

ФОКУСИРОВКА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ИЗОГНУТЫМИ КРИСТАЛЛАМИ

В. В. Скадоров^{а,б}, С. И. Тютюнников^а

^а Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

^б Институт ядерных проблем, Белорусский государственный университет, Минск

С помощью принципа локальности получен коэффициент отражения рентгеновского излучения от изогнутого брэгговского зеркала. Рассмотрена фокусировка рентгеновских квантов изогнутыми кристаллами. Определены каустики для рентгеновского излучения, отраженного от изогнутого брэгговского зеркала.

Using the principle of locality, we obtain the coefficient of X-ray reflection from the bent Bragg mirror. We consider the focusing of X rays by bent crystals. We define the caustics for X rays reflected from the bent Bragg mirror.

PACS: 32.30.Rj; 41.50.+h; 78.70.-g

ВВЕДЕНИЕ

С точки зрения общей электродинамики рентгеновская дифракционная оптика относится к области геометрической оптики в ее самом простом варианте. Единственное усложнение возникает из-за динамической дифракции: внутри кристалла появляются несколько связанных волн. Поэтому для расчета отражения рентгеновского излучения от гладко деформированного брэгговского зеркала естественно воспользоваться «принципом локальности» геометрической оптики, который, по-видимому, впервые был введен в электродинамику В. А. Фоком [1]. Согласно принципу локальности изогнутое зеркало можно заменить набором плоских зеркал, касательных в каждой точке изогнутому зеркалу, а падающее на зеркало излучение с гладким волновым фронтом — на набор плоских волн, касательных в каждой точке к падающему на зеркало фронту волны. Тогда отражение волны в каждой точке поверхности зеркала происходит так, как если бы падающая волна была плоской, а криволинейная поверхность в этой точке была бы заменена касательной плоскостью — необходимо только учесть, что углы падения и отражения волны меняются от точки к точке на этой поверхности. Следовательно, принцип локальности позволяет использовать в качестве нулевого приближения коэффициенты отражения, полученные для плоских волн и плоских поверхностей, и в частности коэффициент отражения Брэгга из дифракционной рентгеновской оптики. В оптическом и СВЧ диапазонах частот «принцип локальности» используется при расчетах отражения электромагнитных полей от зеркал и антенн сложной конфигурации. В то же время нам не известны работы, в которых с помощью принципа локальности был бы получен коэффициент отражения рентгеновского излучения с произвольным гладким фронтом от произвольно гладко

изогнутого брэгговского зеркала. Таким образом, целью этой работы будет получение достаточно простой формулы для коэффициента отражения рентгеновского излучения с произвольным гладким фронтом от произвольно изогнутого брэгговского зеркала, а также исследование фокусировки рентгеновского излучения изогнутыми брэгговскими зеркалами.

1. КОЭФФИЦИЕНТ ОТРАЖЕНИЯ ОТ ИЗОГНУТОГО БРЭГГОВСКОГО ЗЕРКАЛА

Коэффициент отражения Брэгга при отражении плоской волны от плоскопараллельной толстой пластинки из совершенного кристалла определяется формулой

$$R = \frac{2\beta C \chi_\tau}{\alpha\beta - (1 + \beta)\chi_0 - \mathcal{D} \operatorname{sign}(\operatorname{Im}(\mathcal{D}))}, \quad (1)$$

$$\mathcal{D} = \sqrt{[\alpha\beta - (1 + \beta)\chi_0]^2 - 4C\beta\chi_\tau\chi_{-\tau}},$$

где C — поляризационный фактор: $C = 1$ для σ -поляризации и $C = \cos(2\theta_B)$ для π -поляризации, θ_B — угол Брэгга; $\beta = \frac{\cos\theta_\tau}{\cos\theta_0}$ — параметр асимметрии, θ_τ — угол между нормалью к зеркалу, направленной вонне кристалла, и направлением распространения дифрагированного рентгеновского излучения, θ_0 — угол между нормалью к зеркалу и направлением распространения падающего на кристалл рентгеновского излучения; $\chi_{0,\pm\tau}(\omega)$ — фурье-компоненты тензора поляризуемости идеального кристалла в рентгеновском диапазоне частот; $\alpha = \frac{(\mathbf{k} + \boldsymbol{\tau})^2 - \mathbf{k}^2}{\mathbf{k}^2}$ — параметр отклонения от точного условия Брэгга; $\operatorname{sign}(x) = 1$ при $0 \leq x$ и $\operatorname{sign}(x) = -1$ при $x < 0$. Прежде чем обобщить формулу (1) для деформированных (изогнутых) брэгговских зеркал, напомним, что в механике сплошных сред, в рамках которой будем рассматривать деформацию, существуют два метода описания процесса деформаций: метод Эйлера и метод Лагранжа. В методе Эйлера система координат совпадает с системой отсчета наблюдателя. В методе Лагранжа система координат заморожена в среду и в процессе деформации среды координатные линии изменяются вместе со средой. Следует особо подчеркнуть, что если в системе координат Эйлера координаты некоторой выбранной точки среды изменяются в течение процесса деформации, то в лагранжевой системе координат координаты этой точки остаются неизменными. Для эйлеровых координат введем обозначение $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$ (иногда мы будем использовать стандартные обозначения $\mathbf{r} = (x, y, z)$), а для лагранжевых $\xi = (\xi^1, \xi^2, \xi^3)$. Связь между ними определяется соотношением

