

УДК 539.26+548.73

*Посвящается памяти А.В. Шубникова*

## РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ СТАНЦИИ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА (РСА) С АДАПТИВНОЙ СЕГМЕНТИРОВАННОЙ ОПТИКОЙ НА БОКОВОМ ПУЧКЕ ВИГГЛЕРА В НАКОПИТЕЛЕ “СИБИРЬ-2”

© 2012 г. Д. С. Молоденский, Д. М. Хейкер, В. Н. Корчуганов\*, Е. Е. Коноплев\*\*, П. В. Дороватовский\*

*Институт кристаллографии РАН, Москва  
E-mail: kheiker@ns.crys.ras.ru*

*\* НИЦ Курчатовский институт, Москва*

*\*\* НПО “Луч”, Подольск*

Поступила в редакцию 07.11.2011 г.

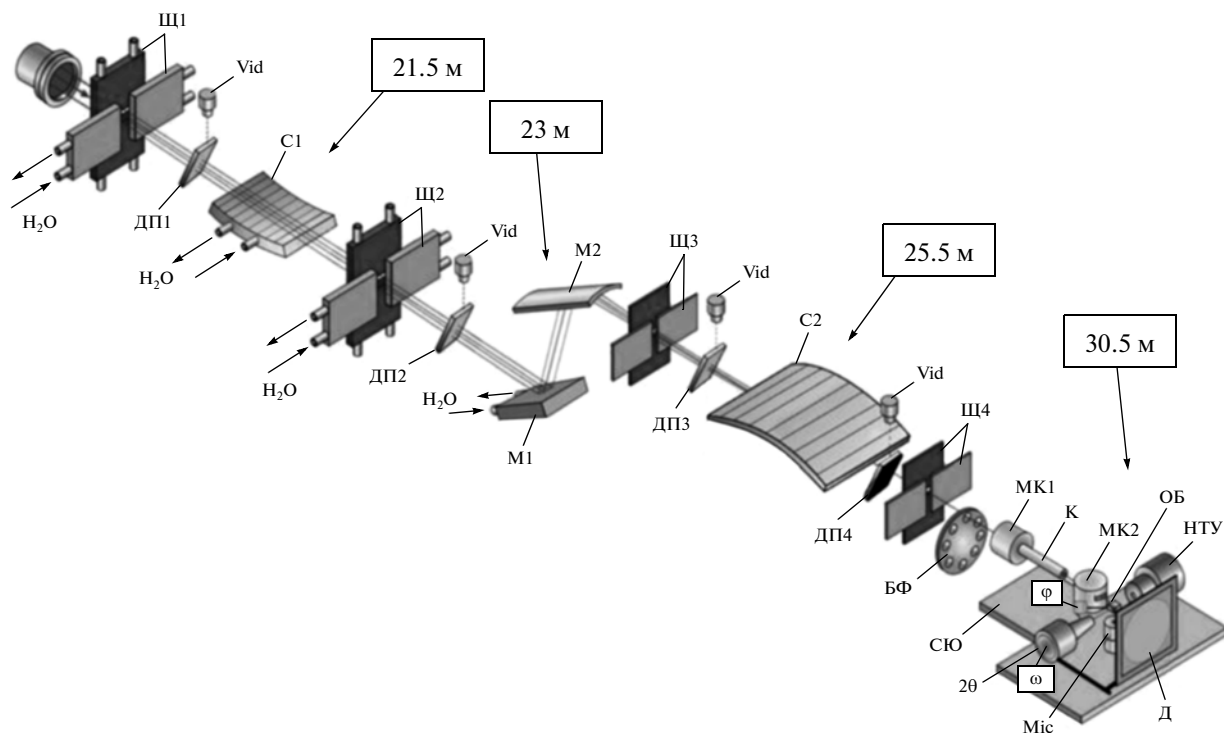
Установка станции рентгеноструктурного анализа на боковом пучке 19-полюсного сверхпроводящего вигглера дает возможность помимо использования центрального пучка СИ с длиной волны  $0.5 \text{ \AA}$  решать задачи, требующие более мягкого рентгеновского излучения при интенсивности СИ, большей, чем на пучках из поворотного магнита. Численное моделирование процесса создания фотонов от источника и прохождения созданных лучей через элементы станции (как и через станцию в целом) позволяет рассчитать параметры станции, сравнить станцию с уже существующими аналогами, определить ее возможности и фактическую эффективность ее элементов, оценить качество наладки. Выполнено численное моделирование источника СИ на боковом пучке из вигглера, фокусирующего канала (сегментированное зеркало-конденсор, монохроматор с саггитальной фокусирующей сегментированным вторым кристаллом, сегментированное фокусирующее зеркало). Определены размеры фокуса и расходимости лучей в нем с учетом конечных размеров сегментов. Определена величина интенсивности излучения в фокусе с длиной волны  $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$  с учетом потерь в канале вывода СИ и в фокусирующем канале. Вычислены величины критической длины волны для бокового пучка вигглера и разрешения по длинам волн. Определены интенсивности рентгенограммы и угловые разрешения на ней.

