КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2011, том 56, № 5, с. 876–885

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.732

ВЛИЯНИЕ ДИФРАКЦИИ В КРИСТАЛЛАХ НА КОГЕРЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ИМПУЛЬСОВ РЕНТГЕНОВСКОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

© 2011 г. В. А. Бушуев, Л. Самойлова*

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Россия
E-mail: vabushuev@yandex.ru
**Европейский лазер на свободных электронах, Гамбург, Германия*

Поступила в редакцию 09.03.2011 г.

На основе развитого в статистической оптике формализма анализируется пространственно-временная эволюция поля случайных рентгеновских фемтосекундных ипульсов и их когерентных свойств при распространении импульсов в свободном пространстве и при динамической дифракции в совершенных кристаллах в геометриях Брэгга и Лауэ. Особое внимание уделено влиянию больших длин путей импульсов, характерных для протяженных каналов рентгеновских лазеров на свободных электронах.

ВВЕДЕНИЕ

Генерация излучения в рентгеновском лазере на свободных электронах (**РЛСЭ**) основана на явлении самоиндуцированного усиления спонтанного излучения (**SASE**) сгустков высокоэнергичных электронов при их прохождении через достаточно протяженную систему ондулляторов [1]. В последние годы ведется активная работа по строительству Европейского РЛСЭ с излучением в жестком рентгеновском диапазоне ($\lambda \sim 0.1$–1.6 нм) [2]. Согласно расчетам и результатам, приведенным в [2–6], ожидаются следующие параметры Европейского РЛСЭ и его излучения в канале SASE 1: энергия электронов 17.5 Гэв, общая длина сверхпроводящих ондулляторов ~150 м, центральная длина волны излучения $\lambda_0 = 0.1$ нм, полная длительность импульсов на половине высоты $\tau_p \sim 100$ фс. Эти импульсы имеют крайне нерегулярную многопичковую временную структуру с длительностью отдельных случайных субимпульсов (спайков) $\tau_s \sim 0.1$–0.2 фс, разделенных интервалами времени ~0.3–0.4 фс; поперечный размер импульса на выходе из ондуллятора $r_0 \approx 40$ мкм, угловая расходимость $\Delta\theta_0 \approx 1$ мкрад. Ожидаемая пиковая яркость излучения РЛСЭ будет на 9 порядков превышать яркость современных источников синхротронного излучения 3-го поколения [2].

Эксперименты с временным разрешением, корреляционная спектроскопия рентгеновских фотонов, получение когерентных дифракционных и фазоконтрастных изображений в значительной степени зависят от когерентных свойств рентгеновских импульсов [7, 8]. Излучение РЛСЭ является практически полностью пространственно когерентным и характеризуется весьма посредственной временной когерентностью. В режиме насыщения длина пространственной (поперечной) когерентности $\rho_0 \sim r_0$, тогда как время когерентности (продольная когерентность) $\tau_c \approx 0.2$ фс $\ll \tau_p$, что приводит к относительной спектральной ширине импульса $\Delta E/E \approx 0.1\%$ [4, 6].

Дифракционное отражение рентгеновского излучения от кристаллов и многослойных периодических структур широко используется для монохроматизации и коллимации излучения. В [9, 10] показано, что при дифракционном отражении от монокристаллов детерминированных фемтосекундных импульсов отраженные импульсы уширяются во времени на 1–2 порядка, их форма существенно отличается от временной зависимости падающего импульса, а пиковая интенсивность составляет единицы и доли процента от падающего импульса. Кроме того, во всех случаях, за исключением симметричного отражения в геометрии Брэгга, происходит достаточно нетривиальное изменение ориентации отраженного импульса, а сам импульс начинает диффузным образом расплываться в пространстве и времени на расстояниях порядка 0.1–1 м от кристалла [10]. Это обусловлено тем, что спектральная ширина таких коротких падающих импульсов намного превышает спектральную ширину области дифракционного отражения. В [11] развита статистическая теория брэгговского отражения случайных фемтосекундных ипульсов РЛСЭ от многослойных периодических структур.

В настоящей работе теоретически рассмотрена пространственно-временная трансформация поля рентгеновского импульса и его статистических

свойств при распространении импульса в свободном пространстве и при дифракционном отражении в геометриях Брэгга и Лауэ от одного и от двух параллельно расположенных кристаллов. Особое внимание уделено зависимости пространственно-временных и статистических характеристик импульса от длины пути, так как расстояния от РЛСЭ до первых оптических элементов, а затем и до измерительных станций достаточно велики (порядка 400–500 м) [2, 4]. Показано, что дифракционное отражение приводит к значительному увеличению времени когерентности отраженного импульса, а форма функции временной когерентности отраженного импульса сильно отличается от гауссовой формы для падающего излучения и имеет характерный "треугольный" вид с затухающими осцилляциями на краях.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ИМПУЛЬСА В СВОБОДНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Рассмотрим распространение случайного рентгеновского импульса в свободном пространстве от РЛСЭ до произвольной плоскости на расстоянии z [9–12]. Представим поле импульса в плоскости источника $z = 0$ (выходное окно ондуллятора РЛСЭ) в виде

$$E(\mathbf{r},0,t) = A_s(\mathbf{r},t)\exp(-i\omega_0 t), \tag{1}$$

где $\mathbf{r} = (x, y)$ – координата произвольной точки на источнике, ω_0 – средняя частота излучения, $A_s(\mathbf{r}, t)$ – медленно меняющаяся и в общем случае случайная и комплексная амплитуда импульса. Статистические свойства излучения источника импульса (1) описываются корреляционной функцией

$$\Gamma_s(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t') = \left\langle A_s(\mathbf{r},t)A_s^*(\mathbf{r}',t')\right\rangle, \tag{2}$$

где угловые скобки означают усреднение по ансамблю различных реализаций, что при $\tau_s \ll \tau_p$ эквивалентно усреднению за промежутки времени, намного превышающие характерные времена флуктуаций поля [13]. В общем случае импульс (1) является неоднородным в пространстве и нестационарным во времени, т.е. коррелятор (2) не может быть представлен в виде функции лишь разностей аргументов $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$ и $\tau = t' - t$. В связи с этим импульс (1) не подчиняется теореме Винера–Хинчина [13].

Представим поле (1) в виде разложения по плоским волнам с частотами $\omega = \omega_0 + \Omega$ и волновыми векторами $\mathbf{k} = (\mathbf{q}, k_z)$, которые удовлетворяют волновому уравнению, где $k_z = (k^2 - q^2)^{1/2}$, $k = \omega/c$. В итоге в квазиоптическом приближении ($q \ll k$) для поля импульса в плоскости z получим, что

$$E(\mathbf{r},z,t) = A(\mathbf{r},z,t)\exp(ik_0 z - i\omega_0 t), \tag{3}$$

где $k_0 = \omega_0/c = 2\pi/\lambda_0$, $A(\mathbf{r}, z, t)$ – медленно меняющаяся амплитуда:

$$A(\mathbf{r},z,t) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} A_s(\mathbf{q},\Omega)\times \\ \times\exp[i\mathbf{q}\mathbf{r} - iq^2 z/2k - i\Omega(t - z/c)]d\mathbf{q}d\Omega. \tag{4}$$

Здесь $k = (\omega_0 + \Omega)/c$, $A_s(\mathbf{q}, \Omega)$ – спектрально-угловые амплитуды поля в плоскости источника импульса:

$$A_s(\mathbf{q},\Omega) = (1/8\pi^3)\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} A_s(\mathbf{r},t)\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r} + i\Omega t)d\mathbf{r}dt. \tag{5}$$

Импульс (3) также в общем случае неоднороден в пространстве и нестационарен во времени, так как его корреляционная функция

$$\Gamma_{tot}(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho},z;t,\tau) = \left\langle A(\mathbf{r},z,t)A^*(\mathbf{r}+\boldsymbol{\rho},z,t+\tau)\right\rangle \tag{6}$$

зависит еще от $\mathbf{r}$ и t.

