

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНТРАСТА ПОЛОС СМЕЩЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

А. М. ГРИГОРЯН, А. К. КОЧАРЯН, П. А. БЕЗИРГАНЯН,
Г. М. АЛАДЖАДЖЯН

Теоретически исследованы основные факторы, определяющие контраст изображения полос смещения рентгеновских лучей. Показано, что при полихроматическом излучении происходит фокусировка различных длин волн вне кристалла. Определено место фокусировки полихроматического излучения. Контраст изображения полос смещения строго зависит от спектрального состава падающего излучения и размера выходной щели коллиматора. Экспериментально исследована зависимость контраста изображения от этих факторов.

Введение

В работе [1] применением приближения геометрической оптики к уравнениям Такаги [2, 3] определены распределения фаз внутри лауэ-дифрагированных пучков. В этой работе показано, что при наложении двух когерентных пучков в рентгеновских интерферометрах со ступенчатым зеркальным блоком получают полосы дефокусировки и разнотолщинности.

В работе [4] был исследован характер тонкой структуры рентгеноинтерференционных картин: получено наложение муаровых узоров с линиями дефокусировки в трехблочных системах и с полосами межветвьевого рассеяния в двухблочных системах с узким зазором. Полосы межветвьевого рассеяния [5] по характеру не отличаются от полос дефокусировки [6]. Обе они — результат смещения центров пространственно наложенных пучков, и мы далее назовем их полосами смещения (ПС) [4].

Для периода ПС в центре топограммы в [4] получено выражение

$$\Lambda = \frac{\Delta_0 z \operatorname{tg} \theta}{z_g},$$

где z — суммарная толщина блоков интерферометра, z_g — величина дефокусировки (или узкого зазора в двухблочных системах), Δ_0 — экстинкционная длина, θ — угол Брэгга. Получение ПС на муаровых узорах дает возможность детально анализировать структуру кристаллических сред и более точно измерять величины и вид искажений атомных решеток. Однако на эксперименте трудно регистрировать ПС, так как они получаются с недостаточной контрастностью. В работе [4] впервые с помощью кристалл-увеличителя удалось выявить тонкую структуру, однако при этом сильно падала светосила и требовались длительные экспозиции.

Настоящая работа посвящена теоретическому и экспериментальному исследованию основных факторов, определяющих контраст изображения

ПС, включая размер выходной щели коллиматора, поляризацию и спектральный состав падающего излучения. В эксперименте подбирались такие условия (размер щелей, местоположение щелей и фотопленки), чтобы получить максимально четкую дифракционную картину.

1. Контраст изображения ПС при немонохроматическом излучении

Динамическая теория сферической волны, развитая Като [9, 10], рассматривает случай, когда точечный источник рентгеновского излучения расположен на входной поверхности кристалла. Дифракционная картина, полученная на плоскости фотопластинки, не зависит от расстояния фокус-кристалл-фотопластинка. Однако в экспериментах этот случай, как правило, не реализуется. В реальных случаях источник рентгеновских лучей и фотопластинка располагаются на расстояниях, отличных от нулевого, и фокус рентгеновской трубки имеет конечный размер. В работе [11] детально исследовано изображение сферической волны, когда точечный источник рентгеновского излучения расположен не на поверхности кристалла, и получено новое качество дифракции рентгеновских лучей — динамическая фокусировка.

Для решения реальной задачи необходимо учесть не только расстояния источника рентгеновских лучей от кристалла и фотопластинки, но и спектральный состав падающего излучения. Действительно, электромагнитная волна от реального физического источника никогда не бывает строго монохроматической [12], так как даже самая узкая спектральная линия обладает конечной шириной $\Delta\lambda$. Поэтому необходимо рассчитать изображение точечного источника на фотопластинке, а потом усреднить результат по спектру падающего излучения [11].

Интенсивность ПС, зарегистрированная на фотопластинке при излучении от точечного монохроматического источника рентгеновских лучей, для симметричного случая Лауэ дается выражением [1, 7]

$$A = A_0 \exp \left\{ -\mu_0 \frac{z^2}{\cos \theta \sqrt{z^2 + x^2}} \left(1 - \frac{\chi_{hl}}{\chi_{0l}} \right) \right\} \cos^2 \left(\frac{\pi z_g x}{\Delta_0 z \operatorname{tg} \theta} \right), \quad (1)$$

где μ_0 — линейный коэффициент поглощения вещества для данной длины падающей волны, A_0 — постоянный множитель, x — координатная ось, показанная на рис. 1, χ_{hl} , χ_{0l} — фурье-компоненты поляризуемости кристалла. Интенсивность A записана для центральной части топограмм ($z \operatorname{tg} \theta \gg x$), т. е. для полос с малыми интерференционными номерами.

