

Выбор геометрии эксперимента при определении волновых свойств излучения рентгеновского лазера дифракционным методом

С. С. Макаров^{1,2}, С. А. Пикуз¹, Т. А. Пикуз¹ и А. В. Бузмаков³

¹ Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские Горы, 1, Москва 119991, Россия

³ Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: seomakarov28@gmail.com

Статья поступила в редакцию 23 ноября 2018 г.

Аннотация. В данной работе рассматривается вопрос оптимизации параметров эксперимента по исследованию когерентных свойств монохроматического рентгеновского излучения с пространственным разрешением по сечению пучка. Обсуждается применение метода, основанного на анализе дифракционной картины, образованной при прохождении рентгеновского излучения через тестовый объект. На основе моделирования дифракции пучка рентгена с энергией фотонов 120 эВ на проволочке размером 20 мкм произведен анализ влияния таких параметров как размер источника, тип детектора и тестового объекта на геометрию дифракционного эксперимента. <https://doi.org/10.33849/2018129>

1. ВВЕДЕНИЕ

К сегодняшнему дню достигнут значительный прогресс в разработке различных высокоинтенсивных и когерентных источников рентгеновского излучения. Рентгеновские лазеры на свободных электронах (XFELs) относятся к таким источникам. За последнее десятилетие введены в эксплуатацию сразу несколько таких установок: LCLS (США, 2009 г.), SACLA (Япония, 2011 г.), PAL-XFEL (Корея, 2015 г.), EXFEL (Германия, 2016 г.), SwissFEL (Швейцария, 2016 г.).

С появлением рентгеновских лазеров на свободных электронах перед учеными открылись новые возможности для экспериментальных исследований в физике высоких плотностей энергии. Одновременно возрастает потребность в развитии методов определения различных параметров излучения таких лазеров. В частности, к таким параметрам относятся спектральный состав и степень когерентности пучка. Одним из наиболее известных методов определения когерентности пучка является эксперимент с двумя щелями, основанный на анализе изменения контрастности дифракционной картины, образованной при прохождении рентгеновского излучения через щели [1, 2]. Однако такие исследования дают информацию о когерентности пучка только в одном направлении. Для того, чтобы определить когерентность излучения по другим направлениям, необходимо повторять измерения при различной ориентации щелей. Более универсальный метод основан на исследовании дифракционной картины, получаемой не на щели, а на сетке с размером ячеек в несколько раз меньше, чем размер исследуемого пучка. Анализ дифракционной картины, полученной на элементах сетки, расположенных в различных участках пучка, позволяет определять спектральный состав и когерентность в соответствующих зонах. Комбинация полученных данных дает пространственное распределение этих параметров по поперечному сечению пучка. Вследствие малой расходимости обычный размер FEL пучка в области эксперимента не превышает 1 мм. Поэтому очевидно, что для практической реализации этого подхода необходимо иметь детек-

тор с очень высоким пространственным разрешением и динамическим диапазоном.

Возможности данного метода продемонстрированы в статье [3]. Его применение позволило авторам зарегистрировать изменение спектрального состава вдоль поперечного сечения пучка и определить соответствующее этому изменению соотношение интенсивностей 2-й и 3-й гармоник для установки SASE-FEL (прототип установки SACLA, Япония). На рисунке 1(а) показана схема эксперимента.

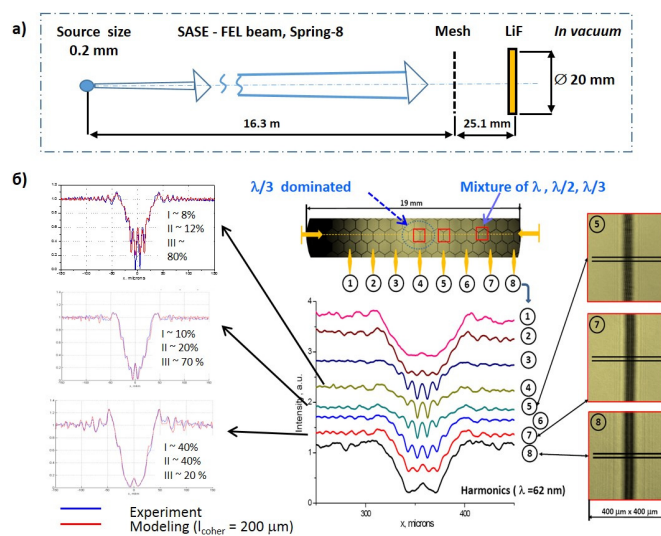


Рисунок 1. а) Схема эксперимента по определению параметров пучка SASE-FEL дифракционным методом, реализованного в работе [3] и б) Результаты моделирования дифракции рентгеновского излучения на гексагональной решетке, выбранной в качестве тестового объекта [3].

