

Компьютерное моделирование когерентных эффектов в оптике и кристаллооптике синхротронного излучения с программой XRWP.

В. Г. Кон, НИЦ "Курчатовский институт", г. Москва

Когерентная оптика и кристаллооптика синхротронного излучения (СИ) являются актуальными разделами науки в России благодаря планам по созданию новых источников СИ 4-го поколения: СКИФ и СИЛА. Новые источники обладают высокой пространственной когерентностью. Необходимо решить задачу подготовки специалистов для успешной работы на этих источниках. Важно отметить, что уравнения Максвелла описывают процессы взаимодействия СИ с веществом только для когерентного излучения. Компьютерное моделирование теоретически описывает лишь такие эксперименты. Теория на основе уравнений Максвелла развивалась с самого начала, но для СИ это стало актуально только в последние годы. Наиболее интересными новыми когерентными методами являются метод фазово-контрастного изображения микрообъектов и фокусировка пучков СИ составными преломляющими линзами. Что касается кристаллооптики, то оказалось, что некоторые когерентные эффекты, которые на воздухе реализуются на очень больших расстояниях, имеют аналоги при дифракции на атомной решетке монокристаллов, в частности, в кристалле кремния. Можно отметить известный интерферометр Юнга и даже дифракцию на широкой щели. Необходимо создание компьютерных программ для реализации таких методов. Данный доклад имеет своей целью представить новую программу, которую автор разрабатывает с 2020 года. Она называется XRWP (x-ray wave propagation). В ней собраны вместе все методы компьютерного моделирования, которые автор разрабатывал в течение всей своей научной карьеры. В настоящее время программа имеет свой сайт в интернете <http://xray-optics.ucoz.ru/XR/xrwp.htm>, на котором можно скачать архив программы и документацию, содержащую основные правила работы с ней.



СКИФ, Новосибирск,
научоград Кольцово
(Сибирский Кольцевой
Источник Фотонов)

$$E = 3 \text{ GeV}$$



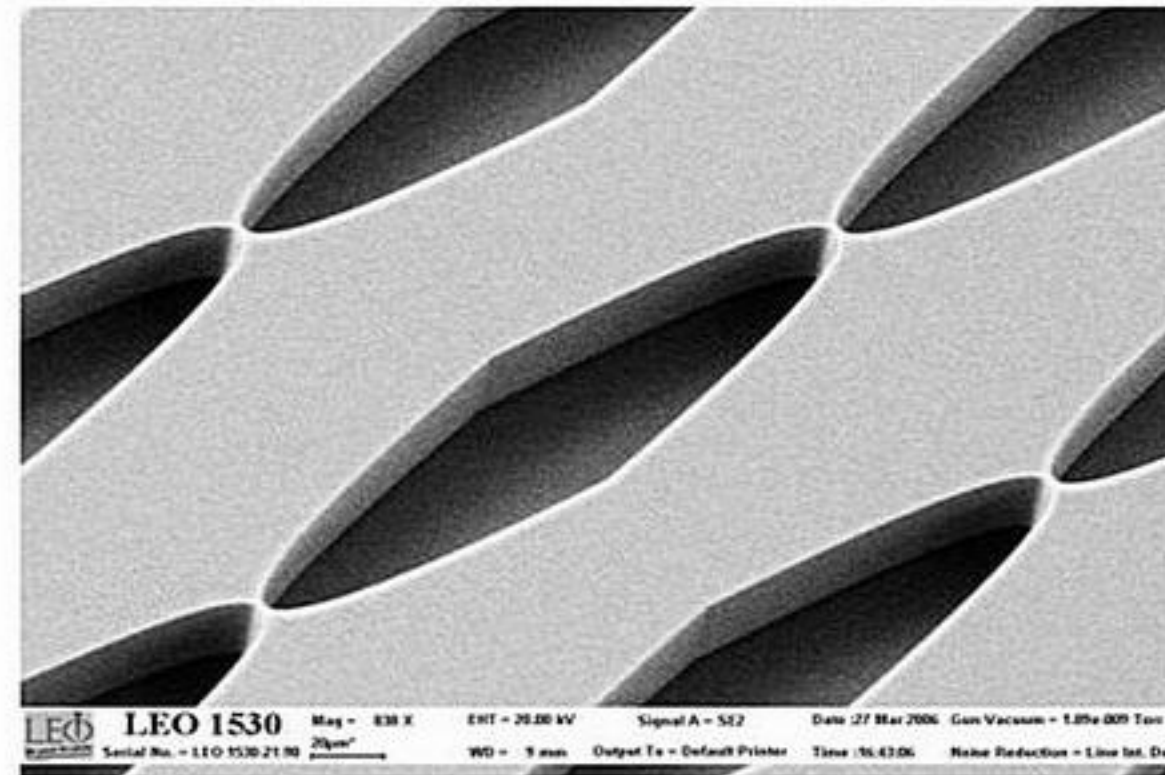
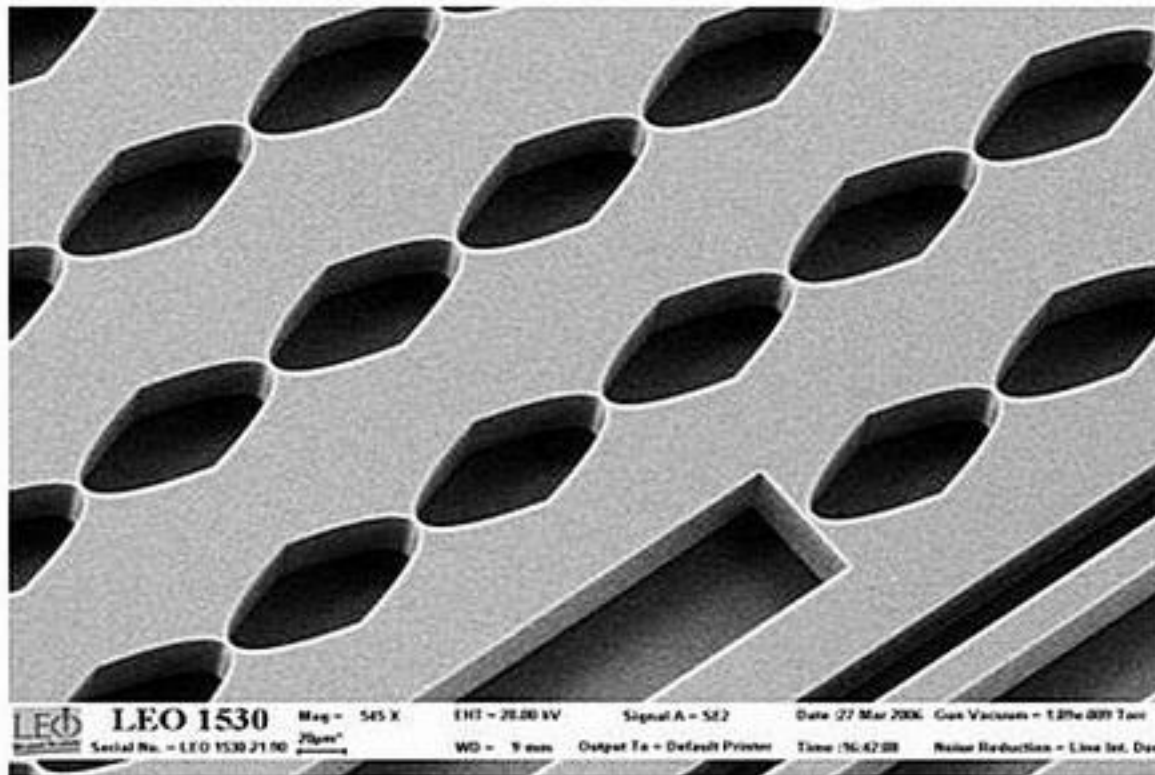
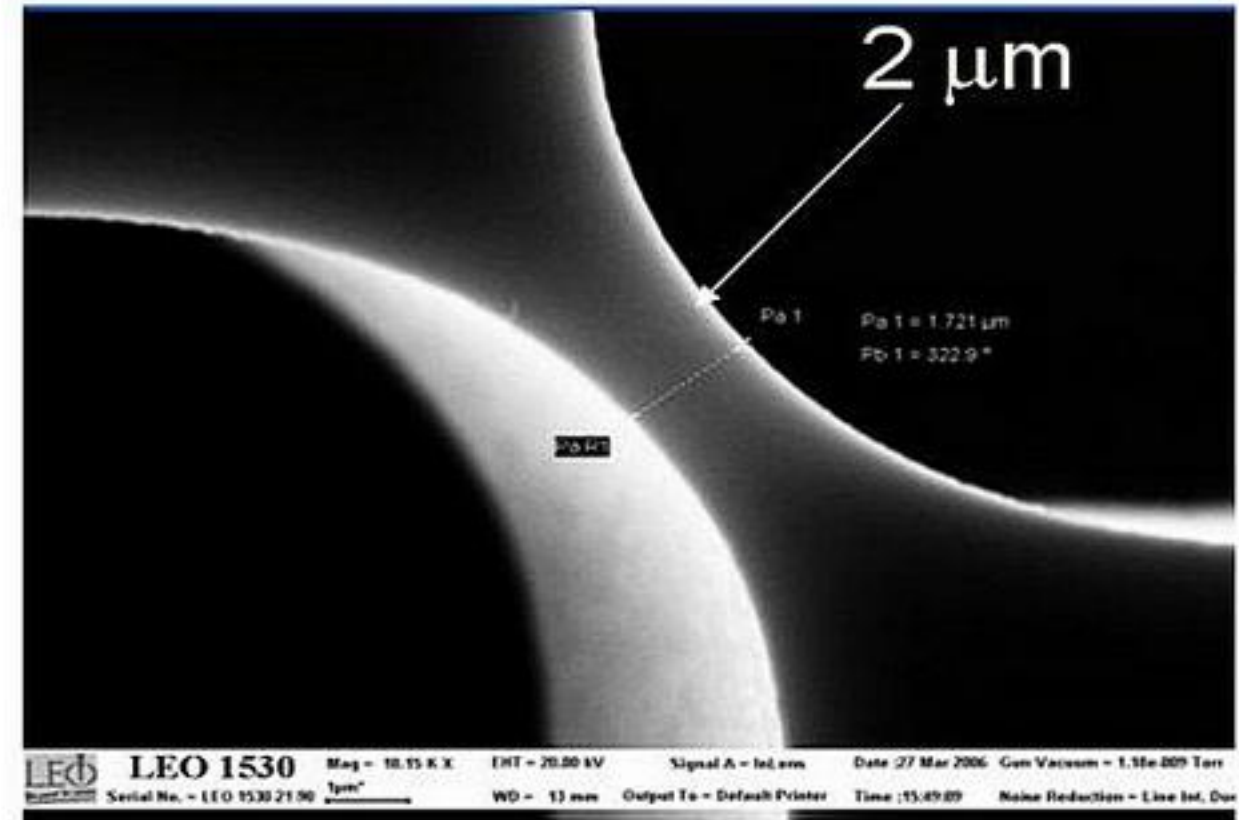
СИЛА, Москва,
научоград Протвино
(Синхротронное
Излучение и ЛАЗер
рентгеновский)

$$E = 6 \text{ GeV}$$



Planar Si lenses nano-focusing and nano-interferometry

Developed e-beam lithography and
deep etching. PRL-2009-103-064801
Chernogolovka, Russia, Yunkin



