劳厄弯晶色散特性的光线追迹研究

陈 灿[1]　佟亚军[2]　许照乾[1]　毛定立[1]　肖体乔[2]

1（浙江省计量科学研究院　杭州 310018）

2（中国科学院上海应用物理研究所 嘉定园区　上海 201800）

摘要　劳厄弯晶具有可有效降低高热负载的影响，同时对透射光可以再次利用，已作为高通量密度高能 X 射线(30 keV 以上)聚焦、准直和单色化的最有效的分光元件。研究其色散特性，对发展高性能、多用途的劳厄弯晶单色器具有重要意义。采用自行发展的光线追迹软件对劳厄弯晶的色散特性进行了深入研究，得到衍射光能量随光斑的分布情况以及利用单块劳厄弯晶获得可聚焦不同能量射线束的选取方法，并推导了双光束中心能量及带宽的一般公式，为下一步更好地应用劳厄弯晶打下了基础。

关键词　X 射线光学，劳厄弯晶，色散特性，光线追迹

中图分类号　TL99　　**DOI:** 10.11889/j.0253-3219.2015.hjs.38.040101

劳厄弯晶作为一个有效的光学元件已经应用于多个同步辐射装置[1–6]，但是对劳厄弯晶的研究一直未停止[6–9]，随着其他领域也提出应用需求，使得现行的劳厄弯晶研究方法存在的局限性更加明显。我们自行发展了基于 X 射线几何衍射的晶层模型，适用于柱面弯曲劳厄晶体的光线追迹软件[10]。根据光源与晶体参数，我们利用该平台对光路进行追迹得到衍射光聚焦光斑大小和发散度[10–11]，并分析了 X 射线入射方式、衍射能量、晶体结构和弯曲半径对劳厄弯晶光学特性的影响，为设计使用劳厄弯晶打下基础。

对于一个色散元件，不仅要了解衍射光的几何特性，更要知道衍射光的色散情况，之前我们初步分析了劳厄弯晶的色散能力，得到了其衍射能量带宽及影响因素。本文将通过追迹软件深入研究劳厄弯晶的单色化能力和衍射能量随光斑的分布情况，从而更完整深入地了解劳厄弯晶的色散特性。

1　单色化

当一束白光入射到晶体(图 1)，经过弯晶后可以得到能量带宽为ΔE 的衍射光[4]，其由两个独立的部分组成：

$$\Delta E = \Delta E_{\Delta\chi} + \delta E = E\cot\theta(\theta_1 - \theta_2) + E\cot\theta\cdot\delta\theta \quad (1)$$

式中，$\Delta E_{\Delta\chi}$来自于入射光竖直方向发散度的贡献；θ_1、θ_2 分别是入射光竖直方向边缘光线与弯晶晶层的夹角；δE 来自于弯晶本身的贡献，由于晶体弯曲而使晶层旋转渐变导致的布拉格角的变化($\delta\theta$)；E 是中心 X 射线与弯晶晶层夹角（布拉格角）对应的能量，一般可认为衍射光的中心能量。

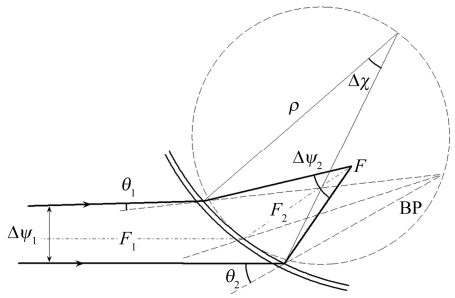

图 1　劳厄弯晶能散原理示意图

Fig.1　Principle of energy dispersion of Laue bent crystal.