$$x^i = \xi^i + u^i(\xi^1, \xi^2, \xi^3), \quad (2)$$

где $\mathbf{u} = (u^1, u^2, u^3)$ — поле деформации, которое мы будем считать заданным. В методе Эйлера геометрия в области, занятой деформированным кристаллом, является евклидовой. В методе Лагранжа область, занятая деформированным кристаллом, является римановым многообразием с метрическим тензором

$$g_{ij}(\xi) = \sum_{k=1}^3 \frac{\partial x^k}{\partial \xi^i} \frac{\partial x^k}{\partial \xi^j} = \delta_{ij} + \delta_{ik} \frac{\partial u^k}{\partial \xi^j} + \delta_{jk} \frac{\partial u^k}{\partial \xi^i} + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u^k}{\partial \xi^i} \frac{\partial u^k}{\partial \xi^j},$$

где по повторяющимся индексам предполагается суммирование (правило Эйнштейна). В основном мы будем работать в системе отсчета Эйлера, но для описания деформированного кристалла часто будем использовать лагранжевы координаты как параметры для эйлеровых координат: $x = \xi^1 + u^1(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$, $y = \xi^2 + u^2(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$ и $z = \xi^3 + u^3(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$. Такая параметризация очень удобна, так как лагранжевы координаты, по существу, являются координатами точек идеального кристалла до начала процесса деформации. Поле рентгеновских квантов, падающих на изогнутый кристалл, есть

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, \omega) = \mathbf{E}_0(\mathbf{x}, \omega) e^{ik\Phi(\mathbf{x})}, \quad \mathbf{H}(\mathbf{x}, \omega) = \mathbf{H}_0(\mathbf{x}, \omega) e^{ik\Phi(\mathbf{x})},$$

где $\mathbf{E}_0(\mathbf{x}, \omega)$ и $\mathbf{H}_0(\mathbf{x}, \omega)$ — действительные амплитуды волны рентгеновских квантов, а $\Phi(\mathbf{x})$ — фаза этой волны, которая должна удовлетворять соотношению $(\nabla\Phi(\mathbf{x}))^2 = n^2(\mathbf{x})$, и, наконец, волновое число $k = \omega/c$. Так как показатель преломления любой среды для рентгеновских квантов близок к единице, то можно положить $n(\mathbf{x}) \simeq 1$. Тогда имеем $\nabla\Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{n}_0(\mathbf{x})$ и $(\mathbf{n}_0(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_0(\mathbf{x})) = 1$, т.е. $\mathbf{n}_0(\mathbf{x})$ является нормалью единичной длины к волновому фронту падающих на изогнутый кристалл рентгеновских квантов в точке с координатами \mathbf{x} . Отсюда волновой вектор рентгеновских квантов есть $\mathbf{k}(\mathbf{x}) = k\mathbf{n}_0(\mathbf{x})$.

Согласно принципу локальности, изогнутое брэгговское зеркало можно заменить непрерывным набором плоских брэгговских зеркал, касательных к изогнутому брэгговскому зеркалу в каждой точке, а падающее на зеркало рентгеновское излучение с гладким волновым фронтом — на непрерывный набор плоских волн, касательных к волновому фронту в каждой точке. Тогда отражение в каждой точке поверхности зеркала происходит так, как если бы падающая волна была бы плоской, а криволинейная поверхность в этой точке была бы заменена касательной плоскостью. Необходимо только учесть, что углы падения и отражения рентгеновских квантов меняются от точки к точке на этой поверхности. Следовательно, коэффициент отражения в каждой точке изогнутого брэгговского зеркала рентгеновских квантов имеет такую же функциональную форму, как и при отражении плоской волны от плоского брэгговского зеркала:

$$R(\mathbf{x}, \varepsilon) = \frac{2C(\mathbf{x})\beta(\mathbf{x})\chi_\tau(\varepsilon)}{\alpha(\mathbf{x}, \varepsilon)\beta(\mathbf{x}) - (1 + \beta(\mathbf{x}))\chi_0(\varepsilon) - \mathcal{D}(\mathbf{x}, \varepsilon) \operatorname{sign}(\operatorname{Im}(\mathcal{D}(\mathbf{x}, \varepsilon)))}, \quad (3)$$

$$\mathcal{D}(\mathbf{x}, \varepsilon) = \sqrt{(\alpha(\mathbf{x}, \varepsilon)\beta(\mathbf{x}) - (1 + \beta(\mathbf{x}))\chi_0(\varepsilon))^2 - 4C^2\beta(\mathbf{x})\chi_\tau(\varepsilon)\chi_{-\tau}(\varepsilon)}.$$

