

Лауэ-дифракция рентгеновских пучков в многослойной структуре

Д.В. Казаков, В.И. Пунегов

Физико-математический институт
ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
г. Сыктывкар

kazakov@pmi.komisc.ru
vpunegov@pmi.komisc.ru

Аннотация

Разработана теория Лауэ-дифракции рентгеновских микропучков в мультислоях (МС). Получено решение для вычисления рентгеновских карт в обратном пространстве. Показан маятниковый эффект (Pendellösung effect) для совершенного и несовершенного МС. Выполнено численное моделирование Лауэ-дифракции в мультислое Mo/Si с граничными условиями в случае геометрической оптики и приближения Френеля. Показано, что при работе с рентгеновскими микропучками необходимо учитывать эффекты дифракции рентгеновских волн на краях щелей и коллиматоров исследовательской установки.

Ключевые слова:

Лауэ-дифракция, рентгеновские пучки, маятниковый эффект, многослойные структуры

Введение

Многослойные структуры (МС) применяются в установках синхротронного излучения для транспортировки рентгеновских пучков, фокусирования излучения, при экстремальной ультрафиолетовой литографии (EUVL) и в астрономии. Преимущественно МС выполняют функции отражателей скользящего рентгеновского излучения. Для фокусировки жестких рентгеновских лучей предложено создать многослойные Лауэ линзы [1]. Теоретические основы рентгеновской дифракции такими линзами описаны в [2]. Изготовление многослойных Лауэ линз представляет собой сложную задачу, и первым шагом в этом направлении является изучение Лауэ-дифракции в МС с постоянным периодом [3]. Поэтому в данной работе рассмотрена теория Лауэ-дифракции рентгеновских микропучков в МС с использованием формализма для пространственно-ограниченных рентгеновских полей [4, 5].

1. Динамическая Лауэ-дифракция ограниченных рентгеновских пучков в мультислое

Рассмотрим динамическую Лауэ-дифракцию рентгеновских лучей в секционированном мультислое с постоянным периодом d (рис. 1). Введем декартову систему координат: ось z направим вдоль облучаемой поверхности МС, а

Laue diffraction of X-ray beams in a multilayer structure

D.V. Kazakov, V.I. Punegov

Institute of Physics and Mathematics,
Federal Research Centre Komi Science Centre, Ural Branch, RAS,
Syktyvkar

kazakov@pmi.komisc.ru
vpunegov@pmi.komisc.ru

Abstract

The Laue diffraction theory of X-ray microbeams in multilayers (MLs) has been developed. The solution for calculating X-ray reciprocal space maps has been obtained. The pendulum (Pendellösung) effect for perfect and imperfect MLs has been demonstrated. The numerical simulation of Laue diffraction in Mo/Si multilayers with boundary conditions in the case of geometrical optics and the Fresnel approximation has been carried out. For X-ray microbeams, the scattering at the edges of collimators and slits of the diffractometer should be taken into account.

Keywords:

Laue diffraction, X-ray beams, Pendellösung effect, multilayer structures

ось x — нормально к ней. На пути распространения исходной плоской волны на расстоянии L_{S_1} от поверхности МС расположен пространственный ограничитель S_1 (коллиматор, щель), который выделяет микропучок шириной w_1 , падающий на поверхность МС под углом $\theta = \theta_B + \omega$, где ω — малый угол отклонения. Амплитуду излучения на входной поверхности обозначим через $E_0^{(in)}$; амплитуду проходящей и дифракционной волн на выходной поверхности МС обозначим E_0 и E_1 соответственно. Дифракционная интенсивность регистрируется позиционно-чувствительным детектором (PSD), расположенным на расстоянии L_{PSD} от выходной поверхности МС.

