

УДК 539.18:538.97

РАСЧЕТ ОТРАЖАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МОЗАИЧНЫХ КРИСТАЛЛОВ КЛАССА *b* МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

© 2011 г. Д. А. Бакланов, И. Е. Внуков, Ю. В. Жандармов, Ж. Т. Зыонг,
С. А. Лактионова, Р. А. Шатохин

Белгородский государственный университет, Белгород, Россия

Поступила в редакцию 12.07.2010 г.

Мозаичные кристаллы класса *b*, например пиролитический графит, широко используются в экспериментальной физике в качестве нейтронных и рентгеновских монохроматоров и обеспечивают больший выход монохроматического излучения, чем совершенные. Предложена и реализована методика расчета отражающей способности таких кристаллов методом Монте-Карло, позволяющая корректно учесть переотражение фотонов внутри кристалла и геометрию эксперимента для произвольного распределения мозаичности.

ВВЕДЕНИЕ

Дифракция электромагнитного излучения с непрерывным или линейчатым спектром в кристаллах часто используется для получения пучков монохроматического рентгеновского излучения. Интегральная отражающая способность мозаичных кристаллов существенно выше, чем у совершенных. По степени совершенства кристаллы можно классифицировать по двум факторам: размерам правильных блоков или участков в кристалле, и степени их взаимной разориентации [1]. В соответствии с первым фактором все кристаллы можно разделить на два класса – *a* и *b*. В кристаллах класса *a* отдельные участки достаточно велики, чтобы проявилось заметное влияние эффекта первичной экстинкции, т.е. их линейный размер сопоставим с длиной первичной экстинкции l_{ex} . В кристаллах класса *b* размер правильных блоков мал, поэтому эффект первичной экстинкции практически не наблюдается. В соответствии со вторым фактором кристаллы также можно разделить на два класса – α и β . В кристаллах класса α блоки почти параллельны друг другу, их взаимная разориентация мала, поэтому вклад вторичной экстинкции велик. В кристаллах класса β блоки распределены нерегулярно, поэтому вклад вторичной экстинкции мал.

Отражающая способность рентгеновского излучения кристаллами связана с совершенством их структуры. Кристаллы класса *a* обеспечивают узкую кривую качания (FWHM ~20–30 угл. с), а их интегральная отражающая способность невелика. Максимальной интегральной отражающей способностью обладают мозаичные кристаллы класса *b*. Наиболее известным мозаичным кристаллом класса *b*, используемым в прикладной физике, является пиролитический графит. Он применяется для получения квазимонохроматических пучков рентгеновского излучения [2] и нейтронов [3].

Как отмечено в [2], теория дифракции рентгеновского излучения в мозаичных кристаллах [4, 5] не всегда точно описывает результаты измерений даже в кристаллах пиролитического графита, что, в первую очередь, связано с предположением об однородности распределения блоков мозаики по толщине кристалла и гауссовом распределении углов их взаимной разориентации относительно среднего направления. Метод статистического моделирования позволяет не использовать эти приближения и более корректно учитывать все экспериментальные факторы: размеры и геометрию кристаллов, реальное распределение мозаичности образцов, наличие многократных отражений внутри кристалла и связанное с ним изменение поглощения и ряд других.

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Используемый нами подход также основан на теории дифракции рентгеновского излучения в мозаичных кристаллах [1, 4, 7] и уже частично применялся в работе [6]. Методика расчета отражающей способности мозаичных кристаллов класса *b* [4, 7] получена для одномерного распределения мозаичности и мононаправленного пучка внешнего излучения с фиксированной энергией. В общем случае на кристалл падает или рождается в нем расходящийся фотонный пучок с непрерывным спектром. Для отражения мононаправленного и моноэнергетического фотонного пучка от элемента мозаичного кристалла объемом ΔV можно записать [1]:

$$\int P(\theta) d\theta = Q\Delta V, \quad (1)$$

где $P(\theta)$ – отражающая способность кристаллического элемента под углом θ , пропорциональная распределению блоков мозаичности в кристалле [7]; $Q\Delta V$ – интегральное отражение от элемента ΔV . Q – интегральная отражающая способность – зави-