### ВВЕДЕНИЕ

Станция рентгеноструктурного анализа (РСА) [1] предназначена для исследования структуры малых монокристаллов и нанокристаллов, изучения модулированных структур и структуры кластеров в них, создания условий для решения структуры на порошковых образцах и уточнения ее методом Ритвельда, ускоренного определения фазового состава с большой точностью и чувствительностью, размеров и формы кристаллитов, величины напряжений, преимущественной ориентировки. Эти исследования требуют малой расходимости, большой интенсивности СИ на образце с размерами  $0.1\text{--}1.0 \text{ мм}$  в диапазоне длин волн  $0.6\text{--}2.5 \text{ \AA}$ , разрешения по длинам волн  $\leq 10^{-4}$ , высокой стабильности этих параметров, малой интенсивности гармоник, высокого углового разрешения на дифракционной картине, малой интенсивности фона, большого предельного угла рассеяния  $2\theta$ . Для удовлетворения этих требований большинство исследовательских станций на пучке СИ включают в себя фокусирующий канал, основными элементами которого являются фокусирующие и коллимирующие рентгеновские зер-

кала, монохроматоры, коллиматоры и другие рефракционные и дифракционные элементы.

Фокусирующий канал станции РСА, собирающий расходящиеся из источника СИ лучи на образце, вместе с дифрактометром и каналом вывода СИ, является основным элементом станции. Источником СИ для станции РСА является боковой пучок 19-полюсного вигглера, сделанного на основе сверхпроводящих магнитов. Рентгенооптическая схема фокусирующего канала станции РСА (рис. 1) базируется на следующих трех элементах: на двухкристалльном монохроматоре с первым кристаллом Si(111) (охлаждаемым водой) и саггитально изогнутым сегментированным вторым кристаллом, фокусирующим пучок СИ в горизонтальной плоскости; на адаптивном сегментированном зеркале полного внешнего отражения, уменьшающем расходимость пучка СИ в вертикальной плоскости; а также на установленном перед монохроматором охлаждаемом 11-сегментном зеркале-конденсоре из кремния, покрытого родием. Зеркало-конденсор поглощает половину интенсивности падающего на него СИ, уменьшает расходимость лучей, исключая ту часть расходимости, которая обусловлена нагревом поверхности сегментов зеркала относительно



**Рис. 1.** Рентгенооптическая схема станции РСА Щ1, 2, 3, 4 – щели; М1, М2 – кристаллы монохроматора, ДП1, 2, 3, 4 – детекторы положения пучка, стрелками указаны расстояния от источника. С1 – зеркало-конденсор, С2 – фокусирующее зеркало, МК1, МК2 – мониторы; К – коллиматор, НТУ – низкотемпературное устройство, БФ – блок фильтров; ОБ – образец, Мис-микроскоп, Д – CCD детектор; φ – наклонная ось, (2θ, ω) – горизонтальные оси. Стрелками указаны расстояния до источника.

охлаждаемой стороны, улучшая тем самым разрешение по длинам волн. Также оно уменьшает интенсивность гармоник. Размеры сегментов –  $100 \times 80 \times 2$  мм. Они устанавливаются через слой галлий-индиевой эвтектики на медных блоках, охлаждаемых водой. Поворот сегментов относительно соседних осуществляется с помощью 10-ти пьезодвигателей с датчиками перемещений и позволяет устанавливать любой профиль. Зеркало наклоняется и перемещается по вертикали с помощью двух шаговых двигателей с датчиками обратной связи. Адаптивное сегментированное зеркало из кварцевого стекла, расположенное после монохроматора, фокусирует пучок СИ на образец.

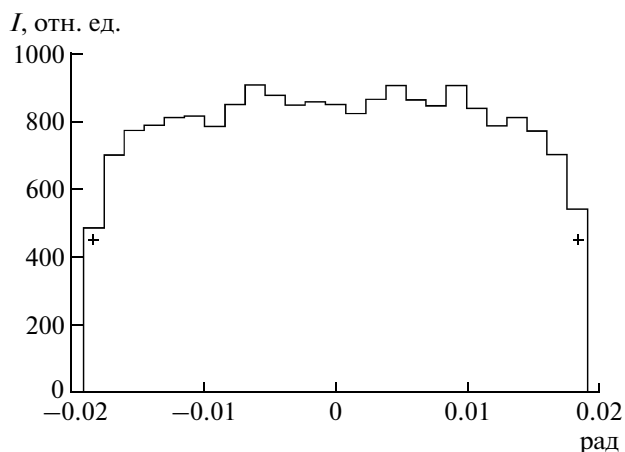
Численное моделирование процесса создания фотонов от источника и прохождения созданных лучей через элементы станции (как и через станцию) позволяет рассчитать параметры станции, сравнить станцию с уже существующими аналогами, определить ее возможности и фактическую эффективность ее элементов, оценить качество наладки. Установка станции на боковом пучке 19-полюсного сверхпроводящего виллера дает возможность помимо использования центрального пучка СИ с длиной волны  $0.5 \text{ \AA}$  решать задачи, требующие более мягкого рентгеновского из-

лучения при интенсивности СИ, большей, чем на пучках из поворотного магнита. Рабочий диапазон длин волн СИ для станции РСА  $0.6\text{--}2.5 \text{ \AA}$ .