Пучок мягкого рентгеновского излучения с длиной волны 62 нм проходил через тестовый объект в виде решетки с гексагональными ячейками, после чего образованная дифракционная картина регистрировалась с помощью кристалла фторида лития. Выбор LiF в качестве

детектора в описанном эксперименте является одним из основных условий успешного применения такого метода исследования, так как кристалл обладает субмикронным пространственным разрешением при практически неограниченном поле зрения. Изображающие свойства пластинок LiF в спектральном диапазоне от вакуумного ультрафиолета до рентгеновского излучения с энергией фотонов 10 кэВ описаны во многих работах (см., например [4, 5]). Известно, что пучок лазера на свободных электронах не является чисто монохроматическим. В нем, помимо основной волны λ , присутствуют вторая и третья гармоники ($\lambda/2$ и $\lambda/3$). Однако их интенсивность, как правило, на 2–3 порядка меньше, чем у основного излучения. Для того, чтобы можно было применить обсуждаемый дифракционный метод, интенсивность основной гармоники была уменьшена до уровня 2-й и 3-й гармоник с помощью специальных фильтров. При расходимости SASE-FEL пучка равной ~ 0.6 мрад (по полувысоте), на расстоянии от источника до сетки ~ 16 м, освещенная область тестового объекта была равна по диаметру 20 мм. Центральная часть полученной на LiF дифракционной картины показана вверху рисунка 1(б). В правой части рисунка 1(б), на увеличенных изображениях отдельных проволочек, взятых из центральной области пучка и на периферии, наблюдается явное изменение структуры дифракционных полос. Наиболее наглядно это представлено на центральном графике. На соответствующих прописях отчетливо видно значительное отличие периодов и интенсивностей максимумов полос вдоль пучка.

Полученная экспериментально дифракционная картина сравнивалась с численным моделированием. Для оценки однородности пространственного распределения гармоник по апертуре пучка было рассмотрено 8 элементов сетки (отдельных проволочек). Стоит отметить, что в области тени проволоочки изменяется количество и амплитуда дифракционных максимумов при рассмотрении картин, полученных в различных областях пучка. Данный факт связан с тем, что вклад в наблюдаемую дифракционную картину от различных гармоник по сечению пучка неодинаков. Численный расчет дифракции на сетке был выполнен для излучения, содержащего три спектральные компоненты, соответствующие гармоникам реального пучка. Путем подбора их относительных интенсивностей достигалось хорошее соответствие между моделированием и экспериментом для каждого из выбранных элементов. В левой части рисунка 1(б), на графиках красным показано расчетное распределение интенсивности дифракционных полос, синим — эксперимент. Вклад каждой гармоники, полученной из моделирования, указан в процентах от общей интенсивности. Таким образом было установлено, что спектральное распределение в плоскости, перпендикулярной оси, распространение пучка SASE-FEL, не является однородным: третья гармоника $\lambda/3$ (от основного излучения) доминировала в центре пучка, в то время как на периферии пучка основной вклад давали основная λ и вторая $\lambda/2$ гармоники. Также с помощью моделирования была определена пространственная когерентность пучка — 200 мкм.

Отметим, что используемый в эксперименте детектор LiF обладает субмикронным пространственным разрешением, что позволяет зарегистрировать дифракци-

онные полосы размером менее 1 мкм. Это позволяет делать экспериментальную схему предельно компактной, устанавливая детектор на близком расстоянии от тестовой сетки. Тем не менее в некоторых случаях необходимо использовать детекторы с более низким пространственным разрешением (например, IP ~ 25 мкм, CCD ~ 13.5 мкм, рентгеновские пленки ~ 5 мкм), что требует оптимизации таких параметров эксперимента как размер ячейки сетки и расстояние между объектом и детектором.

Целью нашей статьи является рассмотрение вышеописанной схемы дифракционного определения пространственных характеристик пучка в более общем виде и демонстрация того, как от типа детектора и геометрического размера пучка должен выбираться тестовый объект и расстояние до детектора в таком эксперименте.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОХОЖДЕНИЯ ПУЧКА РЕНТГЕНОВСКОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ ЧЕРЕЗ ТЕСТОВЫЙ ОБЪЕКТ

В данной работе дифракционная картина, образующаяся при прохождении монохроматического когерентного пучка рентгеновского излучения через тестовый объект в виде сетки, считалась при помощи программного обеспечения WavePropaGator (WPG) [6]. Данный программный пакет активно используется для FEL приложений и находится в открытом доступе. Учитывая, что на реальных установках расстояния между источником и тестовым объектом устанавливаются в десятки метров, волновой фронт пучка можно считать квази-параллельным. Тогда видимость дифракционной картины в плоскости регистрирующего устройства определяется расстоянием между объектом и детектором. Также стоит отметить, что для определения когерентности излучения в разных точках пространства сетку можно представить, как набор независимых проволочек. Данный подход позволяет нам ограничиться моделированием дифракции на отдельной проволочке, считая, что излучение от соседнего элемента сетки не влияет на общую картину.