由于晶体弯曲必然导致晶层旋转渐变，则$\delta\theta\neq0$，所以δE 不可能为零，因此要使ΔE 尽量小，只能使$\Delta E_{\Delta\chi}$趋于零，而要达到该目的，必须使$\theta_1=\theta_2$，即当光源点落在罗兰圆上（光源从晶体凹面入射），则$\Delta E_{\Delta\chi}=0$。此时可以被反射的总的能量带宽ΔE 由$\delta\theta$决定：

$$\Delta E = \delta E = E\cot\theta\cdot\delta\theta \quad (2)$$

由于δE 比较小，一般把此时的衍射光认为是纯净的单色光，这也被认为是劳厄弯晶单色化的极限。

浙江省科技厅公益技术研究工业项目(No.2013C31102)、国家质检总局科技计划项目(No.2013QK057)资助

第一作者：陈灿，男，1983 年出生，2011 年于中国科学院上海应用物理研究所获博士学位，主要从事劳厄弯晶光线追迹及应用、电离辐射计量等方面的研究

通讯作者：肖体乔，E-mail: tqxiao@sinap.ac.cn

收稿日期：2014-10-21，修回日期：2014-11-26

同时在晶体凸面得到发散的衍射光，其发散度等同于入射光发散度，如图 2 所示。

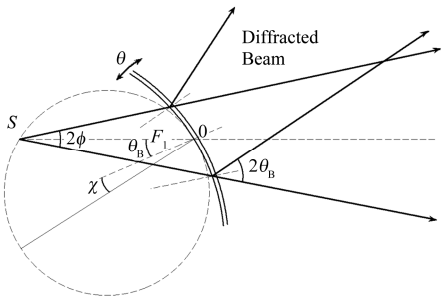

图 2 衍射光路图
Fig.2 Diffracted X-ray path.

当$\theta_1 \approx \theta_2$，即入射光发散度很小且光斑也很小时，我们也能得到带宽很窄的衍射光。一般情况下，布拉格平晶与劳厄弯晶的衍射带宽差别不大[12]。

2 能量随光斑的分布

我们也通过光线追迹研究了能量带宽ΔE 随光斑分布的相应能量的分布特性[11]。考虑点光源从弯晶凸面入射（实际应用最多的情况），如图 1 所示。

追迹结果如图 3 所示。图 3(a)、(b)、(c)分别为衍射面内入射光的光斑分布图、衍射光斑分布图、对应衍射光斑内点的能量分布图。追迹条件：衍射中心能量 E_c=33.170 keV，光源至晶体中心距离 F_1=32.027 m，入射光高度 h=10 mm，晶体厚度 T=0.7 mm，不对称切割角χ=26.22°，弯曲半径ρ=13.81 m，衍射面为 Si(111)。

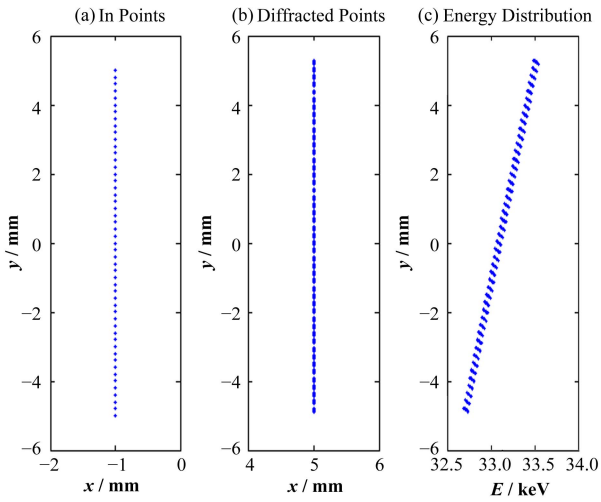

图 3 衍射光斑对应点的能量分布图
Fig.3 Energy profile according to the points of diffracted beam.