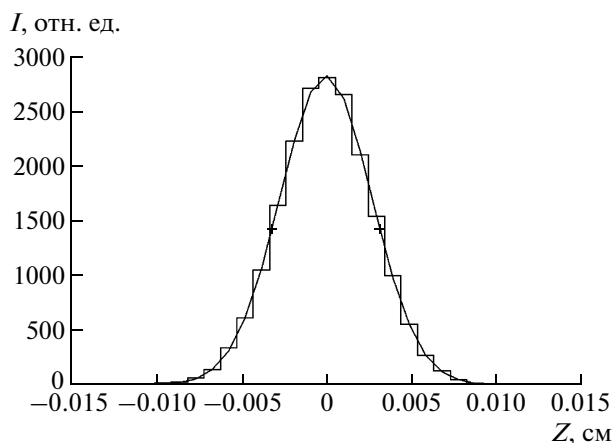
### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСТОЧНИКА СИ

В качестве модели принят электронный пучок с гауссовым распределением частиц по вертикальным углам и координатам. Эмиттанс для накопителя “Сибирь-2” равен: в горизонтальной плоскости  $\epsilon_x = 65 \text{ нм рад}$ , в вертикальной  $\epsilon_y = 0.65 \text{ нм рад}$ . Размеры пучка в плоскости орбиты  $\sigma_{b0,x}^2 = \epsilon_x, \beta_x = 0.264 \text{ мм}^2$  и  $\sigma_{b0,y}^2 = \epsilon_y, \beta_y = 0.38 \times 10^{-3} \text{ мм}^2$ , угловая расходимость векторов электронных скоростей  $\sigma_{b0,x'}^2 = \epsilon_x/\beta_x = 16.1 \times 10^{-6} \text{ мрад}^2$ ,  $\sigma_{b0,y'}^2 = \epsilon_y/\beta_y = 0.0011 \text{ мрад}^2$ , где  $\beta_x = 4.06$  и  $\beta_y = 0.58 \text{ м}$  – горизонтальная и вертикальная бета-тронные функции соответственно.

Распределение интенсивности излучения по вертикальным углам ψ приближенно представить зависимостью “гауссовского” вида  $I_{\parallel} = I_0 \exp(-\psi/2\sigma_r^2)$ , причем  $\sigma_r(\lambda) = (0.565/\gamma)(\lambda/\lambda_c)^{0.425}$  – среднеквадратичный угол расходимости СИ. Такое экспоненциальное представление хорошо согласуется с на-



**Рис. 2.** Угловое распределение интенсивности по горизонтали для 19-полюсного вогглера. ПШПВ = 0.0367 рад.



**Рис. 3.** Пространственное распределение интенсивности по вертикали и его гауссова аппроксимация для 19-полюсного вогглера. ПШПВ = 0.0064 см.

стоящим распределением до  $\lambda/\lambda_c = 10$  и неплохо до  $\lambda/\lambda_c = 100$ .

Видимые вертикальные размеры и углы расходимости фотонного пучка  $\sigma_y$ ,  $\sigma_{y'}$  в центре вогглера:

$$\sigma_{Ty}^2 = \sigma_r^2 + \sigma_y^2, \quad \sigma_{y'}^2 = \sigma_{b0,y}^2 + \frac{1}{12}\sigma_{b0,y'}^2 L_w^2 + \frac{1}{36}\psi^2 L_w^2,$$

$$\sigma_{Ty'}^2 = \sigma_r^2 + \sigma_{y'}^2, \quad \sigma_{y''}^2 = \sigma_{b0,y''}^2,$$

где  $L_w$  — протяженность источника излучения. Принято, что на азимуте вогглера дисперсия расходимости равна нулю.

Увеличение видимых размеров происходит из-за:

— бетатронного размера электронного пучка и его угловой расходимости;

— амплитуды колебаний  $\alpha = \lambda_w K / (2\pi\gamma)$  в плоскости отклонения, где  $\lambda_w$  — длина периода вогглера, а  $K = \frac{eB_0\lambda_w}{2\pi m_0 c^2} = 0.934 B_0(T)\lambda_w(\text{cm})$  — параметр ондуляторности;

— изменения размеров электронного пучка вогглера (член  $1/12\dots$ )

— наблюдения под малыми горизонтальным  $\theta$  и вертикальным  $\psi$  углами по отношению к оптической оси (член  $1/36\dots$ ).

Для  $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$  получим  $\alpha^2 = (\lambda_w K / 2\pi\gamma)^2 = 0.24 \text{ мм}^2$ ,  $\sigma_r^2 (1.0 \text{ \AA}) = (0.108 \text{ мрад})^2$

$$\sigma_{Ty}^2 = (0.108)^2 + (0.033)^2 = (0.113)^2 \text{ мрад}^2.$$

Расходимость пучка из источника СИ составит  $\Psi_H = \frac{K}{\gamma} = 18.78 \text{ мрад}$ ,  $\Psi_v = 4.7 \times 0.113 \times 10^{-3} = 0.53 \text{ мрад}$ , размеры пучка из источника СИ по вертикали:  $\sigma_{Ty}^2 = (0.025)^2$ ,  $b_v = 2.35\sigma_{Ty} = 0.059 \text{ мм}$ .

