

*О. М. Кутькин<sup>1\*</sup>, Г. Д. Довженко<sup>2</sup>*

## **Расчет оптических свойств монохроматора с помощью трассировки лучей**

<sup>1</sup> Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск,  
Российская федерация

<sup>2</sup> ЦКП «СКИФ», Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН г. Новосибирск,  
Российская Федерация

\*e-mail: kutkino@list.ru

**Аннотация.** При проектировании станции синхротронного излучения (СИ) для фокусировки широкого вигглерного пучка, можно использовать монохроматор с изгибаемыми кристаллами. Несмотря на известное [2] аналитическое описание таких систем, для изготовления и оптимизации систем станции требуется произвести моделирование методом трассировки лучей. Для этого был использован пакет xrt [8], в дополнение к которому был написан набор компонент на языке Python. Результаты моделирования подтверждают формулы [2] в большинстве случаев, однако для плоскопараллельных пучков и кристаллов большой толщины моделирование дает более точные результаты. Это необходимо учитывать при проектировании станции, задачей которой является сфокусировать пучок высокоэнергетического рентгеновского излучения в микрообъем.

**Ключевые слова:** синхротронное излучение, изогнутый кристалл, монохроматор

*О. М. Kutkin<sup>1\*</sup>, G. D. Divzhenko<sup>2</sup>*

## **Calculation of the Optical Properties of a Monochromator Using Ray Tracing**

<sup>1</sup> Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, Russian Federation

<sup>2</sup> Siberian Circular Photon Source “SKIF”, Borekov Institute of Catalysis SB RAS (SRF “SKIF”),  
Novosibirsk, Russian Federation

\*e-mail: kutkino@list.ru

**Abstract.** A monochromator with curved crystals can be used when designing a synchrotron radiation (SR) station for focusing a wide wiggler beam. In spite of the known [2] analytical description of such systems a ray-tracing simulation is required to fabricate and optimize the station systems. For this purpose the package xrt [8] was used in addition and a set of components in Python was written. The simulation results confirm the formulas [2] in most cases but the simulation gives more accurate results for plane-parallel beams and crystals of great thickness. This should be taken into account when designing a station for focusing a beam of high-energy X-rays into a microvolume.

**Keywords:** synchrotron radiation, bend crystal, monochromator

### ***Введение***

В настоящее время в Кольцово строится источник синхротронного излучения (СИ) поколения 4+ – Сибирский Кольцевой Источник Фотонов (СКИФ), которых вызывает интерес многих научных групп в связи с перспективой проведе-

ния на нем уникальных экспериментов. Ниже приведены примеры некоторых задач, решение которых будет возможно с использованием этого источника:

- неразрушающий контроль, позволяющий визуализировать качество 3D-наноструктур с целью оптимизации литографического процесса, аттестация электроники, используемой в критически важном оборудовании и др.;
- исследование структур, формирующихся в сплавах (в том числе авиакосмических) в процессе лазерной сварки аддитивного производства [1];
- исследование процессов глубинного минералообразования и рудообразования при высоких давлениях и температурах;
- поиск новых сверхтвердых, высокоэнергетических и других функциональных материалов, модификация функциональных материалов в условиях высоких давлений и температур;
- получение информации о химическом строении, фазовом составе и морфологии синтезированных или отработанных катализаторов.

Новосибирский государственный технический университет (НГТУ) принимает активное участие в проектировании СКИФ. Ранее научным коллективом НГТУ в коллаборации с другими соавторами был подготовлен концептуальный проект станции Материя [2], в настоящее время разрабатывается концептуальный проект вигглерной станции для материаловедческих задач. Частью этой работы является разработка возможности фокусировки вигглерного пучка в микрообъем. В связи с этим в оптической схеме необходимо использовать соответствующие фокусирующие элементы, одним из которых является монохроматор с изогнутыми кристаллами.

Существующая модель расчета фокусного расстояния изогнутого кристалла, описываемая аналитическими формулами [3], обладает недостаточной точностью для проработки оптической схемы станции.