Если спектральная плотность падающего излучения есть $\Phi(\omega)$, то на фотопластинке будет регистрироваться интенсивность, усредненная по спектру:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} A(\omega, x) \Phi(\omega) d\omega. \quad (2)$$

Необходимо отметить, что формула (1) записана для случая, когда источник расположен на входной поверхности кристалла, а фотопластинка

ка — на выходе, но в формуле (2) величина A относится к случаю, когда расстояния источник-кристалл D и кристалл-фотопластинка d не равны нулю. Поместим начало координат в точке O фотопластинки, куда после дифракции под точным углом Вульфа—Брэгга θ_0 (рис. 1) падает волна с частотой ω_0 .

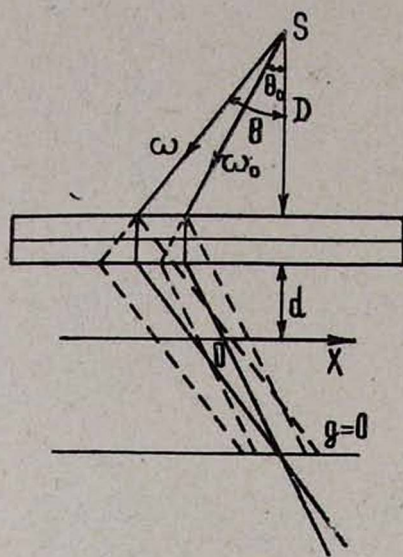


Рис. 1. Схема фокусировки полихроматического излучения: S — источник излучения рентгеновских лучей, D — расстояние источник-образец, d — расстояние образец-фотопластинка.

Волновой пакет с частотой ω после дифракции падает на фотопластинку в точке, которая смещена на величину Δx по отношению к первоначальному изображению, когда $D = d = 0$. Для Δx имеем

$$\Delta x = (D - d)(\operatorname{tg} \theta_0 - \operatorname{tg} \theta) = g(\operatorname{tg} \theta_0 - \operatorname{tg} \theta),$$

где θ — угол Брэгга, соответствующий частоте ω .

$A(\omega, x)$ можно записать в виде

$$A(\omega, x) = A_0 \exp \left\{ -\mu_0 \frac{z^2 \left(1 - \frac{\gamma_{hl}}{\gamma_{0l}} \right)}{\cos \theta \sqrt{z^2 + (x + \Delta x)^2}} \right\} \cos^2 \left[\frac{\pi z g (x + \Delta x)}{z \Delta_0 \operatorname{tg} \theta} \right],$$

или, учитывая зависимость μ_0 , θ , Δx и Δ_0 от частоты падающего излучения,

$$A(\omega, x) = A_0 \exp \left\{ -\frac{z^2 \gamma(\omega) B}{\sqrt{z^2 + [x - g \operatorname{tg} \theta_0 (\gamma(\omega) - 1)]^2}} \right\} \cos^2 [c [x - g \operatorname{tg} \theta_0 (\gamma(\omega) - 1)]],$$

где

$$B = \frac{\mu_0^0 \left(1 - \frac{\gamma_{hl}}{\gamma_{0l}} \right)}{\cos \theta_0}, \quad c = \frac{\pi z g}{\Delta_0^0 \operatorname{tg} \theta_0 z},$$

$$\gamma(\omega) = \frac{\omega_0 \cos \theta_0}{\sqrt{\omega^2 - \omega_0^2 \sin^2 \theta_0}},$$

μ_0^0, Δ_0^0 — величины μ_0 и Δ_0 , соответствующие частоте ω_0 .