Здесь $\chi_0(\varepsilon)$ и $\chi_{\pm\tau}(\varepsilon)$ — амплитуды в фурье-разложении поляризуемости идеального кристалла для рентгеновских квантов с энергией ε . Мы полагаем, что при упругой деформации можно пренебречь изменением элементарных ячеек кристалла. Так как $\chi_0(\varepsilon)$ пропорциональна амплитуде рассеяния вперед рентгеновских квантов элементарной ячейкой кристалла, а $\chi_{\pm\tau}(\varepsilon)$ пропорциональны амплитуде рассеяния элементарной ячейкой квантов с волновым вектором \mathbf{k} в кванты с волновыми векторами $\mathbf{k} \pm \tau$, то с большой точностью можно считать амплитуды в фурье-разложении поляризуемости изогнутого кристалла совпадающими с $\chi_0(\varepsilon)$ и $\chi_{\pm\tau}(\varepsilon)$. Поляризационный фактор $C(\mathbf{x})$ равен единице для σ -поляризации и $-(\mathbf{n}_0(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_1(\mathbf{x}))$ для π -поляризации. Здесь $\mathbf{n}_0(\mathbf{x})$ — нормаль к волновому фронту падающего рентгеновского излучения, введенная выше, а $\mathbf{n}_1(\mathbf{x})$ — нормаль единичной длины к волновому фронту дифрагированных квантов, т.е. единичный вектор вдоль волнового вектора равен $\mathbf{k}(\mathbf{x}) + \tau(\mathbf{x})$. Если обозначить как $\mathbf{n}(\mathbf{x})$

единичный вектор нормали к отражающей поверхности изогнутого брэгговского зеркала, направленной вонне кристалла, то фактор асимметрии есть $\beta(\mathbf{x}) = \frac{-(\mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_1(\mathbf{x}))}{(\mathbf{n}_0(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}))}$.

Параметр отклонения от точного условия Брэгга $\alpha(\mathbf{x}, \varepsilon)$ есть

$$\alpha(\mathbf{x}, \varepsilon) = \frac{(\mathbf{k}(\mathbf{x}) + \tau(\mathbf{x}))^2 - k^2}{k^2} = \frac{2\hbar c}{\varepsilon}(\mathbf{n}_0(\mathbf{x}) \cdot \tau(\mathbf{x})) + \left(\frac{\hbar c}{\varepsilon}\right)^2 (\tau(\mathbf{x}) \cdot \tau(\mathbf{x})). \quad (4)$$

Вектор отражения (или вектор обратной решетки) $\tau(\mathbf{x})$ для деформированных кристаллов в эйлеровой системе отсчета является функцией координат. Если известно поле деформаций кристалла, то задача о вычислении компонент вектора отражения $\tau_i(\mathbf{x}), i = 1, 2, 3$, решается достаточно просто, если заметить, что в лагранжевой системе отсчета компоненты вектора отражения такие же, как и для идеального кристалла. Необходимо только учесть, что область, занятая деформированным кристаллом, является римановым многообразием с метрическим тензором $g_{ij}(\xi)$. Так как метрический тензор отличается от δ_{ij} (символ Кронекера), то мы должны отличать векторы и ковекторы (по-разному преобразуются). Как уже упоминалось выше, компоненты ковекторов обратной решетки деформированного кристалла совпадают в лагранжевой системе отсчета с компонентами ковекторов обратной решетки для идеального кристалла. Тогда компоненты ковекторов обратной решетки деформированного кристалла в эйлеровой системе отсчета получаются по закону преобразования ковекторов при преобразовании координат, заданному соотношением (2), и определяются соотношениями