сит от параметров кристалла и энергии излучения следующим образом:

$$Q = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{N^2 \lambda^3}{\sin(2\Theta)} |F_p| |F(\mathbf{g})|^2. \quad (2)$$

Здесь N – концентрация рассеивающих центров, λ – длина волны излучения, Θ – угол разворота плоскости кристалла относительно направления фотонного пучка. $|F(\mathbf{g})|^2 = |S(\mathbf{g})|^2 \exp(-2W)$, где $|S(\mathbf{g})|^2$ – структурный фактор, $\exp(-2W)$ – фактор Дебая–Уоллера, $F(\mathbf{g})$ – фурье-компонента пространственного распределения электронов в атоме кристалла, $(f(0) = z$, где z – число электронов в атоме). $|F_p|$ – поляризационный множитель, зависящий от поляризации падающего на кристалл излучения. Если вектор поляризации перпендикулярен плоскости дифракции, то $|F_p| = 1$, в противоположном случае $|F_p| = \cos^2 2\Theta$. Для неполяризованного пучка $|F_p| = (1 + \cos^2 2\Theta)/2$.

Для анализа процесса отражения используется подход с введением нескольких систем координат, связанных с направлением первичного фотонного пучка (лабораторная система) и направлением плоскости кристалла (система кристалла), предложенный в [8]. Пусть в мозаичном кристалле с распределением векторов обратной решетки $P(\mathbf{g})$ распространяется поток фотонов со спектрально-угловым распределением $N_\gamma(\omega, \mathbf{n})$, где ω и \mathbf{n} – энергия и единичный вектор, направленный вдоль импульса фотона. Здесь $g = |\mathbf{g}| \alpha$, α – единичный вектор, описывающий отклонение микроблоков кристалла от среднего направления $\mathbf{g}_0 = \langle \mathbf{g} \rangle$. Вектор \mathbf{g}_0 перпендикулярен плоскости кристалла и развернут относительно оси z на угол $\pi/2 - \Theta_B$. Плоскость дифракции определяется векторами \mathbf{n} и \mathbf{g} .

Исходя из закона Брэгга для фотона с энергией ω и направлением \mathbf{n} можно записать требование к направлению вектора \mathbf{g} микроблока, на котором этот фотон может дифрагировать,

$$\omega = \frac{\mathbf{n}\mathbf{g}}{\sqrt{\varepsilon_0(1 - \mathbf{n}'\mathbf{n})}} = \frac{|\mathbf{g}| \sin \Theta}{\sqrt{\varepsilon_0(1 - \cos 2\Theta)}}, \quad (3)$$

где \mathbf{n}' – вектор, описывающий направление движения дифрагированного фотона, а ε_0 – диэлектрическая проницаемость среды. Здесь и далее используется система единиц $\hbar = m_e = c = 1$. Отсюда угол между направлениями векторов \mathbf{n} и \mathbf{g} должен удовлетворять условию:

$$\sin \Theta = \frac{|\mathbf{g}|}{2\omega\sqrt{\varepsilon_0}}. \quad (4)$$

В мозаичном кристалле этому условию соответствует целый набор блоков мозаики, удовлетворяющих уравнению

$$\sin \Theta = \frac{(\mathbf{g}\mathbf{n})}{|\mathbf{g}|} = \frac{[n_x g_x + n_y g_y + n_z g_z]}{|\mathbf{g}|}. \quad (5)$$

Из этого уравнения можно определить блоки мозаики, на которых этот фотон может дифрагировать, и определить направление движения отраженного фотона \mathbf{n}' . Тогда плотность вероятности отражения фотона с фиксированными ω и \mathbf{n} в мозаичном кристалле толщиной Δt можно записать в виде:

$$f(\omega, \mathbf{n}) = q(\omega, \mathbf{n})Q(\omega)\Delta t, \quad (6)$$

где $q(\omega, \mathbf{n})$ – коэффициент, учитывающий мозаичность кристалла.

$$q(\omega, \mathbf{n}) = \int P_m(\alpha_x(\omega, \mathbf{n}, \alpha_y), \alpha_y) d\alpha_y. \quad (7)$$

Здесь $P_m(\alpha_x, \alpha_y)$ – распределение мозаичности кристалла, выражаемое через $\omega, \mathbf{n}, \alpha_y$ в соответствии с ((3)–(5)).