Уравнения дифракции рентгеновских лучей в пространственно-периодических структурах [4, 5], с учетом граничных условий Лауэ-дифракции, дают решение для амплитуды дифракционного микропучка в обратном пространстве

$$E_0(q_x, q_z) = \frac{\exp(i\psi L_x)}{2\pi} \mathcal{F}_0(q_x, q_z)$$
$$E_1(q_x, q_z) = i \frac{a_1 f \exp(i\psi L_x)}{2\pi} \mathcal{F}_1(q_x, q_z),$$

$$\mathcal{F}_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\cos\left(\frac{L_x \xi}{2}\right) - i \frac{\zeta \sin\left(\frac{L_x \xi}{2}\right)}{\xi/2} \right) \hat{Y}_{in}(\kappa) d\kappa$$

$$\mathcal{F}_1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{L_x \xi}{2}\right)}{\xi/2} \hat{Y}_{in}(\kappa) \hat{Y}_{ex}(\kappa - qz) d\kappa,$$

где $\xi = -\sqrt{\zeta^2 + 4fa_1a_{-1}}$, $\zeta = q_x - (q_z - 2\kappa) \tan \theta_B$, $a_0 = \pi\chi_0/(\lambda \cos \theta_B)$, $a_1 = C\pi\chi_1/(\lambda \cos \theta_B)$, $a_{-1} = a_1$, θ_B – угол Брэгга, λ – длина волны рентгеновского излучения в вакууме, C – поляризационный фактор, f – фактор затухания, зависящий от дефектов в МС.

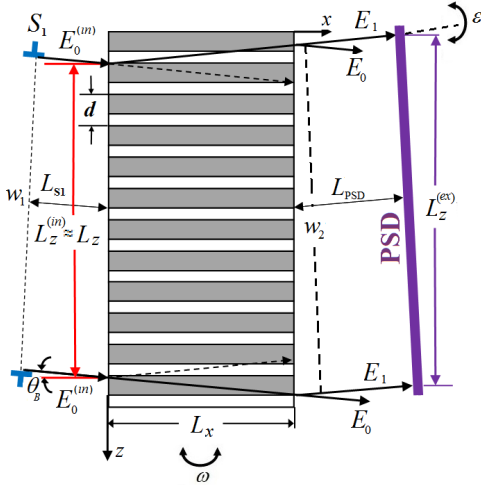


Рисунок 1. Схема Лауэ-дифракции в мультислое глубины L_x и толщины L_z : $w_{1,2}$ – поперечная ширина падающего и выходящего пучков; $L_z^{(in),(ex)}$ – проекции на ось z (направлена вдоль входной грани) поперечной ширины пучка для падающего излучения и для вышедшего из мультислоя соответственно; L_{S1} – расстояние от щели S_1 до входной грани мультислоя ($x = 0$); L_{PSD} – расстояние от выходной грани ($x = L_x$) до позиционно-чувствительного детектора PSD.

Figure 1. Laue diffraction scheme in a multilayer structure with L_x depth and L_z thickness: $w_{1,2}$ – cross-section width of incident and output beams; $L_z^{(in),(ex)}$ – cross-section projections of incident and the output beams onto the z axis (directed along the input face), respectively; L_{S1} – a distance from a S_1 slit to the multilayer's input face ($x = 0$); L_{PSD} – a distance between the output face ($x = L_x$) and the position-sensitive detector PSD.

Если период МС, как на рис. 1, образован бислоем вида $d = d_t + d_b$, то Фурье коэффициенты рентгеновской поляризуемости $\chi_{0,1}$ в направлении прохождения и дифракции равны

$$\chi_0 = \frac{\chi_t d_t + \chi_b d_b}{d},$$

$$\chi_1 = \frac{\chi_t - \chi_b}{\pi} \sin\left(\frac{\pi d_t}{d}\right).$$

Здесь $\chi_{t,b}$ и $d_{t,b}$ – Фурье коэффициенты поляризуемостей и толщины верхнего (t) и нижнего (b) слоев.

Распределение интенсивности рентгеновских волн в обратном пространстве при трехосевой схеме регистрации зависит от угловых положений образца ω и анализатора ε [6, 7]. В симметричной геометрии Лауэ эти углы связаны с проекциями отклонения вектора дифракции от вектора обратной решетки в горизонтальном и вертикальном

направлениях соотношениями $q_x = k \sin \theta_B (2\omega - \varepsilon)$ и $q_z = -k \cos \theta_B \varepsilon$. Множитель $\hat{Y}_{in}(\kappa)$ в интеграле (1) выражает граничные условия дифракционной задачи на входной поверхности МС и имеет вид

$$\hat{Y}_{in}(\kappa) = P(\kappa, L_{S1}) \frac{\sin\left(\frac{\kappa}{2} L_z^{(in)}\right)}{\frac{\kappa}{2}},$$

