

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.73

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА ФОКУСИРОВКИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ С ПОМОЩЬЮ РЕФРАКЦИОННО-ДИФРАКЦИОННОЙ ЛИНЗЫ

© 2024 г. В. Г. Кош^{1,2,*}

¹Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

²Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатова комплекса кристаллографии и фотоники
НИИ “Курчатовский институт”, Москва, Россия

*E-mail: kohnvict@yandex.ru

Поступила в редакцию 31.08.2023 г.

После доработки 25.09.2023 г.

Принята к публикации 25.09.2023 г.

Теоретически исследуются особенности фокусировки рентгеновских лучей с помощью рефракционно-дифракционной линзы, состоящей из двух асимметрично отражающих кристаллов с факторами асимметрии, произведение которых равно единице, и преломляющей линзы с большим фокусным расстоянием. Кристаллы позволяют сократить фокусное расстояние линзы в b^2 раз, где b — фактор асимметрии второго кристалла. Выполнено детальное численное моделирование эффекта фокусировки излучения с помощью рефракционно-дифракционной линзы, для которого использовалась универсальная компьютерная программа XRWP, созданная для расчета эффектов когерентной рентгеновской оптики. Получены аналитические формулы для оптимальных значений апертуры и радиуса кривизны линзы, а также для ширины спектра излучения, который может быть сфокусирован.

DOI: 10.31857/S0023476124040011, EDN: XDХКNI

ВВЕДЕНИЕ

Показатель преломления рентгеновских лучей в веществе очень слабо отличается от единицы. Кроме того, для рентгеновских лучей не существует прозрачных веществ. По этой причине в течение ста лет после открытия рентгеновских лучей не удавалось сфокусировать рентгеновский пучок с использованием эффекта преломления. Проблему удалось решить в 1996 г. с помощью составной преломляющей линзы (СПЛ) [1]. СПЛ стали широко использоваться для фокусировки узких пучков на источниках синхротронного излучения (СИ) третьего поколения, особенно после того, как линзы стали делать плоскими и с параболическим профилем [2]. Весьма удачным оказалось то, что для рентгеновских лучей все вещества имеют действительную часть показателя преломления меньше единицы, т.е. $n_r = 1 - \delta$. При этом фокусирующая линза должна иметь не выпуклый, а вогнутый профиль поверхности, что существенно снижает потери на поглощение.

Например, двояковогнутая линза из берил-ля с радиусом кривизны у вершины парабо-лы $R = 1$ мм фокусирует плоскую волну на рас-стоянии $F_1 = R/2\delta = 448$ м для энергии фотонов

$E = 17.48$ кэВ, равной $K_{\alpha 1}$ -линии в спектре молиб-денового анода рентгеновской трубки. Ответ полу-чен с помощью онлайн-программы [3]. При апер-туре $A = 2$ мм такая линза имеет длину $p = A^2/4R = 1$ мм без учета толщины перемычки, которая мо-жет быть не более 1% от длины линзы. Если сло-жить вместе 400 таких линз, фокусное расстояние со-кратится в 400 раз и будет равно $F_{400} = 1.12$ м, что вполне приемлемо для экспериментов даже в лаборатории средних размеров при условии ис-пользования источника с малыми поперечными размерами.

Суммарная длина такой СПЛ будет более 40 см, поэтому приближение тонкой линзы для нее уже не является точным. Необходимо использовать более сложную теорию [4]. Кроме того, поглощение на краях апертуры приведет к тому, что реально будет фокусироваться пучок на эффективной апертуре A_e меньшего размера. Расчет в онлайн-программе [3] в этом случае дает результат: $F_{400} = 1.18$ м, если считать от середины длины СПЛ, и $A_e = 0.473$ мм. Хотя апертура сокращается в 4 раза, она все еще достаточно большая. Размер пучка в фокусе для то-чного источника равен $w_f = 0.084$ мкм, в то время как максимальная относительная интенсивность

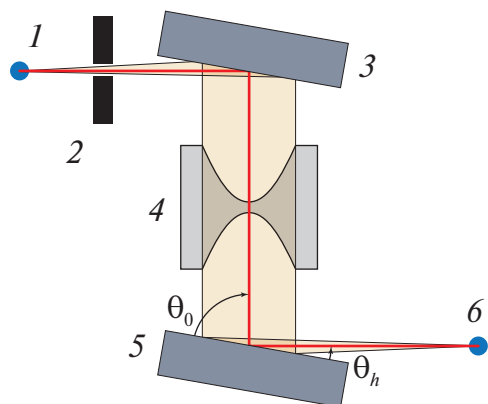


Рис. 1. Схема эксперимента: 1 — точечный источник, 2 — щель, ограничивающая пучок, 3 — первый кристалл, расширяющий пучок, 4 — линза, фокусирующая пучок, 5 — второй кристалл, сжимающий пучок, 6 — фокус, т.е. место, где пучок становится вторичным источником.

$I_m/I_0 = 5296$. Здесь I_0 — интенсивность излучения перед СПЛ, I_m — максимальная интенсивности в фокусе СПЛ.

