

## Моделирование дифракционной фокусировки в одном и двух кристаллах в геометрии Лауэ

В. Г. Кон<sup>1</sup>, И. А. Смирнова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия

<sup>2</sup> Институт Физики Твердого Тела РАН, Черноголовка, Россия

e-mail: [irina@issp.ac.ru](mailto:irina@issp.ac.ru)

Эффект дифракционной фокусировки сферической рентгеновской волны плоскопараллельным кристаллом в геометрии Лауэ был предсказан Афанасьевым и Коном [1] в 1977 году, и вскоре обнаружен экспериментально в работах [2-5]. В 2013 году была предложена схема спектрометра для измерения спектра одного импульса лазера на свободных электронах (ЛСЭ) [6] на основе эффекта дифракционной фокусировки. Заметим, что другой эффект полихроматической фокусировки [7-9] можно наблюдать в однородно изогнутых кристаллах.

Эффект дифракционной фокусировки реализуется только для расходящегося падающего излучения и состоит в том, что на границе воздух-кристалл половина общего потока энергии меняет направление на противоположное, аналогично линзе Пендри в метаматериалах [10]. Важно, что в случае рентгеновских лучей это происходит только для половины общего потока излучения и только вблизи малой окрестности угла Брэгга (угловой диапазон динамической дифракции). В связи с этим получается относительно большая ширина пучка в фокусе и малые величины пиковой интенсивности. И все же возможно получить пучок шириной в несколько микрон.

При динамической дифракции сферической рентгеновской волны имеет место также другой эффект фокусировки, а именно, в случае последовательного отражения пучка двумя кристаллами в геометрии прохождения при малом (нулевом) расстоянии между источником и плоскостью регистрации [11]. В экспериментах пучок ограничивался узкой щелью, установленной перед первым кристаллом [12]. В результате дифракции в первом кристалле пучок сильно расширяется. При дифракции во втором кристалле такой же толщины  $t_2 = t_1$ , часть пучка вместо расширения испытывает дифракционное сжатие и восстанавливает изображение исходной щели с точностью  $\Delta x = (A/\pi)\text{tg}\theta$ , где  $A$  – экстинкционная длина для данного отражения.

В данной работе представлены новые результаты изучения эффекта фокусировки одним и двумя кристаллами посредством более детального компьютерного моделирования. Показано, что случай нулевого расстояния может быть реализован с использованием составной преломляющей линзы (СПЛ), когда детектор размещен на фокусном расстоянии СПЛ, и система из двух кристаллов расположена между СПЛ и детектором. Численные расчеты выполнены с

помощью программы на языке ACL, разработанном одним из авторов (Кон). Интерпретатор языка вместе с описанием можно бесплатно скачать на сайте автора [13].

Возможная схема эксперимента показана на рисунке 1 для случая одного кристалла (С). В случае двух кристаллов они близки друг к другу, однако небольшое расстояние все же необходимо для разделения проходящих и отраженных пучков в пространстве. Источник синхротронного излучения (СИ), расположен на большом расстоянии  $z_0$  от СПЛ. Монохроматор (М) выделяет необходимую длину волны. Затем СПЛ формирует вторичный источник в фокусе, который создает расходящийся пучок с существенно большей расходимостью, чем исходный пучок СИ. Детектор (D) регистрирует профиль интенсивности рентгеновского излучения  $I(x) = |E(x)|^2$ .

В случае двух кристаллов амплитуда электрического поля на детекторе равна:

$$E(x) = \int dx_1 P_C^2(x - x_1) \int dx_2 P(x_1 - x_2, Z_1) T(x_2) P(x_2 - x_0, z_0) \quad (1)$$

где  $Z_1 = z_f + z_1$  есть расстояние от СПЛ до детектора (рис.1). Здесь функция  $P(x, z)$  является пропагатором Френеля (поперечная часть сферической волны в паракиальном приближении),  $P_C(x)$  есть пропагатор кристалла, который представляет собой фурье-образ амплитуды отражения плоской волны кристаллом  $P_C(q)$ ,  $T(x)$  есть трансмиссионная функция, описывающая изменение волны при прохождении через СПЛ.