ТОЧНАЯ ТЕОРИЯ ИЗОБРАЖЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ ПАРАБОЛИЧЕСКОЙ НЕПРЕРЫВНО ПРЕЛОМЛЯЮЩЕЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЛИНЗЫ

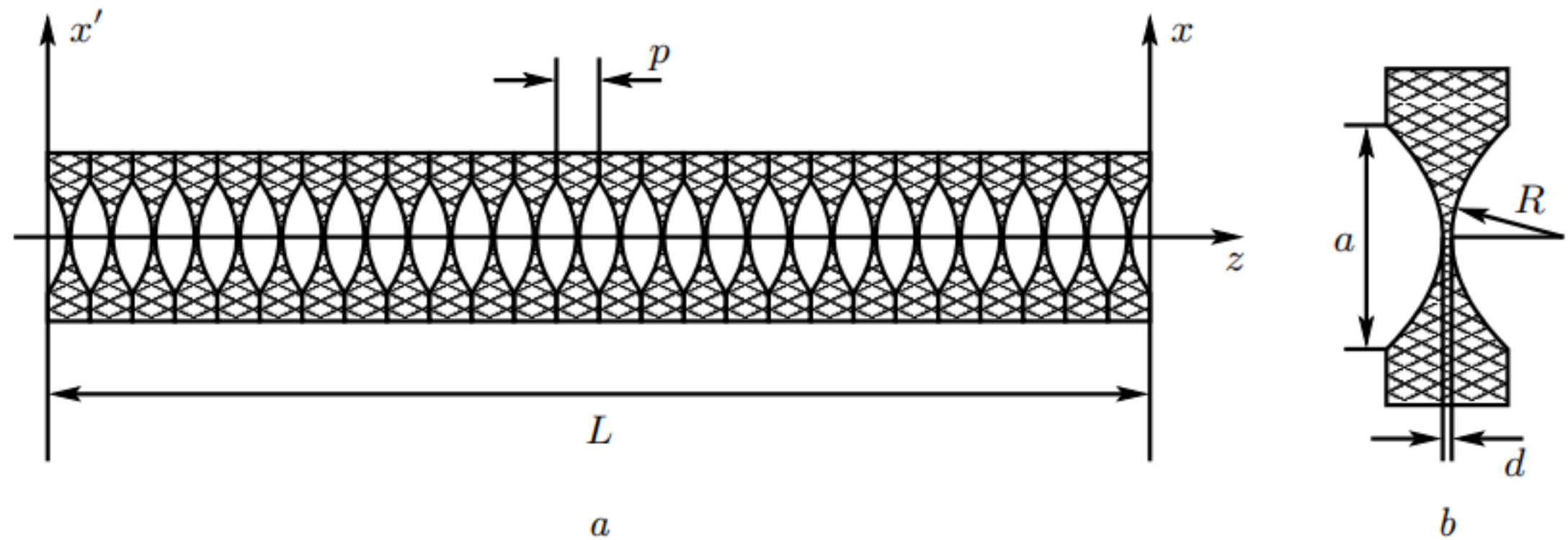
*В. Г. Кон**

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 января 2003 г.

Развита теория формирования изображения с помощью рентгеновской линзы, состоящей из очень большого числа элементов. Каждый элемент имеет двояко-вогнутый параболический профиль и очень слабо преломляет рентгеновский пучок. Такая линза может иметь относительно большую длину, сравнимую с длиной фокуса, поэтому приближение «тонкой» линзы неприменимо. Получено точное выражение для пропагатора непрерывно преломляющей линзы, который описывает перенос излучения через преломляющую параболическую среду. Вычислен пропагатор изображения, который описывает фокусировку параллельного пучка и перенос изображения (фокусировку микрообъекта), а также фурье-преобразование функции пропускания микрообъекта с помощью линзы. Эффективная апертура рентгеновской линзы полностью определяется поглощением излучения и не зависит от ее геометрических поперечных размеров. Если записать комплексный показатель преломления в виде $n = 1 - \delta + i\beta$, то диаметр пучка в фокусе примерно в $0.8\beta/\delta$ раз меньше диаметра эффективной апертуры, причем коэффициент очень слабо зависит от длины линзы. Непрерывно преломляющая линза не имеет аберраций в том смысле, что все лучи, прошедшие через апертуру линзы, фокусируются в одной точке. Линза может фокусировать излучение внутри себя и обладает свойствами волновода, т.е. может восстанавливать структуру пучка при некоторых значениях длины с точностью до искажений, обусловленных поглощением. Неоднородное поглощение рентгеновских лучей в линзе приводит к интересному эффекту визуализации прозрачных микрообъектов при их сфокусированном изображении. При этом изображается градиент сдвига фазы, создаваемой микрообъектом. Обсуждаются особенности фурье-преобразования, связанные с поглощением излучения в линзе.

Аналитическая формула для пропагатора СПЛ



$$\frac{dP_L}{dz} = -ik \frac{x^2}{2z_c^2} P_L + \frac{i}{2k} \frac{d^2 P_L}{dx^2},$$

$$P_L(x, x', 0) = \delta(x - x'), \quad z_c = \left(\frac{pR}{2\eta} \right)^{1/2}.$$

$$P_L(x, x', z) = \frac{1}{(i\lambda z_c s_z)^{1/2}} \times \\ \times \exp \left[i\pi \frac{(x^2 + x'^2) c_z - 2xx'}{\lambda z_c s_z} \right]$$

где введены обозначения

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

$$s_z = \sin \frac{z}{z_c}, \quad c_z = \cos \frac{z}{z_c}.$$



JOURNAL OF
SYNCHROTRON
RADIATION

ISSN 1600-5775

(2018). **25**, 1634–1641

Received 8 May 2018

Accepted 7 September 2018

Edited by A. Momose, Tohoku University, Japan

Keywords: X-ray focusing; compound refractive lens; rocking curve; computer simulations; recurrent relations; coherence.

Rocking curve and spatial coherence properties of a long X-ray compound refractive lens

V. G. Kohn*

National Research Centre 'Kurchatov Institute', Kurchatov Square 1, 123182 Moscow, Russia.

*Correspondence e-mail: kohnvict@yandex.ru

Semi-analytical theory of a long set of X-ray compound refractive lenses (CRLs) based on recurrence relations is developed further. The geometrical aperture, angular divergence of incident radiation and source size were accurately taken into account. Using this theory it is possible to calculate the width of the rocking curve of a long (40.7 cm) Be CRL which coincides with experimental data obtained earlier. By this approach the transverse coherence length for the X-ray beam after passing a set of CRLs of arbitrary complexity has been estimated. It is shown that at the focus this coherence length is equal to a diffraction-limited beam size (beam size in the case of a point source) and has minimal difference with the real beam size.

X-ray CRL Parameters

Parameters of x-ray beam focused by a set of X-ray Compound Refractive Lenses

[Help](#)[Input](#)[Exec](#)

```
14 -- Energy of x rays in keV
50 -- Source transverse size in microns
10000 -- Source angular divergence in urad
1e19 -- Distance source to CRL system in cm
1 -- Number of CRLs
Si, Si -- Chemical formula [array]
2.33, 2.33 -- Density (g/ccm) [array]
0, 2.477671 -- Delta x 1e6 (if you know the exact value)
0, 1.95222 -- Beta x 1e8 (if you know the exact value)
50, 50 -- Aperture (um) [array]
6.25, 6.25 -- Curvature radius (um) [array]
102, 102 -- Length of one bi-concave element (um) [array]
2, 2 -- Web thickness (um) [array]
1, 1 -- Number of bi-concave element [array]
126.121394, 0 -- Distance behind CRL (cm) [array]
0, 0 -- Key of aperture account (0 or 1)
0, 126.11355, 126.11357, 21 -- Variant and cycle parameters: V, min, max, N
```

X-ray CRL Parameters

Parameters of x-ray beam focused by a set of X-ray Compound Refractive Lenses

Help

Input

Exec

PARAMETERS OF THE BEAM AFTER PASSING THROUGH THE CRL SYSTEM.