Другой способ сократить фокусное расстояние линзы, состоящей из одного элемента, рассмотрен в [5]. Было предложено перед линзой и после нее асимметрично отражать пучок рентгеновских лучей от атомных плоскостей кристалла кремния. Такая линза использует комбинированный эффект рефракции в линзе и дифракции в кристаллах. Она была названа рефракционно-дифракционной линзой (РДЛ). Кристаллы в форме пластинки вырезали так, чтобы поверхность пластинки составляла относительно большой угол с атомными плоскостями, на которых отражается пучок. Ориентация кристаллов такова, что пучок при отражении от первого кристалла расширяется, т.е. его ширина делится на коэффициент $b_1 = 1/b$. При отражении от второго кристалла пучок сжимается, т.е. его ширина делится на коэффициент $b_2 = b$.

Параметр $b = \sin(\theta_0)/\sin(\theta_h) \gg 1$ равен фактору асимметрии для второго кристалла, он значительно больше единицы. Здесь b_k ($k = 1, 2$) — параметр асимметрии для конкретного кристалла, θ_0 и θ_h — углы между поверхностью кристалла и направлениями падающего и отраженного пучков соответственно. Схему возможного эксперимента иллюстрирует рис. 1, на котором показаны углы θ_0 и θ_h , точечный источник (1), щель, ограничивающая пучок (2), первый кристалл, расширяющий пучок (3), линза, фокусирующая пучок (4), второй кристалл, сжимающий пучок (5), и фокус, т.е. место, где пучок становится вторичным источником (6). Расстояния между объектами 1 и 2, а также 5 и 6 в реальном эксперименте намного больше, они уменьшены на рисунке для его компактности.

Остальные расстояния малы, в расчете ими можно пренебречь. В этой схеме первый кристалл необходим, чтобы сократить расстояние от источника до линзы, второй кристалл сокращает фокусное расстояние линзы. Известно, что расходимость электромагнитного излучения определяется его первой зоной Френеля, диаметр которой для сферической волны равен $2(\lambda z)^{1/2}$, где $\lambda = hc/E$ — длина волны излучения, h — постоянная Планка, c — скорость света, z — расстояние от объекта до точки наблюдения. Поэтому при сжатии пучка в b раз фокусное расстояние сокращается в b^2 раз. Этот факт на год ранее публикации [5] был отмечен и использован в [6] для другой цели.

С учетом указанного факта, если выбрать $b = 20$, можно получить фокусное расстояние 1.12 м для одной линзы, указанной выше, при отражении от второго кристалла, и складывать вместе 400 линз не обязательно. Такой метод кажется привлекательным, если принять во внимание большую стоимость преломляющих линз для фокусировки СИ. Первый кристалл с обратной асимметрией необходим и для того, чтобы положение фокуса в поперечной плоскости не зависело от длины волны излучения. В [6] первый кристалл отражал симметрично, отражение вторым кристаллом использовалось для разделения разных длин волн СИ в пространстве.

Численный расчет параметров сфокусированного с помощью РДЛ пучка рентгеновских лучей выполнен в [5] по аналитическим формулам для интенсивности излучения в фокусе, полученным с использованием пропагаторов кристалла и линзы сразу в прямом пространстве. Формулы имеют относительно сложный вид, расчеты были выполнены в малом числе точек и с низкой точностью. Другой подход к численному моделированию эффектов рентгеновской оптики разработан и реализован в универсальной компьютерной программе XRWP [7]. В ней используется модульный принцип волновой оптики. Он состоит в том, что изменение волновой функции (ВФ) в плоскости, перпендикулярной направлению пучка, учитывается на системе точек в заданной расчетной сетке. При этом изменение ВФ последовательно пересчитывается при прохождении каждого объекта и каждого расстояния от одного объекта до другого.

Имея набор расчетных модулей для каждого объекта и включая в расчет пустое пространство, можно рассчитать любую экспериментальную схему, в том числе РДЛ. В том случае, когда расчет сводится к свертке двух функций, используется фурье-преобразование из прямого пространства в обратное и наоборот. При этом расчет выполняется по алгоритму быстрого преобразования Фурье (БПФ) [8], что резко сокращает время расчетов. Преимущество такого метода решения задач рентгеновской оптики состоит и в том, что для

алгоритма БПФ нужна сетка с большим числом точек и маленьким шагом. При этом легко описать осцилляции интенсивности с любым сколь угодно малым периодом, обычно имеющие место в когерентной оптике.