Квадратичное по q выражение в (4) в случае узкого спектра импульса ($\Delta\Omega \ll \omega_0$) можно представить в виде суммы двух слагаемых: $q^2 z/2k = q^2 z/2k_0 - q^2 z(\Omega/\omega_0)/2k_0$. Первое слагаемое описывает дифракционное увеличение поперечного размера импульса с увеличением расстояния z. Второе слагаемое, которое зависит от q, Ω и z, описывает влияние частотного спектра на пространственный и наоборот, а также взаимное влияние пространственой и временной когерентности. Этим влиянием можно пренебречь на расстояниях $z \ll z_c$, где $z_c \approx \lambda_0(\omega_0/\Delta\Omega)/\pi\Delta\theta_0^2$, $\Delta\Omega$ и $\Delta\theta_0$ – спектральная ширина и ширина углового спектра импульса. В случае типичных для РЛСЭ немонохроматичности $\Delta\Omega/\omega_0 \sim (1–3)\times 10^{-3}$ и расходимости $\Delta\theta_0 \sim 1–3$ мкрад [2, 6] условие $z \ll z_c$ выполняется во всех практически интересных случаях ($z_c \geq 1000$ м).

Предположим теперь, что амплитуду поля (1) на источнике можно представить в виде произведения пространственной и временной функций: $A_s(\mathbf{r}, t) = B_s(\mathbf{r})A(t)$. Тогда из (4) и (5) следует, что амплитуда импульса в плоскости z также имеет вид произведения двух функций:

$$A(\mathbf{r},z,t) = B(\mathbf{r},z)A(t - z/c), \tag{7}$$

$$B(\mathbf{r},z) = \int_{-\infty}^{\infty} B_s(\mathbf{r}')G(\mathbf{r}-\mathbf{r}',z)d\mathbf{r}', \tag{8}$$

где $G(\boldsymbol{\xi}, z) = (i\lambda_0 z)^{-1}\exp(i\pi\xi^2/\lambda_0 z)$ – пропагатор свободного пространства, $\boldsymbol{\xi} = (x - x', y - y')$.

Представление амплитуды (7) в виде произведения приводит к тому, что корреляционная

функция импульса (6) также имеет вид произведения двух функций:

$$\Gamma_{tot}(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho},z;t,\tau) = \Gamma_{\rho}(\mathbf{r},\boldsymbol{\rho},z)\Gamma(t,\tau), \quad (9)$$

где фунция $\Gamma_{\rho}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\rho}, z) = \langle B(\mathbf{r}, z)B^*(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}, z)\rangle$ описывает пространственную корреляцию в поперечном сечении импульса, а $\Gamma(t, \tau) = \langle A(t)A^*(t + \tau)\rangle$ – корреляцию поля во времени.

Из соотношений (7) и (8) видно, что при распространении импульса в свободном пространстве временная структура импульса $A(t)$ сохраняется, изменяется лишь распределение амплитуды поля $B(\mathbf{r}, z)$ в его поперечном сечении. Рассмотрим, например, гауссовский импульс в плоскости источника $z = 0$ с амплитудой $B_s(\mathbf{r}) = b_s(\mathbf{r})\exp(-r^2/2r_0^2 + i\varphi_0)$, где r_0 – поперечный радиус импульса, $\varphi_0(\mathbf{r}) = \alpha_0 r^2/2r_0^2$ – регулярная фаза, которая описывает начальное параболическое искривление волнового фронта, $b_s(\mathbf{r})$ – случайная амплитуда с гауссовской функцией пространственной когерентности $\langle b_s(\mathbf{r})b_s^*(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho})\rangle = \exp(-\rho^2/\rho_0^2)$, где ρ_0 – длина пространственной когерентности поля излучения источника. Такой импульс остается гауссовским и на других расстояниях z. Интенсивность импульса $I(\mathbf{r}, z) = \Gamma_{\rho}(\mathbf{r}, 0, z)$ в плоскости z определяется соотношением

$$I(\mathbf{r},z) = (1/M^2)\exp\left(-r^2/r_1^2\right), \quad (10)$$

причем его поперечный размер $r_1(z) = r_0M$ и длина пространственной когерентности $\rho_1(z) = \rho_0M$ увеличиваются в M раз [12, 14], где

$$M(z) = [(1 + \alpha_0D)^2 + D^2 + 2DF]^{1/2}, \quad (11)$$

$D = \lambda_0z/2\pi r_0^2$ и $F = \lambda_0z/\pi\rho_0^2$ – волновые параметры, которые описывают дифракционное расплывание импульса с увеличением z, обусловленное размером r_0 и длиной пространственной когерентности ρ_0 источника. Параметр квадратичной фазы регулярной части амплитуды равен $\alpha_1(z) = \alpha_0 + (1 + \alpha_0^2)D + 2F$. Ширина углового спектра импульса $\langle|B(\mathbf{q})|^2\rangle = (1/4\pi^2\Delta q_0^4)\exp(-q^2/\Delta q_0^2)$ не зависит от расстояния z:

$$\Delta q_0 = (1/r_0)\left[1 + \alpha_0^2 + 4(r_0/\rho_0)^2\right]^{1/2}. \quad (12)$$

При типичных для РЛСЭ параметрах ($r_0 \approx 40$ мкм, $\rho_0 \sim r_0$ и $\alpha_0 \leq 1$ [2, 4, 6]) угловая расходимость импульса $\Delta\theta_0 = \Delta q_0/k_0 \sim 1$–$3$ мкрад, что много меньше угловой ширины $\Delta\theta_B \sim 10$–15 мкрад дифракционного отражения от совершенных кристаллов. Поэтому происходит лишь дальнейшее дифракционное увеличение поперечного размера импульса после его отражения: $r_2(z + z_1) = r_1(z)M(z_1)$, где z_1 – расстояние от кристалла до точки наблюдения. Если, например, расстояния $z \approx z_1 \approx 500$ м, то $r_1 \approx 0.5$ мм и $r_2 \approx 1$ мм.

