

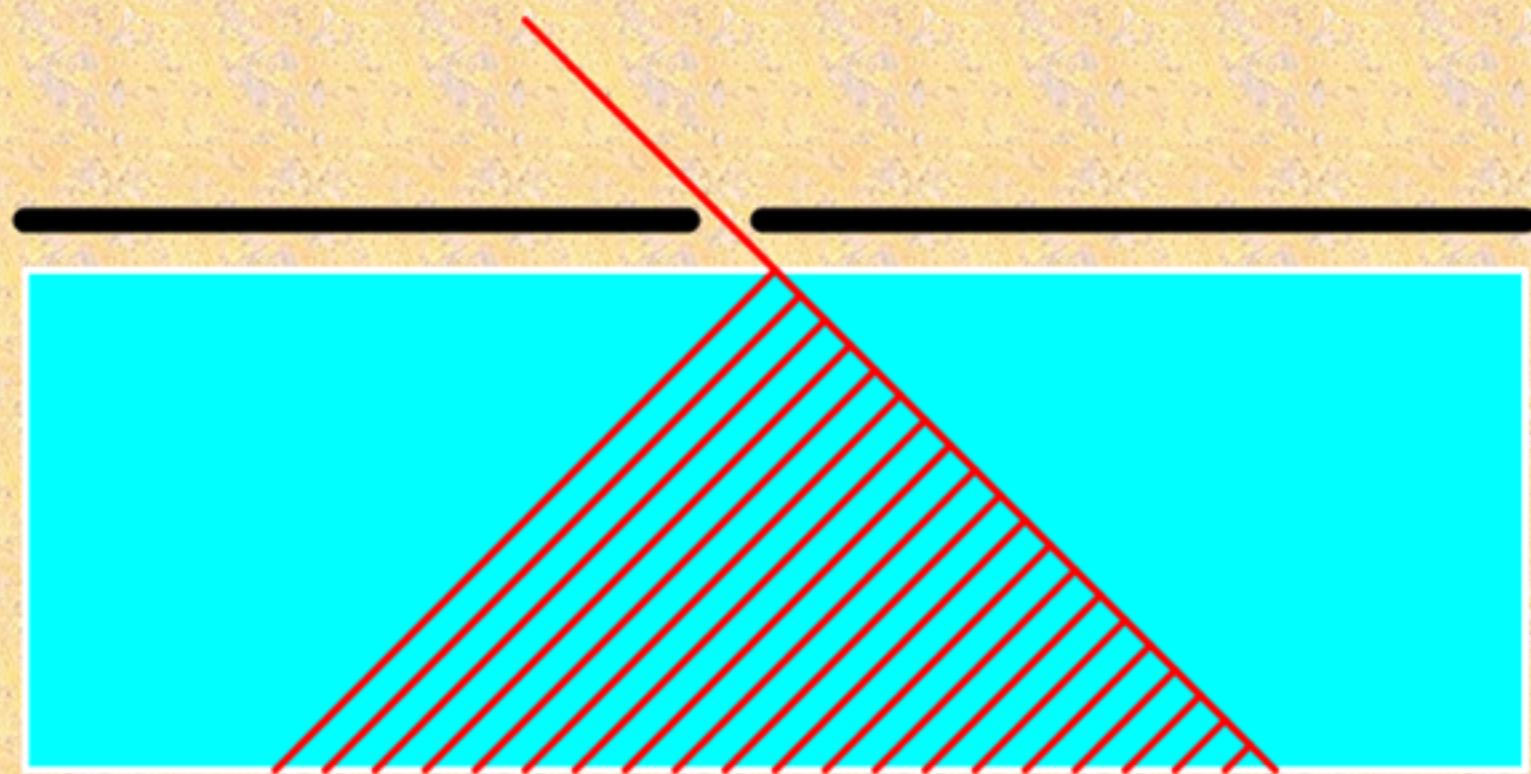
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ДИФРАКЦИИ НА ОТРАЖЕНИЕ СФОКУСИРОВАННОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ В МНОГОСЛОЙНЫХ КРИСТАЛАХ И ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

Кон Виктор Германович
РНЦ "Курчатовский Институт"

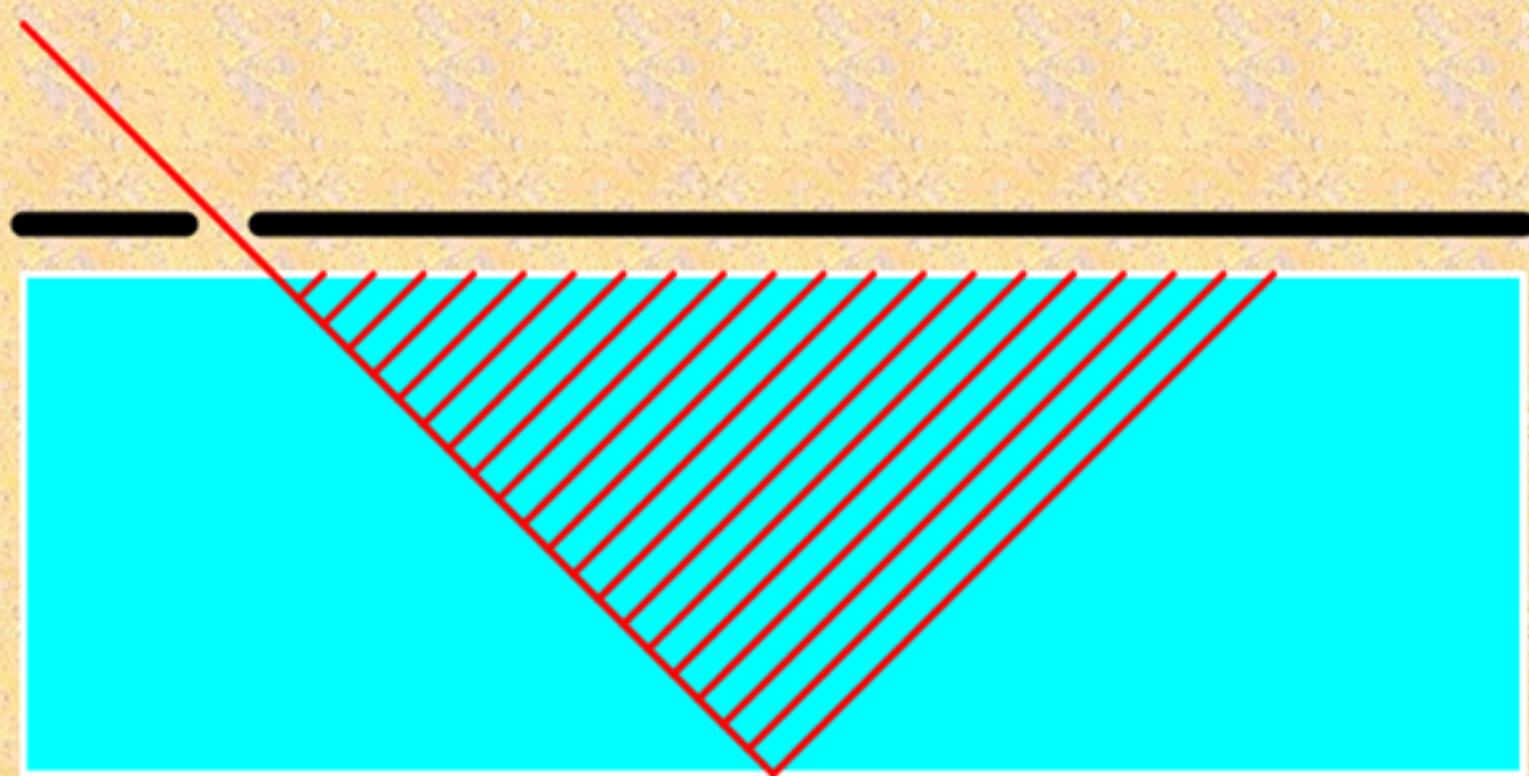
<http://kohnvict.narod.ru>



Дифракцию ограниченного пучка в геометрии Лауз, можно изучать, используя щель перед кристаллом, Это всем известная секционная топография. Пропагатор этой задачи хорошо известен и проверен экспериментально.