All distances are counted from the end of last CRL

INPUT: 14 50 10000 1e19 1 Si, Si 2.33, 2.33 0, 2.477671 0, 1.95222 50, 50 6.25, 6.25 102, 102 2, 2 1,

RESULTS: Effective aperture and Length (in the case of one CRL) = 84.191 um, 0.010200 cm

Focus distances z_f (True, Geom-Opt) = 126.11356, 126.12139 cm, Web absorption = 0.99448

Data for the POINT source:

Integral relative intensity = 83.726 um, Rocking Curve FWHM = 2.6093 mrad

$M = (z + Z1)/(z0 + Z0)$, $Z0 = 2048.0$ cm, $Z1 = 0.0051000$ cm

Zero distance:

Max of relative intensity = 0.99452, FWHM = 79.086 um, Phase Radius = -126.121 cm

Focus distance:

Max of relative intensity = 126.22, FWHM = 0.62315 um, Depth = 1.9873 cm

Detector distance:

Max of relative intensity = 126.21, FWHM = 0.62317 um, Phase Radius = 126.126 cm

Data for the REAL source:

Integral relative intensity = 83.726 um, Rocking Curve FWHM = 2.6093 mrad

$M = (z + Z1)/(z0 + Z0)$, $Z0 = 2048.0$ cm, $Z1 = 0.0051000$ cm

Zero distance:

Max of relative intensity = 0.99452, FWHM = 79.086 um, $L_{tc}(C,S) = 7.8153e+16$, 77.084 um

Focus distance:

Max of relative intensity = 126.22, FWHM = 0.62315 um, $L_{tc}(C,S) = 6.1580e+14$, 0.60737 um

Detector distance:

Max of relative intensity = 126.21, FWHM = 0.62317 um, $L_{tc}(C,S) = 6.1581e+14$, 0.60739 um

(2022). **29**, 615–621

Received 22 November 2021

Accepted 3 February 2022

Edited by A. Momose, Tohoku University, Japan

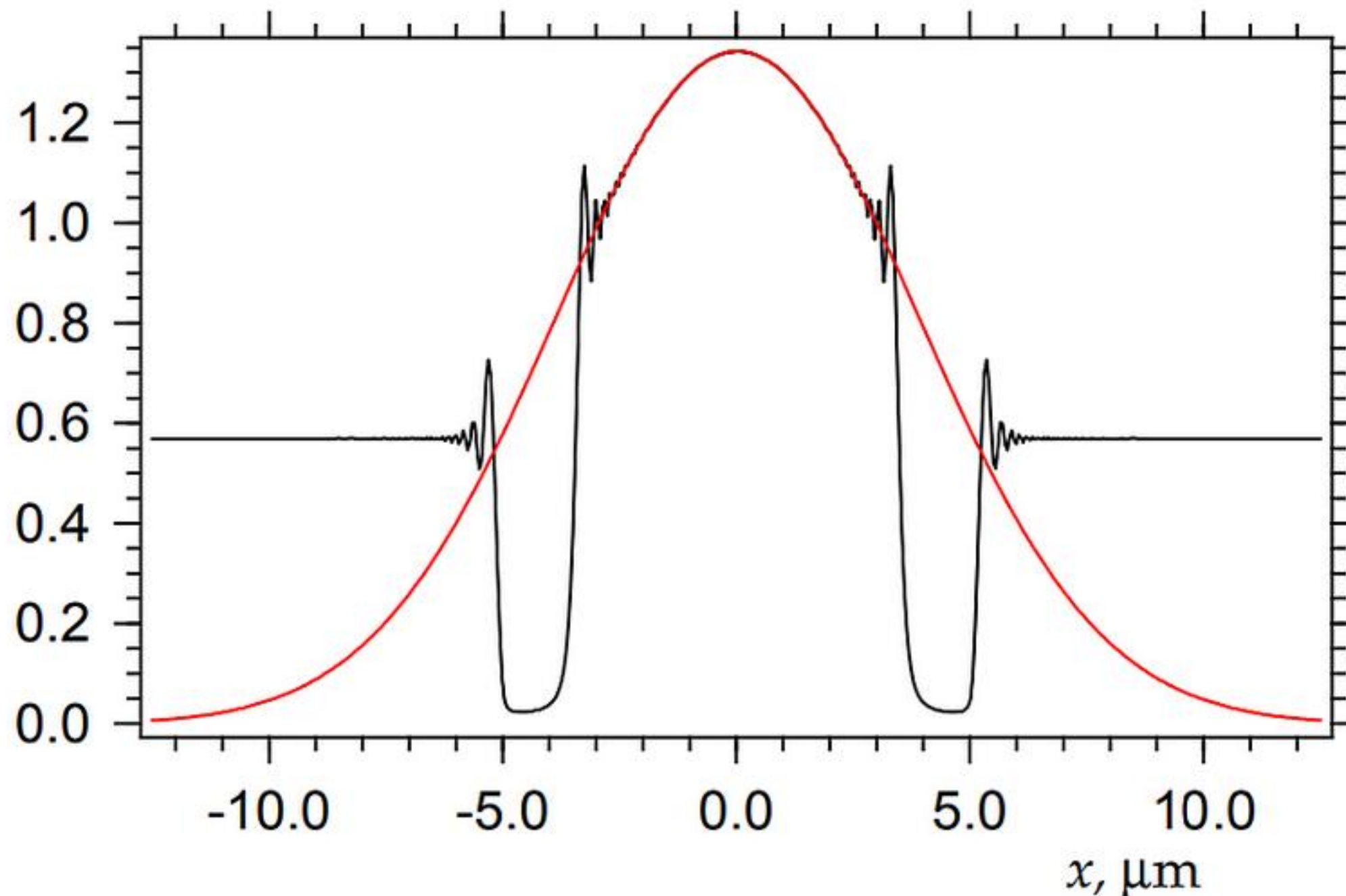
Keywords: X-ray nanofocusing; computer simulations; compound refractive lens; synchrotron radiation; theory of X-ray optics.

On the theory of synchrotron radiation nano-focusing with planar compound refractive lenses

V. G. Kohn*

National Research Centre 'Kurchatov Institute', 123182 Moscow, Russia, and Shubnikov Institute of Crystallography of Federal Scientific Research Centre 'Crystallography and Photonics' of Russian Academy of Sciences, 119333 Moscow, Russia. *Correspondence e-mail: kohnvict@yandex.ru

Two new methods of computer simulation of synchrotron radiation nano-focusing with planar compound refractive lenses (PCRLs) are presented. The methods are based on the results of analytical theory. In contrast to previous works, the new methods take into account the PCRL aperture. It is especially important at high photon energies, when absorption is low and the calculations based on analytical theory, *i.e.* without taking into account the aperture, give incorrect results. A computer program was created and specific results were obtained for a silicon PCRL having an aperture of 50 μm , element length of 102 μm and minimum thickness of 2 μm . For an energy of 50 keV and number of elements 300, it focuses the beam to 31 nm size at a distance of one and a half times its length. Analysis of the calculation accuracy for the proposed methods is performed, as well as a demonstration of the capabilities of the computer program.



Кривые относительной интенсивности на выходе из СПЛ типа 3 при $E = 50$ кэВ и $L = (\pi/4)L_c$. Черная линия -- расчет с учетом апертуры (итерационный). Красная линия -- результат аналитической теории.

$$A(x, z) = C_0 B_0(x) \int dx_1 P(x - x_1, b) B_1(x_1) A(x_1, 0).$$

$$B_{0,1}(x) = \exp\left(-i\pi a_{0,1} \frac{x^2}{\lambda b}\right), \quad z_c = \left(\frac{p_l R}{2\eta}\right)^{1/2}$$

$$b = z c_L + z_c s_L, \quad a_0 = 1 - c_L, \quad a_1 = a_0 + s_L \frac{z}{z_c},$$

$$c_L = \cos(L/z_c), \quad s_L = \sin(L/z_c), \quad L = p_l n_l$$

$$\eta(x, z) = \eta \frac{(d_l + x^2/R)}{p_l}$$

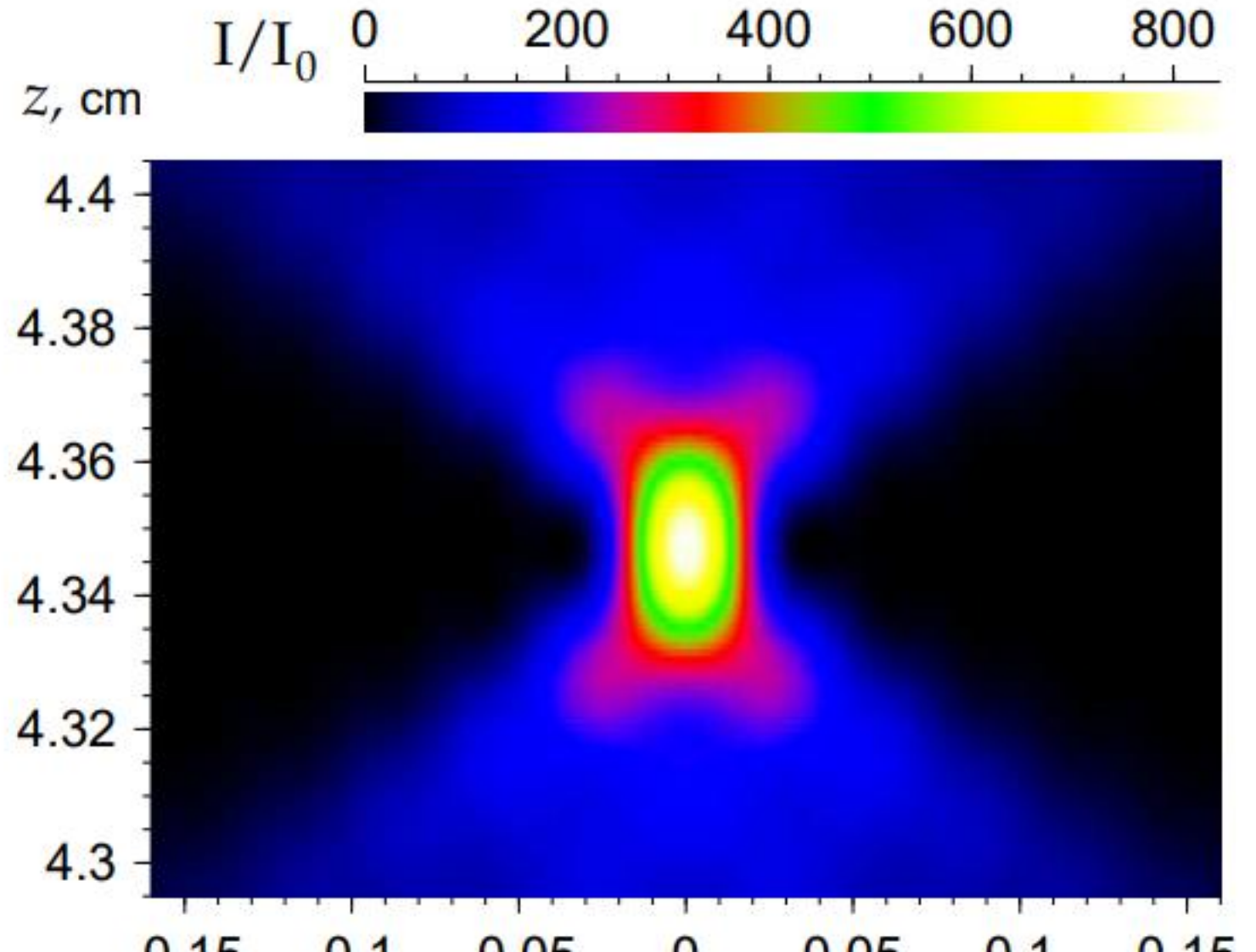
$$A(x, L) = \frac{C_0}{c_L^{1/2}} \exp\left(i\pi \left[c_L - \frac{1}{c_L}\right] \frac{x^2}{x_L^2}\right) A\left(\frac{x}{c_L}, 0\right)$$

$$C_L = \cos(L/L_c), \quad L_c = (p_l R/2\delta)^{1/2}$$

$$E = 50 \text{ keV}, \quad z_0 = 50 \text{ m}, \quad n_l = 300,$$

$$A = 50 \text{ }\mu\text{m}, \quad R = A/8 = 6.25 \text{ }\mu\text{m}, \quad d_l = 2 \text{ }\mu\text{m},$$

$$p_l = d_l + A^2/4R = 102 \text{ }\mu\text{m}$$



КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2022, том 67, № 6, с. 892–899

РЕНТГЕНОВСКИЙ ФАЗОВО-КОНТРАСТНЫЙ МИКРОСКОП: ТЕОРИЯ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

© 2022 г. В. Г. Коn^{1,2,*}

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

² Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия

**E-mail: kohnvict@yandex.ru*

Поступила в редакцию 29.01.2022 г.