Также использовалась программа трассирования SHADOW, написанной под графической оболочкой XOP ShadowVUI, созданная разработчиками из Европейского центра синхротронного излучения (ESRF) в Гренобле, Франция. В программе процесс создания фотонов из источника считается стохастическим как по времени, так и по пространству, для моделирования источника используется вероятностный метод Монте-Карло и алгоритм генератора псевдослучайных чисел. Пучок СИ включает в себя до 20000 лучей, каждый луч генерируется независимо (на основании заданного распределения), состоит из одинакового числа фотонов, распространяется и преломляется согласно законам геометрической оптики. Моделирование источников СИ осуществляется на основании аналитических формул, взятых из доклада [2].

На рис. 2–4 представлены графики распределения пучка СИ в метрическом и импульсном пространствах, полученные на основании численного моделирования источника по программе SHADOW.

Таким образом, расходимость пучка СИ из источника по горизонтали составит 37.56 мрад, по вертикали — 0.53(0.48) мрад. Размер источника по горизонтали определяется размерами входных щелей, размеры по вертикали — 0.059 (0.064) мм. Значения в скобках получены по формулам программы SHADOW, без скобок — согласно нашей модели.

### ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОКУСИРУЮЩЕГО КАНАЛА СТАНЦИИ РСА

Для численных расчетов эффективности фокусировки на пучке СИ существует аналитический способ оценки фокусирующей способности канала, основанный на принципе сохранения полного потока фотонов (в отсутствие поглощения пучка в веществе или потерь на щелях), а также на теореме Лиувилля о сохранении полного фазового объема, в применении к рентгеновскому излучению впервые использованной в [3]. Согласно этой теореме, фазовый объем, занимаемый частицами в  $N$ -мерном пространстве, сохраняется при любой фокусировке излучения так же, как и в ее отсутствие. Таким образом, для одномерного случая можно записать условие

$$I_1\Psi_1 = I_2\Psi_2; \quad I = N^*(\Psi_2 l_2)_H(\Psi_2 l_2)_V,$$

где  $I$  — интенсивность рентгенограммы,  $N^*$  — яркость источника излучения,  $l_{1,2}$  — линейные размеры источника излучения и пучка в фокусе,  $\Psi_{1,2}$  — расходимость пучка от источника и его расходимость в фокусе соответственно. Индексы  $H$  и  $V$  относятся соответственно к горизонтальным и вертикальным размерам и расходимостям.

Для расчета параметров станции РСА необходимо знать оптимальные углы наклона зеркала-конденсора и фокусирующего зеркала, при которых произойдет исключение гармоник одновременно с небольшим уменьшением интенсивности основного излучения. Расчет углов проводился для бесконечной гладкой поверхности  $\text{SiO}_2$  и Rh с помощью формул Френеля для  $s$ - и  $p$ -поляризации [4]:  $r_s(\theta) = (\sin\theta - \sqrt{\varepsilon - \cos^2\theta})/(\sin\theta + \sqrt{\varepsilon - \cos^2\theta})$ ;  $r_p(\theta) = (\varepsilon\sin\theta - \sqrt{\varepsilon - \cos^2\theta})/(\varepsilon\sin\theta + \sqrt{\varepsilon - \cos^2\theta})$ ;  $R_s = (r_s)^*r_s$ ,  $R_p = (r_p)^*r_p$ ; здесь  $\theta$  — угол скольжения падения лучей на поверхность зеркала,  $\varepsilon$  — мнимая часть диэлектрической постоянной среды  $n = 1 - \delta - i\beta$ , которую также можно записать в виде:  $n(\lambda) = 1 - (n_a r_e \lambda^2 / 2\pi) [f_1^0(\lambda) - i f_2^0(\lambda)]$ , где  $r_e$  — классический радиус электрона,  $\lambda$  — длина волны падающего излучения,  $f_1^0(\lambda)$  и  $f_2^0(\lambda)$  — действительная и мнимая части атомного фактора рассеяния,  $n_a$  — средняя плотность атомов в единице объема. Взяв значения атомных формфакторов для разных длин волн и веществ из таблиц NIST, можно построить кривые отражения для Rh и  $\text{SiO}_2$ .

Из графиков (рис. 5) видно, что взяв углы наклона  $\theta = 4$  мрад для зеркала-конденсора, покрытого родием, и  $\theta = 2.4$  мрад для фокусирующего зеркала из кварцевого стекла, дважды

