

## ЭЛЛИпсоИДАЛЬНЫЕ КОНЦЕНТРАТОРЫ ДЛЯ ЛАБОРАТОРНЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ИСТОЧНИКОВ: АНАЛИТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПТИМИЗАЦИИ

© 2013 г. И. В. Якимчук, И. В. Кожевников, В. Ю. Политов\*, В. Е. Асадчиков

*Институт кристаллографии РАН, Москва*

*E-mail: yaivan@list.ru*

*\*Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики, Снежинск*

Поступила в редакцию 21.02.2012 г.

Чрезвычайно низкая интенсивность большинства существующих лабораторных источников рентгеновского излучения ( $\lambda \sim 0.01\text{--}10$  нм) требует разработки коллимирующей и концентрирующей оптики, позволяющей значительно увеличить мощность излучения на поверхности образца. Настоящая работа посвящена аналитическому решению задачи оптимизации параметров концентратора. Это позволяет без каких-либо вспомогательных вычислений определить максимально возможную эффективность концентратора на любой длине волны и проанализировать зависимость эффективности от размера источника, длины волны, расстояния между источником и образцом и т.д.

DOI: 10.7868/S002347611302029X

### ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время существует много лабораторных приборов для рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) и фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС), где рентгеновское излучение используется для количественного анализа химического состава и структуры различных образцов. Во всех этих приборах используются, как правило, стандартные рентгеновские трубки, интенсивность излучения которых мала даже в жестком рентгеновском (ЖР) диапазоне и катастрофически падает при переходе в мягкую рентгеновскую (МР) область длин волн. Для увеличения потока рентгеновского излучения и, следовательно, для увеличения чувствительности методов практически во всех лабораторных установках РФА и ФЭС исследуемый образец размещается как можно ближе к фокусу рентгеновской трубки. Образец при этом сильно нагревается, что может привести к изменению состава внутреннего строения или даже разрушению органических или биологических объектов. Значительный интерес представляет и увеличение локальности методов РФА и ФЭС, т.е. уменьшение размеров рентгеновского зонда при сохранении падающего потока излучения, что позволило бы исследовать изменение свойств образца вдоль его поверхности. Кроме того, зачастую образцы имеют малые размеры в доли миллиметра или даже десятки микрон, что также подразумевает уменьшение размеров зондирующего пучка. В качестве примеров можно отметить органические и биологические кристаллы, пленки различного состава, отдельные элементы микро-

схем в микроэлектронике и драгоценные камни в ювелирной промышленности.

Перспективный подход к одновременному решению перечисленных выше проблем (увеличение плотности потока излучения на образце, резкое снижение тепловых нагрузок и увеличение локальности методов) состоит в использовании концентрирующих рентгенооптических элементов, расположенных между источником и образцом.

Представляет значительный интерес разработка широкополосных концентраторов скользящего падения, основанных на полном внешнем отражении (ПВО) рентгеновского излучения. Простейшими концентраторами для фокусировки излучения “точечного” рентгеновского источника являются осесимметричные эллипсоиды или конусы. В [1] описана простая и дешевая технология изготовления подобных устройств длиной до 500 мм и диаметром до 30 мм. Метод состоит в “натягивании” размягченной стеклянной заготовки (трубки) на металлический шаблон для придания ей заданной формы и снятия полученного концентратора с шаблона после отвердевания. Также в [1] продемонстрировано увеличение плотности потока МР-излучения ( $\lambda = 4.47$  нм) от рентгеновской трубки в 370 раз при диаметре пятна фокусировки 0.26 мм. Увеличение плотности потока ЖР-излучения на 3 порядка благодаря применению концентраторов обсуждалось в [2, 3], хотя и с применением синхротронных источников. Использование концентратора скользящего падения в РФА позволило обнаружить слой

эриция средней толщиной менее 0.1 нм, что соответствует чувствительности метода  $4 \times 10^{-15}$  г [4].

Ясно, что концентраторы скользящего падения эффективно отражают излучение, падающее на их поверхность под углами, меньшими критического угла ПВО  $\theta_c$ , так что коэффициент передачи излучения составляет порядка  $\nu \sim \theta_c^2$ . Критический угол  $\theta_c$  составляет от долей градуса для ЖР-излучения до нескольких градусов для МР-излучения. Поэтому концентраторы могут собрать на образце лишь малую долю всего излучения источника, составляющую от сотых долей процента в ЖР-диапазоне до единиц процентов в МР диапазоне.

Рассмотрим источник рентгеновского излучения постоянной яркости в виде круга диаметром  $S$ . Плотность потока излучения на оси, проходящей через центр источника перпендикулярно его поверхности, очевидно, равна

$$q_R = q_0 S^2 / (S^2 + 4R^2), \quad (1)$$

где  $R$  – расстояние до источника, а  $q_0$  – плотность потока на его поверхности. Для определенности будем считать, что размер образца совпадает с размером источника. Тогда в отсутствие оптики полная мощность излучения, падающего на образец, составляет  $W \approx W_0 (S/2R)^2$ , если последний находится достаточно далеко от источника ( $R \gg S/2$ ). Если хотим собрать на образце лишь 0.01% полной мощности излучения источника без использования оптики, то необходимо разместить образец на расстоянии  $R = 50S$ . При  $S = 100$  мкм это расстояние составит 5 мм, что часто оказывается невозможным, например, из-за конструкции рентгеновской трубки или сложности измерения и анализа выходящего излучения, несущего информацию об исследуемом объекте. Если хотим собрать 1% излучения источника, то нужно приблизить образец к источнику на расстояние всего лишь в 0.5 мм. Тем самым, если эффективность концентраторов составляет доли процента, их использование полностью оправдано и позволяет существенно увеличить мощность излучения на образце.

Свойства простейшего эллипсоидального концентратора в рентгеновском диапазоне ранее рассматривались в целом ряде работ. Для расчетов традиционно использовался численный метод прогонки лучей [5, 6] ([7] и ссылки в ней), позволяющий без особых усилий смоделировать фокусировку пучка и оптимизировать геометрические параметры концентратора применительно к той или иной конкретной задаче. Качественный анализ предельных возможностей концентраторов проведен в [8–10] при использовании ряда упрощающих предположений об угловой зависимости коэффициента отражения и пренебрежении эффектами

поглощения. В [7, 11] свойства эллиптических концентраторов (как эллиптических цилиндров, так и эллипсоидов вращения) рассматривались более детально и в удобном аналитическом виде. Была исследована зависимость фокусирующих свойств концентратора от его геометрических параметров, длины волны излучения и размера источника, анализировалось влияние ошибки формы поверхности концентратора на фокусировку рентгеновского пучка. Однако рассмотрение, проведенное в этих работах, относилось к использованию концентраторов в каналах синхротронного излучения, т.е. к случаю высоко коллимированного падающего пучка. Поэтому проблема высокой эффективности концентратора стоит не так остро и может быть решена путем простого увеличения его размеров. Главный акцент был сделан на достижении максимальной плотности потока в фокусе концентратора и минимально возможном размере пятна фокусировки.