После доработки 29.01.2022 г.

Принята к публикации 26.02.2022 г.

Теоретически анализируется новый метод рентгеновской микроскопии с использованием синхротронного излучения. Метод использует идею фазового контраста в ближнем поле и идею нанофокусировки с помощью планарной составной преломляющей линзы, которая создает вторичный источник с малым поперечным размером на небольшом расстоянии от образца. Выполнен компьютерный эксперимент по изображению двумерного фотонного кристалла с периодом 0.5 мкм. Разработана универсальная программа для проведения компьютерных экспериментов в области когерентной рентгеновской оптики. Показано, что метод обладает высоким разрешением, локальностью, большой светосилой и слабо чувствителен к поперечному размеру реального источника синхротронного излучения. Экспериментальная установка может иметь небольшие размеры. Можно получить увеличение изображения более чем в 100 раз.

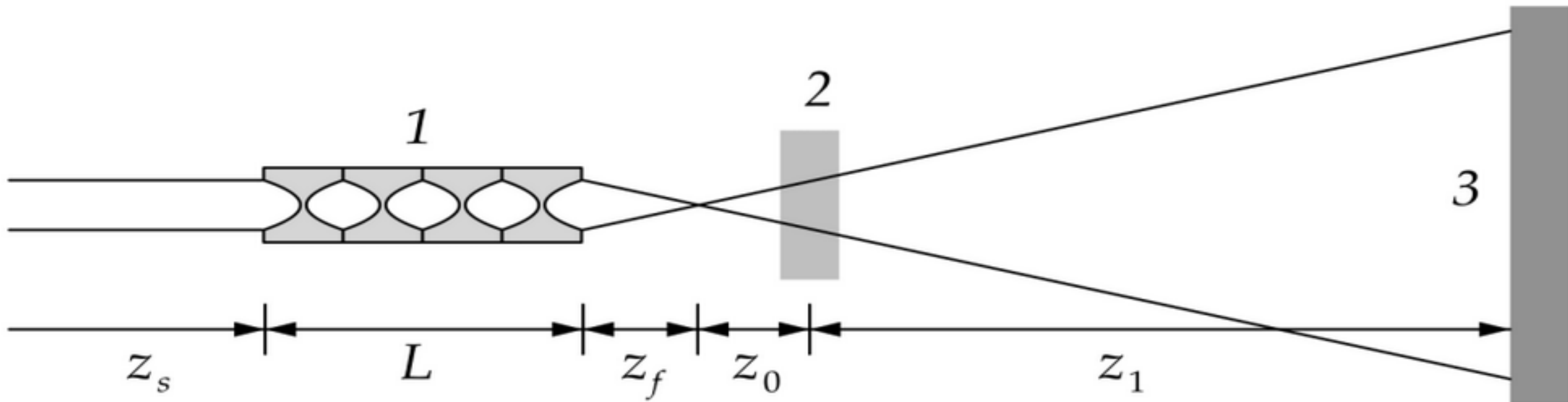
$$A(x, x_s) = P(x - x_s, z_t) a_i(x_i, z_i) \quad (5)$$

