

مطالعه زاویه فضایی جمع کنندگی بلورهای دوبار خمیده

سیدجلال پسته‌ای^۱، غلامرضا عسکری گرمی^۲ و علیرضا راستکار ابراهیم‌زاده^۲

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز، تبریز

۲. دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهید مدنی آذربایجان، تبریز

پست الکترونیکی: sjpest@tabrizu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۰۷/۲۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۸/۰۵/۱۶)

چکیده

یک رویکرد برای به دست آوردن زاویه فضایی بیشینه، استفاده از بلورهای خمیده است. لذا به منظور مفید بودن این بلورها در طیف‌سنجی پرتو ایکس، لازم است طراحی آنها به گونه‌ای باشد تا زاویه فضایی و بازده انعکاسی بالایی داشته باشند. در این مقاله یک رابطه کلی تقریباً دقیق برای محاسبه زاویه فضایی و ضریب مساحت روی سطح چندین هندسه بلوری خمیده استخراج و با نتایج منتشره قبلی مورد مقایسه قرار می‌گیرد. روش میانبر ویتری و سان برای محاسبه زاویه فضایی و نیز روش آزمون و خطای ایشان جهت بیشینه‌سازی زاویه فضایی فوق و معرفی بلور کانونی‌ساز واقعی، مورد نقد و بررسی قرار می‌گیرد و نشان داده می‌شود که برای بعضی از هندسه‌های بلوری پاسخگو نیست. با نوشتن یک الگوریتم جهت محاسبه زاویه فضایی و ضریب مساحت تمام هندسه‌های بلوری، نشان داده‌ایم که با نتایج حاصل از روش تحلیلی توافق خوبی دارند.

واژه‌های کلیدی: زاویه فضایی جمع کنندگی، بلورهای سطح چنبره‌ای پرتو ایکس، ناحیه مؤثر پراکنندگی بلوری، هندسه بلوری کانونی‌ساز

۱. مقدمه

یک رویکرد برای به دست آوردن زاویه فضایی بیشینه با تک رنگ‌سازهای بلوری، استفاده از بلورهای دو بار خمیده است. این نوع هندسه‌های بلوری معمولاً برای تک رنگ‌سازی، کانونی‌سازی و پراش پرتو ایکس به کار می‌روند و در گستره وسیعی از سیستم‌های طیف‌سنجی شامل؛ تحلیل فلورسنت پرتو ایکس، تشکیل میکروپروب پرتو ایکس با استفاده از چشمه‌های آزمایشگاهی یا سنکروترونی، هولوگرافی پرتو ایکس با چشمه لیزری پرتو ایکس نرم و لیتوگرافی پرتو ایکس زیر میکرونی با

استفاده از چشمه‌های نقطه‌ای کاربرد دارند [۱ و ۲]. از کاربردهای عملی بلورهای خمیده در داخل کشور می‌توان به استفاده از آنها در طیف‌سنجی پرتو ایکس تابیده از دستگاه پلاسما کانونی دنا [۳] و صنعتی شریف [۴] و نیز در قسمت اپتیکی طرح چشمه ایران [۵] اشاره کرد. از این رو لازم است بتوانیم هندسه بلوری خمیده‌ای را ارزیابی کنیم که در بهینه‌سازی عملکرد یک سیستم طیف‌سنجی نوری، مؤثر واقع شود. توانایی یک هندسه بلوری در جمع کردن پرتو پرتو ایکس گسیلی از یک چشمه نقطه‌ای، با زاویه فضایی

جدول ۱. نه هندسه بلوری رایج.

شعاع صفحه اتمی		شعاع سطح بلور		هندسه‌های بلوری
R'_p	R'_s	R_p	R_s	
∞	۱	∞	۱	۱. یوهان
∞	۱	∞	۰.۵	۲. یوهانسون
۱	۱	۱	۱	۳. کروی
۱	۱	۰.۵	۰.۵	۴. یوهانسون کروی
۱	۱	۱	۰.۵	۵. بلور ویتری
۰.۵	۱	۰.۵	۰.۵	۶. کانونی‌ساز ۴۵ درجه
$\sin^2 \theta$	۱	$\sin^2 \theta$	۰.۵	۷. کانونی‌سازعام ویتری
$\sin^2 \theta$	۱	$\sin^2 \theta$	∞	۸. کانونی‌ساز برمن
$\sin^2 \theta$	۱	$\sin^2 \theta$	۱	۹. کانونی‌ساز یوهان

سطح بلور که به واسطه قانون براگ اتفاق می‌افتد. (ب) خصوصیات کانونی‌سازی پرتو اشعه ایکس توسط بلور بعد از پراش (ج) تعیین منحنی راکینگ بلور. ویتری و همکاران با تمرکز بر دیدگاه‌های فوق، در طول چند دهه طی مقالاتی [۱، ۲، ۶-۹ و ۱۲-۱۹]، نورشناسی نه هندسه بلوری یک یا دو بار خمیده مناسب برای طیف‌سنجی را که در جدول ۱ لیست شده، از روش هندسی مورد مطالعه قرار داده‌اند. از میان آنها می‌توان به ویژگی‌هایی مانند ناحیه مؤثر پراکندگی سطح بلوری، قدرت تفکیک طول موج و ضریب مساحت بلورها [۱ و ۲]، محاسبه انحراف زاویه‌ای از زاویه براگ روی سطح بلور و معرفی بلور کانونی‌سازی نقطه‌ای عام [۹، ۱۲ و ۱۳] و سپس تصحیح عددی شعاع‌های انحنای قائم آن با استفاده از یک روش آزمون و خطا روی بیشینه‌سازی زاویه فضایی جمع‌کنندگی [۹]، اثر نفوذ پرتو ایکس به داخل بلور [۱۶]، اثر انحراف چشمه نقطه‌ای پرتو ایکس از موقعیت روی دایره رولاند [۶ و ۸]، محاسبه ضریب زاویه فضایی جمع‌کنندگی و نمایه شدت روی سطح بلور و آشکارساز [۸ و ۱۸]، شبیه‌سازی نمایه شدت روی صفحه تصویر قرار داده شده در یک موقعیت دلخواه [۱۹]، محاسبه زاویه فضایی جمع‌کنندگی با استفاده از یک روش میانبر [۲] و [۱۲]، بررسی خصوصیت کانونی‌سازی پرتو ایکس توسط بلورهای خمیده [۲]، بلورهای سطح پله‌ای

پوشیده شده توسط ناحیه مؤثر پراکندگی سطح بلوری در موقعیت چشمه محدود می‌شود. خود ناحیه مؤثر پراکندگی سطح بلوری توسط منحنی انعکاس‌دهی بلور (یا منحنی راکینگ بلور که معمولاً به صورت گوسی در نظر گرفته می‌شود) و نقطه قله منحنی فوق مشخص می‌شود. حتی اگر نقطه قله منحنی نزدیک به یک شود، که ممکن است برای بعضی از بلورها درست باشد، زاویه فضایی جمع‌کنندگی در برگرفته توسط ناحیه مؤثر پراکندگی سطح بلوری تحت تأثیر پهنای منحنی راکینگ بلور قرار می‌گیرد. پهنای منحنی راکینگ بلورها و راندمان نقطه قله آن همیشه یک مقدار ثابت نبوده و برای بیشتر بلورها بستگی به جنس بلور، کیفیت کنده کاری و ساییدن سطح بلور دارد [۶-۸]. تأثیر پهنای منحنی راکینگ بر روی ناحیه مؤثر پراکندگی و زاویه فضایی جمع‌کنندگی برای هندسه‌های بلوری مختلفی در مقالات قبلی توسط چندین نویسنده به صورت هندسی مورد بحث قرار گرفته و مشخص شده که در یک طیف خروجی، شدت پرتو ایکس کانونی شده توسط یک بلور خمیده بستگی به زاویه فضایی جمع‌کنندگی سطح بلوری دارد [۱، ۶ و ۹-۱۳].

در بررسی نور شناختی پرتو ایکس در ارتباط با بلورها سه دیدگاه زیر بیشتر از جنبه‌های دیگر موضوع مورد توجه بوده است [۹]: الف) ناحیه مؤثر پراکندگی محدود ایجاد شده روی

جدول ۲. چهار هندسه بلوری کانونی ساز اصلاحی.

هندسه‌های بلوری کانونی ساز اصلاحی			
صفحه اتمی		شعاع سطح بلور	
R'_1	R'_2	R_1	R_2
$\sqrt{2}/2$	۱	$(1+\sqrt{2})/2$	۰٫۵
$\sin \theta$	۱	$\sin \theta(1+\sin \theta)/2$	۰٫۵
$\sin \theta$	۱	$\sin \theta(1+\sin \theta)/2$	∞
$\sin \theta$	۱	$\sin \theta(1+\sin \theta)/2$	۱

corr. ۴۵/۶ درجه

corr. ۷ عام پسته‌ای - عسکری

corr. ۸ برمن

corr. ۹ یوهان

طیفی بلورهای خمیده [۲۵]، اثر انحراف بلور از موقعیت روی دایره رولاند و نفوذ پرتو ایکس به داخل بلور [۲۶]، خصوصیات کانونی سازی افقی و عمودی چندین هندسه بلوری [۲۷ و ۲۸]، تصحیح ضریب زاویه فضایی جمع کنندگی و بررسی اثر آن بر نمایه شدت سطح بلوری [۲۳]، انحراف زاویه‌ای هندسی از زاویه براگ روی سطح بلورهای خمیده در زاویه براگ کوچک [۲۹]، معرفی هندسه بلوری کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری به عنوان بلوری با بالاترین زاویه فضایی جمع کنندگی [۳۰] و نهایتاً بررسی ابیراهی هندسی بلور یوهانی و خطای یوهانی [۳۱]، مورد نقد و اصلاح قرار گرفته‌اند. در مراجع [۱۱ و ۲۸] نیز مشخص شد که شعاع‌های کانونی هندسه‌های بلوری کانونی ساز نقطه‌ای شماره ۶، ۷، ۸ و ۹ جدول ۱ می‌بایست با شعاع‌های کانونی ساز نویسندگان اصلاح شوند. نتیجه حاصل در جدول ۲ با شماره‌های ۶ corr.، ۷ corr.، ۸ corr. و ۹ corr. فهرست شده که در آن هندسه بلوری شماره ۷ corr. بلور کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری معرفی شده است [۲۸].