В настоящей работе анализируются предельные возможности эллипсоидальных концентраторов для фокусировки излучения “точечных” рентгеновских источников (рентгеновских трубок). В отличие от синхротронных пучков точечные лабораторные источники характеризуются низкой интенсивностью и излучают во все полупространство. Поэтому главная задача в этом случае состоит в том, чтобы собрать максимальное количество испущенных фотонов на исследуемом образце, в то время как достижение максимально высокой плотности потока и предельно малого размера сфокусированного пучка представляет вторичный интерес.

Задача оптимизации концентраторов решена аналитически. Эффективность концентратора выражена через несколько универсальных параметров  $L/F$ ,  $S/(F|1 - \varepsilon|^{1/2})$  и  $(1 - e)/|1 - \varepsilon|$ , представляющих собой безразмерные комбинации из межфокусного расстояния  $2F$  и эксцентриситета  $e$  эллипсоида, длины  $L$  и диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$  вещества концентратора, а также диаметра источника  $S$ . Показано, что аналитическое решение задачи оптимизации позволяет без вспомогательных вычислений определить максимально возможную эффективность концентратора на любой длине волны и проанализировать зависимость эффективности от размера источника, длины волны излучения, вещества отражающего покрытия, а также технологических и экспериментальных ограничений, накладываемых на длину концентратора, расстояние между источником и образцом и т.д. Представлены и обсуждаются результаты оптимизации концентраторов для ряда длин волн рентгеновского излучения, широко используемых на практике.

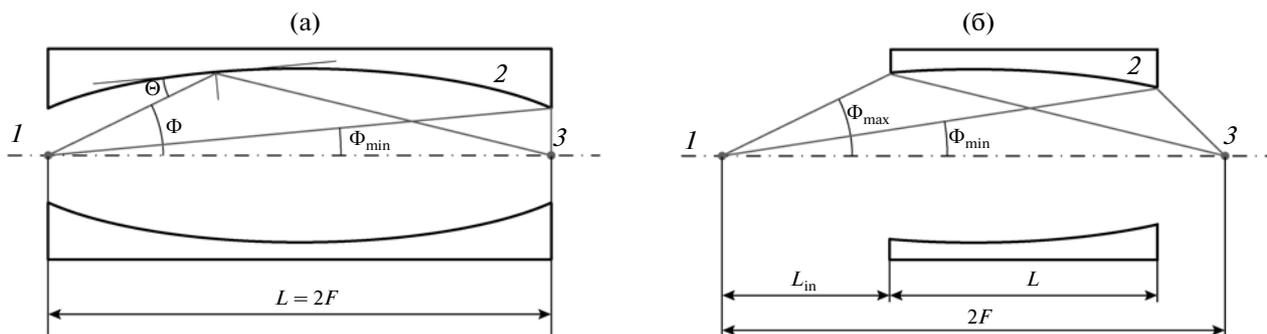


Рис. 1. Схема отражения излучения “точечного” источника *I* от осесимметричного эллипсоидального концентратора 2 максимально возможной длины  $L = 2F$  (а) и от концентратора длины  $L < 2F$  (б). Фокусы концентратора расположены в точках *I* и *3*.

ТОЧЕЧНЫЙ ИСТОЧНИК ИЗЛУЧЕНИЯ

Рассмотрим точечный источник рентгеновского излучения, расположенный в левом фокусе эллипсоида вращения и излучающий по закону Ламберта в правую полусферу (рис. 1а):

$$\frac{dW_s}{d\Omega} = \frac{W_0}{\pi} \cos \Phi,$$

где  $\Phi \in [0, \pi/2]$  – угол между лучом и большой полуосью эллипсоида,  $W_0$  – полная мощность источника,  $dW_s$  – мощность излучения источника, испускаемого в элементарный телесный угол  $d\Omega$ . Напомним, что уравнение эллипсоида в полярных координатах имеет вид

$$\rho(\Phi) = \frac{p}{1 - e \cos \Phi}; \quad p = 2F \frac{1 - e}{e}, \quad (2)$$

где  $e < 1$  и  $2F$  – эксцентриситет и расстояние между фокусами соответственно.

Мощность излучения, собранного в правом фокусе эллипсоида, равна

$$W = W_0 \int_{\Phi_{\min}}^{\pi/2} R(\Theta) \sin(2\Phi) d\Phi, \quad (3)$$

$$\text{tg} \Theta = \frac{1 - e \cos \Phi}{e \sin \Phi}, \quad \text{tg} \Phi_{\min} = \frac{1 - e^2}{2e}$$

где  $\Theta$  – угол скольжения луча при отражении от эллиптической поверхности,  $R(\Theta)$  – коэффициент отражения, вычисляемый по формулам Френеля и зависящий от  $\Theta$  и комплексной диэлектрической проницаемости отражающего покрытия концентратора  $\epsilon = 1 - \delta + i\gamma$ . Формула (3) предполагает, что длина концентратора  $L = 2F$ , т.е. его входная и выходная апертуры расположены в фокальных плоскостях эллипсоида, как на рис. 1а. В этом случае коэффициент передачи по мощности (эффективность концентратора)  $\nu \equiv W/W_0$ , определяющий число фотонов в пятне фокусировки по отношению к полному числу из-

лученных фотонов, есть функция трех величин:  $e$ ,  $\delta = \text{Re}(1 - \epsilon)$ ,  $\gamma = \text{Im} \epsilon$ . Удобнее использовать другой набор параметров:

$$|1 - \epsilon| \equiv \sqrt{\delta^2 + \gamma^2}; \quad \frac{\gamma}{\delta}; \quad \theta_{\min} \equiv \left[ \frac{2(1 - e)}{|1 - \epsilon|} \right]^{1/2}, \quad (4)$$

и нормировать углы  $\Theta$  и  $\Phi$  следующим образом:

$$\theta \equiv \Theta/|1 - \epsilon|^{1/2}, \quad \varphi \equiv \Phi/|1 - \epsilon|^{1/2}. \quad (5)$$

Тогда, учитывая малость всех величин  $\Phi$ ,  $\Theta$ ,  $1 - e$ ,  $|1 - \epsilon| \ll 1$ , представим коэффициент передачи по мощности в следующем виде:

$$\nu = 4|1 - \epsilon| Y(\theta_{\min}, \gamma/\delta); \quad Y \approx \frac{1}{2} \int_0^{\theta_{\min}} R(\theta, \gamma/\delta) \varphi d\varphi, \quad (6)$$