ДИФРАКЦИЯ ФЕМТОСЕКУНДНОГО ИМПУЛЬСА СО СЛУЧАЙНОЙ ВРЕМЕННОЙ СТРУКТУРОЙ

Гораздо более существенным является влияние временной некогерентности и нестационарности короткого рентгеновского импульса на его дифракционное отражение. Представим случайную амплитуду падающего на кристалл импульса $A(t)$ в (7) в виде разложения в интеграл Фурье:

$$A(t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(\Omega)\exp(-i\Omega t)d\Omega, \quad (13)$$

где спектральная амплитуда

$$A(\Omega) = (1/2\pi)\int_{-\infty}^{\infty} A(t)\exp(i\Omega t)dt. \quad (14)$$

Так как амплитуда импульса $A(t)$ случайная, то $A(\Omega)$ (14) также является случайной функцией. Поскольку каждая плоская волна с амплитудой $A(\Omega)$, падающая на кристалл под углом $\theta = \theta_0 + \Delta\theta$ к нормали, отражается от кристалла с амплитудным коэффициентом $R(\Omega)$, то амплитуда отраженного импульса определяется интегралом [9, 10]:

$$A_R(x,z,t) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\Omega)A(\Omega)\exp[-i\varphi(\Omega,t)]d\Omega, \quad (15)$$

где ось z направлена вдоль вектора $\mathbf{k}_h = \mathbf{k} + \mathbf{h}$, $\mathbf{h}$ – вектор обратной решетки, $k = (\omega_0 + \Omega)/c$, время t отсчитывается от момента падения импульса в начало координат на входной поверхности кристалла,

$$\varphi(\Omega,t) = \Omega(t - z/c - a_hx/c) + \Omega^2F_h(z - x\,\mathrm{tg}\,\theta_h), \quad (16)$$

$a_h = (\sin\theta_0 - \sin\theta_h)/\gamma_h$, $\theta_0 = \Psi - \theta_B$ и $\theta_h = \Psi + \theta_B$ – углы падения и отражения по отношению к нормали к поверхности, направленной в глубь кристалла, Ψ – угол наклона отражающей плоскости, угол Брэгга θ_B определяется соотношением $h = 2(\omega_0/c)\sin\theta_B$, $\gamma_h = \cos\theta_h$, $F_h = k_0a_h^2/2\omega_0^2$. Квадратичное по частоте Ω слагаемое в (16) описывает уширение и дальнейший распад отраженного импульса с увеличением расстояния z от кристалла. Указанная трансформация формы и ориентации импульса объясняется тем, что различные спектральные компоненты отраженного импульса распространяются в свободном пространстве под разными углами $\Delta\theta_h(\Omega) = a_h(\Omega/\omega_0)$ по отношению к углу $(\theta_h - b\Delta\theta)$. Входящая в F_h и $\Delta\theta_h$ вели-

чина $a_h = 0$ только в симметричном случае Брэгга (подробнее в [9, 10]). Спектральные коэффициенты дифракционного отражения $R(\Omega)$ в (15) имеют следующий явный вид в геометриях Брэгга и Лауэ соответственно:

$$R(\Omega) = -2ibC\chi_h(\sin\eta/Q), \quad (b < 0) \qquad (17.1)$$

$$R(\Omega) = 2ibC\chi_h(\sin\eta/W)\exp(i\psi), \quad (b > 0), \qquad (17.2)$$

где $b = \gamma_0/\gamma_h$ – коэффициент асимметрии отражения, $\gamma_0 = \cos\theta_0$; $C = 1$ или $C = \cos 2\theta_B$ для σ- или π-поляризации соответственно;

$$Q = W\cos\eta - i\sigma\beta\sin\eta, \quad W = (\beta^2 + 4bC^2\chi_h\chi_{-h})^{1/2},$$

$\beta = \alpha b + \chi_0(b - 1)$, $\alpha = 2\sin 2\theta_B[\Delta\theta + (\Omega/\omega_0)\,\mathrm{tg}\,\theta_B]$, $\Delta\theta$ – угловая отстройка от точного брэгговского условия, $\eta = k_0lW/4\gamma_0$, $\psi = k_0l(\beta + 2\chi_0)/4\gamma_0$, l – толщина кристалла, $\sigma = b/|b|$, χ_0, $\chi_{h,-h}$ – фурье-компоненты поляризуемости кристалла. Вдали от краев поглощения можно пренебречь дисперсией поляризуемости, так как спектральная ширина импульсов $\Delta E \approx 10$ эВ.

Коэффициент отражения $R(\Omega)$ максимален при $\beta = 0$ и, в геометрии Лауэ, при толщинах кристалла $l = \Lambda(2n + 1)$, где $\Lambda = \lambda_0(\gamma_0\gamma_h)^{1/2}/2C|\chi_h|$ – длина экстинкции, $n = 0, 1, 2, \ldots$. Спектральная ширина брэгговского отражения оценивается соотношением $\Delta\Omega_B/\omega_0 \approx C|\chi_h|/|b|^{1/2}\sin^2\theta_B$. В случае Лауэ эффективная ширина кривой отражения с маятниковыми осцилляциями от кристалла с толщиной $l \gg \Lambda$ составляет $\Delta\Omega_B/\omega_0 \approx \lambda_0\gamma_h/2\pi l\sin^2\theta_B$.

Статистические свойства импульса (15), отраженного от кристалла, определяются временной корреляционной функцией

$$\Gamma_R(t,\tau) = \left\langle A_R(t)A_R^*(t+\tau)\right\rangle. \qquad (18)$$

Очевидно, что интенсивность отраженного импульса $I_R(t) = \Gamma_R(t, 0)$. Подставим в (18) соотношение (15) и проведем статистическое усреднение. В итоге получим, что

$$\Gamma_R(t,\tau) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} g(\Omega,\Omega')R(\Omega)R^*(\Omega')\Phi(\Omega,\Omega';t,\tau)d\Omega d\Omega', \qquad (19)$$

где введена спектральная корреляционная функция падающего импульса

$$g(\Omega,\Omega') = \left\langle A(\Omega)A^*(\Omega')\right\rangle, \qquad (20)$$

а Φ является регулярной функцией частоты, времени и координат:

$$\Phi(\Omega,\Omega';t,\tau) = \exp[-i\varphi(\Omega,t) + i\varphi(\Omega',t+\tau)]. \qquad (21)$$

Энергетический (частотный) спектр падающего импульса определяется соотношением $S(\Omega) = \langle|A(\Omega)|^2\rangle$, т.е. $S(\Omega) = g(\Omega, \Omega)$.

Соотношения (19)–(21) в общем виде решают задачу о нахождении интенсивности $I_R(t)$ и нормированной функции временной когерентности отраженного импульса

$$\gamma_R(t,\tau) = |\Gamma_R(t,\tau)|\big/[I_R(t)I_R(t+\tau)]^{1/2}. \qquad (22)$$

На основе анализа данных [4–6] можно предложить следующую простую модель нестационарного импульса РЛСЭ со случайной временной субструктурой: $A(t) = F(t)a(t)$, где $F(t)$ описывает огибающую импульса и является регулярной действительной функцией времени, $a(t)$ – случайный стационарный процесс, для которого среднее значение амплитуды $\langle a(t)\rangle = 0$, средняя интенсивность (дисперсия) $\langle a(t)a^*(t)\rangle = 1$ и функция временной когерентности $\gamma(\tau) = \langle a(t)a^*(t+\tau)\rangle$ не зависят от времени t. Для такого случайного сигнала спектральная корреляционная функция является δ-коррелированной, т.е. $\langle a(\Omega)a^*(\Omega')\rangle = G(\Omega)\delta(\Omega - \Omega')$, где, согласно теореме Винера–Хинчина [13], спектральная плотность (энергетический спектр) этого сигнала

$$G(\Omega) = (1/2\pi)\int_{-\infty}^{\infty}\gamma(\tau)\exp(-i\Omega\tau)d\tau. \qquad (23)$$

Случайный импульс $A(t)$ является нестационарным, так как его интенсивность $I(t) = F^2(t)$ и корреляционная функция $\Gamma(t, \tau) = F(t)F(t+\tau)\gamma(\tau)$ меняются со временем. Следует отметить, что функция временной когерентности такого импульса $\Gamma(t, \tau)/[I(t)I(t+\tau)]^{1/2} = \gamma(\tau)$ совпадает с функцией когерентности случайного стационарного процесса $a(t)$.