где $L_z^{(in)} = w_1 / \cos \theta_B$ – ширина области на входной поверхности МС, засвечиваемая падающим микропучком; $P(\kappa, L_{S1})$ – пропагатор поля рентгеновской волны в Фурье пространстве [8], который в приближении Френеля равен

$$P(\kappa, L_{S1}) = \exp\left(-i\lambda \frac{L_{S1} \kappa^2}{4\pi \cos^2 \theta_B}\right).$$

Второй множитель

$$\hat{Y}_{ex}(\kappa - qz) = P(\kappa - qz, L_{PSD}) \frac{\sin\left(\frac{\kappa - qz}{2} L_z^{(ex)}\right)}{\frac{\kappa - qz}{2}}$$

является коэффициентом пропускания дифракционной волны в Фурье пространстве. Он зависит от ширины отраженного рентгеновского пучка $L_z^{(ex)}$ и выражается через пропагатор

$$P(\kappa - qz, L_{PSD}) = \exp\left(-i\lambda \frac{L_{PSD} (\kappa - qz)^2}{4\pi \cos^2 \theta_B}\right),$$

описывающий распространение рентгеновского излучения от выходной поверхности МС до PSD. Важно отметить, что в приближении геометрической оптики пропагаторы $P(\kappa, L_{S1})$ и $P(\kappa - qz, L_{PSD})$ равны единице.

Окончательное выражение для дифракционной интенсивности в обратном пространстве, регистрируемой PSD при рассеянии ограниченного фронта рентгеновской волны в МС, запишется как

$$I_1(q_x, q_z) = |E_1(q_x, q_z)|^2.$$

Решения (1) с учетом (4) являются основными соотношениями для расчета карт рассеяния в обратном пространстве (RSM).

2. Численное моделирование

Выполним численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей от МС Mo/Si . Структурные параметры МС и характеристики падающего синхротронного излучения соответствуют параметрам и условиям работы [3]. Длина волны падающего синхротронного излучения $\lambda = 0.1305$ нм, период МС $d = d_{Mo} + d_{Si} = 7$ нм, $d_{Mo} = d_{Si} = 3.5$ нм, угол Брэгга $\theta_B = 2.25$ мкрад. Оптические константы компонент МС получены с помощью онлайн сервиса рентгеновского сервера [9].

Динамическая Лауэ-дифракция рентгеновских лучей в МС сопровождается маятниковым эффектом (Pendellösung effect), когда интенсивность рентгеновского пучка проходящей волны перекачивается в дифракционный и далее,

с увеличением глубины, наоборот, интенсивность дифрагированной волны передается в направлении проходящего. При выполнении точного условия Брэгга выражения интенсивности для проходящей и дифракционной рентгеновских волн в МС равны

$$\begin{aligned} I_0(x) &= e^{-\mu_0 x} (\cos^2 (fa_1^r x) + \sinh^2 (fa_1^i x)), \\ I_1(x) &= e^{-\mu_0 x} (\sin^2 (fa_1^r x) + \sinh^2 (fa_1^i x)), \end{aligned} \quad (5)$$

$$a_1^r = \frac{C\pi\chi_1^r}{\lambda \cos \theta_B}, \quad a_1^i = \frac{C\pi\chi_1^{im}}{\lambda \cos \theta_B},$$

где $\mu_0 = 2\text{Im}(a_0)$ – линейный коэффициент поглощения, l_{Pen} – период маятниковых осцилляций, который в симметричной геометрии Лауэ равен $l_{Pen} = \lambda |\cos \theta_B| / C / |\chi_1|$. При малых углах Брэгга $\cos \theta_B \approx 1$, период маятниковых осцилляций обратно пропорционален Фурье коэффициенту рентгеновской поляризуемости χ_1 . Для рассматриваемого МС *Mo/Si* и длины волны рентгеновского пучка $\lambda = 0.1305$ нм период маятниковых колебаний равен $l_P^{MoSi} = 38.2$ мкм.

