

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.73

СПЕКТРОМЕТР СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ДИФРАКЦИОННОЙ ФОКУСИРОВКИ РАСХОДЯЩЕГОСЯ ПУЧКА, СФОРМИРОВАННОГО СОСТАВНОЙ ПРЕЛОМЛЯЮЩЕЙ ЛИНЗОЙ

© 2018 г. В. Г. Кон^{a, b}, И. А. Смирнова^{c, *}, И. И. Снигирева^d, А. А. Снигирев^e

^a Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

^b Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия

^c Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

^d Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

^e Балтийский федеральный университет, Калининград, Россия

* e-mail: irina@issp.ac.ru

Поступила в редакцию 27.03.2017 г.

Обсуждаются результаты первой экспериментальной реализации спектрометра нового типа, использующего эффект дифракционной фокусировки рентгеновского излучения монокристаллом в форме пластины. Вторичный источник излучения с относительно высокой угловой расходимостью и малыми размерами получен в фокусе составной преломляющей линзы, имеющей 50 двояковогнутых элементов из Ве с радиусом кривизны 50 мкм. Кристалл-спектрометр из Si вырезан в форме клина с переменной толщиной в направлении, перпендикулярном плоскости дифракции. Использовалось отражение 111 при энергии 8.3 и 12 кэВ. Для моделирования эксперимента разработана компьютерная программа, которая впервые аккуратно учитывает фокусировку излучения линзой и последующую дифракцию излучения в кристалле. Расчетная кривая для монохроматического пучка позволила с высокой точностью определить спектр монохроматора из экспериментальных данных для полихроматического пучка. Показано, что разрешение спектрометра увеличивается при увеличении расстояния от составной преломляющей линзы до кристалла-спектрометра.

DOI: 10.1134/S0023476118040112

ВВЕДЕНИЕ

Дифракцию рентгеновских лучей в монокристалле в геометрии Лауэ, когда отраженный пучок проходит через кристалл в форме пластины, впервые экспериментально исследовали в 1959 г. Като и Ланг [1]. Получение интерференционных изображений при когерентном освещении стало возможным благодаря использованию узкой щели перед кристаллом, которая играла роль вторичного источника излучения с малым поперечным сечением. Для теоретического описания этого эксперимента Като разработал вариант теории в приближении сферической падающей волны [2, 3]. В этой теории предполагалось, что дифракционная картина на выходной поверхности кристалла формируется в треугольнике Бормана, который образуют направления падающего и отраженного пучков, и затем переносится без изменения в плоскость регистрации. Метод и теория получили название рентгеновской секционной топографии и широко используются в течение многих лет для исследования качества монокристаллов.

В 1977 г. Афанасьев и Кон [4] предложили обобщенную теорию дифракции сферической волны, явно учитывающую расстояние от источника до детектора. Одним из основных результатов этой работы было предсказание дифракционной фокусировки расходящегося излучения кристаллом в форме пластины. Этот эффект более подробно рассмотрен в [5]. Экспериментально он был проверен в [6–9]. В этих работах использовали кристалл в форме клина, т.е. с переменной толщиной в направлении, перпендикулярном плоскости дифракции. Кроме того, в тонкой части клина была обнаружена необычная интерференционная картина, получившая название “аномального пенделлзунг-эффекта”.

Через 20 лет в [10] теория была сформулирована на основе пропагаторов Френеля и рассмотрен случай сильной анизотропии, когда полихроматическая фокусировка реализуется при разных расстояниях источник–кристалл и кристалл–детектор. В [11] полосы “аномального пенделлзунг-эффекта” были использованы для определения локальной толщины образцов.

В теоретической работе [12] на основе эффекта дифракционной фокусировки предложен спектрометр нового типа, который способен регистрировать весь энергетический спектр излучения сразу, т.е. за одно измерение, причем с высокой точностью. Такой спектрометр предложен для измерения спектра одного импульса рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL), ширина которого $\Delta E/E = 10^{-3}$, с энергетическим разрешением $\Delta E/E = 2 \times 10^{-6}$. Для работы спектрометра необходимо обеспечить достаточно высокую расходимость падающего на кристалл излучения.