$$a_i(x_i, z_i) = \int dx_o P(x_i - x_o, z_i) T(x_o) \quad (6)$$

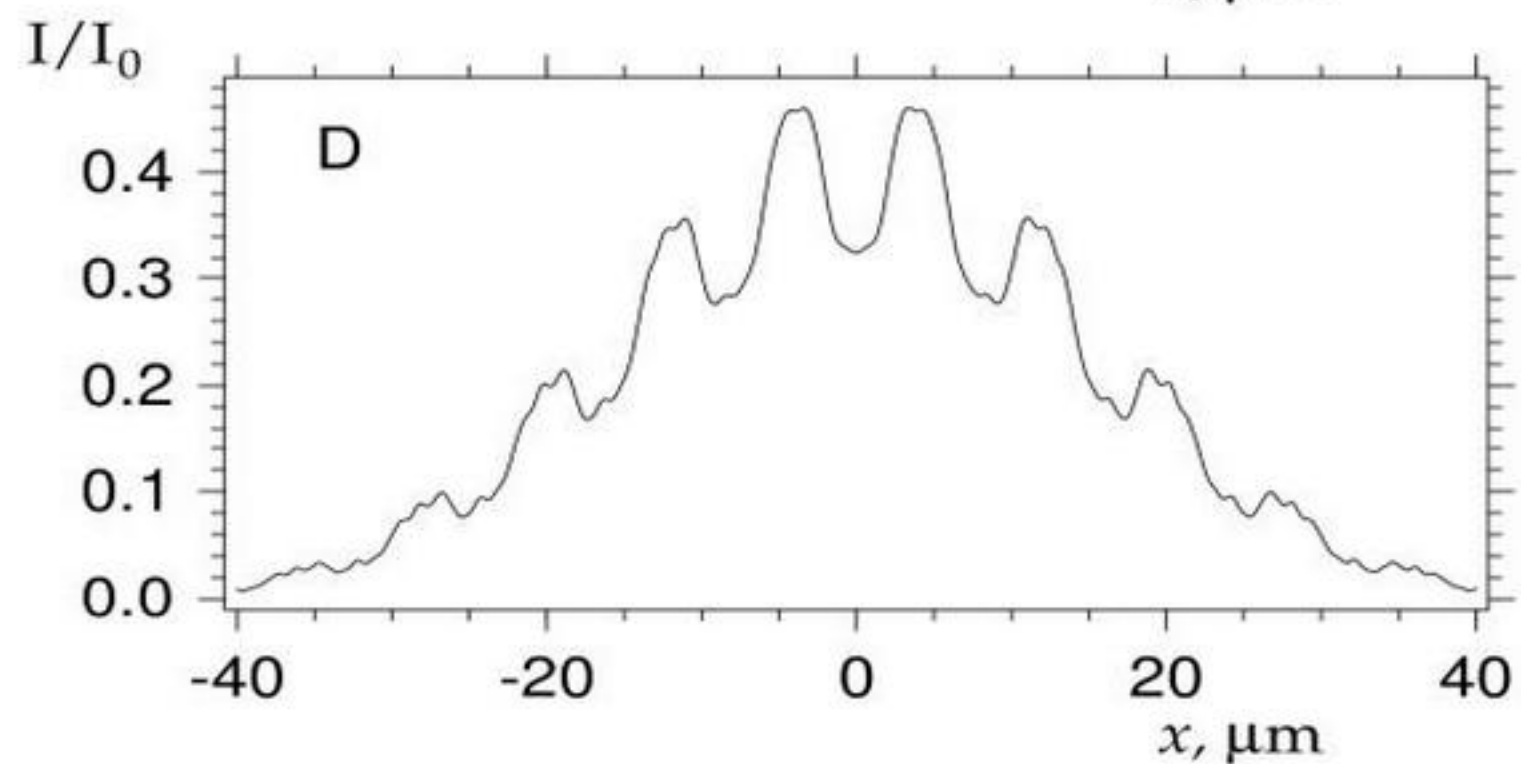
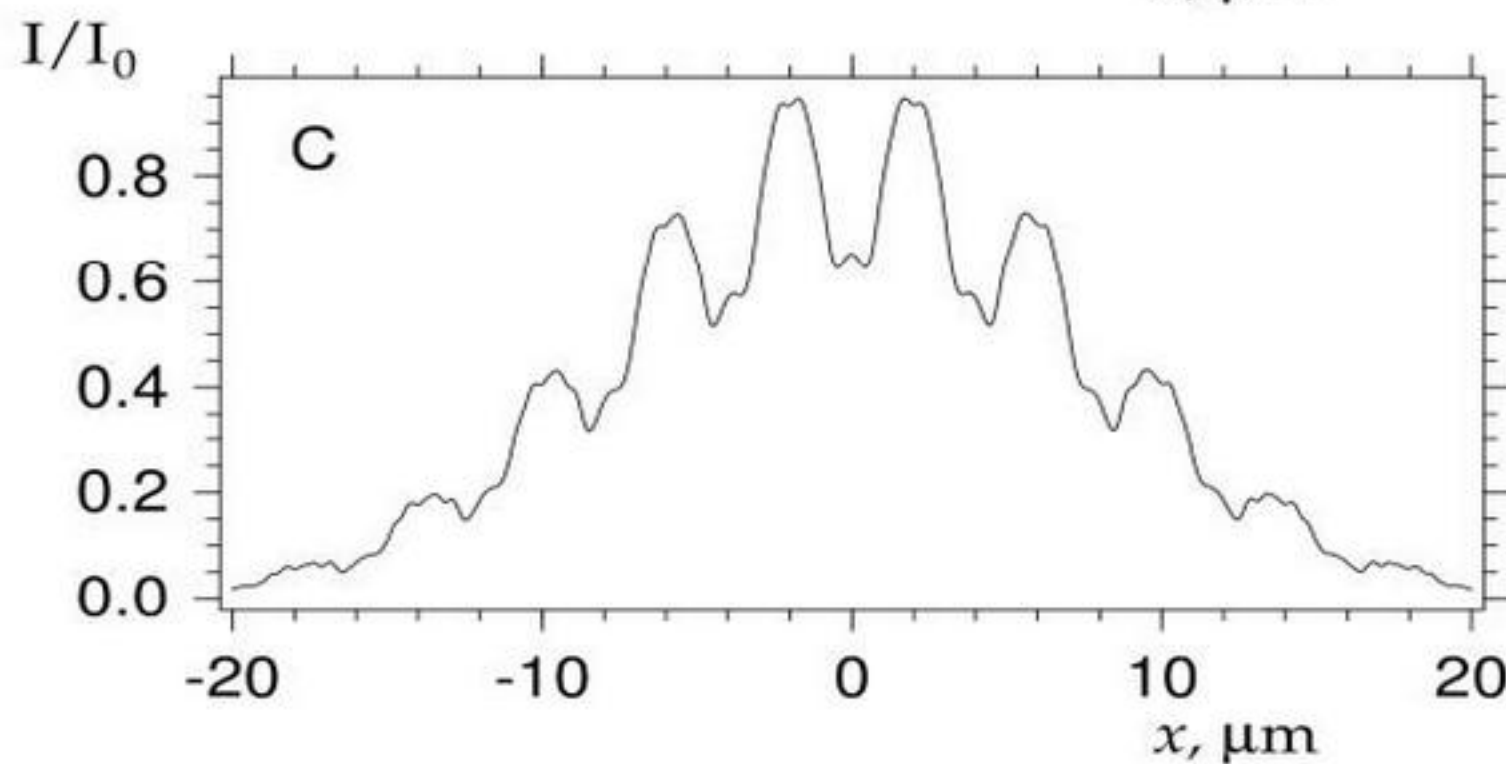
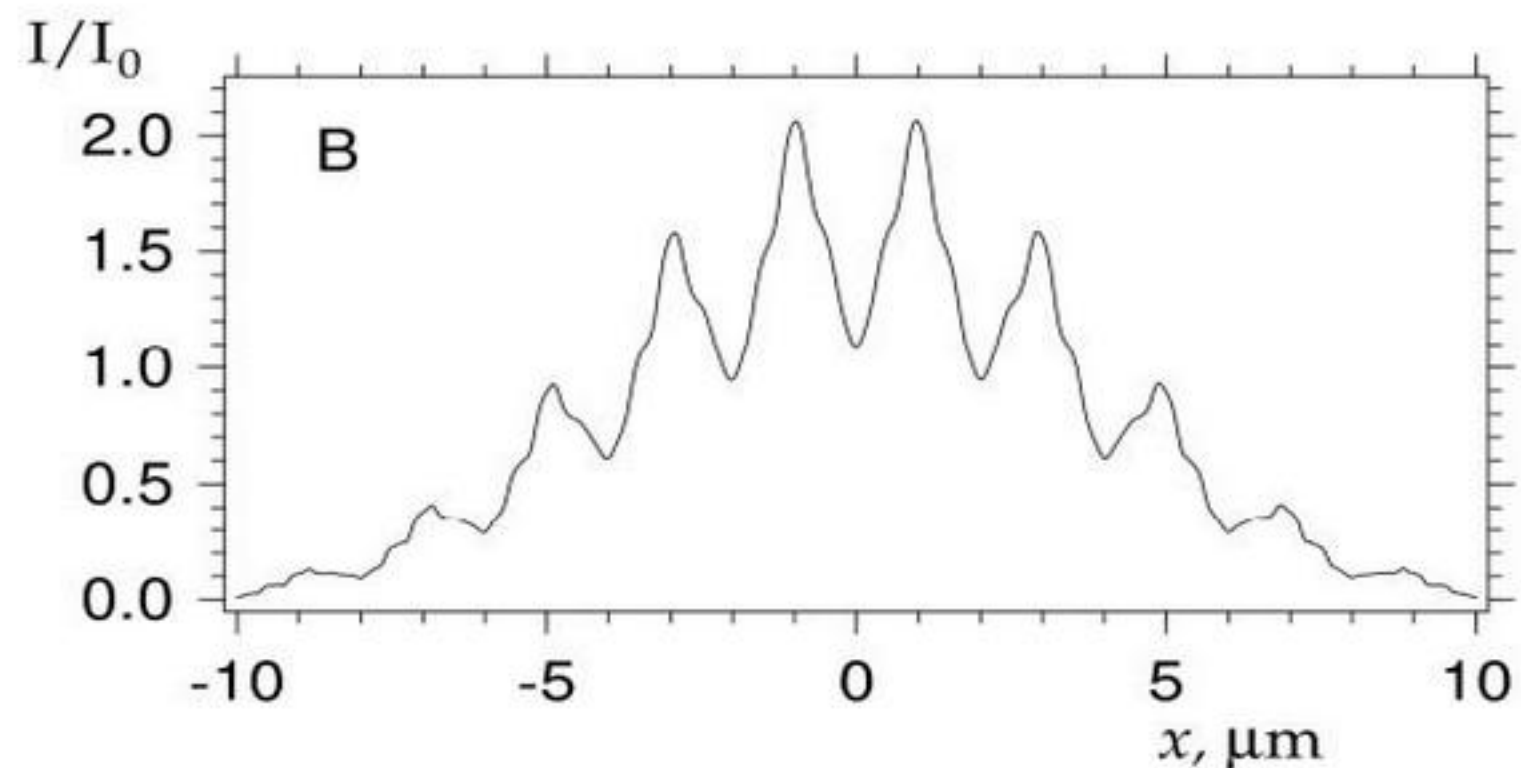
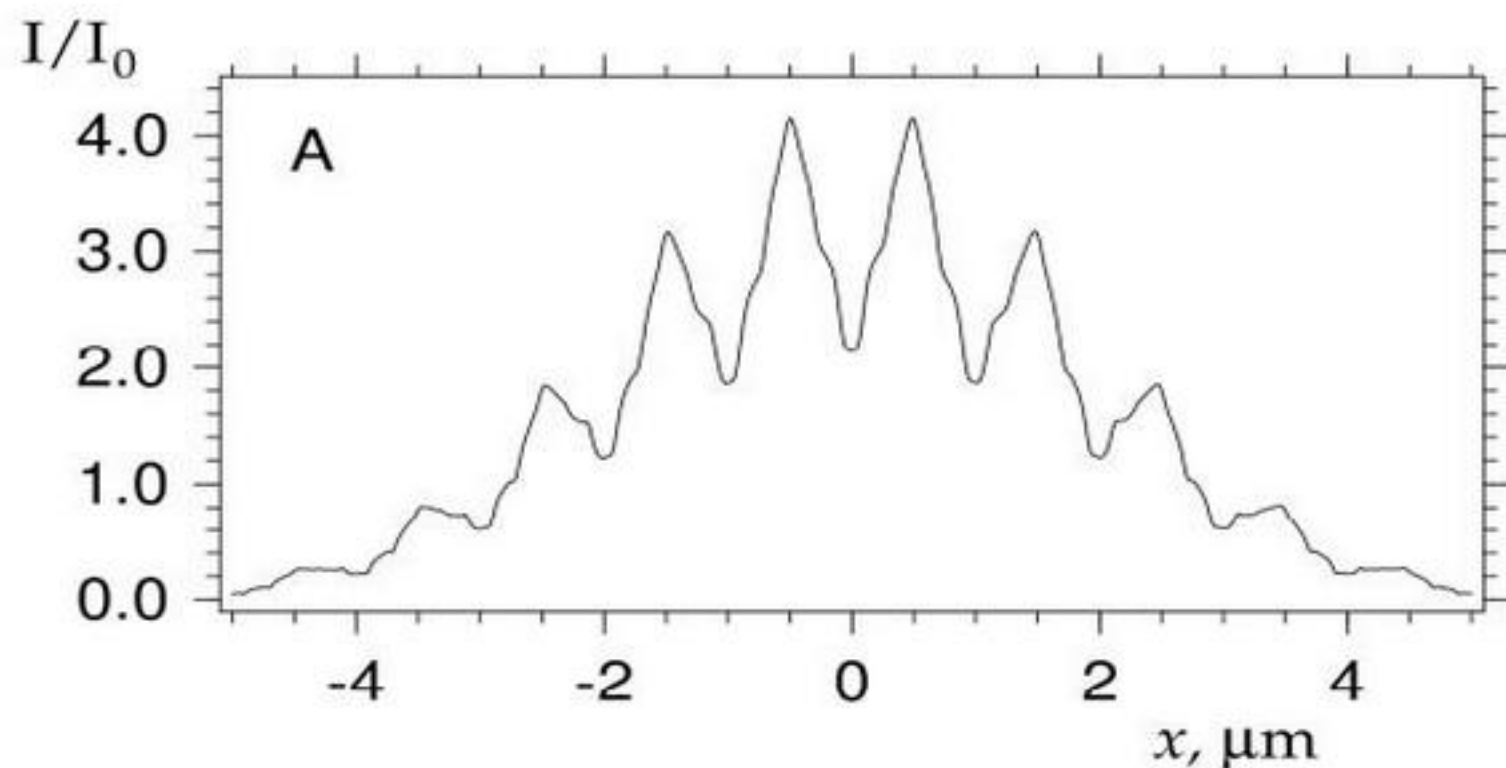
$$z_t = z_0 + z_1, \quad z_i = z_0 z_1 / z_t, \quad x_i = (z_0 / z_t)[x + x_s (z_1 / z_0)] \quad (7)$$

In many investigations (standard) $z_0 \gg z_1$

New approach to experiment $z_0 \ll z_1$



$E = 25$ keV, $z_s = 50$ m, $n_l = 150$, $A = 50$ μm , $R = 6.25$ μm , $d_l = 2$ μm , $p_l = 102$ μm ,
 $z_f = 2.1664$ cm, $L = 1.53$ cm, $z_0 = 0.4$ cm, $z_1 = 0.4$ (A), 1.2 (B), 2.8 (C), 6.0 (D) cm



К ТЕОРИИ ДИФРАКЦИИ ОГРАНИЧЕННЫХ ПУЧКОВ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛЕ В ГЕОМЕТРИИ ЛАУЭ

© 2024 г. В. Г. Кон¹, И. А. Смирнова^{2,*}

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

²Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

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

Поступила в редакцию 25.08.2023 г.