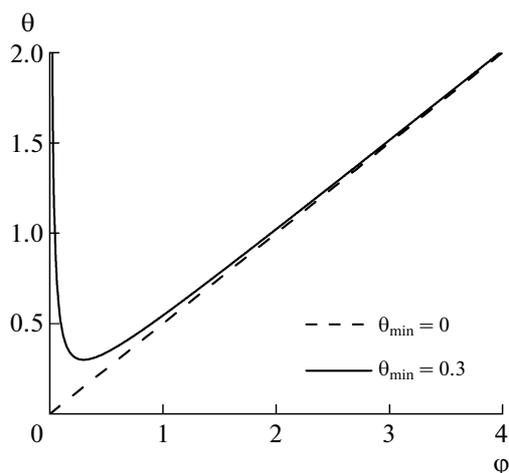
$$R(\theta, \gamma/\delta) = \left| \theta - \sqrt{\theta^2 - \exp(i\alpha)} \right|^4; \quad (7)$$

$$\exp(i\alpha) \equiv \frac{1 - i\gamma/\delta}{\sqrt{1 + \gamma^2/\delta^2}}; \quad \theta \approx \frac{\varphi}{2} + \frac{\theta_{\min}^2}{2\varphi},$$

а уравнение эллипсоида (2) перепишем в упрощенной форме, очень для качественных оценок,

$$\rho(\varphi) \approx \frac{2F}{1 + \varphi^2/\theta_{\min}^2}. \quad (8)$$

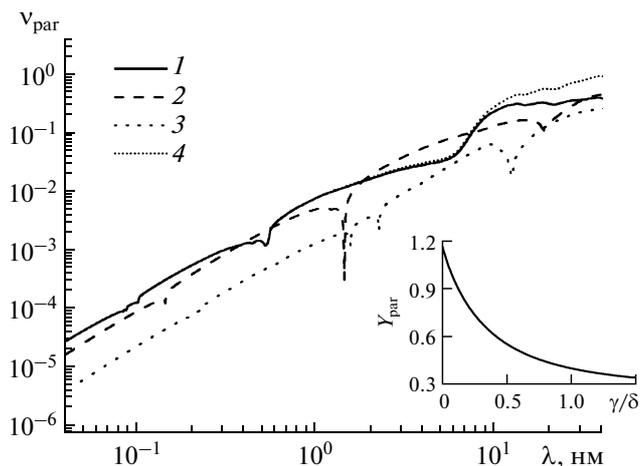
Смысл выражений (4)–(7) заключается в том, что сильная зависимость эффективности эллипсоида  $\nu$  от длины волны выделена в явном виде через множитель  $|1 - \epsilon| \sim \lambda^2$ , который уменьшается на четыре порядка при переходе от длины волны 10 нм к 0.1 нм. В то же время, как будет видно из дальнейшего изложения, значение приведенной эффективности  $Y$  составляет 0.3–1 независимо от длины волны излучения. Связь эксцентриситета, т.е. геометрической формы эллипсоида, с длиной волны определяется параметром  $\theta_{\min}$ . Отметим, что этот параметр определяет минимальное зна-



**Рис. 2.** Зависимость угла скольжения  $\theta$  между лучом и отражающей поверхностью от угла выхода луча из источника  $\varphi$ . Сплошная кривая соответствует эллипсоиду, а пунктирная — параболоиду.

чение угла скольжения  $\theta$ , достигаемое при отражении луча от окружности центрального сечения эллипсоида (рис. 1а, 2).

Если  $\theta_{\min} = 0$ , т.е. эксцентриситет  $e = 1$ , эллипсоид вырождается в параболоид и (6) определяет эффективность преобразования излучения точечного источника в коллимированный пучок  $v_{par} \equiv v(e = 1)$ . Отметим, что в этом случае интеграл (6) может быть рассчитан аналитически [9]. В отсутствие поглощения ( $\gamma = 0$ ) значение параметра  $Y_{par} = 7/6$  несколько превышает единицу, что связано с вкладом лучей, отражающихся от поверхности параболоида под углами скольжения, превышающими критический угол ПВО. При увеличении поглощения в веществе параметр  $Y_{par}$  уменьшается примерно до 0.24 (если  $\gamma \gg \delta$ ). Однако при выборе материала отражающего покрытия следует учитывать, что большие значения  $Y_{par}$ , соответствующие малому поглощению излучения, еще не означают максимально возможного значения коэффициента передачи  $v_{par}$ , которое зависит и от абсолютного значения поляризуемости вещества. Расчеты показывают, что максимальная эффективность передачи достигается при использовании в качестве отражающего покрытия либо самых тяжелых материалов (Au, Pt, Os, Ir), характеризующихся наибольшей поляризуемостью  $|1 - \epsilon|$ , либо более легких материалов (Ni, Ru) с меньшей поляризуемостью, но и существенно меньшим поглощением (параметром  $\gamma/\delta$ ). Учитывая, что для практических применений следует использовать отражающие покрытия, устойчивые к окислению, их набор, по существу, ограничен перечисленными выше материалами.



**Рис. 3.** Коэффициент преобразования  $v_{par}$  излучения точечного источника в коллимированный пучок с помощью параболоида бесконечной длины с отражающим покрытием из Au (1), Ni (2) и стекла марки C52-1 (3) химического состава  $\text{SiO}_2$  (68.2%),  $\text{Ba}_2\text{O}_3$  (19%),  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (3.5%),  $\text{Na}_2\text{O}$  (4.8%),  $\text{K}_2\text{O}$  (4.5%). Кривая 4 рассчитана для параболоида с золотым покрытием по приближенной формуле (6). На вставке зависимость приведенной эффективности параболоида  $Y_{par}$  от отношения  $\gamma/\delta$ .

Зависимость  $Y_{par}$  от отношения  $\gamma/\delta$  показана на вставке к рис. 3 при естественном для рентгеновского диапазона предположении, что  $\delta > 0$ . На рис. 3 показана зависимость коэффициента передачи параболоида от длины волны излучения для нескольких материалов отражающих покрытий. Отметим, что стекло, хотя и является наилучшим материалом для изготовления концентраторов с технологической точки зрения [1], приводит к падению эффективности почти на порядок по сравнению с лучшими отражающими покрытиями. Поэтому важно уметь нанести покрытие из хорошо отражающего вещества на внутреннюю поверхность сильно вытянутых концентраторов. Такая технология разработана, а пример ее использования приведен в [12].

Кривые 1–3 на рис. 3 рассчитаны по точной формуле (3), в то время как кривая 4 — по приближенной формуле (6), где основными допущениями являются замена  $\sin(2\Phi)$  на  $2\Phi$  и пренебрежение поляризационными эффектами. Видно, что различие между кривыми 1 и 4 начинается проявляться лишь в длинноволновой области спектра  $\lambda > 10$  нм. В области более коротких длин волн  $\lambda < 10$  нм анализ, основанный на приближенных выражениях, полностью справедлив.

