

劳厄弯晶光学特性的光线追迹研究

陈 灿^{1,2} 佟亚军¹ 任玉琦^{1,2} 周光照^{1,2} 谢红兰¹ 肖体乔¹

(¹ 中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)
(² 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要 基于 X 射线几何衍射的晶层模型, 编写了用于柱面弯曲劳厄晶体的光线追迹软件。程序主体用 C 语言编写, 在 VC++ 环境下运行。利用程序分别对衍射光方向和能量带宽两方面不同的项目进行追迹, 通过模拟结果与理论计算和实验结果的对比, 显示出很好的一致性, 从而验证了程序在追迹衍射光衍射方向变化和能量变化方面的正确性。利用该光线追迹软件, 追迹得到衍射光的光路(即任意位置处光斑的大小和空间分布)以及衍射光能量带宽, 通过对追迹结果的分析研究, 得到劳厄弯晶聚焦、准直和色散等光学特性。

关键词 X 射线光学; 光学特性; 光线追迹; 劳厄模式; 柱面弯曲晶体

中图分类号 O434.14; O721 **文献标识码** A **doi**: 10.3788/AOS201131.1034002

Study on the Optical Properties of Laue Bent Crystal by Ray-Tracing

Chen Can^{1,2} Tong Yajun¹ Ren Yuqi^{1,2} Zhou Guangzhao^{1,2} Xie Honglan¹ Xiao Tiquiao¹

(¹ Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)
(² Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract A program for the ray-tracing of cylindrically Laue bent crystal is developed based on the lamellar model of X-ray geometrical diffraction. The program is compiled by C and runs under the computing environment VC++. It is used to simulate different projects of the direction and energy band of the diffracted rays. The results show that the program is exactly correct on the trace of rays according to the excellent agreement between the simulations and theoretical calculation (or experimental results). Study of the X-rays' path (in and out) and energy band which can be diffracted by making use of this ray-tracing program, we obtain the optical properties of Laue bent crystal such as focusing, collimation and dispersion. It is useful for the research and application of Laue bent crystal.

Key words X-ray optics; optical properties; ray tracing; Laue mode; cylindrically bent crystal

OCIS codes 340.7440; 230.1480; 120.4140; 080.5692; 200.1130

1 引 言

随着第三代同步辐射装置的广泛应用, X 射线光源的特性得到了极大改善, 可以提供均匀、连续、高相干性、高通量的 X 射线, 为新的 X 射线成像方法的诞生、发展及应用创造了条件。而在得到大光斑尺寸、高通量密度和宽能量调谐范围的 X 射线的同时, 高热负载就成为单色器设计中需要解决的关

键问题。现在广泛使用的双平晶单色器常用水冷或者液氮冷却, 但总功率达到一定程度时这两种方法都很难取得好的热负载缓释效果。采用不对称切割的劳厄型弯晶单色器可有效降低晶体上的功率密度, 是硬 X 射线波段高通量 X 射线较为理想的单色化方案。与传统的双平晶相比, 劳厄弯晶单色器有两大优势^[1~4]: 1) 由于使用透射模式, 并且采用厚度

收稿日期: 2011-04-11; **收到修改稿日期**: 2011-05-05

基金项目: 国家 973 计划(2010CB834301)、国家自然科学基金(10805071)和中国科学院对外合作重点项目(GJHZ09058)资助课题。

作者简介: 陈 灿(1983—), 男, 博士研究生, 主要从事劳厄弯晶光线追迹及应用等方面的研究。

E-mail: chencan@sinap.ac.cn

导师简介: 肖体乔(1966—), 男, 研究员, 博士生导师, 主要从事 X 射线光学、成像光学及光学检测等方面的研究。

E-mail: tqxiao@sinap.ac.cn(通信联系人)

很薄的晶体(毫米量级)和高能量,致使大部分射线经过反射直接透过晶体而未被吸收,有利于降低晶体上的热负载;2)透射模式下由于衍射面的弯曲,增加了反射率宽度,提高了光通量(特别是在高能范围内)。这些特点对成像光束线很有意义,而为高能 X 射线应用所设计的各种双劳厄弯晶单色器已在多个同步辐射装置上得到了成功应用^[5~8]。同时,利用弯晶的聚焦、色散特性,应用于冠状动脉、肺等的造影成像(双色减影成像)的单块劳厄弯晶单色器^[9,10],也在多个同步辐射装置如欧洲光源(ESRF)、美国的国家同步辐射光源(NSLS)和德国电子同步加速器研究所(DESY)等都进行了深入的实验、应用研究。

在光束线设计、优化过程中,特别是单色器的设计中,光线追迹软件 SHADOW^[11,12] 扮演了很重要的角色,但 SHADOW 对劳厄模式下柱面弯晶的光线追迹并不支持(SHADOW 可以对布拉格模式下的弯晶进行追迹);而 Schulze 等^[13] 发展的 PEPO^[8]、Etelniemi 等^[14] 编写的 REFLECT 等程序可以计算劳厄弯晶的反射率,但对于被弯晶衍射的 X 射线的衍射方向、能量色散等方面的追迹并不适用。所以目前没有可用于劳厄弯晶光学特性分析的光线追迹软件,这给劳厄弯晶单色器的设计带来了很大的不便。为此,本文根据晶层模型来模拟晶体弯曲后内部的结构变化,通过编程来实现对 X 射线投射到弯晶及透射晶体衍射后的传播等一系列过程的追迹,模拟得到焦点的位置和光斑的大小,以及衍射能量的范围和分布情况。以此来研究弯晶的聚焦、准直和色散等光学特性,从而为设计、优化劳厄弯晶单色器提供便利。