После доработки 12.10.2023 г.

Принята к публикации 27.10.2023 г.

Теоретически исследованы особенности брэгговской дифракции когерентного синхротронного излучения на атомной решетке монокристалла в геометрии Лауэ при условии, что пучок излучения ограничен щелью относительно большого размера, установленной перед кристаллом. Использован метод численного моделирования и получены зависимости распределения интенсивности для разных толщин кристалла. Показано, что края щели вносят неоднородные искажения интенсивности внутри треугольников Бормана с углом $2\theta_B$, где θ_B — угол Брэгга. В области пересечения треугольников распределение интенсивности аналогично таковому при дифракции на щели в воздухе на определенном (большом) расстоянии. Получена формула соответствия расстояния и толщины кристалла, которая хорошо описывает результаты численных расчетов.

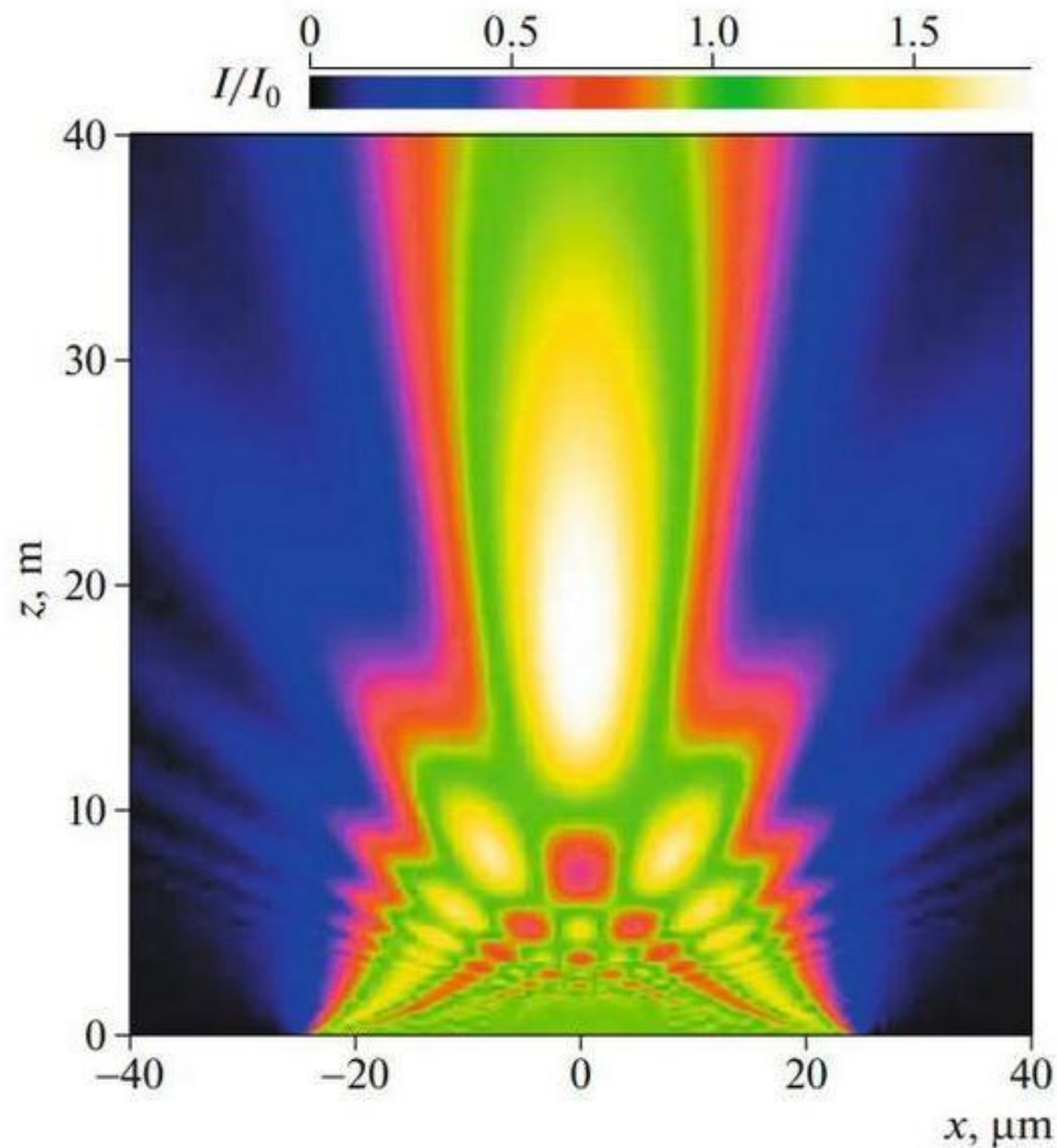


Fig. 3. Dependence on x for the relative SR beam intensity in the region of distances corresponding to the Fresnel diffraction at $d = 50 \mu\text{m}$ and photon energy of 25 keV.

Расчет по программе XRWP
Дифракция плоской волны СИ на щели относительно большого размера показывает признаки фокусировки. То есть щель работает как зонная пластинка с одной зоной. Интенсивность в максимуме почти в 2 раза больше падающей. А расширение пучка происходит не сразу, а на очень больших расстояниях.

Расчет выполнен по программе XRWP
Зависимость интенсивности отраженного пучка от толщины кристалла t_c при дифракции плоской волны, ограниченной щелью. Предполагается идеальная когерентность, то есть источник СИ 4-го поколения.

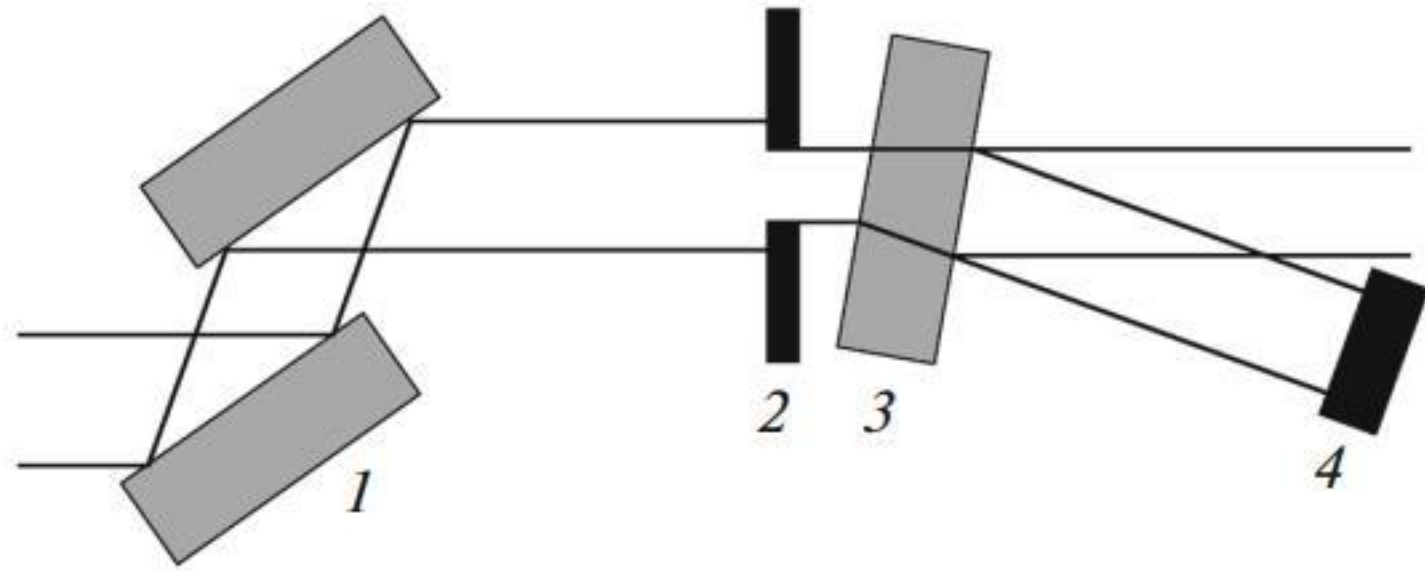


Fig. 1. Part of the experimental scheme (without a source): (1) monochromator, (2) slit, (3) single crystal, and (4) detector.