Исходя из этого положения, в рамках проектирования станции для источника СИ возникла задача определения фокусного расстояния изогнутых кристаллов с использованием трассировки лучей.

### ***Постановка задачи численного моделирования***

#### ***Монохроматор как оптический элемент***

Оптические приборы, используемые на станциях источников СИ, работают с пространственными и спектральными характеристиками пучка. Монохроматор является устройством, используемым для выделения излучения с требуемой монохроматичностью ( $\Delta E / E$ ) из предоставляемого спектра. Различают белый спектр из источника, обработанный фильтрами, при наличии, и розовый – полученный на выходе зеркального монохроматора.

Монохроматоры различают по оптическим материалам: многослойные зеркала и кристаллы (рис. 1); по геометрии отражения: Лауэ и Брэгга (рис. 2); по фиксации положения излучения на выходе и другим параметрам.

Процесс монохроматизации на кристалле можно рассмотреть, используя теорию дифракции Лауэ [4]. Согласно ей, направление дифракционного пучка,

соответствующего интерференционному максимуму, всегда должно получаться путем отражения падающего пучка лучей на одном из семейства плоскостей решетки и должно соблюдаться условие:  $2d \sin \theta = m\lambda$  – именуемое также законом Вульфа-Брэгга. В качестве кристаллов используются германий, кремний, алмаз. Степень монохроматичности для различных материалов отличается: для многослойных зеркал она составляет  $\sim 10^{-4}$ , а для кристаллов она составляет  $\sim 10^{-6}$ . Следует отметить, что, исходя из решаемых задач, используют монокристаллы с различными ориентациями.

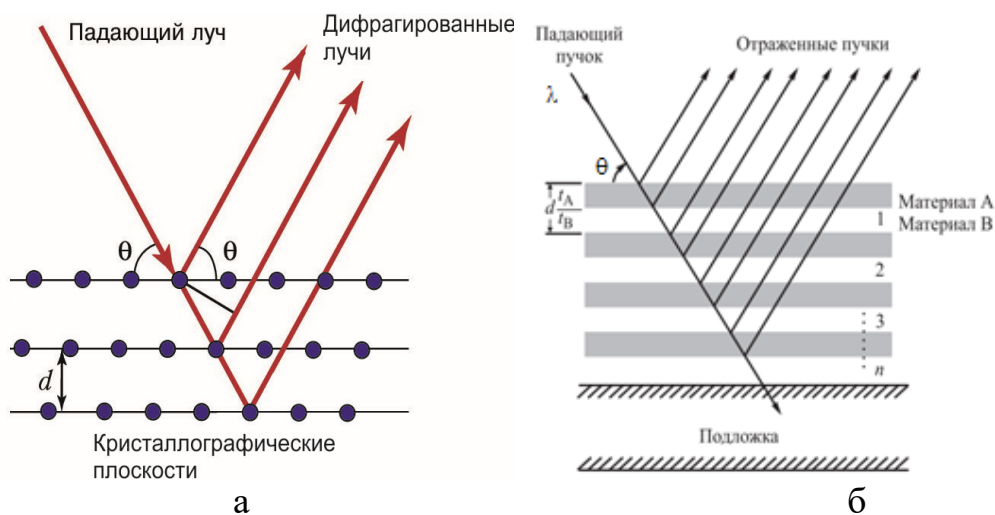


Рис. 1. Дифракция на кристалле (а), дифракция на многослойном зеркале (б)