2 物理模型及追迹软件

本软件主要的弯晶追迹程序部分是在 Windows 平台,VC++ 环境下采用 C 语言编写完成的。

程序的输入信息主要有三个部分:1)光源参数;2)晶体参数;3)其他参数。光源参数按照给定的发散度(包括水平和竖直发散度)、晶体处光斑大小和分布情况(主要采用均匀分布或者高斯分布)模拟采样得到,同时每条光线拥有一定分布的能量范围,还包括光源的入射方向(从凹面或凸面入射)。关于晶体的信息包括晶体的尺寸、非对称切割角、所选择的衍射面(晶面间距)、所选晶体的泊松比和弯曲半径。其他还有沿入射方向穿过的晶层数量、是否放置分束器以及分束器尺寸等参数。

通过程序模拟 X 射线投射到弯晶及透射晶体衍射后的传播等一系列过程,可以得到每一束光线在各个晶层面上的衍射点、衍射方向和可以被衍射的能量以及相应能量在晶体内通过的距离。利用上述模拟得到的基本数据,通过软件可以得到整个光路图(包括入射光、出射光以及衍射光),并实现得到任意位置处的光斑大小和分布情况(进一步处理可以得到焦点的位置和大小)、衍射光的能量带宽和分布及被晶体吸收和衍射光所占入射光的比例等功能。

从图 1 可知,对于光源和晶体都采用了离散化的方法来进行模拟。光源由按照一定角分布的有限条具有一定能量分布的 X 射线组成。

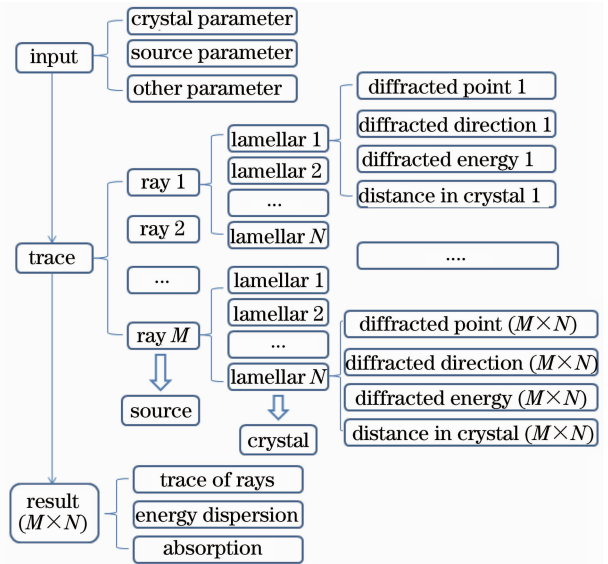


图 1 软件框架

Fig. 1 Framework of the program

2.1 晶层模型

本程序采用几何衍射的晶层模型来模拟柱面弯曲晶体的内部结构。图 2 所示即为子午弯曲劳厄晶体的晶层模型。图中 ρ 是晶体的弯曲半径;BP 为布拉格平面; χ 为晶体的不对称切割角,即布拉格平面与晶体表面法向之间的夹角; θ_B 为晶体的布拉格衍射角; F_1 是光源到晶体的距离; F_2 是晶体与焦点之间的距离。当入射 X 射线位于布拉格平面与晶体表面法向之间时,称之为“lower case”;反之,当入射 X 射线处于两者之外时,称之为“upper case”^[15~17]。

柱状弯曲晶体的 X 射线光学基本公式为

$$\frac{\cos(\chi \pm \theta_B)}{F_1} + \frac{\cos(\chi \mp \theta_B)}{F_2} = \frac{2}{\rho}. \quad (1)$$

当 X 射线以“upper case”入射时,(1)式中也选择“upper signs”,即符号依次取“+、-”;而当 X 射

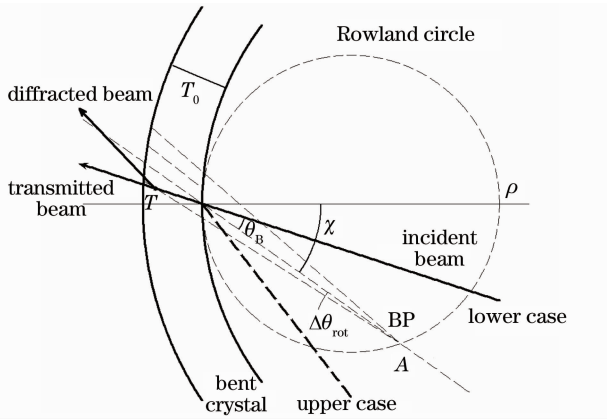


图 2 柱状劳厄弯晶的晶层模型

Fig. 2 Lamellar model for a cylindrically bent Laue crystal
 线以“lower case”入射时，(1)式中也选择“lower signs”，符号依次取“-、+”，下同。当 X 射线从弯晶的凸面(凹面)入射时，晶体的 ρ 取负值(正值)。而当像点与源点位于弯晶的同侧时， F_2 为正值；反之，则 F_2 为负值。

所谓晶层模型^[14]，即在衍射面内，把弯晶近似为由一系列渐变的非对称切割角与晶面间距的完整晶层所组成。同时布拉格平面的切线最终交汇于罗兰圆上一点^[8](图 2 中 A 点)。所以沿着入射方向，X 射线与各晶层面之间的布拉格条件也是逐步变化的。在晶体厚度 T 处，布拉格角的变化可以写为^[2,9,15,18]

$$\delta\theta(T) = \frac{T}{\rho} [\tan(\chi \pm \theta_B) + \frac{1}{2}(1 + \nu) \sin 2\chi \mp \tan \theta_B (\cos^2 \chi - \nu \sin^2 \chi)]. \quad (2)$$

由晶层模型理论可知， $\delta\theta$ 主要来自于各晶层面旋转渐变($\Delta\theta_{rot}$)和晶面受到压缩形成晶面间距变化导致布拉格角变化($\Delta\theta_d$)的影响。 $\Delta\theta_{rot}$ 是 X 射线被晶体衍射后方向发生变化的根本原因；而可以被衍射的能量范围是 $\Delta\theta_{rot}$ 和 $\Delta\theta_d$ (即 $\delta\theta$) 共同作用的结果。