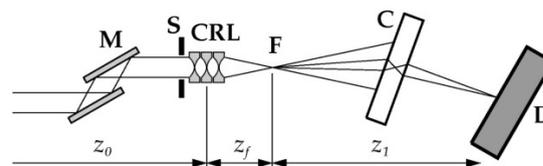


Рисунок 1. Схема дифракции.

Заметим, что эффект дифракционной фокусировки расходящейся сферической волны в геометрии нахождение на одном кристалле наблюдается при условии, что толщина кристалла  $t$  и расстояние от источника до плоскости регистрации (на рис.1 это  $z_1$ ) связаны соотношением  $t = Cz_1$ ,  $C = 2|\chi_{hr}|\cos\theta/\sin^2 2\theta$ .

На рис. 2 показано распределение интенсивности для кристалла кремния, отражение 220 при изменении толщины кристалла кремния  $t$  (левая

шкала) или расстояния  $z_1$  (правая шкала) для трех разных энергий. При этом второй параметр равен значению, которое следует из указанного выше соотношения, являющегося условием на фокусировку.

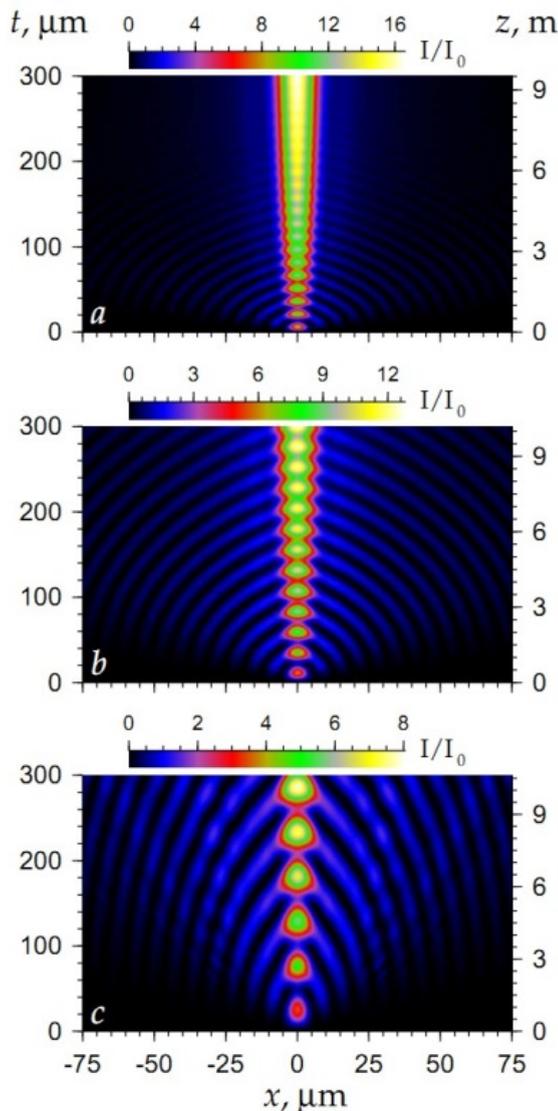


Рис. 2 Теоретическое распределение интенсивности  $E = 8$  кэВ (а), 12 кэВ (б), 25 кэВ (с).

Расчет выполнен для планарной кремниевой СПЛ, состоящей из элементов (чипов), у которых радиус кривизны у вершины параболы равен 6.25 мкм, число чипов равно 6 для энергии 8 кэВ, 14 для энергии 12 кэВ и 58 для энергии 25 кэВ. Соответственно фокусные расстояния равны 6.78, 6.58 и 6.96 сантиметров.

Верхний рисунок соответствует случаю мягкого излучения, то есть сильного поглощения. Для толщины кристалла от 200 до 300 мкм параметр поглощения  $P = \mu t / \cos\theta$ , где  $\mu$  есть линейный коэффициент поглощения, меняется от 3.14 до 4.71 и почти реализуется эффект Бормана. При этом часть излучения с большим динамическим коэффициентом поглощения полностью поглощается, и не затухает только слабопоглощающееся поле, причем в узком

интервале углов вблизи угла Брэгга, ширина которого уменьшается с ростом толщины кристалла.

