

ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ РЕНТГЕНОВСКОГО СПЕКТРОГРАФА СКОЛЬЗЯЩЕГО ПАДЕНИЯ И МЕТОДИКИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ СПЕКТРА В ДИАПАЗОНЕ 2–40 НМ

© 2023 г. А. В. Скобляков^{a,*}, Д. С. Колесников^a, А. В. Канцырев^a, А. А. Голубев^{a,c},
И. В. Рудской^a, А. Н. Грицук^b, Е. В. Грабовский^b, К. Н. Митрофанов^b, Г. М. Олейник^b

^a Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

^b Государственный научный центр Российской Федерации “Троицкий институт инновационных
и термоядерных исследований”, Москва, Россия

^c ЧУ “Наука и Инновации” Росатом, Москва, Россия

*e-mail: dinAlt220@yandex.ru

Поступила в редакцию 22.10.2022 г.

После доработки 20.01.2023 г.

Принята к публикации 25.01.2023 г.

Разработана цифровая модель рентгеновского спектрографа скользящего падения и методик восстановления спектров мягкого рентгеновского излучения плазмы Z-пинча на установке Ангара-5-1 в области 2–40 нм. Основные проблемы, препятствующие достоверному качественному и количественному восстановлению исходных рентгеновских спектров Z-пинча, — наложение сигналов от разных порядков дифракции и сложный вид аппаратной функции прибора. Приведены две методики восстановления спектра. В первой методике разработана цифровая модель спектрографа в среде Монте-Карло моделирования Geant4, учитывающая геометрию эксперимента и процессы взаимодействия рентгеновского излучения с дифракционной решеткой. В модели с учетом конкретной формы профиля штриха дифракционной решетки и дифференциального метода решения задачи дифракции рассчитывается распределение интенсивности рентгеновского излучения в различные порядки дифракции в зависимости от длины волны. С использованием разработанной модели спектрографа выполнен расчет его аппаратной функции. Вторая методика не использует конкретную форму штриха решетки, а на основе анализа калибрационных спектрограмм строит дисперсионное соотношение и позволяет восстановить спектр. В конце работы приведено сравнение результатов восстановления по первой и второй методикам и показана достаточно высокая степень совпадения полученных по разным методикам спектров.

Ключевые слова: рентгеновский спектр, дифференциальный метод, Монте-Карло моделирование, дифракционный спектрограф скользящего падения, Z-пинч, дифракционная решетка

DOI: 10.31857/S0367292122601357, **EDN:** WXGEOO

1. ВВЕДЕНИЕ

Информация о рентгеновском спектре излучения, эмитируемого плазмой Z-пинча, необходима для понимания и описания протекающих в нем физических процессов и построения физических и математических моделей поведения вещества в экстремальном состоянии.

Для спектрографов с дифракционными решетками (ДР) основными проблемами, препятствующими достоверному качественному и количественному восстановлению исходных рентгеновских спектров Z-пинча, являются наложение сигналов от разных порядков дифракции и сложный вид аппаратной функции прибора, зависящий от геометрии эксперимента. Такая задача не имеет аналитического решения. В данной работе приведены две методики восстановления спектра.

Первая методика основывается на разработанной полномасштабной цифровой Монте-Карло модели спектрографа и, с учетом конкретной формы штриха решетки, позволяет выполнить расчет аппаратной функции прибора и восстанавливать исходные рентгеновские спектры излучения плазмы. Вторая методика не использует данные о конкретной форме штриха решетки, а на основе анализа калибрационных спектрограмм строит дисперсионное соотношение (ДС) и позволяет восстановить спектр. В конце работы приведено сравнение результатов восстановления по первой и второй методикам и показана достаточно высокая степень совпадения полученных по разным методикам спектров.

Для регистрации рентгеновских спектров излучения плазмы Z-пинча на установке Ангара-5-1

[1] применяется дифракционный спектрограф скользящего падения [2–4]. Этот спектрограф в разных экспериментах был снабжен разными вогнутыми сферическими дифракционными решетками с углом блеска 2 градуса с числом штрихов 600 шт./мм двух типов: размером 20×30 мм (W-Re покрытие, радиус кривизны 1 м) и размером 30×40 мм (золотое покрытие, радиус кривизны 2 м).

2. ЦИФРОВАЯ МОДЕЛЬ СПЕКТРОГРАФА

Разработанная цифровая модель рентгеновского спектрографа скользящего падения включает:

- программную процедуру dDif для расчета распределения интенсивности излучения в порядке дифракции в зависимости от длины волны после взаимодействия с дифракционной решеткой;

- модель Монте-Карло (в среде моделирования Geant4 [5]) для построения модельных спектров с учетом геометрии эксперимента и конструкции спектрографа.

Цифровая модель рентгеновского спектрографа скользящего падения реализована в виде компьютерной программы [5] вместе дополнительной программной процедурой dDif.

3. ПРОГРАММНАЯ ПРОЦЕДУРА dDif

Для расчета распределения интенсивности рентгеновского излучения после взаимодействия с ДР в различные порядки дифракции разработана программная процедура dDif. Данная процедура dDif основана на дифференциальном методе решения задачи дифракции [7–9], написана на языке программирования Python.

Рассмотрим процесс взаимодействия рентгеновского излучения с дифракционной решеткой. Пусть в плоскости xu на дифракционную решетку с периодом d и диэлектрической проницаемостью ϵ_1 , штрихи которой параллельны оси z , падает плоская волна с амплитудой $A_0^{(2)}$ (рис. 1). Диэлектрическая проницаемость вакуума (верхней среды) $\epsilon_2 = 1$, магнитная проницаемость во всей среде равна 1.

В результате дифракции на штрихах ДР происходит разложение волны в отраженные порядки с амплитудами $B_n^{(2)}$ и в прошедшие порядки с амплитудами $A_n^{(1)}$, где n – номер порядка дифракции. Учитывается определенное число порядков от $-N$ до $+N$, всего $2N + 1$ порядков. Уравнения Максвелла, применяемые к поляризации ТЕ (вектор электрического поля направлен перпендикулярно к плоскости падения), могут быть све-

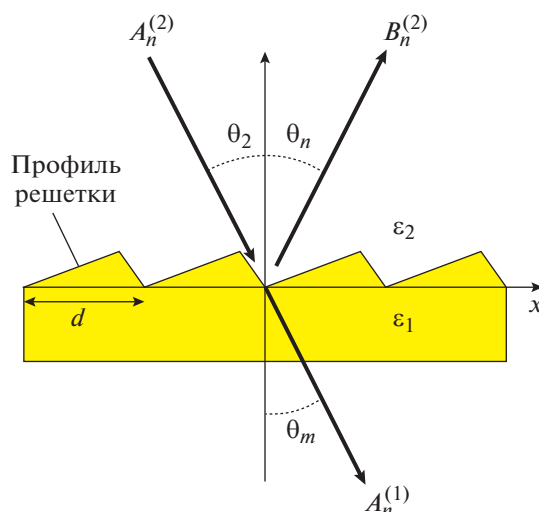


Рис. 1. Схематичное представление одномерной дифракционной решетки: θ_2 — угол падения, θ_n — углы дифракции отраженных порядков, θ_m — углы дифракции прошедших порядков.

дены к одному дифференциальному уравнению второго порядка [9] с полем, направленным вдоль оси z

$$\Delta E_z(x, y) + k^2(x, y) E_z(x, y) = 0, \quad (1)$$

где $k(x, y) = (2\pi/\lambda)\sqrt{\epsilon(x, y)}$, λ — длина волны падающего излучения, E_z — искомая функция.

С учетом разложения полного поля в ряд Фурье, выражение (1) можно представить в виде матричного дифференциального уравнения второго порядка [9]

$$\frac{d^2[E(y)]}{dy^2} = M^{TE}(y)[E(y)], \quad (2)$$

где $E(y)$ — столбец с $2N + 1$ Фурье компонентами электрического поля E_z , $M_{nm}^{TE}(y) = -(k^2)_{n-m}(y) + \alpha_n^2 \delta_{nm}$ — матрица с $(2N + 1) \times (2N + 1)$ компонентами [9].

Для решения данного матричного уравнения в программной процедуре dDif используются такие численные методы как метод стрельбы для решения дифференциальных уравнений и методы Нунмера и Рунге–Кутта 4-го порядка [9]. Программная процедура dDif позволяет проводить расчет интенсивности излучения в порядке дифракции с учетом многослойной структуры дифракционной решетки. В таком расчете используется алгоритм матрицы рассеяния S-matrix [9], который позволяет учитывать большое количество слоев без потери точности. В разработанной программе учитывается только ТЕ поляризация, поскольку в диапазоне мягкого рентгеновского излучения распределение интенсивности прак-

тически не зависит от вида поляризации [9]. Программная процедура dDif позволяет выполнять расчет для любой формы штриха, материала и структуры слоев дифракционной решетки.

3. ТЕСТИРОВАНИЕ ПРОЦЕДУРЫ dDif

Для проверки разработанной программы проведено несколько расчетных тестов. Ниже представлены три теста.

В случае однослойной структуры решетки был рассчитан коэффициент отражения отраженного излучения от золотой ровной гладкой поверхности. Сопоставление этого коэффициента отражения с коэффициентом отражения из базы данных CXRO (Henke [10]) представлено на рис. 2, где два профиля коэффициента отражения полностью совпали друг с другом.

Во втором тесте выполнено сравнение результатов расчета вероятностей отражения в различные порядки дифракции, полученных с помощью разработанной программной процедуры, с результатами расчета в коммерческой программе PCGrate-DEMO [11]. Поскольку в демонстрационной версии программы PCGrate присутствует ограничение на отношение длины волны излучения к периоду решетки $\lambda/d > 0.05$, в проводимом тесте была выбрана длина волны излучения 100 нм и период решетки 1.66 мкм, угол падения 88°. Тестирование, в том числе с учетом поглощения излучения в материале решетки, проводилось для нескольких различных дифракционных решеток и для различных диэлектрических проницаемостей, как с мнимой частью, так и без нее. В табл. 1 и 2 для сравнения показаны результаты расчета распределения интенсивности излучения в различные порядки дифракции, выполненные с помощью разработанной программной процедуры dDif и программы PCGrate-DEMO, можно отметить, что результаты совпадают.

В третьем тесте выполнено сравнение результатов расчета программной процедуры dDif с результатами расчета программы PCGrate. Данные



Рис. 2. Сравнение коэффициента отражения из базы данных CXRO с результатами расчетов, выполненными с помощью разработанной программной процедуры dDif. Две кривые полностью совпали друг с другом.

для расчета брались из эксперимента XMM-Newton (Spectroscopy X-ray Telescope) [12]. Расчет проводился в диапазоне длин волн излучения от 0.5 нм до 5 нм с учетом трех порядков дифракции (−3, −2, −1) (дифракционная решетка с периодом 1000 шт./мм при угле блеска 0.9° и угле падения 88.1°). Сопоставление результатов расчета распределения интенсивности в порядки дифракции по PCGrate и dDif представлено на рис. 3. Небольшое расхождение объясняется отсутствием подробного описания формы профиля штриха ДР.

Для верификации программной процедуры dDif в случае многослойной структуры дифракционных решеток проверялось условие выполнения энергетического баланса, которое заключается в том, что если на ДР падает волна с единичной интенсивностью, то сумма всех интенсивностей отраженных и прошедших порядков дифракции должна быть также единицей [9]. В результате условие энергетического баланса отличалось от единицы не более чем на 0.1%.