Учтем, что в рамках нашей модели спектральная амплитуда импульса $A(\Omega)$ в (20) имеет следующий интегральный вид:

$$A(\Omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\Omega - \Omega')a(\Omega')d\Omega', \qquad (24)$$

где $F(\Omega)$ и $a(\Omega)$ – спектральные амплитуды регулярной огибающей импульса $F(t)$ и случайного сигнала $a(t)$ соответственно, которые определяются соотношениями, аналогичными (14). Наличие δ-образного коррелятора позволяет после подстановки (24) в (20) перейти от двукратного интеграла в (20) к однократному и получить следующее выражение для входящей в (19) спектральной корреляционной функции:

$$g(\Omega,\Omega') = \int_{-\infty}^{\infty} F(\Omega - \Omega_1)F^*(\Omega' - \Omega_1)G(\Omega_1)d\Omega_1. \qquad (25)$$

ГАУССОВСКИЕ ИМПУЛЬСЫ И СПЕКТРЫ

В дальнейшем для определенности будем считать, что огибающая падающего импульса $F(t)$ и функция временной когерентности $\gamma(\tau)$ случайного процесса $a(t)$ имеют вид функций Гаусса:

$$F(t) = \exp\left(-t^2/2\tau_0^2\right), \tag{26.1}$$

$$\gamma(\tau) = \exp\left(-\tau^2/\tau_c^2\right), \tag{26.2}$$

где τ_0 – длительность импульса, τ_c – время когерентности. Величина τ_0 связана с полной шириной τ_p интенсивности импульса $I(t)$ на половине высоты соотношением $\tau_0 = \tau_p/\left(2\sqrt{\ln 2}\right) \approx 0.6\tau_p$. Из (26) легко получить явный вид для спектральной амплитуды огибающей $F(\Omega)$ и спектральной плотности стационарного сигнала $G(\Omega)$, которые входят в (25):

$$F(\Omega) = \frac{\tau_0}{\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\Omega^2\tau_0^2/2\right), \tag{27.1}$$

$$G(\Omega) = \frac{\tau_c}{2\sqrt{\pi}}\exp\left(-\Omega^2\tau_c^2/4\right). \tag{27.2}$$

Спектральные ширины функций $|F(\Omega)|^2$ и $G(\Omega)$ определяются соотношениями $\Delta\Omega_0 = 1/\tau_0$ и $\Delta\Omega_c = 2/\tau_c$, соответственно. Аналогичным образом можно ввести также характерное время дифракционного отражения $\tau_B = 2/\Delta\Omega_B$.

Наряду с определением времени когерентности τ_c с помощью соотношения (26.2), часто используется также введенное Манделем [15] интегральное время когерентности

$$\tau_M = \int_{-\infty}^{\infty}\gamma(\tau)^2 d\tau. \tag{28}$$

Если функция когерентности $\gamma(\tau)$ имеет вид функции Гаусса (26.2), то времена когерентности τ_M и τ_c связаны соотношением $\tau_M = \tau_c(\pi/2)^{1/2} \approx \approx 1.253\tau_c$.

Подстановка (27) в (25) приводит к следующему аналитическому выражению для спектрального коррелятора $g(\Omega, \Omega')$:

$$g(\Omega,\Omega') = \\ = \frac{\tau_0\tau_c}{4\pi\sqrt{1+\xi}}\exp\left[-\frac{(\Omega-\Omega')^2\tau_0^2}{4(1+\xi)} - \frac{(\Omega^2+\Omega'^2)\tau_c^2}{8(1+\xi)}\right], \tag{29}$$

где $\xi = \tau_c^2/(4\tau_0^2)$. Эта функция зависит от τ_0 и τ_c и максимальна вдоль линии $\Omega = \Omega'$. Из (29) следует, что в рамках нашей модели спектр падающего импульса $S(\Omega) = g(\Omega, \Omega)$ имеет вид:

$$S(\Omega) = \frac{\tau_0}{2\pi\Delta\Omega_{eff}}\exp(-\Omega^2/\Delta\Omega_{eff}^2), \tag{30}$$

где $\Delta\Omega_{eff} = \sqrt{4\tau_0^2 + \tau_c^2}/(\tau_0\tau_c)$.

Рассмотрим два предельных случая для спектра (30):

1) $\tau_c \gg \tau_0$, т.е. падающий импульс является практически полностью когерентным. В этом случае ширина спектра $\Delta\Omega_{eff} \approx 1/\tau_0 = \Delta\Omega_0$ определяется только длительностью импульса τ_0, а его спектр $S(\Omega) \approx (\tau_0^2/2\pi)\exp(-\Omega^2\tau_0^2) = |F(\Omega)|^2$, как и следовало ожидать, совпадает со спектром регулярной огибающей импульса (сравни с (27.1)). Так как в рассматриваемом случае $\xi \gg 1$, то спектральный коррелятор (29) сводится к произведению $g(\Omega, \Omega') \approx F(\Omega)F(\Omega')$. В итоге из (19) получим, что интенсивность отраженного импульса определяется выражением, типичным для отражения детерминированного импульса:

$$I_R(t) = \left|\int_{-\infty}^{\infty} F(\Omega)R(\Omega)\exp[i\varphi(\Omega)]d\Omega\right|^2. \tag{31}$$

2) $\tau_c \ll \tau_0$, что характерно для частично когерентного случайного импульса излучения РЛСЭ. Тогда из (30) следует, что ширина спектра $\Delta\Omega_{eff} \approx \approx 2/\tau_c = \Delta\Omega_c$ такого квазистационарного импульса определяется временем когерентности τ_c, а спектр импульса пропорционален длительности импульса τ_0 и спектральной плотности стационарного случайного процесса: $S(\Omega) \approx (\tau_0/2\pi^{1/2})G(\Omega)$ (27.2). Полная ширина спектра $S(\Omega)$ на половине высоты связана с τ_c соотношением $\Delta\Omega_F = 4(\ln 2)^{1/2}/\tau_c \approx \approx 3.330/\tau_c$. Приведем также удобную формулу для относительной ширины спектра такого импульса: $(\Delta\Omega_F/\omega_0)[\%] \approx 0.221 \times \lambda_0[\text{нм}]/\tau_M[\text{фс}]$. Если, например, $\lambda_0 = 0.1$ нм и $\Delta\Omega_F/\omega_0 \approx 0.1\%$ [6], то $\tau_M \approx \approx 0.22$ фс и $\tau_c \approx 0.18$ фс.