$$\tau_i(\mathbf{x}) = \frac{\partial \xi^j}{\partial x^i} \tau_j. \quad (5)$$

Здесь $J^{-1} = [\partial \xi^i / \partial x^j]$ — матрица, обратная матрице Якоби $J = [\partial x^i / \partial \xi^j]$ преобразования координат (2), а τ_j в (5) есть не что иное, как компоненты вектора обратной решетки идеального кристалла. Мы уже упоминали о том, что для описания деформированных кристаллов удобно пользоваться эйлеровой системой отсчета, но при этом использовать лагранжевы координаты в качестве параметров. Поэтому будем полагать, что отражающая поверхность изогнутого кристалла задается соотношением $\xi^3 = 0$, а сам деформированный кристалл лежит в области с $\xi^3 \leq 0$, и $\mathbf{x}(\xi^1, \xi^2) = (\xi^1 + u^1(\xi^1, \xi^2), \xi^2 + u^2(\xi^1, \xi^2), u^3(\xi^1, \xi^2))$ есть не что иное, как параметрическое уравнение отражающей поверхности изогнутого брэгговского зеркала. С учетом этого замечания и того обстоятельства, что брэгговская дифракция рентгеновских квантов разыгрывается на отражающей поверхности изогнутого кристалла, величины, входящие в формулы (3)–(5), можно считать функциями параметров ξ^1 и ξ^2 .

2. КАУСТИКИ И ФОКУСИРОВКА РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ИЗОГНУТЫМИ БРЭГГОВСКИМИ ЗЕРКАЛАМИ

Рассмотрим вначале отраженные изогнутым брэгговским зеркалом рентгеновские кванты, удовлетворяющие точному условию Брэгга, т. е. дифрагировавшие рентгеновские кванты, для которых выполняется равенство

$$\alpha(\xi^1, \xi^2, \varepsilon) = \frac{2\hbar c}{\varepsilon}(\mathbf{n}_0(\xi^1, \xi^2) \cdot \tau(\xi^1, \xi^2)) + \left(\frac{\hbar c}{\varepsilon}\right)^2 (\tau(\xi^1, \xi^2) \cdot \tau(\xi^1, \xi^2)) = 0. \quad (6)$$

Это соотношение можно рассматривать как уравнение относительно энергии рентгеновских квантов ε . Решение этого уравнения очевидно:

$$\varepsilon(\xi^1, \xi^2) = -\frac{\hbar c}{2} \frac{(\tau(\xi^1, \xi^2) \cdot \tau(\xi^1, \xi^2))}{(\mathbf{n}_0(\xi^1, \xi^2) \cdot \tau(\xi^1, \xi^2))}. \quad (7)$$

Параметрическое уравнение семейства лучей, отраженных от изогнутого брэгговского зеркала рентгеновских квантов, удовлетворяющих точному условию Брэгга, есть

$$\mathbf{r}(\xi^1, \xi^2, s) = (\xi^1 + u^1(\xi^1, \xi^2), \xi^2 + u^2(\xi^1, \xi^2), u^3(\xi^1, \xi^2)) + s\mathbf{n}_1(\xi^1, \xi^2).$$

Здесь s — длина вдоль луча рентгеновских квантов, отраженных от изогнутого брэгговского зеркала; $\mathbf{n}_1(\xi^1, \xi^2)$ — вектор единичной длины вдоль волнового вектора $\mathbf{k}(\xi^1, \xi^2) + \tau(\xi^1, \xi^2)$ рентгеновских квантов, отраженных от брэгговского зеркала в точке на поверхности с параметрами (ξ^1, ξ^2) , определенный соотношением

$$\mathbf{n}_1(\xi^1, \xi^2) = \frac{k\mathbf{n}_0(\xi^1, \xi^2) + \tau(\xi^1, \xi^2)}{k\sqrt{1 + \alpha(\xi^1, \xi^2)}} = \mathbf{n}_0(\xi^1, \xi^2) + \frac{\hbar c}{\varepsilon(\xi^1, \xi^2)}\tau(\xi^1, \xi^2). \quad (8)$$

В (8) было учтено, что рассматриваются рентгеновские кванты, для которых выполняется точное условие Брэгга и, следовательно, $\alpha(\xi^1, \xi^2, \varepsilon) = 0$. Тогда семейство лучей рентгеновских квантов, согласно (7), (8), определено уравнениями

$$\mathbf{r}(\xi^1, \xi^2, s) = (\xi^1 + u^1(\xi^1, \xi^2), \xi^2 + u^2(\xi^1, \xi^2), u^3(\xi^1, \xi^2)) + s\mathbf{n}_0(\xi^1, \xi^2) + s\frac{\hbar c}{\varepsilon(\xi^1, \xi^2)}\tau(\xi^1, \xi^2). \quad (9)$$

Для того чтобы это семейство лучей имело огибающую, т. е. каустику, необходимо, чтобы было выполнено условие [2]

$$g(\xi^1, \xi^2, s) = (\mathbf{r}_{\xi^1} \times \mathbf{r}_{\xi^2} \cdot \mathbf{r}_s) = \frac{D(x(\xi^1, \xi^2, s), y(\xi^1, \xi^2, s), z(\xi^1, \xi^2, s))}{D(\xi^1, \xi^2, s)} = 0, \quad (10)$$