讨论的对象都在衍射面内，通过理论计算得知，被弯晶反射的衍射光线在垂直于衍射面方向(一般的水平方向)的分量较入射光线没有变化，即沿原来的发散度前进。因为晶体在理想的柱面弯曲时，垂直于弯曲方向的平面内的晶层没有发生形变(没有方向的变化和晶层的压缩)，所以对入射光的该方向分量没有影响。

2.2 理论和实验验证

由于光线经过弯晶衍射后，产生的衍射方向和衍射能量的变化来自于不同影响的作用，因此接下来需要对程序模拟的结果，从衍射方向的变化和衍

射能量的变化分别进行验证。验证标准是理论计算或已有的实验结果。

2.2.1 衍射特性

2.2.1.1 焦距

F_2 是焦点与晶体中心之间的距离，根据(1)式，可以得到其解析式。

如图 3 所示，考虑光源 S 从弯晶凸面以“upper case”入射，焦点 F 位于弯晶另一侧，中心能量 $E = 33.17 \text{ keV}$ ($\theta_B = 3.42^\circ$)， $F_1 = 20 \text{ m}$ ，分别对两个 χ 进行一系列的 ρ 模拟验证，对比结果如图 4 所示。

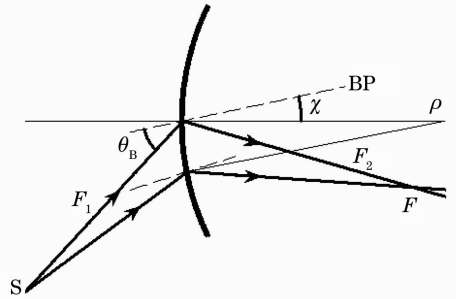


图 3 聚焦模式的劳厄弯晶

Fig. 3 Bent-crystal Laue-case geometry in focusing mode

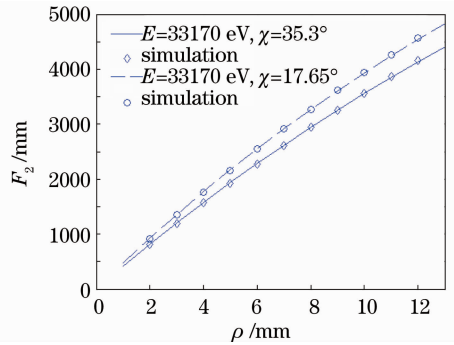


图 4 F_2 模拟结果对比图

Fig. 4 Comparison of simulation and theoretical results of F_2

两组模拟结果的相对误差的平均值和标准差分别为 $(-0.1519\%, 0.5031\%)$ 和 $(-0.1591\%, 0.5013\%)$ ，对比结果显示模拟值与理论计算结果基本吻合。从图中可知 F_2 与曲率 $1/\rho$ 和不对称切割角 χ 成反比。

2.2.1.2 衍射光从白光分离

白光入射到弯晶，与晶体相互作用后，分成衍射光和没有被衍射沿入射光方向出射的白光两部分，经过一定距离 D 后，两束光分离(如图 5 所示)。这是一个很重要的结果，因为在实际应用中只需要其中一束光(一般是衍射光，有时也可以利用出射的白光继续分光或成像)，所以要在分离位置后对另外一

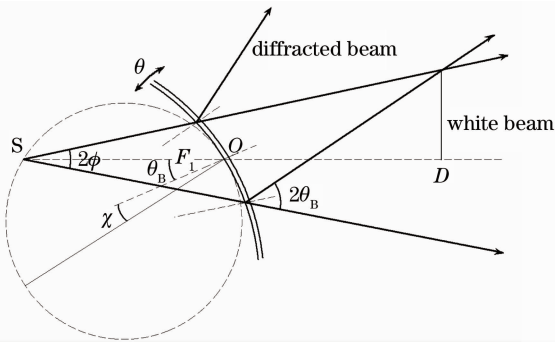


图 5 衍射光与白光分离

Fig. 5 Separation of the monochromatic beam from the white beam

束光进行阻挡吸收。

D 的一般解析式可以写成如下形式^[2]：

$$D = \frac{F_1 \sin 2\phi}{\sin 2(\theta_B - \phi)}, \quad (3)$$

式中 $2\phi = h/F_1$ 是衍射面内入射光的发散度, h 是衍射面内入射光在晶体处垂直于光轴方向的尺寸。

考虑光源 S 从弯晶凹面以“lower case”入射, 选择不同的能量 E (对应 θ_B), 对不同的 h (对应 2ϕ) 进行模拟验证。对比结果如图 6 所示。

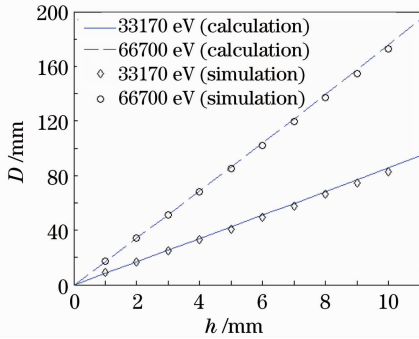


图 6 D 模拟结果对比图

Fig. 6 Comparison of simulation and theoretical results of D

两组模拟结果的相对误差的平均值和标准差分别为 $(-1.8434\%, 2.6602\%)$ 和 $(-0.8600\%, 1.3210\%)$, 对比结果显示模拟值与理论计算结果基本吻合。从结果可知 D 与入射 X 射线的发散度(对应 h)、能量 E (对应 θ_B) 成正比。

在同步辐射情况下, 入射 X 射线的发散度很小(毫弧度量级), 所以

$$\sin 2\phi \approx 2\phi \approx \frac{h}{F_1} = \frac{h}{\rho \cos(\chi - \theta_B)},$$