Идея спектрометра состоит в следующем. Явление дифракционной фокусировки отраженного пучка можно наблюдать только при соблюдении условий полихроматической фокусировки, когда в симметричном случае дифракции расстояния источник—кристалл и кристалл—детектор равны. Если расстояние до кристалла значительно больше, чем расстояние до детектора, то разные монохроматические компоненты фокусируются с разным смещением на детекторе. Это смещение определяется тем, что кристалл выбирает из расходящегося излучения только ту часть, которая удовлетворяет условию Брэгга, а угол Брэгга зависит от энергии.

Разрешение такого спектрометра зависит от того, насколько хорошо будет сфокусирована монохроматическая компонента за счет явления дифракционной фокусировки. Кроме того, размер пучка в фокусе зависит не только от свойств кристалла, но и от размера источника, потому что кристалл не меняет размер источника в фокусе. То есть для спектрометра необходим источник с высокой угловой расходимостью и малыми размерами. Но ни источники XFEL, ни источники синхротронного излучения (СИ) такими свойствами не обладают. Они имеют относительно большие размеры и малую угловую расходимость.

Для решения данной проблемы предложено использовать вторичный источник излучения, который формируется в фокусе составной преломляющей линзы [13, 14]. Надо обеспечить большое расстояние от линзы до кристалла и малое расстояние до детектора, что тоже является проблемой. Если это условие не выполняется, то разрешение спектрометра будет невысоким.

Использовать спектрометр нового типа на источнике XFEL пока не представляется возможным. По этой причине первое экспериментальное тестирование такого спектрометра выполнено на источнике СИ третьего поколения, результаты представлены в настоящей работе. Как известно, СИ имеет очень широкий спектр, но на многих станциях стационарно установлены монохроматоры, резко ограничивающие спектр излучения. Убрать или заменить монохроматор

невозможно. Поэтому в работе был измерен относительно узкий спектр, который формируется монохроматором.

Преимуществом спектрометра нового типа для источников СИ является все та же возможность регистрации всего спектра за одно измерение с короткой экспозицией, стандартные спектрометры измеряют точку за точкой в течение большого промежутка времени. Спектр можно формировать при поглощении или рассеянии излучения различными материалами, например, вблизи скачков поглощения (методы EXAFS и XANES). Малое время измерения дает возможность исследования того, как меняются спектры при кратковременном воздействии на образец.

В настоящей работе представлены экспериментальные результаты в виде секционных топограмм, полученных от вторичного источника излучения, сформированного составной преломляющей линзой. Для описания эксперимента разработана компьютерная программа, которая впервые явным образом учитывает фокусировку излучения с помощью составной преломляющей линзы и последующую дифракцию излучения в кристалле. Численное моделирование эксперимента для монохроматического пучка позволило получить более детальный, чем при регистрации в ходе прямых измерений, спектр монохроматора.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Эксперимент выполнен на станции ID06 источника СИ третьего поколения в Европейском центре синхротронного излучения (ESRF, Гренобль, Франция). Схема эксперимента показана на рис. 1. Источник излучения имел эффективные размеры 30 мкм (вертикальный) и 900 мкм (поперечный). Первичная щель была установлена на расстоянии 27 м от источника и имела переменный горизонтальный и фиксированный вертикальный размер 0.8 мм. Двухкристальный монохроматор Si(111) с вертикальной плоскостью дифракции находился на расстоянии 31 м от источника.

Поворотом монохроматора можно было выделить из широкого спектра СИ узкий спектр вблизи заданной энергии. Использовали энергию 8.3 и 12 кэВ. Кристалл-спектрометр из Si вырезан в форме клина с переменной толщиной по вертикальной оси, плоскость дифракции была горизонтальной, отражение 111. Для формирования вторичного источника использовали составную преломляющую линзу, установленную на расстоянии 56 м от источника. Линза имела 50 двояковогнутых элементов из Ве с радиусом кривизны 50 мкм, диаметром апертуры 450 мкм и толщиной 1.05 мм [15].

Для указанных значений энергии фокусное расстояние линзы Z_f , отсчитываемое от ее середины и вычисленное по рекуррентным формулам [16, 17], равно 10.9 и 22.1 см соответственно. Расчет по формуле тонкой линзы $R/(2N\delta)$, где R – радиус линзы, N – количество ее элементов, $\delta = 1 - n$, n – реальная часть коэффициента преломления, дает значения 10.1 и 21.2 см, которые не сильно отличаются от результатов, полученных при более точных расчетах. Диаметр эффективной апертуры равен 158 и 225 мкм соответственно, что меньше геометрической апертуры из-за поглощения излучения на краях апертуры линзы, причем поглощение более существенно при меньшей энергии.