Обратимся теперь к анализу спектрального коррелятора (29). В наиболее интересном случае $\tau_c \ll \tau_0$ можно использовать известное предельное аналитическое представление для δ-функции: $\delta(x) = (\beta/\pi^{1/2})\exp(-\beta^2x^2)$ при $\beta \to \infty$. В итоге из соотношений (29) и (27.2) получим, что $g(\Omega, \Omega') = = \delta(\Omega - \Omega')G(\Omega)$, т.е. для квазистационарного импульса с длительностью $\tau_0 \gg \tau_c$ спектральный коррелятор имеет вид сверхузкого пика на фоне плавной функции спектральной плотности стационарного шума $G(\Omega)$ (27.2). Подстановка $g(\Omega, \Omega')$ в (19) и интегрирование по частоте Ω' приводит к следующему выражению для корреляционной функции поля отраженного импульса:

$$\Gamma_R(t,\tau) \to \Gamma_R(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\Omega)\left|R(\Omega)\right|^2\exp(i\Omega\tau)d\Omega. \tag{32}$$

Была получена достаточно простая формула, но при этом утрачена зависимость интенсивности

отраженного импульса $I_R = \Gamma_R(0)$ от времени. Формально это связано с тем, что при $\Omega = \Omega'$ в показателе экспоненты функции Φ (21) зависящее от времени слагаемое $(\Omega - \Omega')t = 0$. А с физической точки зрения это означает, что импульс является настолько протяженным по сравнению с временем когерентности, что в каких-либо конечных интервалах времени регулярная огибающая импульса $F(t)$ практически не зависит от времени. Отметим также, что аналогичный (32) результат ранее был получен для функции пространственной когерентности отраженного поля при падении на кристалл стационарного во времени и случайного в поперечном сечении рентгеновского пучка, поперечный размер которого намного больше длины пространственной когерентности пучка [12].

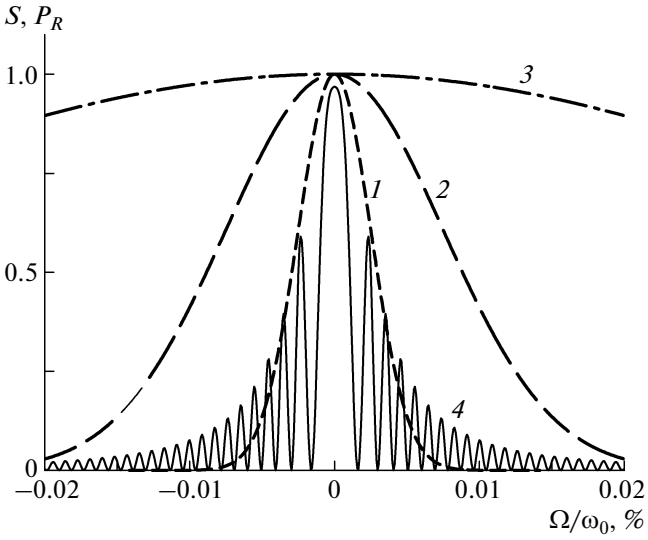

Рис. 1. Спектральная плотность падающего импульса $S(\Omega)$ с длительностью $\tau_p = 100$ фс и временами когерентности $\tau_c = 3$ фс (*1*), 1 фс (*2*) и 0.18 фс (*3*); *4* – функция спектральной интенсивности симметричного лауэ-отражения 111 $P_R(\Omega)$ от кристалла алмаза с толщиной $l = 98$ мкм, $\lambda_0 = 0.1$ нм.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Интенсивность дифракции случайного импульса существенным образом зависит от соотношений между временами τ_0, τ_c и τ_B, или, что то же самое, от соотношений между ширинами спектра огибающей $\Delta\Omega_0$, спектральной плотности случайного сигнала $\Delta\Omega_c$ и характерной шириной $\Delta\Omega_B$ спектральной кривой дифракционного отражения $P_R(\Omega) = |R(\Omega)|^2$.

Рассмотрим вначале дифракцию в геометрии Лауэ. В этом случае импульс падает на кристалл почти перпендикулярно поверхности, что снижает требования к поперечному размеру кристалла (≤1–2 мм), однако накладывает ограничения на его толщину, которая должна быть примерно кратна нечетным значениям длины экстинкции. Здесь и ниже рассматривается симметричное лауэ-отражение 111 от кристалла алмаза с толщиной $l = 98$ мкм, $\lambda_0 = 0.1$ нм, $\theta = \theta_B = 14.08°$, σ-поляризация, $\Lambda = 13.97$ мкм. Для представления отраженных импульсов на рисунках совместно с падающими импульсами время t в $I_R(t)$ сдвигается на величину z/c.

С уменьшением времени когерентности τ_c ширина $\Delta\Omega_{eff}$ функции спектральной плотности $S(\Omega)$ (30) увеличивается по сравнению с $\Delta\Omega_B$ (рис. 1). Кристалл становится своеобразным фильтром, подавляющим высокочастотные составляющие спектра падающего импульса. Это приводит к уменьшению интенсивности отраженного импульса (рис. 2), а также к кардинальному изменению формы функции временной когерентности $\gamma_R(t, \tau)$ (рис. 3) и к многократному увеличению интегрального времени когерентности τ_{MR}.

Наличие слагаемого с Ω^2 в фазе (16) приводит к расплыванию и деградации отраженного импульса с увеличением расстояния от кристалла $z \geq z_F$ [9, 10]. На основе анализа подинтегрального выражения в (19) можно показать, что в случае $\tau_c \ll \tau_0$ расстояние $z_F \approx \tau_0[(\tau_c/2)^2 + \tau_B^2]^{1/2}/F_h$, где $F_h = 2k_0(\mathrm{tg}\theta_B/\omega_0)^2$. Если, например, $\tau_0 = 60$ фс и $\tau_c \approx 0.18$ фс, то импульс начинает "разваливаться" на расстоянии $z_F \approx 3.5$ м от кристалла.

Отражение от 2-го кристалла в двукристальном монохроматоре описывается аналогичным образом. Каждая спектральная гармоника $A(\Omega)$ в спектре падающего импульса отражается от 1-го кристалла с амплитудой $A(\Omega)R_1(\Omega)$, и при падении на 2-й кристалл отражается от него с амплитудой $A(\Omega)R_1(\Omega)R_2(\Omega)$. Корреляционная функция двукратно отраженного импульса также определяется соотношением (19), но с заменой $R(\Omega) \to R^2(\Omega)$ (в случае двух одинаковых кристаллов). Самым замечательным здесь является отсутствие квадратичного по Ω слагаемого в фазе (16), что приводит к полному отсутствию расплывания во времени отраженного импульса на любых расстояниях от 2-го кристалла при сохранении, конечно, дифракционного расплывания импульса в поперечном направлении (10). Действительно, тангенциальная проекция волнового вектора для двукратно отраженного импульса $k_{ht}^{(2)} = k_{ht} + h_t^{(2)}$, где $k_{ht} = k_t + h_t$. Поскольку в параллельной схеме $(n, -n)$ $\mathbf{h}^{(2)} = -\mathbf{h}$, то $\mathbf{k}_h^{(2)} = \mathbf{k}$, т.е. все спектральные компоненты этого импульса распространяются в одном направлении и в фазе (16) $a_h = 0$ и $F_h = 0$.