В данной работе выполнено численное моделирование эффекта фокусировки СИ с помощью РДЛ по программе XRWP, а также проведен теоретический анализ недостатков этого метода фокусировки, связанных с тем, что дифракционное отражение пучка СИ кристаллом реализуется в очень малой угловой области. Получены аналитические формулы для оптимальных значений апертуры и радиуса кривизны преломляющей линзы, а также ширины спектра, который РДЛ способна фокусировать. Такой анализ в [5] не проводился. Вместе с тем результаты расчета новым способом в целом соответствуют результатам, полученным в [5], но выполнены более детально.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД ЕЕ РЕШЕНИЯ

Основные расчетные формулы, использованные в программе XRWP, описаны в [9]. Двухволновая дифракция на атомной решетке в кристалле реализуется в плоскости (x, z) , причем ось z выбирается вдоль направления пучка, а ось x — перпендикулярно оси z . Ограничимся рассмотрением одномерной линзы, фокусирующей излучение в этой же плоскости. Пусть $F(x)$ — ВФ монохроматического излучения с заданной энергией фотонов E в некоторой точке траектории пучка, т.е. при фиксированном значении координаты z . Перенос ВФ по пустому пространству на некоторое расстояние $z = z_2 - z_1$, где $z_{1,2}$ — начальное и конечное расстояния в пустом пространстве, вычисляется в виде свертки $F(x)$ с пропагатором Френеля, что является математическим аналогом принципа Гюйгенса—Френеля.

Свертка вычисляется в три этапа. На первом вычисляется образ Фурье ВФ $F(q)$, где q — координата в обратном пространстве, связанная с x . На втором этапе эта функция умножается на образ Фурье пропагатора Френеля

$$P(q, z) = \exp(-i(\lambda z/4\pi)q^2). \quad (1)$$

На третьем этапе вычисляется обратное преобразование Фурье. Такой метод используется в большом числе публикаций автора. Отметим, что этот метод хорош еще и тем, что позволяет быстро получить двумерный массив в плоскости (x, z) для распределения интенсивности СИ в пустом пространстве. Если известна ВФ на некотором расстоянии z_1 , для расчета ВФ на расстоянии z_2 не надо пересчитывать всю экспериментальную схему. Достаточно просто вычислить свертку.

Прохождение ВФ через двояковогнутую фокусирующую линзу с малой толщиной можно учитывать умножением ВФ на трансмиссионную функцию линзы $T(x) = \exp(-i\pi x^2/\lambda F_1)$, если $|x| < A/2$. Обычно пучок СИ ограничивают щелью, тогда он имеет ширину, равную апертуре РДЛ, и за пределами указанного интервала $T(x) = 0$. Точность такого подхода для одной линзы вполне достаточна. Используемая программа XRWP выполняет расчеты СПЛ более сложными методами [10], применимыми для любого числа линз.

Асимметричное отражение монокристаллом учитывается методом расчета свертки с пропагатором кристалла, но в более сложном варианте. При этом образ Фурье пропагатора кристалла является решением задачи о дифракции плоской волны на атомной решетке, давно и подробно рассмотренной в учебниках [11, 12]. В программе реализован наиболее общий случай асимметричного отражения от многослойного кристалла с использованием рекуррентных формул. В общем виде рекуррентные формулы получены в [13]. В [14] расчетные формулы для многослойного кристалла представлены в наиболее удобном виде, но только для симметричного случая. Обобщение на асимметричный случай сделано в [6].

Ниже приведены формулы для расчета излучения в отраженном пучке для кристалла конечной толщины в асимметричном случае дифракции:

$$F(x) = \exp(-iq_0'xb_k)F'(xb_k), \quad (2)$$

$$F'(x) = \int (dq/2\pi) \exp(iqx) P(q, z) P_c(q - q_0, b) F_0(q). \quad (3)$$

Здесь предполагается, что ВФ излучения $F_0(x)$ на расстоянии z_1 от кристалла известна, требуется найти ВФ на расстоянии z_2 после отражения кристаллом. Соответственно, обратное преобразование Фурье вычисляется от произведения образа Фурье ВФ на образ Фурье пропагатора Френеля для расстояния $z = z_1 + z_2 b_k^2$ и на образ Фурье пропагатора кристалла $P_c(q - q_0, b_k)$. При этом [14]:

$$P_c(q, b_k) = (R_1 - R_2 \text{Cexp}(i\phi)) / (1 - \text{Cexp}(i\phi)), \quad (4)$$

$$R_{1,2} = (\sigma \pm a)/sf, \quad a = (\sigma^2 - b f s^2)^{1/2}, \quad (5)$$

$$C = R_1/R_2, \quad \phi = at/\sin\theta_0,$$

$$\sigma = qb_k \sin(2\theta_B) - i\mu_0(1 + b)/2, \quad s = K\chi_h, \quad (6)$$

$$f = \chi_{-h}/\chi_h.$$

Здесь t — толщина кристалла, $K = 2\pi/\lambda$, χ_h и χ_{-h} — комплексные параметры дифракции, $\mu_0 = K\chi_{0i}$ — линейный коэффициент поглощения, χ_{0i} — мнимая часть комплексного параметра χ_0 .