对照(3)式可知 D 受 ρ 的变化影响很微小。

2.2.2 能量色散特性

2.2.2.1 晶体接收角

根据晶层模型, 当一束单色 X 射线穿过厚度为 T 的晶体后, 布拉格角的变化 $\delta\theta$ 可以从(2) 式得到。以中心 X 射线为例, 假设在厚度为 0 处, 与晶层面的夹角为 θ ; 在经过厚度 T 后, 与晶层面夹角变为 $(\theta + \delta\theta)$ 。如果入射 X 射线布拉格角 θ_B 落在此范围内, 则可以被衍射。在衍射面内晶体绕中心旋转 $\Delta\theta$ (一般在几十至几百微弧度) 后(如图 5 所示), 对于中心 X 射线, 晶体前后晶层夹角范围变为 $(\theta \pm \Delta\theta) \sim (\theta + \delta\theta \pm \Delta\theta)$, 若 θ_B 此时依旧在此范围内, 还可以被衍射; 反之, 则不能被衍射。所以利用晶体的旋转, 通过测量相应 $\Delta\theta$ 时衍射光的强度分布, 可以间接得到 $\delta\theta$ 的大小。接下来就用此方法来模拟验证 $\delta\theta$ 的正确性。

考虑单色光源 S 从弯晶凹面以“upper case”入射, 并且 S 落在罗兰圆上, 晶体在衍射面内绕中心(即与罗兰圆相切点)旋转($\Delta\theta$), 得到相应衍射光的反射率曲线, 其半峰全宽(FWHM)即 $\delta\theta$ 。选择不同的 χ 和 T , 对不同的曲率($1/\rho$)进行模拟验证, 对比结果如图 7 所示。

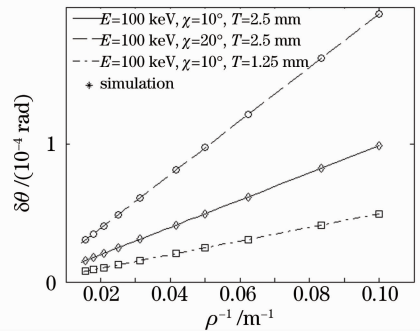


图 7 $\delta\theta$ 模拟结果对比图

Fig. 7 Comparison of simulation and theoretical results of $\delta\theta$

三组模拟结果的相对误差的平均值和标准差分别为 $(0.3984\%, 0.3787\%)$, $(0.3984\%, 0.3326\%)$ 和 $(0.3959\%, 0.3548\%)$ 对比结果显示模拟值与理论计算结果基本一致。当入射光是白光时, 为了提高反射效率, 一般都需要使 $\delta\theta$ 尽量大(有时为了提高单色化性能时需要 $\delta\theta$ 尽量小)。从图中可知, $\delta\theta$ 与厚度 T 、曲率 $1/\rho$ 和不对称切割角 χ 成正比, 但是 T 的增大会导致晶体对 X 射线的吸收增大, 而曲率的变大(ρ 变小)会导致晶体内部结构的畸变(晶层模型适用于轻微形变的弯晶)甚至损坏晶体。所以在设计劳厄弯晶时需要选择适当的晶体厚度以及在合理的范围内调节弯曲半径。

2.2.2.2 反射率曲线

给出一个反射率的模拟结果,对比的对象是已

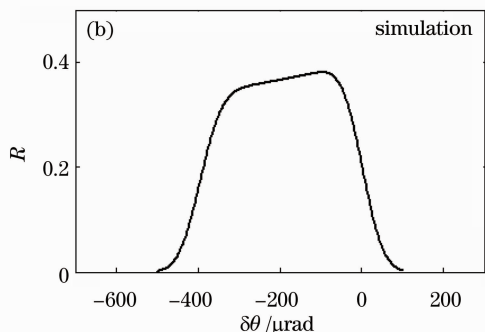
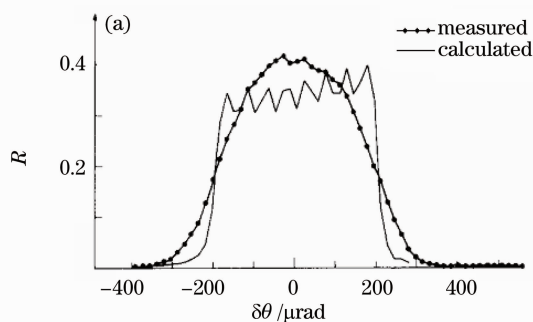


图 8 反射率曲线模拟对比图

Fig. 8 Comparison of simulation and theoretical results of reflectivity

图 8(a)为反射率的实验测量值(点线)和理论计算值(细实线);图 8(b)是利用本软件追迹得到的反射率曲线。模拟参数为 $E=17.48$ keV (Mo $K_{\alpha 1}$ 辐射能量), $T=0.525$ mm, 衍射面为 Si(111)/[110], 弯曲半径 $\rho=1.9$ m。经过对比可得,3 条曲线的 FWHM 基本一致,模拟值与理论计算值相似,但模拟值比理论计算值更接近实验测量值。对比结果说明了软件光线追迹的正确性,并且在一定程度上也可以用于计算劳厄弯晶的透射率。

2.2.2.3 衍射光能量带宽

当一束 X 射线投射到弯晶时,可以被衍射的能量带宽主要由其张开角 ($\Delta\psi_1$) 决定。假设竖直平面就是衍射面,如图 9 所示。

有的实验结果^[8],如图 8 所示。

式中 h 是衍射面内入射光在晶体处垂直于光轴方向的尺寸。(5)式中括号中第 1 项代表光斑高度 h 所对应的布拉格平面改变的方向角;第 2 项代表入射光的发散度。