Таблица 1. Распределение интенсивности в прошедших порядках дифракции

Расчетная программа	Порядок дифракции						
	−3	−2	−1	0	1	2	3
PCGrate	~0	0.0013	0.0102	0.0996	0.0226	0.0001	0.0002
Разработанная процедура dDif	~0	0.0013	0.0102	0.0999	0.0224	0.0001	0.0002

Таблица 2. Распределение интенсивности в отраженных порядках дифракции

Расчетная программа	Порядок дифракции			
	−3	−2	−1	0
PCGrate	~0	~0	0.0044	0.8611
Разработанная процедура dDif	~0	~0	0.0044	0.8611

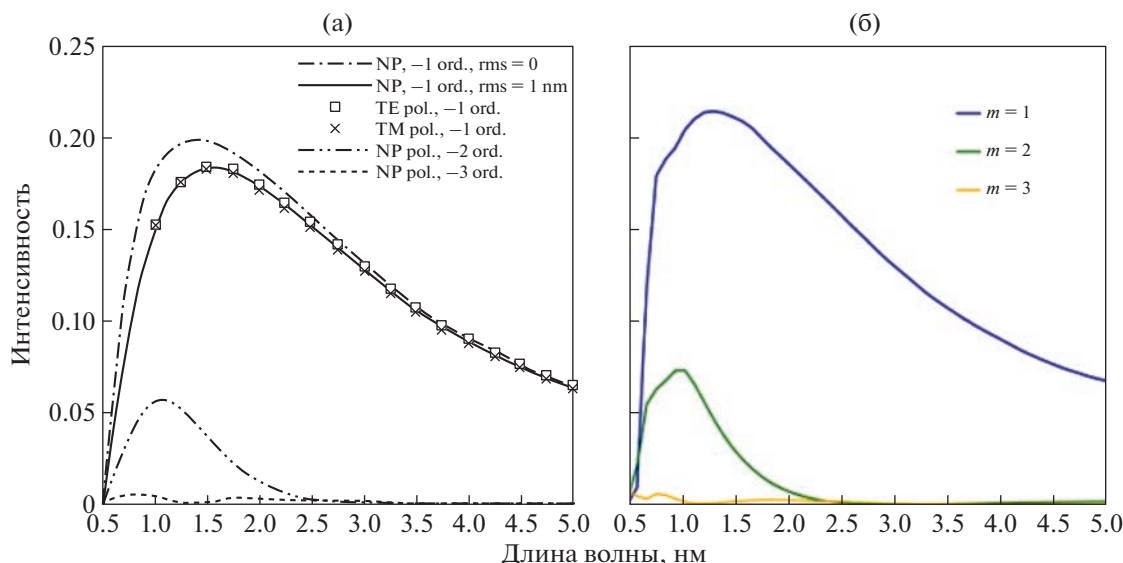


Рис. 3. Результаты расчета распределения интенсивности в порядки дифракции для пилообразной формы профиля штриха дифракционной решетки с золотым покрытием при угле блеска 0.9° : результаты расчета с помощью программы PCGrate (а), результаты расчета, выполненного с помощью разработанной программной процедуры dDif (б).

4. ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ПРОФИЛЯ ШТРИХА РЕШЕТКИ

С помощью программной процедуры dDif путем сравнения расчетов для двух форм профилей штриха дифракционной решетки показано, что форма профиля ДР оказывает сильное влияние на распределение интенсивности рентгеновского излучения в порядках дифракции. Так, в работе [9], где в эксперименте ХММ-Newton для рентгеновского телескопа, использующего несколько сотен одинаковых ДР, предполагалось, что профиль каждой решетки имеет одинаковую форму со следующими параметрами: число штрихов 525 шт./мм, угол блеска 0.75° , угол при вершине треугольника 90° , угол падения излучения от 0° до 3° . Однако после измерения профилей нескольких ДР [9] было определено, что форма профилей штрихов ДР сильно отличается друг от друга, и лишь некоторые из них имеют форму близкую к треугольной, что представлено на рис. 4. С помощью dDif выполнен расчет распределения интенсивности в порядки дифракции (рис. 5) для профилей ДР Н1 и F0 при угле падения излучения 88° .

Как можно видеть на рис. 5, форма профиля штриха ДР оказывает сильное влияние на распределение интенсивности рентгеновского излучения после взаимодействия с дифракционной решеткой, что в свою очередь может сильно влиять на восстановление спектров исходного излучения. Таким образом, для более точного восстановления исходного спектра излучения необходимо точное знание формы профиля штриха используемой дифракционной решетки.

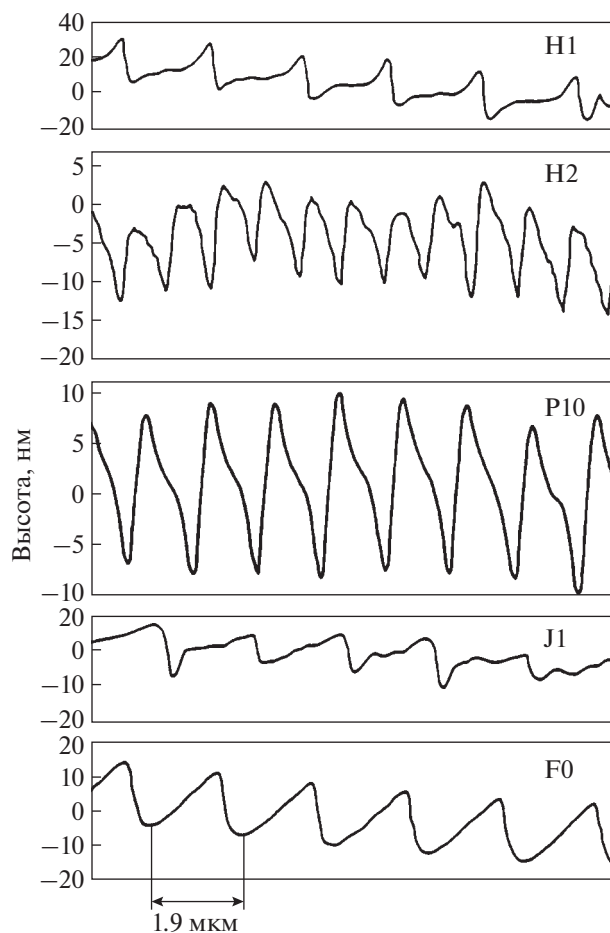


Рис. 4. Форма профилей штрихов дифракционных решеток из одного набора в эксперименте ХММ-Newton [12]. Масштабы по горизонтали (мкм) и по вертикали (нм).

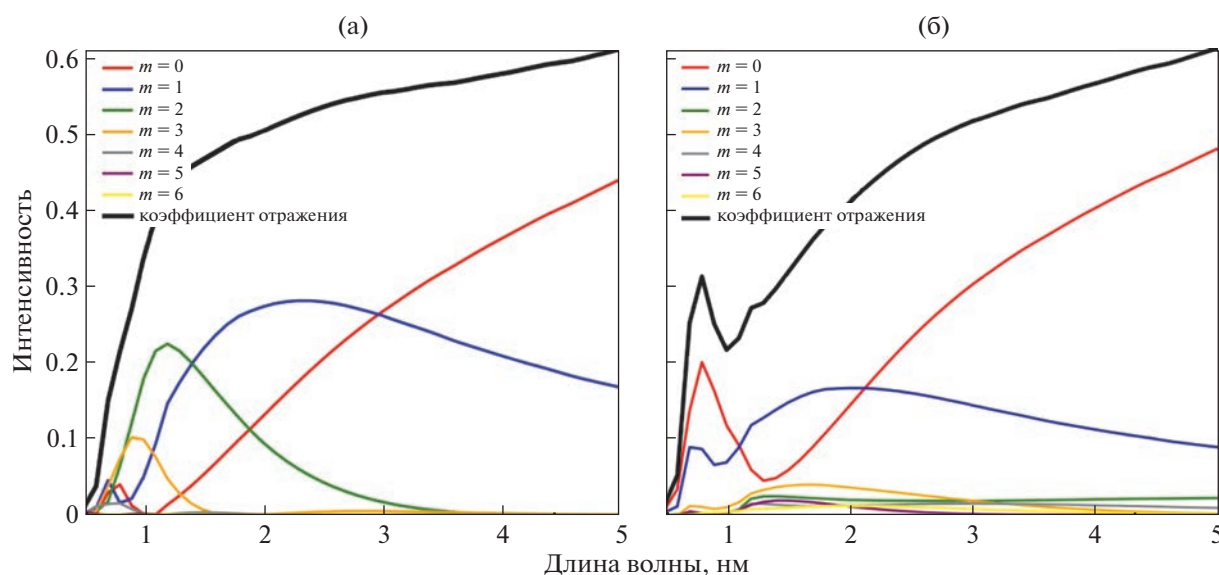


Рис. 5. Сравнение распределения интенсивностей мягкого рентгеновского излучения в различные порядки дифракции для двух профилей штриха дифракционных решеток из эксперимента XMM-Newton: результат для профиля ДР F0 (а), результат для профиля ДР H1 (б).

Следовательно, для достоверности работы модели спектрографа необходима информация о форме профиля штриха. Спектрограф скользящего падения, используемый в эксперименте № 6105 на установке Ангара-5-1, включает в себя дифракционную прямоугольную решетку с геометрическими размерами 20×30 мм, рабочая поверхность ДР имеет вогнутую сферическую форму с радиусом кривизны 1 м с покрытием из сплава W/Re (в эксперименте использовалась ДР 600 шт./мм (период 1.66 мкм), форма штриха пилообразная, угол блеска равен 2°). Форма профиля штриха ДР была определена при сканировании поверхности ДР с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) NTEGRA-II [13], результаты сканирования представлены на рис. 6.

Из результатов сканирования профиля можно видеть, что, хотя период решетки оказался верным и равным приблизительно 1.66 мкм, профиль штриха не является треугольным, что можно объяснить особенностями технологии изготовления ДР, в которой коммерчески доступные ДР являются репликами первичного изделия. Поскольку профиль штриха ДР оказывает очень сильное влияние на распределение интенсивности рентгеновского излучения и на результаты восстановления спектров, то в дальнейшем мы использовали усредненный профиль штриха ДР. С использованием усредненного профиля штриха, представленного на рис. 7, было рассчитано распределение интенсивности рентгеновского излучения в порядки дифракции при угле падения 86° (рис. 8) в диапазоне длин волн от 0.5 до 40 нм, данное распределение далее использовалось при восстановлении исходных спектров рентгеновского излучения.

5. МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛЬ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ

Для разработки полномасштабной Монте-Карло модели рентгеновского спектрографа скользящего падения, рассчитывающей трекинг фотонов от источника до детектора, выбрана среда Монте-Карло моделирования Geant4 [6], снабженная большим количеством физических пакетов [14, 15], учитывающих взаимодействие частиц с веществом, и одновременно позволяющая задавать геометрию эксперимента и элементов спектрографа в виде 3D-модели. В связи с отсутствием в среде Geant4 процесса взаимодействия рентгеновского излучения с периодическими структурами такими, как дифракционная решетка (ДР), для расчета распределения интенсивности излучения после взаимодействия с дифракционной решеткой, разработан новый программный класс “Diffraction”, работающий одновременно с физическим пакетом FTFP_BERT [14]. Класс “Diffraction”, унаследованный от класса G4VDiscreteProcess, внутри которого перегружены методы “GetMeanFreePath()” и “PostStepDoIt()” [16]. Метод “GetMeanFreePath()” отвечает за определение сечения взаимодействия как функции типа частиц, энергии и материала решетки и рассчитывает длину свободного пробега фотонов. В “GetMeanFreePath()” задано условие, что длина свободного пробега фотона на поверхности дифракционной решетки равна нулю, т.е. в случае попадания рентгеновского излучения на поверхность дифракционной решетки расчет взаимодействия производится сразу. Метод “PostStepDoIt()” отвечает за генерацию фотонов после взаимодей-

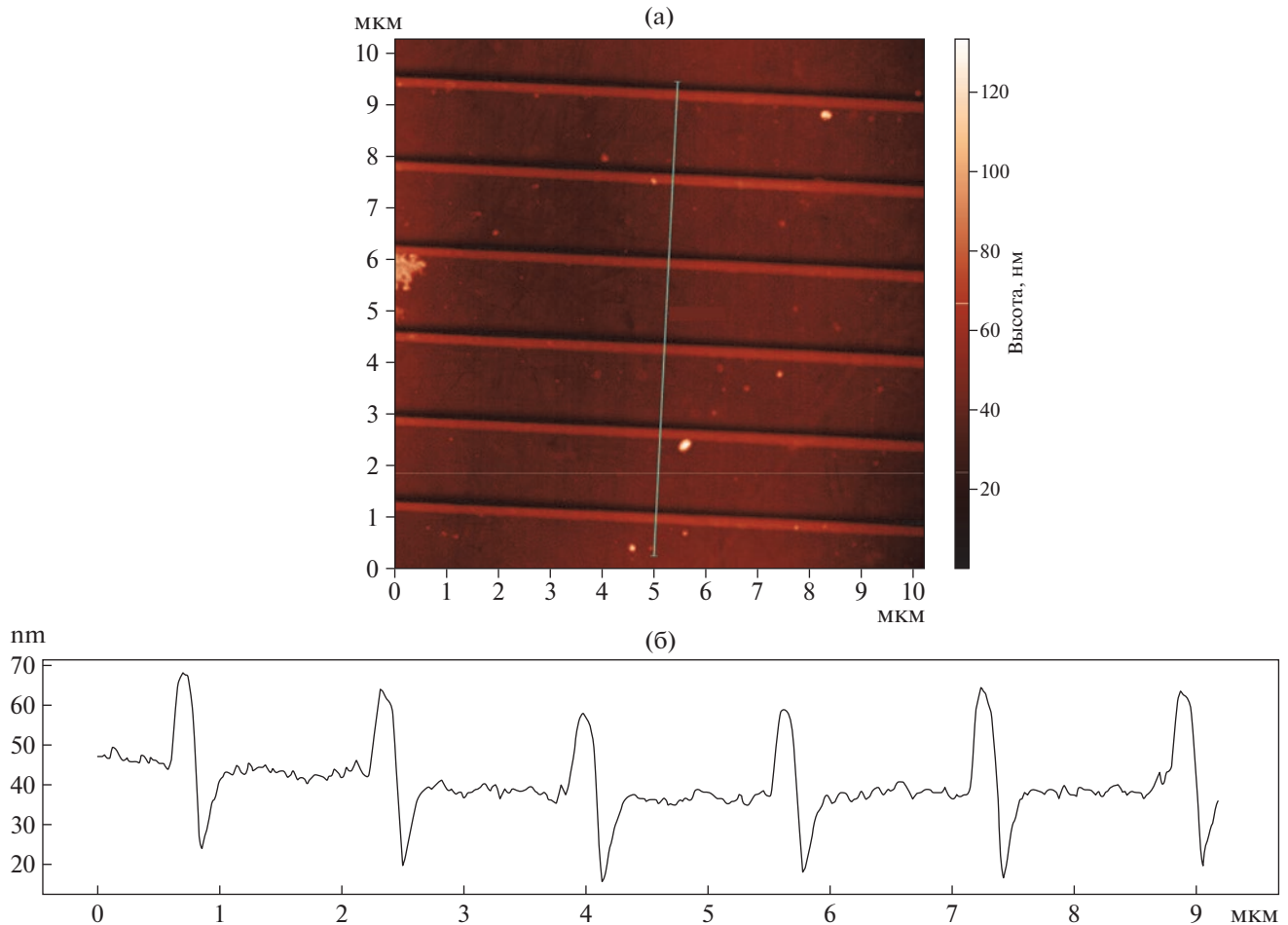


Рис. 6. Результаты сканирования АСМ микроскопом поверхности дифракционной решетки: изображение поверхности ДР (а), профиль поверхности ДР (б).

ствия и проводит обновление состояние трека фотона. Вычисление угла падения фотона θ_{inc} на поверхности ДР производится с учетом кривизны поверхности дифракционной решетки. После попадания фотона на поверхность ДР в работу вступает ранее описанная программная процедура dDif, которая интегрирована в класс "Diffraction".

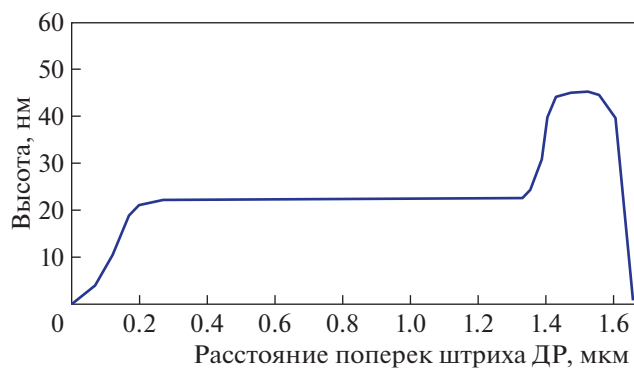


Рис. 7. Форма профиля штриха ДР, используемая при расчете распределения интенсивности.

В процессе моделирования, с использованием разработанной программной процедуры dDif, класса "Diffraction" и с учетом вероятности отражения излучения в соответствующий порядок дифракции m , а также с целью уменьшения времени расчета и исключения одинаковых вычислений при падении излучения на поверхность ДР под одним и тем же углом и с одной и той же длиной волны, происходит накопление данных о распределении интенсивности излучения в зависимости от угла падения и длины волны излучения в массив. Данные накапливаются с определенным шагом по длине волны излучения и углу падения с точностью 0.1 нм и 0.1°. В случае падения фотона на ДР с длиной волны и углом падения не кратным шагу производится расчет промежуточных значений с помощью аппроксимирующей функции. С учетом вероятности отражения излучения в соответствующий порядок дифракции m вычисляется угол дифракции, θ_r , согласно уравнению, которое выводится из уравнения дифракции [9]:

$$\theta_r = \arcsin\left(\frac{m\lambda}{d} - \sin(\theta_{\text{inc}})\right), \quad (3)$$

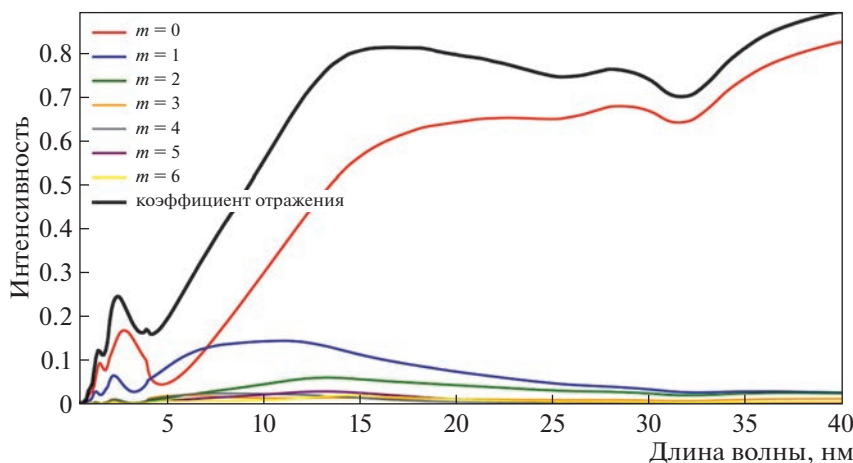


Рис. 8. Распределение интенсивности рентгеновского излучения в порядки дифракции после взаимодействия с дифракционной решеткой.

где θ_{inc} — угол падения излучения на поверхность решетки, d — период решетки, λ — длина волны.

После расчета взаимодействия фотона с ДР, происходит изменение направления волнового вектора фотона. Он поворачивается вокруг оси, перпендикулярной плоскости, образованной волновым вектором падающего фотона на решетку и восстановленной нормалью в точке падения с учетом угла дифракции. На конечном этапе расчета модельных спектров происходит регистрация фотона на виртуальном детекторе.

В разработанной полномасштабной модели спектрографа имеется возможность строить расчетные изображения спектров на плоскости регистрации. Задание геометрических параметров спектрографа и элементов экспериментального оборудования производится посредством переноса схемы, с помощью библиотеки CADMesh [17], в среду моделирования Geant4 в форматах stl, ply и obj, предварительно созданной в любой удобной 3D-CAD программе.

Разработанная модель позволяет строить спектрограммы в плоскости детектора одновременно с учетом всех геометрических параметров эксперимента, таких как внеуландовская система регистрации и форма кривизны поверхности решетки, с учетом процессов взаимодействия излучения с решеткой при любой форме профиля штриха, а также с учетом материала и многослойности поверхности.

6. КОРРЕКЦИЯ ДИСПЕРСИОННОГО СООТНОШЕНИЯ

С использованием разработанной модели выполнен расчет модельных спектров, построение аппаратной функции и восстановление спектра излучения плазмы Z-пинча в эксперименте № 6105 на установке Ангара-5-1. Схема полномасштабной модели эксперимента представлена

на рис. 9. При моделировании источник рентгеновского излучения (Z-пинч) задается цилиндром диаметром 1 мм высотой 15 мм, что соответствует средним размерам излучающей части Z-пинча в момент стагнации. Изображение Z-пинча формируется с помощью перпендикулярной его оси пространственной щели шириной 70 мкм, высотой 30 мм. Входная щель спектрографа (расположена параллельно оси источника) имеет ширину 50 мкм, высоту 30 мм. Расстояние от пространственной щели до входной щели — 568 мм, расстояние от входной щели до середины решетки — 80 мм, а расстояние от пространственной щели до Z-пинча — 1110 мм. Расстояние от центра дифракционной решетки до детектора — 90 мм. Для увеличения скорости численного моделирования, в расчетах источник излучает в телесный угол, который охватывает только область пространственной щели. Угол падения рентгеновского излучения на дифракционную решетку составлял 86° . В модели детектор установлен перпендикулярно оси спектрографа (внеуландовская система регистрации) и представляет собой чувствительную область размером 2×60 мм с размером пикселя равным 1 мкм. Размеры детектора и его пространственное разрешение выбраны с целью полного охвата излучения в первых трех порядках дифракции в диапазоне длин волн от 1 до 40 нм, а также увеличения количества точек на спектре для более точного определения аппаратной функции спектрографа. В эксперименте в качестве детектора используется микроканальная пластина (МКП) с размером пикселя 12.5 мкм [18].