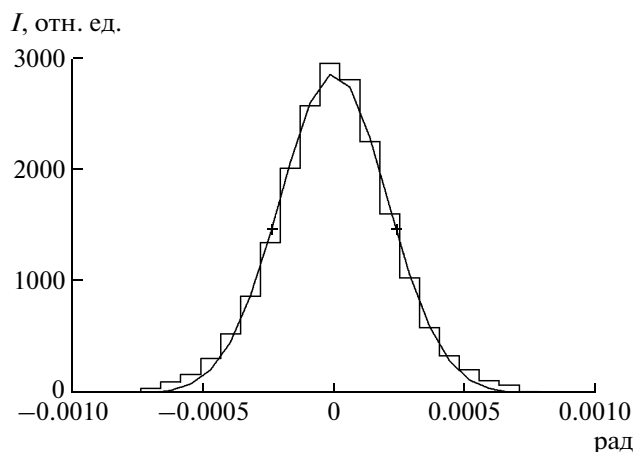


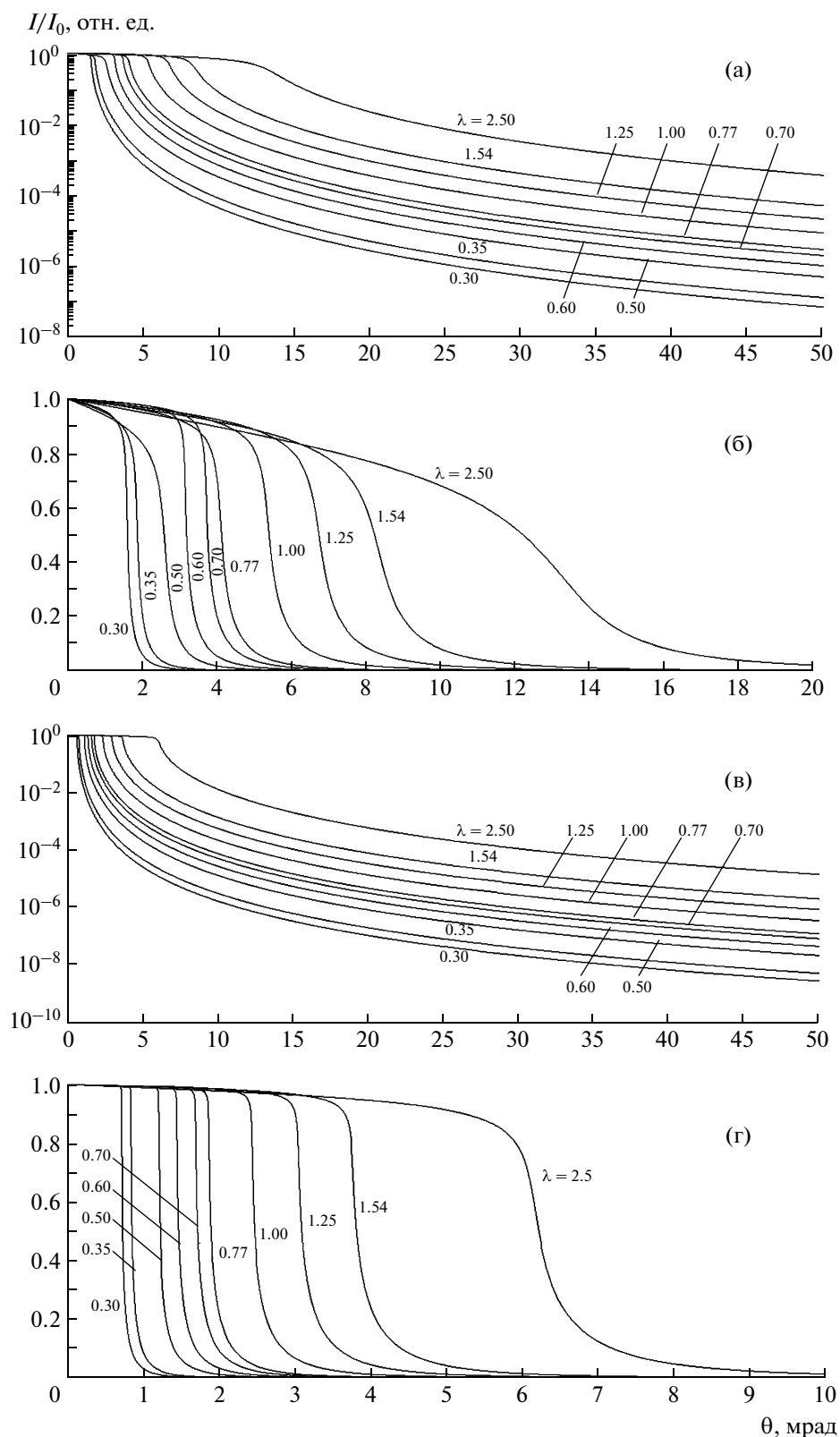
Рис. 4. Угловое распределение интенсивности по вертикали и его гауссова аппроксимация для 19-полюсного вигглера. ПШПВ = 0.00048 рад.

уменьшим гармоники основного излучения (все-го в  $10^{-5}$  раз), уменьшив при этом интенсивность основного излучения на 20%.