Проанализируем, насколько уменьшится эффективность при переходе от параболоида к эллипсоиду. Нормированная эффективность эллипсоида  $v/v_{par} \equiv Y/Y_{par}$  показана на рис. 4 в зависимости от параметров  $\gamma/\delta$  и  $\theta_{\min}$ . Увеличение

параметра  $\theta_{\min}$ , т.е. уменьшение эксцентриситета эллипсоида, приводит к уменьшению коэффициента передачи по сравнению с параболоидом. Отметим, что значения  $\theta_{\min} > 1$  соответствуют ситуации, когда все лучи падают на поверхность концентратора вне области ПВО. Рисунок 4 показывает, что эффективность эллипсоида составляет не менее 90% от эффективности параболоида, если минимальный нормированный угол скольжения удовлетворяет неравенству

$$\theta_{\min} \leq \{0.3 - 0.43\}, \quad \gamma/\delta = \{1 - 0.1\}. \quad (9)$$

Тем самым получаем условие для оптимальных значений эксцентриситета эллипсоида

$$1 - e \leq \{0.045 - 0.092\} |1 - \varepsilon|, \quad \gamma/\delta = \{1 - 0.1\}. \quad (10)$$

причем коэффициенты пропорциональности в (9)–(10) увеличиваются при уменьшении параметра  $\gamma/\delta$  от 1 до 0.1. Условие (10) наглядно демонстрирует, что для обеспечения высоких коэффициентов передачи эксцентриситет должен быстро (пропорционально  $\lambda^2$ ) приближаться к единице при уменьшении длины волны, т.е. концентратор будет становиться все более и более вытянутым.

### КОНЦЕНТРАТОР КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

До сих пор рассматривался эллипсоидальный концентратор максимально возможной длины  $L = 2F$ , когда входная и выходная апертуры расположены в фокальных плоскостях (рис. 1а). Проанализируем, насколько уменьшится коэффициент передачи эллипсоида при уменьшении его длины и каково будет оптимальное положение его входной апертуры по отношению к источнику, который по-прежнему будем считать точечным (рис. 1б). Вместо (6) получаем интеграл с конечными пределами

$$Y \approx \frac{1}{2} \int_{\Phi_{\min}}^{\Phi_{\max}} R\left(\theta, \frac{\gamma}{\delta}\right) \rho d\Phi. \quad (11)$$

Здесь  $\Phi_{\max} = \Phi_{\max}/|1 - \varepsilon|^{1/2}$  и  $\Phi_{\min} = \Phi_{\min}/|1 - \varepsilon|^{1/2}$  определяют положения входной и выходной апертуры концентратора и связаны с его длиной  $L$  следующим соотношением:

$$L = \rho(\Phi_{\min}) \cos(\Phi_{\min}) - \rho(\Phi_{\max}) \cos(\Phi_{\max}),$$

где  $\rho = \rho(\Phi)$  – уравнение эллипсоида, определенное в (2).

Считая, что  $\Phi_{\min}, \Phi_{\max} \ll 1$ , найдем приближенную связь между верхним и нижним пределом интегрирования в (11):

$$\frac{\Phi_{\max}^2}{\theta_{\min}^2} \left(1 - \frac{L}{2F}\right) - \frac{\Phi_{\min}^2}{\theta_{\min}^2} \left(1 + \frac{L}{2F}\right) = \frac{L}{2F} \left(1 + \frac{\Phi_{\max}^2 \Phi_{\min}^2}{\theta_{\min}^2 \theta_{\min}^2}\right). \quad (12)$$

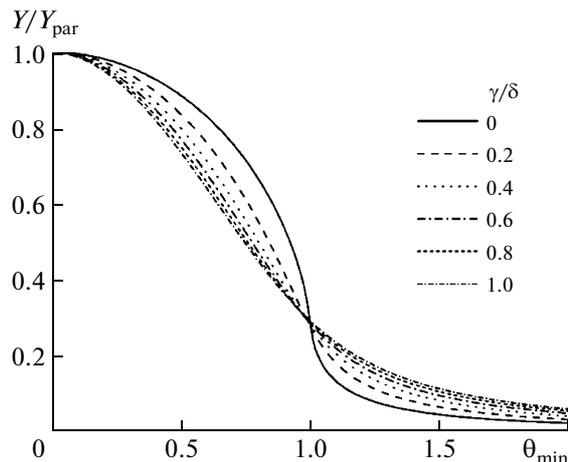
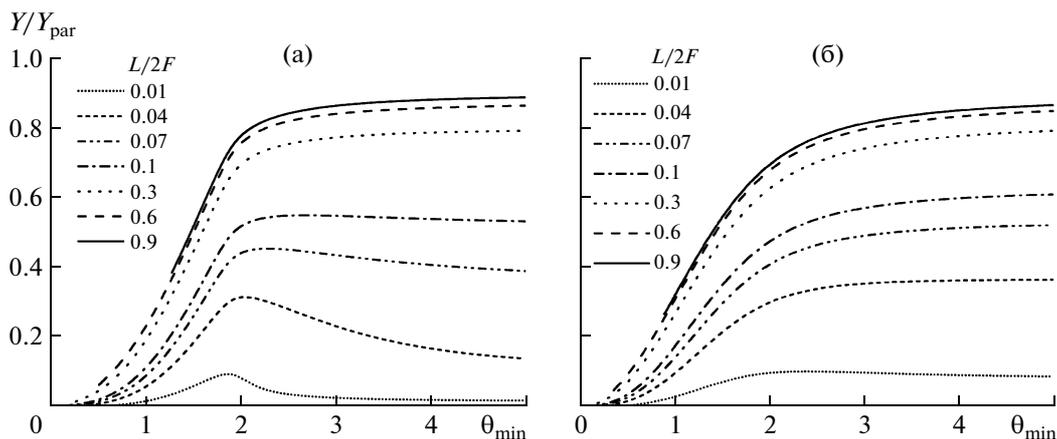


Рис. 4. Зависимость нормированной эффективности эллипсоидального концентратора  $v/v_{par} \equiv Y/Y_{par}$  от параметра  $\theta_{\min}$  для различных значений  $\gamma/\delta$ .

В (12) появился новый безразмерный параметр  $L/(2F)$ , а интеграл (11) зависит только от  $\Phi_{\max}$ , если с помощью (12) выразить  $\Phi_{\min}$  через  $\Phi_{\max}$  и зафиксировать остальные параметры. Поэтому проблема оптимизации сводится к тому, чтобы найти значение  $\Phi_{\max}$ , обеспечивающее максимум интеграла (11) при заданных  $\gamma/\delta, \theta_{\min}, L/(2F)$ .