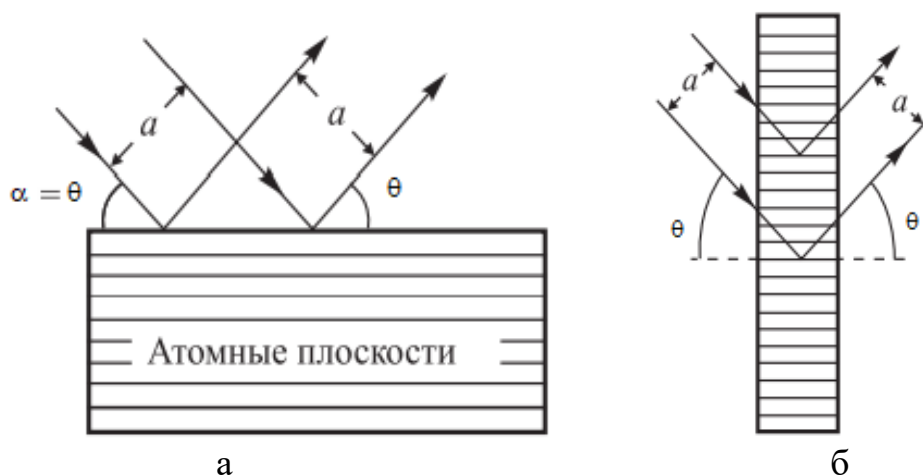


Рис. 2. Отражение в геометрии Брэгга (а), отражение в геометрии Лауэ (б)

В данной работе представлен расчет для монохроматора в геометрии Лауэ с изгибаемыми кристаллами. То есть он изменяет и спектральные, и пространственные параметры пучка синхротронного излучения. Данный монохроматор имеет два набора кристаллов с регулируемым изгибом. Один набор с сагиттальным изгибом (рис. 3) для создания сфокусированного пучка и другой с мериди-

ональным для создания широкого монохроматического пучка. Существует возможность изменения фокусного расстояния посредством регулировки радиуса изгиба.

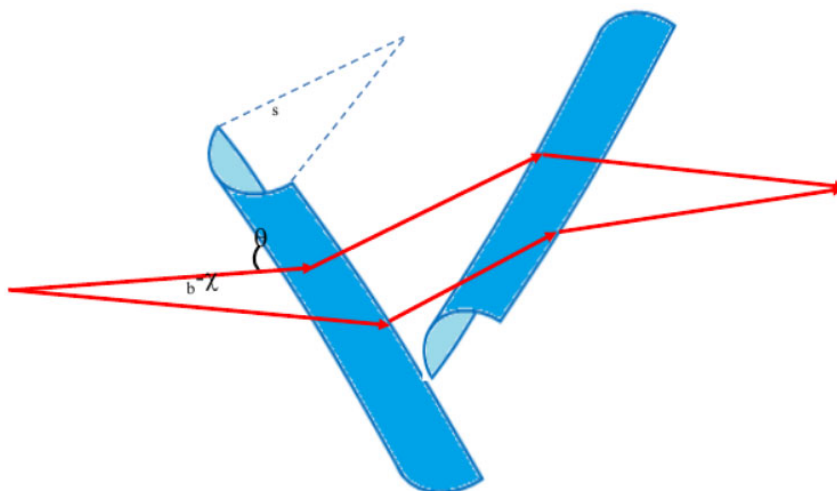


Рис. 3. Схема с сагиттальной фокусировкой и использованием двух кристаллов [5]

### *Расчет фокуса изогнутых кристаллов*

В качестве аналитической формулы использовалась формула, полученная Чуковским и Крисшем [2]. Авторами утверждается, что уравнение линзы для оптики с использованием дифракции Брэгга отличается от подобного уравнения для видимого излучения.

Для описания отражения сферической монохроматической волны на изогнутом кристалле используется выражение:

$$\frac{\cos \phi_0 + |\cos \phi_H|}{R} = \frac{\cos^2 \phi_0}{L_0} + \frac{\cos^2 \phi_H}{L_H},$$

где  $\phi_H = (\vec{n}, \vec{k}_H)$ ,  $\phi_0 = (\vec{n}, \vec{k}_0)$  – направляющие косинусы между внутренней нормалью поверхности и волновыми векторами  $\vec{k}_0$  и  $\vec{k}_H$  соответственно;  $\vec{k}_H = \vec{k}_0 + \vec{h}$  – волновой вектор для дифрагированного луча;  $\vec{h}$  – вектор обратной решетки;  $L_0$  – расстояние до источника;  $L_H$  – расстояние от фокуса до изогнутой поверхности кристалла;  $R$  – радиус кривизны.