В соответствии с подходом, развитым в [7], выход дифрагированных фотонов в апертуру коллиматора для каждого порядка отражения i определяется сверткой спектрально-углового распределения интенсивности излучения с плотностью вероятности отражения по всем переменным, включая энергию и углы вылета фотонов и толщину кристалла. Вторичная дифракция отраженных фотонов в направлении первичного пучка на пути от области дифракции до вылета из кристалла рассчитывается аналогичным образом. Поглощение фотонов определяется длиной пути, проходимого в кристалле, и их энергией. Эта методика позволяет учесть спектрально-угловое распределение излучения и реальное распределение мозаичности образца. Главным недостатком является трудность учета реальной геометрии измерений (поворот кристалла, возможное отличие распределения мозаичности образца от гауссового и тому подобное) и неконтролируемое изменение длины пути фотона в кристалле из-за многократных отражений.

Учитывая (6), (7), изменение числа фотонов вследствие процесса дифракции в кристалле после прохождения слоя толщиной Δt можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \Delta N_\gamma(\omega, \mathbf{n}) &= -N_\gamma q(\omega, \mathbf{n})Q(\omega)\Delta t = \\ &= -N_\gamma \mu_{\text{dif}}(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{g})\Delta t, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\mu_{\text{dif}}(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{g})$ – линейный коэффициент поглощения излучения с энергией ω и направлением движения \mathbf{n} из-за процесса дифракции в мозаичном кристалле.

С учетом (8) зависимость числа фотонов от толщины пройденного слоя кристалла t может быть записана в традиционной форме:

$$N_\gamma(\omega, \mathbf{n}, t) = N_0(\omega, \mathbf{n}) \exp(-\mu_{\text{tot}} t), \quad (9)$$

где $N_0(\omega, \mathbf{n})$ – спектрально-угловое распределение падающего на кристалл излучения, а $\mu_{\text{tot}} = \mu_{\text{dif}}(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{g}) + \mu_{\text{ph}}(\omega) + \mu_{\text{inc}}(\omega) + \mu_{\text{coh}}(\omega) + \mu_{\text{pair}}(\omega)$ – полный линейный коэффициент поглощения первичного излучения, обусловленный процессами фотопоглощения $\mu_{\text{ph}}(\omega)$, некогерентного (комптоновского) рассеяния $\mu_{\text{inc}}(\omega)$, когерентного рассеяния $\mu_{\text{coh}}(\omega)$ и процесса рождения электрон-позитронных пар $\mu_{\text{pair}}(\omega)$. Возможность такой формы записи позволяет использовать для описания процесса прохождения фотонов через мозаичный кристалл хорошо известный метод статистического моделирования (метод Монте-Карло) [9].

Приведем основные шаги и приближения, использованные в процессе моделирования, на примере решения задачи определения энергетического разрешения и эффективности кристалл-дифракционных спектрометров на основе мозаичных кристаллов пиролитического графита, использованных в эксперименте [10]. На кристалл, установленный в гониометре и развернутый на угол $\Theta_B = \Theta_D/2$, падает пучок тормозного излучения из разориентированной вольфрамовой мишени. Здесь Θ_D – угол, под которым расположен детектор, регистрирующий дифрагированное излучение. Методика расчета спектрально-углового распределения тормозного излучения, характеристики использованных кристаллов и схема расположения экспериментальной аппаратуры близки к приведенным в [7].

Для фотона с энергией ω и волновым вектором $\mathbf{k} = \omega \mathbf{n} \sqrt{\epsilon_0}$ определялась точка попадания на кристалл. С учетом измеренного распределения мозаичности кристалла разыгрывался угол разориентации микроблока относительно оси y в системе кристалла – α_y . Исходя из значений ω , \mathbf{k} , Θ_B в соответствии с (4), (5) определялся угол разориентации микроблока, на котором может дифрагировать фотон с такими ω и \mathbf{k} , относительно оси x – α_x . Далее из измеренного распределения мозаичности относительно оси x определялась вероятность существования такого блока в кристалле $w(\alpha_x)$ и линейный коэффициент поглощения первичных фотонов, обусловленного процессом дифракции $-\mu_{\text{dif}} = wQ$. Для гауссова распределения микроблоков искомая вероятность равна:

$$w = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-\alpha_x^2/2\sigma^2), \quad (10)$$

где σ – характерный угол мозаичности используемого кристалла.