На рис. 2 представлены распределения интенсивности проходящей и дифракционной волн по глубине, иллюстрирующие маятниковый эффект при соблюдении точного условия Брэгга: пунктирными линиями показаны результаты в совершенном МС с фактором затухания $f = 1$, а сплошными линиями – в дефектном с $f = 0.8$. Толщина МС составляет $L_x = 2l_{Pen} = 76.4$ мкм, что соответствует двум полным периодам маятниковых осцилляций. Рис. 2 (а) показывает, что при распространении рентгеновского пучка в МС интенсивность проходящей волны перекачивается в дифракционную. На глубине $x = 19.1$ мкм, отвечающей половине маятникового периода, проходящая волна переходит полностью (с поправкой на фотоэлектрическое поглощение) в дифракционную, которая достигает здесь локального максимума. С дальнейшим ростом x происходит обратный процесс. Рис. 2 (б) демонстрирует влияние дефектов. И него следует, что наличие дефектов в МС ведет к увеличению периода маятниковых осцилляций и смещению взаимного положения максимумов и минимумов интенсивностей $I_0(x)$ и $I_1(x)$. Эти изменения объясняются тем, что дефекты в МС снижают отражательную способность периодической структуры. Аналогичное влияние дефектов на маятниковые осцилляции наблюдается в случае динамической Лауэ-дифракции в кристалле [10].

Зная глубину залегания максимумов и минимумов дифракционной интенсивности в МС *Mo/Si*, приступим к численному моделированию RSM. Расчеты выполним для МС с секционной толщиной $L_x = \text{argmax}(I_1(x)) = l_P^{MoSi}/2 = 19.2$ мкм L_x , при которой интенсивность дифракционной волны достигает максимума, и с толщиной $L_x = \text{argmin}(I_1(x)) = l_P^{MoSi} = 38.2$ мкм, отвечающей минимуму (рис. 2).

Результаты моделирования в рамках геометрической оптики для МС с $L_x = l_P^{MoSi}/2$ приведены на рис. 3 (а), для МС с $L_x = l_P^{MoSi}$ – на рис. 3 (б). Сравнивая между собой полученные карты, можно заметить, что для МС с секционной глубиной, равной полному периоду маятниковых осцилляций, возникает расщепление главного дифракци-

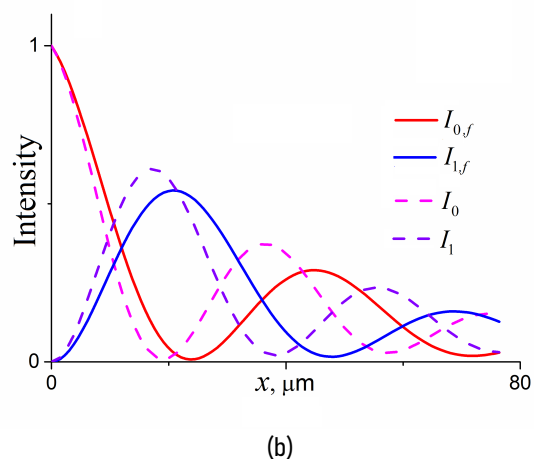
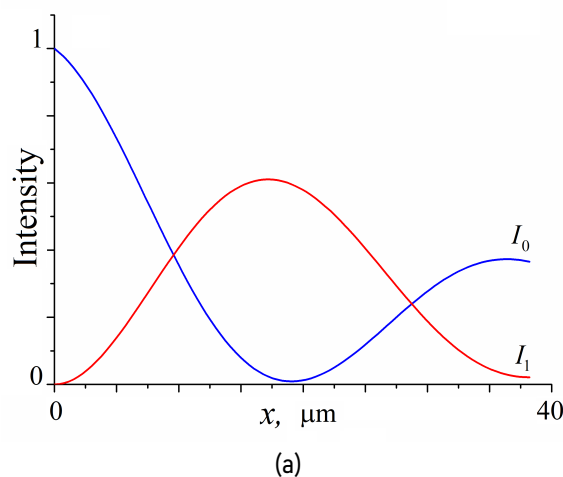


Рисунок 2. Маятниковый эффект (Pendelösung effect) в совершенном (а) и несовершенном (б) мультислое *Mo/Si*: кривые $I_{0,f}$, $I_{1,f}$ – проходящая и дифракционная интенсивности в несовершенном мультислое с фактором затухания $f = 0.8$; кривые I_0 , I_1 – проходящая и дифракционная интенсивности в совершенном мультислое с фактором затухания $f = 1$.

Figure 2. Pendelösung effect within perfect (a) and imperfect (b) *Mo/Si* multilayers: curves $I_{0,f}$, $I_{1,f}$ – transmission and diffraction intensities in an imperfect multilayer with damping factor $f = 0.8$; curves I_0 , I_1 – transmission and diffraction intensities in a perfect multilayer with damping factor $f = 1$.