Дифракцию ограниченного пучка в геометрии Брэгга, нельзя изучать, используя щель перед кристаллом, Щель закрывает пучок. Пропагатор этой задачи известен с 1971 года, но прямых экспериментов по его проверке не было до последнего времени.

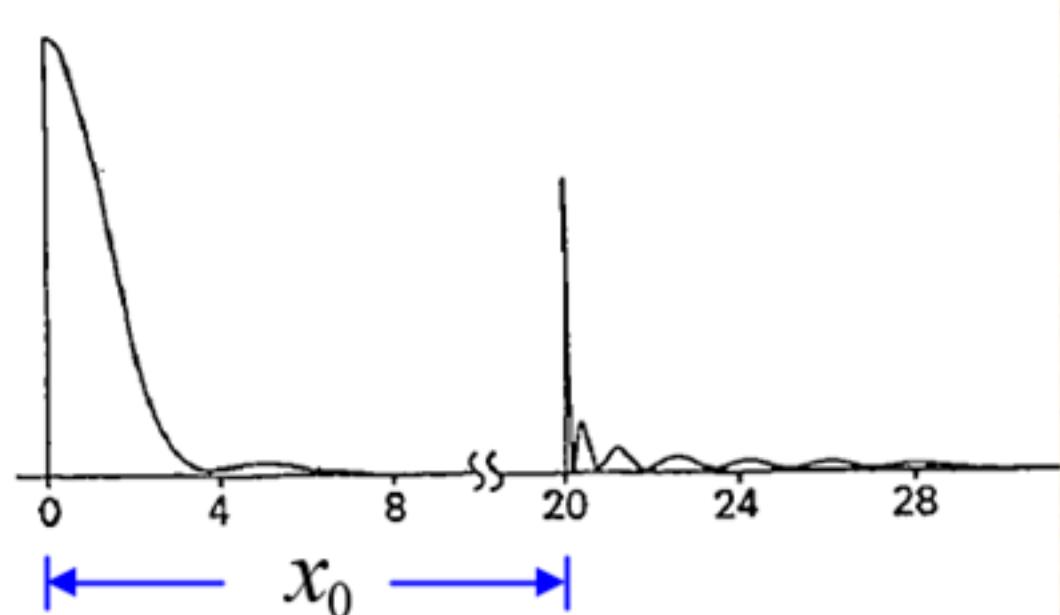


A. M. Afanas'ev, V. G. Kohn, Acta Cryst. A, 27, 421 (1971)

$$I(x) = \left| \frac{sD}{2 \sin 2\theta_B} \right|^2 \exp\left(-\mu_0 \frac{2x}{\sin 2\theta_B} \right) \left| \theta(x)G_0(x) - \theta(x-x_0)G_1(x) \right|^2,$$

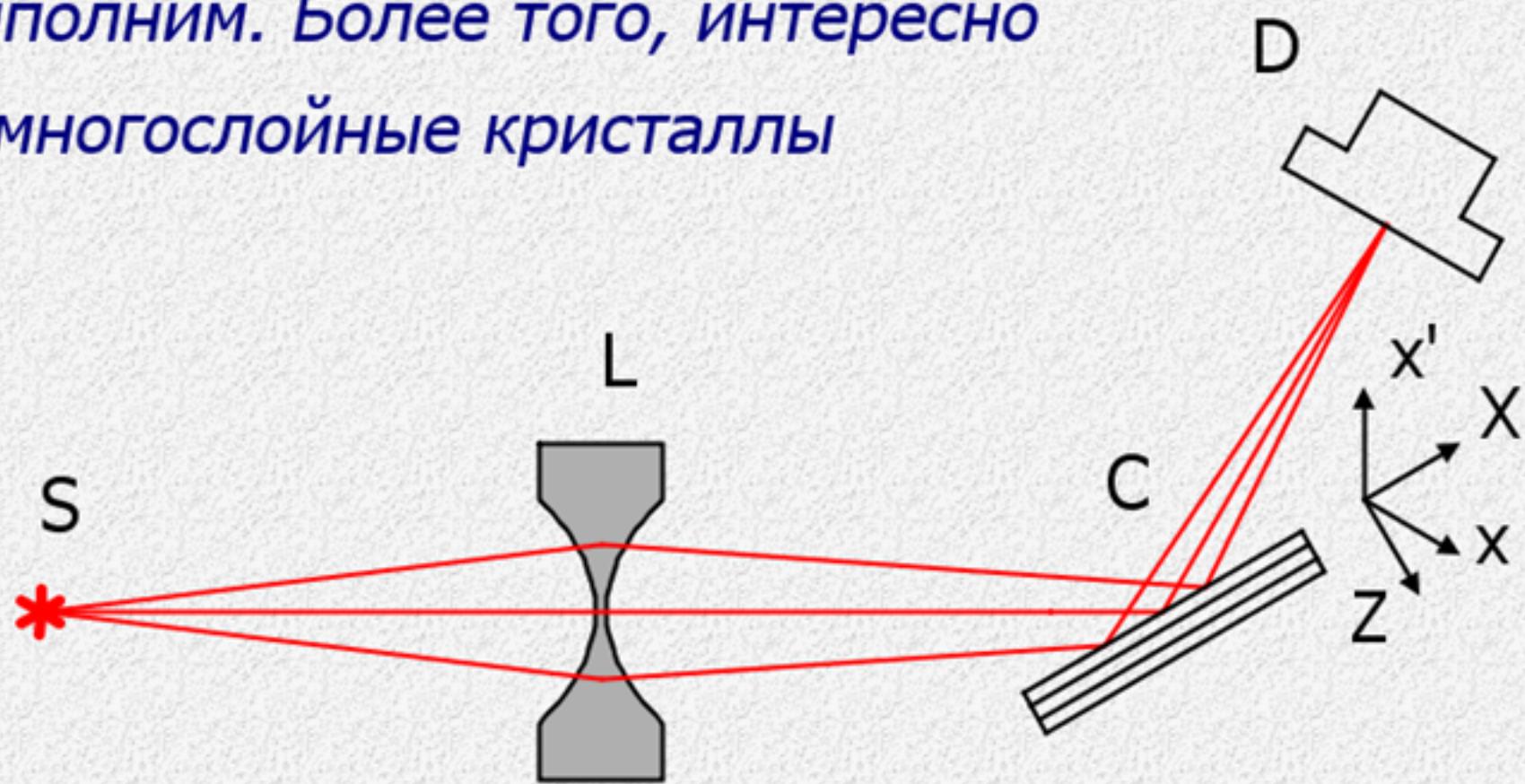
$$G_0(x) = J_0(Bx) + J_2(Bx), \quad G_1(x) = J_0(B\eta) + 2\xi J_2(B\eta) + \xi^2 J_4(B\eta),$$

$$B = \frac{(s^2 f)^{1/2}}{\sin 2\theta_B}, \quad x_0 = 2d \cos \theta_B, \quad \eta = (x^2 - x_0^2)^{1/2}, \quad \xi = \frac{x - x_0}{x + x_0}.$$