Кристалл-спектрометр находился на разных расстояниях от центра линзы, наибольшее из которых равно 147 см. Для регистрации интенсивности отраженного пучка использовали двухкоординатный CCD-детектор, дающий двумерную числовую матрицу с эффективным линейным размером пикселя 0.645 мкм. Кристалл располагался близко к детектору таким образом, что расстояние не превышало 3 см.

В первом эксперименте использовали энергию 8.3 кэВ, дифракционные картины записывали в 50 точках по шкале энергии при повороте монохроматора каждый раз на такой угол, чтобы энергия увеличивалась на 1 эВ. Оказалось, что сдвиг на 1 эВ целиком смещал дифракционную картину в неподвижном детекторе на расстоянии $x_{d\omega} = 11.7$ мкм (18 пикселей). Для данной энергии угол Брэгга $\theta_B = 13.74^\circ$. Можно оценить разность расстояний L_0 от вторичного источника в фокусе линзы до кристалла и L_1 от кристалла до детектора по формуле [10]:

$$\Delta L = L_0 - L_1 = \frac{x_{d\omega}}{\text{tg}(\theta_B)(\Delta E/E)}. \quad (1)$$

Подставляя указанные значения, получаем $\Delta L = 39.8$ см. Это находится в согласии с расстояниями, при которых был выполнен эксперимент.

Интересно оценить энергетический диапазон δE , который на таком расстоянии способна зафиксировать составная преломляющая линза. Для этого диаметр эффективной апертуры нужно разделить на фокусное расстояние, чтобы получить угловую апертуру $\delta\theta$. В рассматриваемом случае $\delta\theta = 58 \times 10^{-4}/10.9 = 1.45 \times 10^{-3}$ рад. Соответственно $\delta E = E\delta\theta/\text{tg}\theta_B = 49.4$ эВ. Это значение тоже находится в соответствии с экспериментом. Для измерения большего интервала значений энергии нужна линза с более коротким фокусом.

При энергии 12 кэВ измерения проводили на разных расстояниях, но без сканирования по энергии. На рис. 2 показаны две экспериментальные топограммы (дифракционные картины) кли-

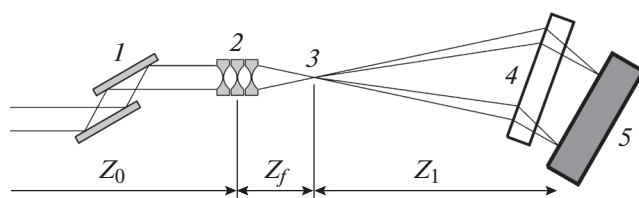


Рис. 1. Схема эксперимента: пучок излучения попадает на монохроматор 1 с вертикальной плоскостью дифракции и затем на составную преломляющую линзу 2, расположенную на расстоянии Z_0 от источника. На фокусном расстоянии Z_f линза формирует вторичный источник 3 расходящегося излучения, которое падает на кристалл-спектрометр 4 с горизонтальной плоскостью дифракции. В кристалле разные монохроматические компоненты дифрагируют под разными углами Брэгга и попадают в детектор 5 в разных его точках. Расстояние от вторичного источника до детектора Z_1 примерно равно расстоянию источник-кристалл.

новидного кристалла из Si при отражении 111 на малом (49 см) и на большом (147 см) расстояниях. Для пересчета вертикальной координаты экспериментальных топограмм в толщину кристалла необходимо знать, при какой толщине t_0 реализуется дифракционная фокусировка излучения. Для этого используем формулу [4, 10]:

$$t_0 = \frac{2|\chi_{rh}|\cos\theta_B}{\sin^2(2\theta_B)} L_r, \quad L_r = L_0 + L_1, \quad (2)$$

из которой следует, что t_0 пропорционально полному расстоянию L_r . Это соответствует эксперименту, так как на топограммах t_0 равно 18.5 мкм для расстояния 49 см и 83.9 мкм для расстояния 147 см. Известно, что эффективность фокусировки растет с ростом толщины кристалла, когда на толщине укладывается много длин экстинкции. Согласно стандартным формулам экстинкционная длина для отражения 111 Si равна $\Lambda = 28.6$ мкм. В первом случае $t_0 < \Lambda$, поэтому эффект фокусировки практически отсутствует. С другой стороны, на топограмме четко видны интерференционные полосы, описываемые теорией Като, т.е. гиперболические полосы, концами обращенные в сторону более толстой части кристалла.