онного пика рис. 3 (б). Данное расщепление объясняется тем фактом, что в точных условиях Брэгга $q_x = q_z = 0$ на глубине $x = L_x = l_P^{MoSi}$ основная часть дифракционной интенсивности перекачивается в проходящий пучок, из-за чего на RSM вблизи точки $q_x = q_z = 0$ возникает провал, но поскольку $I_1(l_P^{MoSi})$ не достигает нуля, то и значения интенсивности в окрестности данной точки не нулевые. Однако если угол падения будет отклоняться от точного условия Брэгга, то будет меняться характер распределения маятниковых осцилляций по глубине МС, в частности сократятся амплитуда и длина периода. В результате таких изменений интенсивность дифракционной волны в точке $x = l_P^{MoSi}$ не будет соответствовать положению минимума, что повлечет рост регистрируемой интенсивности. При определенных значениях угла ω может сложиться ситуация, при которой там, где при точном соблюдении условия Брэгга наблюдался минимум, расположится локальный максимум.

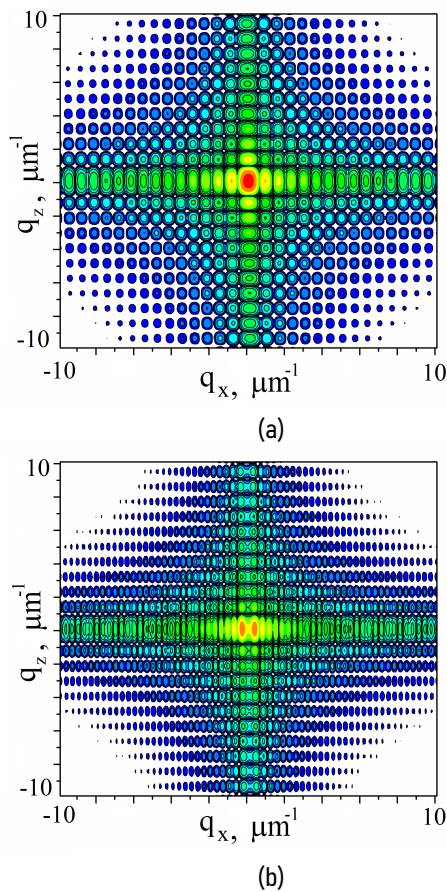


Рисунок 3. Карты рассеяния в обратном пространстве дифракционной интенсивности синхротронного излучения с энергией 9.5 кэВ от мультислоя Mo/Si с граничными условиями в приближении геометрической оптики: (a) – $L_x = l_P^{MoSi}/2$; (b) – $L_x = l_P^{MoSi}$.
 Figure 3. Calculated RSMs of diffraction intensity from a Mo/Si multilayer with a synchrotron radiation energy of 9.5 keV in the case of the boundary conditions in the geometrical optics approximation: (a) – $L_x = l_P^{MoSi}/2$; (b) – $L_x = l_P^{MoSi}$.

Аналогичные расчеты выполним для пространственно-ограниченной рентгеновской волны с граничными условиями в приближении Френеля. Расстояние от щели до поверхности МС равно $L_{S1} = 30$ мм, расстояние от выходной поверхности до PSD $L_P = 40$ мм, ширина падающего пучка $w_1 \approx L_z = 14$ мкм (см. рис. 1). Результаты моделирования представлены на рис. 4. Сравнивая полученные RSM с картами, представленными на рис. 3, легко заметить, что угловые распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей в случае геометрической оптики и в приближении Френеля сильно отличаются. Тем не менее характерное расщепление центрального пика МС толщиной $L_x = l_P^{MoSi}$ сохранилось.

Заключение

Таким образом, мы теоретически исследовали Лауэ-дифракцию рентгеновских микропучков в секционированных мультислоях. Как в геометрии Брэгга [4], так и для случая Лауэ-дифракции микропучков при выполнении расчетов RSM всегда необходимо правильно выбирать граничные условия в приближении Френеля. Важно, что решение (1) справедливо только для мультислоев с постоянным пери-