Применяется правило знаков следующим образом. Радиус изгиба считается положительным, если падающий пучок находится с вогнутой стороны кристалла; фокусный отрезок  $L_H$  – положительный, если действительное изображение находится на одной стороне с падающим пучком. Случай Лауэ же может быть рассмотрен в приближении тонкой линзы, где влиянием толщины кристалла пренебрегают.

## Расчет с использованием программы для трассировки лучей

Существует множество различных по своему функционалу программ для расчетов оборудования на источниках СИ. Для оптической части станции чаще используются: хор [6], Oasys [7], xrt [8]. Для текущих задач выбрали xrt по причине открытого исходного кода и возможности дополнительно писать требуемые для конкретных задач пакеты на языке Python. Xrt позволяет рассматривать луч от формирования в источнике излучения с первичными характеристиками (радиус-вектор, фаза, поляризация, энергия и др.) до нужного элемента. Это позволяет рассмотреть все известные процессы, происходящие с излучением по мере прохождения элементов для достижения поставленных целей. Моделирование осуществляется классической трассировкой лучей и использованием модели распространения волн в соответствии с интегралами Кирхгофа без параксиального приближения и приближения тонкой линзы.

Для решения поставленной задачи на языке Python с помощью библиотеки xrt была составлена оптическая схема планируемой станции, включающая в себя: источник излучения, апертуру фронтенда, два изгибаемых кристалла монохроматора, выходные щели и экраны для снятия показаний. Был написан соответствующий скрипт для серийного моделирования при различных режимах работы монохроматора: различных энергий выходного излучения и изгиба. Пример данных, полученных после моделирования, показан на рис. 4. Для расчета коэффициента отражения программой решались уравнения Такаги-Тапина [9–11].

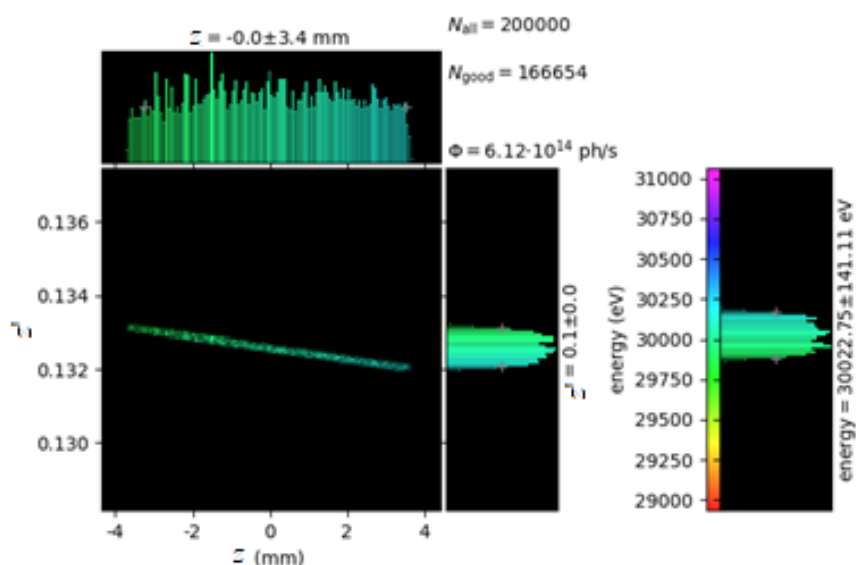


Рис. 4. Пример данных с экрана, полученных при моделировании в программе xrt

Для обработки данных дополнительно был написан модуль, позволяющий рассчитать фокусное расстояние. В ходе этой работы также была решена задача определения точки пересечения двух лучей, у которых известны направляющие косинусы. Ниже приведен процесс решения.

Зададим два луча:  $f_1 = \frac{y_1 - y_f}{z_f} z + c$  и  $f_2 = \frac{y_2 - y_f}{z_f} z + d$  (рис. 5).