从图 3 中可以清楚地看出劳厄弯晶对 X 射线的色散作用：图 3(a)中的任一点代表着一条入射 X 射线；图 3(b)中任一小段点的分布对应于图 3(a)中一条入射线经过劳厄弯晶的衍射分布，其被衍射能量范围即δE；在衍射面内沿着 y 方向，衍射光斑的能量是渐变分布的。

而ΔE 的变化趋势主要来自于$\Delta E_{\Delta\chi}$的贡献，其是由入射光张角（图 3 中光斑 y 方向大小）决定的。而两端衍射能量分布不均，考虑衍射能量带宽的半高宽近似为：

$$\begin{aligned}\Delta E_{\mathrm{FWHM}} &= \Delta E_{\Delta\chi} + \delta E - \frac{\delta E}{2} - \frac{\delta E}{2} \\ &= \Delta E_{\Delta\chi} + E\cot\theta \cdot h \cdot \left(\frac{1}{\rho\cos(\chi+\theta)} - \frac{1}{F_1}\right)\end{aligned} \quad (3)$$

上述近似条件为小入射角内误差较小。而采用插入件辐射的同步辐射光或者利用多级光阑的实验 X 射线辐射源发散度较小，基本满足该近似条件。

此时衍射能量带宽的半高宽ΔE_{FWHM} 与入射光高度 h 基本呈线性正比关系，从图 3 也可以清楚看到这一点。

上述模拟过程考虑光源从晶体凸面入射，在凹面得到一实焦点；根据光线可逆原理，如果在焦点 F 处放置同样的光源，则我们会在刚才的源点处得到一实焦点，而且衍射光能量带宽相同，分布特性一致，主要差异点是发散度与焦源距不同（互为相反），从图 2 可以清楚看到这一点。

3 双色能量的选取

从前文的追迹结果可知衍射光斑与入射光有明确的空间对应关系，因此，如果在入射光中心（y 方向）添加一吸收体，挡住一部分入射光，追迹结果如图 4(a)所示；则相应的衍射光也会被分成两束，如图 4(b)所示。或者在衍射光中心（同样在 y 方向，靠近晶体处）放置一吸收体，同样可以把衍射光分成两部分。由于弯晶对入射 X 射线有聚焦作用，因此可以通过上述方法得到两束有一定能量差、可聚焦的 X 射线，对照图 4(a)–(f)衍射光变化可得。追迹条件：E_c=33 170 eV，F_1=32.027 m，ϕ_V=0.1 mrad，T=0.7 mm，χ=26.22°，ρ=13.81 m，衍射面为 Si(111)，SPLIT_V=2 mm。其中，SPLIT_V 是吸收体高度（衍射面内）。