Дисперсионное соотношение для первого порядка дифракции $\lambda = f(x)$ связывает длину волны λ излучения с координатой x на детекторе, отсчитываемой от нулевого порядка. Поскольку рассматривается несколько порядков дифракции, то для порядка номер m дисперсионное соотно-

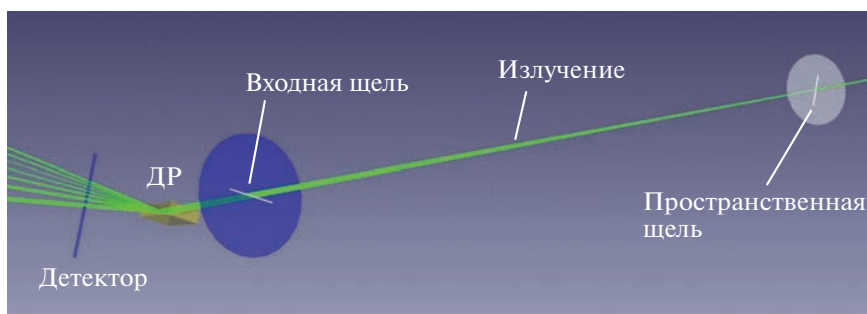


Рис. 9. Монте-Карло Geant4 модель рентгеновского спектрографа скользящего падения. Расстояние от пространственной щели до входной щели — 568 мм, расстояние от входной щели до середины решетки — 80 мм, а расстояние от пространственной щели до Z-пинча — 1110 мм. Источник излучения находится справа на расстоянии в три раза большем, чем расстояние от ДР до пространственной щели.

шение имеет вид $m\lambda = f(x)$. Дисперсионное уравнение для первого порядка дифракции $\lambda = f(x)$ получено из геометрических параметров спектрографа

$$\lambda \text{ [nm]} = 1667\{0.9976 - \cos[0.1396 + \arctg((x \text{ [мм]}/78) - 0.0699)]\}. \quad (4)$$

Сопоставление модельного дисперсионного соотношения, рассчитанного для случая идеальной геометрии, при котором излучение падает на центр дифракционной решетки с экспериментальным ДС (4) показано рис. 10а. Как можно увидеть на рис. 10, экспериментальное и модельные ДС не совпадают, из чего следует вывод, что геометрические параметры, используемые в модели, не соответствуют экспериментальным (как оказалось, эта неточность связана с неточностью определения позиции ДР в креплении). Для устранения данного несоответствия проведено варьирование геометрических параметров в модели: расстояние от ДР до детектора, угол наклона позиции дифракционной решетки, вертикальной и продольной позиции ДР, угол наклона детектора. В модели изменение геометрических параметров установки проводилось до тех пор, пока отличие в дисперсионных соотношениях в области 1–14 нм не стало менее 0.2 нм. В результате определено, что при смещении дифракционной решетки на 0.55 мм вниз относительно падающего на нее рентгеновского излучения дисперсионные соотношения имеют хорошее совпадение (рис. 10б) в диапазоне длин волн 2–15 нм. Далее, в расчетах, в полномасштабной модели эксперимента использовалось именно это скорректированное ДС.

7. РАСЧЕТ АППАРАТНОЙ ФУНКЦИИ СПЕКТРОГРАФА

При восстановлении экспериментальных рентгеновских спектров из зарегистрированной спектрограммы необходимо учитывать функцию рассеяния спектральных линий (ФРЛ), что особенно актуально в случае использования внефокусной системы регистрации. Фокусировка

спектральных линий происходит на круге Роуленда. Поскольку регистрирующая плоскость детектора расположена не на круге Роуленда, то изображение линий размывается. Причем данное размывание зависит от многих геометрических параметров прибора. Разработанная полномасштабная Монте-Карло модель рентгеновского спектрографа скользящего падения учитывает размывание изображения спектральных линий при получении аппаратной функции прибора.

С использованием разработанной Монте-Карло модели выполнен расчет аппаратной функции спектрографа скользящего падения, которая используется для восстановления экспериментальных спектров излучения плазмы Z-пинча. Для дифракционной решетки, использованной в эксперименте № 6105 (рис. 8, 9), проведен ряд Монте-Карло расчетов спектрограмм (рис. 11), регистрируемых виртуальным детектором от цилиндрического источника диаметром 1 мм со спектром излучения в виде тонкой спектральной линии с нулевым уширением. Расчеты проведены для длин волн излучения в диапазоне λ от 0.5 до 40 нм.

Примеры полученных моделированием функций рассеяния спектральных линий (ФРЛ) при разных значениях $m\lambda$ представлены на рис. 12. Для сопоставления на рис. 10 изображена точка $\lambda = 9$ нм, соответствующая средней части рис. 12 для первого порядка дифракции.

С использованием полученных результатов моделирования осуществлен анализ формы ФРЛ [19]. В диапазоне длин волн $\lambda = 7–12.5$ нм наблюдается изменение формы ФРЛ к эллипсовидной вблизи $\lambda = 9$ нм (рис. 12).

Проведен подбор аппроксимирующей зависимости от $m\lambda$ для описания ФРЛ (рис. 12). Хорошее приближение получено с использованием свертки нормального распределения с равнобедренной трапецией, боковые стороны которой достраиваются до эллипса. Погрешность аппроксимации оценивалась как процентное отношение корня среднеквадратичной ошибки к значению

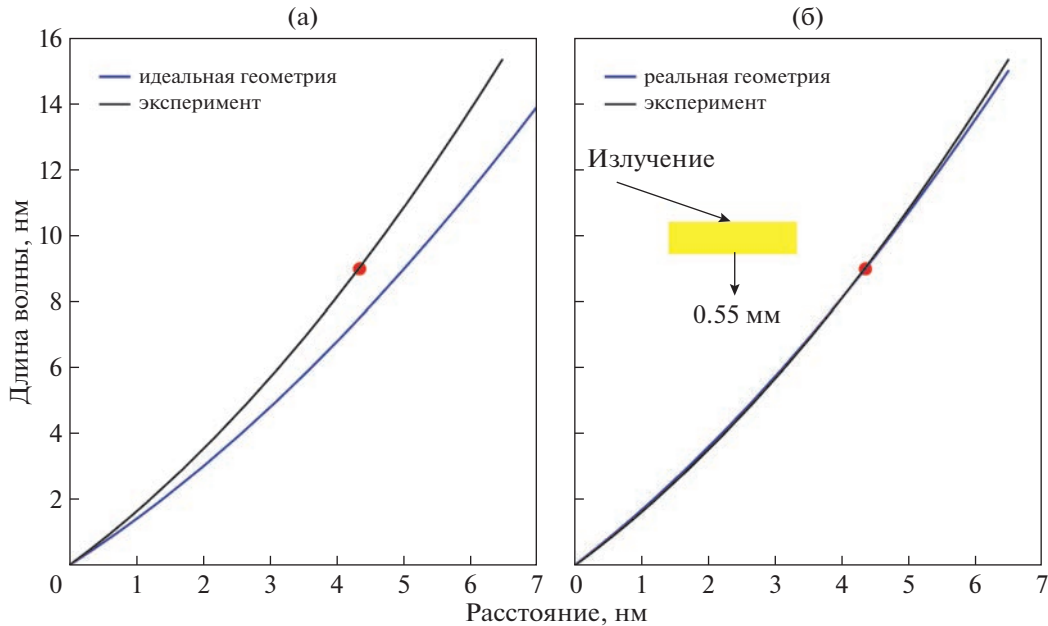


Рис. 10. Сравнение экспериментального и модельного дисперсионных соотношений для выстрела № 6105: до модификации модели спектрографа (а), после модификации (сдвиг ДР на 0.55 мм вниз) (б). Для сопоставления со средней частью рис. 12 изображена точка ($x = 4.346$ мм, $\lambda = 9$ нм).

аппроксимируемой функции в максимуме. Для всех исследуемых функций в диапазоне длин волн 0.5–40 нм данное отношение не превысило 1.7%. Получены зависимости параметров аппроксимирующей функции от $m\lambda$. Проведена аппроксимация этих зависимостей полиномами для обеспечения возможности определения ФРЛ при любом значении $m\lambda$.

Следует отметить, что локализация максимума ФРЛ для длины волны $m\lambda$ соответствует $\lambda_m(x)$ — дисперсионному соотношению для порядка дифракции m .

После отражения излучения от ДР с каждого пикселя регистратора снимается заряд. Переходя от дискретных пикселей к непрерывному распределению по координате x , связь между зарегистрированной линейной плотностью заряда $Q(x)$ [Кл/мм] и спектральной плотностью энергии $I(\lambda)$ [Дж/нм] можно представить аналитически через аппаратную функцию спектрографа $f(\lambda, x)$, заданную в явном виде с учетом полученных выше данных, следующим образом:

$$Q(x) = \int f_\lambda(x) I(\lambda) d\lambda, \quad (5)$$

$$f_\lambda(x) = \sum_m p_m(\lambda) LSF(m\lambda, x - x(m\lambda)),$$

где $p_m(\lambda)$ — вероятность отражения фотона от решетки в порядок дифракции m ; $LSF(m\lambda, x)$ — функция рассеяния линии (ФРЛ); $x(m\lambda)$ — дисперсионное соотношение для ДР.

Значения p_m получены кубической интерполяцией данных о зависимости вероятности отражения в порядок дифракции от длины волны излучения (рис. 8), рассчитанных с использованием dDif.

8. ПЕРВАЯ МЕТОДИКА ВОССТАНОВЛЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ

Для восстановления входной спектральной плотности излучения $I(\lambda)$ Z-пинча по зарегистрированной спектрограмме $Q(x)$ разработан итерационный алгоритм. Входной спектр $I(\lambda)$ аппроксимируется алгебраической суммой

$$I_N(\lambda) = \sum_n^N M_n(\lambda) \quad (6)$$

сдвинутых функций Максвелла $M(\lambda)$

$$M_n(\lambda) = \begin{cases} B_n(\lambda - \lambda_n)^2 \exp(-\beta_n(\lambda - \lambda_n)^2), & \lambda - \lambda_n \geq 0 \\ 0, & \lambda - \lambda_n < 0 \end{cases} \quad (7)$$

На каждой итерации n форма восстанавливаемого спектра уточняется еще одним слагаемым $M_n(\lambda)$, параметры B_n , β_n и λ_n которого варьируются в рамках данной итерации. Оптимизация происходит исходя из минимизации невязки между экспериментальной спектрограммой Q_{exp} и расчетной Q_N , восстанавливаемой по формуле

$$Q_N(x) = \int f(\lambda, x) I_N(\lambda) d\lambda \quad (8)$$

с использованием найденного аналитического приближения аппаратной функции спектрографа (5). Здесь $I_N(\lambda)$ — реконструированная спектральная плотность интенсивности излучения Z-пинча после N итераций; $Q_N(x)$ — вычисленное по $I_N(\lambda)$ распределение интенсивности в спектрограмме на плоскости детектора после N итераций; N — полное число итераций.