Во втором случае $t_0 \gg \Lambda$, поэтому на топограмме можно заметить фокусировку сферической волны при толщине кристалла около 90 мкм. Хорошо видно, что в этом случае изображение клиновидного кристалла очень сильно размазано вдоль вектора обратной решетки (ось x) по сравнению с первым случаем. Размазывание изображения главным образом связано с конечным спектральным составом излучения, падающего на исследуемый кристалл.

Эффект размазывания изображения ясно показывает, что кристалл работает как спектрометр.

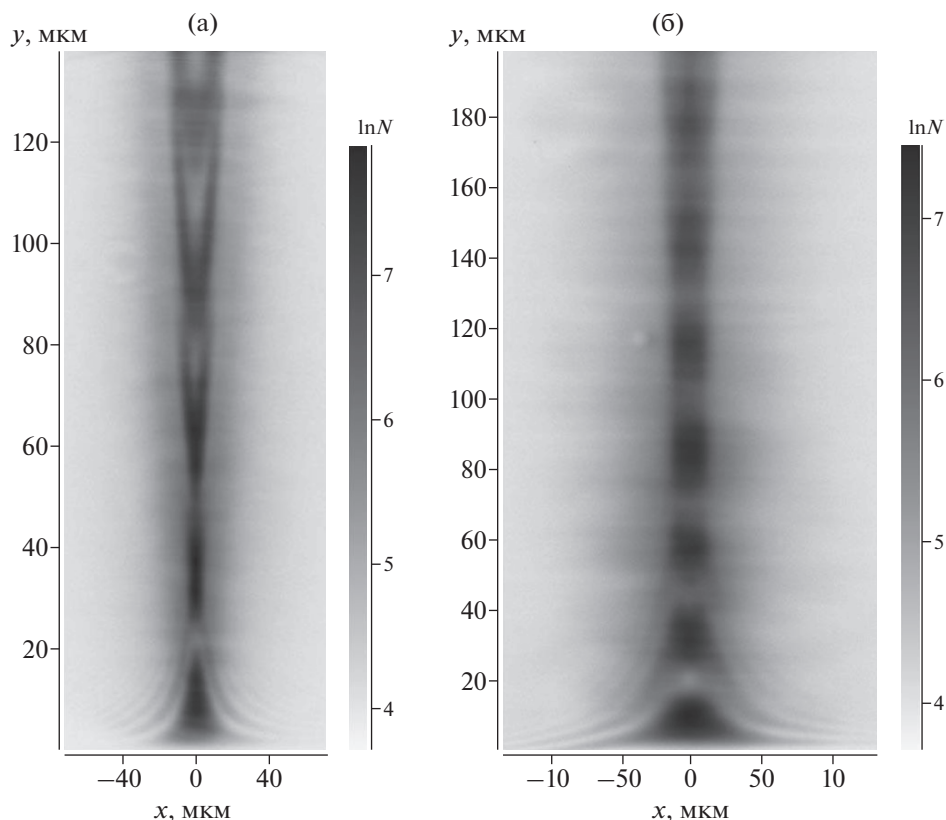


Рис. 2. Экспериментальные топограммы клиновидного кристалла кремния (отражение 111) при расстоянии линза–кристалл 49 (а) и 147 см (б). По оси y указана толщина кристалла. На шкале градаций серого показан логарифм числа импульсов в CCD-детекторе.

При дифракции полихроматического рентгеновского излучения кристалл-монокроматор работает подобно призме, преобразуя расходящийся белый пучок в радугу. Спектральный состав дифрагированной волны можно оценить по формуле Брэгга: $\Delta\theta_B = (\Delta\lambda/\lambda)\text{tg}\theta_B$, приравняв $\Delta\theta_B$ угловому размеру монокроматора относительно источника излучения. В исследуемом случае монокроматор находился на расстоянии 31 м, а вертикальный размер пучка перед монокроматором был равен 0.8 мм. Деля второе значение на первое, получаем $\Delta\theta_B = 2.58 \times 10^{-5}$ рад. Следовательно, относительная ширина спектра излучения после монокроматора равна $\Delta\lambda/\lambda = 1.5 \times 10^{-4}$.