در مراجع [۱۱ و ۲۲]، ابتدا با به کارگیری رابطه انحراف زاویه‌ای دقیق‌تر به دست آمده توسط نویسندگان، ضریب زاویه فضایی جمع کنندگی سطح بلوری مورد مطالعه و اصلاح قرار گرفت که در آن به پیروی از ویتیری و همکاران، به جای بردار یکه قائم بر سطح بلور به تقریب از بردار یکه قائم بر صفحات اتمی بلور استفاده شد. سپس در مرجع [۲۳] با محاسبه بردار یکه قائم بر سطح بلور و جایگذاری آن در روابط مربوطه، ضریب زاویه فضایی جمع کنندگی سطح بلوری مورد تصحیح قرار گرفته و اثر آن بر نمایه شدت سطح بلوری بررسی شد. نشان

شکل [۱۶] و بلورهای سطح ماریچ لگاریتمی [۱۷] اشاره کرد. در این مطالعات ابتدا از یک روش برداری، یک رابطه تقریبی عمومی برای انحراف زاویه‌ای از زاویه براگ سطح بلوری استخراج و از آن در بقیه مقالات جهت بررسی ویژگی‌های ذکر شده در بالا استفاده کرده‌اند. ویتیری و همکاران در مطالعات مربوط به نه هندسه بلوری لیست شده در جدول ۱، برای یک نقطه اختیاری واقع در سطح بلور، مختصات نوک بردار قائم بر صفحات اتمی بلور را با استفاده از مختصات نوک بردار حاصل از دوران بردار قائم بر صفحات اتمی گذرنده از مرکز تقارن بلور و در راستای قائم بر دایره رولاند حول محور گذرنده از مرکز انحنا قائم بلور، تقریب زده‌اند. سپس یک رابطه تقریبی عمومی را برای انحراف زاویه‌ای از زاویه براگ تا مرتبه سوم دقت از بسط تیلور حول نقطه مرکز تقارن بلور به دست آورده‌اند [۹].

در مقالاتی از دو نویسنده اول، با دنبال کردن روش برداری ویتیری و همکاران، یک رابطه عمومی تقریباً دقیق‌تر برای انحراف زاویه‌ای از زاویه براگ تا مرتبه سوم دقت ارائه شده است که این رابطه از نتیجه محاسبه و به کارگیری دقیق بردار قائم بر صفحات اتمی بلور توسط نویسندگان از دو روش استفاده از دستگاه خمیده خط چنبره‌ای [۱۰ و ۲۰] و ماتریس دوران [۱۱ و ۲۱] در بسط تیلور مربوطه ناشی شده است. سپس با به کار بردن آن، روابط منتشر شده توسط ویتیری و همکاران مانند تعیین دقیق شعاع‌های بلور کانونی ساز عام [۱۰ و ۱۱]، ناحیه مؤثر پراکندگی سطح بلوری [۱۰]، ضریب زاویه فضایی جمع کنندگی و نمایه شدت بلوری [۱۱، ۲۲ و ۲۳]، تأثیرات عدم تنظیم چشمه روی دایره رولاند [۱۱ و ۲۴]، قدرت تفکیک

فضایی مربوطه در هندسه‌های بلوری اصلاحی به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد.

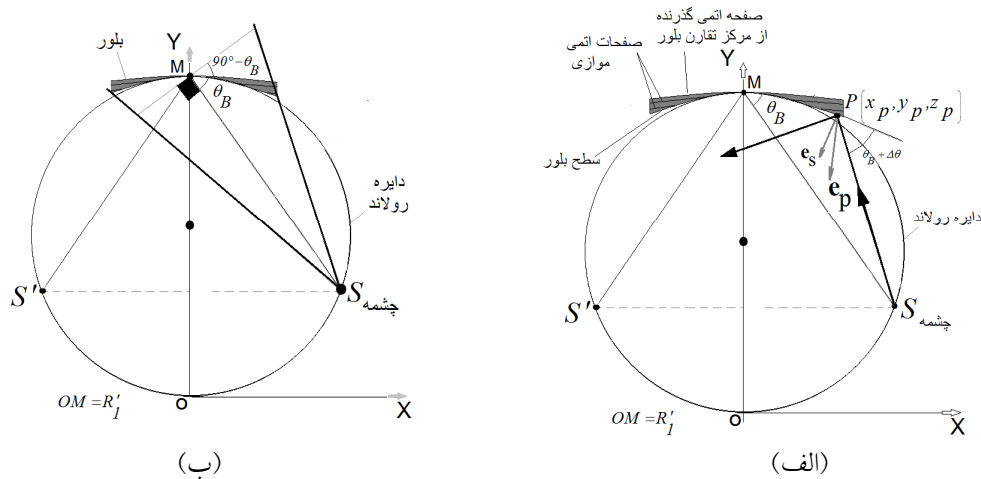
۲. روش مطالعه

با در نظر گرفتن یک بلور پراکننده خمیده سطح چنبره‌ای، ما دو سطح چنبره‌ای را تعریف می‌کنیم: یکی برای سطح بلور و دیگری برای صفحه اتمی گذرنده از مرکز تقارن بلور. این دو سطح چنبره‌ای در نقطه مرکزی بلور به صورت مماس بر هم قرار دارند. لازم به ذکر است که چندین صفحه اتمی دیگر به موازات هم و موازی با صفحه اتمی گذرنده از مرکز تقارن بلور قرار دارند که توسط چنبره سطح بلور در نقاط مختلف قطع شده‌اند. اگر چه محاسبات فوق با به کار بردن دستگاه مختصات خمیده خط چنبره‌ای انجام می‌گیرد اما جهت مقایسه یک دستگاه مختصات دکارتی مناسب هم به کار خواهیم برد. جهت انجام محاسبات، با توجه به شکل ۱، مبدأ دستگاه مختصات دکارتی، O ، را روی دایره‌ای موسوم به دایره رولاند درست در نقطه مقابل مرکز تقارن بلور، M ، در نظر می‌گیریم به طوری که محور Y آن عمود بر بلور در نقطه مرکز تقارن بوده و محور X آن مماس بر دایره رولاند و در جهت نشان داده شده قرار دارد و محور Z آن عمود بر صفحه دایره رولاند و به سمت بالا است. R_1 و R_2 به ترتیب نشان دهنده شعاع‌های چنبره سطح بلوری در صفحات XY و YZ بوده و R'_1 و R'_2 مقادیر متناظر برای چنبره اتمی گذرنده از مرکز تقارن بلور هستند. قابل توجه است که در سر تا سر این مقاله منظور ما از ذکر صفحه اتمی به تنهایی، همان صفحه اتمی گذرنده از مرکز تقارن بلور خواهد بود که به صورت مماس بر چنبره سطح بلور قرار گرفته است (شکل ۱. الف).

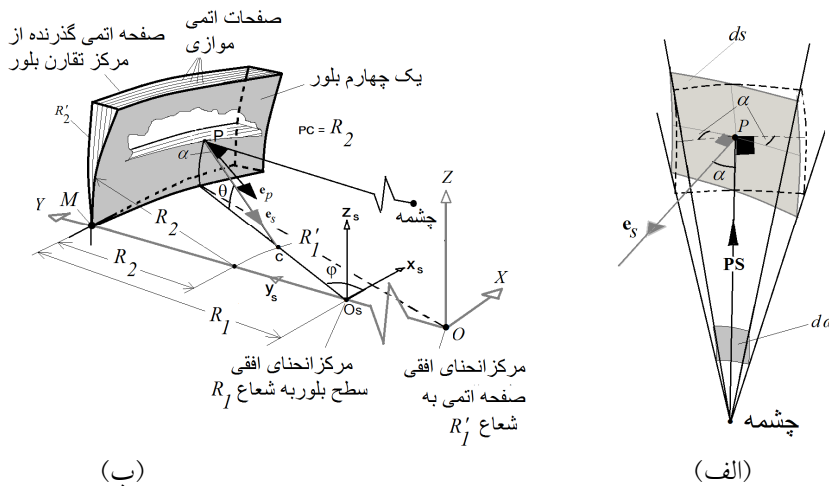
مرکز انحنای افقی صفحه اتمی بلور مشخص شده با شعاع R'_1 ، در مبدأ مختصات دکارتی O قرار دارد، لذا R'_1 قطر دایره رولاند است. چشمه نقطه‌ای پرتو ایکس، S ، را روی دایره رولاند در نظر گرفته و فرض می‌شود که زاویه فرودی θ_i به نقطه M دقیقاً برابر θ_B باشد و لذا در یک نقطه دلخواه روی سطح بلور مانند $P(x_p, y_p, z_p)$ ، زاویه فرودی برابر

داده شده که رابطه موجود در نشریات برای ضریب زاویه فضایی جمع کنندگی یک حالت خاصی از محاسبات مرجع فوق بوده که در آن به تقریب برای تمام هندسه بلوری جدول ۱، سطح بلور با صفحه اتمی بلوری موازی در نظر گرفته شده است. در مرجع [۳۰] با انتگرال‌گیری روی ضریب زاویه فضایی جمع کنندگی تصحیحی، نشان داده شده که هندسه بلوری کانونی‌ساز عام پسته‌ای - عسکری یک حالت کلی از هندسه بلوری کانونی‌سازی است که ویتری و سان از طریق پیشینه کردن زاویه فضایی جمع کنندگی هندسه بلوری کانونی‌ساز عام خود به آن دست یافته‌اند.

در این مقاله ضمن یادآوری تفضیلی مباحث مراجع [۲۳] و [۳۰]، روش میانبر ویتری و سان برای محاسبه زاویه فضایی و نیز روش آزمون و خطای ایشان جهت پیشینه‌سازی زاویه فضایی فوق، مورد نقد و بررسی قرار می‌گیرد. نشان می‌دهیم که هر چند ویتری و سان با این روش پیشینه‌سازی زاویه فضایی توانسته‌اند به صورت عددی به هندسه بلوری کانونی‌ساز واقعی پسته‌ای عسکری برسند، ولی نمودارهای زاویه فضایی منتشر شده ایشان جهت مقایسه دو هندسه بلوری کانونی‌ساز ساده و واقعی، به دلیل نادیده گرفتن جمله اصلاحی نویسندگان نمی‌تواند صحیح باشند. در این مقاله مشخص می‌شود که روش میانبر ویتری و سان برای محاسبه زاویه فضایی بعضی از هندسه‌های بلوری فهرست شده در جدول ۱ پاسخگو نیست. لذا با نوشتن یک الگوریتم جهت محاسبه ضریب مساحت ناحیه مؤثر پراکنندگی و زاویه فضایی سطح بلوری، توانستیم هندسه‌های بلوری را که توسط روش تحلیلی قابل پاسخگویی نبودند، مطالعه کنیم و نشان می‌دهیم که برای بقیه هندسه‌های بلوری، نتایج به دست آمده از روش الگوریتم با نتایج حاصل از روش تحلیلی همخوانی کامل دارند. همچنین در این مقاله نشان می‌دهیم که در میان دیگر هندسه‌های بلوری، ضریب مساحت ناحیه مؤثر پراکنندگی سطح بلوری هندسه کانونی‌ساز عام پسته‌ای - عسکری در زاویه براگ مورد نظر برابر واحد بوده و زاویه فضایی آن نیز پیشینه است. با اصلاح شعاع‌های قائم دیگر سطح کانونی‌ساز نقطه‌ای با شعاع‌های قائم بلور کانونی‌ساز نویسندگان، دریافتیم که ضریب مساحت و زاویه



شکل ۱. (الف) چیدمان در نظر گرفته شده برای محاسبات حاضر که در آن محور Z عمود بر صفحه شکل می‌باشد و (ب) هندسه در نظر گرفته شده برای محاسبه زاویه فضایی بر حسب ضریب مساحت ناحیه مؤثر پراکنندگی.