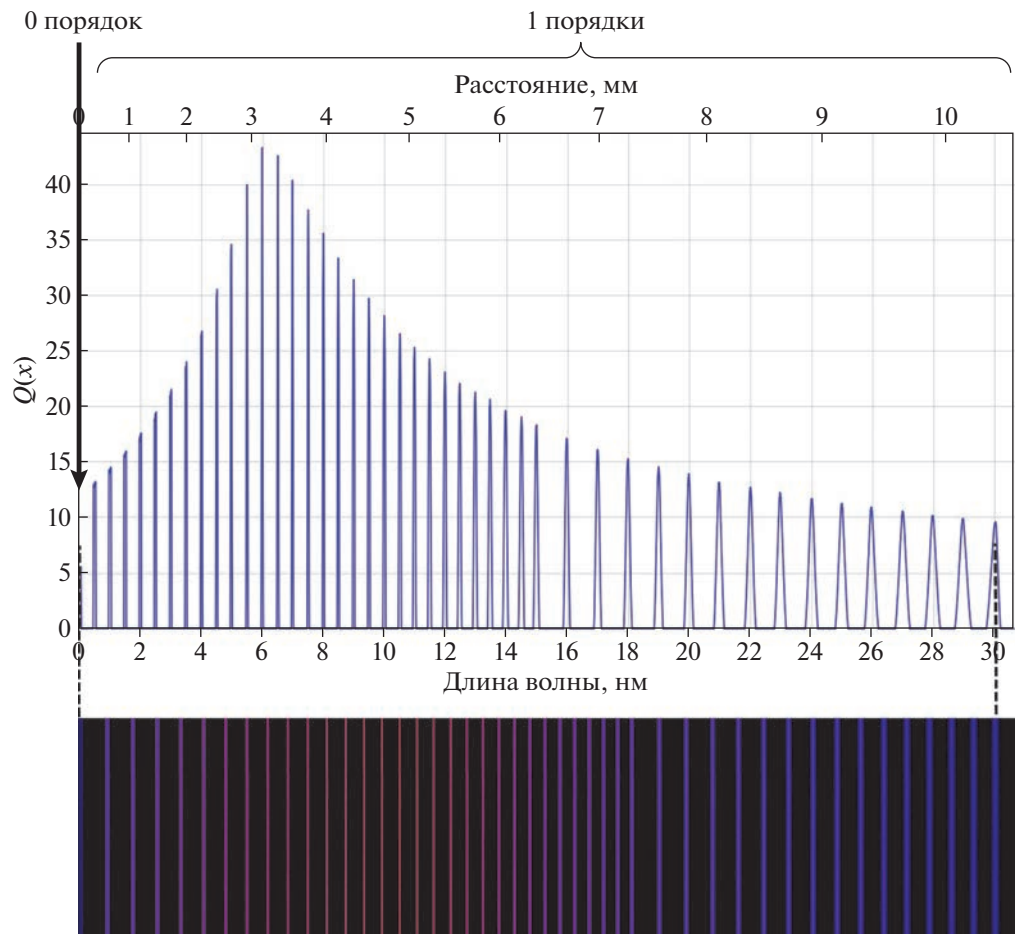


Рис. 11. Расчетная спектрограмма для дифракционной решетки, использованной в эксперименте № 6105, зарегистрированная на виртуальном детекторе от источника со спектром излучения в виде тонких спектральных линий в диапазоне $\lambda = 0.5\text{--}30$ нм.

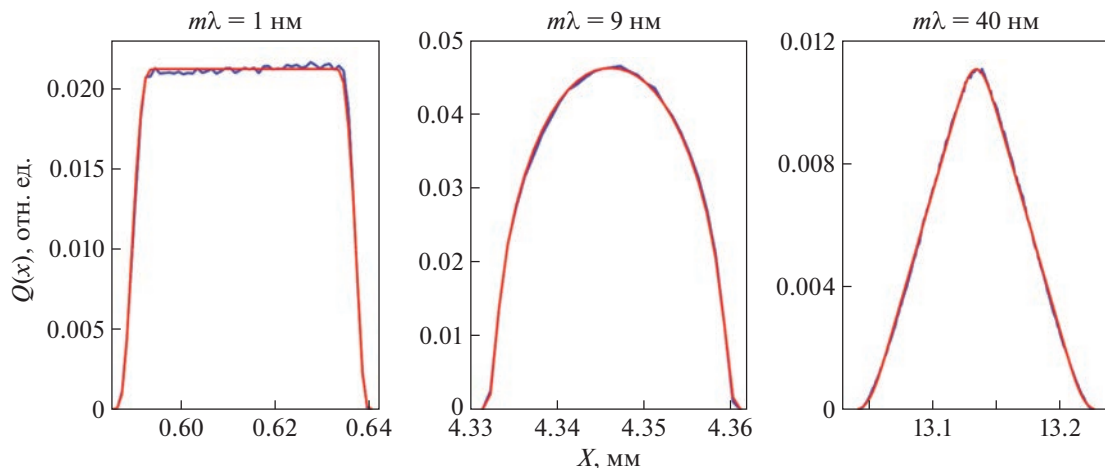


Рис. 12. Пример функций рассеяния линии при разных значениях $m\lambda$, полученных с использованием разработанной цифровой модели спектрографа (синие линии) и их аппроксимация (красные линии). Для сопоставления на рис. 10 изображена точка $\lambda = 9$ нм, соответствующая средней части рисунка для первого порядка дифракции.

Выбор функции (7) обусловлен тем, что регистрируемый спектр, в зависимости от условий эксперимента, может состоять из различных, не

похожих друг на друга компонент, таких как: тепловой спектр, собственные спектральные линии излучения материалов нагрузки и мишени, поло-

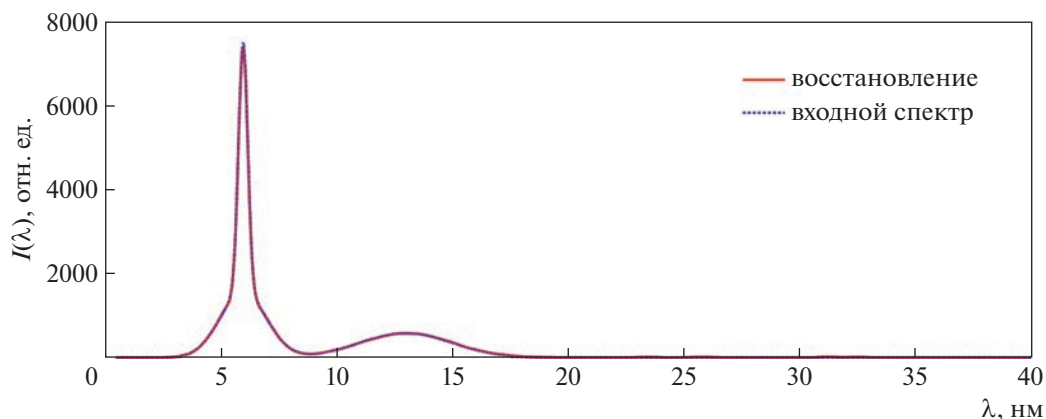


Рис. 13. Спектральная плотность излучения виртуального источника. Синяя линия — входной искусственно заданный спектр, красная — результат восстановления из спектрограммы. Эти линии полностью совпали друг с другом.

сы поглощения и др. Использование линейной комбинации (6) данных функций позволяет добиться хорошего приближения расчетной спектрограммы (8) к экспериментальной за разумное число итераций.

Методика восстановления спектров реализована в виде численного кода на языке программирования MATLAB [20]. Для проверки данного кода выполнен тест по восстановлению входного, искусственно заданного спектра. Для построения входного спектра задан цилиндрический виртуальный источник рентгеновского излучения диаметром 1 мм, спектральная плотность интенсивности которого представлена на рис. 13. С помощью разработанной модели спектрографа рассчитана спектрограмма излучения виртуального источника (рис. 14) и проведена ее обработка с учетом шести порядков дифракции, распределение интенсивности которых рассчитано с использованием профиля, изображенного на рис. 9 с параметрами, соответствующими эксперименту № 6105. С помощью алгоритма (6)–(8) восстановлен входной спектр излучения. Проведено сравнение восстановленного спектра с входным (рис. 13), получено хорошее совпадение (среднеквадратичное отклонение $\sigma = 0.16\%$ от значения в максимуме и коэффициент линейной корреляции Пирсона $r = 0.99996$).

С помощью разработанной методики восстановления спектров выполнено восстановление рентгеновского спектра излучения плазмы Z-пинча в эксперименте № 6105 на установке Ангара-5-1. В данном эксперименте нагрузка для генерации Z-пинча состояла из 60 вольфрамовых проводников диаметром 6.0 мкм каждый, которые располагались на боковой поверхности цилиндра диаметром 10 мм, при высоте нагрузки 16 мм. Регистрация была произведена через 1 нс после максимума мягкого рентгеновского излучения (временное разрешение регистратора около 1.5 нс). Спектрограмма излучения Z-пинча, зарегистрированная в эксперименте № 6105 на установке Ангара-5-1

представлена на рис. 15 (первый пик — нулевой порядок).

Экспериментальная спектрограмма представляет собой композицию фонового сигнала, изображения светимости источника (нулевой порядок) и дифракционной части спектра. Для восстановления исходного спектра выделена дифракционная часть (рис. 16). Величина фоновой засветки определялась как среднее значение сигнала на границе апертуры. Разделение изображения светимости источника и дифракционного спектра производится наклонной прямой. Параметры прямой подбираются исходя из двух соображений. Во-первых, согласно рис. 10 вероятность отражения в первый порядок дифракции для излучения с $\lambda \leq 0.7$ нм стремится к нулю. Также предполагается, что для используемой нагрузки Z-пинча излучение в данной коротковолновой области незначительно. В этой точке величина дифракционной части полагается равной нулю. Во-вторых, область, занимаемая отстающей плазмой, ограничена и на изображении составляет предположительно ~ 4 мм.

Проведено построение дифракционной части расчетной спектрограммы, расчет проведен с учетом шести порядков дифракции. На рис. 16 приведено сравнение распределения интенсивности полученного за 25 итераций алгоритма восстановления (6)–(8) и экспериментальной спектрограммы. Используемым критерием остановки итерационного процесса служит хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных, а именно: коэффициент линейной корреляции Пирсона $r > 0.999$, процентное отношение среднеквадратичного отклонения к значению дифракционной части спектра в максимуме $< 0.5\%$. Результат восстановления спектра излучения (спектральная плотность интенсивности излучения) плазмы Z-пинча приведен на рис. 17.

В результате восстановления спектра можно видеть, что максимум спектральной плотности

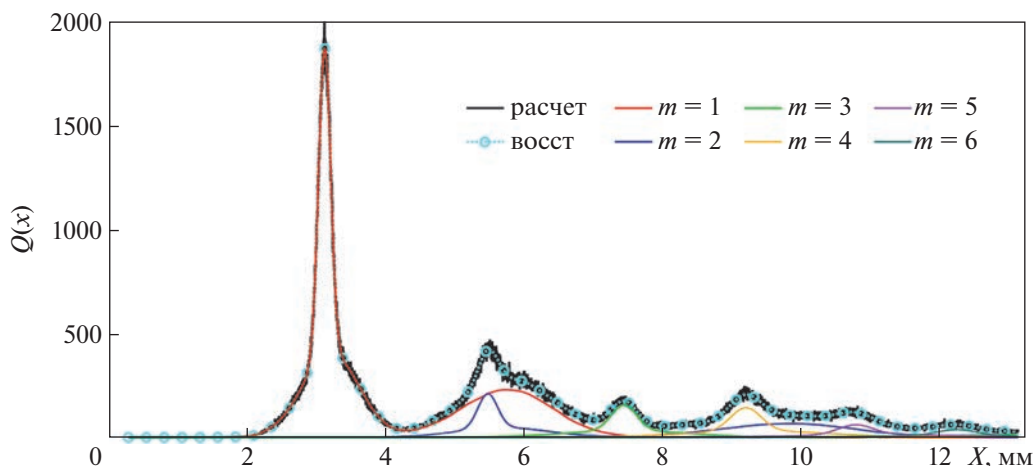


Рис. 14. Спектрограмма (данные на плоскости детектора) виртуального источника с искусственно заданным спектром излучения и восстановленный вклад отдельных порядков дифракции. Черная линия (верхняя кривая) — результат построения спектра на плоскости регистрации, пунктирная голубая линия с маркерами (тоже верхняя кривая) — результат работы итерационной методики восстановления спектра (8), эти линии полностью совпали друг с другом. Остальными цветными линиями отображена декомпозиция реконструированного сигнала по порядкам дифракции m .