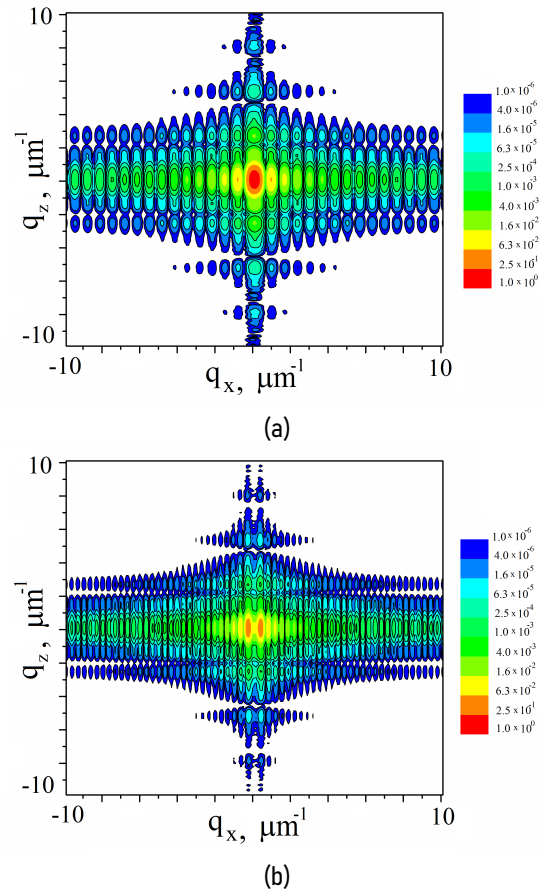


Рисунок 4. Карты рассеяния в обратном пространстве дифракционной интенсивности синхротронного излучения с энергией 9.5 кэВ от мультислоя Mo/Si с граничными условиями в приближении Френеля: (a) – $L_x = l_P^{MoSi}/2$; (b) – $L_x = l_P^{MoSi}$; $L_{S1} = 30$ мм и $L_P = 40$ мм.
 Figure 4. Calculated RSMs of diffraction intensity from a Mo/Si multilayer with a synchrotron radiation energy of 9.5 keV in the case of Fresnel boundary conditions: (a) – $L_x = l_P^{MoSi}/2$; (b) – $L_x = l_P^{MoSi}$; $L_{PSD} = 40$ мм.

одом. При исследовании аperiодических многослойных структур необходимо численно интегрировать уравнения рентгеновской дифракции [2].

Литература

1. Maser, J. Multilayer Laue lenses as high-resolution X-ray optics / J. Maser, G.B. Stephenson, S. Vogt, Y. Wenbing, A. Macrander [et al.] // Proceedings of SPIE. – 2004. – Vol. 5539. – P. 185–194.
2. Пунегов, В.И. Влияние рассогласования толщин слоев на фокусировку рентгеновских лучей многослойными Лауэ линзами / В.И. Пунегов // Письма в ЖЭТФ. – 2020. – Т. 111. – № 7. – С. 448–454.
3. Kang, H.C. High-efficiency diffractive x-ray optics from sectioned multilayers / H.C. Kang, G.B. Stephenson, C. Liu, R. Conley, A.T. Macrander [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2005. – Vol. 86. – P. 151109 (1–3).
4. Punegov, V.I. X-ray microbeam diffraction in a crystal / V.I. Punegov, A.V. Karpov // Acta Crystallogr. A. – 2021. – Vol. 77. – P. 117–125.
5. Punegov, V.I. Applications of dynamical theory of X-ray diffraction by perfect crystals to reciprocal space map-

- ping / V.I. Punegov, K.M. Pavlov, A.V. Karpov, N.N. Faleev // *J. Appl. Crystallogr.* – 2017. – Vol. 50. – P. 1256–1266.
6. Пунегов, В.И. Высокораesшающая рентгеновская дифракция в кристаллических структурах с квантовыми точками / V.I. Punegov // *УФН.* – 2015. – Т. 185. – № 5. – С. 449–478.
 7. Iida, A. Separate measurements of dynamical and kinematical X-ray diffractions from silicon crystals with a triple crystal diffractometer / A. Iida, K. Kohra, A.V. Karpov, N.N. Faleev // *Physica Status Solidi (A).* – 1979. – Vol. 51. – P. 533–542.
 8. Kohn, V.G. Theory of imaging a perfect crystal under the conditions of X-ray spherical wave dynamical diffraction / V.G. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev, N.N. Faleev // *Physica Status Solidi (B).* – 2000. – Vol. 222. – P. 407–423.
 9. Stepanov, S. Fitting dynamical X-ray diffraction data over the World Wide Web / S. Stepanov, R. Forrest // *J. Appl. Crystallogr.* – 2008. – Vol. 41. – P. 958–962.
 10. Пунегов, В.И. Влияние дефектов структуры на угловое распределение рентгеновской Лауэ-дифракции в тонком кристалле / В.И. Пунегов, К.М. Павлов // *Письма в ЖТФ.* – 1992. – Т. 18. – № 12. – С. 60–64.