где $\mathbf{r}_{\xi^1} = \frac{\partial \mathbf{r}(\xi^1, \xi^2, s)}{\partial \xi^1}$, $\mathbf{r}_{\xi^2} = \frac{\partial \mathbf{r}(\xi^1, \xi^2, s)}{\partial \xi^2}$ и $\mathbf{r}_s = \frac{\partial \mathbf{r}(\xi^1, \xi^2, s)}{\partial s}$. Нетрудно видеть, что относительно s (10) является квадратным уравнением:

$$a(\xi^1, \xi^2)s^2 + b(\xi^1, \xi^2)s + c(\xi^1, \xi^2) = 0.$$

Подставляя решения этого квадратного уравнения в (9), получаем параметрические уравнения каустической поверхности:

$$\mathbf{r}_{1,2}(\xi^1, \xi^2) = (\xi^1 + u^1(\xi^1, \xi^2), \xi^2 + u^2(\xi^1, \xi^2), u^3(\xi^1, \xi^2)) + s_{1,2}(\xi^1, \xi^2)\mathbf{n}_0(\xi^1, \xi^2) + s_{1,2}(\xi^1, \xi^2)\frac{\hbar c}{\varepsilon(\xi^1, \xi^2)}\tau(\xi^1, \xi^2), \quad (11)$$

где $s_{1,2}(\xi^1, \xi^2)$ — корни квадратного уравнения. Классификацией каустических поверхностей и их особенностей занимается теория особенностей дифференцируемых отображений [3] (теория катастроф). Простейшей особенностью каустической поверхности

в трехмерном пространстве является ребро возврата (складка Уитни, или особенность A_3 [3]). Именно ребро возврата каустической поверхности (11) (если оно существует) и является местом фокусировки семейства лучей рентгеновских квантов (9). Ребро возврата (место фокусировки) можно определить, решая совместно уравнение (10) и уравнение [2]:

$$g_{\xi^1}[(\mathbf{r}_{\xi^1} \cdot \mathbf{r}_{\xi^2})(\mathbf{r}_{\xi^2} \cdot \mathbf{r}_s) - (\mathbf{r}_{\xi^2} \cdot \mathbf{r}_{\xi^2})(\mathbf{r}_{\xi^1} \cdot \mathbf{r}_s)] - g_{\xi^2}[(\mathbf{r}_{\xi^1} \cdot \mathbf{r}_{\xi^1})(\mathbf{r}_{\xi^2} \cdot \mathbf{r}_s) - (\mathbf{r}_{\xi^1} \cdot \mathbf{r}_{\xi^2})(\mathbf{r}_{\xi^1} \cdot \mathbf{r}_s)] + g_s[(\mathbf{r}_{\xi^1} \cdot \mathbf{r}_{\xi^1})(\mathbf{r}_{\xi^2} \cdot \mathbf{r}_{\xi^2}) - (\mathbf{r}_{\xi^1} \cdot \mathbf{r}_{\xi^2})^2] = 0. \quad (12)$$

Здесь $g_{\xi^1} = \frac{\partial g(\xi^1, \xi^2, s)}{\partial \xi^1}$, $g_{\xi^2} = \frac{\partial g(\xi^1, \xi^2, s)}{\partial \xi^2}$ и $g_s = \frac{\partial g(\xi^1, \xi^2, s)}{\partial s}$.

Формулы (9), (11) и уравнения (10), (12) позволяют найти каустическую поверхность и местоположение фокуса семейства лучей рентгеновских квантов, отраженных от изогнутого брэгговского зеркала, при условии, что известно поле деформаций $\mathbf{u}(\xi)$. Причем из-за малой поляризуемости кристалла в рентгеновском диапазоне частот это поле деформации должно быть определено со значительной точностью. Выполнить такую задачу достаточно сложно как экспериментально, так и теоретически. Поэтому на практике ограничиваются только знанием отражающей поверхности изогнутого брэгговского зеркала.

Пусть $z = f(x, y)$ — уравнение этой поверхности. Вначале рассмотрим простой случай, когда вектор отражения кристалла до момента его изгиба (т. е. вектор отражения идеального кристалла) перпендикулярен отражающей плоскости. Очевидно, что с достаточно большой точностью при упругой деформации этот вектор останется перпендикулярным в каждой точке отражающей поверхности изогнутого брэгговского зеркала. Тогда, если пренебречь изменением длины вектора отражения при упругом изгибе брэгговского зеркала, вектор отражения для изогнутого брэгговского зеркала есть

$$\tau(x, y) = \frac{\tau}{\sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}}(-f_x, -f_y, 1), \quad (13)$$