在同步辐射中,由于光源很小而且光谱连续,每一束光都有一个能量范围 δE 可以被衍射,它的宽度决定于 $\delta\theta$ 。因此(4)式中第 2 部分是来自于 $\delta\theta$ 的贡献:

$$\delta E = E \cot \theta \cdot \delta\theta, \quad (6)$$

$\delta\theta$ 由(2)式给出。

考虑光源从弯晶凸面以“upper case”入射,选择两个能量(对应 θ_B)和不同的 χ ,对不同的曲率($1/\rho$)进行模拟验证,对比结果如图 10 所示。

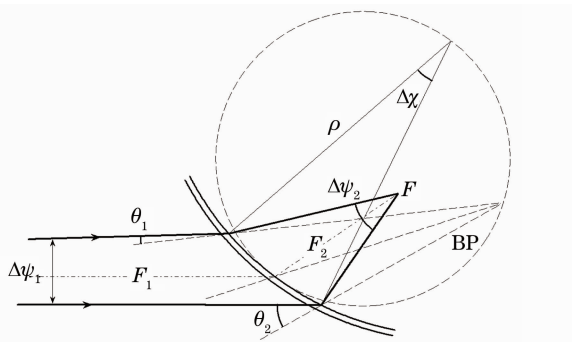


图 9 劳厄弯晶能散原理示意图

Fig. 9 Principle of energy dispersion of Laue bent crystal

被反射的总的能量带宽(ΔE)由两个独立的部分组成^[8]:

$$\Delta E = \Delta E_{\Delta\chi} + \delta E, \quad (4)$$

式中第一部分是来自于入射光垂直方向的发散度的贡献,

$$\Delta E_{\Delta\chi} = E \cot \theta (\theta_1 - \theta_2) = E \cot \theta (\Delta\chi - \Delta\psi_1) = E \cot \theta \left[\frac{h}{\rho \cos(\chi + \theta)} - \frac{h}{F_1} \right], \quad (5)$$

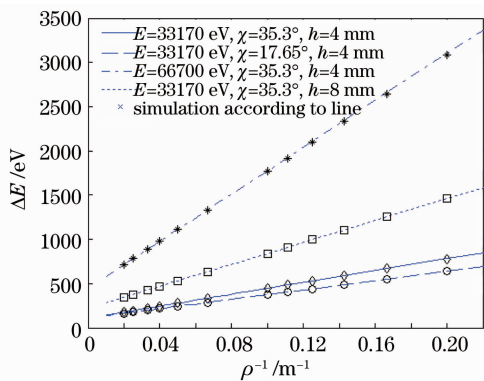


图 10 ΔE 模拟结果对比图

Fig. 10 Comparison of simulation and theoretical results of ΔE

4 组模拟结果的相对误差的平均值和标准差分别为 $(-0.1339\%, 0.0884\%)$, $(-0.0673\%, 0.0445\%)$, $(-0.2535\%, 0.1649\%)$ 和 $(0.0196\%, 0.0799\%)$,对比结果显示模拟值与理论计算结果基本一致。从模拟结果可知,提高入射 X 射线的能量 E 可以显著提高反

射能量带宽。而对于一定的 E (对应一定的 θ_B)， χ 的增大同样能增加能量带宽，但是幅度比较小； h 的增大能明显增加能量带宽 (来自于 $\Delta E_{\Delta\chi}$ 的贡献)；弯曲半径 ρ 的变化是调整 ΔE 大小的主要手段 (对 $\Delta E_{\Delta\chi}$ 和 δE 都有贡献)。由模拟的中间结果可知， $\Delta E_{\Delta\chi}$ 比 δE 大一个量级左右，因此 ΔE 的大小主要来自于 $\Delta E_{\Delta\chi}$ 的贡献。

分别在衍射方向变化和衍射能量变化两方面，通过对 F_2 、 D 、 $\delta\theta$ 以及 ΔE 等基本特性的追迹模拟，与理论计算和实验结果进行对比，显示误差在允许范围之内，从而证明该劳厄弯晶光线追迹软件在对衍射方向、能量色散等方面的追迹是正确的。此外还讨论了光源参数和晶体参数对这些弯晶基本特性的影响。

3 劳厄弯晶的光学特性光线追迹

劳厄弯晶的光学特性主要体现在聚焦、准直以及色散等方面，下面就通过程序的追迹模拟，对照理论推导，分别研究其光学特性。

3.1 聚焦特性

聚焦功能是弯晶的主要光学特性。柱状弯晶对 X 射线的聚焦有几种不同的模式^[3,16]，对应的衍射光可以是会聚的或者发散的，具体由光源和像点的位置决定。

柱面弯曲劳厄晶体有着类似于透镜的光学公式，如(1)式所示。焦点到晶体的距离 F_2 可以写成

$$F_2 = F_1 \frac{\rho \cos(\chi \mp \theta_B)}{2F_1 - \rho \cos(\chi \pm \theta_B)} = \frac{\rho \cos(\chi \mp \theta_B)}{2 - \frac{\rho \cos(\chi \pm \theta_B)}{F_1}} \quad (7)$$

首先考虑点光源 S 从弯晶凸面入射的情形，追迹结果如图 11(a) 所示，可在晶体凹面得到一实焦点 F ，且衍射光发散度大于入射光发散度；根据光线可逆原理，如果在 F 点处 (凹面) 放置一点光源，在 S 处 (凸面) 同样可以得到一实焦点，且衍射光发散度小于入射光发散度，如图 11(b) 追迹所示。