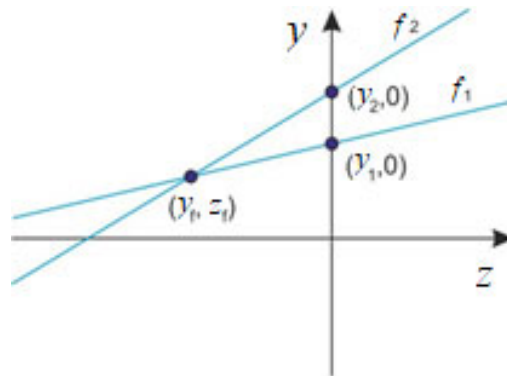


Рис. 5. Заданные лучи на плоскости

Из моделирования получено  $\frac{dy}{dz} = ky + b$ . Используя это, зададим лучи другим способом  $f_1 = (ky_1 + b)z + c$ ,  $f_2 = (ky_2 + b)z + d$  и запишем систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{y_1 - y_f}{z_f} z + c = (ky_1 + b)z + c \\ \frac{y_2 - y_f}{z_f} z + d = (ky_2 + b)z + d \end{cases},$$

$$\begin{cases} \frac{y_1 - y_f}{z_f} = ky_1 + b \\ \frac{y_2 - y_f}{z_f} = ky_2 + b \end{cases}.$$

Произведем сложение и вычитание уравнений:

$$\begin{cases} \frac{y_1 - y_f}{z_f} + \frac{y_2 - y_f}{z_f} = ky_1 + b + ky_2 + b \\ \frac{y_1 - y_f}{z_f} - \frac{y_2 - y_f}{z_f} = ky_1 + b - ky_2 - b \end{cases}.$$

Решая, получим:

$$\begin{cases} z_f = \frac{1}{k} \\ y_f = \frac{b}{k} \end{cases}$$

Исходя из этого, фокусное расстояние от начала координат равно:

$$f = \sqrt{\frac{1}{k^2} + \left(\frac{b}{k}\right)^2}.$$

Результаты моделирования приведены на рис. 6. Размеры пучка в фокусе показаны на рис. 7.