Очевидно, что размер пучка в фокусе обратно пропорционален угловой области дифракции. Она тем меньше, чем толще кристалл. На рис. 3 и 2а при увеличении толщины кристалла пропадают боковые фоновые осцилляции, и в центре распределения интенсивности виден чистый пик фокусировки слабопоглощаемой части излучения шириной 10 мкм. Ширина пика фокусировки и контраст постоянны только в верхней части рисунка, что соответствует толщине кристалла более 250 мкм. Именно этот случай и рассматривался в работе [1].

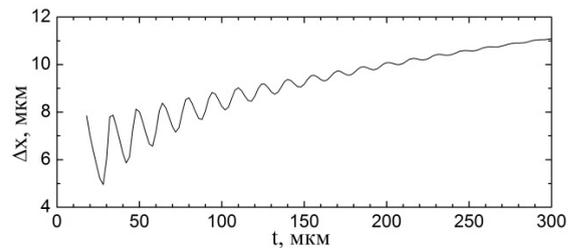


Рис. 3 Ширина пика фокусировки для  $E = 8$  кэВ

При переходе к более жесткому излучению уменьшается фотоэлектрическое поглощение и реализуется случай слабопоглощающего кристалла. Так для энергии 25 кэВ и толщины кристалла 200 -- 300 мкм параметр поглощения  $P = 0.1 -- 0.15$  (рис. 2с). В этом случае слабо поглощаемая и сильно поглощаемая части излучения соизмеримы по интенсивности. Плоская волна, падающая под углом Брэгга дифрагирует то в проходящий, то в отраженный пучок. Полная интегральная интенсивность если нет поглощения не меняется, но интенсивность в отраженном пучке осциллирует с длиной экстинкции.

Когда падающая волна не плоская, а сферическая, то ее можно представить в виде суперпозиции плоских волн и тогда осцилляции сохраняются, только имеют более слабую амплитуду. И поэтому на рисунках 2 (b, c) хорошо видны периодические биения интенсивности в зависимости от толщины кристалла. Фокусировка излучения существует при всех толщинах кристалла, но высота пиков фокусировки, ширина пучка в фокусе и интегральная интенсивность периодически изменяется с периодом почти равным экстинкционной длине, что хорошо видно на рисунках. Заметим, что длина экстинкции  $L = 15.08$  мкм для энергии  $E = 8$  кэВ,  $L = 24.11$  мкм для  $E = 12$  кэВ и  $L = 52.66$  мкм для  $E = 25$  кэВ. Видно, что для энергии 25 кэВ на толщине кристалла 300 мкм укладывается шесть осцилляций, ширина пика фокусировки минимальна, когда минимальна высота пика фокусировки. Ширина пиков фокусировки на всех трех рисунках слабо зависит от энергии фотонов и в среднем равна примерно 10 мкм. Результаты моделирования показывают, что хотя для жесткого излучения имеются интерференционные осцилляции, все же

можно подобрать такую толщину кристалла, при которой фокусировка проявляется достаточно четко, и на основе этого эффекта можно построить спектрометр розового пучка в небольших пределах по энергии.

Для дифракционной фокусировки на одном кристалле необходимо достаточно большое расстояние от источника до плоскости регистрации. В случае дифракционной фокусировки последовательно на двух одинаковых кристаллах фокусировка возможна только при нулевом расстоянии от источника до плоскости регистрации и слабом поглощении в кристалле. Например, на рис. 4 при нулевом расстоянии расчетная ширина пика фокусировки равна  $\Delta x = 1.41$  мкм ( $E = 25$  кэВ,  $t = 358$  мкм),  $1.85$  мкм ( $E = 25$  кэВ,  $t = 338$  мкм),  $2.01$  мкм ( $E = 12$  кэВ,  $t = 324$  мкм). При переходе к более слабым отражениям уменьшается угловая область отражения кристалла, и, как следствие, увеличивается ширина пучка в фокусе. Для энергии  $25$  кэВ и случая Si (331) имеем  $\Delta x = 4.2$  мкм, а для случая Si(531)  $7.3$  мкм.