излучения лежит в диапазоне между 5 и 6 нм. Этот диапазон соответствует массиву неразрешаемых переходов $4d-4f$ в ионах вольфрамовой плазмы [21, 22].

9. ВТОРАЯ МЕТОДИКА ВОССТАНОВЛЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ

В предыдущем разделе было представлено восстановление спектров для угла падения рентгеновского излучения на дифракционную решетку 86° . Возможность реализации представленного алгоритма основана на том, что поверхность этой дифракционной решетки была отсканирована АСМ, и на основе полученной формы штриха был рассчитан вклад излучения в различные порядки дифракции.

Для регистрации рентгеновских спектров излучения плазмы Z-пинча на установке Ангара-5-1 применялся дифракционный спектрограф скользящего падения с углом падения рентгеновского излучения на дифракционную решетку 88° . Для

этой решетки не было возможности отсканировать ее поверхность АСМ микроскопом и определить форму штриха. Соответственно, описанный выше алгоритм не мог быть применен.

Для дифракционного спектрографа скользящего падения с углом падения рентгеновского излучения на дифракционную решетку 88° была разработана вторая методика определения параметров решетки и восстановления спектров. Эта методика успешно используется в экспериментах на установке Ангара-5-1 с 2019 г. [4, 22–27]. Для этой решетки требовалось получить дисперсионное соотношение экспериментально в процессе калибровки. Для калибровки на установке Ангара-5-1 был проведен эксперимент № 6438, в котором источником рентгеновского излучения являлся Z-пинч, образованный полипропиленовыми волокнами и дейтерированным полиэтиленовым $(C_2H_4)_n$ цилиндром (диаметр 1 мм, $\rho = 80 \text{ мг/см}^3$) на оси, плазма которого интенсивно излучает в линиях углерода. На рис. 18 приведена зарегистрированная в этом выстреле спектрограмма и ее расшифровка. Спектр легко может быть отождествлен.

Погрешность положения нуля составляет 100 мкм. В табл. 3 приведены длины волн [H]- и [He]-подобных ионов углерода в 1-м, 2-м и 3-м порядках дифракции. Табличные значения длин волн данных переходов: $\lambda(L_\beta) = 2.846 \text{ нм}$, $\lambda(L_\alpha) = 3.374 \text{ нм}$, $\lambda(He_\alpha) = 4.027 \text{ нм}$. Было принято, что в 1-м порядке линия L_β 2.8464 нм соответствует пику на зарегистрированной спектрограмме при координате на детекторе $x = 3.47 \text{ мм}$. При такой идентификации все линии из табл. 3 соответствуют спектрограмме: первый максимум — 2.8464 нм, второй максимум — 3.435 нм, третий — 4.027 нм. Далее идут три точки 2-го порядка две из трех точек 3-го порядка. 0-й порядок на 0 мм.

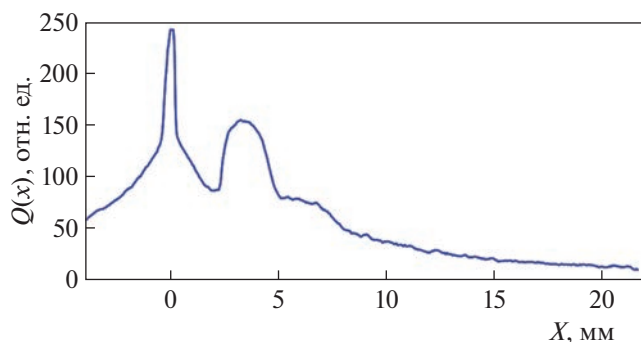


Рис. 15. Спектрограмма излучения Z-пинча, зарегистрированная в эксперименте № 6105 на установке Ангара-5-1.

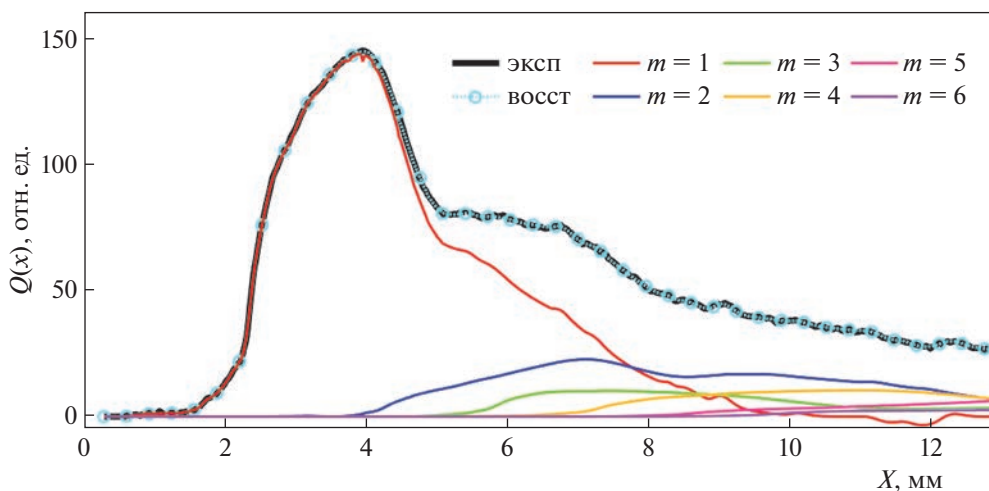


Рис. 16. Дифракционная часть спектрограммы, полученной в эксперименте № 6105. Цветными линиями отображена декомпозиция реконструированного сигнала по порядкам дифракции m . Черная линия (верхняя кривая) — экспериментально зарегистрированная спектрограмма без нулевого максимума, пунктирная с маркерами (тоже верхняя кривая) — результат работы итерационной методики восстановления спектра (8), эти линии полностью совпали друг с другом.

Полученные привязки перечисленных выше линий к спектрограмме позволили получить дисперсионное соотношение для первого порядка отражения в виде полинома второго порядка путем минимизации среднеквадратичного отклонения значений этого полинома от идентифицированных длин волн в табл. 3. При этом линии L_α и He_β считались как одна линия, поскольку они не разрешались спектрографом. На рис. 18 совокупное положение линий L_α и He_β в 1-м, 2-м, и в 3-м порядках отмечено толстыми стрелками. Особая сложность состояла в идентификации линии L_β . Линия L_β в 1-м и 2-м порядке имеет малую, но вполне различимую амплитуду и участвовала в интерполяции в 1-м и 2-м порядках. Линия L_β в 3-м порядке не участвовала в интерполяции, поскольку была не видна.

Путем аппроксимации полиномом второй степени было получено дисперсионное соотношение (9) для отражения в первом, во втором, и в третьем порядках дифракции m

$$m\lambda(x) [\text{нм}] = 0.59093x [\text{мм}] + 0.06823x^2. \quad (9)$$

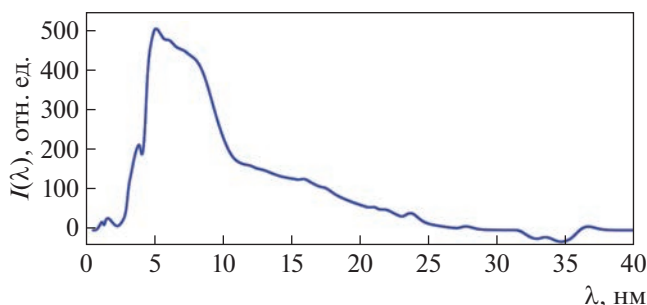


Рис. 17. Восстановленный спектр излучения Z-пинча в эксперименте № 6105.

Результирующее экспериментальное дисперсионное соотношение и спектральные линии из табл. 3 показаны на рис. 19. На рис. 20 приведена зарегистрированная спектрограмма $Q(\lambda)$ в шкале длин волн.

Как видим, совпадение реперных линий из табл. 3 с пиками на спектрограмме хорошее. Однако это не есть спектр, а наложение нескольких порядков отражения (в нашем случае, мы считаем, что 1-го, 2-го и 3-го порядков).

Наличие в эксперименте выделенных линий излучения ионов углерода позволило определить отношения их интенсивностей для первых трех порядков дифракции. Величины интенсивностей излучения A_1, A_2, A_3 для объединенных линий L_α и He_β в первый, второй и третий порядки на рис. 18 соответствуют величине толстых стрелок. Из серии экспериментов с аналогичными эксперименту № 6438 нагрузками были получены отношения пиков второго (A_2) и третьего порядков (A_3), к величине пика линии первого порядка (A_1): $a_2 = A_2/A_1 = 0.41 \pm 0.13$, $a_3 = A_3/A_1 = 0.16 \pm 0.06$. Это позволило перейти к восстановлению спектра из спектрограммы, исходя из значений a_2 и a_3 . Чтобы найти спектр, надо выделить из зарегистрированной спектрограммы отражение только в 1-м порядке.

Обозначим $Q_1(x)$ вклад первого порядка дифракции в экспериментально полученный сигнал $Q(x)$ на координате x на плоскости регистрации спектрографа. Связь между плотностью заряда $Q_1(x)$ для первого порядка дифракции и спектральной плотностью излучения источника $I_1(\lambda)$ в первом порядке дифракции с учетом зависимости коэффициента отражения материала по-

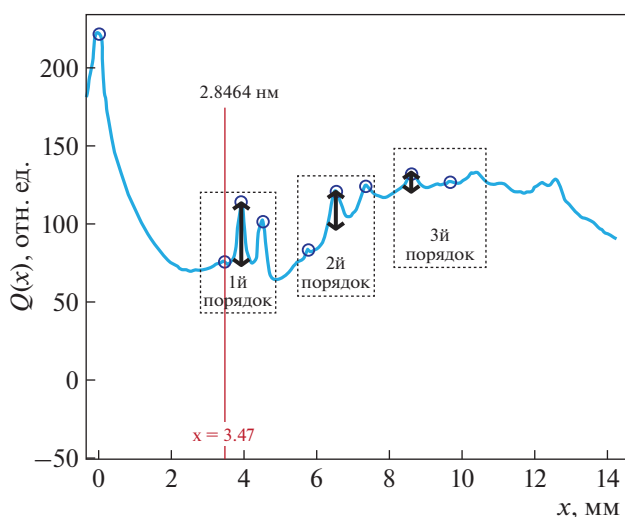


Рис. 18. Зарегистрированная спектрограмма в калибровочном эксперименте № 6438.

крытия решетки от длины волны падающего излучения осуществляется с помощью выражения

$$Q_1(x) = I_1(\lambda(x)) \frac{d\lambda_1}{dx(x)} k(\lambda(x)), \quad (10)$$

где $I_1(\lambda(x))$ – спектральная плотность излучения первого порядка на координате x регистратора, $d\lambda_1/dx(x)$ – производная по x дисперсионного соотношения $\lambda_1(x)$ для первого порядка дифракции, $k(\lambda)$ – коэффициент отражения материала покрытия решетки из базы данных [10].