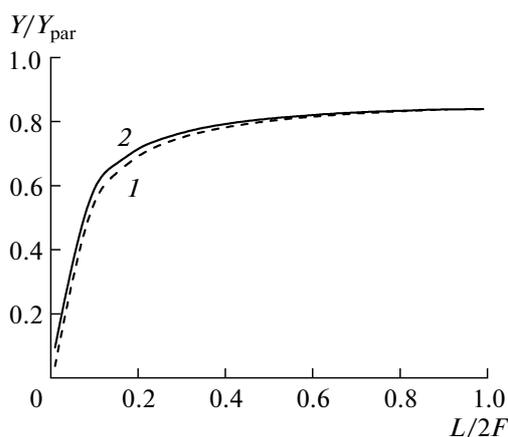
На рис. 5а показана зависимость нормированной эффективности эллипсоида  $v/v_{par} \equiv Y/Y_{par}$  от положения входной апертуры концентратора, т.е. от угла  $\Phi_{\max}$ , рассчитанная по формуле (11) при фиксированном  $\gamma/\delta = 0.1$ , но для различных отношений  $L/2F$ . Значение  $\theta_{\min} = 0.43$  выбрано из условия, что эффективность эллипсоида максимально возможной длины  $L = 2F$  составляет 90% от эффективности параболоида (рис. 4). Видно, что при  $L/2F < 0.1$  существует максимум, соответствующий оптимальному положению входной апертуры и наибольшей эффективности концентратора при заданной его длине. При  $L/2F > 0.1$  этот пик исчезает, а интеграл (11) практически постоянен, если  $\Phi_{\max} \geq 2.5$ , т.е. если входная апертура концентратора расположена достаточно близко к источнику. С одной стороны, при приближении концентратора к источнику угол скольжения лучей, падающих на ближнюю к источнику часть концентратора, увеличивается, что приводит к уменьшению коэффициента передачи. С другой стороны, телесный угол, в котором распространяются лучи, попадающие в апертуру концентратора, увеличивается пропорционально  $\sin \Phi_{\max}$ , приводя к увеличению эффективности. В результате эти два эффекта компенсируют друг друга, обеспечивая постоянство коэффициента



**Рис. 5.** Зависимость нормированной эффективности эллипсоидального концентратора  $v/v_{par} \equiv Y/Y_{par}$  от положения его входной апертуры (угла  $\theta_{max}$ ) при фиксированных параметрах  $\gamma/\delta = 0.1$  и  $\theta_{min} = 0.43$  (а) или  $\gamma/\delta = 1$  и  $\theta_{min} = 0.3$  (б), но различных значениях  $L/2F$ , указанных на рисунке.

передачи в некотором диапазоне расстояний от концентратора до источника. В то же время выражение (12) получено в предположении, что угол  $\Phi_{max}$  мал. Поэтому случай, когда входная апертура концентратора расположена вплотную к источнику, из анализа выпадает.

При увеличении поглощения (параметра  $\gamma/\delta$ ) локальный максимум при малых значениях  $L/2F$  становится все менее выраженным и, в конце концов, совсем пропадает (рис. 5б). Как и на рис. 5а, значение  $\theta_{min} = 0.3$  выбрано таким, чтобы эффективность эллипсоида составляла 90% от эффективности параболоида при увеличении



**Рис. 6.** Зависимость нормированной эффективности эллипсоидального концентратора  $v/v_{par} \equiv Y/Y_{par}$  от его длины при фиксированных параметрах  $\gamma/\delta = 0.1$  и  $\theta_{min} = 0.43$  (1) или  $\gamma/\delta = 1$  и  $\theta_{min} = 0.3$  (2). Значение  $\Phi_{max}$  выбрано равным 2.5 (1) или 3.2 (2).

длины концентратора до максимально возможной  $L = 2F$ .

Рисунок 5 позволяет заключить, что для обеспечения максимальной эффективности входная апертура концентратора должна быть расположена так близко к источнику, чтобы

$$\Phi_{max} \geq \{2.5 - 3.2\} |1 - \epsilon|^{1/2}, \quad \gamma/\delta = \{0.1 - 1\}, \quad (13)$$

где коэффициент пропорциональности увеличивается при увеличении отношения  $\gamma/\delta$  от 0.1 до 1.

На рис. 6 показана зависимость приведенной эффективности эллиптического концентратора  $v/v_{par} \equiv Y/Y_{par}$  от его безразмерной длины  $L/2F$ . Как и выше, расчет проведен для двух разных отношений  $\gamma/\delta = 0.1$  и 1, значение параметра  $\theta_{min}$  (0.43 и 0.3 соответственно) выбрано таким, чтобы эффективность эллипсоида составляла 90% от максимально возможной, достигаемой при увеличении его длины до  $2F$ , а положение входной апертуры выбрано в соответствии с (13).

Чтобы обеспечить значение эффективности порядка 90% по отношению к концентратору максимально возможной длины  $L = 2F$  и, следовательно, около 80% от эффективности параболоида, длина концентратора должна удовлетворять условию

$$L/2F \geq 0.35, \quad (14)$$

т.е. составлять не менее третьей части расстояния от источника до образца.

Воспользовавшись (8)–(9) и (13)–(14), находим, что для обеспечения максимальной эффективности входная апертура концентратора должна быть расположена очень близко к источнику

$$L_{in} \leq \{0.0081 - 0.028\} 2F, \quad \gamma/\delta = \{1 - 0.1\}, \quad (15)$$

причем в случае отражающего покрытия с большим поглощением расстояние до источника должно быть существенно (в 3.5 раза) меньше. Если по тем или иным причинам расстояние от источника до концентратора  $L_{in}$  не может быть меньше определенного значения, то (15) определяет минимальное расстояние от источника до образца  $2F$ , необходимое для достижения высокой эффективности.

Тем самым для достижения высокой эффективности передачи излучения достаточно использовать левую половину эллипсоида или ее часть. Этот вывод привлекателен с технологической точки зрения, поскольку, например, изготовление концентраторов методом термопластической деформации стекла [1] подразумевает снятие стеклянного эллипсоида после его отвердевания с металлического шаблона.

### ИСТОЧНИК КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ

До сих пор рассматривался точечный источник рентгеновского излучения, что, конечно, является абстракцией. Проанализируем, как изменится эффективность эллиптического концентратора, если диаметр  $S$  источника конечен. В этом случае каждая точка отражающей поверхности облучается конусом лучей, падающих на поверхность в интервале углов скольжения  $\Theta(\Phi) \pm S/[2\rho(\Phi)]$ , где  $\Theta(\Phi)$  — угол скольжения луча, испущенного из центра источника, а  $\rho(\Phi)$  — это уравнение поверхности эллипсоида (2) в полярных координатах. Конечный размер источника не будет влиять на эффективность концентратора, если разброс в углах падения излучения в каждой точке отражающей поверхности настолько мал, что  $S/[2\rho(\Phi)] \ll \Theta(\Phi)$ . Перейдя к нормированным углам (5), замечаем, что возникает новый безразмерный параметр  $\sigma \equiv S/(2F|1 - \epsilon|^{1/2})$ , и получаем условие, при котором конечным размером источника можно пренебречь

$$\sigma \equiv \frac{S}{2F|1 - \epsilon|^{1/2}} \ll \frac{\rho(\varphi)}{F} \theta(\varphi). \quad (16)$$

Воспользовавшись (7)–(8), легко убедиться в том, что правая часть в (16) является монотонно убывающей функцией угла  $\varphi$  и достаточно потребовать, чтобы (16) выполнялось при  $\varphi = \varphi_{\max}$ . Тогда находим, что (16) выполняется, если