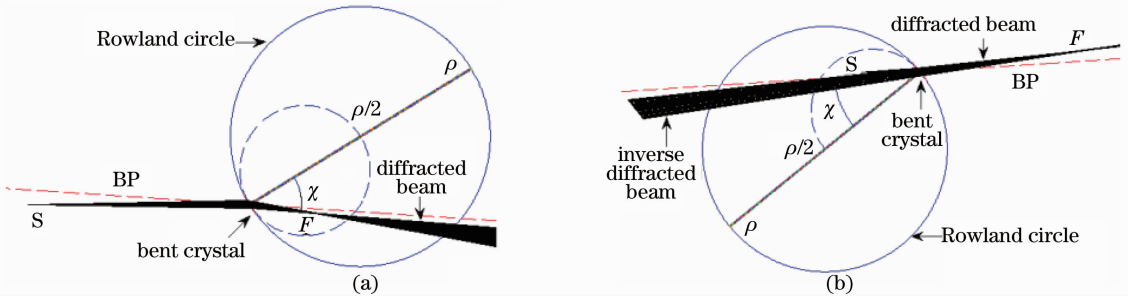


图 11 柱状劳厄弯晶聚焦特性追迹

Fig. 11 Ray-tracing of focusing properties of cylindrically bent Laue crystal

根据(7)式，由于 $\rho < 0$ (凸面入射)，所以

$$|F_2| < |\rho| \cos(\chi \mp \theta_B) / 2.$$

在同步辐射成像线中，源点到晶体的距离 F_1 一般比较大，而选取的晶体弯曲半径一般与 F_1 相当或小于 F_1 ，因此 $F_2 < F_1$ (同时也符合实验站和实验设备的限制)，所以在利用弯晶的聚焦功能时，一般选择 X 射线从弯晶凸面入射。

接下来选择 X 射线从晶体凹面入射 ($\rho > 0$)。通过对(7)式的分析，考虑以罗兰圆和弦中点圆为界放置点光源，通过软件追迹研究衍射光的特性。当点光源位于罗兰圆弦中点圆内时，即 $F_1 < \rho \cos(\chi \pm \theta_B) / 2$ ，追迹结果如图 11(b) 所示。

当点光源位于罗兰圆弦中点圆上时，即 $F_1 = \rho \cos(\chi \pm \theta_B) / 2$ ，追迹结果如图 12(a) 所示，没有焦点 ($F_2 \rightarrow \infty$)，则通过弯晶衍射得到一平行光；当点光源位于罗兰圆上时，即 $F_1 = \rho \cos(\chi \pm \theta_B)$ ，追迹结果

如图 12(b) 所示，可在晶体凹面得到一虚焦点，而且焦点也落在罗兰圆上 [$F_2 = \rho \cos(\chi \mp \theta_B)$]，则通过弯晶衍射得到一发散光，发散度与入射光发散度相同 (根据罗兰圆的特性，其上任意一点与晶体同一厚度处的晶层面夹角相同)。

下面模拟两组一般位置光源的情况：当点光源位于罗兰圆内、弦中点圆外时，即 $\rho \cos(\chi \pm \theta_B) / 2 < F_1 < \rho \cos(\chi \pm \theta_B)$ ，追迹结果如图 13(a) 所示，可在晶体凹面罗兰圆外得到一虚焦点，则通过弯晶衍射得到一发散光，且发散度小于入射光发散度；根据光线可逆原理，当把点光源放置在罗兰圆外时，即 $F_1 > \rho \cos(\chi \pm \theta_B)$ ，追迹结果如图 13(b) 所示，可在罗兰圆内、弦中点圆外得到一虚焦点，则通过弯晶衍射得到一发散光，且发散度大于入射光发散度。

上述追迹模拟的参数为 $E = 33.17 \text{ keV}$ ， $\chi = 35.3^\circ$ ， $\rho = 1 \text{ m}$ ，衍射面为 $\text{Si}(111)$ ， $T = 0.67 \text{ mm}$ 。

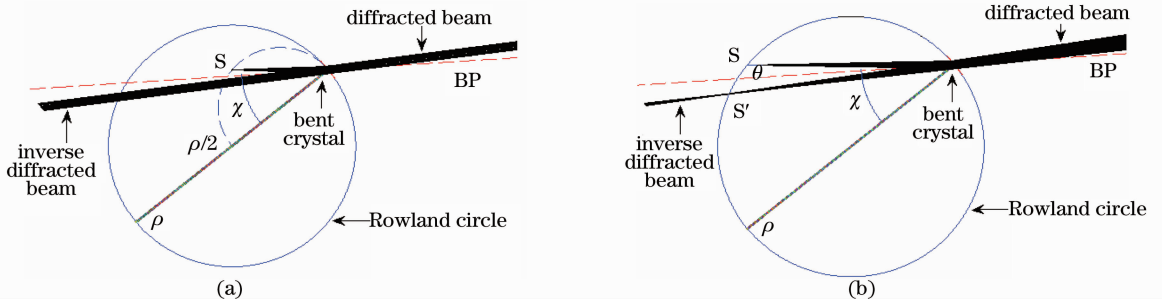


图 12 特殊位置光源的光线追迹

Fig. 12 Ray-tracing of special location of source

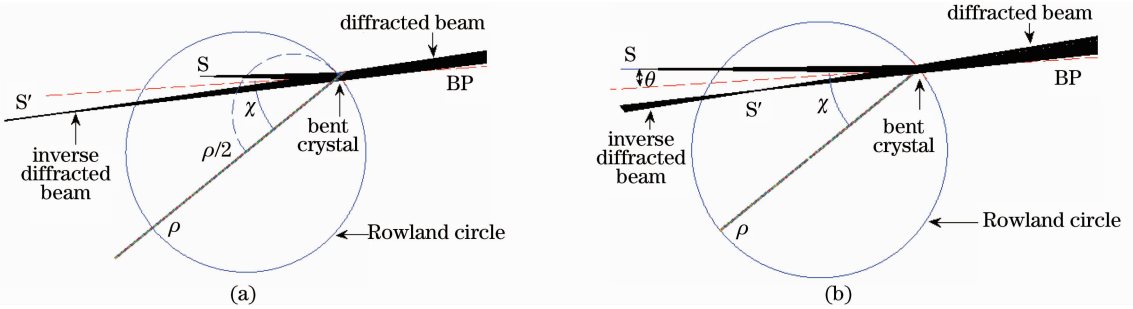


图 13 一般位置光源的光线追迹

Fig. 13 Ray-tracing of common location of source

从上述一系列追迹结果可知，源点与弯晶的相对位置决定着衍射光的性质。在同步辐射中，光源是基本固定的，但是通过调整晶体的弯曲半径以及入射方向，可以达到改变光源与晶体相对位置的目的，从而得到所需的聚焦、平行或者发散的衍射光。