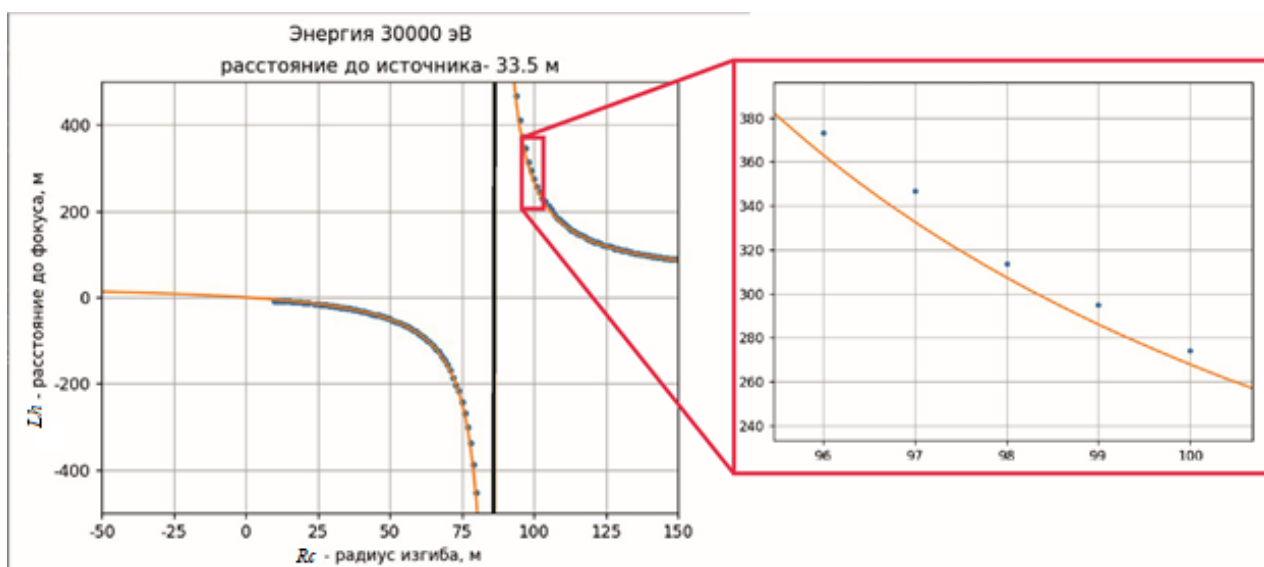


Рис. 6. График зависимости расстояния до фокуса от радиуса изгиба (положительный радиус вдоль оптической оси, отрицательный против). Синими точками отмечены результаты моделирования; оранжевой линией – расчет по аналитической формуле; толстая черная линия – асимптота графика

### **Обсуждение и выводы**

Как было указано в статье Guigay [11], результаты моделирования совпадают с аналитической зависимостью до значений изгиба, при которых падающий на поверхность пучок можно считать не расходящимся, а плоским. По мере приближения к вертикальной асимптоте (отмеченной на рисунке) разница между фокусным расстоянием, полученным из моделирования и из формулы, увеличивается. Причиной этого является то, что рассмотрение аналитической формулы в геометрии Лауэ ограничено случаем очень тонких кристаллов (меньше 0,1 мм). А в данной работе использовались кристаллы кремния толщиной 4 мм и с большим углом асимметричного среза (35,3°).

В ходе работы были отмечены преимущества моделирования с использованием трассировки в области асимптотики. Такое моделирование позволяет рассматривать поведение излучения после взаимодействия с толстыми кристаллами ( $>0,1$  мм). Эти кристаллы важны для высокоэнергетических приложений, так как интенсивность отраженного пучка прямо пропорциональна толщине кристалла для высоких энергий.