D - размер щели
d - толщина кристалла
s, f - параметры дифракции
 θ_B - угол Брэгга
 $J_n(x)$ - функция Бесселя
 μ_0 - коэффициент поглощения

Предлагается новая схема эксперимента, с фокусировкой пучка в детекторе после отражения, кристаллом. Пропагатор этой задачи совпадает с пропагатором кристалла, но эксперимент легко выполним. Более того, интересно изучать многослойные кристаллы



Перенос излучения от источника до детектора в ин-лайн схеме вычисляется как многократный расчет сверток поля с пропагаторами

$$E(x) = P(x, x_1, L_2) * P_{MC}(x_1, x_2) * P(x_2, x_3, L_1) \\ * P_L(x_3, x_4) * P(x_4, 0, L_0)$$

При этом пропагатор пустого пространства имеет вид

$$P(x, x_1, L) = \frac{1}{(i\lambda L)^{1/2}} \exp\left(i\pi \frac{(x - x_1)^2}{\lambda L}\right)$$

λ – длина волны, L – расстояние вдоль оптической оси, пропагатор линзы имеет вид (F – фокусное расстояние линзы)

$$P_L(x, x_1) = \exp\left(-i\pi \frac{x^2}{\lambda F} [1 - i\gamma]\right) \delta(x - x_1)$$

Пропагатор многослойного кристалла (симметричное отражение)

$$P_{MC}(x, x', z) = \int \frac{dq}{2\pi} R_N(q) \exp(iq(x - x')),$$

$$R_k(q) = \frac{R_1 - R_2 C \exp(i\varphi)}{1 - C \exp(i\varphi)}, \quad C = \frac{R_1 - R_{k-1}(q)}{R_2 - R_{k-1}(q)},$$

$$\varphi = \frac{ad}{\sin \theta_B}, \quad a = (\sigma^2 - s^2 f)^{1/2}, \quad R_{1,2} = \frac{\sigma \pm a}{s f},$$

$$\sigma = (q - q_0) \sin 2\theta_B - i\mu_0, \quad s = K\chi_h, \quad f = \frac{\chi_{-h}}{\chi_h},$$

$$\mu_0 = K\chi_0'', \quad q_0 = K\varphi + K[\frac{\Delta d_c}{d_c} - \frac{\Delta \lambda}{\lambda}] \operatorname{tg} \theta_B$$

Волновую функцию после линзы $E_L(x_3)$ получаем сразу в аналитическом виде. Остальной расчет удобно делать методом преобразования Фурье. При этом на расстоянии фокусировки источника имеем

$$P(x, x_1, L_2) * P(x_1, x_2, L_1) = P(x, x_2, L_1 + L_2)$$

$$P(x, x_2, L_1 + L_2) * E_L(x_2) \approx \delta(x - x_2)$$

Отсюда следует, что если детектор находится в фокусе, то

$$E(x) \approx P_{MC}(x_1, 0)$$

То есть так как будто источник и детектор находятся на поверхности кристалла.

Для численного эксперимента был выбран интерферометр Фабри-Перо, реально изготовленный и использованный в статье: S.-L. Chang, Yu. P. Stetsko, et al., *Phys. Rev. Lett.* v.94, 174801, 2005.

Он состоит из 2-х слоев кристалла Si, толщиной 70 мкм, разделенных слоем воздуха толщиной 100 мкм.

Симметричное отражение 12 4 0 при энергии фотонов 15 кэв.

Угол Брэгга 74.27 град.

Рассмотрены 3 случая узкого пучка:

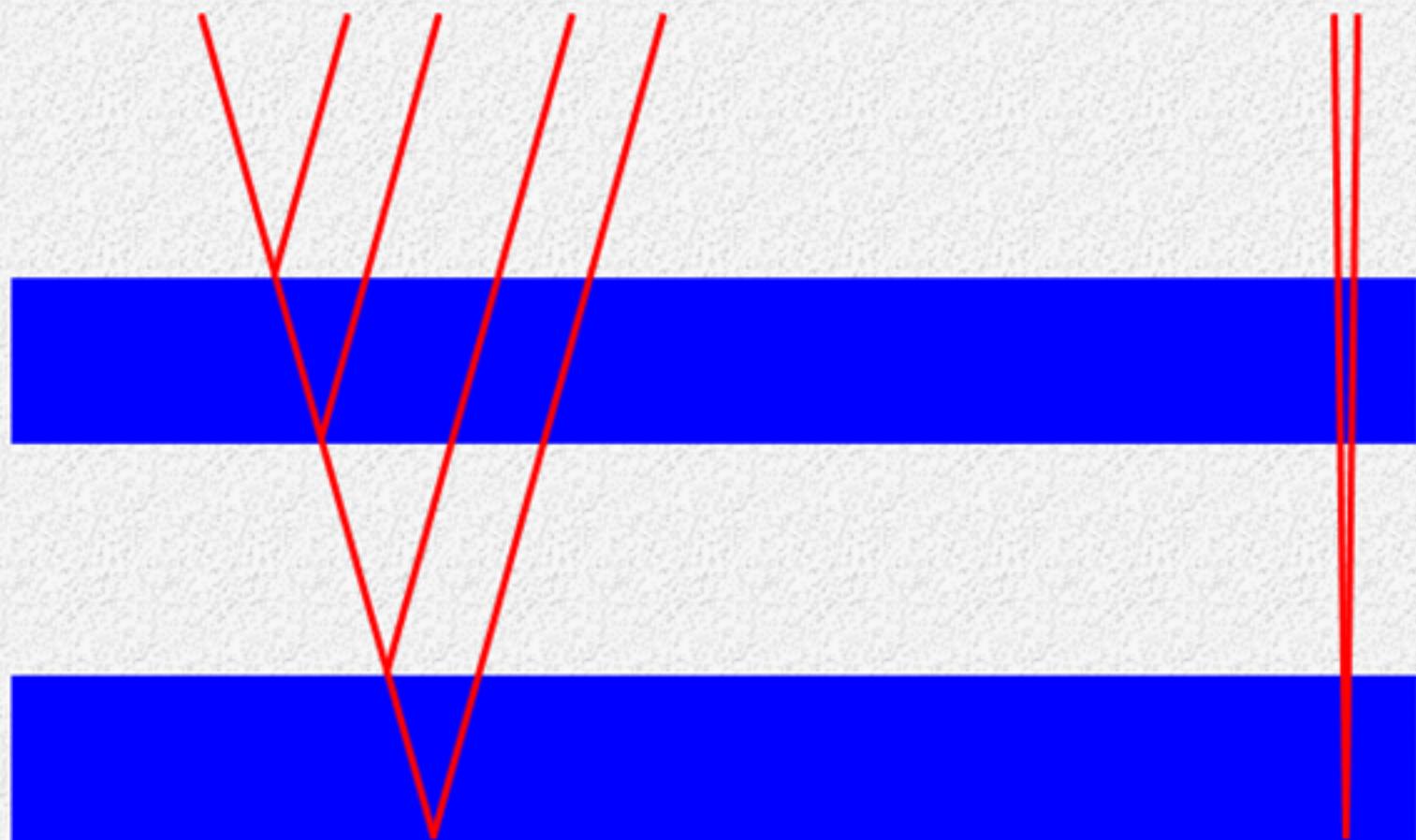
ограниченный узкой щелью (A);