Далее необходимо снова вычислить угловую расходимость излучения по формуле Брэгга, но уже для кристалла-спектрометра. В рассматриваемом случае оба кристалла идентичны, используется одно и то же отражение, поэтому достаточно знать угловой размер монокроматора. Размазывание в пространстве изображения, связанное с конечным спектральным составом излучения, падающего на кристалл-спектрометр, можно оценить по простой формуле $\Delta x = \Delta L \Delta\theta$. В первом случае $\Delta L = 27$ см, следовательно, $\Delta x = 6.9$ мкм, во вто-

ром случае $\Delta L = 125$ см, и $\Delta x = 32.3$ мкм. Таким образом, при большей разности расстояний ΔL размазывание изображения вдоль вектора обратной решетки больше, что повышает чувствительность спектрометра, которая определяется отношением ширины пучка, сфокусированного за счет явления дифракционной фокусировки в случае монохроматического излучения, к величине размазывания изображения в случае спектра реального излучения, падающего на прибор.

ТЕОРИЯ

Как известно, на источниках СИ используют монокроматоры, которые не меняют направление пучка, т.е. пучок отражается дважды в прямом и обратном направлениях. При теоретическом моделировании результатов эксперимента в схеме, показанной на рис. 1, монокроматор можно не учитывать, так как он лишь слегка ограничивает угловую расходимость излучения. Однако если ширина области засветки пучка перед основной преломляющей линзой больше ее эффективной апертуры, то монокроматор никак не влияет на дифракционную картину, формируемую кристаллом.

Рассмотрим отдельную монохроматическую гармонику излучения, которая является когерентной и описывается уравнениями Максвелла. Учитывая, что дифракционная картина зависит только от суммарного расстояния между линзой и детектором, для простоты будем предполагать, что детектор находится сразу за кристаллом. В этом случае амплитуду электрического поля на детекторе можно записать в виде

$$E(x) = \int dx_1 P_C(x - x_1) \times \int dx_2 P(x_1 - x_2, z_1) T(x_2) P(x_2 - x_0, Z_0), \quad (3)$$

где Z_0 – расстояние от точечного источника до линзы, $z_1 = Z_f + Z_1$ – расстояние от линзы до детектора (рис. 1), пропагатор Френеля

$$P(x, z) = (i\lambda z)^{-1/2} \exp\left(i\pi \frac{x^2}{\lambda z}\right) \quad (4)$$

есть компонента сферической волны в направлении x в парааксиальном приближении, пропагатор кристалла

$$P_C(x) = \int \frac{dq}{2\pi} \exp(iqx) P_C(q) \quad (5)$$

есть фурье-образ амплитуды отражения плоской волны $P_C(q)$, направление которой отличается от брэгговского направления на угол $\theta = q/K$, $K = 2\pi/\lambda$. Формулы для расчета функции $P_C(q)$ представлены в [10].

В отличие от задачи [10] в рассматриваемом случае падающая волна модифицируется составной преломляющей линзой. В приближении тонкой линзы она представлена трансмиссионной функцией

$$T(x) = \exp\left(-i\pi \frac{x^2}{\lambda F} [1 - i\gamma]\right), \quad F = \frac{R}{2N\delta}, \quad \gamma = \frac{\beta}{\delta}. \quad (6)$$

Здесь β – мнимая часть комплексного коэффициента преломления $n = 1 - \delta + i\beta$. Влияние размера источника на дифракционную картину учитывается через координату x_0 , которая описывает поперечное смещение точечного источника от оптической оси.

Экспериментально измеряется интенсивность излучения $I(x) = |E(x)|^2$. Для расчета интенсивности по формуле (3) создана компьютерная программа с использованием собственного интерпретируемого языка программирования ACL. Интерпретатор языка ACL – это программа Java, которая свободно распространяется в интернете вместе с описанием самого языка [18]. Программа позволяет вычислить распределение интенсивности при дифракции монохроматического излучения от точечного источника для кристалла любой толщины, а также построить двумерную карту распределения интенсивности для клиновидного кристалла.