شکل ۲. (الف) طرح وتره‌ای برای محاسبه المان زاویه فضایی $d\omega$ و (ب) نمایشی از بردارهای یکه e_p و e_s به همراه دستگاه دکارتی در نظر گرفته شده. جهت تجسم راحت تر فقط یک چهارم بلور رسم و نشان داده شده است. O و O_s به ترتیب مرکز انحنا افقی مربوط به چنبره سطح بلور و چنبره صفحه اتمی گذرنده از مرکز تقارن بلور است.

در نقطه P با المانی از زاویه فضایی $d\omega$ در بر می‌گیرد [۱۸] (شکل ۲. الف) یعنی:

$$d\omega = \frac{e_{ps} \cdot ds}{|PS|^2}, \quad (1)$$

که در آن $ds = ds e_s$ و $e_{ps} = PS/|PS|$ بردار PS از نقطه P تا چشمه نقطه‌ای S واقع در روی دایره رولاند امتداد یافته و به صورت $PS = PS(R'_1 \sin \theta_B \cos \theta_B - x_p, R'_1 \cos^2 \theta_B - y_p, -z_p)$ است [۱۰]. بردار e_s بردار یکه عمود بر سطح بلور در نقطه P است. لذا داریم:

$\theta_B + \Delta\theta$ در نظر می‌گیریم. هندسه‌های بلوری که می‌توانند با شعاع‌های قائم و افقی مختلف تعریف شوند، در جدول ۱ فهرست شده‌اند. از آنجایی که محاسبات حاضر بر اساس پیکربندی یک چشمه نقطه‌ای پرتو ایکس انجام می‌شود، ناحیه مؤثر پراکنندگی حول یک نقطه مانند P واقع در روی سطح بلور، یک زاویه فضایی را در موقعیت چشمه نقطه‌ای در برمی‌گیرد. زاویه فضایی تابعی از مختصات x_p, y_p, z_p است. بنابراین چشمه نقطه‌ای، المان سطح ds از سطح بلور را

به دست آورد که در آن h_p سنجه‌های دستگاه خمیده خط چنبره‌ای هستند. لذا به دست می‌آوریم:

$$e_s = \partial X_p / h_r \partial r = \cos \theta \cos \varphi i + \cos \theta \sin \varphi j + \sin \theta k, \quad (8)$$

با مراجعه به شکل ۲. ب برای محاسبه $\sin \theta$, $\cos \varphi$, $\sin \varphi$ و $\cos \theta$ داریم:

$$\sin \varphi = (y_p - (R'_1 - R_1)) / \sqrt{x_p^2 + (y_p - (R'_1 - R_1))^2}, \quad (9)$$

$$\cos \varphi = x_p / \sqrt{x_p^2 + (y_p - (R'_1 - R_1))^2}, \quad \sin \theta = z_p / R_r,$$

نهایتاً با جایگذاری رابطه (۹) در رابطه (۸) و فرض این که ابعاد بلور در مقایسه با مقادیر شعاع‌های R'_1, R_r, R_1 و R'_1 کوچکتر هستند و بهنجار کردن تمام طول‌ها به R'_1 (با گرفتن $R'_1 = 1$)، رابطه تقریبی زیر برای e_s به دست می‌آید که در آن علامت منفی به دلیل برگرداندن جهت بردار یکه به سمت تقعر بلور وارد شده است.

$$e_s \approx -[\eta x_p i + \eta(R_1 - x_p^2 / 2R_1 - z_p^2 / 2R_r, z_p) j + z_p k] / R_r, \quad (10)$$

$$\eta = 1 - (R_1 - R_r) / (R_1 - z_p^2 / 2R_r).$$

می‌توان مشاهده کرد که در یک حالت خاص؛ وقتی صفحات اتمی بلور موازی با سطح بلور باشد یعنی $R_1 = R'_1 = 1$ و $R_r = R'_1$ ، آنگاه رابطه به دست آمده در مرجع [۱۰] برای بردار یکه عمود بر صفحه اتمی گذرنده از نقطه P ، یعنی e_p دقیقاً به صورت e_s محاسبه شده در بالا در می‌آید. با جایگذاری روابط $PS(R'_1 \sin \theta_B \cos \theta_B - x_p, R'_1 \cos^2 \theta_B - y_p, -z_p)$ در رابطه (۴) و فرض این که ابعاد بلور در مقایسه با شعاع‌ها کوچک است، با بسط تیلور حول نقطه مرکز تقارن بلور، $M(0, R'_1, 0)$ ، و نگهداری جملاتی تا مرتبه سوم دقت از x_p / R'_1 و z_p / R'_1 ضریب زاویه فضایی جمع‌کنندگی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\Omega(x_p, z_p) = e_s \cdot PS / |PS|^3 [1 + x_p^2 / R_1^2 + z_p^2 / R_r^2]^{3/2} \quad (11)$$

$$\approx K_1 x_p^2 + K_2 x_p^4 + K_3 x_p + K_4 z_p^2 + K_5 x_p z_p^2 + K_{10},$$

با گرفتن $R'_1 = 1$ ، شش ضریب غیر صفر بسط $K_1, K_2, K_3, K_4, K_5, K_{10}$ به صورت زیر داده می‌شوند:

$$d\omega = \frac{e_s \cdot PS}{|PS|^3} ds, \quad (2)$$

معادله سطح بلور به صورت $y_p = f(x_p, z_p) = R'_1 - x_p^2 / 2R_1 - z_p^2 / 2R_r$ زیر نوشته می‌شود [۶].

$$ds = \left[1 + \left(\partial f(x_p, z_p) / \partial x_p \right)^2 + \left(\partial f(x_p, z_p) / \partial z_p \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (3)$$

$$dz_p dx_p = \left[1 + x_p^2 / R_1^2 + z_p^2 / R_r^2 \right]^{1/2} dz_p dx_p,$$

با جایگذاری در رابطه (۲) داریم:

$$d\omega = e_s \cdot PS / |PS|^3 \left[1 + x_p^2 / R_1^2 + z_p^2 / R_r^2 \right]^{1/2}, \quad (4)$$

$$dz_p dx_p \equiv \Omega(x_p, z_p) dz_p dx_p,$$

که در آن $\Omega(x_p, z_p)$ ضریب زاویه فضایی جمع‌کنندگی سطح بلوری است [۱۸].

برای استخراج رابطه‌ای برای e_s ، با توجه به شکل ۲. ب، از روشی که برای محاسبه بردار یکه عمود بر صفحه اتمی گذرنده از یک نقطه اختیاری سطح بلوری در مرجع [۱۰] به دست آورده شده، استفاده می‌کنیم. با توجه به شکل ۲. ب، یک نقطه دلخواه مانند P را روی چنبره مربوط به سطح بلور با مختصات $x_{p,s}, y_{p,s}, z_{p,s}$ نسبت به دستگاه دکارتی مشخص شده با شاخص s و مختصات $r = R_r, \theta, \phi$ نسبت به دستگاه خمیده خط چنبره‌ای در نظر می‌گیریم. دو سیستم به صورت زیر به هم مربوط می‌شوند:

$$\begin{aligned} x_{p,s} &= (R_1 - R_r + r \cos \theta) \cos \varphi, \\ y_{p,s} &= (R_1 - R_r + r \cos \theta) \sin \varphi, \\ z_{p,s} &= r \sin \theta, \end{aligned} \quad (5)$$

که در دستگاه مختصات اصلی (بدون شاخص) به صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned} x_p &= (R_1 - R_r + r \cos \theta) \cos \varphi, \\ y_p &= (R_1 - R_r + r \cos \theta) \sin \varphi + (R'_1 - R_1), \\ z_p &= r \sin \theta, \end{aligned} \quad (6)$$

با تعریف مختصات برداری P در دستگاه دکارتی فوق به صورت $X_p = x_p i + y_p j + z_p k$ ، بردار یکه عمود بر چنبره سطح

بلور در نقطه P یعنی $e_s(x_p, y_p, z_p)$ را می‌توان با به کار بردن

$$e_s = \partial X_p / h_\zeta \partial q_\zeta; \quad \zeta = r, \theta, \varphi, \quad (7)$$

$$a_v = \cot^2 \theta_B \left(1 - \frac{1}{2R_1} \right),$$

$$a_q = \frac{(1-R_1')}{2R_1'^2} + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{R_1} - \frac{(1-R_1')}{R_1'^2} + \left(\frac{2}{R_1'} - \frac{1}{R_1} - 2 \right) \frac{1}{\sin^2 \theta_B} \right],$$

(۱۴)

لازم به ذکر است که از میان چهار ضریب بسط فوق، تنها ضریب a_q به اندازه جمله اول $(1-R_1')/(2R_1'^2)$ نسبت به ضرایب منتشر شده توسط ویتری و سان [۹] متفاوت و دقیق‌تر محاسبه شده است.

برای بلوری به ابعاد 0.2×0.2 در مختصات بهنجارش، ناحیه مؤثر پراکنندگی سطح بلوری با حدود $-0.1 \leq x_p \leq 0.1$ و $z_p(x_p) = \pm \sqrt{(\Delta\theta - a_q x_p^2 - a_v x_p^2) / (a_\varphi + a_q x_p)}$ مشخص می‌شود که در آن جهت نمایش، مقدار $\Delta\theta$ را برابر $\pm 10^{-4}$ $W_c/2$ رادیان در نظر می‌گیریم [۲۸]. از آنجایی که انتگرال‌گیری از رابطه (۱۳) در بازه فوق به صورت تحلیلی قابل حل نیست، می‌توان به شکل مناسبی از آن به صورت زیر بسنده کرد [۱۸].

$$R(x_p, z_p) = I/I_0 = \Omega(x_p, z_p) \exp \left[- \left(2\Delta\theta(x_p, z_p) / W_c \right)^2 \text{Ln} 2 \right],$$

(۱۵)

که در آن $R(x_p, z_p)$ قدرت انعکاس‌دهی بلور تعریف می‌شود (بدون واحد). با رسم $R(x_p, z_p)$ بر حسب هر یک از مختصات X یا Z با ثابت نگه داشتن نوبتی یکی از دو مختصه، منحنی انعکاس‌دهی (یا منحنی راکینگ) مربوطه در برش مورد نظر روی بلور به دست می‌آید. همچنین این رابطه نمودار کانتور مربوط به پروفایل شدت را در روی سطح بلور نمایش می‌دهد [۶، ۱۱ و ۱۳].