Из рис. 2 видно, что падающий достаточно протяженный импульс с малым временем коге-

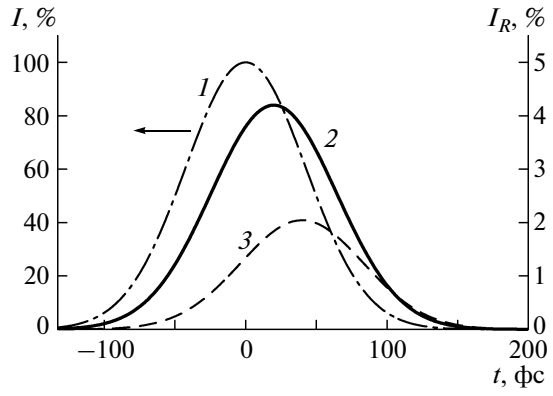

Рис. 2. Дифракционное отражение падающего импульса (*1*) с длительностью $\tau_p = 100$ фс и временем когерентности $\tau_c = 0.18$ фс от 1-го (*2*) и от 2-го (*3*) кристаллов.

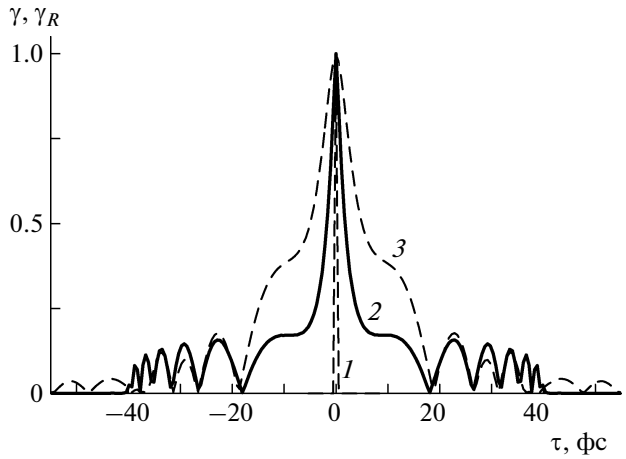

Рис. 3. Функции временной когерентности падающего импульса $\gamma(\tau)$ (*1*) и отраженного импульса $\gamma_R(\tau)$ от 1-го (*2*) и от 2-го (*3*) кристаллов.

рентности отражается с большой потерей интенсивности после 1-го и 2-го отражений (4 и 2% в максимуме). Относительно небольшое (всего в 2 раза) уменьшение интенсивности импульса после 2-го отражения объясняется резким сужением спектра импульса $S(\Omega)P_{R1}(\Omega)$ после 1-го отражения.

Форма функции временной когерентности отраженного импульса $\gamma_R(t, \tau)$ при $\tau_c \ll \tau_0$ кардинально отличается от гауссовского вида $\gamma(\tau)$ (26.2) для падающего импульса (рис. 3). Она имеет характерный "треугольный" вид с симметрично расположенными затухающими осцилляциями на краях, причем $\gamma_R(t, \tau) = 0$ при $|\tau| > \tau_B = 2(l/c)\sin^2\theta_B/\cos\theta_B$ [10, 16], где $\tau_B \approx 40$ фс. В данном случае функция $\gamma_R(t, \tau)$ не зависит от времени t. Это свидетельствует о том, что в амплитуде $A_R(t) = F_R(t)a_R(t)$ отраженного импульса функция $a_R(t)$ также является случайным стационарным процессом. Интегральное время когерентности (28) отраженных импульсов τ_{MR} (3.7 и 9.3 фс) значительно (в 17 и 42 раза) превышает интегральное время когерентности $\tau_M = 0.22$ фс падающего импульса. Однако для более коротких импульсов с длительностью $\tau_0 \le \tau_B$ форма функции временной когерентности $\gamma_R(t, \tau)$ зависит от времени t и, в отличие от кривых на рис. 3, становится асимметричной, т.е. случайная амплитуда $a_R(t)$ уже не является стационарной. Ранее аналогичный результат был получен для функции пространственной когерентности при дифракционном отражении стационарного во времени узкого рентгеновского пучка со случайной амплитудой в поперечном направлении [12].

С увеличением времени когерентности τ_c (например, до 10 фс) отраженные импульсы имеют гораздо большую интенсивность (77 и 67% после 1-го и 2-го отражений), а функции временной когерентности $\gamma_R(t, \tau)$ практически не зависят от времени t, и по форме и ширине мало чем отличаются от функции $\gamma(\tau)$ для падающего импульса.

Рассмотрим интегральные интенсивности импульсов, регистрация которых не требует высокоскоростной времяразрешающей техники. Интегральная интенсивность отраженного импульса определяется выражением

$$I_{R_{int}} = \int_{-\infty}^{\infty} I_R(t)dt = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} S(\Omega)\left|R(\Omega)\right|^2 d\Omega. \qquad (33)$$

Из соотношения (30) для спектра $S(\Omega)$ и (33) видно, что интегральная интенсивность $I_{R_{int}}$ пропорциональна длительности падающего импульса τ_0 и зависит от τ_c. Так как для падающего импульса $I_{int} = \tau_0\pi^{1/2}$, то отношение $f(\tau_c) = I_{R_{int}}/I_{int}$ зависит только от времени когерентности τ_c. Таким образом, по экспериментально измеренным интегральным интенсивностям импульсов до и после 1-го и (или) 2-го отражения можно из сравнения с теоретической кривой $f(\tau_c)$ определить время когерентности τ_c импульса РЛСЭ (рис. 4).

Импульсы РЛСЭ можно преобразовать в практически когерентные, то есть с временем когерентности $\tau_{MR} \ge \tau_p$, путем использования брэгговских отражений высокого порядка с чрезвычайно узкими кривыми отражения (сравни кривые $P_R(\Omega)$ на рис. 1 и рис. 5). При этом, однако, происходит уменьшение интенсивности отраженных импульсов почти в 200 раз. Рассмотрим симметричное отражение 400 в геометрии Брэгга от кристалла алмаза с толщиной $l = 30$ мкм; длина волны $\lambda_0 = 0.1$ нм, длительность импульса $\tau_p = 30$ фс, время когерентности, которое примерно равно

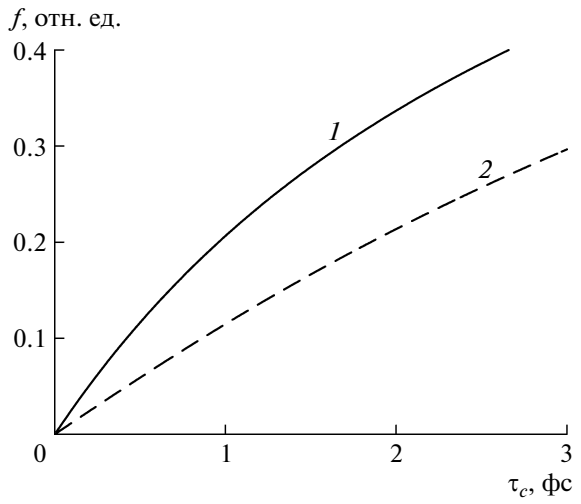

Рис. 4. Относительные интегральные интенсивности импульсов, отраженных от 1-го (*1*) и от 2-го (*2*) кристаллов, в зависимости от времени когерентности падающего импульса.