В центре топограмм ($z \lg \theta \gg x$) функция косинус меняется быстрее экспоненты, поэтому, не совершая большой ошибки, можно написать

$$A(\omega, x) = A_0 \exp(-\gamma(\omega) z B) \cos^2 [c [x - g \lg \theta_0 (\gamma(\omega) - 1)]].$$

Для функции спектральной плотности с лоренцевым распределением со средней частотой ω_0 и полушириной b имеем

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{b^2 + (\omega - \omega_0)^2},$$

и интеграл (2) принимает следующий вид:

$$I = A_0 \exp(-Bz) \int_{-\infty}^{\infty} \cos^2 [c [x - g \lg \theta_0 (\gamma(\omega) - 1)]] \frac{d\omega}{b^2 + (\omega - \omega_0)^2}. \quad (3)$$

Внимательное рассмотрение интеграла показывает, что при $g = 0$ период ПС не изменяется ($\Lambda = \pi/c$), т. е. он не зависит не только от величины b спектральной ширины, но и от формы спектральной линии. На эксперименте фотопластинку нужно поставить на таком расстоянии от кристалла, чтобы выполнялось условие $D = d$. Оно определяет место расположения плоскости нулевой дисперсии [13, 14].

При $g = 0$ получается максимальный контраст

$$\eta = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} = 1.$$

Это обусловлено тем, что при расположении фотопластинки на поверхности нулевой дисперсии максимумы и минимумы ПС одного и того же порядка, соответствующие разным частотам падающего излучения, суммируются в одном и том же месте фотопластинки.

На эксперименте условие $D = d$ выполняется с некоторой точностью. Если принять $D - d = g$ и $g \ll \Lambda$, то вышеуказанное приближение справедливо и $\eta \approx 1$. Период Λ строго зависит от z^g и от z . В нашем эксперименте $\Lambda \approx 0,13$ мм и удовлетворить условию $g < \Lambda$ нетрудно.

При невыполнении условия полихроматической фокусировки трудно вычислить интеграл (3). Однако мы можем разделить члены, содержащие параметр x . Раскрывая косинус суммы аргументов в подынтегральном выражении, получим

$$I = A_0 \exp(-Bz) \left[\gamma_1 \cos 2cx + \gamma_2 \sin^2 cx + \gamma_3 \frac{1}{2} \sin 2cx \right],$$

где

$$\gamma_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \cos^2 [cg \lg \theta_0 (\gamma(\omega) - 1)] \frac{d\omega}{b^2 + (\omega - \omega_0)^2},$$

$$\gamma_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{b^2 + (\omega - \omega_0)^2},$$

$$\gamma_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \sin \left[2cd \operatorname{tg} \theta_0 \left(\frac{\omega_0 \cos \theta_0}{\sqrt{\omega^2 - \omega_0^2 \sin^2 \theta_0}} - 1 \right) \right] \frac{d(\omega)}{b^2 + (\omega - \omega_0)^2}$$

Отсюда легко можно определить экстремумы ПС $x_{\text{экстр}}$ для центральной части топограмм:

$$x_{\text{экстр}} = \frac{\Lambda}{2\pi} \operatorname{arctg} \left(\frac{\gamma_3}{2\gamma_1 - \gamma_2} \right) + \frac{\Lambda}{2} n,$$

n — порядок экстремумов. Таким образом, если при монохроматическом падающем излучении основной максимум получается в центре ($x = 0$) топограммы, то наличие спектральной расходимости ($\Delta\lambda$) в падающем пучке приводит к смещению центра интерференционных полос. Контраст в этом случае не равен единице и зависит как от величины b , так и от формы спектральной плотности.

Можно решить и обратную задачу: экспериментально определяя величину η , восстановить потом форму $\Phi(\omega)$. С этой точки зрения задача подобна вопросам, решенным в работах [15, 16], однако в нашем случае нужно точно вычислить интеграл (2) с помощью ЭВМ.

2. Влияние размера щели коллиматора на контраст ПС

Подобно задаче определения влияния спектральной ширины падающего излучения на контраст изображения ПС в случае щели с шириной a мы должны усреднить результат по величине ширины щели. Усреднение должно производиться по дифракционной картине точечного источника. Если размеры щели много меньше «характеристических» размеров (межполосного расстояния при монохроматическом точечном источнике) интерференционной картины точечного источника, то влиянием размера щели на контраст изображения можно пренебречь. В случае ПС в качестве «характеристического» размера нужно принять период полос Λ . Обычно Λ — порядка $50 \div 400$ мкм, так что при работе со щелью более 10 мкм нельзя не учитывать ее размеры.