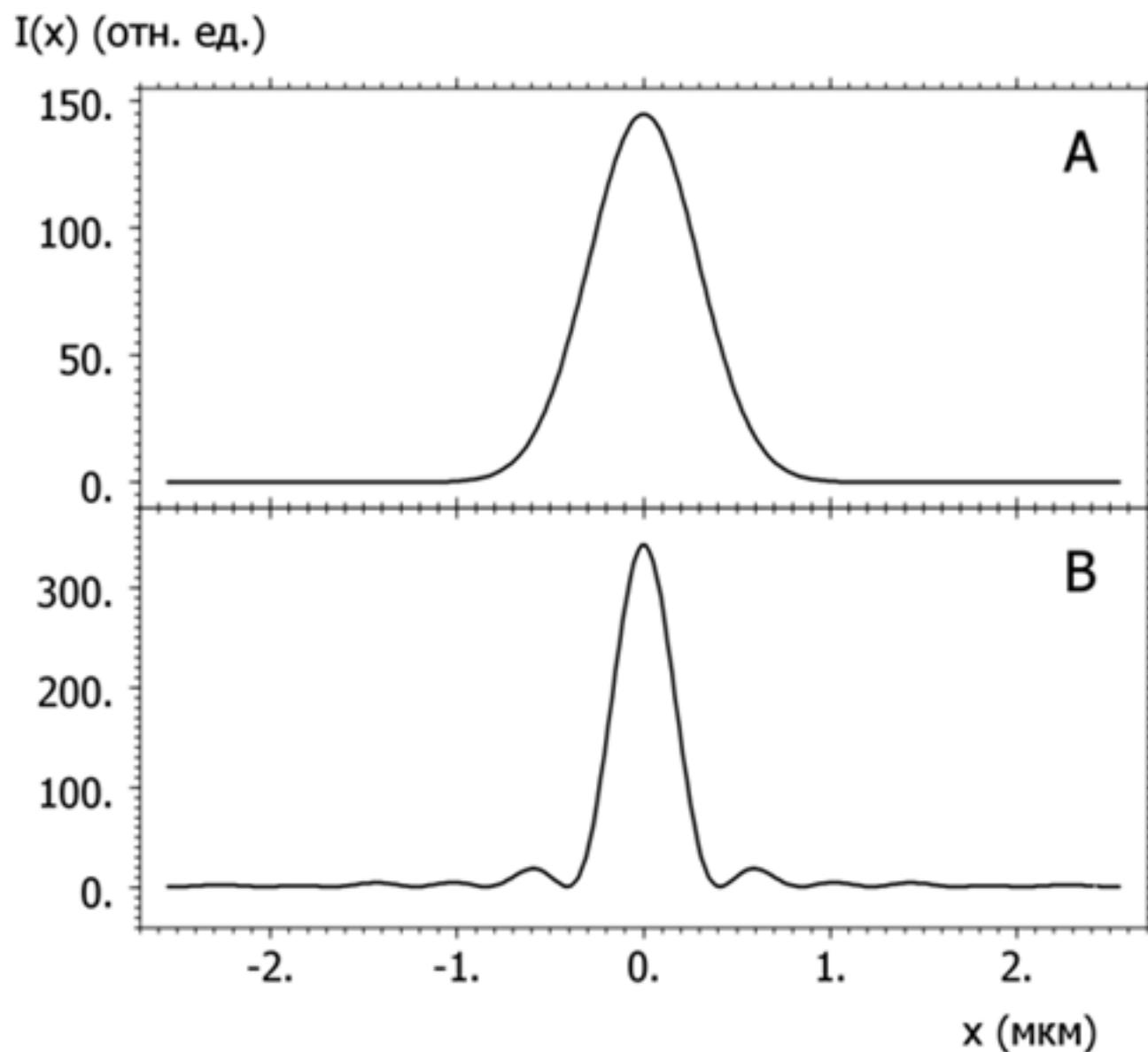
сфокусированный параболической линзой (B)

и сфокусированный зонной пластинкой с тем же фокусным расстоянием (C)

$E = 15.0$ кэв

$E = 14.44$ кэв

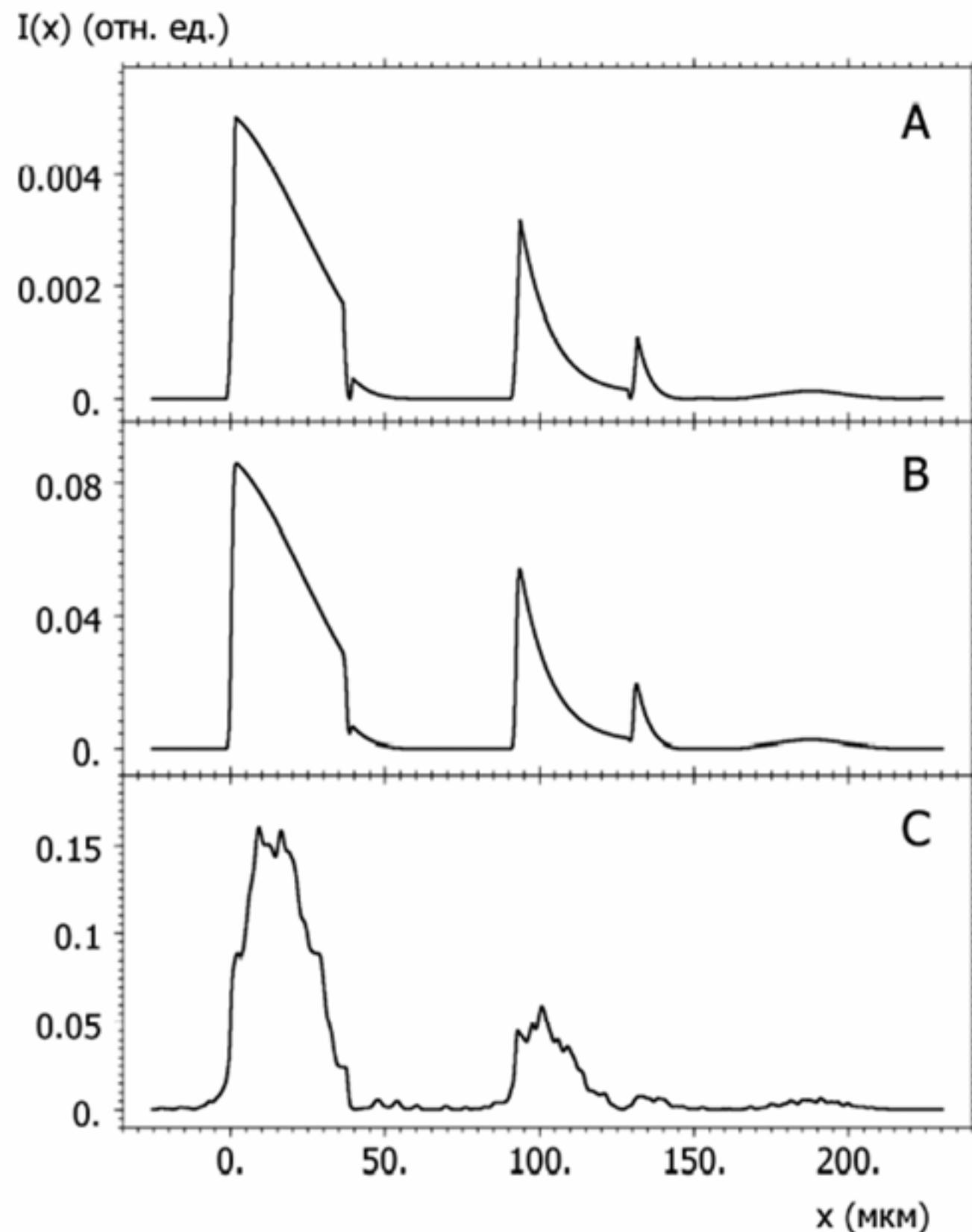




Параболическая линза: планарная,
Si, R = 7.5 мкм, A = 102 мкм, F = 174 см.