References

1. Maser, J. Multilayer Laue lenses as high-resolution X-ray optics / J. Maser, G.B. Stephenson, S. Vogt, Y. Wenbing, A. Macrander [et al.] // *Proceedings of SPIE.* – 2004. – Vol. 5539. – P. 185–194.
2. Punegov, V.I. Vliyaniye rassoglasovaniya tolshchin sloev na fokusirovku rentgenovskikh luchey mnogoslownymi Laue linzami [Effect of the mismatch of layer thicknesses on the focusing of X-rays by multilayer Laue lens] / V.I. Punegov // *J. Exp. Theor. Phys.* – 2020. – Vol. 111. – № 7. – P. 376–382.
3. Kang, H.C. High-efficiency diffractive x-ray optics from sectioned multilayers / H.C. Kang, G.B. Stephenson, C. Liu, R. Conley, A.T. Macrander [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – Vol. 86. – P. 151109 (1–3).
4. Punegov, V.I. X-ray microbeam diffraction in a crystal / V.I. Punegov, A.V. Karpov // *Acta Crystallogr. A.* – 2021. – Vol. 77. – P. 117–125.
5. Punegov, V.I. Applications of dynamical theory of X-ray diffraction by perfect crystals to reciprocal space mapping / V.I. Punegov, K.M. Pavlov, A.V. Karpov, N.N. Faleev // *J. Appl. Crystallogr.* – 2017. – Vol. 50. – P. 1256–1266.
6. Punegov, V.I. Vysokorazreshayushchaya rentgenovskaya difraktsiya v kristallicheskikh strukturakh s kvantovymi tochkami [High-resolution X-ray diffraction in crystalline structures with quantum dots] / V.I. Punegov // *Uspekhi fizicheskikh nauk [Advances in Physical Sciences].* – 2015. – Vol. 58. – P. 419–445.
7. Iida, A. Separate measurements of dynamical and kinematical X-ray diffractions from silicon crystals with a triple crystal diffractometer / A. Iida, K. Kohra, A.V. Karpov, N.N. Faleev // *Physica Status Solidi (A).* – 1979. – Vol. 51. – P. 533–542.
8. Kohn, V.G. Theory of imaging a perfect crystal under the conditions of X-ray spherical wave dynamical diffraction / V.G. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev, N.N. Faleev // *Physica Status Solidi (B).* – 2000. – Vol. 222. – P. 407–423.
9. Stepanov, S. Fitting dynamical X-ray diffraction data over the World Wide Web / S. Stepanov, R. Forrest // *J. Appl. Crystallogr.* – 2008. – Vol. 41. – P. 958–962.
10. Punegov, V.I. Vliyaniye defektov struktury na uglovoe raspredeleniye rentgenovskoy Laue-difraktsii v tonkom kristalle [Effect of structural defects on the angular distribution of x-ray Laue diffraction in a thin crystal] / V.I. Punegov, K.M. Pavlov // *Pis'ma v ZhTF [Soviet technical physics letters].* – 1992. – Vol. 18. – № 6. – P. 390–391.

Для цитирования:

Казаков, Д.В. Лауэ-дифракция рентгеновских пучков в многослойной структуре / Д.В. Казаков, В.И. Пунегов // *Известия Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук. Серия «Физико-математические науки».* – 2022. – № 5 (57). – С. 89–93. УДК: 539.231. DOI: 10.19110/1994-5655-2022-5-89-93

For citation:

Kazakov, D.V. Laue diffraction of X-ray beams in a multilayer structure / D.V. Kazakov, V.I. Punegov // *Proceedings of the Komi Science Centre of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences. Series "Physical and Mathematical Sciences".* – 2022. – № 5 (57). – P. 89–93. UDC: 539.231. DOI: 10.19110/1994-5655-2022-5-89-93

Дата поступления рукописи: 08.08.2022

Received: 08.08.2022