۳. بحث و بررسی

در شکل ۳ الف، نمودار کانتور پروفایل شدت روی سطح هندسه بلوری شماره ۵ جدول ۱ برای زاویه براگ دلخواه ۲۵ درجه رسم و با نمودار کانتور حاصل از نتایج قبلی برای $\Omega(x_p, z_p)$ در شکل ۳ ب مقایسه شده است. ابعاد بلور در مختصات بهنجار 0.2×0.2 فرض شده‌اند که برای یک

$$K_1 = \left[\frac{5}{2} + \frac{3}{R_1} - \frac{1+3R_1}{4R_1^2} + \left(\frac{35}{2} - \frac{15}{2R_1} - \frac{1+3R_1}{4R_1^2} \right) \cos 2\theta_B \right] \frac{\cot \theta_B}{\sin^2 \theta_B},$$

$$K_2 = \left[\frac{1+R_1}{4R_1^2} + \frac{3}{2} + \left(\frac{5}{2} - \frac{1+3R_1}{4R_1^2} \right) \cos 2\theta_B \right] \frac{1}{\sin^2 \theta_B},$$

$$K_3 = \left(3 - \frac{1}{R_1} \right) \frac{\cot \theta_B}{\sin \theta_B},$$

$$K_5 = \left(\frac{5-3 \cos 2\theta_B}{4R_1} - \frac{3}{2} \right) \frac{1}{\sin^2 \theta_B},$$

$$K_9 = \left[\frac{R_1(6R_1-3)-1}{R_1^2} - \left(15 - \frac{1+3R_1}{R_1^2} \right) \cos 2\theta_B - 3(1 \cdot R_1 - 7) \right] \frac{\cot \theta_B}{4R_1 \sin^2 \theta_B},$$

$$K_{10} = \frac{1}{\sin \theta_B}. \quad (۱۲)$$

باز می‌توان مشاهده کرد که در حد $R_1 = R_1' = 1$ و $R_2 = R_2' = 1$ ضرایب فوق به ضرایب مرجع [۱۱] کاهش می‌شوند. توجه داریم که در مرجع ذکر شده، این ضرایب برای حالت انحراف چشمه از روی دایره رولاند به دست آورده شده‌اند، لذا به منظور مقایسه لازم است که در آنجا $X_S = Y_S = Z_S = 0$ قرار داده شوند. انعکاس‌دهی یکپارچه، R_{int} ، با استفاده از رابطه (۴) به صورت زیر بیان می‌شود [۱۸]:

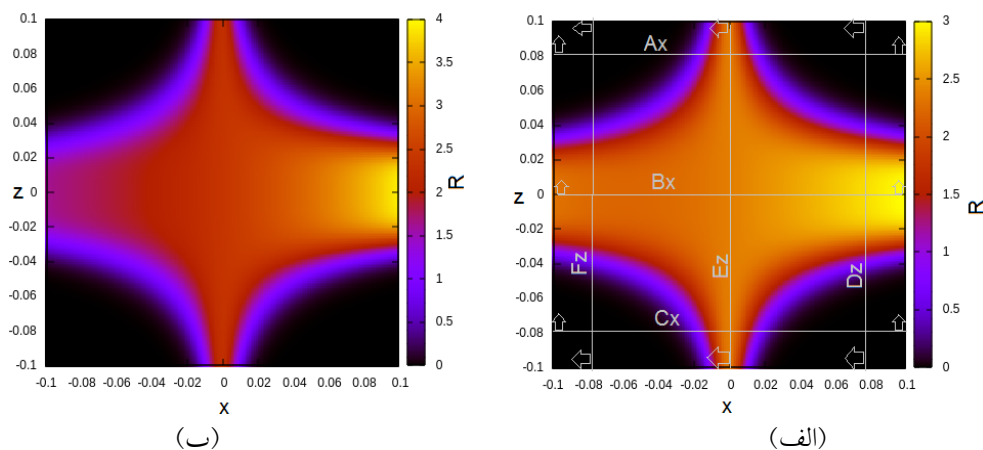
$$R_{int} = \int I/I_0 \cdot d\omega = \iint \Omega(x_p, z_p) \exp \left[- \left(2\Delta\theta(x_p, z_p) / W_c \right)^2 \text{Ln} 2 \right] dz_p dx_p,$$

(۱۳)

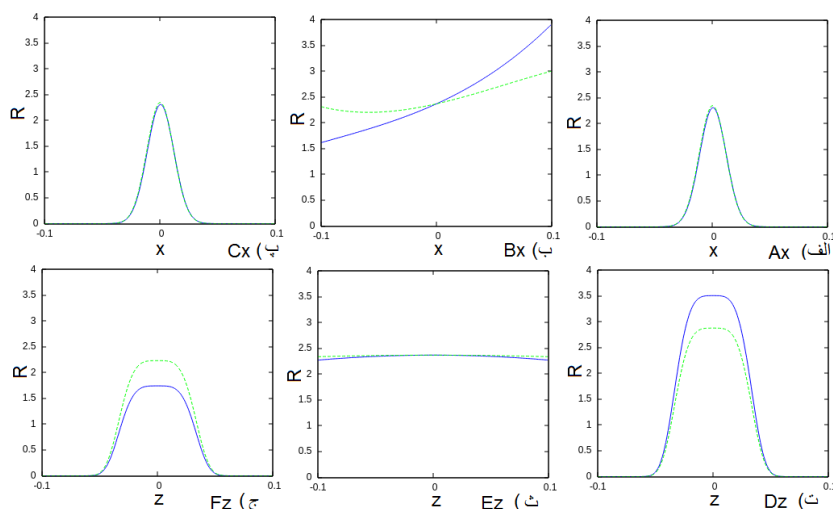
که در آن I/I_0 نسبت شدت پرتوهای فرودی به خروجی، $\Delta\theta(x_p, z_p)$ انحراف زاویه‌ای از زاویه براگ روی سطح بلور و W_c پهنا در نصف ارتفاع بیشینه منحنی راکینگ بلور است و از کارهای قبلی نویسنده‌گان [۱۰ و ۱۱] به صورت $\Delta\theta(x_p, z_p) = a_\varphi x_p^2 + a_v x_p^2 + a_\varphi z_p^2 + a_q x_p z_p^2$ و $W_c = \pm 2 \times 10^{-4}$ رادیان جایگذاری می‌شوند. ضرایب بسط $a_\varphi, a_v, a_\varphi, a_q$ در $\Delta\theta(x_p, z_p)$ تا دقت مرتبه سوم به صورت زیر داده می‌شوند.

$$a_\varphi = \cot \theta_B \left(1 - \frac{1}{2R_1} \right),$$

$$a_\varphi = \frac{\tan \theta_B}{2} \left[\frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_1'} - \frac{(1-R_1')}{R_1'^2} + \left(\frac{2}{R_1'} - \frac{1}{R_1} - 1 \right) \frac{1}{\sin^2 \theta_B} \right],$$



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار کانتور مربوط به پروفایل شدت هندسه بلوری شماره ۵ جدول ۱ با استفاده از زاویه براگ ۲۵ درجه (الف) با نتایج حاضر و (ب) با نتایج قبلی منتشر شده. با مقایسه نمودارها در (الف) و (ب) می‌توان مشاهده کرد که شدت روی سطح هندسه بلوری فوق تحت تأثیر قرار گرفته است.

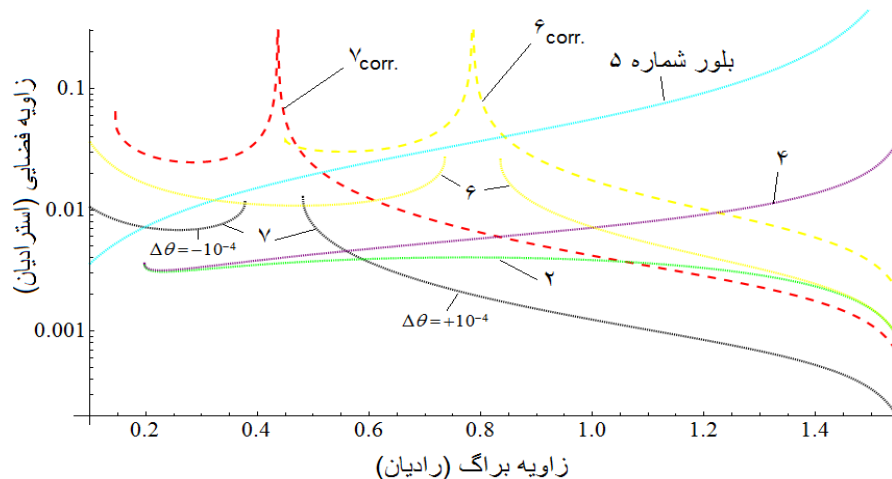


شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودارهای منحنی انعکاسی دهی مربوط به یک هندسه بلوری شماره ۵ جدول ۱ در امتداد برش‌های مشخص شده بر روی نمودار کانتور شکل ۳. الف. انعکاس دهی در بخشی از سطح بلور که نزدیک چشمه است (قسمت ت)، کاهش یافته و در بخشی از بلور که دور از چشمه قرار دارد (قسمت ج)، افزایش یافته است. برش‌ها در جهت X با (الف) $A_{x,z=0.08}$ ، (ب) $B_{x,z=0}$ ، (پ) $C_{x,z=-0.08}$ و در جهت Z با (ت) $D_{x=0.08,z}$ ، (ث) $E_{x=0,z}$ و (ج) $F_{x=-0.08,z}$ برچسب زده شده‌اند. منحنی‌های خط ممند و نقطه چین به ترتیب مربوط به نتایج استفاده از $\Omega(x_p, z_p)$ قبلی و محاسبه شده در این مقاله است. مقایسه نمودارها در قسمت‌های (ب)، (ت) و (ج) شکل فوق نشان می‌دهد که انعکاس دهی در بخشی از سطح بلور که نزدیک چشمه است، کاهش یافته و در بخشی از بلور که دور از چشمه قرار دارد، افزایش یافته است. از میان هندسه‌های بلوری فهرست شده در جدول ۱، هندسه‌های بلوری ۱، ۳ و ۹ که در آنها صفحات اتمی با سطح بلور موازی هستند ($R_1 = R'_1 = 1$ و $R_3 = R'_3 = 1$)، تحت تأثیر اصلاحات فوق قرار نمی‌گیرند.

است، نسبت به نتایج حاصل از به کارگیری $\Omega(x_p, z_p)$ قبلی، تحت تأثیر قرار گرفته است.