Зонная пластиинка: линейная,
Si, r1 = 12 мкм, N = 226, A = 361 мкм, F = 174 см.

Из результатов расчета видно, что параболическая линза эквивалентна щели, в то время как зонная пластина даже без нулевого порядка не годится из-за наличия многих порядков фокусировки.



A. M. Afanas'ev, V. G. Kohn, Acta Cryst. A, 27, 421 (1971)

$$I(x) = \left| \frac{sD}{2\sin 2\theta_B} \right|^2 \exp\left(-\mu_0 \frac{2x}{\sin 2\theta_B}\right) |\theta(x)G_0(x) - \theta(x-x_0)G_1(x)|^2,$$

$$G_0(x) = J_0(Bx) + J_2(Bx), \quad G_1(x) = J_0(B\eta) + 2\xi J_2(B\eta) + \xi^2 J_4(B\eta),$$

$$B = \frac{(s^2 f)^{1/2}}{\sin 2\theta_B}, \quad x_0 = 2d_1 \cos \theta_B, \quad \eta = (x^2 - x_0^2)^{1/2}, \quad \xi = \frac{x - x_0}{x + x_0}.$$

**Скачки интенсивности на границах кристаллов
связаны с интегрально-кинематическим
отражением хвостами угловой зависимости**

$$A_R(x) \approx \frac{s}{2\sin 2\theta_B} \int \frac{dq}{(2\pi)} \frac{\exp(iqx)}{(q - i\mu_0/\sin 2\theta_B)} = \frac{si}{2\sin 2\theta_B} \theta(x) \exp\left(-\frac{\mu_0 x}{\sin 2\theta_B}\right)$$

Simulations of Bragg diffraction of a focused x-ray beam by a single crystal with an epitaxial layer

V. G. Kohn^{1,*} and A. Kazmirov^{2,†}

¹Russian Research Center “Kurchatov Institute,” 123182, Moscow, Russia

²Cornell High Energy Synchrotron Source, Cornell University, Ithaca, New York 14853, USA

(Received 5 March 2007; revised manuscript received 14 May 2007; published 28 June 2007)

The Bragg case diffraction of a narrow x-ray beam in a multilayer crystal is studied theoretically. The beam produced by a parabolic refractive lens is Bragg reflected by a crystalline sample and a spatial distribution of the intensity is recorded by a detector placed at the focus of the lens. This x-ray optical scheme represents a topographic technique which is extremely sensitive to a depth variation of a crystalline structure. Simulations of the intensity pattern were performed by using a computational technique based on a convolution of individual propagators by performing a double fast Fourier transform procedure. It was shown that each interface in a multilayer crystal can be observed on the intensity pattern with a contrast depending on the incident angle. Thus, by recording a series of images at different angles, valuable depth sensitive structural information can be obtained.

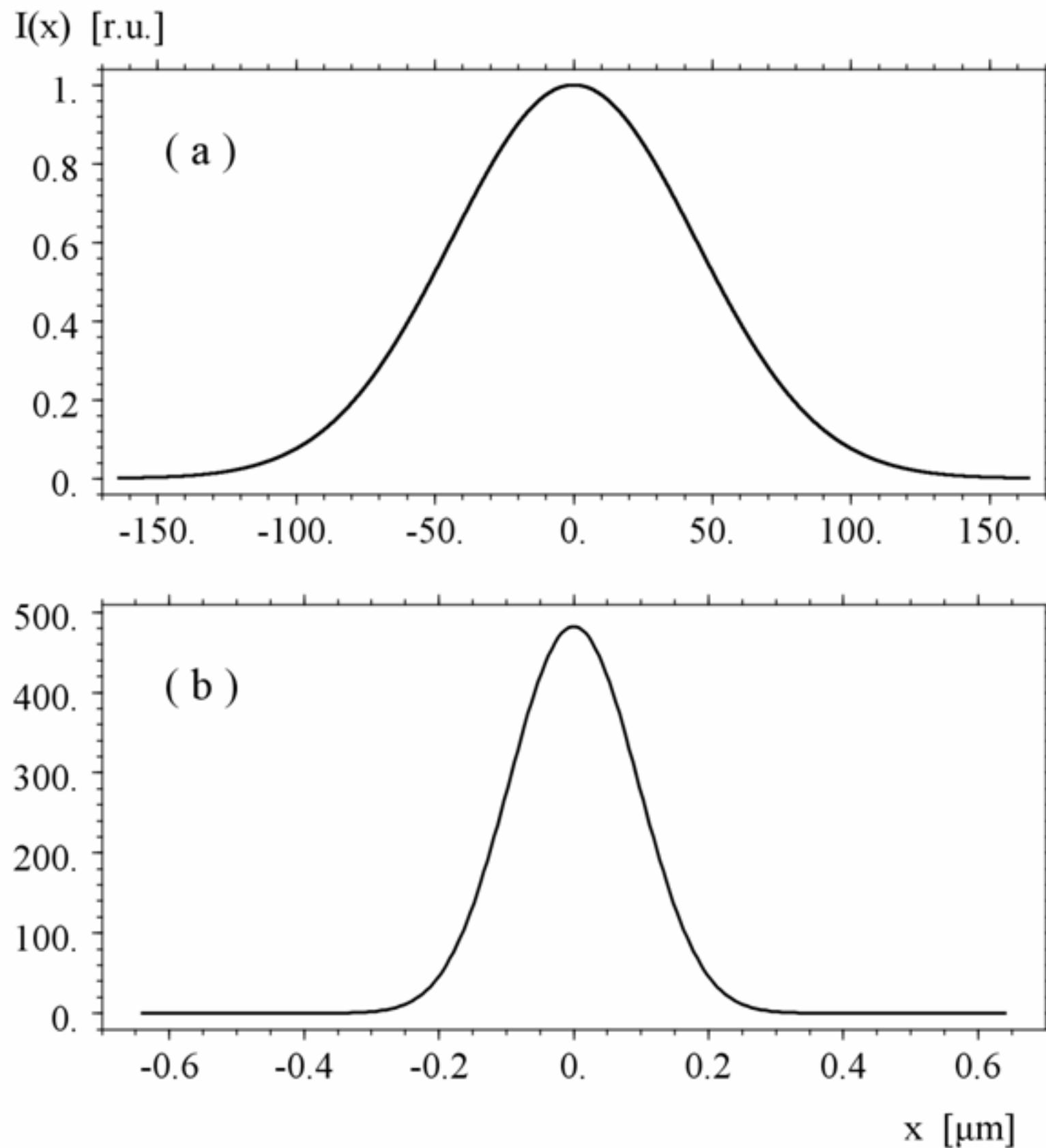
DOI: [10.1103/PhysRevB.75.224119](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.224119)