С другой стороны, кристалл сильно реагирует на отклонение от условия Брэгга как при его повороте

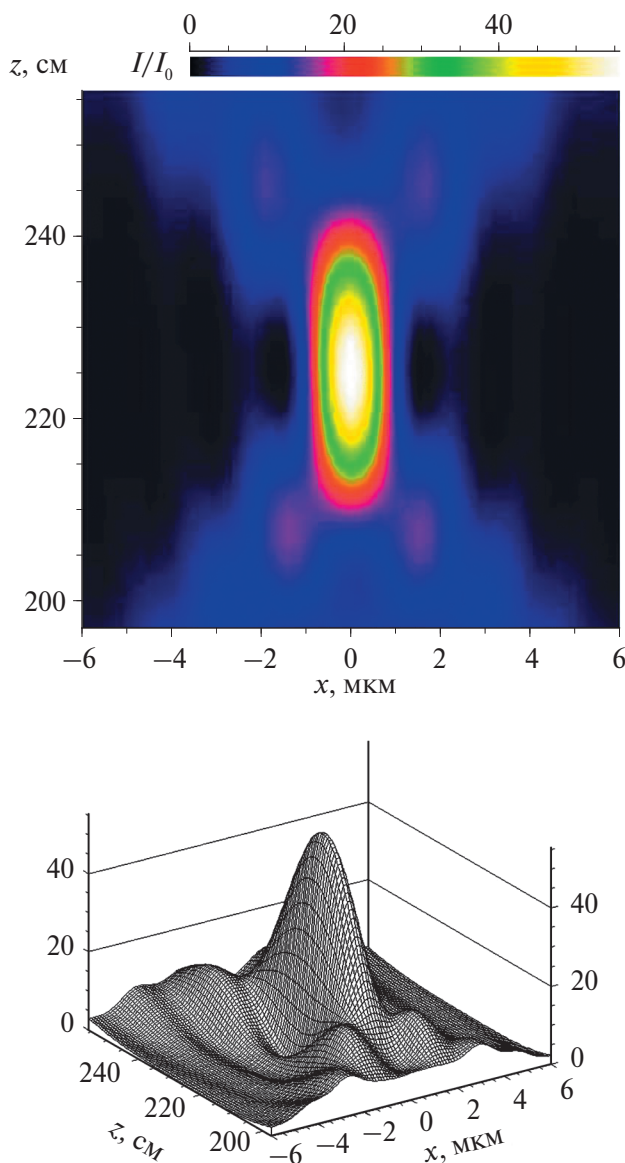


Рис. 2. Распределение относительной интенсивности излучения в пустом пространстве в области вблизи точки фокусировки с помощью РДЛ. Энергия фотонов 17.58 кэВ, расстояния от РДЛ до источника и фокуса $z_0 = z_1 = 2.24$ м, кристаллы кремния, 220 отражение, факторы асимметрии b равны 1/20 и 20 для первого и второго кристалла. Линза из бериллия, $R = 1$ мм, $A = 2$ мм.

на некоторый угол φ , так и при сдвиге энергии фотонов ΔE от значения, соответствующего условию Брэгга. При этом [6]:

$$q_0 = q_a + q_b, q_a = -K\varphi, q_b = K(\Delta E/E)\text{tg}(\theta_B), \quad (7)$$

$$q_0' = q_a(1 + 1/b_k) + q_b(1 - 1/b_k). \quad (8)$$

Из (3) следует, что сначала вычисляется интеграл Фурье на стандартной сетке точек. Затем шаг сетки точек для результата вычисления надо разделить на значение параметра b_k согласно формуле (2). Если $b_k > 1$, шаг уменьшается. Сдвиг углового положения кристалла φ и сдвиг энергии фотонов ΔE от их значений, соответствующих условию Брэгга, приводят как к изменению отражения, так и к появлению дополнительного фазового множителя, за счет которого происходит отклонение направления отраженного пучка. Из (8) следует, что при $b_k = 1$ направление отраженного пучка не зависит от сдвига энергии фотонов. Аналогичная ситуация имеет место при отражении в двух кристаллах, когда $b_1 b_2 = 1$.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ АНАЛИЗ

На рис. 2 представлены результаты расчета распределения интенсивности рентгеновского излучения в пустом пространстве после фокусировки с помощью РДЛ, описанной выше и рассмотренной в [5]. Результаты получены для следующих значений параметров: линза из бериллия с $R = 1$ мм, $A = 2$ мм, кристаллы из кремния, асимметричное отражение 220 с факторами асимметрии b_k , равными $1/b$ для первого кристалла и $b = 20$ для второго. РДЛ фокусирует монохроматическое излучение точечного источника с энергией фотонов $E = 17.48$ кэВ. Дифракционные параметры для кристаллов вычисляли по онлайн-программе [15]. Фокусное расстояние такой линзы для плоской волны и с учетом сокращения при отражении вторым кристаллом примерно равно $F_s = R/(2\delta b^2) = 1.12$ м. Реальное расстояние z_1 от РДЛ до фокуса зависит от расстояния z_0 от источника до РДЛ. Все три расстояния удовлетворяют формуле линзы $z_0^{-1} + z_1^{-1} = F_s^{-1}$.