Предположим, что из каждой точки щели выходит некоторая постоянная частота падающего излучения и кристалл сфокусирован точно в отра-

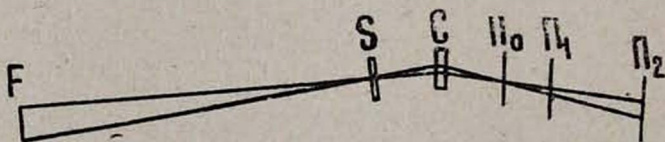


Рис. 2. Схема эксперимента: F — фокус рентгеновской трубки, S — выходная щель коллиматора, C — образец, $P_{0,1,2}$ — местоположения фотопластинок.

жающем положении для этой частоты, т. е. подобно задаче, решенной в работе [17], мы предположим, что щель представляется совокупностью когерентных элементарных источников. Усреднение производим не по амплитудам, а по интенсивностям, формирующимся из одного точечного источ-

ника (здесь не будем рассматривать корреляционные соотношения отдельных точек щели [12]). Так как $\Delta\lambda = 0$, то $\theta_B = \text{const}$ и изображение не будет зависеть от расстояний щель-кристалл и щель-фотопластинка, и интенсивность, зарегистрированная на фотопластинке, будет определяться простым интегрированием:

$$I = \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{+a/2} \exp\left(-\frac{A^0 z^2}{\sqrt{z^2 + (x+y)^2}}\right) \cos^2[B^0(x+y)] dy.$$

Отметим, что начало координатной оси x выбрано в центре щели, т. е. пучок, выходящий из центральной точки щели, изображается симметрично относительно точки $x = 0$, y — переменная щели с шириной a ,

$$A^0 = \frac{\mu_0 \left(1 - \frac{\chi_{hi}}{\chi_{ol}}\right)}{\cos \theta_B}, \quad B^0 = \frac{\pi}{\Delta_0 \tan \theta_B} \frac{z_g}{z}.$$

Для малых значений x и a ($a \leq \Lambda$ и $x^2 \ll z^2$) можно написать

$$I = \frac{e^{-A^0 z}}{a} \int_{x-a/2}^{x+a/2} \cos^2(B^0 p) dp.$$

В результате находим

$$I = \frac{e^{-A^0 z}}{2} \left(B^0 - \frac{\cos 2B^0 x}{a} \sin B^0 a \right),$$

а для контраста η получаем

$$\eta = \frac{\frac{\sin B^0 a}{B^0 a}}{2 - \frac{\sin B^0 a}{B^0 a}},$$

т. е. при нулевом значении щели контраст получается максимальным, с увеличением a контраст падает, а при значении $a = \Lambda$ он равняется нулю.

3. Влияние поляризации

Исходный рентгеновский пучок, выходящий из рентгеновской трубки, имеет две компоненты поляризации: σ — с поляризационным фактором $s = 1$ и π — с фактором $s = \cos 2\theta_B$. Рентгеноинтерференционная картина обычно представляет некогерентную суперпозицию этих двух компонент. В случае прозрачных кристаллов ($\mu z \ll 1$) эффект поляризации может привести либо к появлению биения интерференционной картины [18], либо к размытию дифракционного фокуса [19].

В случае работы с поглощающими кристаллами коэффициенты линейного поглощения для ветвей, отличающихся поляризацией, сильно различаются. При наличии двух компонент поляризации общая интенсивность дается выражением [7]

$$I_h \sim A_1 \cos^2 \left(\frac{\pi}{\Delta_0^\sigma} \frac{z_g}{z} x \right) + A_2 \cos^2 \left[\frac{\pi}{\Delta_0^\sigma} |\cos 2\theta| \frac{z_g}{z} x \right],$$

где Δ_0^σ — период маятниковых полос для σ -поляризации, A_1 и A_2 определяются выражениями

$$A_1 = \exp(-\mu^\sigma z), \quad A_2 = |\cos 2\theta| \exp(-\mu^\pi z).$$

Сравнивая μ^π и μ^σ , можно сказать, что $A_1 \gg A_2$. В итоге, исключая последнее слагаемое в I_h , получаем (1), т. е. для случая сильно поглощающего кристалла ($\mu_0 z \gg 1$) π -компонента поляризации дает малый вклад в интенсивность ПС.