Затем, в соответствии с традиционным подходом моделирования прохождения фотонов через вещество [9], разыгрывался пробег фотонов до точки взаимодействия $l = \ln \xi / \mu_{\text{tot}}$, где ξ – случайное число от нуля до единицы, определялись координаты

точки взаимодействия и разыгрывался тип процесса: дифракция, фотопоглощение, комптоновское (некогерентное) рассеяние или когерентное рассеяние. Для моделирования использовались значения сечений взаимодействия фотонов низкой энергии, приведенные в [11]. Для учета влияния кристаллической структуры в сечение когерентного рассеяния вводился поправочный коэффициент $1 - \exp(2W)$. Если точка взаимодействия не принадлежала кристаллу, проверялось попадание фотона в детектор и розыгрыш начинался снова.

Дальнейший процесс моделирования определялся типом произошедшего взаимодействия. Если произошел процесс фотопоглощения, моделирование начиналось заново, а если фотон рассеялся, то с помощью известных способов моделирования процессов взаимодействия фотонов с веществом [9] определялись энергия рассеянного фотона ω' и направление его движения \mathbf{n}' . Далее снова разыгрывался угол разориентации микроблока α_y , определялся угол α_x , разыгрывалась длина свободного пробега и тип взаимодействия. Если происходил процесс дифракции, то в соответствии с законом сохранения импульса можно записать:

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{g}. \quad (11)$$

Здесь \mathbf{k}' – волновой вектор дифрагированного фотона, \mathbf{g} – вектор обратной решетки микроблока кристалла, на котором произошел процесс дифракции. Все три вектора определены в лабораторной системе координат. Поэтому из системы координат кристалла, где вектор \mathbf{g} описывается углами разориентации микроблока α_x и α_y , необходимо перейти в лабораторную систему по методике, приведенной в [8]. Затем, исходя из ω и векторов \mathbf{g} , \mathbf{n} определялось направление движения дифрагированного фотона:

$$\mathbf{n}' = \mathbf{n} - \frac{\mathbf{g}}{\omega \sqrt{\epsilon_0}}. \quad (12)$$

Для фотона с энергией ω и направлением движения \mathbf{n}' снова разыгрывался угол разориентации микроблока α_y , определялся угол α_x , и весь процесс розыгрыша длины свободного пробега, определения координаты точки взаимодействия, проверки условия вылета из кристалла и процесса взаимодействия повторялся. Основное отличие второго и всех последующих четных отражений состоит в том, что фотон отражается с противоположной стороны плоскости. Поэтому для таких отражений система кристалла разворачивалась вокруг оси y на 180° . История каждого фотона прослеживалась вплоть до его поглощения в кристалле или вылета из него с проверкой попадания в детектор.

Предлагаемая методика не имеет ограничений на толщину и геометрию используемого кристалла, который может состоять из нескольких образцов, угловое распределение блоков мозаики и тому подобное. Главные условия применимости методики:

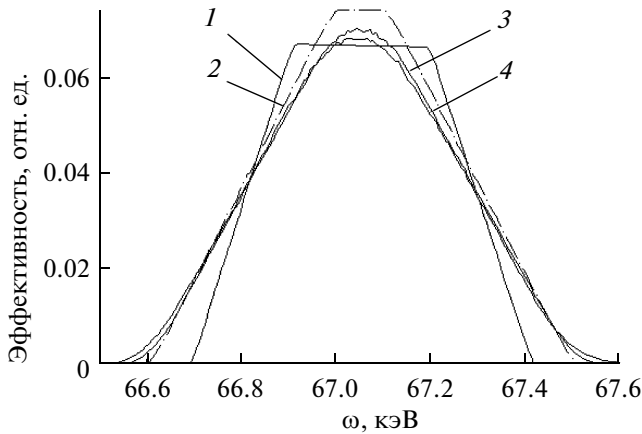


Рис. 1. Расчетная эффективность спектрометра для $\Theta_D = 3.16^\circ$ и $\omega \sim 67$ кэВ.