3.2 准直特性

准直可以看做是聚焦的特殊情况，即焦点趋向于无穷远($F_2 \rightarrow \infty$)。根据光线可逆原理，采用平行光入射($F_1 \rightarrow \infty$)，通过追迹衍射光是否聚焦来研究

弯晶的准直特性。软件追迹参数同 3.1 节。首先考虑一平行光从晶体凸面入射($\rho < 0$)，追迹结果如图 14(a)所示，可在晶体凹面得到一实焦点，而且焦点刚好落在罗兰圆内弦中点圆上，即 $F_2 = \rho \cos(\chi \pm \theta_B)/2$ 。

接着考虑平行光从晶体凹面入射，此时 $\rho > 0$ ，追迹结果如图 14(b)所示，可在晶体凹面得到一虚焦点，而且焦点同样落在罗兰圆内弦中点圆上。通过弯晶衍射得到一发散光。

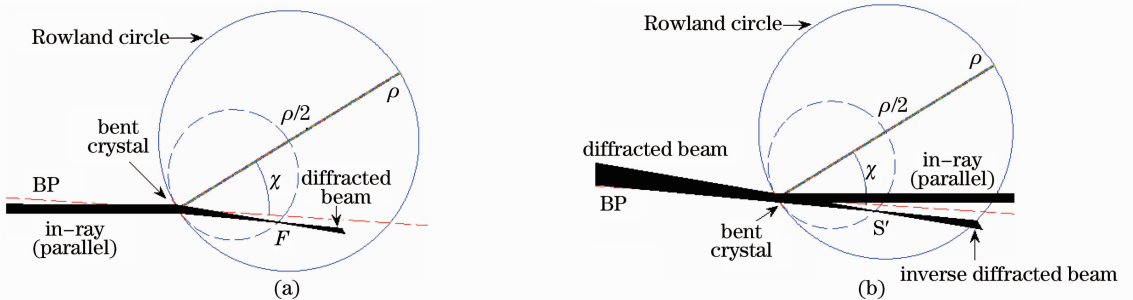


图 14 柱状劳厄弯晶准直特性追迹

Fig. 14 Ray-tracing of collimation of cylindrically bent Laue crystal

从上面的追迹结果可知，当且仅当源点位于罗兰圆内部某一弦中点时，通过劳厄弯晶的衍射，才可以得到平行 X 射线。

3.3 色散特性

劳厄弯晶可以对符合晶层布拉格条件的 X 射

线进行衍射。2.2.2 节中已经讲到，当一束白光入射到晶体，经过弯晶后可以得到能量带宽为 ΔE 的衍射光。由于罗兰圆的特性，当光源点落在罗兰圆上时，其发出的任意光线与晶体同一厚度处的晶层夹角相同，即 $\theta_1 = \theta_2$ ，则 $\Delta E_{\Delta\chi} = 0$ 。此时可以被反射

的总的能量带宽也由 $\delta\theta$ 决定: $\Delta E = \delta E = E \cot \theta \cdot \delta\theta$ 。由于 δE 比较小, 一般把此时的衍射光认为是单色光。

接下来关心的问题是能量带宽 ΔE 随光斑分布的相应能量的分布情况。考虑点光源(白光)从弯晶凸面入射, 通过程序追迹研究聚焦衍射光的能量分布情况。结果如图 15 所示。图 15(a) 为弯晶入射面离晶体 1 mm 处衍射面内的光斑分布追迹图(衍射面内, 下同), 图 15(b) 为弯晶出射面离晶体 1 mm 处衍射面内的光斑分布追迹图, 图 15(c) 是对应衍射光斑内点的能量分布图。为了更好地揭示分布情况, 入射光斑的采样间隔选择比较大, 且呈均匀分布时; 当其数量增加至连续分布时, 衍射光斑及其对应的能量分布同样会呈连续分布。从图中可以清楚看出: 图 15(b) 中每一小段点的分布来自于图 15(a) 中一根射线的衍射; 在衍射面内沿着 y 方向, 衍射光斑的能量是渐变分布的。如果在光斑中心(y 方向) 添加一吸收体, 就可以得到两束有一能量差的聚焦 X 射线。

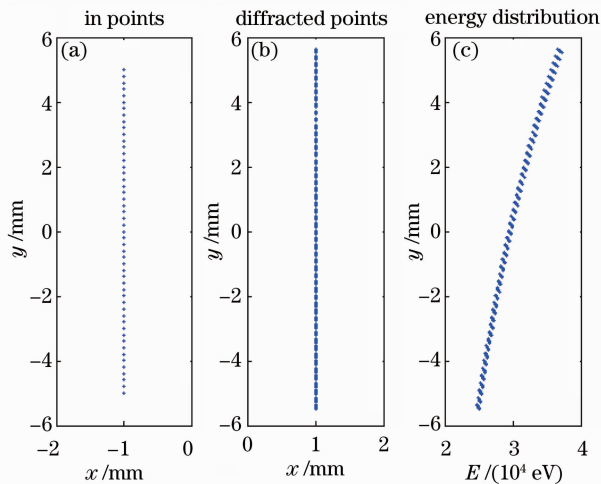


图 15 衍射光斑对应点的能量分布图

Fig. 15 Energy distribution according to the points of diffracted beam

而且从图 15(c) 还可以得到 ΔE , $\Delta E_{\Delta\chi}$ 和 δE 三者之间的关系。图 15(c) 中每一小段曲线代表一根 X 射线可以被衍射的能量范围(δE); 而 ΔE 的变化趋势主要来自于 $\Delta E_{\Delta\chi}$ 的贡献, 其值是由入射光张角(图中光斑 y 方向大小)决定的。