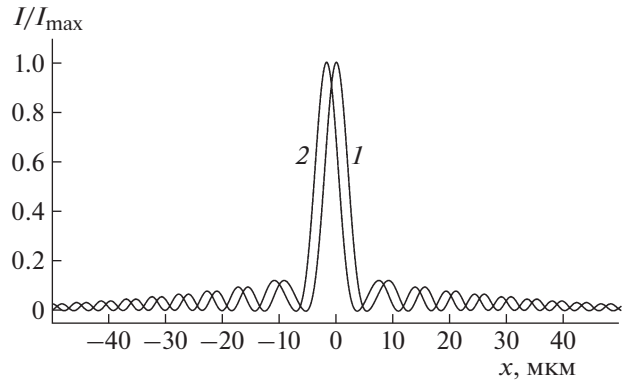


Рис. 3. Теоретические кривые интенсивности дифрагированного излучения для двух координат точечного источника $x_0 = 0$ (1) и 450 мкм (2) и толщины кристалла 98 мкм.

На рис. 3 показаны две кривые распределения интенсивности при указанных выше параметрах, т.е. для составной преломляющей линзы из бериллия с эффективным радиусом кривизны $R_0 = R/N = 1$ мкм, энергия излучения равна 12 кэВ, кристалл Si толщиной 98 мкм, отражение 111, $Z_0 = 5600$ см, $z_1 = 147$ см. Кривые различаются значениями координаты точечного источника $x_0 = 0$ и 450 мкм. Видно, что при сдвиге точечного источника на 450 мкм (половину размера источника в эксперименте) кривая как целое смещается в противоположную сторону на величину -1.75 мкм.

Этот результат показывает, что кристалл реагирует на вторичный источник, расположенный в фокусе линзы. Учитывая известное свойство пропагатора Френеля, что свертка двух пропагаторов на расстояниях Z_f и Z_1 равна пропагатору Френеля на суммарном расстоянии $z_1 = Z_f + Z_1$, этот факт математически можно представить следующим образом:

$$E(x) = \int dx_1 P_C(x - x_1) \int dx_2 P(x_1 - x_2, Z_1) B(x_2, x_0), \quad (7)$$

$$B(x, x_0) = \int dx_1 P(x - x_1, Z_f) T(x_1) P(x_1 - x_0, Z_0). \quad (8)$$

Здесь функция $B(x, x_0)$ описывает поле излучения в фокусе линзы. Подставляя (4) и (6), получаем

$$B(x, x_0) = \frac{A(x, x_0)}{i\lambda [Z_f Z_0]^{1/2}} \times \int dx_1 \exp\left(-i2\pi \left[\frac{(x - x'_0)}{\lambda Z_f} x_1 - \frac{\pi\gamma}{\lambda F} x_1^2\right]\right), \quad (9)$$

где

$$A(x, x_0) = \exp\left(-i\pi \left[\frac{x^2}{\lambda Z_f} + \frac{x_0^2}{\lambda Z_0}\right]\right), \quad (10)$$

$$x'_0 = -x_0 \frac{Z_f}{Z_0}.$$

Здесь использовано соотношение $1/Z_f = 1/F - 1/Z_0$.

Вычисляя интеграл, окончательно получаем

$$B(x, x_0) = \frac{A(x, x_0)}{iC_2} G(x - x'_0, \sigma), \quad (11)$$

где

$$C_2 = \left(\frac{C_1}{1 - C_1} \right)^{1/2}, \quad C_1 = 1 - \frac{F}{Z_0}, \quad \sigma = \frac{1}{C_1} \left(\frac{\lambda F \gamma}{2\pi} \right)^{1/2}, \quad (12)$$

$$G(x, \sigma) = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right).$$

Таким образом, амплитуда зависимости поля излучения в фокусе в горизонтальном направлении пропорциональна функции Гаусса с полушириной $w = 2.355\sigma$. При смещении источника на расстояние x_0 функция Гаусса смещается как целое на расстояние x'_0 .

При точности, соответствующей значению постоянного фазового множителя M , который не влияет на интенсивность, имеем

$$B(x, x_0) = B(x - x'_0, 0)M \exp\left(i\pi \frac{2xx'_0}{\lambda Z_f}\right). \quad (13)$$

Отсюда следует, что поле излучения в фокусе при поперечном сдвиге точечного источника на x_0 не только смещается как целое на расстояние x'_0 , но и получает дополнительный фазовый множитель, который иначе зависит от x . Заметим, что при интегрировании координата x отличается от x'_0 только в пределах дифракционной ширины фокуса w .

Если дифракционная ширина фокуса мала, то фазовый множитель остается почти константой при относительно небольших значениях смещения x_0 , и им можно пренебречь. Соответственно, используя свойство сверток, в (7) сразу получаем, что дифракционная картина как целое сместится на расстояние x'_0 , что и следует из численных расчетов. Однако этот результат не является универсальным. Он справедлив только в условиях достаточно сильной фокусировки пучка линзой.