در نمودارهای شکل ۴ منحنی انعکاسی دهی مربوط به هندسه بلوری فوق در امتداد برش‌های مشخص شده بر روی

طیف‌سنج با شعاع دایره رولاند ۱۰ سانتی‌متر ($R'_1 = 20 \text{ cm}$)، متناظر با بلوری به ابعاد 4×4 سانتی‌متر مربع است. می‌توان مشاهده کرد که طبق انتظار نمودار کانتور مربوط به پروفایل شدت هندسه بلوری فوق که در آن $R_1 = R'_1 = 1$ و $R_3 = R'_3 = 1$



شکل ۵. رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار زاویه فضایی (استرادیان) بر حسب تغییرات زاویه براگ (رادیان) برای هندسه‌های بلوری ۲، ۴، ۵، ۶، ۷ و ۱ و بلورهای شماره ۶_{corr.} و ۷_{corr.} جدول ۲، با زوایای کانونی‌سازی به ترتیب ۴۵ و ۲۵ درجه (به ترتیب ۰٫۷۸ و ۰٫۴۳ رادیان) برای بلورهای ۶، ۶_{corr.} و ۷_{corr.}

$$\omega = \gamma \Delta \theta \left[\frac{\Delta \theta}{\sqrt{a_\gamma + a_q x_p}} \left\{ \frac{K_q (\gamma a_\gamma + a_q x_p)}{3 a_q^2} - \frac{K_\delta}{3 a_q} \right\} + \frac{a_\gamma + a_q x_p}{\Delta \theta} \left(\frac{\gamma K_1}{a_q} + \frac{K_\gamma (-\gamma a_\gamma + a_q x_p)}{3 a_q^2} + \frac{K_\gamma (\lambda a_\gamma - \gamma a_\gamma a_q x_p + 3 a_q^2 x_p^2)}{15 a_q^3} \right) + \frac{K_1 (-\gamma a_\gamma^2 + \lambda a_\gamma a_q x_p - \gamma a_\gamma a_q^2 x_p^2 + 5 a_q^3 x_p^3)}{35 a_q^4} \right]_{x_p = -0.1}^{0.1}, \quad (18)$$

در شکل ۵ نمودار زاویه فضایی (استرادیان) بر حسب تغییرات زاویه براگ (رادیان) برای هندسه‌های بلوری ۲، ۴، ۵، ۶، ۷ و جدول ۱ و بلورهای شماره ۶_{corr.} و ۷_{corr.} جدول ۲، با زوایای کانونی‌سازی به ترتیب ۴۵ و ۲۵ درجه (به ترتیب ۰٫۷۸ و ۰٫۴۳ رادیان) برای بلورهای ۶، ۶_{corr.} و ۷_{corr.} رسم و نشان داده شده است.

با توجه به نمودارهای فوق، مشاهده می‌شود که بلوری شماره ۵ (هندسه ویتری) در گستره وسیعی از زاویه براگ، زاویه فضایی بزرگتری را در مقایسه با هندسه‌های بلوری شماره ۲ (یوهانسون) و ۴ (یوهانسون کروی) دارد و لذا برای طیف‌سنجی پرتو ایکس روبشی مفیدتر است. در زاویه براگ ۹۰ درجه (۱٫۵۷

نمودار کانتور شکل ۳ الف، رسم و مقایسه شده‌اند.

هدف بعدی ما در این مقاله، محاسبه زاویه فضایی، ω

است که با استفاده از رابطه (۴) داریم:

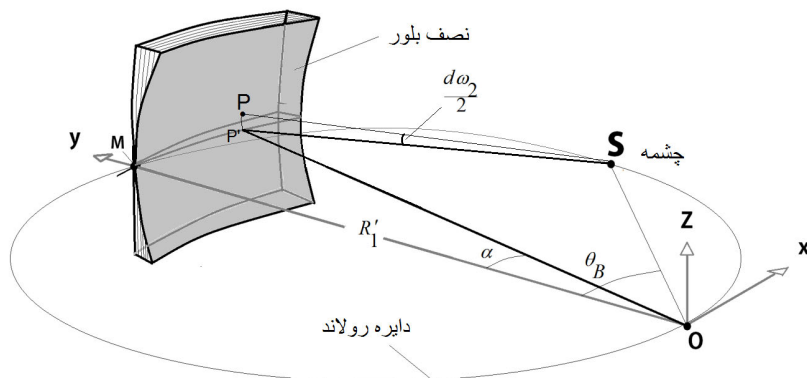
$$d\omega = \Omega(x_p, z_p) dz_p dx_p \Rightarrow \omega = \int_{x_{pmin}}^{x_{pmax}} \int_{z_p(x_p)min}^{z_p(x_p)max} dz_p dx_p, \quad (16)$$

$$\int_{z_p(x_p)min}^{z_p(x_p)max} \left(K_1 x_p^2 + K_\gamma x_p^2 + K_\gamma x_p \right) dz_p dx_p, \int_{z_p(x_p)min}^{z_p(x_p)max} \left(+K_\delta z_p^2 + K_q x_p z_p^2 + K_1 \right) dz_p dx_p,$$

با انتگرال‌گیری رابطه (۱۶) نسبت به z_p به دست می‌آید:

$$\omega = \frac{2}{3} \int_{x_p = -0.1}^{0.1} \sqrt{(\Delta \theta - a_\gamma x_p^2 - a_\gamma x_p^2)} / (a_\gamma + a_q x_p) \left[3 \left(K_1 + K_\gamma x_p + K_\gamma x_p^2 + K_1 x_p^2 \right) + (K_\delta + K_q x_p) (\Delta \theta - a_\gamma x_p^2 - a_\gamma x_p^2) / (a_\gamma + a_q x_p) \right] dx_p, \quad (17)$$

رابطه (۱۷) یک انتگرال بیضوی بوده و به صورت تحلیلی قابل حل نیست. ولی اگر فرض کنیم که بلور در راستای افقی یوهانسونی باشد یعنی؛ $R_1 = R_1'/2 = 1/2$ که برای بلورهای موارد ۲، ۴، ۵، ۶ و ۷ جدول ۱ و بلورهای شماره ۶_{corr.} و ۷_{corr.} جدول ۲ صادق است، آنگاه خواهیم داشت: $a_\gamma = a_\gamma = 0$ و در این صورت با استفاده از نرم‌افزار ممتیکا جواب تحلیلی به صورت زیر به دست می‌آید:



شکل ۶. $d\omega$ المان زاویه فضایی در راستای عمود بر صفحه دایره رولاند نسبت به عرض المان مساحت ds است. به منظور تجسم راحت‌تر نصف بلور ترسیم و نشان داده شده است.

نسبت به عرض المان سطح ds است. مقدار زاویه محاطی $d\omega$ برای یک دایره رولاند مشخص، مقداری ثابت بوده و از موقعیت مکان چشمه S مستقل است. لذا در مختصات بهنجارش، برای بلوری به طول 0.2 ، زاویه در برگرفته شده از چشمه S نسبت به طول بلور را به صورت $\omega = \int d\omega = 0.2 \text{ rad}$ به دست می‌آورند.

به طور مشابه برای $d\omega$ با توجه به شکل ۶ در نظر گرفته‌اند:

$$\tan \frac{d\omega_r}{2} = \frac{z_p \max(x_p)}{P'S}, \quad (20)$$

با فرض این که α کوچک است، $\sin \alpha \approx \alpha$ و $OP' \approx R'_1 = 1$ ، لذا از $\sin \alpha = x_p / OP'$ به دست می‌آید: $\alpha \approx x_p$. با نوشتن $\sin(\theta_B - \alpha) \approx P'S / OP'$ از رابطه (۲۰) به رابطه زیر دست یافته‌اند:

$$\tan \frac{d\omega_r}{2} \approx \frac{d\omega_r}{2} \approx \frac{z_p \max(x_p)}{\sin(\theta_B - x_p)}, \quad (21)$$

و از آن مقدار متوسط ω_r را به صورت:

$$\langle \omega_r \rangle = \frac{1}{0.2} \int_{-0.1}^{0.1} \frac{z_p \max(x_p)}{\sin(\theta_B - x_p)} dx_p, \quad (22)$$

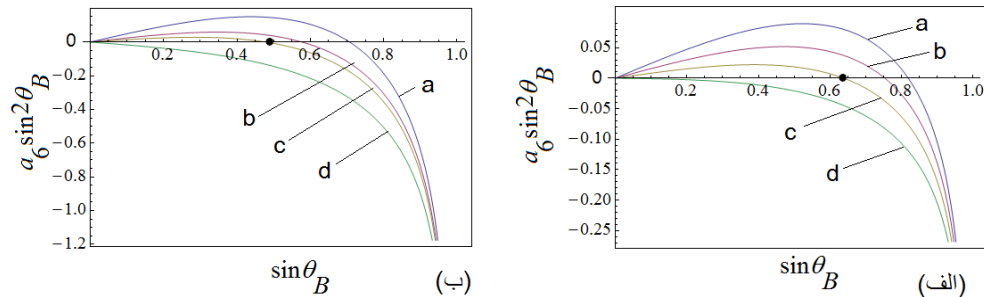
معرفی کرده‌اند (رابطه ۴-۴ مرجع [۱۲]) که در آن $z_p \max(x_p) = \sqrt{(\Delta\theta - a_v x_p^2 - a_r x_p^2) / (a_v + a_r x_p)}$ است. نهایتاً ویتری و سان بیان کرده‌اند که با جایگذاری $\langle \omega_r \rangle$ در رابطه (۱۹)، زاویه فضایی به صورت $\omega = 0.2 \langle \omega_r \rangle$ به راحتی قابل محاسبه است [۱۲]:

رادیان) بلورهای شماره ۴ و ۵ زاویه فضایی بیشینه‌ای را دارند. در زاویه‌ای براگ به ترتیب ۴۵ و ۲۵ درجه (۰.۷۸ و ۰.۴۳ رادیان)، هندسه‌های بلوری 6_{corr} و 7_{corr} زاویه فضایی بیشتری را نسبت به بلور شماره ۶ و ۷ جدول ۱ نشان می‌دهند. عملکرد هندسه‌های بلوری 6_{corr} و 7_{corr} مزیتی برای استفاده از این بلور در تک رنگ سازهای پرتو ایکس است. توجه داریم که هندسه بلوری 6_{corr} حالت خاصی از هندسه بلوری 7_{corr} (موسوم به بلور کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری) است که در آن زاویه کانونی ساز عام مورد نظر ۴۵ درجه است.