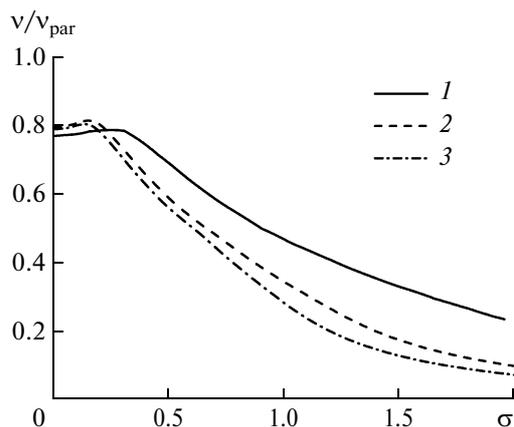
$$\sigma \ll \theta_{\min}^2 / \varphi_{\max}, \quad (17)$$

в частности  $\sigma \ll 0.073$  при  $\gamma/\delta = 0.1$  и  $\sigma \ll 0.026$  при  $\gamma/\delta = 1$ . Полученные условия накладывают ограничения на минимальные размеры концентратора, когда конечным размером источника еще можно пренебречь, а эффективность концентратора высока.

Для более точных оценок проведем расчет эффективности концентратора для разных длин волн в зависимости от размера источника с использованием метода прогонки лучей. Этот метод является компьютерным аналогом реального эксперимента, широко используется для анализа сложных рентгенооптических систем [13–15] и может учитывать рассеяние излучения на поверхностях шероховатостях [16]. Генерируя пару равномерно распределенных случайных чисел, определяем точку на поверхности источника, из которой испускается луч (рентгеновский фотон единичной энергии). Направление выхода луча определяется двумя другими случайными числами, одно из которых (азимутальный угол выхода фотона) также характеризуется равномерным распределением, а плотность распределения другого, определяющего угол выхода  $\Phi$  по отношению к оптической оси, пропорциональна  $\sin(2\Phi)$ , в соответствии с (3). Различные методы образования случайных чисел с заданным законом распределения обсуждаются в [17]. Затем находится точка пересечения луча с поверхностью концентратора, угол скольжения  $\Theta$  между лучом и поверхностью и рассчитывается коэффициент отражения  $R(\Theta)$ . После этого генерируется еще одно случайное число  $\eta$  с равномерной плотностью распределения в интервале  $[0; 1]$ , которое сравнивается со значением  $R$ . Если  $\eta < R$ , то луч (фотон) отражается без изменения своей энергии и находится точка его пересечения с фокальной плоскостью. Если  $\eta > R$ , то луч поглощается и начинается трассировка нового луча. Разбив правую фокальную плоскость (поверхность образца) на малые пиксели и суммируя попавшие в них лучи, определяем распределение плотности потока излучения по поверхности образца и полную эффективность концентратора.

Результаты расчетов представлены на рис. 7. Параметры концентраторов выбраны в соответствии с проведенным анализом так, чтобы их эффективность составляла около 80% от эффективности параболоида для точечного источника. Вычисления были проведены для нескольких сильно различающихся длин волн и лучших по оптическим свойствам отражающих покрытий. Кривые 2 и 3 на рис. 7, рассчитанные для  $\lambda = 0.989$  и  $\lambda = 4.47$  нм, близки друг к другу, поскольку на этих длинах волн близки отношения  $\gamma/\delta \sim 0.4$  для материалов отражающих покрытий (Au и Ni соответственно). Кривая 1 ( $\lambda = 0.154$  нм) несколько отличается от них из-за существенно меньшего отношения  $\gamma/\delta \sim 0.1$  для золотого отражающего покрытия на этой длине волны. Тем не менее рис. 7 позволяет заключить, что независимо от отношения  $\gamma/\delta$  полученное неравенство (17) сводится к более простому и понятному условию

$$\sigma \leq \theta_{\min}^2 / 2\varphi_{\max}, \quad (18)$$



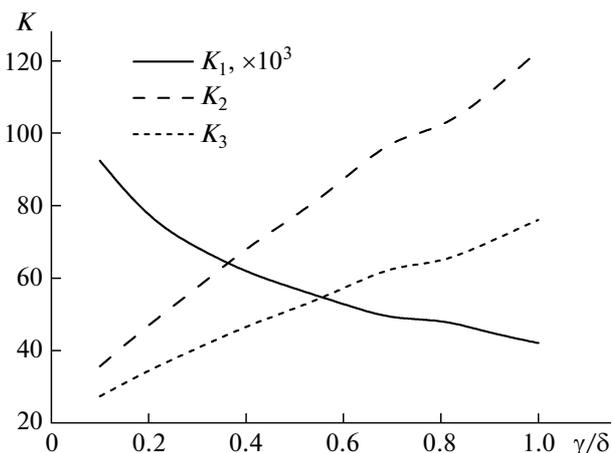
**Рис. 7.** Зависимость эффективности эллипсоидального концентратора  $v$  от размера источника  $\sigma$ . Значения  $v$  нормированы на эффективность параболоида для точечного источника. Расчеты проведены методом прогонки лучей для нескольких длин волн рентгеновского излучения и разных материалов отражающего покрытия:  $\lambda = 0.154$  нм, Au (1);  $\lambda = 0.989$  нм, Au (2);  $\lambda = 4.47$  нм, Ni (3).

при выполнении которого конечный размер источника не влияет на эффективность эллипсоидального концентратора. Из (18) следует, что расстояние между источником и образцом должно быть достаточно велико, а именно

$$2F \geq \{27 - 77\} S / |1 - \varepsilon|^{1/2}, \quad \gamma/\delta = \{0.1 - 1\}, \quad (19)$$

причем это расстояние возрастает как  $\lambda^{-1}$  при уменьшении длины волны излучения, а коэффициент пропорциональности увеличивается при увеличении отношения  $\gamma/\delta$ .

Кроме того, рис. 7 демонстрирует неожиданный результат: при увеличении размера источника эффективность концентратора сначала возрастает, хотя и не настолько, чтобы этот эффект мог быть полезным для практических применений. Поясним причину возникновения эффекта. Рассмотрим некоторую фиксированную точку на отражающей поверхности. Ясно, что лучи, исходящие из разных частей источника, падают на эту точку под несколько различающимися углами скольжения. Основываясь на простых геометрических соображениях, можно показать, что лучи из чуть большей части источника освещают точку под углами скольжения, чуть меньшими угла скольжения луча, испущенного из центра. Это и приводит к некоторому увеличению суммарного коэффициента отражения всех лучей, падающих на рассматриваемую точку, по сравнению с точечным источником, т.е. к увеличению эффективности концентратора. При дальнейшем увеличении размера источника разброс в углах скольжения возрастает и появляются лучи, падающие на рассматриваемую точку вне области ПВО, причем их



**Рис. 8.** Зависимости параметров  $K_1$ ,  $K_2$  и  $K_3$ , используемых для определения геометрических параметров оптимального эллипсоидального концентратора, от отношения  $\gamma/\delta$ .