где τ — длина вектора отражения идеального кристалла; $f_x = \partial f(x, y)/\partial x$ и $f_y = \partial f(x, y)/\partial y$. Уравнение (6) в этом случае можно переписать в следующем виде:

$$\alpha(x, y, \varepsilon) = \frac{2\hbar c \tau}{\varepsilon}(\mathbf{n}_0(x, y) \cdot \mathbf{n}(x, y)) + \left(\frac{\hbar c}{\varepsilon}\right)^2 \tau^2 = 0, \quad (14)$$

где $\mathbf{n}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2}}(-f_x, -f_y, 1)$ — единичный вектор нормали к изогнутому

брэгговскому зеркалу. Из этого уравнения немедленно получаем энергию рентгеновских квантов, удовлетворяющих точному условию Брэгга, как функцию координат на поверхности:

$$\varepsilon(x, y) = -\frac{\hbar c \tau}{2(\mathbf{n}_0(x, y) \cdot \mathbf{n}(x, y))}.$$

Параметрическое уравнение семейства лучей рентгеновских квантов, отраженных от изогнутого брэгговского зеркала и удовлетворяющих точному условию Брэгга, есть

$$\mathbf{r}(x, y, s) = (x, y, f(x, y)) + s\mathbf{n}_1(x, y), \quad (15)$$

где s — длина вдоль луча рентгеновских квантов, отраженных от изогнутого брэгговского зеркала; $\mathbf{n}_1(x, y)$ — вектор единичной длины вдоль волнового вектора $\mathbf{k}(x, y) + \tau(x, y)$ рентгеновских квантов, отраженных от брэгговского зеркала в точке на поверхности с координатами $(x, y, f(x, y))$, определенный соотношением

$$\mathbf{n}_1(x, y) = \mathbf{n}_0(x, y) - 2(\mathbf{n}_0(x, y) \cdot \mathbf{n}(x, y))\mathbf{n}(x, y). \quad (16)$$

Для того чтобы это семейство лучей имело огибающую, т. е. каустику, необходимо, чтобы было выполнено условие (10):

$$g(x, y, s) = (\mathbf{r}_x \times \mathbf{r}_y \cdot \mathbf{r}_s) = 0. \quad (17)$$

Относительно s соотношение (17) является квадратным уравнением. Подставляя решение этого уравнения $s_{1,2}(x, y)$ в (15), получаем параметрическое уравнение каустической поверхности семейства лучей рентгеновских квантов, отраженных от изогнутого брэгговского зеркала и удовлетворяющих точному условию Брэгга:

$$\mathbf{r}_{1,2}(x, y) = (x, y, f(x, y)) + s_{1,2}(x, y)\mathbf{n}_1(x, y). \quad (18)$$

Ребро возврата (фокус) каустической поверхности определяется совместным решением уравнения (17) и уравнения

$$g_x[(\mathbf{r}_x \cdot \mathbf{r}_y)(\mathbf{r}_y \cdot \mathbf{r}_s) - (\mathbf{r}_y \cdot \mathbf{r}_y)(\mathbf{r}_x \cdot \mathbf{r}_s)] - g_y[(\mathbf{r}_x \cdot \mathbf{r}_x)(\mathbf{r}_y \cdot \mathbf{r}_s) - (\mathbf{r}_x \cdot \mathbf{r}_y)(\mathbf{r}_x \cdot \mathbf{r}_s)] + g_s[(\mathbf{r}_x \cdot \mathbf{r}_x)(\mathbf{r}_y \cdot \mathbf{r}_y) - (\mathbf{r}_x \cdot \mathbf{r}_y)^2] = 0. \quad (19)$$

Формула (18) и уравнения (17), (19) определяют местоположение фокуса и каустическую поверхность в предположении, что вектор отражения кристалла до момента его изгиба (т. е. вектор отражения идеального кристалла) перпендикулярен отражающей плоскости.

Далее рассмотрим общий случай. Систему координат мы выберем таким образом, что ось z перпендикулярна входной плоскости кристалла до его момента изгиба, т. е. перпендикулярна входной плоскости идеального кристалла, а оси x и y лежат на входной плоскости кристалла. Кроме того, будем полагать, что ось z направлена вовне кристалла. Пусть вектор отражения τ в этом случае есть $\tau = \tau \mathbf{n}_\tau$, где τ — длина вектора отражения, а $\mathbf{n}_\tau = (\sin(\theta) \cos(\varphi), \sin(\theta) \sin(\varphi), \cos(\theta))$, т. е. $\sin(\theta) \cos(\varphi)$, $\sin(\theta) \sin(\varphi)$ и $\cos(\theta)$ — компоненты единичного вектора \mathbf{n}_τ относительно репера с осями $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$. Для изогнутого кристалла будем использовать метод подвижного репера, предполагая, что в каждой точке входной поверхности кристалла репер $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ в результате изгиба переходит в репер $(\mathbf{n}_x(x, y), \mathbf{n}_y(x, y), \mathbf{n}(x, y))$, где $\mathbf{n}_x(x, y) = \frac{1}{\sqrt{1+f_x^2}}(1, 0, f_x)$, $\mathbf{n}_y(x, y) = \frac{1}{\sqrt{1+f_x^2+f_y^2}}(-f_x f_y, 1+f_x^2, f_y)$ и $\mathbf{n}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{1+f_x^2+f_y^2}}(-f_x, -f_y, 1)$. Тогда единичный вектор вдоль вектора отражения для изогнутого брэгговского зеркала есть