4 结 论

通过对一系列追迹模拟结果与理论和实验结果对比显示出的良好一致性, 证明了该劳厄弯晶光线追迹软件的正确性。该软件可以用于劳厄弯晶光学

特性的研究以及相关设计和优化。接着利用软件对 X 射线模拟追迹, 研究了劳厄弯晶聚焦、准直、色散等光学特性, 为接下来研究设计劳厄弯晶单色器以及应用劳厄弯晶打下了基础。

对劳厄弯晶的光学特性的分析和光线追迹结果说明可以利用源点与罗兰圆的不同位置关系得到不同性质(聚焦、准直和单色化等)的衍射光。应用劳厄弯晶的聚焦功能和色散特性, 可以利用单块劳厄弯晶完成双色减影成像系统; 而利用两块(或者多块)弯晶, 可以实现衍射光两种(多种)性质的叠加。比如通过两块弯晶与光源的特殊位置关系(一块实现单色化, 另一块实现准直), 就可以得到固定出口、能量可调的平行单色光束^[3]。利用该软件来研究应用劳厄弯晶将是下一步工作的重点。

参 考 文 献

- 1 Yakov I. Nesterets, Stephen W. Wilkins. A flexible configuration for a high-energy phase-contrast imaging beamline involving in-line focusing crystal optics [J]. *Radiation Physics and Chemistry*, 2006, **75**(11): 1981~1985
- 2 Z. Zhong, D. Chapman, W. Thomlinson *et al.*. A bent Laue crystal monochromator for monochromatic radiography with an area beam [J]. *Nucl. Instrum. Methods*, 1997, **A399**(2-3): 489~498
- 3 Hu Wen, Xie Honglan, Du Guohao *et al.*. Double Laue-crystal monochromator for an X-ray imaging beamline with synchrotron radiation [J]. *High Energy Physics & Nuclear Physics*, 2007, **31**(6): 597~601
- 胡雯, 谢红兰, 杜国浩等. 同步辐射 X 射线成像光束劳厄双晶单色器设计 [J]. *高能物理与核物理*, 2007, **31**(6): 597~601
- 4 V. Mocella, J. P. Guigay, J. Hrdy *et al.*. Bent crystals in Laue geometry dynamical focusing of a polychromatic incident beam [J]. *J. Appl. Cryst.*, 2004, **37**(6): 941~946
- 5 B. Ren, F. A. Dilmanian, L. D. Chapman *et al.*. A bent Laue-Laue monochromator for a synchrotron-based computed tomography system [J]. *Nucl. Instrum. Methods*, 1999, **A428**(2-3): 528~550
- 6 P. Suortti, S. Fiedler, A. Bravin *et al.*. Fixed-exit monochromator for computed tomography with synchrotron radiation at energies 18 ~ 90 keV [J]. *J. Synchrotron Rad.*, 2000, **7**(5): 340~347
- 7 Z. Zhong, D. Chapman, R. Menk *et al.*. Monochromatic energy-subtraction radiography using a rotating anode source and a bent Laue monochromator [J]. *Phys. Med. Biol.*, 1997, **42**(9): 1751~1762
- 8 Z. Zhong, D. Chapman, A. Bunker *et al.*. A bent Laue analyzer for fluorescence EXAFS detection [J]. *J. Synchrotron Rad.*, 1999, **6**(3): 212~214
- 9 P. Suortti, W. Thomlinson. A bent Laue crystal monochromator for angiography at the NSLS [J]. *Nucl. Instrum. Methods*, 1988, **A269**(3): 639~648
- 10 P. Suortti, W. Thomlinson. A single crystal bent Laue monochromator for coronary angiography [J]. *Nucl. Instrum. Methods*, 1993, **A336**(1-2): 304~309
- 11 B. Lai, F. Cerrina. SHADOW: a synchrotron radiation ray tracing program [J]. *Nucl. Instrum. Methods*, 1986,

- A246**(1-3): 337~341
- 12 C. Welnak, G. J. Chen, F. Cerrina. SHADOW: a synchrotron radiation and X-ray optics simulation tool[J]. *Nucl. Instrum. Methods*, 1994, **A347**(1-3): 344~347
- 13 C. Schulze, D. Chapman. A program for the calculation of the reflectivity of cylindrically bent Laue crystal monochromators[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1995, **66**(2): 2220~2223
- 14 V. Etellniemi, P. Suortti, W. Thomlinson. REFLECT: a computer program for the X-ray reflectivity of bent perfect crystals[R]. BNL Report 43247, 1989
- 15 E. Erola, V. Etelaniemi, P. Suortti *et al.*. X-ray reflectivity of bent perfect crystals in Bragg and Laue geometry[J]. *J. Appl. Cryst.*, 1990, **23**(1): 35~42
- 16 C. Schulze, U. Lienert, M. Hanfland *et al.*. Microfocusing of hard X-rays with cylindrically bent crystal monochromators[J]. *J. Synchrotron Rad.*, 1998, **5**(2): 77~81
- 17 P. Suortti. Focusing monochromator for high energy synchrotron radiation[J]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1992, **63**(1): 942~945
- 18 B. Ren, F. A. Dilmanian, L. D. Chapman *et al.*. Interpretation of bent-crystal rocking curves using phase-space diagrams[J]. *Nucl. Instrum. Methods*, 2000, **A447**(3): 556~568