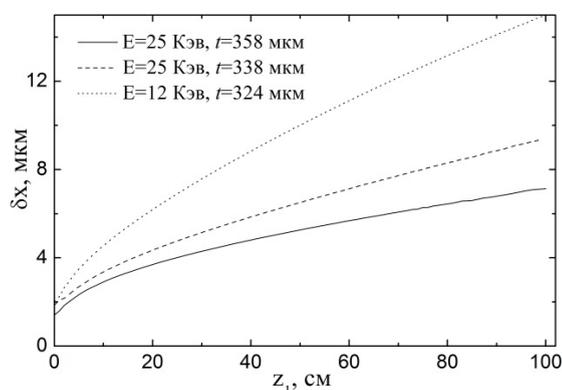


Рис. 4. Зависимость ширины пучка от расстояния  $z_1$ , случай Si (220).

В реальном эксперименте необходимо конечное расстояние от источника до плоскости регистрации. Нулевое расстояние брать нельзя, так как пучки после первого кристалла должны разойтись, на второй кристалл должен попадать только отраженный пучок. На рис. 4 показано изменение ширины пучка при увеличении расстояния. В результате расчетов показано (см. рис. 4), что ширина пучка на детекторе быстро увеличивается с ростом расстояния до  $8$  мкм и более  $12$  мкм для более мягкого излучения уже на расстоянии  $100$  см.

Из этого следует, что на основе эффекта фокусировки двумя кристаллами сложно реализовать высокоразрешающий спектрометр

рентгеновского излучения, как предполагалось ранее [12]. Наоборот, для высокого разрешения при фокусировке одним кристаллом необходимо большое расстояние от источника до плоскости регистрации.

В заключение отметим, что в работе представлены результаты моделирования эффекта дифракционной фокусировки сферической рентгеновской волны плоскопараллельным кристаллом, а также двумя кристаллами последовательно поставленными друг за другом. В численном эксперименте составная преломляющая линза формирует вторичный источник расходящегося излучения малого поперечного размера. Показано, что при слабом поглощении в том и в другом случаях возникают осцилляции высоты пика фокусировки и ширины пучка в фокусе в зависимости от толщины кристаллов из-за эффекта экстинкции. Но все же можно подобрать такую толщину кристалла, при которой фокусировка проявляется достаточно четко.

- [1] Афанасьев А. М., Кон В. Г., ФТТ, **19**, 1775 (1977).
- [2] Аристов В.В., Половинкина В.И., Шмытько И.М., Шулаков Е.В., Пистма в ЖЭТФ, **28**, 6-9 (1978).
- [3] Козьмик В. Д., Михайлюк И. П., Письма в ЖЭТФ, **28**, 673 (1978).
- [4] Aristov V. V., Polovinkina V. I., Afanasev, A.M., Kohn V. G., Acta Cryst. A **36**, 1002-1013 (1980).
- [5] Aristov V. V., Kohn V. G., Polovinkina V. I., Snigirev A. A., Phys. Status Solidi A, **72**, 483 (1982).
- [6] Kohn V. G., Gorobtsov O. Y., Vartanyants I. A., J. Synchrotron. Rad., **20**, 258 (2013).
- [7] Mocella V., Guigay J. P., Hrdy J., Ferrero C., Hoszowska J., J. Appl. Cryst. **37**, 941-946 (2004).
- [8] Mocella V., Ferrero C., Hrdy J., Wright J., Pascarelli S., Hoszowska J., J. Appl. Cryst. **41**, 695-700 (2008).
- [9] Nesterets Y. I., Wilkins S. W., J. Appl. Cryst. **41**, 237-248 (2008).
- [10] Pendry J. B., Phys. Rev. Lett. **85**, 3966 (2000).
- [11] Инденбом В. Л., Слободетский И. Ш., Труни К. Г., ЖЭТФ, **66**, 1100 (1974).
- [12] Инденбом В. Л., Суворов Э. В., Письма в ЖЭТФ, **23**, 485 (1976).
- [13] <http://kohnvict.ucoz.ru/acl/acl.htm>