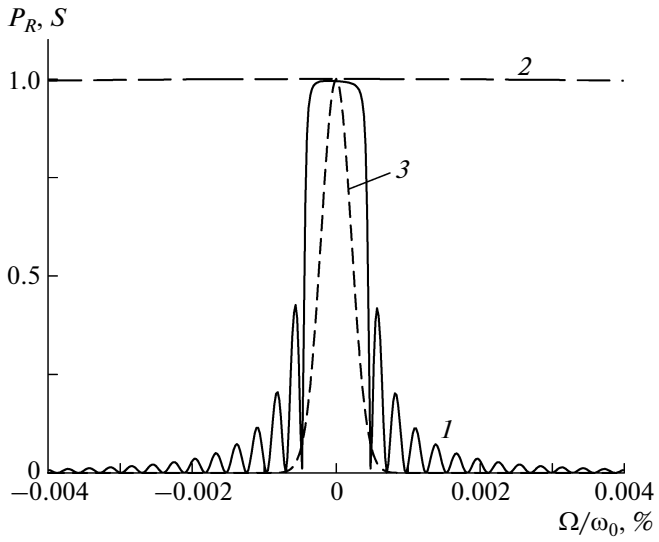

Рис. 5. Спектральная кривая дифракционного отражения $P_R(\Omega)$ (*1*), спектр падающего импульса $S(\Omega)$ (*2*) и спектр огибающей импульса $|F(\Omega)|^2$ (*3*). Отражение 400 от кристалла алмаза, $b = -1$, $\lambda_0 = 0.1$ нм, толщина кристалла $l = 30$ мкм, длительность падающего импульса $\tau_p = 30$ фс, $\tau_c = 0.18$ фс.

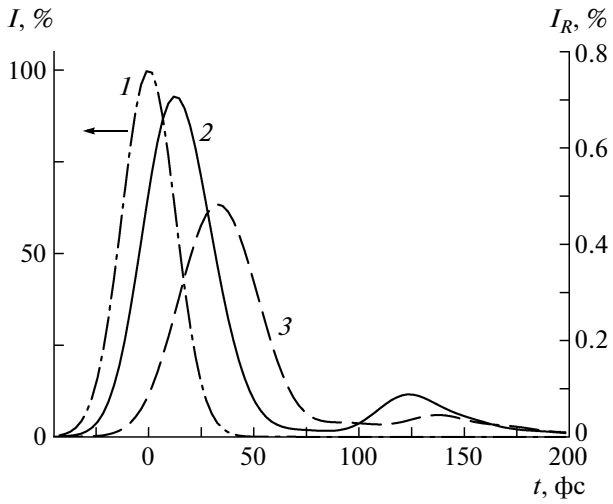

Рис. 6. Падающий импульс $I(t)$ (*1*) и отраженные импульсы $I_R(t)$ после 1-го (*2*) и 2-го (*3*) кристаллов. Остальные параметры, как на рис. 5.

длительности спайков, $\tau_c = 0.18$ фс. Из рис. 5 видно, что спектральная ширина огибающей импульса (кривая *3*) соизмерима с шириной брэгговского отражения, тогда как спектр импульса (кривая *2*) практически постоянен во всей области дифракции.

Длительность отраженных импульсов возрастает примерно в полтора раза по сравнению с τ_p (41 и 45 фс), а сами импульсы, в отличие от геометрии Лауэ (рис. 2), становятся асимметричными (рис. 6). Слабые максимумы в области $t \approx \tau_B \approx$ $\approx$ 112 фс связаны с запаздыванием отражения от нижней поверхности кристалла (подробнее см. в [9, 10, 16]).

Время когерентности отраженных импульсов даже превышает их длительность, т.е. импульсы становятся практически когерентными (рис. 7). В данном случае в заданном на рис. 7 интервале времени $\tau_{MR1} \approx 80$ фс, $\tau_{MR2} \approx 100$ фс. Функции временной когерентности $\gamma_R(t, \tau)$ кардинально отличаются по форме как от функции $\gamma(\tau)$ для падающего импульса, так и от симметричных функций $\gamma_R(t, \tau)$ в случае отражения в геометрии Лауэ (рис. 7 и рис. 3). Асимметрия и осцилляции функции $\gamma_R(t, \tau)$ вызваны интерференцией волн, отраженных от верхней и нижней поверхностей кристалла. Следует отметить, что интенсивные осцилляции на кривых $\gamma_R(t, \tau)$ в области $\tau \geq \tau_p$ не стоит абсолютизировать, поскольку в этой области интенсивности самих импульсов близки к нулю (кривая *4* на рис. 7).

В заключение рассмотрим некоторые интересные особенности, возникающие при прохождении случайных импульсов через кристалл в геометрии дифракции Брэгга. Амплитудный коэффициент прохождения определяется соотношением $T(\Omega) = (W/Q)\exp(i\psi)$ (17). Кривая прохождения $P_T = |T|^2$ при толщине кристалла $l > (2–3)\Lambda$ характеризуется сверхузким глубоким провалом на фоне постоянной интенсивности $\exp(-\mu l/\gamma_0)$, где $\mu = k_0\mathrm{Im}(\chi_0)$, ширина которого $\Delta\Omega_B/\omega_0 \approx$ $\approx 0.0007\%$ более чем на 2 порядка меньше ширины спектра падающего импульса (рис. 8а). Поэтому проходящий импульс практически повторяет

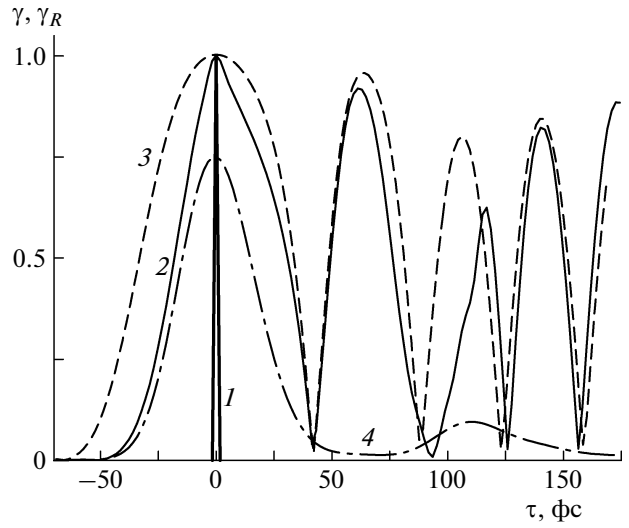

Рис. 7. Функции временной когерентности падающего импульса $\gamma(\tau)$ (*1*) и отраженного импульса $\gamma_R(t, \tau)$, после 1-го (*2*) и после 2-го (*3*) отражений; *4* – импульс, отраженный от 1-го кристалла. Моменты времени t соответствуют положениям максимумов на кривых $I_R(t)$ рис. 6.

по форме и интенсивности (при $\mu l/\gamma_0 \ll 1$) падающий импульс (кривая *2* на рис. 8б).