$$\mathbf{n}_\tau(x, y) = \sin(\theta) \cos(\varphi) \mathbf{n}_x(x, y) + \sin(\theta) \sin(\varphi) \mathbf{n}_y(x, y) + \cos(\theta) \mathbf{n}(x, y). \quad (20)$$

Соотношение (7) в этом случае принимает вид

$$\varepsilon(x, y) = -\frac{\hbar c \tau}{2(\mathbf{n}_0(x, y) \cdot \mathbf{n}_\tau(x, y))},$$

а формула (16)

$$\mathbf{n}_1(x, y) = \mathbf{n}_0(x, y) - 2(\mathbf{n}_0(x, y) \cdot \mathbf{n}_\tau(x, y))\mathbf{n}_\tau(x, y). \quad (21)$$

Формулы (15), (17)–(19) для этой ситуации имеют такой же вид, только надо учитывать, что $\mathbf{n}_1(x, y)$ определяется соотношением (21).

3. ФОКУСИРОВКА В ЭНЕРГОДИСПЕРСИОННОМ EXAFS-СПЕКТРОМЕТРЕ

В качестве примера, иллюстрирующего полученные выше формулы, рассмотрим фокусировку рентгеновских квантов в энергодисперсионном EXAFS-спектрометре [4]. Как фокусирующий элемент в этом спектрометре используется изогнутое брэгговское зеркало, изготовленное из триангулированной пластинки кристалла кремния с вектором отражения $\tau[1, 1, 1]$. До изгиба этот вектор отражения является перпендикулярным к отражающей плоскости кристалла. Профилирование кристалла имеет целью избавление от обусловленного анизотропией изгиба кристалла в поперечном направлении. Будем полагать, что отражающая поверхность изогнутого брэгговского зеркала (см. рис. 1) описывается формулой $\{x \leq 25, 0,09x - 2,5 \leq y \leq -0,09x + 2,5, z = c(1 - \sqrt{1 - x^2/a^2})\}$.

Согласно [4], можно считать, что на кристалл падает пакет плоских волн рентгеновских квантов с энергиями в интервале от 5 до 20 кэВ, волновые векторы которых параллельны. Будем полагать, что до изгиба кристаллическая пластинка ориентирована таким образом, что условие Брэгга точно выполняется для рентгеновских квантов с энергией 6 кэВ. На рис. 2 показано полученное по формуле (15) семейство лучей рентгеновских квантов, отраженных от изогнутого профилированного брэгговского зеркала.

В спектрометре [4] падающее на фокусирующее брэгговское зеркало синхротронное рентгеновское излучение освещает на кристаллической пластинке полосу размерами