PACS number(s): 61.10.Nz, 41.50.+h

I. INTRODUCTION

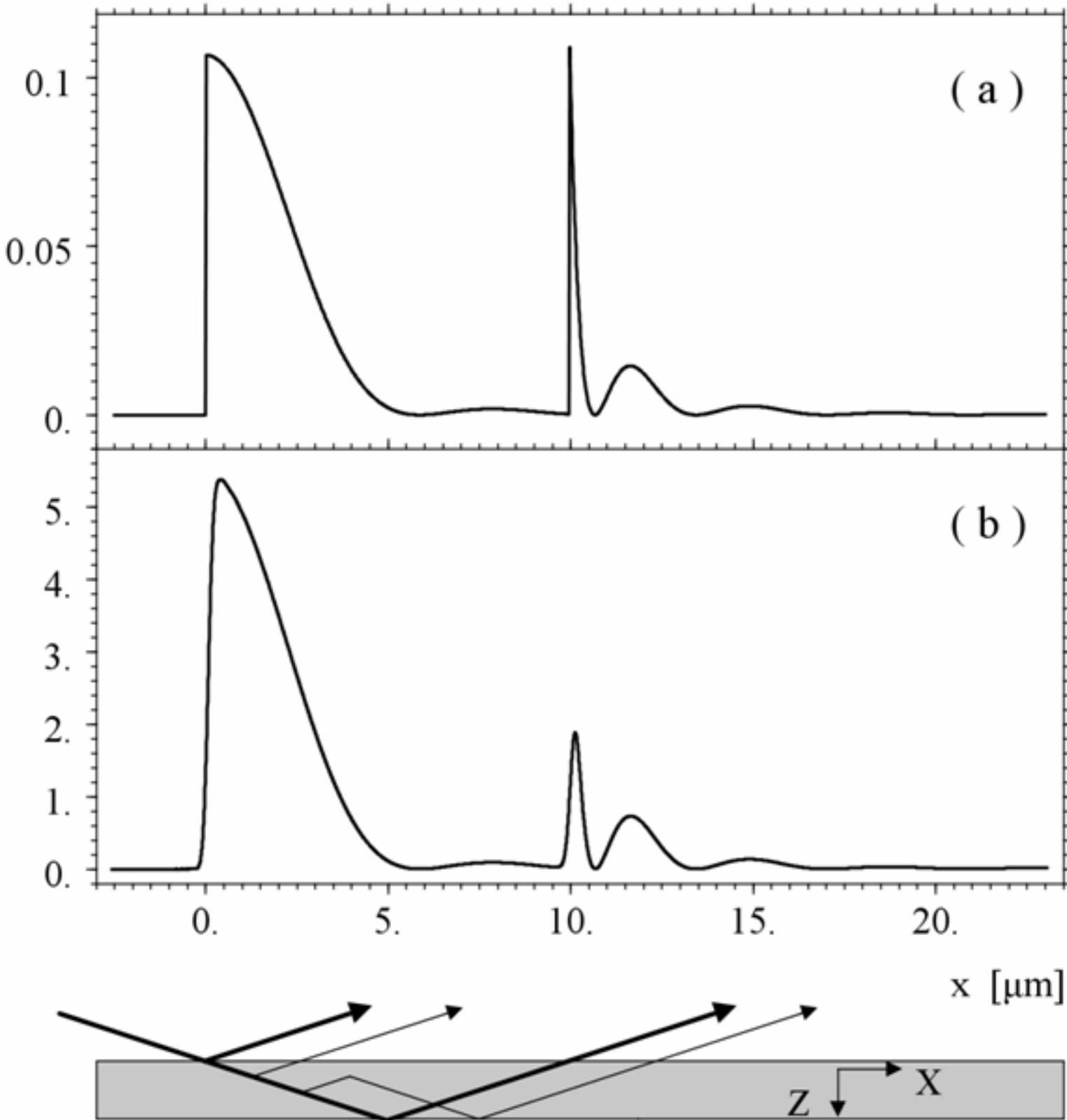
Diffraction is a powerful tool to study the atomic structure of crystals, surface layers, and interfaces. High-energy diffractometry is based on using a well collimated beam, which can be approximated by a plane wave.

Analytical solution for the propagator obtained for a crystal of finite thickness^{2–4} revealed an interesting phenomenon: a strong reflection is created not only from the front (entrance) surface but also from the back surface of the crystalline slab. In analogy with reflection of acous-



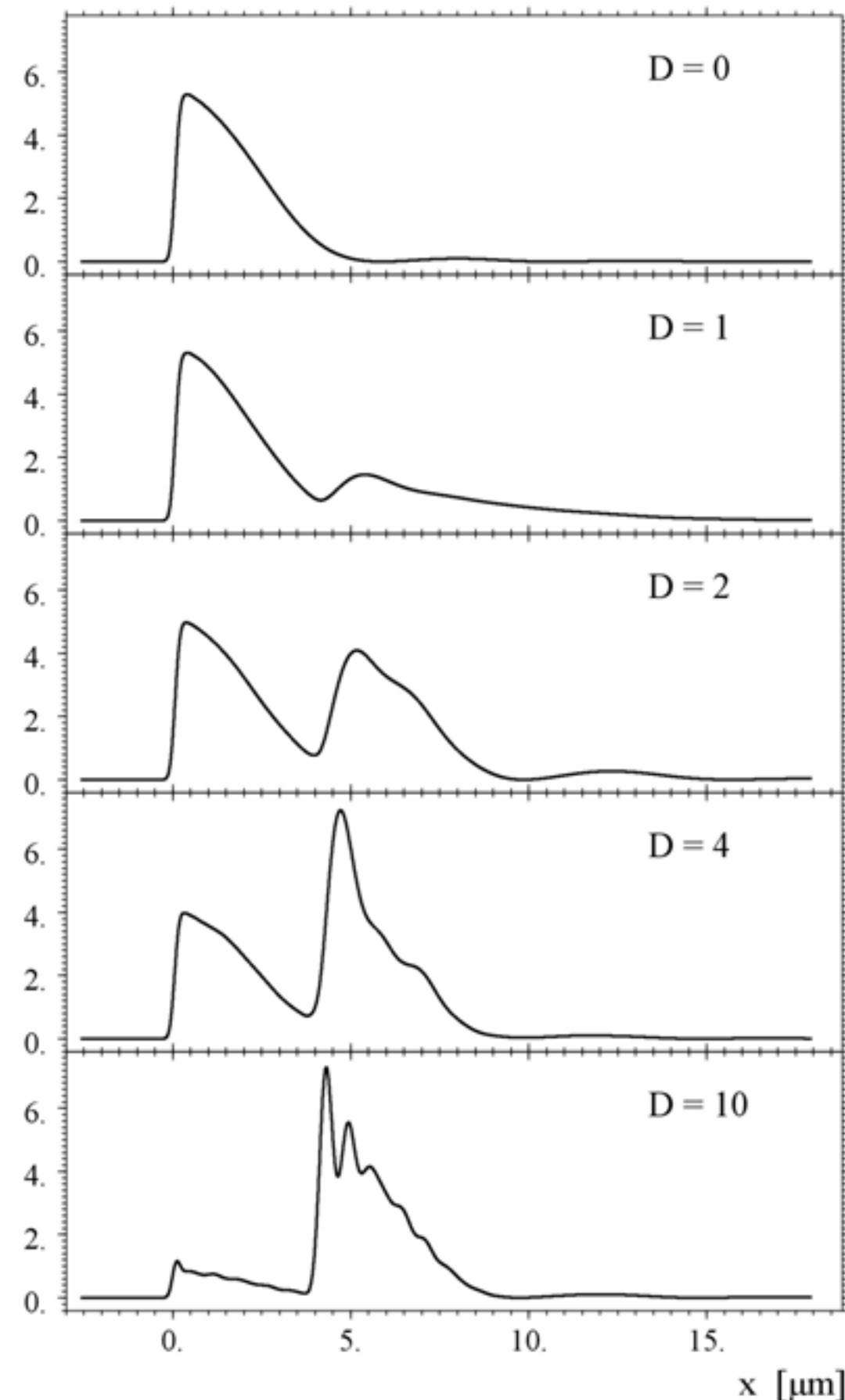
Расчет выполнен для энергии $E = 25$ кэв, для алюминиевой линзы с фокусным расстоянием 100 см, расстояние от источника до линзы 50 м. Верхняя кривая показывает координатную зависимость относительной интенсивности сразу за линзой (апертура). Нижняя кривая – зависимость в фокусе линзы.