Кратко рассмотрим математическое описание, используемое в WavePropaGator. Для малых углов излучения и наблюдения распространение поперечных составляющих электрического поля E_{\perp} в свободном пространстве от точки r_1 до второй точки r_2 можно описать согласно принципу Гюйгенса–Френеля (в частотной области) как интеграл (путем интегрирования по плоскости, перпендикулярной оси пучка z):

$$E_{\perp}(r_2, w) \approx -\frac{iw}{2\pi c} \iint_S E_{\perp}(r_1, w) \frac{e^{-\frac{iw|r_2-r_1|}{c}}}{|r_2-r_1|} dS \quad (1)$$

Волновое поле на плоскости наблюдения может быть записано более в общем виде как:

$$E_{\perp}(x_2, y_2, w) \approx \iint dx_1 dy_1 K(x_2, y_2, x_1, y_1, w) E_{\perp}(x_1, y_1, w) \quad (2)$$

где ядро $K(x_2, y_2, w)$ определяется как:

$$K(x_2, y_2, x_1, y_1, w) \approx -\frac{ik}{2\pi z} e^{\frac{ik((x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2)}{2z}} \quad (3)$$

Распространение рентгеновского излучения через тестовые объекты может быть представлено в виде интеграла свертки двух функций (2). Полный фронт пучка описывается как набор пропагаторов, соответствующих отдельным оптическим компонентам, которые затем могут быть численно решены с помощью 2D быстрого преобразования Фурье (2D БПФ).

Тестовые объекты на пути распространения пучка описываются как тонкие оптические элементы, т.е. линейные фильтры, которые меняют амплитуду волнового поля в плоскости, перпендикулярной направлению распространения пучка z . Ядро (3) может быть представлено в виде:

$$K(x_2, y_2, x_1, y_1, w) = T(x_1, y_1, w)\delta(x_1 - x_2)\delta(y_1 - y_2) \quad (4)$$

где $T(x_1, y_1, w)$ – комплексная функция прохождения. Так мы имеем возможность восстановить плоскость волнового фронта после прохождения излучением тестового объекта.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

Обсудим более подробно параметры, которые необходимо учитывать при постановке эксперимента по изучению пространственных характеристик пучка дифракционным методом. На рисунке 2 представлена типичная схема такого исследования. В зависимости от энергии излучения и апертуры пучка выбирается тестовый объект. Как уже упоминалось выше, для определения когерентных свойств в плоскости пучка используется сетка из проволоки. Ключевым параметром в такой схеме является расстояние объект–детектор, при помощи которого можно варьировать размер наблюдаемой картины в плоскости регистрирующего устройства.



Рисунок 2. Параметры, определяющие геометрию эксперимента по изучению волновых свойств рентгеновского излучения дифракционным методом.

Обычно на FEL установках размер пучка в плоскости объекта достигает размера 500–1000 мкм. Для демонстрации влияния таких параметров как пространственное разрешение детектора, толщина и период сетки, расстояние объект–детектор, диаметр пучка, было выполнено моделирование прохождения рентгеновского излучения размером 500 мкм и энергией 120 эВ (10.3 нм) через медную проволочку размером 20 мкм. Отметим, что результаты моделирования могут быть пропорционально перемасштабируемы при изменении энергии излучения. На рисунке 3(а–г) представлены профили дифракционной картины, наблюдаемой на расстояниях 10–40 мм от тестового объекта. Отчетливо видно, что с увеличением расстояния объект–детектор увеличивается размер наблюдаемых дифракционных полос. Пространственное разрешение используемого детектора накладывает ограничение на выбор данного расстояния

при постановке эксперимента. Важно, чтобы размер зарегистрированных дифракционных полос был больше размера пикселя регистрирующего устройства. Так, например, при использовании рентгеновской пленки с пространственным разрешением 5 мкм оптимальным будет выбор расстояния объект–детектор 30 мм для нашего модельного случая.

Следующим параметром, влияющим на геометрию эксперимента, является период сетки. Данная величина должна выбираться значительно больше размера ожидаемых дифракционных полос для того, чтобы максимумы от двух соседних элементов сетки не перекрывали друг друга. Согласно нашему моделированию при расстоянии объект–детектор 30 мм характерный размер полос составляет 15 мкм (рисунок 3(в)). Тогда можно сделать вывод о том, что период сетки должен быть не менее 100 мкм. Отметим, что для определения когерентности в нескольких точках по плоскости пучка необходимо минимизировать период сетки. Так, для рассматриваемого модельного случая, с размером пучка в плоскости тестового объекта 500 мкм, реально мы можем охарактеризовать когерентные свойства излучения в 3–4 точках (при использовании сетки с периодом 100 мкм).