### РАЗМЕР, РАСХОДИМОСТЬ И ИНТЕНСИВНОСТЬ ПУЧКА СИ В ФОКУСЕ, С УЧЕТОМ ОСТАТОЧНОЙ РАСХОДИМОСТИ

Размер, расходимость и интенсивность пучка СИ в плоскости образца с учетом остаточной расходимости связаны с конечными размерами сегментов фокусирующей оптики. По вертикали: проекция сегмента зеркала-конденсора 0.4 мм, всего зеркала: 0.4 мм, 11-ти сегментов = 4.4 мм. На зеркало-конденсор попадет не весь пучок:  $\psi_v P = 0.53$  мрад  $\times 21.5$  м = 11.2; мм.  $4.4/11.2 = 40\%$  от всего пучка. Остаточная расходимость после зеркала-конденсора:  $0.4/21.5 = 0.019$  мрад. Остаточное увеличение высоты пучка на фокусирующем зеркале  $0.019 \times 25.5 = 0.47$  мм. Полная высота пучка в плоскости фокусирующего зеркала:  $0.4 \times 11 + 0.47 = 4.87$  мм. Проекция сегмента фокусирующего зеркала длиной 200 мм под углом 2.4 мрад составит 0.48 мм, всего фокусирующего зеркала  $0.48 \times 9 = 4.3$  мм, т.е. 88% пучка попадет на зеркало. Остаточная расходимость:  $0.48/21.5 = 0.019$  мрад; увеличение размера пучка в плоскости образца:  $0.019$  мрад  $\times 5$  м = 0.1 мм. Значит, размер пучка в фокусе будет  $BV = 0.48 + 0.1 = 0.58$  мм. По теореме Лиувилля:  $0.52 \times 0.059 \times 0.35 = \psi_{\text{обр}}^v \times 0.58$ ;  $\psi_{\text{обр}}^v = 0.02$  мрад;

В горизонтальной плоскости:  $1.0 \times 22 = \psi_{\text{обр}}^H \times 10$ ;  
 $\psi_{\text{обр}}^H = 2.2$  мрад.



**Рис. 5.** Доля отраженной от поверхности интенсивности в зависимости от угла скольжения для разных длин волн: а — для  $R_h$  в логарифмическом масштабе, б — для  $R_h$  в прямом масштабе, в — для  $SiO_2$  в логарифмическом масштабе, г — для  $SiO_2$  в прямом масштабе.

По горизонтали: Размеры источника излучения (проекция длины вигглера на плоскость, перпендикулярную пучку,  $\alpha = 17$  мрад)  $1640 \times 0.017$  мм = 28 мм. Через первую щель (18 мм на расстоянии 6656 мм от центра вигглера) в канале вывода СИ из середины второго кристалла монохроматора (расстояние до центра вигглера 23000 мм) виден только 91% источника. Из точки второго кристалла, отстоящей на 11 мм от середины, – 79%, отстоящей на 22.5 мм – 63%. Таким образом, произойдет дополнительное уменьшение интенсивности из-за этой щели на 20%. Одновременно размеры фокуса (расстояние до центра вигглера – 30500 мм) для соответствующих монокристалльных полосок шириной 1.7 мм при уменьшении 7500/23000 мм  $\sim 1/3$  и остаточного размера, равного  $1.7 \times 30500/23000$  мм = 2.3 мм, составят 11.2, 9.5, 8.0 мм. Средняя взвешенная ширина фокуса составит  $\sim 10$  мм.

Большая величина горизонтальных размеров фокуса позволяет получать дифракционную картину от цилиндрического образца диаметром 0.3 мм и длиной до 10 мм. Измерения проводятся в вертикальной полосе детектора шириной до 10 мм. В этом случае в 33 раза увеличиваются интенсивность дифракционной картины и число кристалликов в исследуемом порошковом образце (по сравнению с цилиндрическим образцом с длиной, равной диаметру (0.3 мм)). Множитель поглощения может быть рассчитан для цилиндрического сечения образца в плоскости, перпендикулярной оси цилиндра [5].

### ИНТЕНСИВНОСТЬ РЕНТГЕНОГРАММЫ

Мощность излучения СИ для бокового пучка из вигглера определяется выражением

$$P(\lambda) = 1.421 \times 10^{-24} \frac{\gamma^7}{R^2} G_3(y) N_p \sqrt{1 - (\alpha/\alpha_{\max})^2} \frac{\text{Вт}}{\text{мрад } \text{Å} \times 0.1 \text{ Å}}$$

в котором формула из [6] дополнена множителем  $N_p$  (числом полюсов вигглера) и множителем из-за отклонения от центральной оси пучка.

Здесь  $\gamma = E/mc^2 = 4.89 \times 10^3$  – релятивистский лоренц-фактор;  $m$  – масса электрона;  $c$  – скорость света;  $R = 33.3 E/B$  – радиус траектории электронов в метрах;  $E$  – энергия электронов (ГэВ);  $B$  – напряженность магнитного поля в вигглере (кГс);

$$G_3(y) = \left(\frac{\lambda_c}{\lambda}\right)^2 \eta\left(\frac{\lambda}{\lambda_c}\right);$$

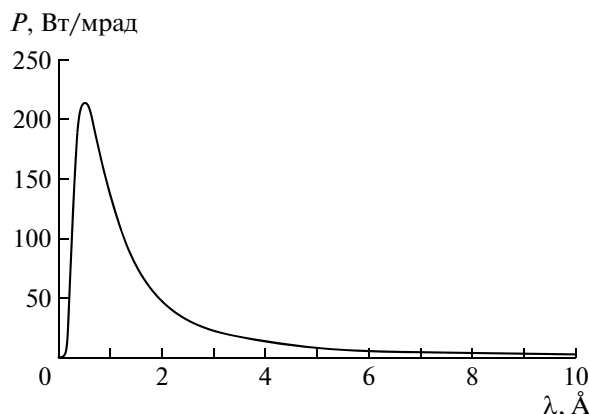


Рис. 6. Спектральная мощность СИ бокового пучка из 19-полюсного сверхпроводящего вигглера.