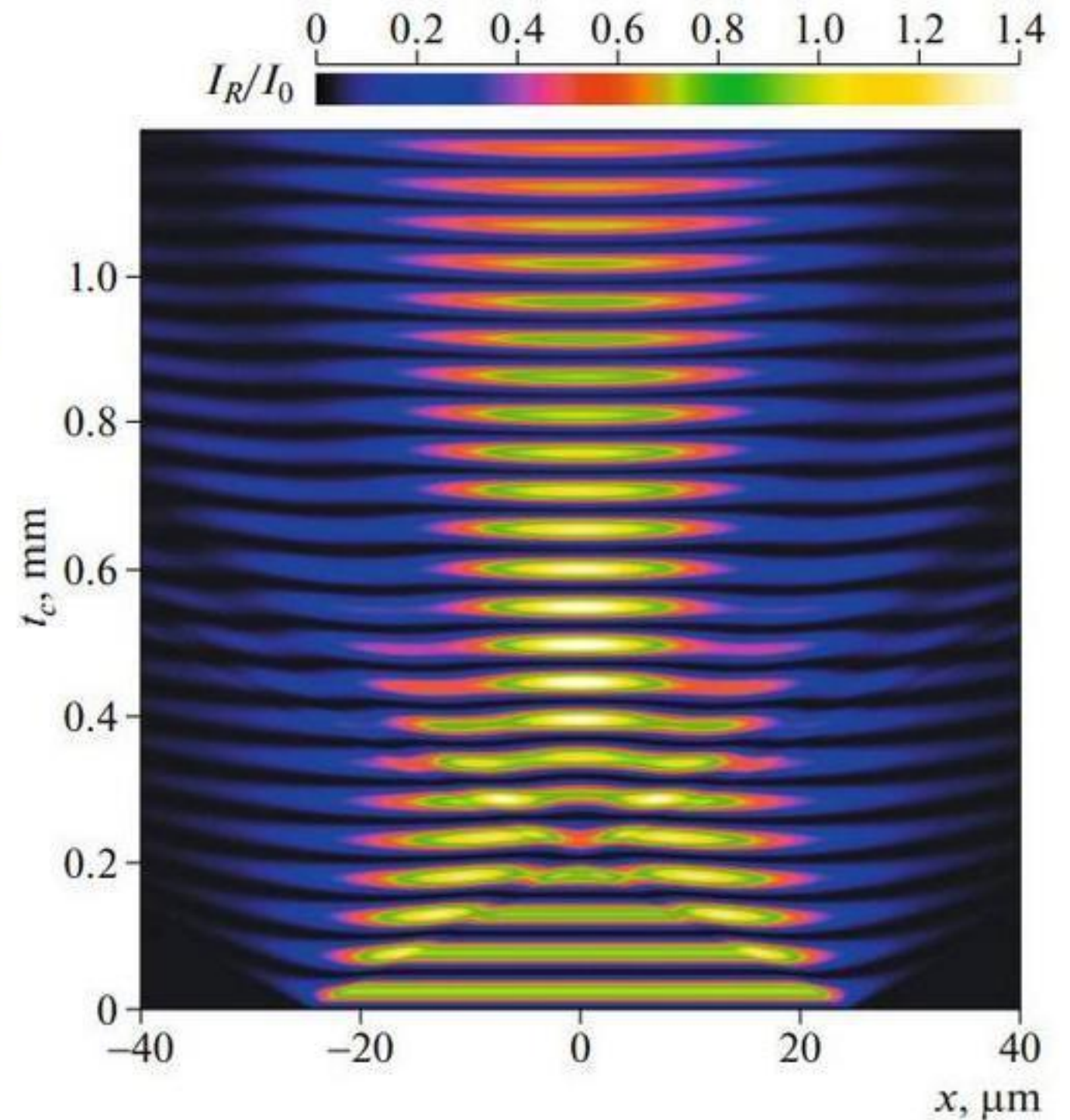


Fig. 4. Dependence on x for the relative intensity of reflected (220) SR beam at diffraction in a silicon single crystal for the range of thicknesses corresponding to the Fresnel diffraction at $d = 50 \mu\text{m}$ and photon energy of 25 keV.

При увеличении размера щели картинка получается при больших толщинах кристалла t_c , причем даже больше фрагментов картины для дифракции на воздухе можно обнаружить. Главный результат данной работы состоит в указании на аналогию дифракции на воздухе и в кристалле с тем отличием, что огромные расстояния (десятки метров) заменяются на толщину кристалла, не более нескольких миллиметров.

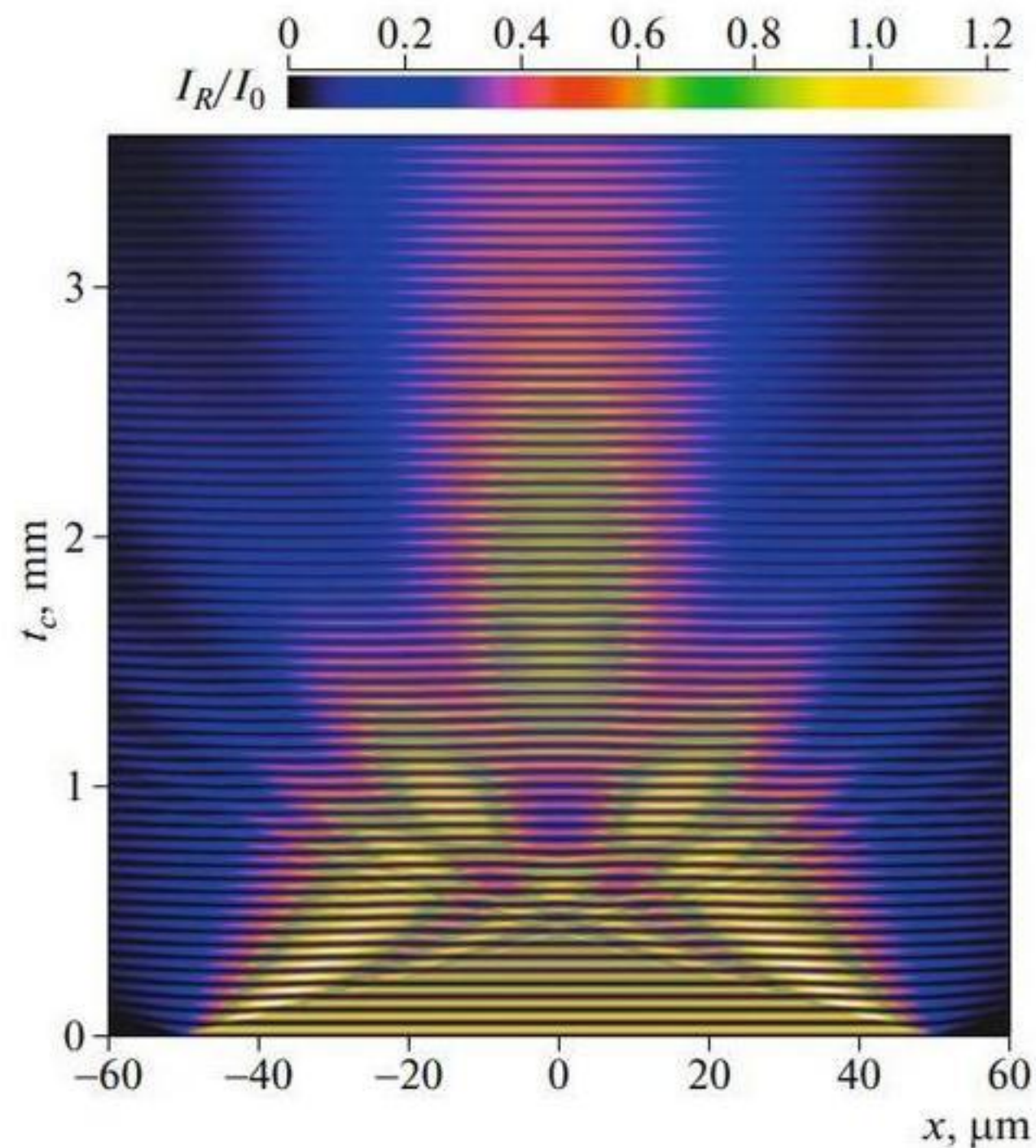


Fig. 5. Dependence on x for the relative intensity of reflected (220) SR beam at diffraction in a silicon single crystal for the range of thicknesses corresponding to the Fresnel diffraction at $d = 100 \mu\text{m}$ and photon energy of 25 keV.

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2024, том 69, № 4, с. 567–574

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

© 2024 г. В. Г. Ко^{1,2,*}

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

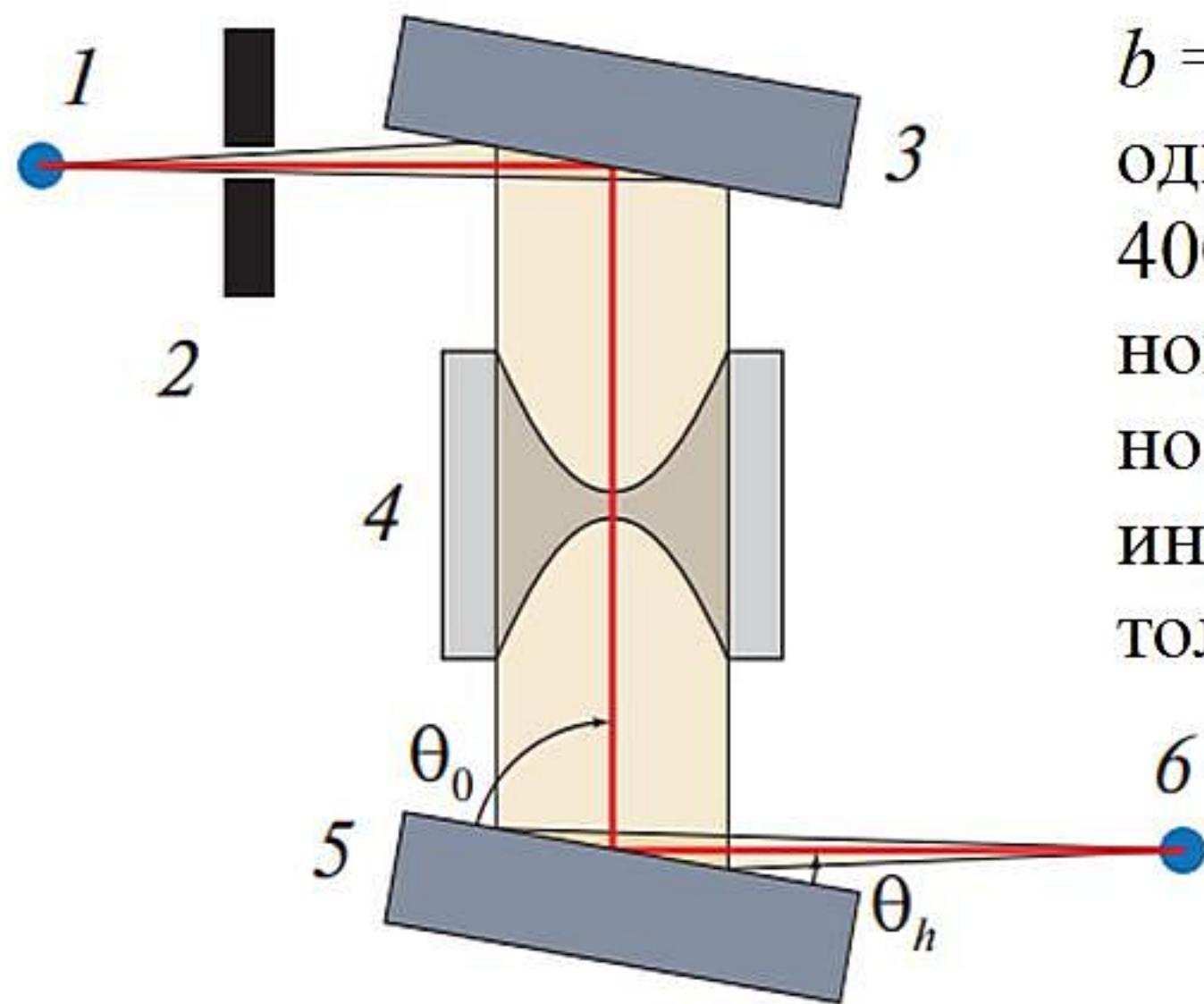
**E-mail: kohnvict@yandex.ru*

Поступила в редакцию 31.08.2023 г.