در این قسمت قصد داریم ابتدا روش میانبری ویتری - سان را جهت محاسبه زاویه فضایی [۱۲] بررسی کرده و نشان می‌دهیم که برای بعضی از هندسه‌های بلوری جداول ۱ و ۲ پاسخگو نیست. سپس روش آزمون و خطای ایشان را جهت طراحی یک بلور کانونی ساز واقعی، از بیشینه‌سازی زاویه فضایی استخراجی از روش میانبر خود به دست آورده‌اند [۹]، مورد بررسی قرار می‌دهیم. با توجه به شکل ۶، روش میانبری ویتری و سان جهت محاسبه زاویه فضایی در رساله مرجع [۱۲]، با تجزیه المان زاویه فضایی، $d\omega$ ، به دو مؤلفه عمودی و افقی به صورت زیر شروع شده است.

$$d\omega = ds / |PS|^2 = (|PS| d\omega_r |PS| d\omega_v) / |PS|^2 = d\omega_r d\omega_v, \quad (19)$$

که در آن $d\omega$ المان زاویه فضایی در راستای صفحه دایره رولاند در برگیرنده چشمه نقطه‌ای S نسبت به طول المان سطح ds و $d\omega_r$ المان زاویه فضایی در راستای عمود بر آن



شکل ۷. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودارتابع $a_6 \sin^2 \theta_B$ را بر حسب $\sin \theta_B$. (الف) برای زاویه براگ ۴۵ درجه با انتخاب $R'_p = 0.67$ و منحنی‌های $(a) R_p = 0.67$ و $(b) R_p = 0.60$, $(c) R_p = 0.55$, $(d) R_p = 0.50$ و (ب) برای زاویه براگ ۳۰ درجه با $R'_p = 0.50$ و منحنی‌های $(a) R_p = 0.50$ و $(b) R_p = 0.40$, $(c) R_p = 0.37$, $(d) R_p = 0.30$.

که به منظور مقایسه زاویه فضایی بلور کانونی‌ساز خود (بلور شماره ۶ و ۷) با بلور کانونی‌ساز واقعی نویسنده‌ها (هندسه‌های بلوری v_{corr} و e_{corr}) ارائه داده‌اند [۹]، صحیح نیست. ویتری و سان با متناسب گرفتن زاویه فضایی با انتگرالده رابطه (۲۳) یعنی $\omega \propto z_{max} / \sin(\theta_B - x_p)$ و جایگزینی $z_{max} = \pm \sqrt{(\Delta\theta - a_p x_p^2 - a_v x_p^3) / (a_f + a_q x_p)}$ در آن، سعی در بیشینه‌سازی زاویه فضایی به صورت زیر دارند: ابتدا اصرار دارند بر این که شعاع‌های افقی یک بلور کانونی‌ساز عام واقعی می‌بایست یوهانسونی باشد، لذا قرار می‌دهند: $a_p = a_v = 0$. در تقریب مرتبه اول در مخرج از جمله $a_q x_p$ صرف نظر کرده‌اند. لذا ω را به صورت $\omega \propto \sqrt{\Delta\theta / a_f \sin^2 \theta_B}$ کاملاً مستقل از x_p در نظر می‌گیرند (یعنی $z_{max} \approx \sqrt{\Delta\theta / a_f}$). جهت بیشینه‌سازی ω کمیت $a_f \sin^2 \theta_B$ را بر حسب متغیر $\sin \theta_B$ بدین صورت کمینه می‌کنند. با انتخاب یک مقدار عددی برای شعاع انحنای قائم صفحه اتمی بلور، R'_p ، نمودار تابع $a_f \sin^2 \theta_B$ را بر حسب $\sin \theta_B$ برای چندین مقدار عددی شعاع انحنای قائم سطح بلور، رسم می‌کنند. نتیجه برای دو زاویه براگ دلخواه ۳۰ و ۴۵ درجه، در شکل ۷ نشان داده شده است. شکل ۷. الف برای زاویه براگ ۴۵ درجه با انتخاب $R'_p = 0.67$ و منحنی‌های $(a) R_p = 0.67$, $(b) R_p = 0.60$, $(c) R_p = 0.55$ و $(d) R_p = 0.50$ ، و شکل ۷. ب برای زاویه براگ ۳۰ درجه با $R'_p = 0.50$ و منحنی‌های $(a) R_p = 0.50$, $(b) R_p = 0.40$, $(c) R_p = 0.37$, $(d) R_p = 0.30$ است.

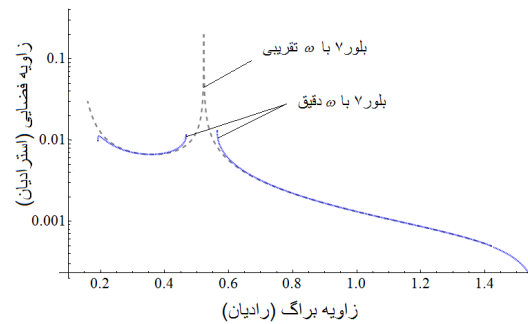
$$\omega = 2 \int_{-\theta_1}^{\theta_1} \frac{z_p \max(x_p)}{\sin(\theta_B - x_p)} dx_p, \quad (23)$$

باز اینجا می‌توان مشاهده کرد که انتگرال حاصل جهت محاسبه ω بیضوی بوده و حل تحلیلی ندارد؛ مگر این که دو باره فرض کنیم که بلور در راستای افقی یوهانسونی باشد، آنگاه با وارد کردن $a_p = a_v = 0$ و استفاده از بسط $\sin(\theta_B - x_p) \approx \sin \theta_B - x_p \cos \theta_B$ جواب تحلیلی به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$\omega = 4 \sqrt{\frac{\Delta\theta}{\cos \theta_B (a_f \cos \theta_B + a_q \sin \theta_B)}} \tanh^{-1} \left(\frac{a_f + a_q x_p}{a_f + a_q \tan \theta_B} \right) \Bigg|_{x_p = -\theta_1}^{x_p = \theta_1}, \quad (24)$$

با به کارگیری ω به دست آمده و تکرار رسم نمودار زاویه فضایی بر حسب تغییرات زاویه براگ برای تمامی هفت هندسه بلوری بررسی شده در بالا (هندسه‌های بلوری شماره ۲، ۴، ۵، ۶، ۷، e_{corr} و v_{corr})، دقیقاً به نمودار شکل ۲ می‌رسیم. لذا مشخص می‌شود که روش میانبری ویتری و سان برای محاسبه زاویه فضایی هندسه‌های بلوری یوهانسونی ($R_1 = 1/2$) کارساز بوده ولی برای دیگر هندسه‌های بلوری یوهانی ($R_1 = 1$) پاسخگو نیست.

روش آزمون و خطای ویتری و سان را جهت محاسبه عددی شعاع‌های قائم یک بلور کانونی‌ساز واقعی از مرجع [۹] مورد بررسی قرار می‌دهیم و نشان می‌دهیم که هر چند ویتری و سان با این روش طراحی توانسته‌اند به صورت عددی به هندسه بلوری کانونی‌ساز واقعی پسته‌ای-عسکری برسند، ولی نمودارهایی را



شکل ۸. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمایش اغراق آمیز بزرگی زاویه فضایی هندسه بلوری کانونی‌ساز عام ویتری-سان (مورد ۷) از نادیده گرفتن جمله $a_q x_p$ ناشی شده است؛ زیرا جمله اصلاحی نویسندگان در ضریب a_q نهفته است.

نمودار مربوط به هندسه‌های بلوری فوق را اینجا نشان نمی‌دهیم. اما هندسه بلوری کانونی‌ساز عام ویتری-سان (بلور شماره ۷ و نیز ۶ جدول ۱ تحت تأثیر این تقریب قرار می‌گیرند. در شکل ۸ نتیجه برای هندسه بلوری فوق برای زاویه براگ ۲۵ درجه و با به کارگیری زاویه فضایی دقیق به دست آمده در رابطه (۱۸) و تقریبی رابطه (۲۶) رسم و نشان داده شده است. با مقایسه دو نمودار مشاهده می‌شود که استفاده از تقریب $z \approx \pm \sqrt{\Delta\theta/a_q}$ در محاسبه زاویه فضایی، منجر به نمایش ناصحیح قله منحنی زاویه فضایی می‌شود و طوری استنباط می‌شود که هندسه بلوری کانونی‌ساز عام معرفی شده توسط ویتری-سان در زاویه براگ ۲۵ درجه، زاویه فضایی بیشینه دارد در حالی که چنین نیست. زاویه فضایی تقریبی بالا از صرف نظر کردن جمله $a_q x_p$ در مرحله قبل از انتگرال‌گیری در مخرج کسر $z \approx \pm \sqrt{\Delta\theta/a_q}$ به دست آمد و چون جمله اصلاحی نویسندگان، $(1-R_q)/2R_q$ در ضریب a_q رابطه (۱۶) نهفته است، لذا نادیده گرفتن جمله $a_q x_p$ منجر به این نمایش اغراق آمیز می‌شود. لذا بیشینه بودن زاویه فضایی هندسه بلوری کانونی‌ساز عام پسته‌ای-عسکری نشان داده شده در شکل ۵ به قوت خود باقی است. لازم به توضیح است که حتی اگر جمله اصلاحی نویسندگان در محاسبات مربوط به زاویه فضایی دقیق رابطه (۱۸) در نظر گرفته نشود آنگاه، قله منحنی زاویه فضایی به طور صحیح نمایش داده نخواهد شد. بنابراین منحنی‌های زاویه فضایی منتشر شده توسط ویتری و سان در مرجع [۹] برای

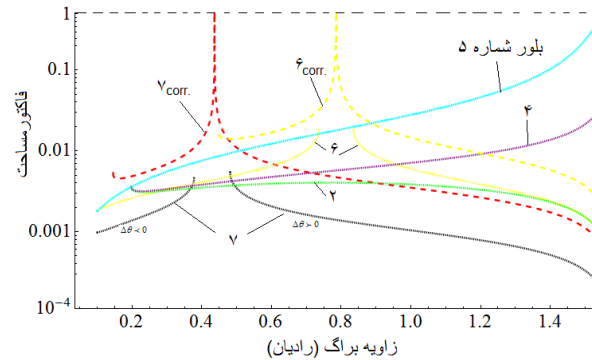
با مراجعه به شکل ۷. الف می‌توان مشاهده کرد که تحت زاویه براگ ۴۵ درجه و $R'_q = 0.67$ ، تابع $a_q \sin^2 \theta_B$ به ازای $R_q = 0.55$ کمینه می‌شود (منحنی c). از شکل ۷. ب تحت زاویه براگ ۳۰ درجه و $R'_q = 0.50$ ، تابع $a_q \sin^2 \theta_B$ به ازای $R_q = 0.37$ کمینه می‌شود (منحنی c). لذا تأیید می‌شود که شعاع‌های انحنای قائم مربوط به هندسه بلوری کانونی‌ساز عام پسته‌ای-عسکری، یعنی $R'_q = \sin \theta_B$ به همراه شعاع‌های انحنای افقی یوهانسونی آن، $R_1 = R'_q/2 = 1/2$ ، در واقع حالت کلی از یک سیستم کانونی‌ساز واقعی بر حسب زاویه براگ مورد نظر با بیشینه زاویه فضایی است که ویتری و سان در محاسبات خود با آن مواجه شده‌اند. اطلاق کلمه عام برای هندسه بلوری کانونی‌ساز فوق به جهت استخراج و نمایش شعاع‌های آن بر حسب یک زاویه براگ کانونی‌سازی دلخواه می‌باشد. اجازه بدهید تقریب $z_{\max} \approx \sqrt{\Delta\theta/a_q}$ ویتری را در انتگرال رابطه (۱۵) جهت محاسبه زاویه فضایی وارد کنیم:

$$\omega = \int_{x_p \min = -0.1}^{x_p \max = 0.1} \int_{z_p \min = -\sqrt{\Delta\theta/a_q}}^{z_p \max = \sqrt{\Delta\theta/a_q}} \left(K_1 x_p^2 + K_2 x_p^2 + K_3 x_p + K_4 z_p^2 + K_5 x_p z_p^2 + K_6 \right) dz_p dx_p, \quad (25)$$