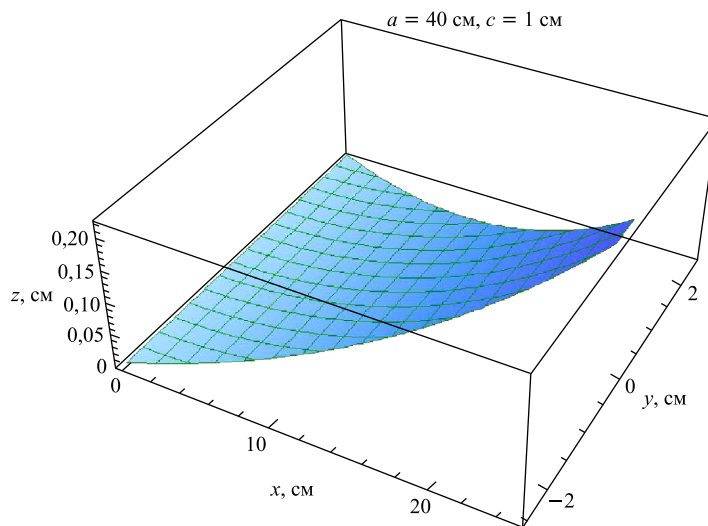


Рис. 1. Отражающая поверхность профилированного изогнутого брэгговского зеркала

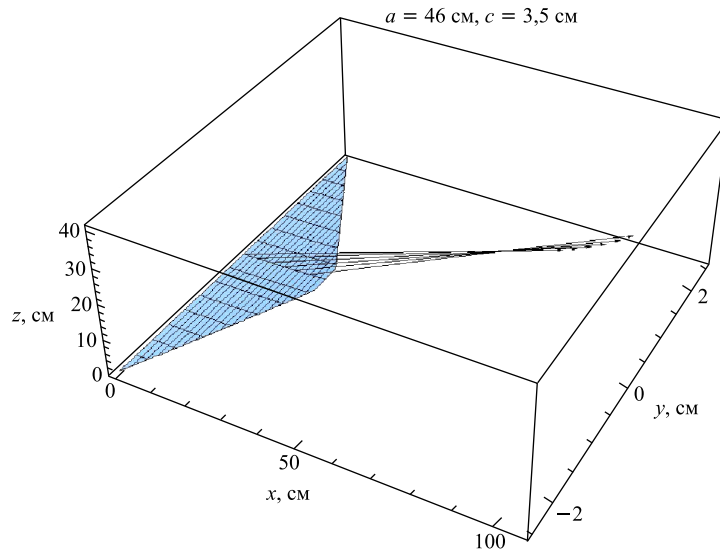


Рис. 2. Семейство лучей рентгеновских квантов, отраженных от изогнутого кристалла при $y = 0$

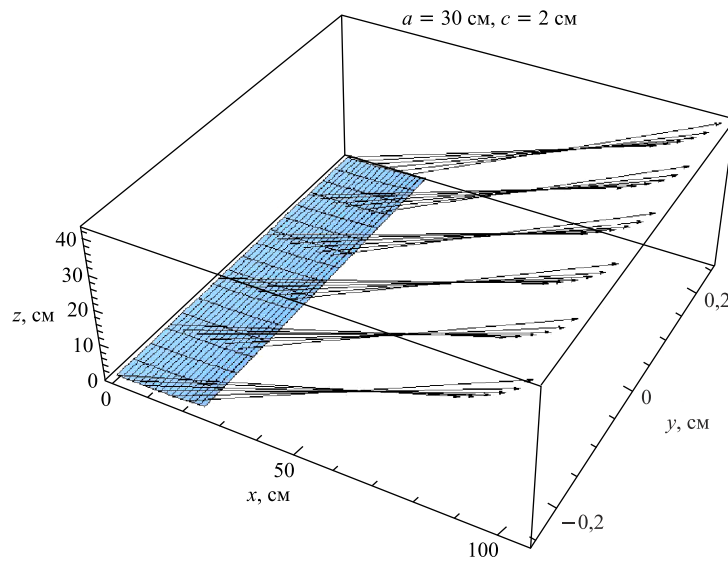


Рис. 3. Семейство лучей рентгеновских квантов, отраженных фокусирующим кристаллом

$25 \times 0,5$ см. На рис. 3 показано полученное по формуле (15) семейство лучей рентгеновских квантов, дифрагировавшее на этой полоске.

Каустическая поверхность, т.е. огибающая семейства лучей рентгеновского излучения, отраженных фокусирующим кристаллом спектрометра, определена соотноше-

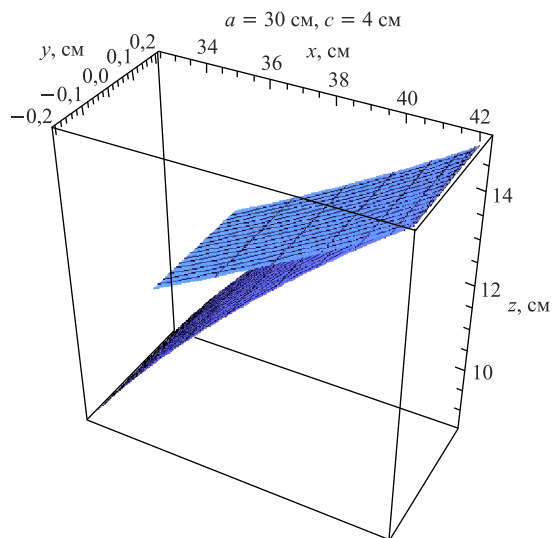


Рис. 4. Каустика семейства рентгеновских лучей, отраженных изогнутым брэгговским зеркалом

нием (18) и приведена на рис. 4. Как видно из этого рисунка, каустика является складкой Уитни или имеет особенность A_3 по классификации Арнольда [3]. Эта особенность (ребро возврата) и является местом фокусировки семейства рентгеновских лучей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фок В. А. Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн. М.: Сов. радио, 1970.
2. Залгаллер В. А. Теория огибающих. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1975.
3. Арнольд В. И., Варченко А. Н., Гусейн-Заде С. М. Особенности дифференцируемых отображений. Т. 1, 2. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1982.
4. Тютюнников С. И. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2009. Т. 6, № 6(155). С. 798–804.

Получено 22 января 2011 г.