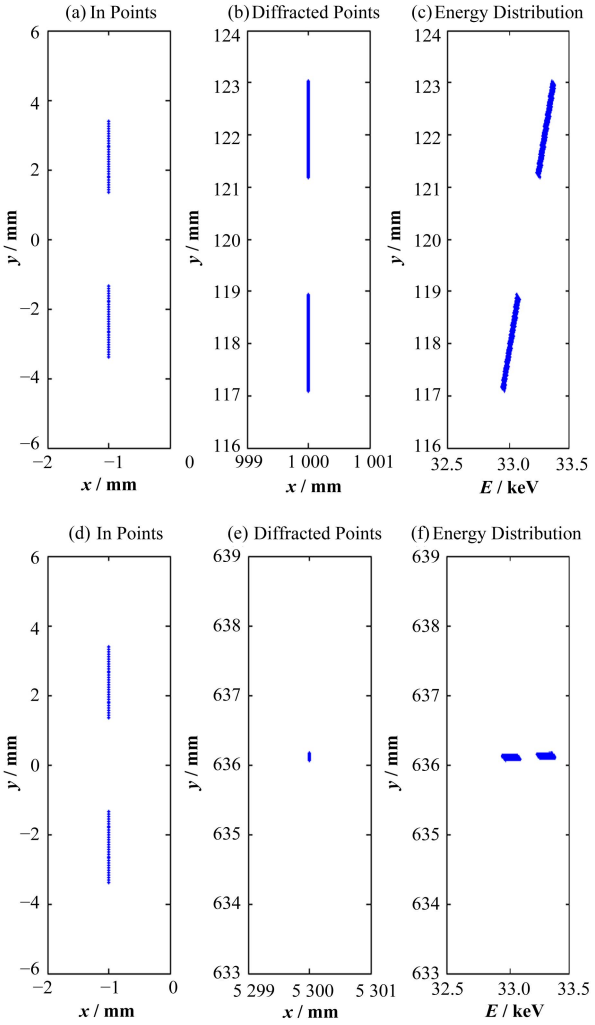

图 4 增加吸收体后入射光斑、衍射光及其对应点能量分布 (a)–(c) 衍射光靠近晶体处，(d)–(f) 衍射光位于焦点处

Fig.4 Energy profile according to the points of diffracted beam after adding absorber. (a)–(c) Diffracted beam near crystal, (d)–(f) Diffracted beam near focus

假设弯晶的衍射带宽为$\Delta E=\Delta E_{\Delta\chi}+\delta E$，吸收体以入射（衍射）光斑中心对称放置，从而把衍射光分成均匀大小的两部分，而两部分光斑各自的中心能量 E_a、E_b 可近似为：

$$E_a=\left(\left(E_c-\frac{\Delta E_{\Delta\chi}}{2}\right)+\left(E_c-\frac{\Delta E_{\Delta\chi}}{2}\cdot a\right)\right)/2-\frac{\delta E}{2} \quad (4)$$

$$E_b=\left(\left(E_c+\frac{\Delta E_{\Delta\chi}}{2}\right)+\left(E_c+\frac{\Delta E_{\Delta\chi}}{2}\cdot a\right)\right)/2-\frac{\delta E}{2} \quad (5)$$

上述结果同样考虑半高宽的影响，其中 a 为吸收体高度与入射光（衍射光）高度的比：

$$a=\frac{\text{SPLIT_V}}{h} \quad (6)$$

而两束光相应的能量带宽分别为：

$$\Delta E_a=\Delta E_b=\frac{\Delta E_{\Delta\chi}}{2}(1-a) \quad (7)$$

如欧洲光源的医学成像线站利用单块劳厄弯晶建立的心血管成像装置[13]，相应的实验条件大致为：E_c=33.170 keV，F_1=150 m，h=10 mm，T=1.0 mm，χ=15°，ρ=14 m，衍射面为 Si(111)，SPLIT_V=3 mm。用该劳厄弯晶单色器得到两束中心能量分别为 33.3 keV 和 33.0 keV，能量带宽为 150 eV 的聚焦 X 光。利用上述公式采用同样条件得到的两束 X 射线中心能量分别为 33.010 keV 和 33.306 keV，能量带宽为 159.33 eV。两中心能量有一小平移，除去这平移后误差几乎可以忽略。能量带宽的误差为 6.22%。这其中实验条件数据并不完全准确，因此会有很大影响。

4 结语

通过自行发展的光线追迹程序进一步研究劳厄弯晶的色散特性，得到劳厄弯晶的单色化特性与衍射能量随光斑的分布规律，并推导了经弯晶分光形成的双光束中心能量及带宽的一般公式。对今后劳厄弯晶分光元件的设计、实验具有指导意义，也为下一步广泛应用劳厄弯晶打下了基础。例如：利用其分光、聚焦有一能量差光束的特性，劳厄弯晶可用于（动态）双色减影成像系统，而推导的公式为双光束能量的选取提供便利；高通量的单色光可拓展用不具备能量识别但效率高的点阵探测器探测，从而使利用 X 光机的短波长射线衍射(X-ray diffraction, XRD)可以得到不错的测试效率；也可以使用高通量、发散的单色光建立标准X射线辐射场，从而实现 X 射线探测器精确的能响测试等工作。

参考文献

1 Ren B, Dilmanian F A, Chapman L D, *et al*. A bent Laue–Laue monochromator for a synchrotron-based computed tomography system[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1999, **A428**(2–3): 528–550