که جواب ساده‌ای به صورت زیر دارد:

$$\omega = \sqrt{\Delta\theta/a_q} (2K_1/5 + K_2/750 + 2\Delta\theta K_4/15a_q), \quad (26)$$

با تکرار رسم نمودارهای شکل ۵، مشاهده شد که هندسه‌های بلوری ۲، ۴ و ۵ تحت تأثیر این تقریب قرار نمی‌گیرند، لذا ما



شکل ۹. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار ضریب مساحت بر حسب تغییرات زاویه براگ (رادیان) برای هندسه‌های بلوری ۲، ۴، ۵، ۶، و ۷ جدول ۱ و بلورهای شماره ۶_{corr.}، ۷_{corr.}، ۸_{corr.}، ۹_{corr.} جدول ۲، با زوایای کانونی‌سازی به ترتیب ۴۵ و ۲۵ درجه (به ترتیب ۰٫۷۸ و ۰٫۴۳ رادیان) برای بلورهای ۶، ۷ و ۶_{corr.}، ۷_{corr.}.

بلوری محاسبه کرده و مورد مقایسه قرار داد.

$$A = \int ds = \int_{x_p \min}^{x_p \max} \int_{z_p(x_p) \min}^{z_p(x_p) \max} \left[1 + x_p^2 / R_1^2 + z_p^2 / R_2^2 \right]^{1/2} dz_p dx_p, \quad (27)$$

برای این که بتوان انتگرال‌گیری را به صورت تحلیلی انجام داد، ابتدا انتگرالده را حول نقطه مرکز تقارن بلور، $M(0, R_1, 0)$ ، تا مرتبه سوم دقت بسط تیلور می‌دهیم. با انتگرال‌گیری در بازه $-0.1 \leq x_p \leq 0.1$ و $z_p(x_p) = \pm \left[\Delta\theta / (a_2 + a_4 x_p) \right]^{1/2}$ به جواب زیر می‌رسیم:

$$A = \left[\frac{2\Delta\theta \left[\lambda a_2^2 / R_1^2 - 2a_2 a_4 x_p / R_1^2 + a_4^2 \left(30 + 3x_p^2 / R_1^2 - 5\Delta\theta / (R_1^2 a_2 + R_2^2 a_4 x_p) \right) \right]}{15a_4^2 \left[\Delta\theta / (a_2 + a_4 x_p) \right]^{1/2}} \right]_{x_p = -0.1}^{x_p = 0.1}, \quad (28)$$

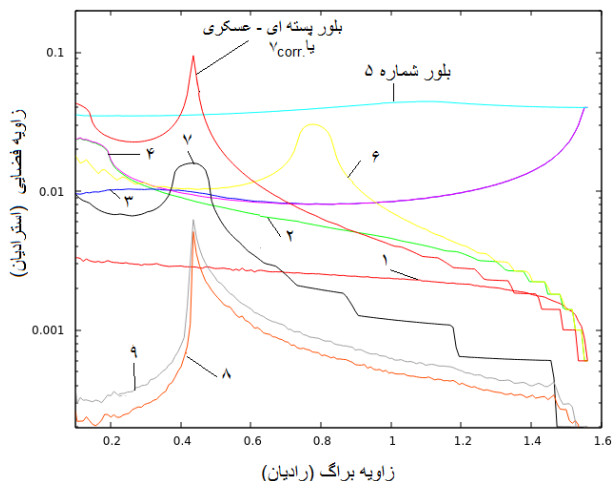
در مورد ضریب مساحت و زاویه فضایی مربوط به دیگر هندسه‌های بلوری که در آن $a_2 \neq a_4 \neq 0$ (موارد ۱، ۳، ۸ و ۹ جدول ۱ و ۸_{corr.}، ۹_{corr.} جدول ۲)، به دست آوریم، الگوریتمی را جهت مطالعه خصوصیات بلوری فوق ارائه می‌دهیم. یک بلور مربعی شکل به ابعاد 0.2×0.2 در مختصات بهنجارش شده در نظر می‌گیریم. برای $-0.1 \leq x_p, z_p \leq 0.1$ و یک زاویه براگ مشخص، تعداد نقاط $P(x_p, z_p)$ موجود در محدوده ناحیه مؤثر پراکنندگی را، با این قصد که آیا شرط $10^{-4} \leq \Delta\theta(x_p, z_p) \leq 10^{-4} \text{ rad}$ برقرار است یا نه، محاسبه می‌کنیم. سپس نسبت تعداد این نقاط را به تعداد نقاط کل سطح بلور دست می‌آوریم. با تغییر زاویه براگ، الگوریتم را تکرار

هندسه‌های بلوری کانونی‌ساز ویتیری-سان و کانونی‌ساز واقعی به دست آمده از روش آزمون و خطا در دو زاویه براگ ۳۰ و ۴۵ درجه به طور صحیح نمایش داده نشده‌اند.

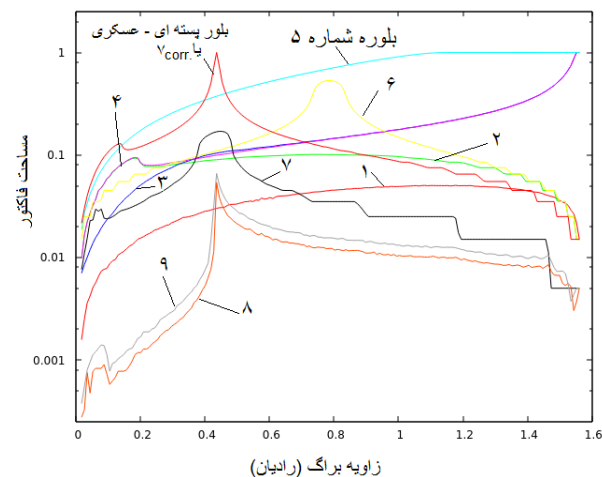
پارامتر بعدی که مورد مطالعه قرار می‌دهیم، ضریب مساحت روی سطح بلور است و به صورت نسبت مساحتی از ناحیه مؤثر پراکنندگی سطح بلوری که در پراش پرتو ایکس شرکت می‌کند به کل مساحت سطح بلور تعریف می‌شود و متناسب با زاویه فضایی جمع کنندگی بلور است [۱ و ۱۲]. از رابطه (۳) می‌توان ضریب مساحت را به صورت زیر برای چندین هندسه

در شکل ۹ نمودار ضریب مساحت بر حسب تغییرات زاویه براگ (رادیان) برای تمامی هفت هندسه بلوری بررسی شده در شکل ۵، (هندسه‌های بلوری شماره ۲، ۴، ۵، ۶، ۷، ۸_{corr.} و ۹_{corr.})، رسم و نمایش داده شده‌اند. با مراجعه به شکل فوق مشخص می‌شود که برای هندسه بلوری کانونی‌ساز عام پسته‌ای-عسکری در زاویه براگ مورد نظر ۲۵ درجه (۰٫۴۳ رادیان)، مقدار ضریب مساحت یک دارد و این بدان معنی است که در زاویه براگ ۲۵ درجه، تمام سطح هندسه بلوری فوق در پراش پرتو ایکس شرکت می‌کند. از نمودارها متناسب بودن ضریب مساحت با زاویه فضایی محرز است.

با توجه به این که از روش تحلیلی بالا نمی‌توانیم اطلاعاتی



شکل ۱۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار زاویه فضایی (استرادیان) بر حسب تغییرات زاویه براگ (رادیان) برای تمام نه هندسه بلوری جدول ۱ و بلور کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری.

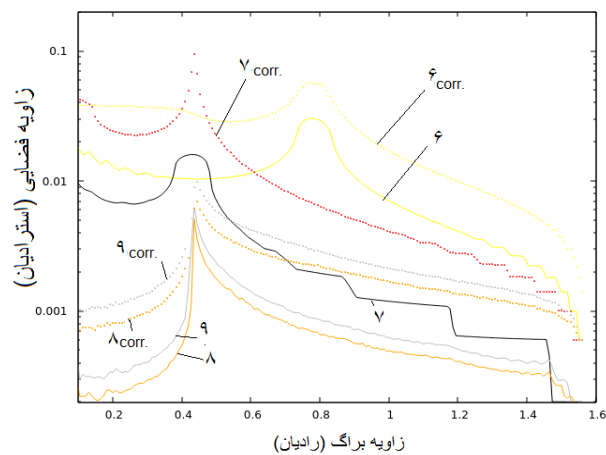


شکل ۱۰. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار ضریب مساحت بر حسب تغییرات زاویه براگ (رادیان) برای تمام نه هندسه بلوری جدول ۱ به همراه هندسه بلوری کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری (یا $V_{corr. 2}$ جدول ۲). برای موارد بلوری ۷، ۸، ۹، ۱۰ و بلور کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری زاویه کانونی براگ برابر ۲۵ درجه (۰/۴۳) رادیان فرض شده است.

و با هم مقایسه شده‌اند.

شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نشان می‌دهند که ضریب مساحت و زاویه فضایی هندسه یوهان (مورد ۱) ضعیف‌تر از هندسه یوهانسون (مورد ۲) است. هندسه‌های بلوری کروی (مورد ۳) و یوهانسون کروی (مورد ۴) ضریب مساحت و زاویه فضایی تقریباً مشابهی دارند و در زاویه براگ ۹۰ درجه بیشینه هستند. هندسه بلوری ویتری (مورد ۵) در گستره وسیعی از زوایای براگ، ضریب مساحت و زاویه فضایی بزرگ‌تری را فراهم می‌کند. ضریب مساحت و زاویه فضایی مربوط به هندسه بلوری کانونی ساز ۴۵ درجه و کانونی ساز عام (موارد ۶ و ۷) به ترتیب برای زوایای براگ ۴۵ و ۲۵ درجه، بهتر از موارد بلوری ۱-۴ جدول ۱ بوده و ضعیف‌تر از مورد ۵ هستند. برای هندسه بلوری کانونی ساز برمن و یوهان (موارد ۸ و ۹ از جدول ۱) ضریب مساحت و زاویه فضایی ضعیف‌تر از سایر هندسه‌های بلوری است، اما هنگامی که $\theta_B \rightarrow 25^\circ$ ، نسبتاً شرایط بهتری را نسبت به هندسه یوهان (مورد ۱) ارائه می‌دهد. این نمودار دو باره تأیید می‌کند که هندسه بلوری کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری نسبت به بقیه نه هندسه بلوری جدول ۱ بیشینه ضریب

می‌کنیم. در شکل ۱۰ نمودار ضریب مساحت بر حسب تغییرات زاویه براگ برای تمام هندسه‌های بلوری جدول ۱ به همراه هندسه بلوری کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری رسم و مقایسه شده است. برای موارد بلوری ۷، ۸، ۹، ۱۰ و بلور کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری زاویه کانونی براگ برابر ۲۵ درجه (۰/۴۳ رادیان) فرض شده است. جهت به دست آوردن نمودار زاویه فضایی، با توجه به شکل ۱. ب فرض می‌کنیم که ناحیه مؤثر پراکنندگی سطح بلوری حول نقطه مرکز تقارن بلور، M ، زاویه فضایی ω را از چشمه نقطه‌ای S در برمی‌گیرد. برای بلور مربعی شکل به ابعاد 0.2×0.2 در مختصات بهنجارش، مساحت ناحیه مؤثر در راستای عمود بر امتداد SM برابر است با: $0.2A \sin \theta_B$ را که در آن A ضریب مساحت به دست آمده از الگوریتم بالا است. بنابراین برای زاویه فضایی بلور خواهیم داشت: $\omega = 0.4A \sin \theta_B / \overline{SM}^2$. نهایتاً با جایگذاری $\overline{SM} = R'_1 \sin \theta_B$ و $R'_1 = 1$ ، زاویه فضایی به صورت $\omega = 0.4A / \sin \theta_B$ به دست می‌آید. در شکل ۱۱ نمودار زاویه فضایی بر حسب تغییرات زاویه براگ برای تمام نه هندسه بلوری جدول ۱ و بلور کانونی ساز عام پسته‌ای - عسکری رسم



شکل ۱۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار زاویه فضایی (استرادیان) بر حسب تغییرات زاویه براگ (رادینان) برای هندسه‌های بلوری کانونی ساز (موارد ۶، ۷، ۸ و ۹ جدول ۱) به همراه هندسه‌های بلوری کانونی ساز اصلاحی (موارد ۶ corr.، ۷ corr.، ۸ corr. و ۹ corr. جدول ۲) که با نقطه چین نشان داده شده است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که با هندسه اصلاحی جدید زاویه فضایی به طور قابل توجهی افزایش یافته است.

تفضیل مورد نقد و بررسی قرار گرفت و نشان داده شد که این روش برای بعضی از هندسه‌های بلوری که در سطح افقی بلور یوهانی هستند، پاسخگو نیست. روش آزمون و خطای ویتری و سان جهت طراحی بلور کانونی ساز واقعی با زاویه فضایی بیشینه مورد بازبینی قرار گرفت و مشخص شد که هر چند ویتری و سان با این روش طراحی توانسته‌اند به صورت عددی به هندسه بلوری کانونی ساز واقعی پسته‌ای-عسکری برسند، ولی نمودارهای زاویه فضایی منتشر شده ایشان برای دو هندسه بلوری کانونی ساز ساده و واقعی، به دلیل نادیده گرفتن جمله اصلاحی نویسندگان، نمی‌توانند صحیح باشند. با نوشتن یک الگوریتم جهت محاسبه ضریب مساحت ناحیه مؤثر پراکنندگی و زاویه فضایی سطح بلوری توانستیم هندسه‌های بلوری را که توسط روش تحلیلی قابل پاسخگویی نبودند، مطالعه کنیم و نشان دادیم که برای بقیه هندسه‌های بلوری، نتایج به دست آمده از روش الگوریتم با نتایج حاصل از روش تحلیلی همخوانی کامل دارند. نشان دادیم که در میان تمام هندسه بلوری یک یا دوبار خمیده رایج، ضریب مساحت ناحیه مؤثر پراکنندگی سطح بلوری هندسه کانونی ساز عام پسته‌ای-عسکری در زاویه براگ مورد نظر برابر واحد بوده و نیز زاویه فضایی آن بیشینه است. با اصلاح شعاع‌های قائم بقیه هندسه‌های بلوری کانونی ساز نقطه‌ای، مشخص شد که ضریب مساحت و زاویه فضایی

مساحت و زاویه فضایی در زاویه براگ مورد نظر ۲۵ درجه را دارد. همچنین می‌توان مشاهده کرد که بین مقدار ضریب مساحت و زاویه فضایی نشان داده شده از روش تحلیلی در شکل‌های ۵ و ۹ و روش الگوریتم در شکل‌های ۱۰ و ۱۱، توافق خوبی برای هفت هندسه بلوری یوهانسونی نشان داده شده در نمودارها وجود دارد. از مراجع [۱۱ و ۲۸] شعاع‌های قائم هندسه‌های بلوری کانونی ساز نقطه‌ای شماره‌های ۶، ۷، ۸ و ۹ جدول ۱ با شعاع‌های قائم نویسندگان اصلاح شده و در جدول ۲ با شماره‌های ۶ corr.، ۷ corr.، ۸ corr. و ۹ corr. مشخص شده‌اند. در شکل ۱۲ نمودار زاویه فضایی مربوط به هندسه‌های بلوری اصلاحی به همراه هندسه‌های بلوری شماره‌های ۶، ۷، ۸ و ۹ جدول ۱ رسم و نشان داده شده است که در آن نقطه چین مربوط به هندسه‌های اصلاحی است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که زاویه فضایی با هندسه اصلاحی جدید به طور قابل توجهی افزایش یافته است.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله یک رابطه عمومی دقیق‌تر برای محاسبه زاویه فضایی جمع کنندگی روی سطح بعضی هندسه‌های بلوری به دست آورده شد و با نتایج روابط متناظر قبلی مورد مقایسه قرار گرفت. روش میانبر ویتری و سان برای محاسبه زاویه فضایی به

مربوطه در هندسه‌های بلوری اصلاحی به طور قابل توجهی

افزایش می‌یابد.

مراجع

1. D B Wittry and S. Sun, *J. Appl. Phys.* **67** (1990) 1633.
2. D B Wittry and S. Sun, *J. Appl. Phys.* **68** (1990) 387.
۳. م هـ ملکی، م امیرحمزه تفرشی، ر امرالهی و س پ عباسی، *کنفرانس فیزیک ایران (دانشگاه لرستان) (۱۳۸۴)*.
۴. ع حسین زاده، غ اطاعتی، ن وثوقی، بیست و یکمین *کنفرانس هسته‌ای ایران (دانشگاه اصفهان) ۱ (۱۳۹۴)*.
۵. ا غلام پوراآزیر، س امیری، ح خسروآبادی، ج رحیقی و م لامعی رشتی، *مجله پژوهش فیزیک ایران ۱۵، ۲ (۱۳۹۴)* ۱۹۷.
5. A Gholampour Azhir, S Amiri, H Khosroabadi, J Rahighi, and M Lamehi Rachti, *Iranian J. Phys. Res.* **15**, 2, 59 (2015) 197.
6. D B Wittry and W Z Chang, *J. Appl. Phys.*, **72** (1992) 3440.
7. D B Wittry and N C Barbi, *Microsc. Microanal* **7** (2001) 124.
8. W Z Chang and D B Wittry, *J. Appl. Phys.* **74** (1993) 2999.
9. D B Wittry and S Sun, *J. Appl. Phys.* **71** (1992) 564.
10. S J Pestehe and G Askari, *J. Opt. Soc. Am. A* **29** (2012) 68.
11. S J Pestehe and G Askari, *J. Appl. Cryst.* **45** (2012) 890.
12. S Sun, *University of Southern California, PhD thesis* (1992).
13. S Seshadri, *University of Southern California, PhD thesis* (1998).
14. D B Wittry and D M Golijanin, *J. Appl. Phys. Lett.* **52** (1988) 1381.
15. D M Golijanin and D B Wittry, "Microbeam Analysis", San Francisco Press, San Francisco (1988) 397.
16. D B Wittry and S Sun, *J. Appl. Phys.* **69** (1991) 3886.
17. D B Wittry, W Z Chang, and L RY, *J. Appl. Phys.* **74** (1993) 3534.
18. W Z Chang, *University of Southern California, PhD Thesis* (1992).
19. Z Chen, *University of Southern California, PhD Thesis* (1997).
۲۰. غ عسکری و س ج پسته‌ای، *هفدهمین گردهمایی فیزیک*
- ماده چگال تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، خرداد (۱۳۹۰)، ۲۲۵.
۲۱. غ عسکری و س ج پسته‌ای، پنجمین همایش ملی فیزیک دانشگاه پیام نور تبریز، مهر (۱۳۹۰) ۱۶۸.
۲۲. س ج پسته‌ای و غ عسکری، پنجمین همایش ملی فیزیک دانشگاه پیام نور تبریز مهر (۱۳۹۰) ۱۸۰.
۲۳. غ عسکری، س ج پسته‌ای و ع راستکار ابراهیم زاده، پنجمین همایش ملی گوه‌شناسی و بلورشناسی ایران، زنجان (۱۳۹۷).
۲۴. س ج پسته‌ای و غ عسکری، پنجمین همایش ملی فیزیک، دانشگاه پیام نور تبریز، مهر (۱۳۹۰) ۱۷۴.
۲۵. س ج پسته‌ای و غ عسکری، هفدهمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران، تبریز، بهمن (۱۳۹۰) ۳۹۱.
۲۶. غ عسکری و س ج پسته‌ای، پنجمین همایش ملی فیزیک، دانشگاه پیام نور تبریز، مهر (۱۳۹۰) ۸۳۶.
۲۷. س ج پسته‌ای و غ عسکری، *کنفرانس فیزیک ایران*، دانشگاه یزد، شهریور (۱۳۹۱) ۲۶۹۰.
28. G Askari, S J Pestehe, and A Rastkar Ebrahimzadeh, *J. Appl. Cryst.* **50** (2017) 1.
۲۹. ع راستکار ابراهیم زاده، غ عسکری و س ج پسته‌ای، *انجمن همایش ملی گوه‌شناسی و بلورشناسی ایران*، زنجان (۱۳۹۷).
۳۰. س ج پسته‌ای، غ عسکری و ع راستکار ابراهیم زاده، پنجمین همایش ملی گوه‌شناسی و بلورشناسی ایران، زنجان (۱۳۹۷).
۳۱. غ عسکری، س ج پسته‌ای و ع راستکار ابراهیم زاده، پنجمین همایش ملی گوه‌شناسی و بلورشناسی ایران، زنجان (۱۳۹۷).