На рис. 2 представлен случай, когда $z_0 = z_1$. Соответственно, $z_1 = 2F_s$, и фокусировка происходит при расстоянии примерно 224 см. Рисунок показывает двумерное распределение интенсивности в плоскости (x, z) , координата z изменяется в диапазоне, соответствующем глубине фокуса линзы. Нормировка интенсивности выполнена с учетом закона сохранения энергии, т.е. интенсивность в фокусе относится к интенсивности перед РДЛ. При этом перед РДЛ относительная интенсивность равна единице. Интегральная интенсивность, попадающая в фокус, соответственно равна апертуре РДЛ. Если РДЛ не поглощает, вся интенсивность в фокусе сжимается в пик, интеграл от которого примерно равен произведению ширины пучка на половине высоты на максимум интенсивности. Грубое говоря, во сколько раз сжимается пучок, во столько же раз увеличивается его максимальная интенсивность. Если этого не происходит, значит, есть потери интенсивности.

Верхняя часть рис. 2 показывает распределение интенсивности цветом с низкой точностью, зато точно представлены значения координат x и z . На нижней части рисунка распределение интенсивности показано в аксонометрической проекции поверхности в трехмерном пространстве. Хорошо видно, как меняется интенсивность, но все изменения искажены проектированием. На рис. 2 видно, что распределение интенсивности не является чисто гауссовским, а имеет сложные хвосты с дополнительными низкими максимумами. Главный пик почти соответствует стандартной форме, аналогичной фокусировке преломляющей линзой с конечной апертурой и без поглощения. Видно, что РДЛ фокусирует излучение, но в сравнении с параметрами пучка в фокусе, которые имеют место в случае СПЛ, имеющей 400 элементов, эффект более чем скромный.

Действительно, полуширина пика в фокусе равна $w_f = 1.5$ мкм, а высота $h_f = 51$. При таких параметрах интеграл от гауссиана равен $S = 1.065w_fh_f = 81$ мкм, в то время как эффективная апертура РДЛ с учетом отражения кристаллом равна $2 \text{ мм}/b = 100$ мкм. То есть небольшие потери все же есть. Отметим, что в [5] результаты расчета показывают такую же полуширину пика, но максимум в 4 раза больше. Это различие связано с тем, что в [5] представлено отношение сфокусированной интенсивности в точке фокуса РДЛ к значению интенсивности в той же точке без фокусировки, т.е. на расстоянии в 2 раза большем, чем в данной работе. А зависимость интенсивности от расстояния при отсутствии РДЛ показана квадратичной. Это и привело к эффективному увеличению интенсивности в 4 раза. Результат расчета, выполненный в [5] совсем другим способом и с очень низкой точностью, совпадает с результатом расчета в данной работе.

Необходимо отметить, что РДЛ является аналогом СПЛ только в том, что имеет такое же фокусное расстояние. Полуширина пика в фокусе для СПЛ по данным онлайн-программы [3] равна 0.161 мкм, а высота пика — 2904. То есть СПЛ фокусирует во много раз эффективнее. Причиной такого различия является то, что эффективная апертура СПЛ для этих условий равна 510 мкм. Она формируется поглощением, поэтому сжимает пучок не в 5, а почти в 10 раз сильнее, чем РДЛ. Особенности фокусировки линзой с поглощением обсуждались в [4]. При этом максимум относительной интенсивности для СПЛ более чем в 50 раз выше, чем для РДЛ. Интересно, что если бы первый кристалл отражал пучок симметричным образом, то РДЛ все равно не смогла бы нормально функционировать. Имеются две причины для этого.

Первая причина состоит в том, что положение фокуса при асимметричном отражении сильно зависит от энергии фотонов. В этом случае линза

показывает спектр излучения с высокой точностью. Такой вариант был предложен в [6] в качестве спектрометра нового типа. В этом случае расстояние от РДЛ до источника должно быть очень большим, чтобы апертура имела малую угловую ширину, иначе даже симметричное отражение не сработает. Рассмотрим предельный случай, когда на линзу падает плоская волна, т.е. $z_0 \gg z_1$. Тогда $z_2 = F_s$. Пусть $F_0(x)$ определяет ВФ излучения сразу за вторым кристаллом. Излучение фокусируется на расстоянии z_2 в точке x_0 , а ВФ в фокусе $F_1(x)$ определяется интегралом

$$F_1(x) = (i\lambda z_2)^{-1} \int dx_1 \exp(i(\pi/\lambda z_2)(x - x_1)^2) F_0(x). \quad (9)$$

Согласно (2) при малом сдвиге энергии фотонов на ΔE функция $F_0(x)$ получает дополнительный фазовый множитель $\exp(-iq_0'bx)$. Остальные изменения функции малы, поэтому ими можно пренебречь. Добавляя экспоненту в подынтегральное выражение, легко обнаружить, что точка фокуса получит смещение

$$\Delta x_0 = -z_2 q_0' b / K = -z_2 (\Delta E / E) \text{tg}(\theta_B) (b - 1). \quad (10)$$

При рассматриваемых параметрах смещение точки фокуса на 1 мкм получается при $\Delta E / E = 2.5 \times 10^{-7}$. Такую сильную чувствительность к спектру возможно подавить только в экспериментальной схеме, когда произведение параметров асимметрии в двух кристаллах РДЛ равно единице.