доля непрерывно увеличивается. В результате суммарный коэффициент отражения всех лучей от рассматриваемой точки уменьшается, приводя к падению эффективности концентратора. Кроме того, при достаточно большом размере источника появляются лучи, которые после первого отражения от концентратора снова падают на его поверхность. Такие многократно отраженные лучи могут достичь правой фокальной плоскости, но формируют на ней широкое пятно с очень низкой плотностью потока, а потому не представляют интереса для практического использования концентраторов и из рассмотрения исключаются. Этот факт приводит к дополнительному уменьшению рассчитанной эффективности.

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные выражения позволяют без дополнительных расчетов определить параметры эллипсоидального концентратора, размеры которого минимальны, а эффективность, напротив, близка к максимальной и составляет около 80% от эффективности преобразования излучения точечного источника в коллимированный пучок с помощью параболоида.

Прежде всего, задавая рабочую длину волны, выбираем материал отражающего покрытия из весьма ограниченного списка веществ, приведенного выше. После этого из (10) определяем эксцентриситет наименее вытянутого эллипсоида  $1 - e = K_1 |1 - \varepsilon|$ , где коэффициент  $K_1$ , зависящий только от отношения  $\gamma/\delta$ , показан на рис. 8. Затем, воспользовавшись (15) и (19), выбираем минимально возможное расстояние между источником и образцом в соответствии со следующим условием:  $2F = \max\{K_2 L_{in}; K_3 S / |1 - \varepsilon|^{1/2}\}$ . Это рас-

Оптимальные параметры эллипсоидальных концентраторов для ряда длин волн рентгеновского излучения, широко используемых на практике, в предположении, что диаметр источника излучения  $S = 300$  мкм, а минимально возможное расстояние от источника до концентратора  $L_{in} = 1$  см

Параметр	$\lambda = 0.154$ нм	$\lambda = 0.989$ нм	$\lambda = 4.47$ нм	$\lambda = 13.5$ нм
Отражающее покрытие	Au	Au	Ni	Ru
Отношение $\gamma/\delta$	0.103	0.351	0.477	0.144
Поляризуемость $ 1 - \epsilon $	$9.44 \times 10^{-5}$	$3.05 \times 10^{-3}$	$3.12 \times 10^{-2}$	0.22
Эксцентриситет, $1 - e$	$8.72 \times 10^{-6}$	$1.98 \times 10^{-4}$	$1.80 \times 10^{-3}$	$1.80 \times 10^{-2}$
Расстояние от источника до образца $2F$ , см	85.0	61.8	74.8	41.2
Длина концентратора $L$ , см	29.8	21.6	26.2	14.4
Расстояние от источника до концентратора $L_{in}$ , см	2.39	1.0	1.0	1.0
Диаметр входной апертуры концентратора $D_{in}$ , см	0.12	0.31	1.00	2.15
Диаметр выходной апертуры концентратора $D_{out}$ , см	0.35	1.18	4.33	7.74
Диаметр пятна фокусировки на полувысоте $S_F$ , мм	0.87	0.91	0.93	0.89
Эффективность $\nu$ , %	0.027	0.61	5.17	42.8
Нормированная эффективность $\nu/\nu_{par}$	0.77	0.81	0.79	0.82
Нормированная плотность потока в центре фокусного пятна, $q/q_0$	$8.43 \times 10^{-6}$	$1.48 \times 10^{-4}$	$1.22 \times 10^{-3}$	$1.55 \times 10^{-2}$
Увеличение плотности потока в центре фокусного пятна за счет использования концентратора, $q/q_R$	$2.7 \times 10^2$	$2.5 \times 10^3$	$3.03 \times 10^4$	$1.17 \times 10^5$

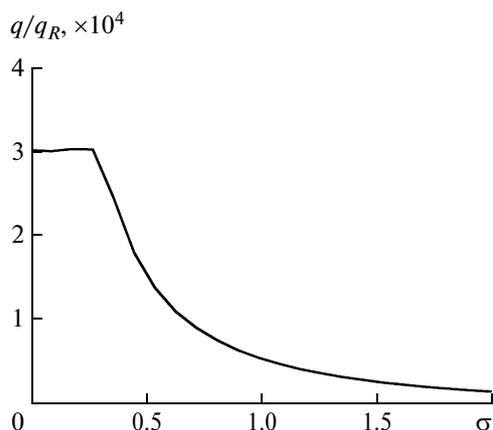
стояние определяется либо диаметром источника  $S$ , либо минимально возможным с практической точки зрения расстоянием от источника до концентратора  $L_{in}$ . Коэффициенты  $K_2$  и  $K_3$ , зависящие только от отношения  $\gamma/\delta$ , показаны на рис. 8. Тем самым, в соответствии с (2), форма эллипсоида полностью определена. Далее находим наименьшую возможную длину концентратора  $L = 0.7F$ . Наконец, если межфокусное расстояние  $2F$  ограничено размером источника, из (15) находим расстояние от источника до входной апертуры концентратора  $L_{in} = 2F/K_2$ . На этом определение оптимальных параметров эллипсоидального концентратора заканчивается.

В таблице приведены параметры оптимизированных эллипсоидальных концентраторов для нескольких длин волн рентгеновского излучения. Среди них  $K_\alpha$ -линия меди ( $\lambda = 0.154$  нм) и  $K_\alpha$ -линия углерода ( $\lambda = 4.47$  нм) характеризуются наибольшей интенсивностью при использовании рентгеновских трубок в качестве источников ЖР- и МР-излучения и поэтому широко используются на практике при исследовании структуры и состава вещества.  $L_\alpha$ -линия магния ( $\lambda = 0.989$  нм) является стандартной для многих лабораторных установок ФЭС. Наконец, излучение с длиной волны  $\lambda = 13.5$  нм находит все более широкое применение в современных установках проекционной нанолитографии, где эллипсоидальные концентраторы могут использоваться в качестве конденсоров для облучения отражающих масок.

Параметры концентраторов найдены из полученных выше аналитических выражений, а значение эффективности определялось численно с использованием метода прогонки лучей. Для определенности размер источника выбран равным  $S = 300$  мкм. Тогда минимальное расстояние от источника до концентратора, ограничиваемое размером источника, выглядит вполне приемлемым в случае ЖР-излучения ( $L_{in} \sim 2.4$  см для  $\lambda = 0.154$  нм), но оказывается чрезвычайно малым для остальных длин волн (от  $L_{in} \sim 4$  мм для  $\lambda = 0.989$  нм до  $L_{in} \sim 0.5$  мм для  $\lambda = 13.5$  нм), что вряд ли возможно осуществить на практике из-за конструкции рентгеновских трубок. Поэтому для МР-излучения расстояние от источника до концентратора выбрано равным  $L_{in} = 1$  см, что, по-видимому, может рассматриваться как минимально возможное с практической точки зрения.