$\lambda_c = \frac{186.4}{BE^2 \sqrt{1 - (\alpha/\alpha_{\max})^2}}$  – критическая длина волны в Å, делящая спектр на две интегрально равные части;  $\alpha_{\max} = \frac{B\delta\omega}{2\pi \times 3.33E} = 18.78$  [мрад] – максимальный угол  $\alpha$ ;  $\delta\omega$  – период траектории электронов в вигглере;  $\eta\left(\frac{\lambda}{\lambda_c}\right) = \left(\frac{\lambda_c}{\lambda}\right) G_0\left(\frac{\lambda_c}{\lambda}\right)$  – универсальная спектральная функция;

$$G_0\left(\frac{\lambda_c}{\lambda}\right) = \int_{\lambda_c/\lambda}^{\infty} K_{5/3}(\eta) d\eta,$$

$K_{5/3}(\eta)$  – функция Макдональда.

На основании приведенных формул можно построить спектр СИ бокового пучка ( $\alpha = 17$  мрад) для станции РСА из 19-полюсного сверхпроводящего вигглера (рис. 6). Как видно из рисунка, для  $\lambda = 1.0$  Å мощность пучка составит  $P \sim 135$  [Вт/0.1 Å мрад Å].

Учтем потери мощности излучения для 1.0 Å: – поглощение в шести бериллиевых окнах по 0.24 мм. Суммарная толщина – 0.144 см. Интенсивность прошедшего через них излучения

$$I(\lambda) = I_0 e^{-\frac{\mu(\lambda)\rho d}{\rho}},$$

где  $I_0$  – интенсивность исходного излучения,  $\mu/\rho$  – массовый коэффициент поглощения,  $\rho$  – плотность,  $d$  – толщина поглощающего слоя; потери 21%; – уменьшение интенсивности из-за прорезей на втором кристалле монохроматора; 85%

– потери интенсивности из-за тепловых деформаций первого кристалла монохроматора малы [7].

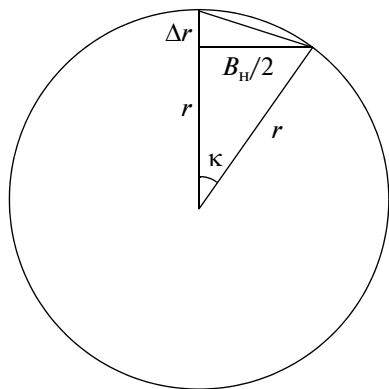


Рис. 7. К определению добавочного ухудшения углового разрешения  $\delta\psi$ .

Спектральное разрешение монохроматора определяется из уравнения Вульфа–Брэгга, для РСА описывается выражением

$$\Delta\lambda/\lambda = [(\psi_{\text{ост}})^2 \text{ctg}^2 \theta_B + (\delta\lambda/\lambda)^2]^{1/2},$$

$$\theta_B = \arcsin(\lambda/2d_{111}),$$

где  $\theta_B$  – угол Брэгга, для  $1.0 \text{ \AA}$  равный  $9.18^\circ$ ,  $\delta\lambda/\lambda$  – спектральное разрешение кристалла (для Si(111)  $\delta\lambda/\lambda(1.0 \text{ \AA}) = 0.14 \times 10^{-3}$ ). В итоге получим

$$\Delta\lambda/\lambda = 1.8 \times 10^{-4}.$$

Полная интенсивность пучка (для  $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$ ) в фокусе составит

$$P(1.0 \text{ \AA}) = 135 \times 0.8 \times 0.40 \times 0.88 \times 0.8 \times \\ \times 0.79 \times 0.85 \times 1.4 \times 10^{-4} = 2.8 \times 10^{-3} \text{ [Вт]}.$$

Поток фотонов  $N(1.0 \text{ \AA}) = 2.8 \times 10^{-3}/1.98 \times 10^{-15} = 1.4 \times 10^{12}$  [фотон/с].

Поток фотонов на  $1 \text{ мм}^2 = 2.3 \times 10^{11}$  [фотон/с  $\text{мм}^2$ ]. Поток фотонов на образце диаметром и длиной  $0.3 \text{ мм}$   $N = 2 \times 10^{10}$  [фотон/с], на образце  $0.3 \times 3 \text{ мм}$   $N = 2 \times 10^{11}$  [фотон/с], на образце  $0.3 \times 10 \text{ мм}$   $N = 0.7 \times 10^{12}$  [фотон/с]. Для станции I11 (Diamond, Англия) при сечении  $0.3 \times 2.5 \text{ мм}^2 = 3.5 \times 10^{12}$  [фотон/с  $\text{мм}^2$ ]