наличие кристалла типа *b* и достоверной информации о двумерном угловом распределении блоков мозаичности в нем. В частности, ее можно использовать для расчета выхода излучения, испускаемого под большими углами к направлению первичного пучка при прохождении быстрых электронов и фотонов через текстурированные поликристаллы [12].

Процесс дифракции низкоэнергетичных нейтронов в кристаллах описывается по аналогии с процессом дифракции рентгеновского излучения в мозаичных и совершенных кристаллах [13]. В соответствии с цитируемой работой интегральное отражение нейтронов от малого элемента объема ΔV равно $Q_n \Delta V$, где величину Q_n можно записать следующим образом:

$$Q_n = \frac{\sigma_{\text{Bragg}}}{4\pi} \frac{N^2 \lambda_n^3}{\sin(2\Theta)} |S(\mathbf{g})|^2 \exp(-2W). \quad (13)$$

Здесь λ_n — длина волны де-Бройля; σ_{Bragg} — сечение упругого рассеяния нейтронов в кристалле. Остальные обозначения совпадают с приведенными выше. Наличие такой аналогии позволяет использовать развитую методику и для расчета отражающей способности мозаичных кристаллов класса *b* для нейтронных пучков, более точно учесть поглощение нейтронов в кристалле и увеличить энергетический диапазон, в котором можно рассчитать отражающую способность, избавиться от поправочного коэффициента ≈ 0.8 , используемого в большинстве работ для учета вклада поглощения и “остаточного” упругого рассеяния [3].

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Как отмечено выше, разработка предлагаемой методики расчета отражающей способности рентгеновского излучения мозаичными кристаллами класса *b* была инициирована необходимостью обработки данных по поиску и исследования характери-

стик параметрического рентгеновского излучения под малыми углами к направлению движения быстрых электронов в кристалле вольфрама, полученных в эксперименте [10]. Из-за узкого спектрального диапазона проявления эффекта самым важным является энергетическое разрешение использованных в эксперименте кристалл-дифракционных спектрометров. Результаты расчета абсолютных значений выхода излучения с использованием представленной методики расчета характеристик кристалл-дифракционных спектрометров для условий эксперимента [10] совпадают с результатами измерений с погрешностью не хуже 5% [14].

Для выделения излучения с фиксированной энергией в цитируемой работе использовались два кристалл-дифракционных спектрометра на основе мозаичных кристаллов пиролитического графита с размерами $2.5 \times 6.5 \times 22.5$ мм и $3.5 \times 5.5 \times 20$ мм, установленных в гониометрах на расстоянии 13–15 м от кристалла вольфрама, где генерировалось исследуемое излучение, и NaI(Tl)-детекторов с размерами 40×1 мм, расположенных на расстоянии 3–5 м от кристаллов графита. Распределение мозаичности использованных кристаллов графита определялось в процессе измерения дифракционной кривой и выхода на пик дифракции для каждого из углов расположения детектора в эксперименте [7]. В более тонком кристалле ($2.5 \times 6.5 \times 22.5$ мм) оно может быть представлено в виде суммы двух гауссовых распределений с параметрами $\sigma_m^1 = 4.2 \pm 0.1$, $S_1 \approx 0.67 \pm 0.01$ и $\sigma_m^2 = 9.0 \pm 0.5$ мрад, $S_2 \approx 0.33 \pm 0.05$, где σ и S , соответственно, — стандартное отклонение и весовой коэффициент.

На рис. 1 приведены результаты расчета эффективности спектрометра для энергии фотонов первого порядка отражения $\omega \approx 67$ кэВ и следующих условий: угол коллимации отраженного излучения в плоскости дифракции $\Delta\Theta_x = 0.42$ мрад, угловой захват в плоскости дифракции $\Delta\theta_x = \pm 0.092$ мрад, аксептанс $\Delta\theta_x \Delta\theta_y = 1.84 \times 10^{-7}$ ср. Использовался кристалл с размерами $2.5 \times 6.5 \times 22$ мм. Первичный спектр генерировался электронами с энергией 500 МэВ в аморфной мишени толщиной 0.5 мм.