$I(x)$ [r.u.]



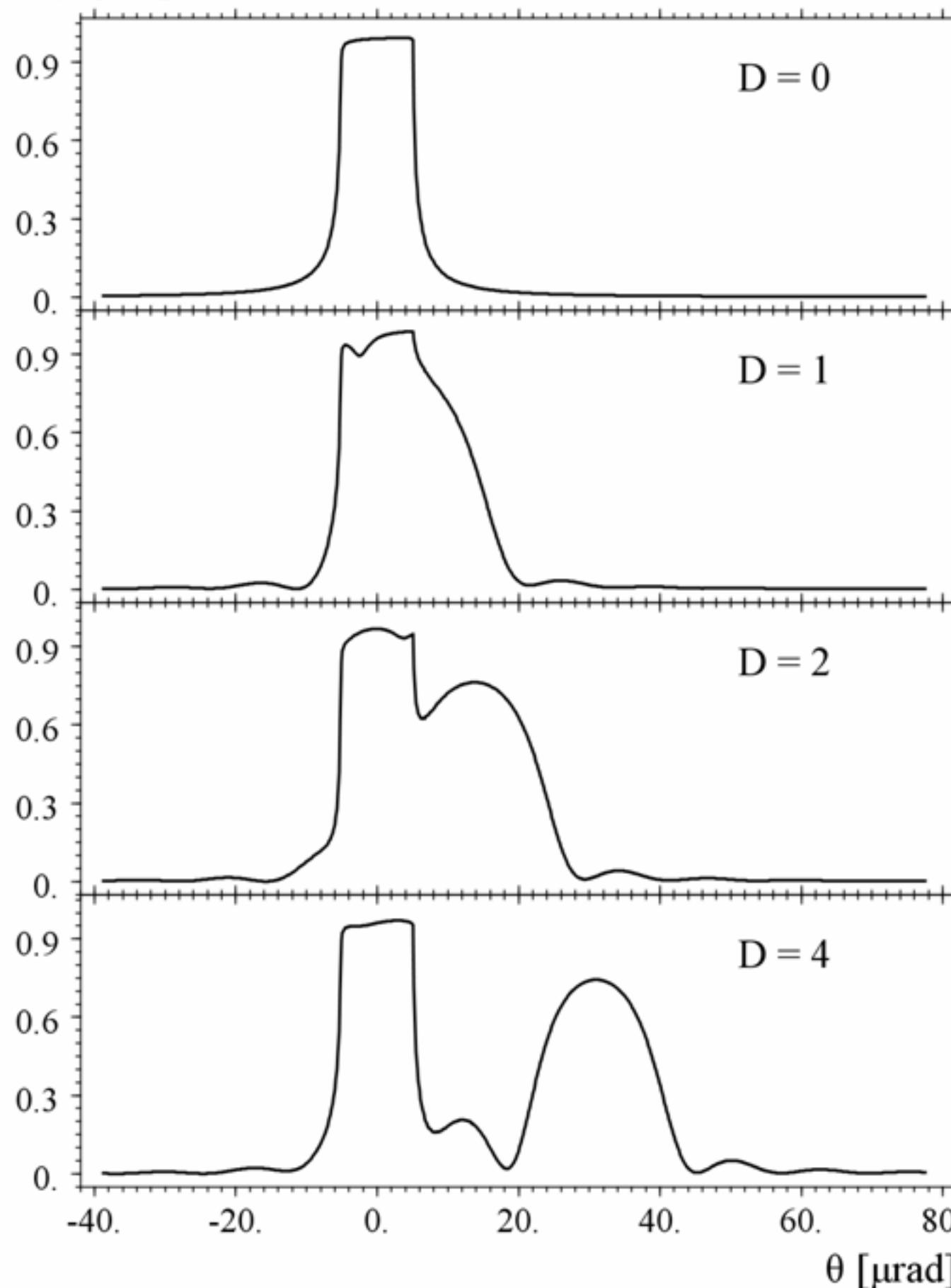
Результаты расчета 111 дифракции в Si для кристалла с толщиной 5 мкм. Сверху – по аналитической формуле для бесконечно узкого пучка и численным методом для пучка с шириной 0.01 мкм (кривые совпадают). Снизу – для случая фокусировки пучка линзой. Обратите внимание на 50x усиление при использовании линзы.

$I(x)$ [r.u.]