Однако наиболе интересным здесь является появление второго, задержанного по времени максимума (кривая *3* на рис. 8б), длительность которого τ_{T2} также равна τ_p, но интенсивность снижена более чем на три порядка. Этот максимум формируется низкочастотными спектральными компонентами исходного импульса, попавшими в окрестность области брэгговского отражения. Задержка во времени вызвана тем, что из-за сильной дисперсии эффективного показателя преломления скорости волн в этой области спектра меньше скорости света в кристалле вдали от условия Брэгга. Функция временной когерентности в области главного пика проходящего импульса практически совпадает с функцией $\gamma(\tau)$ для падающего импульса (кривые *1* и *2* на рис. 8в), тогда как задержанный пик является практически полностью когерентным, поскольку время его когерентности сравнимо с длительностями импульсов: $\tau_{c2} \approx \tau_{T2} \approx \tau_p$. В [17] предложено использовать задержанный монохроматический импульс, возникающий при прохождении коротких (~6 фс) импульсов РЛСЭ через кристалл C(400) с толщиной 0.1 мм, для инициирования когерентного усиления путем помещения кристалла между двумя ондулляторами с синхронизованной задержкой электронных сгустков в магнитном поле.

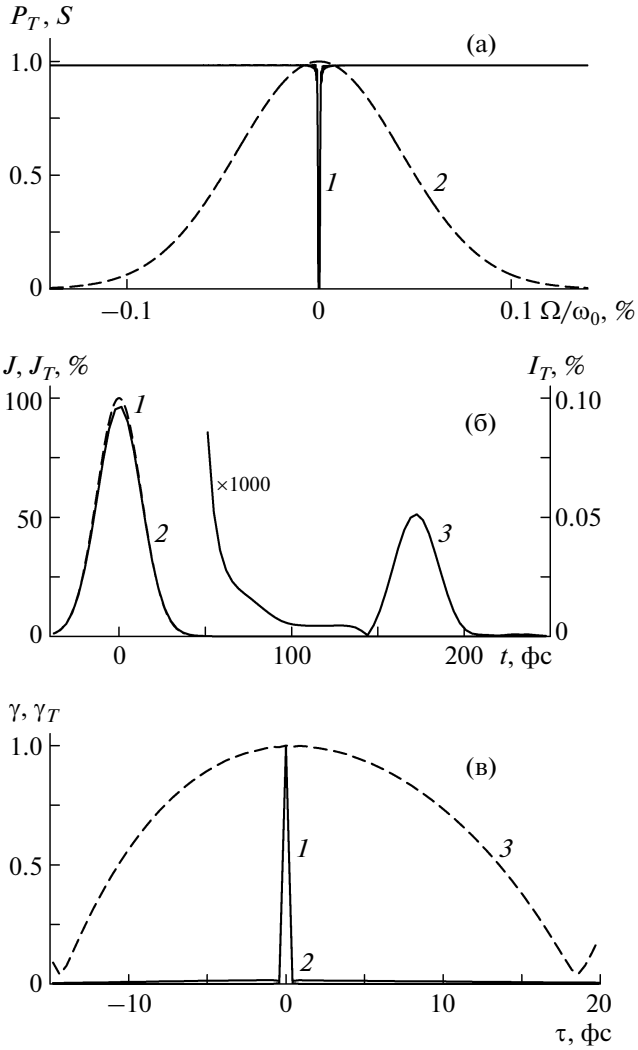

Рис. 8. Формирование высококогерентного задержанного пика при прохождении случайного импульса в геометрии Брэгга. Спектральная кривая прохождения $P_T(\Omega)$ (*1*) и спектр падающего импульса $S(\Omega)$ (*2*) (а); интенсивность падающего импульса $I(t)$ (*1*) и прошедшего импульса $I_T(t)$ в нормальном (*2*) и увеличенном (*3*) масштабах (б); функции временной когерентности падающего импульса $\gamma(\tau)$ (*1*) и прошедшего импульса $\gamma_T(\tau)$ в областях основного некогерентного (*2*) и задержанного высококогерентного (*3*) максимумов (в). Кристалл C(400), l = 30 мкм, λ_0 = = 0.1 нм, θ_B = 34.2°, $\Lambda \approx$ 7.5 мкм, длительность импульса τ_p = 30 фс, τ_c = 0.18 фс.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе с использованием спектрального подхода к задачам статистической оптики рассмотрено влияние дифракционного отражения и прохождения на когерентные свойства частично когерентных фемтосекундных рентгеновских импульсов с параметрами, близкими к ожидаемым параметрам импульсов РЛСЭ. Получены общие выражения для интенсивностей и функций когерентности импульсов, отраженных

от одного или двух совершенных кристаллов. Показано, что высокая степень пространственной когерентности импульсов РЛСЭ позволяет существенно упростить задачу и рассматривать статистические характеристики импульсов в зависимости от времени когерентности исходного импульса, его длительности и спектральной ширины области дифракционного отражения. Полученные результаты представляют интерес как для монохроматизации импульсов РЛСЭ, так и для анализа различных схем линий задержки на основе кристаллов. Рассмотрение проводилось в модели "холодного" кристалла. Учет влияния радиационных нагрузок, вызываемых мощными рентгеновскими импульсами, и связанных с ними неоднородными тепловыми полями и деформациями структуры кристаллов, будет проведен в следующих публикациях.

Авторы выражают благодарность М. Юркову за предоставление 3D FAST результатов расчетов импульсов SASE 1 РЛСЭ, а также М. Юркову, Х. Зинну и Т. Ченчеру за полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 10-02-00768) и BMBF Project 05K10CHG.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Saldin E.L., Schneidmiller E.A., Yurkov M.V.* The Physics of Free Electron Lasers. Berlin: Springer, 1999. 484 p.
2. *Altarelli M. et al.* (*eds.*) // XFEL. Technical Design Report. 2006. (DESY 2006-097. Hamburg. Germany. http://xfel.desy.de/tdr/index_eng.html.).
3. *Saldin E.L., Schneidmiller E.A., Yurkov M.V.* // Nucl. Instrum. Methods. A. 1999. V. 429. P. 233.
4. *Saldin E.L., Schneidmiller E.A., Yurkov M.V.* Report TESLA-FEL 2004-02. DESY, Hamburg, Germany, 2004. 39 p.
5. *Saldin E.L., Schneidmiller E.A., Yurkov M.V.* // New J. Phys. 2010. V. 12. P. 035010.
6. *Geloni G., Saldin E., Samoylova L. et al.* // New J. Phys. 2010. V. 12. P. 035021.
7. *Vartanyants I.A., Robinson I.K.* // Optics Commun. 2003. V. 222. P. 29.
8. *Vartanyants I.A., Robinson I.K., McNulty I. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2007. V. 14. P. 453.
9. *Бушуев В.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2005. Т. 69. С. 1710.
10. *Bushuev V.A.* // J. Synchrotron Rad. 2008. V. 15. P. 495.
11. *Bushuev V., Samoylova L.* // Nucl. Instrum. Methods. A. 2011. V. 635. P. S19.
12. *Бушуев В.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2009. Т. 73. С. 56.
13. *Ахманов С.А., Дьяков Ю.Е., Чиркин А.С.* Введение в статистическую радиофизику и оптику. М.: Наука, 1981. 640 с.
14. *Бушуев В.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2010. Т. 74. С. 47.
15. *Mandel L.* // Proc. Phys. Soc. 1959. V. 74. P. 223.
16. *Malgrange C., Graeff W.* // J. Synchrotron Rad. 2003. V. 10. P. 248.
17. *Geloni G., Kocharyan V., Saldin E.* Report DESY 10-053. Hamburg, Germany, 2010. 28 c.