После доработки 25.09.2023 г.

Принята к публикации 25.09.2023 г.

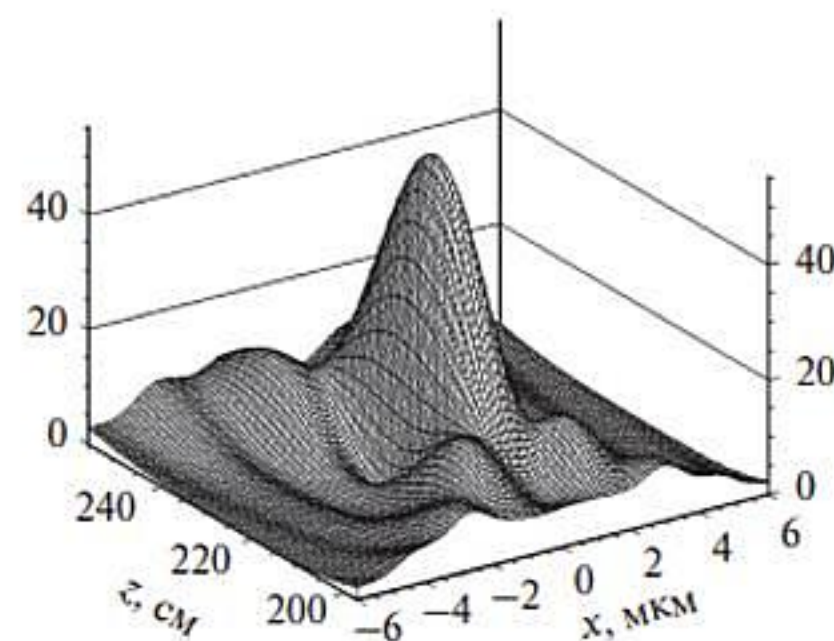
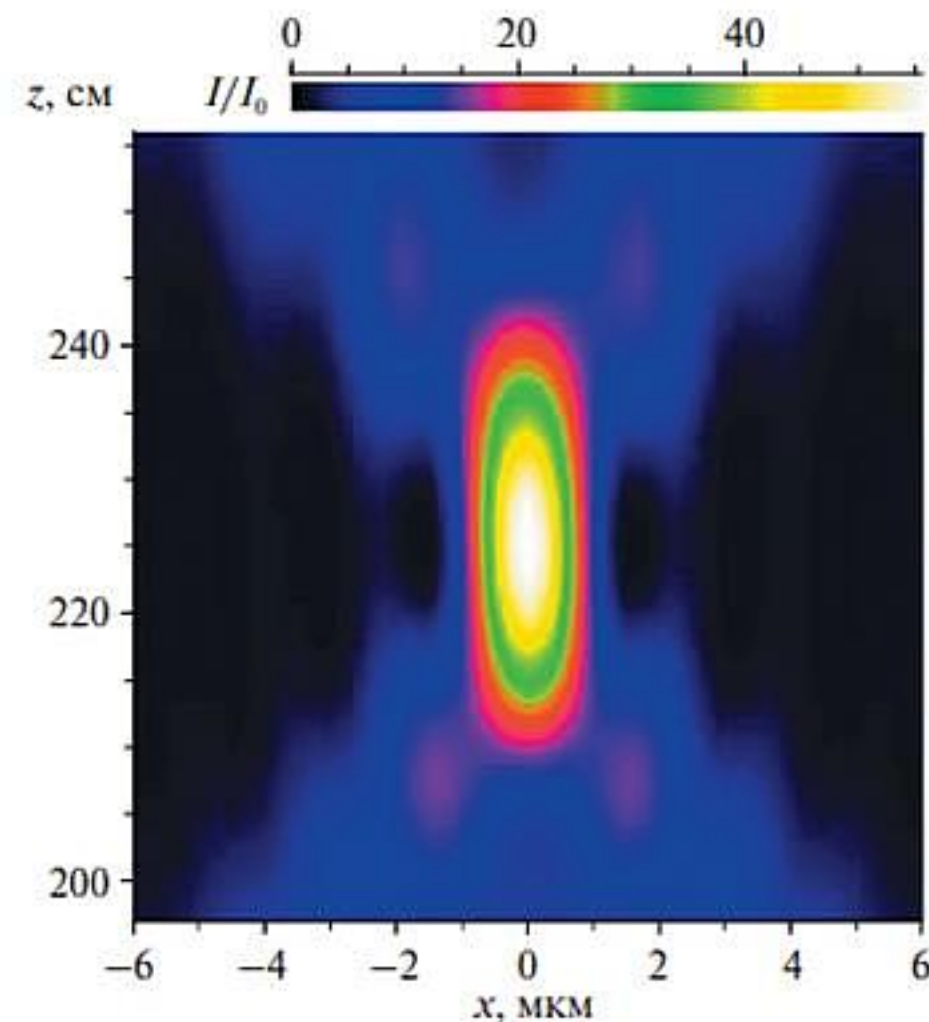
Теоретически исследуются особенности фокусировки рентгеновских лучей с помощью рефракционно-дифракционной линзы, состоящей из двух асимметрично отражающих кристаллов с факторами асимметрии, произведение которых равно единице, и преломляющей линзы с большим фокусным расстоянием. Кристаллы позволяют сократить 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.



$b = \sin\theta_0/\sin\theta_h = 20$
 одна линза заменяет
 400 линз по фокус-
 ному расстоянию,
 но увеличение
 интенсивности
 только в 50 раз.

Расчет выпол-
 нен по прог-
 рамме XRWP

Рис. 1. Схема эксперимента: 1 — точечный источник, 2 — щель, ограничивающая пучок, 3 — первый кри-
 сталл, расширяющий пучок, 4 — линза, фокусирую-
 щая пучок, 5 — второй кристалл, сжимающий пучок,
 6 — фокус, т.е. место, где пучок становится вторич-
 ным источником.



XRWP, Choose operation

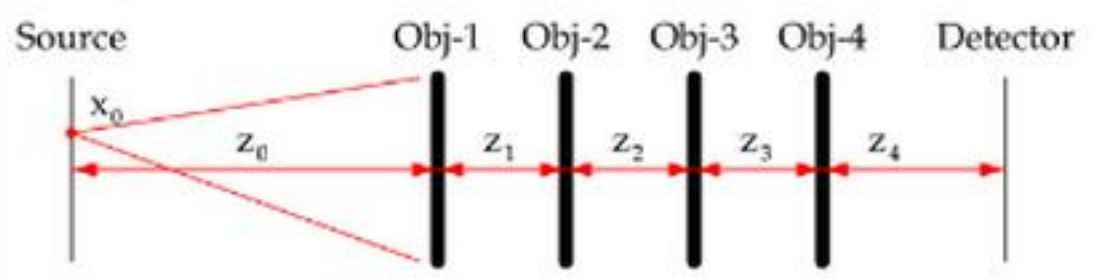
Game rules (read first)	1	q3d figure of 2D data	A
Input Data (main)	2	axon figure of 2D data	B
Input Data (other)	3	Choose ID main	C
Choose ID total	4	Other problems solution	D
Computing 1D	5	Help Operations	E
Input+Computing 1D	6	Picture Viewer	F
Computing 2D	7	Make PicMatrix	G
Input+Computing 2D	8	Calculations by Code	H
Animation of 2D data	9	Make pdf from data	I
Color map of 2D data	0	Exit	J

Web site Proza Programs Photo shows Literature YouTube V kontakte Slide shows

To read the site in other language please

XRWP is a short name for **X-Ray Wave Propagation**

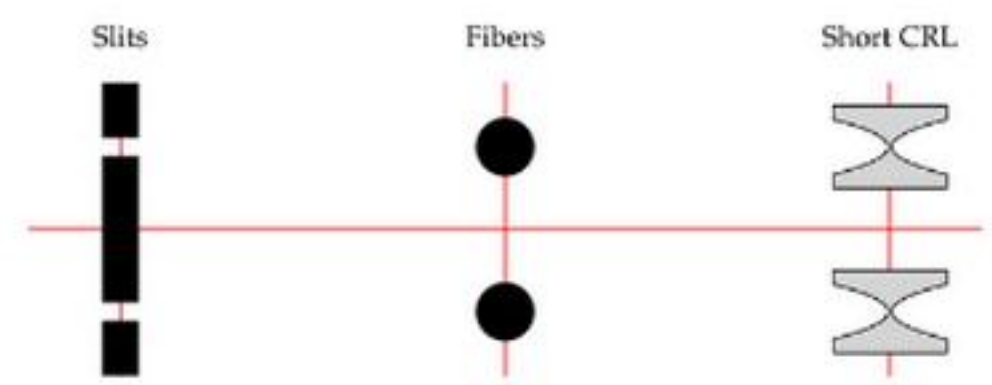
In-Line Setup, FFT is used for computing the space propagation, Objects are taken into account by means of various methods



Point source is defined by 2 parameters: x_0 and z_0
If $z_0 = 0$, wave function in front of Obj-1 should be determined in the file. That allows one to continue computing further.

Objects definitions. They are defined in separate files.

Several objects are described by a transmission function (TF)
 $T(x) = \exp(C \cdot t(x))$, where C is a complex value, which takes into account radiation and material properties, while $t(x)$ is a thickness profile.
Such objects may have many elements of the same kind at the same distance.



X-Ray Wave Propagation

универсальная программа рентгеновской оптики для СИ и XFEL

На данном сайте представлена новая версия (06-05-2023) программы XRWP. Она вычисляет распределение интенсивности в пучке рентгеновского синхротронного излучения (СИ), а более конкретно, в поперечном его сечении, которое измеряется координатным детектором после того, как пучок прошел через серию объектов, расположенных между источником и детектором на разных расстояниях внутри станции источника СИ или на станции рентгеновского лазера на свободных электронах (x-ray free electron laser, XFEL). Программа работает как с двумерными объектами, у которых спектральная плотность меняется только по осям x и z , а по

**БЛАГОДАРЮ
ЗА
ВНИМАНИЕ**