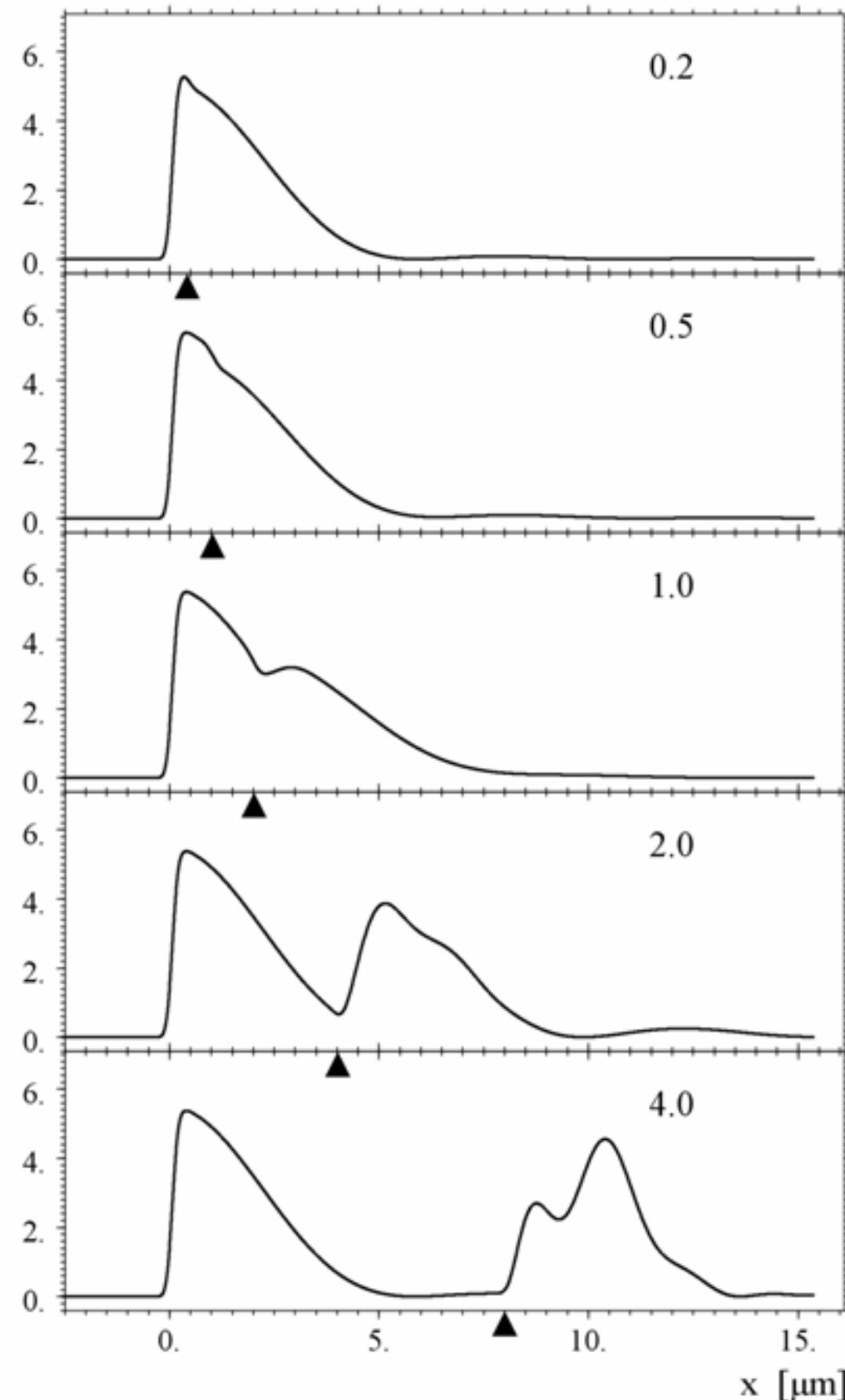
Пространственное распределение относительной интенсивности сфокусированного пучка после 111 отражения по Брэггу от эпитаксиального слоя толщиной 2 мкм на толстой подложке. И слой и подложка из кремния. Несоответствие параметра решетки в слое и в подложке $\Delta d/d = D \cdot 10^{-4}$. Значения D показаны на графике. Центр угловой апертуры линзы соответствует точному брэгговскому Положению подложки.

$I(x)$ [r.u.]



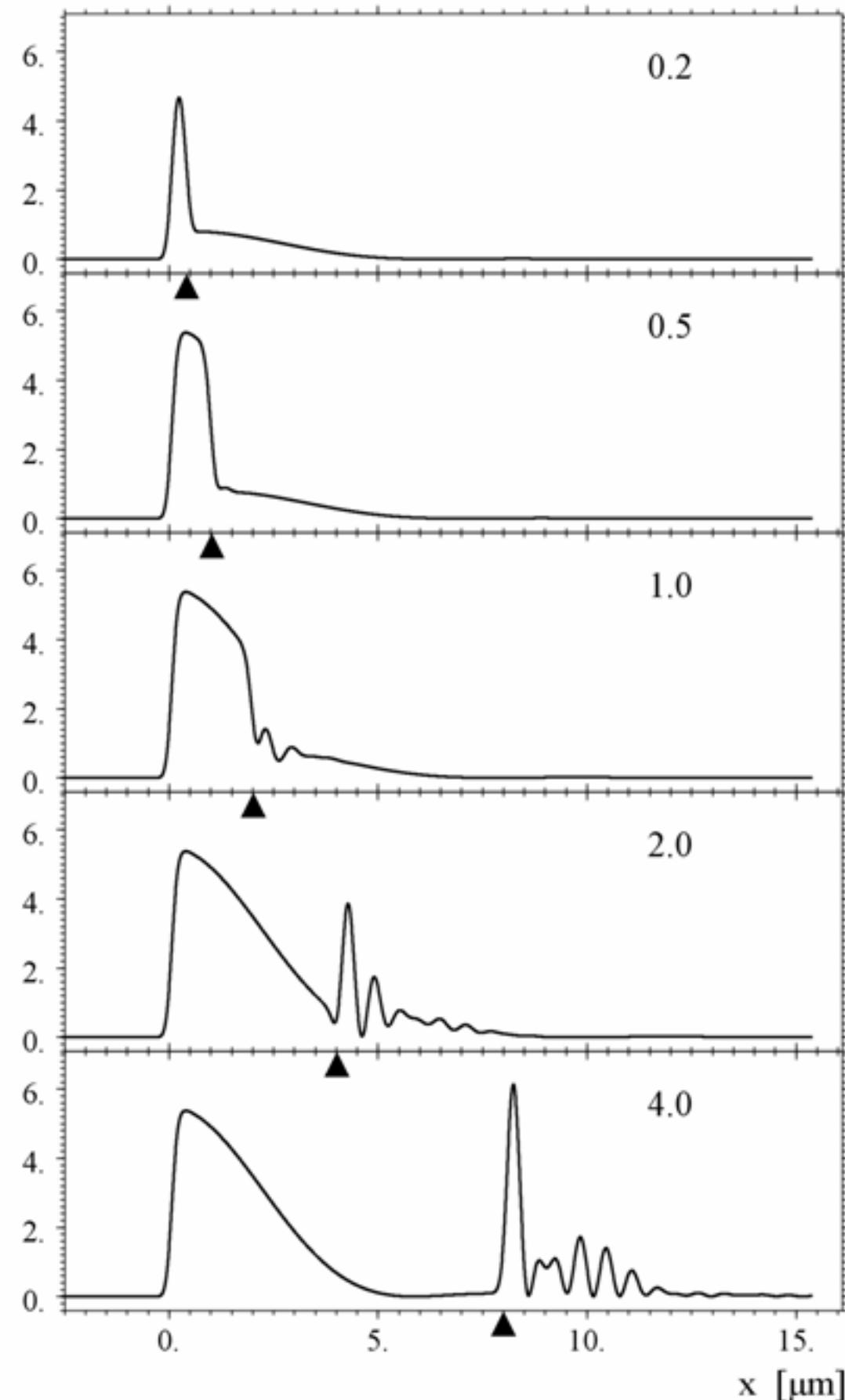
Кривые угловой зависимости относительной интенсивности для тех же условий, что и на слайде 6 и для тех же значений несоответствия параметра решетки D , кроме $D = 10$. Для $D = 10$ пик отражения от слоя сильно сдвинут вправо и выходит за пределы графика. Сравнение показывает примерно одинаковую чувствительность методов.

$I(x)$ [r.u.]



Пространственное распределение относительной интенсивности сфокусированного пучка после 111 отражения по Брэггу от эпитаксиальных слоев различной толщины на толстой подложке. И слой и подложка из кремния. Несоответствие параметра решетки в слое и в подложке $\Delta d/d = 2 \cdot 10^{-4}$. Значения толщины слоя показаны на кривых. Центр угловой апертуры линзы соответствует точному условию Брэгга для слоя. Треугольниками отмечены лучи, выходящие после отражения от границы.

$I(x)$ [r.u.]



Пространственное распределение относительной интенсивности сфокусированного пучка для тех же условий, что и на слайде 8, но для несоответствия параметров решетки $\Delta d/d = 10^{-3}$. Так как угловая апертура линзы соответствует слою, то отражение от слоя похоже на отражение от тонкого кристалла, а отражение от границы с подложкой имеет сложную структуру.

БЛАГОДАРЬ
ЗА
ВНИМАНИЕ