Вторая причина состоит в том, что угловая область асимметричного отражения вторым кристаллом весьма мала, и кристалл не смог бы отразить всю угловую апертуру линзы даже в том случае, когда линза имеет большое фокусное расстояние. На рис. 3 показано распределение интенсивности вблизи фокуса для такой же РДЛ, но при $z_0 = 50$ м (расстояние, типичное для источников СИ третьего поколения). В этом случае, согласно формуле линзы, пучок фокусируется при $z_1 = 1.15$ м. Так как фокусное расстояние сократилось, полуширина пика в фокусе стала меньше и равна $w_f = 0.898$ мкм. Интересно, что при этом пик немного смещается из центра. Сдвиг равен 0.5 мкм. При неравенстве расстояний нарушается симметрия, а отражение пучка СИ кристаллами не является симметричным, поэтому при отражении происходит небольшой сдвиг. Относительная интенсивность в максимуме равна $h_f = 61.5$.

Интересно, что в данном случае интегральная интенсивность примерно равна $S = 1.065w_fh_f = 55$ мкм, т.е. потеряна почти половина интенсивности пучка, который фокусируется линзой. Это объясняется тем, что более короткое фокусное расстояние увеличило угловую апертуру линзы, а угловая ширина отражения вторым кристаллом не изменилась, т.е. второй кристалл отразил не всю

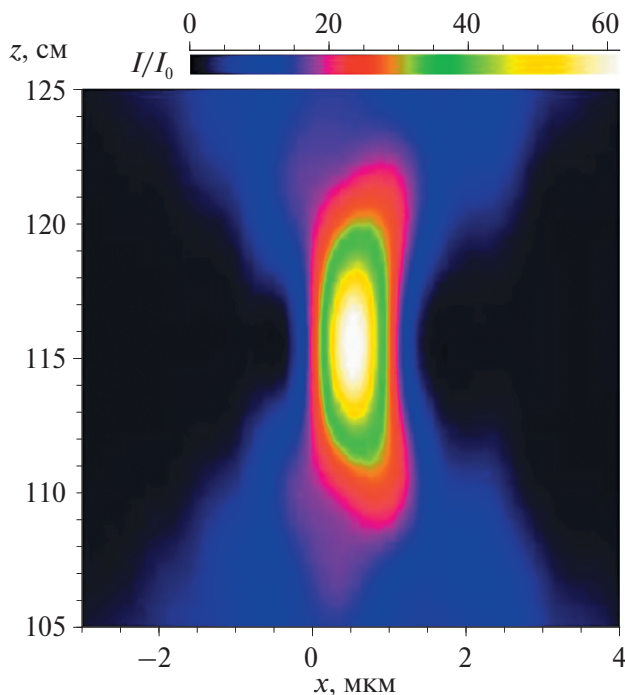


Рис. 3. Распределение относительной интенсивности излучения в пустом пространстве в области vicinity точки фокусировки с помощью РДЛ при тех же параметрах, что и на рис. 2, кроме $z_0 = 50$ м, $z_1 = 1.15$ м.

интенсивность. Угловая ширина Δ_θ для падающего на второй кристалл (входного) пучка определяется областью значений угла $\theta = q/K$, в которой параметр a в формуле (5) является чисто мнимым при нулевом поглощении. Вычисляя, получаем

$$\Delta_\theta = 2|\chi_h|/(b^{1/2}\sin(2\theta_B)). \quad (11)$$

При рассматриваемых значениях параметров $\Delta_\theta = 2.4 \times 10^{-6}$ рад. С другой стороны, угловая апертура рассматриваемой линзы для плоской волны равна $A_\theta = A/F_1 = 4.5 \times 10^{-6}$ рад. То есть кристалл отразил только половину угловой апертуры линзы.

При падении на линзу расходящегося излучения ее угловая апертура уменьшается, и отражение вторым кристаллом становится более полным. Однако в этом случае возможно неполное отражение пучка первым кристаллом. Для первого кристалла угловая ширина для входного пучка в $b = 20$ раз больше, но угловая ширина линзы определяется реальным расстоянием до источника z_0 после уменьшения апертуры линзы в b раз.

Очевидно, что при заданных параметрах кристаллов, индексов отражения, энергии фотонов и материала линзы нельзя произвольно выбирать такие параметры линзы, как R и A . Для лабораторных экспериментов наиболее оптимальным

является случай с малым расстоянием от источника до фокуса $z_1 = z_0 + z_1$, если детектор устанавливать в точке фокуса. Из условия $\Delta_\theta = A_\theta$ и из формулы линзы формулы для расчета апертуры и радиуса кривизны имеют вид

$$\begin{aligned} A &= 2|\chi_h|z_2b^{3/2}/\sin(2\theta_B), \\ R &= 2\delta z_2b^2/(1 + M), \quad M = z_2/z_1. \end{aligned} \quad (12)$$

Формулы позволяют получить зависимость параметров A и R от M . При этом A определяет интегральную относительную интенсивность как $A_e = A/b$, а формула $w_f = \lambda z_2/A_e$ дает оценку размера пучка в фокусе. Оценка делается по линзе для ее реального расстояния фокусировки z_2b^2 и с учетом сжатия пучка в b раз. С другой стороны, формула является стандартной, если использовать экспериментальное расстояние после второго кристалла и эффективную апертуру линзы перед первым кристаллом.