Зависимости 1, 2 рассчитаны по методике [7] для точечного электронного пучка. Кривая 1 получена исходя только из угловых размеров пучка первичного излучения и углового захвата детектора дифрагированного излучения, т.е. без учета координаты попадания фотона на кристалл-анализатор. Для фотона, летящего не вдоль оси экспериментальной установки, детектор расположен под углом, отличным от $\Theta_D = 2\Theta_B$, что приводит к изменению спектральной зависимости эффективности отражения (кривая 2). Результаты моделирования с учетом всех известных экспериментальных факторов (кривые 3, 4) несколько отличаются от полученных по методике [7]. Учет поворота кристалла, точки вылета дифраги-

рованного фотона из него и многократных отражений приводит к некоторому ухудшению разрешения и уменьшению эффективности отражения. Однако ширина (FWHM) практически не изменяется. Расчет зависимости 3 выполнен для точечного пучка, как и зависимости 1, 2. Учет пространственного распределения пучка электронов, падающих на внутреннюю мишень синхротрона [15] (кривая 4), показал, что этот фактор слабо влияет на характеристики спектрометра.

Как видно из рисунка, различие зависимостей, полученных с помощью разных подходов, не очень велико. С уменьшением энергии фотонов отражающая способность резко увеличивается, что приводит к увеличению доли многократных отражений. Например, если для энергии фотонов $\omega = 67$ кэВ доля квантов, испытавших в кристалле однократное, двукратное и трехкратное отражение, равна 0.075, 0.004 и 6×10^{-5} , то для $\omega = 28.3$ кэВ эти величины возросли до 0.29, 0.08 и 0.007. Максимальное число отражений изменилось с пяти до шести. Рост вероятности многократных отражений увеличил разницу между распределениями, полученными в рамках разных подходов. Для $\omega = 28.3$ кэВ ширина распределения, полученная с помощью моделирования, на 20% больше, чем при использовании методики [7].

Этот эффект влияет на результаты измерений характеристик мозаичных кристаллов и, в ряде случаев, может привести к неконтролируемым ошибкам. На рис. 2 приведены расчетные ориентационные зависимости выхода дифрагированного излучения, полученные при вращении кристалла графита для фиксированного угла расположения детектора $\Theta_D = 7.49^\circ$ ($\omega = 28.3$ кэВ). Условия совпадают с условиями эксперимента [10] для этой энергии фотонов, за исключением мозаичности кристалла — $\sigma_m = 3$ мрад, вместо суммы двух гауссовых распределений с разными σ_m .

Кривая 1 с $\sigma = 3.38$ мрад и $\Delta\Theta = 9.37$ мрад — результат точного моделирования для условий [10] и выбранного значения σ_m . Здесь σ — стандартное отклонение, а $\Delta\Theta$ — ширина на полувысоте. Зависимость 2 с $\sigma = 3.15$ мрад и $\Delta\Theta = 8.65$ мрад получена при “программном” отключении второго и последующих отражений. Различие между σ и σ_m обусловлено, по-видимому, конечностью угловых размеров пучка излучения, падающего на кристалл, и угла коллимации излучения. Из рисунка видно, что наличие многократных отражений существенно искажает наблюдаемую зависимость по сравнению с модельной и с рассчитанной без учета последующих отражений. Она не похожа на гауссиан, а ее ширина приблизительно на 10% больше. Следовательно, в случае применения кристаллов с большой отражающей способностью примерно такая же ошибка может наблюдаться и в процессе измерений распре-

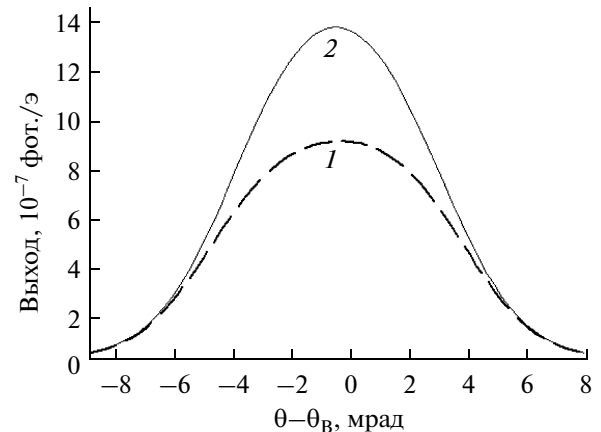


Рис. 2. Ориентационная зависимость выхода излучения для $\Theta_D = 7.49^\circ$ и $\omega \sim 28.3$ кэВ.