Аккуратный расчет по программе показывает, что пик дифракционной фокусировки смещается при любом сдвиге источника, и его максимальное значение уменьшается. Если принять высоту пика при нулевом смещении за единицу, то при смещении на 5, 10 и 15 мм высота пика равна 0.95, 0.85 и 0.69 соответственно. Уменьшение высоты пика происходит благодаря наличию фазового множителя в (13), который не играет роли при измерении интенсивности непосредственно в фокусе линзы.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРА МОНОХРОМАТОРА

Известно, что СИ представляет собой набор импульсов весьма малой длительности. Если время измерения значительно превосходит длительность импульса, то можно показать, что фазовые соотношения между различными монохроматическими компонентами излучения теряются. То есть экспериментальная интенсивность полихроматического излучения равна сумме интенсивностей монохроматических гармоник.

При изменении энергии фотонов в небольших пределах дифракционная картина в целом не меняется, изменяется угол Брэгга. Как показано на рис. 3, это приводит к поперечному смещению x_ω дифракционной картины, регистрируемой детектором. Измеряемая экспериментально интенсивность излучения $I_{ep}(x)$ для заданной толщины кристалла представляет собой свертку

$$I_{ep}(x) = \int dx_\omega I_{em}(x - x_\omega) S(x_\omega), \quad (14)$$

где $I_{em}(x)$ — экспериментальная интенсивность монохроматического излучения, $S(x_\omega)$ — спектр излучения, формируемый монохроматором. Интенсивность $I_{em}(x)$, в свою очередь, представляет собой свертку

$$I_{em}(x) = \int dx_0 I_{emp}(x - x'_0) I_s(x'_0), \quad (15)$$

где $I_{emp}(x)$ — интенсивность монохроматического излучения точечного источника, $I_s(x)$ — функция яркости вторичного источника. Непосредственно измеряется только интенсивность $I_{ep}(x)$. С другой стороны, интенсивность $I_{emp}(x)$ может быть вычислена по компьютерной программе. Соответственно можно вычислить интенсивность $I_{em}(x)$ по формуле (15), предполагая, что функция $I_s(x)$ может быть аппроксимирована гауссовой функцией. Полуширина распределения Гаусса равна размеру изображения источника в фокусе.

В [12] предполагалось, что полуширина пика интенсивности, описываемого функцией $I_{em}(x)$, в условиях дифракционной фокусировки весьма мала, а полуширина $S(x_\omega)$, наоборот, велика. Заменяя приближенно $I_{em}(x - x_\omega)$ в (14) дельта-функцией, сразу получаем $S(x) = I_{ep}(x)$. То есть экспериментальная кривая сразу дает спектр с определенной точностью.

В настоящей работе указанное выше условие не выполняется. Монохроматор формирует довольно узкий спектр излучения, ширина которого хоть и превосходит ширину пика $I_{em}(x)$, но не очень сильно. Выберем толщину кристалла $t = 98$ мкм, при которой пик функции $I_{emp}(x)$ имеет минимальную полуширину $T_{emp} = 4.5$ мкм. Соответственно полуширина пика на кривой яркости вторичного источника $I_s(x)$ равна $T_{ss} = 3.5$ мкм,

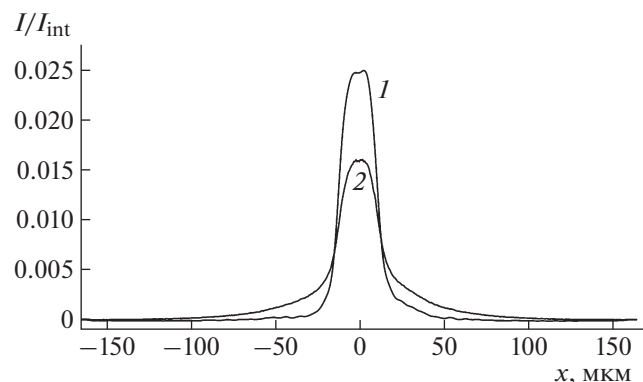


Рис. 4. Спектр монохроматора (1), вычисленный из экспериментальной кривой интенсивности (2) при толщине кристалла 98 мкм. Кривые нормированы таким образом, что интеграл функций равен единице.