Из приведенных формул следует, что размер пучка в фокусе при оптимальных параметрах не зависит от M , так как оптимальная эффективная апертура линейно зависит от расстояния z_2 . Размер пучка в фокусе зависит от угловой апертуры линзы, а она не меняется. На рис. 4 показаны зависимости A и R от M при $z_1 = 4.48$ м. Значения при $M = 1$ близки к данным рис. 2, т.е. $A = 2$ мм, $R = 1$ мм. Видно, что интегральная интенсивность растет с ростом M . Но надо помнить, что с ростом M растет и проекция размеров источника, что может существенно увеличить размер пучка в фокусе. Кроме того, линзы с большой апертурой эффективно работают только при очень высокой когерентности излучения, что всегда является проблемой в лабораторных экспериментах.

Как известно, дифракционное отражение кристаллами существует только в ограниченной области спектра излучения. Можно установить кристаллы на правильные угловые позиции, но нельзя и неразумно создавать монохроматический пучок. Любое излучение имеет спектр. Фокусировка преломляющей линзой невозможна для излучения с широким спектром, но чувствительность к спектральной ширине у СПЛ все же не очень высокая. Чувствительность дифракционного отражения намного выше. Можно скомпенсировать поперечный сдвиг сфокусированного пучка, но нельзя получить отражение при невыполнении условия Брэгга.

Согласно (3) при отклонении энергии фотонов ΔE излучения от значения, точно соответствующего условию Брэгга для фиксированной угловой ориентации кристалла, угловая область отражения смещается на угол $\Delta\theta_0 = q_b/K = (\Delta E/E)\text{tg}(\theta_B)$. С другой стороны, угловая область, которая фокусируется линзой, не меняется. При правильной ориентации кристаллов она соответствует угловой области отражения вторым кристаллом. Угловая область

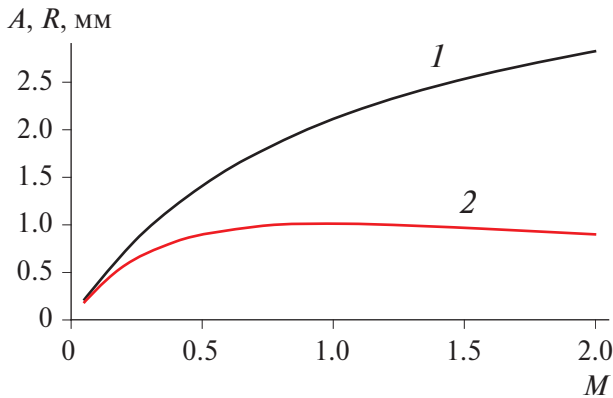


Рис. 4. Зависимость оптимальных значений апертуры A (1) и радиуса кривизны поверхности R (2) линзы от параметра $M = z_1/z_0$ при фиксированном расстоянии $z_t = z_0 + z_1 = 4.48$ м. Все остальные параметры те же, что и на рис. 2.

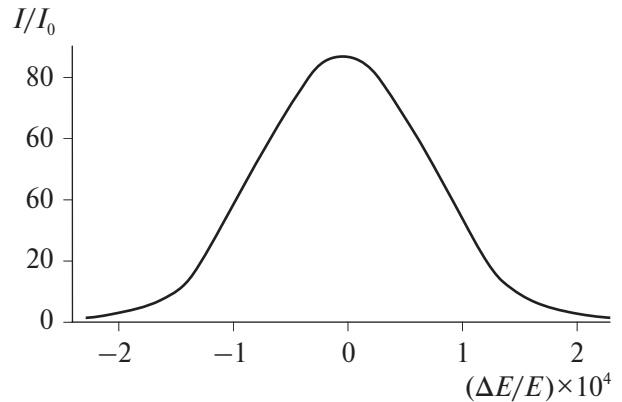


Рис. 5. Энергетический спектр сфокусированного с помощью РДЛ излучения, т.е. интегральная по координате x интенсивность в фокусе в зависимости от энергии фотонов для параметров РДЛ, как на рис. 2.

отражения первым кристаллом может быть больше, и ее смещение ничего не изменит. Но при отражении первым кристаллом направление лучей изменяется на угол $\Delta\theta_1 = -\Delta\theta_0(b_1 - 1)$. Смещение угловой области относительно направления лучей равно $\Delta\theta_2 = \Delta\theta_0 - \Delta\theta_1 = \Delta\theta_0/b$. Известно, что линза не меняет общее направление пучка, которое соответствует лучу, проходящему через центр линзы, поэтому в данном рассмотрении линзу можно не учитывать. Очевидно, что при $\Delta\theta_2 = C\Delta\theta_0$ интенсивность отраженного кристаллом пучка уменьшится вдвое. Параметр C при грубой оценке равен $(1 - 2^{-1/2}) = 0.3$. Практика показала, что более точное совпадение с расчетом получается при $C = 0.36$.