деления мозаичности и ее параметров. Этот эффект важен при использовании мозаичных кристаллов для дифракции нейтронов, где в формулу для отражающей способности входит ширина распределения мозаичности [3]. Примерно такое же влияние отражающей способности на результаты измерений мозаичности должно наблюдаться для мозаичных кристаллов класса $a\alpha$.

ВЫВОДЫ

Результаты проведенных исследований можно сформулировать следующим образом.

Предложена и реализована методика расчета отражающей способности мозаичных кристаллов класса b методом Монте-Карло, позволяющая корректно учесть переотражение фотонов внутри кристалла и геометрию эксперимента для произвольного распределения мозаичности.

С небольшими изменениями она может быть использована и для расчета отражения нейтронов такими кристаллами, что может позволить увеличить энергетический диапазон, в котором можно рассчитать отражающую способность, и избавиться от поправочных коэффициентов.

При исследовании характеристик кристаллов с большой отражающей способностью для выбранного диапазона энергий фотонов многократные отражения могут существенно исказить измеряемые зависимости и привести к ошибкам измеряемых параметров.

Авторы выражают благодарность коллегам [7, 10] за участие в разработке и реализации методик, использованных в процессе исследований, и проведении измерений. Работа выполнена при частичной поддержке ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России”, ГК 16.740.11.0147 от 02.09.2010 и программы внутренних грантов БелГУ (грант № ВКГ 002.10).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: Изд-во Иностран. лит., 1950. 572 с.
2. Gambassini M., Tufanelli A., Taibi A. et al. // *Med. Phys.* 2001. V. 28. № 4. P. 412.
3. Riste T. // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* 1970. V. 86. P. 1.
4. Zachariasen W.H. // *Acta Crystallogr.* 1967. V. 23. P. 558.
5. Zachariasen W.H. *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals*. New York: Dover, 1994. 500 с.
6. Chabot M., Nicolai P., Wohrer K. et al. // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B.* 1991. V. 61. P. 377.
7. Внуков И.Е., Калинин Б.Н., Науменко Г.А. и др. // *Изв. вузов. Физика*. 2001. № 3. С. 53.
8. Potylitsin A. // *arXiv:cond-mat/9802279 v1 26 Feb 1998*
9. Аккерман А.Ф., Грудский М.Я., Смирнов В.В. Вторичное электронное излучение из твердых тел под действием гамма-квантов. М.: Энергоатомиздат, 1986. 186 с.
10. Алейник А.Н., Балдин А.Н., Богомазова Е.А. и др. // *Письма в ЖЭТФ*. 2004. Т. 80. Вып. 6. С. 447.
11. McMaster W.H., Kerr Del Grande N., Mallet J.H., Hubbell J.H. // *Lawrence Radiation Laboratory, University of California, Livermore UCRL-50174 Sec. II Rev. 1*. 350 p.
12. Takabayshi Y., Endo I., Ueda K. et al. // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B.* 2006. V. 243. P. 453.
13. Bacon B.G., Lowde R.D. // *Acta Crystallogr.* 1948. V. 1. P. 303.
14. Бакланов Д.А., Внуков И.Е., Жандармов Ю.В. и др. // Тез. докл. XI Межд. конф. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М: Университетская книга, 2010. С. 86.
15. Бакланов Д.А., Внуков И.Е., Жандармов Ю.В., Шатохин Р.А. // *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед.* 2010. № 4. С. 31.

Calculation of X-Ray Reflectivity of *b* Class Mosaic Crystals By Monte Carlo Technique

D. A. Baklanov, I. E. Vnukov, Yu. V. Zhandarmov, T. G. Duong, S. A. Laktionova, R. A. Shatokhin

Mosaic crystals of *b* class, for example, pyrolytic graphite, are widely used in experimental physics as neutron and X-ray monochromators and provide larger monochromatic radiation yield than perfect ones. A new technique for X-ray reflectivity calculation of these crystals by Monte Carlo method is suggested and realized. The technique allows to take into account photon rereflection in a crystal and experimental geometry for arbitrary distribution of mosaic blocs.