2 Suortti P, Fiedler S, Bravin A, *et al*. Fixed-exit monochromator for computed tomography with synchrotron radiation at energies 18–90 keV[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2000, **7**(Pt 5): 340–347

3 Zhong Z, Chapman D, Menk R, *et al*. Monochromatic energy-subtraction radiography using a rotating anode source and a bent Laue monochromator[J]. Physics in Medicine and Biology, 1997, **42**(9): 1751–1762

4 Zhong Z, Chapman D, Bunker A, *et al*. A bent Laue analyzer for fluorescence EXAFS detection[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 1999, **6**(Pt 3): 212–214

5 Suortti P, Thomlinson W. A bent Laue crystal monochromator for angiography at the NSLS[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1988, **A269**(3): 639–648

6 Suortti P, Thomlinson W. A single crystal bent Laue monochromator for coronary angiography[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1993, **A336**(1–2): 304–309

7 Schulze C, Chapman D. A program for the calculation of the reflectivity of cylindrically bent Laue crystal monochromators[J]. Review of Scientific Instruments, 1995, **66**(2): 2220–2223

8 Schulze C, Lienert U, Hanfland M, *et al*. Microfocusing of hard X-rays with cylindrically bent crystal monochromators[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 1998, **5**(Pt 2): 77–81

9 Nesterets Y I, Wilkins S W. Evaluation of the focusing performance of bent Laue crystals using wave-optical theory[J]. Journal of Applied Crystallography, 2008, **41**: 237–248

10 陈灿, 佟亚军, 任玉琦, 等. 劳厄弯晶光学特性的光线追迹研究[J]. 光学学报, 2011, **31**(10): 1034002
CHEN Can, TONG Yajun, REN Yuqi, *et al*. Study on the optical properties of Laue bent crystal by ray-tracing[J]. Acta Optica Sinica, 2011, **31**(10): 1034002

11 陈灿, 佟亚军, 谢红兰, 等. Laue 弯晶聚焦特性的光线追迹研究[J]. 物理学报, 2012, **61**(10): 104102
CHEN Can, TONG Yajun, XIE Honglan, *et al*. Study of the focusing properties of Laue bent crystal by ray-tracing[J]. Acta Physica Sinica, 2012, **61**(10): 104102

12 Shastri S D, Fezzaa K, Mashayekhi A, *et al*. Cryogenically cooled bent double-Laue monochromator for high-energy undulator X-rays (50–200 keV)[J]. Journal of Synchrotron Radiation, 2002, **9**: 317–322

13 Elleaume H, Charvet A M, Berkvens P, *et al*. Instrumentation of the ESRF medical imaging facility[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1999, **A428**: 513–527

Study on the dispersion characteristics of Laue bent crystal by ray-tracing

CHEN Can[1] TONG Yajun[2] XU Zhaoqian[1] MAO Dingli[1] XIAO Tiqiao[2]

1(*Zhejiang Province Institute of Metrology*, *Hangzhou 310018*, *China*)

2(*Shanghai Institute of Applied Physics*, *Chinese Academy of Sciences*, *Jiading Campus*, *Shanghai 201800*, *China*)

Abstract **Background and Purpose:** The Laue bent crystal is one of the most effective optical elements for focusing, collimating and monochromating of high flux density high energy X-rays (above 30 keV), because of its excellent performance in reducing the high heat load effectively and reusing of transmission beam directly. The dispersion characteristics is very important for developing high performance and multipurpose Laue bent crystal monochromator. **Methods:** Self-developed X-ray trace program was employed to study the dispersion characteristics of Laue bent crystal in aspects of diffraction, focus, *etc*. **Results:** The distribution of diffraction energy with the beam spot was obtained and the focused beams with different energies created by single Laue bent crystal were got. The general formula of center energy and energy bandwidth of the double beam was also derived. **Conclusion:** This research provides a basis for the further application of Laue bent crystal.

Key words X-ray optics, Laue bent crystal, Dispersion characteristics, Ray-tracing

CLC TL99