4. Эксперимент

Для экспериментального исследования контраста ПС рентгеновских лучей в зависимости от условий съемки был проведен следующий эксперимент. Рентгеновский пучок, выходящий из фокуса трубки, проходил через коллиматор длиной 1,25 м (см. рис. 2) и падал на кристалл-образец С, который был съюстирован в отражающем положении. Отраженный пучок регистрировался на фотопластинке П. Кристалл-образец представлял собой двухблочную систему с узким зазором, с помощью которой получались полосы смещения с периодом (в центральной части топограммы) 136 мкм. Кристалл-образец был изготовлен из почти бездислокационного монокристалла кремния. Большие поверхности пластин были перпендикулярны к оси роста кристалла [111], а отражающие плоскости (110) были перпендикулярны к плоскостям (111) и к основанию системы. Регистрировалось (220)-отражение. Толщины блоков системы были соответственно 4 мм и 4,37 мм, а величина зазора $z_g \approx 360$ мкм. Использовалось $Mo_{K\alpha}$ -излучение.

В конце коллиматора была закреплена щель S, ширину которой можно было менять с точностью 10 мкм. Топограммы снимались как в разных:

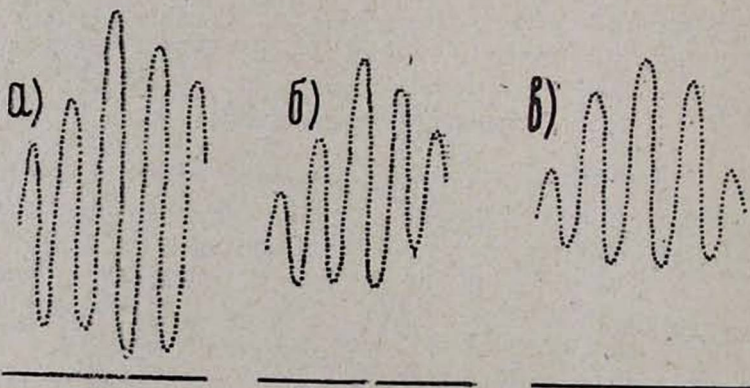
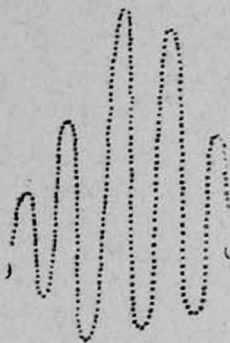


Рис. 3. Микрофотометрические записи распределения интенсивности центральной части топограмм полос смещения: а) фотопластинка расположена в плоскости P_0 ; б) фотопластинка расположена в плоскости P_1 ; в) фотопластинка расположена в плоскости P_2 .

положениях фотопластинки (P_0, P_1, P_2), так и для различных величин ширины щели: 20, 30 и 50 мкм.

На рис. 3 приведены микрофотометрические записи распределения интенсивностей ПС, зарегистрированных при различных положениях фотопластинки. Ширина щели равнялась 50 мкм. Положение P_0 фотопластинки соответствовало условию $D = d$, в положении P_1 расстояния были $D = 5,5$ см и $d = 17,4$ см, а в положении P_2 — соответственно $D = 5,5$ см и $d = 106$ см. Как видно из рис. 3, максимальный контраст получается в плоскости P_0 ($\eta_{P_0} = 0,96$), в которой происходит фокусировка полихроматического излучения. На рис. 4 приведена микрофотометрическая за-

Рис. 4. Микрофотометрическая запись распределения интенсивности полос смещения при ширине выходной щели коллиматора 30 мкм. Фотопластинка расположена в плоскости P_1 .



пись ПС, когда ширина щели составляла 30 мкм, а фотопластинка находилась в положении P_1 . Сравнивая рис. 3б и рис. 4, можно сказать, что контраст полос смещения увеличивается с уменьшением размера щели.

5. Заключение

1. Как известно [7, 8], с помощью периода ПС можно с большой точностью измерять величину структурных факторов рассеивающего вещества. Этот период, как показано в настоящей работе, зависит от спектральной плотности падающего излучения, и если падающий пучок недостаточно монохроматичен, то полученные значения структурных амплитуд будут неточными, а эксперимент и расчет ошибочными.

2. Чтобы получить ПС с максимальной контрастностью, нужно снять топограмму в плоскости нулевой дисперсии, в которой происходит фокусировка различных длин волн полихроматического излучения.