Поскольку переменные x и $\lambda\lambda$ для первого порядка дифракции связаны между собой монотонным дисперсионным соотношением $\lambda\lambda = \lambda(x)$, или $x = x(\lambda)$, то это уравнение может быть переписано через переменную λ

$$Q_1(x) = I_1(\lambda(x)) \frac{d\lambda_1}{dx(\lambda)} k(\lambda(x)). \quad (11)$$

Суммируя вклады от трех порядков отражения, получим

$$Q(\lambda) = Q_1(\lambda_1) + a_2 Q_2(\lambda_2) + a_3 Q_3(\lambda_3). \quad (12)$$

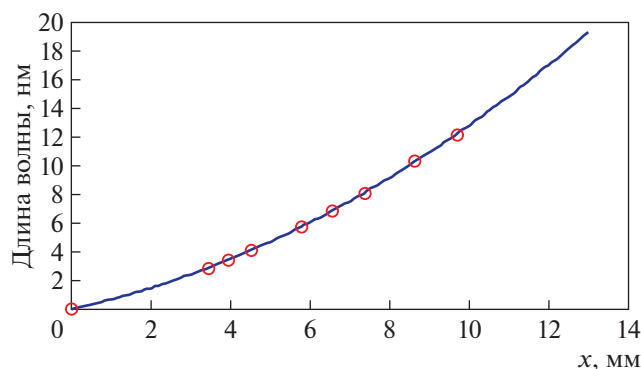


Рис. 19. Дисперсионная кривая для эксперимента № 6438 для порядка дифракции m . Кружками изображены спектральные линии из табл. 3.

Учитывая, что согласно (9)–(11) $\lambda\lambda_2 = \lambda\lambda/2$ и $\lambda\lambda_3 = \lambda\lambda/3$ получаем искомое функциональное уравнение

$$Q(\lambda) = Q_1(\lambda_1) + a_2 Q_1(\lambda/2) + a_3 Q_1(\lambda/3). \quad (13)$$

Таким образом, из полученного выше функционального уравнения надо найти $Q_1(\lambda)$ и далее воспользоваться уравнением (11) для нахождения $I_1(\lambda)$. Эта задача является некорректной. Для решения некорректных задач надо, как правило, воспользоваться некоторой априорной информацией. Часто это бывает требование непрерывности функции и некоторых ее производных. В нашем случае это требование непрерывности и положительности решения и обращения спектра в ноль при нулевых длинах волн. Отражение излучения в 0-м порядке приводит к наложению его на зарегистрированную спектрограмму. Мы убираем часть спектрограммы вблизи нулевого порядка на абсциссе около 3 мм и линейным образом обращаем значения спектрограммы на убранном участке в ноль, с сохранением непрерывности. Результат такой операции виден на рис. 21 и 22. На рис. 22 вблизи нуля видно линейное обращение спектра в ноль. На рис. 21 за счет нелинейности дисперсионного соотношения обращение спектра в ноль нелинейное.

Алгоритм нахождения из уравнения (13) зависимости $Q_1(\lambda)$ следующий. Полученное уравнение решаем методом итераций. Считаем, что в

Таблица 3. Длины волн [H]- и [He]-подобных ионов углерода в 1-м, 2-м и 3-м порядках дифракции

	1-й порядок				2-й порядок				3-й порядок			
	L_β	L_α	He β	He α	L_β	L_α	He β	He α	L_β	L_α	He β	He α
Переход	1s–3p	1s–2p	1s ² –1s3p	1s ² –1s2p	1s–3p	1s–2p	1s ² –1s3p	1s ² –1s2p	1s–3p	1s–2p	1s ² –1s3p	1s ² –1s2p
Длина волны $m\lambda$, нм	2.85	3.37	3.5	4.026	5.70	6.74	7.0	8.05	8.55	10.11	10.50	12.08
Абсцисса на рисунке 18, мм	3.47	3.96	3.96	4.50	5.81	6.58	6.58	7.42		8.70	8.70	10.4

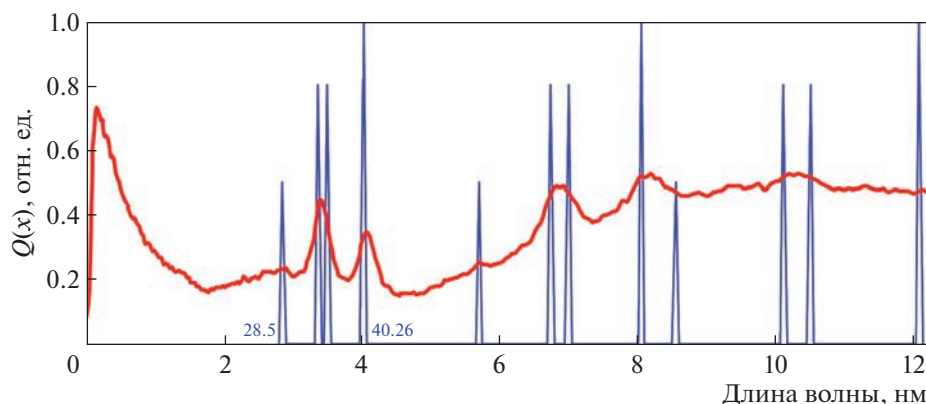


Рис. 20. Зарегистрированная калибровочная спектрограмма Q в шкале длин волн и спектральные линии из табл. 3.

нулевом приближении вклад первого порядка дифракции $Q_1(\lambda)$ в экспериментально полученный сигнал Q равен самому $Q(\lambda)$:

$$Q_1^{(0)}(\lambda) = Q(x(\lambda)).$$

Для следующих итераций. Первая:

$$Q_1^{(1)}(\lambda) = Q(x(\lambda)) - a_2 Q_1^{(0)}(\lambda/2) - a_3 Q_1^{(0)}(\lambda/3),$$

вторая:

$$Q_1^{(2)}(\lambda) = Q(x(\lambda)) - a_2 Q_1^{(1)}(\lambda/2) - a_3 Q_1^{(1)}(\lambda/3),$$

третья:

$$Q_1^{(3)}(\lambda) = Q(x(\lambda)) - a_2 Q_1^{(2)}(\lambda/2) - a_3 Q_1^{(2)}(\lambda/3)$$

и т. д.

Итерации будут сходиться, если второе и третье слагаемое в правой части уравнения (13) после N итераций будут малы по сравнению с первым. Тогда значение спектральной плотности излучения $I(\lambda)$ первого порядка находится из выражения:

$$I(\lambda) = Q^{(N)}(\lambda) \left[\frac{d\lambda}{dx} k(\lambda) \right]^{-1}. \quad (14)$$

Результат нахождения истинного спектра первого порядка для калибровочного эксперимента № 6438 представлен на рис. 23. Сравнивая этот рисунок с рис. 20 (или 22) можно убедиться, что полностью пропали пики, связанные со вторым и третьим порядками дифракции.

По полученному после восстановления спектру была рассчитана спектрограмма. Сопоставление экспериментально зарегистрированной спектрограммы и спектрограммы, полученной после восстановления спектра, представлено на рис. 21. Как видно, обе спектрограммы совпадают друг с другом. На интервале 0–3 мм виден результат линейной интерполяции в ноль вместо нулевого максимума. Кривые расходятся после 17.5 мм, при длинах волн более 30 нм, где доля излучения весьма мала.

Следует отметить, что в литературе приводятся примеры нахождения спектров 1-го порядка из зарегистрированной спектрограммы. Так, в работе [28] исследовалась “реконструкция непрерывных спектров мягкого рентгеновского излучения по спектрограммам, зарегистрированным с использованием пропускающей дифракционной решетки”. В этой работе тоже предполагалось, что коэффициенты отражения в разные порядки не зависят от длины волны. Этот алгоритм отличается от разработанного нами по второй методике, но результат с высокой степенью точности совпадает с результатами второй методики восстановления.

С использованием второй методики восстановления спектров выполнено восстановление спектра для эксперимента № 6105 (рис. 22). На рис. 22 приведено сравнение результатов восстановления исходных спектров излучения Z-пинча по первой и второй методикам.

Наблюдается хорошее совпадение результатов, небольшое отличие может быть объяснено тем, что в первой методике учитывается зависимость коэффициента отражения в разные порядки дифракции от длины волны и тем самым восстановление исходного рентгеновского спектра происходит точнее, а во второй методике предполагается постоянство этих коэффициентов отражения. Кроме того, в первой методике при восстановлении применяется аппаратная функция, в которой учитывается функция рассеяния линии ФРЛ, влияние которой объясняется внефокусной позицией плоскости регистрации спектрографа.

Также при восстановлении спектра по цифровой модели спектрографа в эксперименте № 6105 была использована усредненная форма профиля штриха ДР. Однако интерференционная картина для решетки, у которой все штрихи идеально совпадают друг с другом, будет отличаться от интерференционной картины для реальной решетки, у которой все штрихи разные.

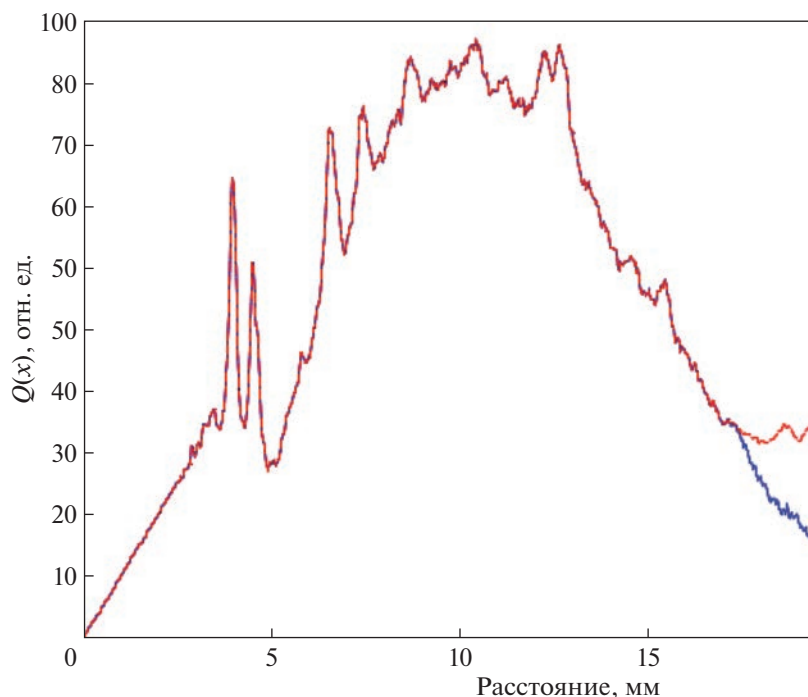


Рис. 21. Наложение экспериментально зарегистрированной спектрограммы и спектрограммы, полученной после восстановления спектра. Эти две кривые слились.

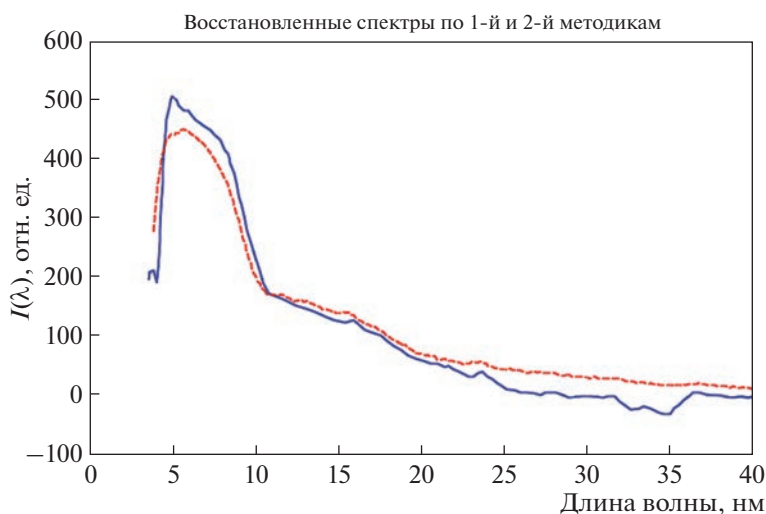


Рис. 22. Сравнение результатов восстановления спектра $I(\lambda)$ в выстреле № 6105 по первой (I – сплошная линия) и второй (2 – штриховая линия) методикам.