Таблица 1. Параметры бокового ( $\alpha = 17$  мрад) пучка СИ в фокусе станции РСА накопителя “Сибирь-2”,  $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$ ,  $E = 2.5 \text{ ГэВ}$ ,  $I = 0.1 \text{ А}$ ,  $N_p = 19$ ,  $V = 60 \text{ КГц}$

Интенсивность, фотон/(с $\text{мм}^2$ )	Высота фокуса, мм	Ширина фокуса, мм	Вертикальная расходимость, мрад	Горизонтальная расходимость, мрад	$\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$	$\lambda_c, \text{ \AA}$	$\frac{I(\lambda/3)}{I(\lambda)}$
$2.3 \times 10^{11}$	0.6	10	0.02	2.2	$1.8 \times 10^{-4}$	1.17	$<10^{-5}$

## УГЛОВОЕ РАЗРЕШЕНИЕ НА РЕНТГЕНОГРАММЕ

Угловое разрешение можно рассчитать по формуле:

$$\Delta\Psi = \frac{D}{R_\Gamma} + \psi_2^V + \delta\psi,$$

где  $D$  – диаметр цилиндрического образца,  $\psi_2^V$  – расходимость дифрагированного пучка по вертикали,  $R_\Gamma$  – расстояние от образца до детектора,  $\delta\psi$  – добавочное ухудшение разрешения, связанное со стрелой прогиба дуги (измеряемой части дифракционного кольца), определяемое выражением  $\delta\psi = \kappa^2/4R_\Gamma$ , где  $\kappa$  – половинный угол сегмента,  $r$  – радиус дифракционного кольца (рис. 7).

Радиус дифракционного кольца:  $r = R_\Gamma \sin 2\theta$ . Таким образом, получаем конечную формулу для вычисления углового разрешения

$$\Delta\Psi = \frac{D}{R_\Gamma} + \psi_2^V + \frac{B_H^2}{8R_\Gamma^2 \sin^2 2\theta}$$

Конструкция гониометра позволяет осуществлять сканирование рассеянного излучения вплоть до  $2\theta = 160^\circ$ . Для оценки ухудшения углового разрешения из-за  $\delta\psi$  возьмем  $2\theta = 160^\circ$ . Рассчитаем угловое разрешение для трех случаев: горизонтальная длина образца равна:  $B_H = 0.3 : 3 : 10 \text{ мм}$ . Угловое разрешение соответственно составит  $\Delta\Psi = 0.018^\circ : 0.0182^\circ : 0.020^\circ$ . Для сравнения, угловое разрешение на станции для порошковой дифракции I11 накопительного кольца Diamond приблизительно равно  $0.005^\circ$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнено численное моделирование сверхпроводящего 19-полюсного вигглера накопителя “Сибирь-2”, фокусирующего канала (конденсор, монохроматор с саггитальной фокусировкой, фокусирующее зеркало). Определены величина размеров фокуса и расходимости лучей в нем, величина интенсивности излучения с длиной волны  $\lambda = 1.0 \text{ \AA}$  с учетом потерь в канале вывода СИ и в фокусирующем канале. Вычислены величины критической длины волны для бокового пучка вигглера и разрешения по длинам волн. Результа-

**Таблица 2.** Интенсивность рентгенограммы от порошка, угловое разрешение  $\Delta 2\theta^\circ$  на рентгенограмме в зависимости от размеров цилиндрического образца,  $2\theta_{\max} = 160^\circ$ ,  $R_\Gamma = 1.0$  м

Проекция образца вдоль пучка, мм	Интенсивность рентгенограммы, отн. ед.	Угловое разрешение
$0.3 \times 10$	$1 \times 10^{12}$	$0.020^\circ$
$0.3 \times 3$	$0.3 \times 10^{12}$	$0.0182^\circ$
$0.3 \times 0.3$	$0.3 \times 10^{11}$	$0.018^\circ$

ты моделирования представлены в табл. 1 и 2. Из них видно, что спектральный поток фотонов на станции РСА выше, чем на станции “Белок”, установленной на поворотном магните, а разрешение по длинам волн на порядок лучше. Определены интенсивности рентгенограммы и угловые разрешения на ней. Разрешение на рентгенограмме порошков  $0.02^\circ$  по сравнению с  $0.05^\circ$  на

станции “Белок” и  $0.005^\circ$  на станции I11 накопителя Diamond.

Работа выполнена в рамках государственного контракта №16.552.11.7003 по станции рентгеноструктурного анализа РСА центра коллективного пользования “Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий”.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хейкер Д.М., Ковальчук М.В., Корчуганов В.Н. и др. // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 6. С. 1145.
2. Green G.K. // NLSL-BNL Tech. Report № 50522. 1976.
3. Arndt U.W. // J. Appl. Cryst. 1990. V. 23. P. 161.
4. Hendrix J., Koch M.H.J., Bordas J. // J. Appl. Cryst. 1979. V. 12. P. 467.
5. International Tables for X-ray Crystallography. V. II. P. 291.
6. Synchrotron radiation research / Eds. Winick H., Doniach S. New York: Plenum Press, 1980. 754. P. 11.
7. Хейкер Д.М., Коноплев Е.Е., Молоденский Д.С. и др. // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 5. С. 954.