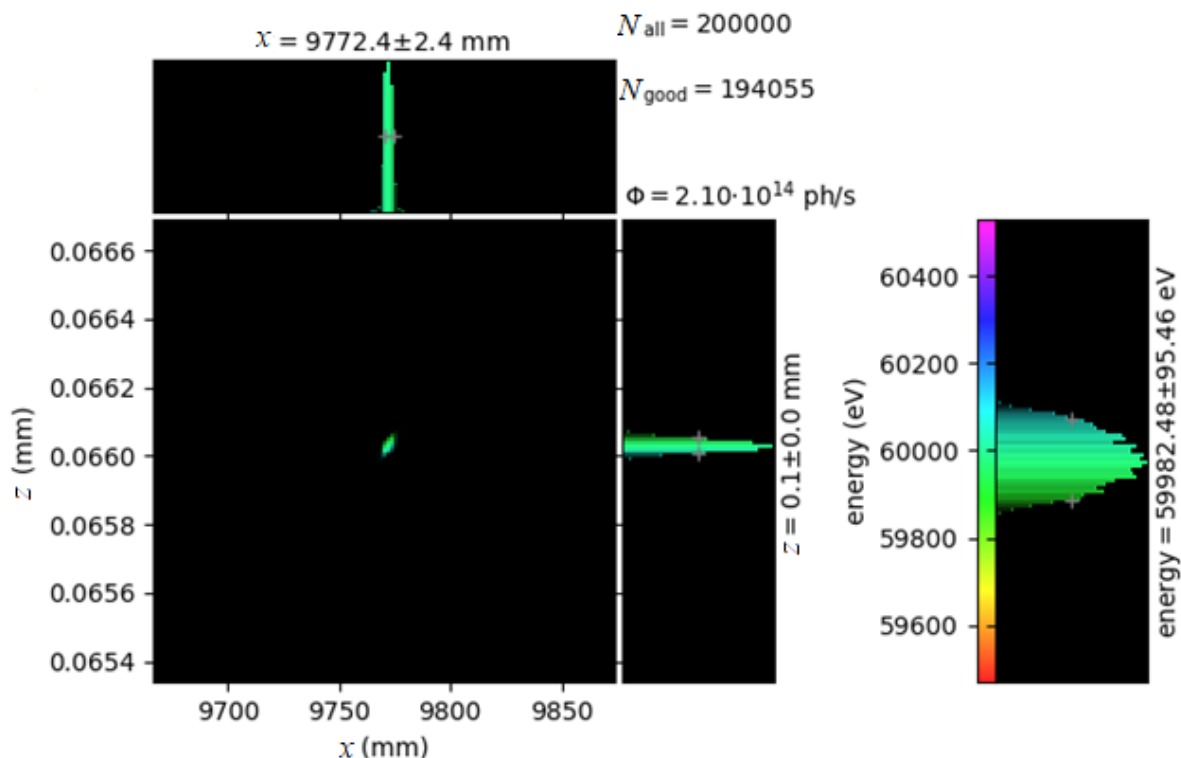


Рис. 7. Данные с экрана в фокусе первого кристалла (148 м) при  $E=60$  кэВ и радиусе изгиба 110 м

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Barriobero-Vila P., Gussone J., Haubrich J., Sandlöbes S., Da Silva J. C., Cloetens P., Schell N., Requena G. Inducing Stable  $\alpha + \beta$  Microstructures during Selective Laser Melting of Ti-6Al-4V Using Intensified Intrinsic Heat Treatments // *Materials*. – 2017 – Т. 10, № 3. – P. 268.
2. Chernov V. A., Bataev I. A., Rakshun Y. V., Khomyakov Y. V., Gorbachev M. V., Chkhalo N. I., Krasnorutskiy D. A., Naumkin V. S., Sklyarov A. N., Mezentsev N. A., Korsunsky A. M., Dolbnya I. P. A concept of “materials” diffraction and imaging beamline for SKIF: Siberian circular photon source // *Rev. Sci. Instrum.* – 2023, Т. 94.
3. CHUKHOVSKI F. N., KRISCH M. The Lens Equation for Bragg Diffraction Optics. The General Case of Asymmetrical Reflection // *J. Appl. Cryst.* – 1992. – V. 256. – P. 211–213.
4. FRIEDRICH W., KNIPPING P., LAUE M. Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen // *Bayerische Akad. d. Wiss. zu Munchen, Sitzungsber. math.-phys.* – 1912. – P. 303–322.
5. Zhong Z., Kao C.C., Siddons D.P. Zhong H., Hastings J.B. A lamellar model for the x-ray rocking curves of sagittally bent Laue crystals // *Acta Crystallographica Section A: Foundations of crystallography*. – 2003. – V. 59, №1. – P. 1–6.
6. Sanchez del Rio M., Dejus R. J. Status of XOP: v2.4: recent developments of the x-ray optics software toolkit // *SPIE Proceedings*. – 2011. – V. 8141. – P. 814115.



7. Rebuffi L., Sanchez del Rio M. OASYS (OrAnge SYnchrotron Suite): an open-source graphical environment for x-ray virtual experiments // Proc. SPIE. – 2017. – V. 10388, № 103880S.
8. Klementiev K., Chernikov R. Powerful scriptable ray tracing package xrt // Proc. SPIE 9209, Advances in Computational Methods X-Ray Optics. – 2014. – V. 3, № 92090A.
9. Takagi S. Dynamical theory of diffraction applicable to crystals with any kind of small distortions // Acta Cryst. – 1962. – V. 15. – P. 1311–1312.
10. Takagi S. A dynamical theory of diffraction for a distorted crystal // J. Phys. Soc. Japan - 1969. – V. 26, №.5. – P. 1239–1253.
11. Taupin D. Th´eorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux d’eform´es // Bull. Soc. Fran,c Min´er. Crist. – 1964. – V. 87. – P. 469–511.
12. Guigay J.-P., Sanchez del Rio M. X-ray focusing by bent crystals: focal positions as predicted by the crystal lens equation and the dynamical diffraction theory // J. Synchrotron Rad. – 2022. – T. 29. – P. 148–158.

© О. М. Кутькин, Г. Д. Довженко, 2023