Это условие дает оценку ширины спектра излучения, который способна сфокусировать РДЛ, в виде

$$(\Delta E/E)_{fwhm} = 1.44b^{1/2}|\chi_h|/(\sin(2\theta_B)\text{tg}(\theta_B)), \quad (13)$$

где коэффициент 1.44 равен $4C$. Эта оценка никак не связана с фокусировкой и определяется только кристаллами. Для рассматриваемого на рис. 2 случая $(\Delta E/E)_{fwhm} = 1.8 \times 10^{-4}$, что хорошо совпадает с результатами численных расчетов по программе XRWP, а также результатами расчетов в [5].

Зависимость интегральной по координате x относительной интенсивности от энергии фотонов для рассматриваемой РДЛ при параметрах, как на рис. 2, показана на рис. 5. Отметим, что эта зависимость не вполне симметричная, а максимум немного сдвинут из центра. Но отклонения от симметричной кривой невелики. Интересно, что фокусировка имеет место практически для всех энергий, изменяется только максимальная интенсивность. Снижение интенсивности связано с тем, что уменьшается часть апертуры линзы, фокусирующей лучи.

А другая часть либо в линзу не попадает, либо не отражается вторым кристаллом.

В заключение можно сформулировать вывод о том, что в рассматриваемой схеме эксперимента весьма сложно получить увеличение интенсивности более чем в 100 раз, а ширина пучка в фокусе не может быть существенно меньше, чем 1 мкм. Эти ограничения определяются малой угловой шириной асимметричного отражения кристаллом с уменьшением ширины пучка.

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант № 075-15-2021-1362) и в рамках Государственного задания ФНИЦ (Кристаллография и фотоника) РАН (в части выполнения численных расчетов.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Snigirev A., Kohn V., Snigireva I., Lengeler B. // Nature. 1996. V. 384. P. 49.
2. Lengeler B., Schroer C., Tummler J. et al. // J. Synchrotron Rad. 1999. V. 6. P. 1153. <https://doi.org/10.1107/S0909049599009747>
3. Кон В.Г. Онлайн-программа. <http://kohnvict.ucoz.ru/jsp/1-crlpar.htm>
4. Кон В.Г. // ЖЭТФ. 2003. V. 124. P. 224.
5. Grigoryan A.H., Balyan M.K., Toneyan A.H. // J. Synchrotron Rad. 2010. V. 17. P. 332. <https://doi.org/10.1107/S0909049510003754>
6. Kohn V.G., Chumakov A.I., Ruffer R. // J. Synchrotron Rad. 2009. V. 16. P. 635. <https://doi.org/10.1107/S090904950902319X>
7. Кон В.Г. Программа XRWP. <http://xray-optics.ucoz.ru/XR/xrwp.htm>

8. Cooley J.W., Tukey J.W. // Math. Comput. 1965. V. 19. P. 297.
9. Кohn B.G. <http://xray-optics.ucoz.ru/XR/xrwp-equations.pdf>
10. Kohn V.G. // J. Synchrotron Rad. 2022. V. 29. P. 615. <https://doi.org/10.1107/S1600577522001345>
11. Authier A. Dynamical Theory of X-ray Diffraction. 3rd ed. Oxford University Press, 2005. 696 p.
12. Pinsker Z.G. Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals. Springer-Verlag, 1978. 390 p.
13. Kohn V.G. // Phys. Status Solidi. B. 2002. V. 231. P. 132.
14. Kohn V.G., Kazimirov A. // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. P. 224119. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.224119>
15. Кohn B.G. Онлайн-программа <http://kohnvict.ucoz.ru/jsp/3-difpar.htm>

COMPUTER SIMULATION OF THE EFFECT OF FOCUSING X RAYS BY MEANS OF REFRACTIVE-DIFFRACTIVE LENS

V. G. Kohn^{a,b,*}

^a*National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia,*

^b*Shubnikov Institute of Crystallography of Kurchatov Complex of Crystallography and Photonics of NRC
“Kurchatov Institute”, Moscow, Russia*

^{*}*e-mail: kohnvict@yandex.ru*

Abstract. The features of focusing X rays using a refractive-diffractive lens (RDL), which is a system of two asymmetrically reflecting crystals with asymmetry factors, the product of which is equal to unity, and a refractive lens with a large focal length, are theoretically studied. Crystals make it possible to shorten the focal length of the lens by b^2 times, where b is the asymmetry factor of the second crystal. A detailed numerical simulation of the effect of radiation focusing using the RDL has been performed. The universal computer program XRWP was used which is created to calculate the effects of coherent X-ray optics. Analytical formulas are obtained for the optimal aperture and radius of curvature of the lens, as well as for the width of the radiation spectrum that can be focused.