Можно выделить следующие преимущества использования первой методики при восстановлении исходных рентгеновских спектров.

– Она позволяет восстанавливать исходные спектры излучения в области длин волн 2–40 нм без экспериментальной калибровки спектрографа по соотношениям интенсивностей излучения в разные порядки дифракции, что приходилось делать при использовании второй методики, так как программная процедура dDif позволяет осу-

ществить численный расчет данных соотношений во всем исследуемом диапазоне длин волн, а не для дискретного набора отдельных спектральных линий.

– Она позволяет учесть функцию рассеяния линии, которая для приборов с худшим спектральным разрешением и при больших геометрических размерах источника может оказывать более существенное влияние на форму восстанов-

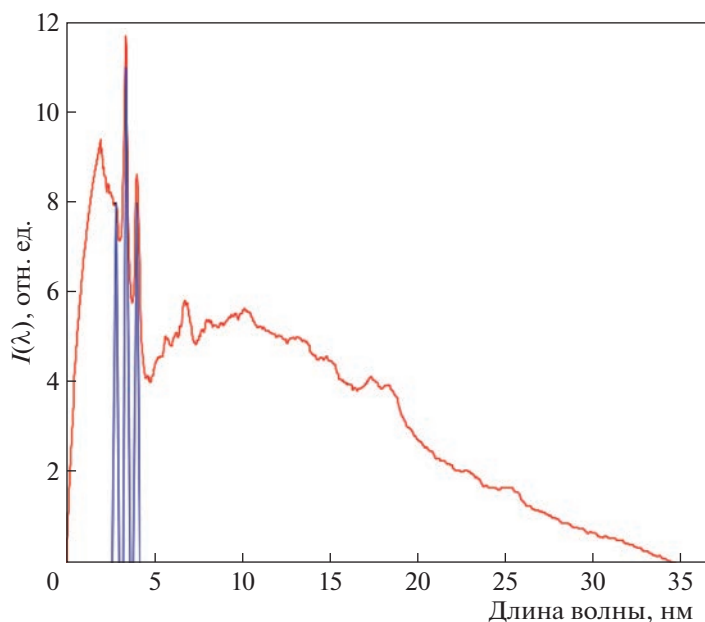


Рис. 23. Восстановленный спектр $I(\lambda)$ из зарегистрированной спектрограммы и спектральные линии 1-го порядка из таблицы 3 (2.85, 3.37 + 3.5, 4.026 нм, линии 3.37 + 3.5 нм слились).

ливаемых рентгеновских спектров, особенно в случае отдельных спектральных линий.

Таким образом, для восстановления спектра в условиях отсутствия данных о форме штриха дифракционной решетки предпочтительно использовать вторую методику восстановления спектров, однако при наличии данных о форме профиля штриха ДР первая методика позволяет получить данные об исходных спектрах излучения плазмы Z-пинча с лучшей точностью.

10. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе приведены две методики восстановления спектра.

Первая методика основывается на разработанной полномасштабной цифровой Монте-Карло модели спектрографа скользящего падения и с учетом конкретной формы штриха решетки позволяет, с учетом геометрии эксперимента и физических процессов взаимодействия рентгеновского излучения с дифракционной решеткой, выполнять построение спектрограмм на плоскости детектора. В разработанной цифровой модели спектрографа, с помощью дифференциального метода, учитывается разложение в ряды дифракции интенсивности излучения при взаимодействии с дифракционной решеткой. При этом учитывается зависимость отражения падающего излучения в ряды дифракции от длины волны с учетом формы профиля штриха, материала и структуры покрытия дифракционной решетки. Выполнена проверка работы модели при сравнении результатов расчета коэффициента отраже-

ния с данными базы CXRO, и результатов расчета интенсивности излучения в порядках дифракции с результатами расчетов выполненных с помощью коммерческой программы PCGrate. Разработана методика восстановления экспериментальных спектров излучения. С использованием разработанной модели выполнен расчет модельных спектров, построение аппаратной функции рентгеновского спектрографа скользящего падения для угла падения рентгеновского излучения на дифракционную решетку 86° . С использованием рассчитанной аппаратной функции спектрометра и итерационной методики первого типа выполнено восстановление спектра излучения плазмы Z-пинча в эксперименте № 6105 на установке Ангара-5-1.

Вторая методика не использует конкретную форму штриха решетки, а на основе анализа калибрационных спектрограмм строит дисперсионную кривую и позволяет восстановить спектр. В данной работе с использованием второй методики при угле падения излучения на дифракционную решетку 88° из данных эксперимента № 6438 на установке Ангара-5-1 получено дисперсионное уравнение и проведено восстановление спектра излучения плазмы Z-пинча. Данная методика восстановления используется в экспериментах на установке Ангара-5-1 с 2019 г. [4, 22–27].

В конце работы приведено сравнение результатов восстановления по первой и второй методикам для эксперимента № 6105, в котором известны данные о форме профиля дифракционной решетки. Показана достаточно высокая степень

совпадения полученных по разным методикам спектров.

Авторы благодарят Александра Петровича Шевелько за плодотворные обсуждения экспериментов со спектрографом.

Данная работа частично поддержана договором № Н.4ч.241.09.21.1074 от 20 апреля 2021 г. между АО “ГНЦ РФ ТРИНИТИ” и ГК “Росатом” по комплексной программе “Развитие техники, технологий и научных исследований в области использования атомной энергии в Российской Федерации на период до 2024 года”, федеральный проект 4 “Разработка новых материалов и технологий для перспективных энергетических систем” и Договором НИОКР № 17706413348210001380/226/3467-Д от 23 июня 2021 г. между АО “ГНЦ РФ ТРИНИТИ” и НИЦ “Курчатовский институт” – ИТЭФ.

Разработка второй методики восстановления спектров излучения плазмы Z-пинча выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-21-00082).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Альбикиков З.А., Велихов Е.П., Веретенников А.И., Глухих В.А., Грабовский Е.В., Грязнов Г.М., Гусев О.А., Жемчужников Г.М., Зайцев В.И., Золотовский О.А., Истомин Ю.А., Козлов О.В., Крашенинников И.С., Курочкин С.С., Латманнизова Г.М., Матвеев В.В., Минеев Г.В., Михайлов В.Н., Недосеев С.Л., Олейник Г.М., Певчев В.П., Перлин А.С., Печерский О.П., Письменный В.Д., Рудаков Л.И., Смирнов В.П., Царфин В.Я., Ямпольский И.Р. // Атомная энергия. 1990. Т. 68. С. 26.
2. Шевелько А.П., Блисс Д.Е., Казаков Е.Д. // Физика плазмы. 2008. Т. 34. С. 1021.
3. Митрофанов К.Н., Грабовский Е.В., Грицук А.Н., Лаухин Я.Н., Александров В.В., Олейник Г.М., Медовицких С.Ф., Шевелько А.П. // Физика плазмы. 2013. Т. 39. С. 71.
4. Gritsuk A.N., Aleksandrov V.V., Grabovskiy E.V., Mitrofanov K.N., Oleinik G.M., Sasorov P.V., Shevelko A.P. // J. Physics: Confer. Ser. 2019. V. 1238. P. 012053.
5. Программа XrayDif для моделирования взаимодействия рентгеновского излучения с дифракционной решеткой” (свидетельство о государственной регистрации № 2021680765).
6. Geant4: User’s Guide: For Application Developers. <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/Users-Guides/ForApplicationDeveloper/fo/BookForApplicationDevelopers.pdf>.
7. Petit R., Cadilhac M., Maystre D., Vincenct P., Nevierre M., McPhedrad R.C., Derrick G.H., Botten L.C. Electromagnetic Theory of Gratings. Berlin–Heidelberg–New York: Springer-Verlag, 1980.
8. Maystre D., Popov E. Gratings, Theory and Numeric Applications Ch. 7: Differential Theory of Periodic Structures, 2014.
9. Nevierre M., Popov E. Light Propagation in Periodic Media: Differential Theory and Design. CRC Press, 2002.
10. X-Ray Optics Database. <http://www.cxro.lbl.gov/>.
11. PCGrate software. <https://www.pcgrate.com/>.
12. Goray L.I. // Proceed. SPIE. February 2004. <https://doi.org/10.1117/12.505679>
13. ACM. <https://www.ntmdt-si.com/products/atomic-force-microscopes/ntegra-ii>.
14. Geant4: Physics Reference Manual. <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>.
15. Geant4: Physics List Guide. <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsListGuide/fo/PhysicsListGuide.pdf>.
16. Geant4: User’s Guide: For Toolkit Developers. <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/Users-Guides/ForToolkitDeveloper/fo/BookForToolkitDevelopers.pdf>.
17. CADMesh. <https://github.com/christopherpoole/CAD-Mesh>.
18. МКП. https://baspik.com/products/nauka/mkp46_12/.
19. Малышев В.И. Введение в экспериментальную спектрометрию. М.: Наука, 1979.
20. MATLAB. <https://www.mathworks.com/products/matlab.html>.
21. Harte C.S., Higashiguchi T., Otsuka T., D’Arcy R., Kilbane D., O’Sullivan G. // J. Phys. B Atomic Molecular and Optical Physics. 2012. V. 45(20). P. 205002.
22. Gritsuk A.N., Aleksandrov V.V., Grabovskiy E.V., Laukhin Y., Mitrofanov K.N., Oleinik G.M., Volkov G.S., Frolov I.N., Shevel’ko A.P. // IEEE Transactions Plasma Sci. 2013. V. 41. P. 3184.
23. Aleksandrov V.V., Branitski A.V., Gasilov V.A., Grabovskiy E.V., Gritsuk A.N., Mitrofanov K.N., Olkhovskaya O.G., Sasorov P.V., Frolov I.N. // Plasma Phys. Control. Fusion. 2019. V. 61. P. 035009.
24. Александров В.В., Браницкий А.В., Болдарев А.С., Гасилов В.А., Грабовский Е.В., Грицук А.Н., Митрофанов К.Н., Ольховская О.Г., Сасоров П.В. // Физика плазмы. 2021. Т. 47. С. 220.
25. Александров В.В., Баско М.М., Браницкий А.В., Грабовский Е.В., Грицук А.Н., Митрофанов К.Н., Олейник Г.М., Сасоров П.В., Фролов И.Н. // Физика плазмы. 2021. Т. 47. С. 613.
26. Митрофанов К.Н., Александров В.В., Браницкий А.В., Грабовский Е.В., Грицук А.Н., Олейник Г.М., Фролов И.Н. // Физика плазмы. 2021. Т. 47. С. 887.
27. Mitrofanov K.N., Aleksandrov V.V., Branitski A.V., Grabovskiy E.V., Gritsuk A.N., Oleinik G.M., Frolov I.N., Samokhin A.A., Olkhovskaya O.G., Gasilov V.A. // Plasma Phys. Control. Fusion 2022. V. 64. P. 045007.
28. Kologrivov A.A., Rupasov A.A., Sklizkov G.V. // Nuclear Inst. Methods Phys. Res. 2019. V. A916. P. 313.