Отметим, что полученные значения эффективности концентраторов соответствуют ожидаемому, которое составляет 80% от эффективности парабооида, т.е. от максимально возможного для оптических элементов с однократными отражениями.

Наибольшей проблемой с технологической точки зрения, по-видимому, является изготовление концентратора для ЖР-излучения, который представляет собой довольно длинную ( $L \sim 30$  см) и очень узкую трубку с внутренним диаметром, изменяющимся от 1.2 до 3.5 мм. Конструкция концентратора может быть упрощена, но за счет уменьшения его эффективности. Простейшим



**Рис. 9.** Радиальное распределение плотности потока МР-излучения ( $\lambda = 4.47$  нм) вдоль поверхности образца при использовании концентратора с покрытием Ni, параметры которого представлены в таблице. Плотность потока нормирована на ее значение в отсутствие концентратора.

способом является уменьшение длины концентратора. Действительно (рис. 6), если “отрезать” дальнюю от источника половину концентратора, т.е. уменьшить параметр  $L/2F$  от 0.35 до 0.17, то эффективность концентратора уменьшится от 80 до 60% по отношению к эффективности параболоида, что может быть вполне достаточным для ряда применений. Более последовательный подход к упрощению конструкции подразумевает, что меньшее значение требуемой эффективности принимается во внимание с самого начала оптимизации. Так, рис. 4 показывает, что значение параметра  $\theta_{\min}$  увеличится в 1.5 раза (от 0.43 до 0.65) в случае концентратора для ЖР-излучения, если нормированную эффективность  $v/v_{\text{par}}$  уменьшить на 20%. В результате отличие эксцентриситета эллипсоида от единицы  $1 - e$  тоже увеличится в 1.5 раза, т.е. концентратор станет менее вытянутым, что предпочтительнее с точки зрения технологии изготовления.

Может оказаться, что использованное при расчетах расстояние от МР-источника до концентратора  $L_{\text{in}} = 1$  см слишком мало и требуется его увеличение, например, до 2 см. Тогда все геометрические параметры МР-концентраторов, представленные в таблице, следует увеличить в 2 раза, причем значение эффективности останется тем же самым. Длина концентратора для  $K_{\alpha}$ -линии углерода при этом превысит 50 см, что может оказаться за пределами возможностей существующих технологий. Как и в случае концентратора для ЖР-излучения, проблему можно решить либо простым уменьшением длины концентратора, “отрезав” дальнюю от источника его часть, либо провести более аккуратную оптимизацию, не-

сколько уменьшив требуемую эффективность концентратора.

В дополнение к расчетам эффективности концентратора, который определяет полное количество рентгеновских фотонов, падающих на образец, рассчитали методом прогонки лучей и распределение плотности потока излучения  $q$  вдоль поверхности образца. Пример показан на рис. 9 для концентратора с покрытием из Ni, оптимизированного для длины волны МР-излучения  $\lambda = 4.47$  нм. Значения плотности потока в центре образца представлены в таблице для всех рассмотренных концентраторов. Как принято в литературе, плотность потока  $q$  нормирована на ее значение  $q_R$  в отсутствие концентратора (1). Отметим, что в литературе отношение  $q/q_R$  зачастую называют “коэффициентом усиления” (gain). Рисунки 9 показывают, что плотность потока увеличивается в  $\sim 30000$  раз за счет использования оптики, т.е. применение концентратора чрезвычайно выгодно. В то же время использование параметра  $q/q_R$  представляется несколько лукавым.

Действительно, смысл использования концентрирующей оптики состоит в том, что с ее помощью можно получить заданную плотность потока, как и полный поток (эффективность), на любом расстоянии от источника, выбрав параметры (размеры) концентратора надлежащим образом. В то же время плотность потока убывает с расстоянием как  $1/R^2$  в отсутствие оптики. Поэтому, увеличив все геометрические размеры концентратора, допустим, в 2 раза, получим дополнительный прирост “коэффициента усиления” еще в 4 раза. Если вообще убрать концентратор, но придвинуть образец к источнику на минимально возможное расстояние в 1 см, все равно получим меньшую плотность потока, чем при использовании концентратора, но только в 5.5 раз. Тем самым параметр  $q/q_R$  полностью характеризует свойства и преимущества использования концентратора лишь в том случае, когда расстояние между источником и образцом фиксировано и никоим образом не может быть изменено.

Возможно, более фундаментальным параметром, характеризующим свойства концентратора независимо от его геометрических размеров, является отношение  $q/q_0$ , где  $q_0$  — плотность потока излучения на поверхности источника. Этот параметр также представлен в таблице.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пхайко Н.А., Гилев О.Н., Елусеев М.В. и др. // Поверхность. 2011. Т. 5. С. 7.
2. Bilderback D.H., Hoffman S.A., Thiel D.J. // Science. 1994. V. 263. P. 201.
3. Balaic D.X., Barnea Z., Nugent K.A. et al. // J. Synchrotron Rad. 1996. V. 3. P. 289.

4. Zeng X., Diewer F., Feser M. et al. // Appl. Optics. 2008. V. 47. P. 2376.
5. Voss K.F., Kim K.H., Stern E.A. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 1994. V. 347. P. 390.
6. Vincze L., Riekkel C. // X-ray Spectrom. 2003. V. 32. P. 208.
7. Huang R., Bilderback D. // J. Synchrotron Rad. 2006. V. 13. P. 74.
8. Виноградов А.В., Зорев Н.Н., Кожевников И.В. // Тр. ФИАН. 1986. Т. 176. С. 195.
9. Виноградов А.В., Кожевников И.В., Толстихин О.И. // Квант. электроника. 1986. Т. 13. С. 2424.
10. Виноградов А.В., Толстихин О.И. // Тр. ФИАН. 1989. Т. 196. С. 168.
11. Bukreeva I.N., Dabagov S.B., Lagomarsino S. // Appl. Optics. 2004. V. 43. P. 6270.
12. Якимчук И.В., Кожевников И.В., Асадчиков В.Е. и др. // Матер. раб. совещ. "Рентгеновская оптика 2010". Черногловка, 2010. С. 136.
13. Bukreeva I.N., Kozhevnikov I.V., Vinogradov A.V. // J. X-Ray Sci. Technol. 1995. V. 5. P. 396.
14. Bukreeva I.N., Kozhevnikov I.V. // Nucl. Instrum. Methods A. 1997. V. 395. P. 244.
15. Якимчук И.В., Роцин Б.С., Кожевников И.В. и др. // Кристаллография. 2008. Т. 53. № 6. С. 1111.
16. Асадчиков В.Е., Букреева И.Н., Виноградов А.В. и др. // Квант. электроника. 1997. Т. 24. С. 845.
17. Справочник по специальным функциям / Под ред. Абрамовица М., Стиган И. М.: Наука, 1979. 743 с.