3. Контраст ПС строго зависит от размера щели коллиматора. С сужением ширины щели контраст изображения стремится к единице. Однако чрезмерное уменьшение ширины щели нецелесообразно, так как при этом падает светосила и происходит дифракционное уширение.

В заключение авторы считают своим долгом выразить благодарность Л. В. Левоняну за обсуждение ряда вопросов.

1. Г. М. Аладжаджян, А. К. Кочарян, К. Г. Труни. Кристаллография, 24, 1135 (1979).
2. S. Takagi. Acta Cryst., 15, 1311 (1962).
3. S. Takagi. J. Phys. Soc. Japan, 26, 1239 (1969).
4. П. А. Безиригян, Г. Р. Дремян, Г. М. Аладжаджян. Препринт ЕРГУ—ФТТ—15 (1978).
5. A. Authier, A. D. Milne, M. Sauvage. Phys. Stat. Sol., 26, 469 (1968).
6. U. Bonse, E. te Kaat. Z. Phys., 243, 14 (1971).
7. M. Hart, A. D. Milne. Acta Cryst., A26, 223 (1970).
8. J. F. C. Boker, M. Hart, J. Halltar. Z. Naturforsch., 28a, 668 (1973).
9. N. Kato. Acta Cryst., 14, 526 (1961).
10. N. Kato. Acta Cryst., 14, 627 (1961).
11. А. М. Афанасьев, В. Г. Кон. ФТТ, 19, 1775 (1977).
12. М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики, Изд. Наука, М., 1970.
13. В. А. Инденбом, Г. М. Аладжаджян. ДАН СССР, 227, 827 (1976).
14. Е. В. Шулаков, В. В. Аристов. Интерферометрия в расходящемся полихроматическом пучке рентгеновских лучей, Препринт, Черноголовка (1977).
15. P. H. Besirganyan. Phys. Stat. Sol., (a) 40, K 77 (1977).
16. А. О. Абоян, П. А. Безиригян, Ф. О. Эйрамджян. ДАН АрмССР, 59, 245 (1974).
17. В. А. Инденбом, Э. В. Суворов, И. Ш. Слободецкий. ЖЭТФ, 71, 359 (1976).
18. R. W. James. Solid State Physik, 15, 53 (1963).
19. Г. М. Аладжаджян, П. А. Безиригян. Кристаллография, 24, 887 (1979).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՀԱՌԱԳԱՅՔՆԵՐԻ ՇԵՂՄԱՆ ԳԾԵՐԻ ԿՈՆՏՐԱՍՏԻ ՀԵՏԱԶՈՏՈՒԹՅՈՒՆԸ

Ա. Մ. ԳՐԻԳՈՐՅԱՆ, Ա. Կ. ՔՈՉԱՐՅԱՆ, Կ. Հ. ԲԵՏԻՐԳՅԱՆ, Գ. Մ. ԱԼԱԶԻԶՅԱՆ

Տեսականորեն և փորձնականորեն հետազոտված են այն հիմնական գործոնները (ներառյալ կոլիմատորի ելքի ճեղքի չափը, ընկնող վիճի բեռնացման աստիճանը և սպեկտրալ բաղադրությունը), որոնք ազդում են ունեղենյան ճառագայթների շեղման գծերի կոնտրաստի վրա: Ցույց է տրված, որ ոչ մոնոքրոմատիկ ճառագայթման դեպքում բյուրեղից դուրս տեղի ունի ֆոկուսացում և որոշված է ֆոկուսացման տեղը: Էքսպերիմենտում ընտրվել են այնպիսի պայմաններ, որոնց դեպքում ստացվում է առավելագույն հստակ դիֆրակցիոն պատկեր:

STUDY OF CONTRAST IN X-RAY INTERBRANCH SCATTERING FRINGES

A. M. GRIGORYAN, A. K. KOCHARYAN, P. H. BESIRGANYAN,
G. M. ALADZHADZHYAN

The main factors affecting the contrast of interbranch scattering fringes, namely, the size of a collimator exit slit, the polarization and the wave length composition of an incident beam, are discussed theoretically and studied experimentally. It is shown, that in case of nonmonochromatic radiation a focusing for different wave lengths takes place outside the crystal. The position of the focal point is determined. The conditions were chosen so as to obtain the most clear diffraction pattern.