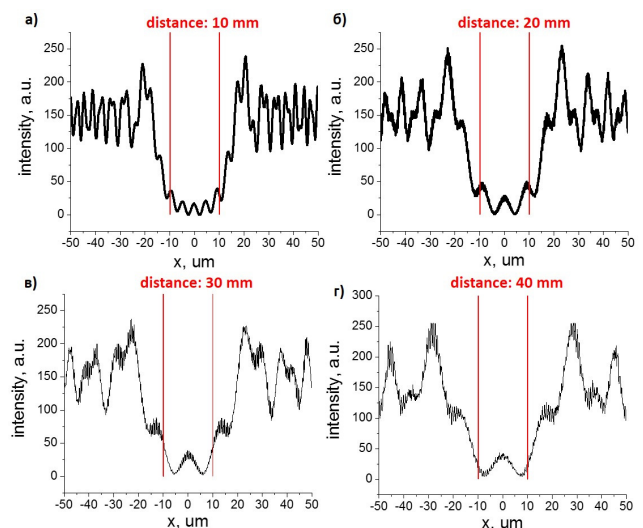


Рисунок 3. Результаты моделирования дифракции рентгеновского излучения на тестовом объекте (проволочке) в зависимости от расстояния объект–детектор: а) 10 мм б) 20 мм в) 30 мм г) 40 мм. Красными линиями обозначены границы проволочки шириной 20 мкм.

Рассмотрим влияние наличия гармоник основного излучения в пучке на дифракционную картину, наблюдаемую на детекторе. На рисунке 4(б) представлен результат моделирования с учетом присутствия второй гармоники ($\lambda + \lambda/2$) для расстояния объект–детектор 30 мм. Видно, что период и амплитуда полос меняются по сравнению с аналогичным расчетом, где учитывалась только основная длина волны (рисунок 3(в)). В картине появляются дополнительные максимумы. Следовательно, при выборе детектора, способном пространственно разрешить данные особенности, становится возможным восстановить спектральный состав исходного рентгеновского пучка.

Таким образом, в настоящей работе рассмотрено влияние размера пучка, параметров тестового объекта и

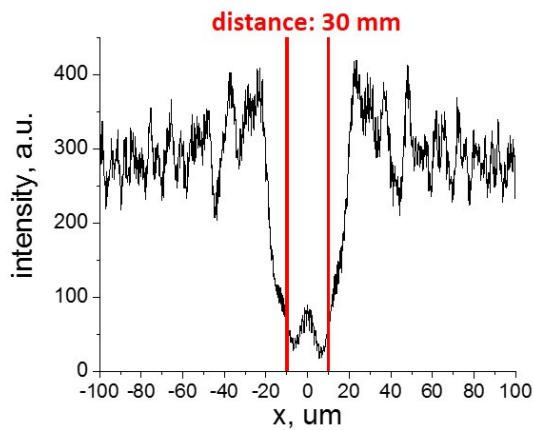


Рисунок 4. Результаты моделирования дифракции рентгеновского излучения, представляющего сумму двух гармоник $\lambda + \lambda/2$ для длины волны 10.3 нм (120 эВ) на тестовом объекте для расстояния объект–детектор 30 мм — случай, реализованный на рисунке 3(в).

пространственного разрешения детектора при постановке эксперимента по диагностике свойств рентгеновского пучка. Дифракционная картина, которая наблюдается вне тени объекта и внутри него, является источником информации о спектральном составе излучения. Соот-

ношение интенсивностей и контраст полос несут дополнительную информацию о когерентности пучка. Правильный выбор расстояния объект–детектор позволяет решать задачу характеристики пучка с точки зрения его спектрального состава и когерентности в плоскости, перпендикулярной оси распространения рентгеновского излучения.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в ОИВТ РАН в рамках государственного задания ФАНО России (тема #01201357846).

В части разработки кода численного расчета дифракционных картин работа выполнялась в ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в рамках выполнения работ по Государственному заданию.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chang C, Naulleau P, Anderson E and Attwood D 2000 *Optics Communications* **182** 25–34
2. Paterson D *et al* 2001 *Optics Communications* **195** 79–84
3. Pikuz T, Faenov A, Fucuda Y, Kato Y, Kawachi T and Kando M 2012 *Proc. of SPIE* **8678** 1–13
4. Baldacchini G *et al* 2005 *Rev. Sci. Instrum.* **76** 113104
5. Pikuz T *et al* 2018 *Mater and Radiation at extremes* **76** 197–206
6. Samoylova L, Buzmakov A, Chubar O and Sinn H 2016 *J. Appl. Cryst.* **49** 1347–1355