т.е. грубая оценка полуширины пика $I_{em}(x)$ может быть такой: $T_{em} = ((T_{emp})^2 + (T_{ss})^2)^{1/2} = 5$ мкм. С другой стороны, как следует из эксперимента, ширина пика $I_{ep}(x)$ для такой толщины кристалла равна $T_{ep} = 25.8$ мкм, что существенно больше.

Поэтому для грубой оценки можно считать, что $S(x) = I_{ep}(x)$, а для получения более точного результата необходимо вычислить свертку (15) и затем вычислить функцию $S(x)$ из уравнения (14) методом двойного преобразования Фурье. На рис. 4 показан спектр монохроматора (т.е. функция $S(x)$), вычисленный таким образом. Спектр нормирован на единичную площадь. На этом же рисунке и при такой же нормировке показана экспериментальная кривая $I_{ep}(x)$. Как следует из рисунка, спектр монохроматора по своей форме похож на кривую брэгговского отражения от двух кристаллов, т.е. имеет вид слегка искаженной на хвостах П-образной функции. Расчет спектра из свертки существенно увеличивает относительную точность определения спектра по сравнению с исходной экспериментальной кривой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально показано, что новый тип спектрометра, предложенный и подробно описанный в [12] для измерения спектра отдельных импульсов рентгеновского лазера на свободных электронах, может быть с успехом использован и на источниках СИ даже в стационарном режиме. Кроме спектра монохроматора, можно изучать изменения спектра излучения в различных материалах (методы EXAFS и XANES) при кратковременном внешнем воздействии на образец.

Развита аккуратная теория такого спектрометра. Показано, что составная рентгеновская линза формирует в своем фокусе вторичный источник

когерентного расходящегося излучения с нужными свойствами. Возможность теоретически рассчитывать интерференционную картину для монохроматического излучения повышает точность определения спектра излучения из экспериментальных данных.

Отметим, что данный спектрометр является относительно простым по конструкции, так как состоит из стандартных элементов: монокристалла кремния, стандартной составной преломляющей линзы и стандартного CCD-детектора, которые широко используются на источниках СИ третьего поколения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (грант 14.Y26.31.0002) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-02-00382).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kato N., Lang A.R. // Acta Cryst. 1959. V. 12. P. 787.
2. Kato N. // Acta Cryst. 1961. V. 14. P. 526.
3. Kato N. // J. Appl. Phys. 1968. V. 39. P. 2225.
4. Афанасьев А.М., Кон В.Г. // ФТТ. 1977. Т. 19. С. 1775.
5. Кон В.Г. // Кристаллография. 1979. Т. 24. Вып. 4. С. 712.
6. Аристов В.В., Половинкина В.И., Шмытько И.М., Шулаков Е.В. // Письма в ЖЭТФ. 1978. Т. 28. С. 6.
7. Aristov V.V., Polovinkina V.I., Afanas'ev A.M., Kohn V.G. // Acta Cryst. A. 1980. V. 36. P. 1002.
8. Aristov V.V., Kohn V.G., Polovinkina V.I., Snigirev A.A. // Phys. Status Solidi. A. 1982. V. 72. P. 483.
9. Козьмик В.Д., Михайлюк И.П. // Письма в ЖЭТФ. 1978. Т. 28. С. 673.
10. Kohn V.G., Snigireva I., Snigirev A. // Phys. Status Solidi. B. 2000. V. 222. P. 407.
11. Шулаков Е.В., Смирнова И.А. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. 2001. № 1. С. 76.
12. Kohn V.G., Gorobtsov O.Y., Vartanyants I.A. // J. Synchr. Rad. 2013. V. 20. P. 258.
13. Snigirev A., Kohn V., Snigireva I., Lengeler B. // Nature. 1996. V. 384. № 6604. P. 49.
14. Lengeler B., Schroer C., Tummler J. et al. // J. Synchr. Rad. 1999. V. 6. P. 1153.
15. http://www.physik.rwth-aachen.de/fileadmin/user_upload/www_physik/Institute/Inst_2B/Gruppe_Lengeler/Praesentation_in_grenoble_july2010.pdf
16. Кон В.Г. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. 2009. № 5. С. 32.
17. Kohn V.G. // J. Synchr. Rad. 2012. V. 19. P. 84.
18. <http://kohnvict.ucoz.ru/acl/acl.htm>