

09

Дифракция рентгеновских пучков от изогнутого градиентного кристалла $\text{Ge}_{1-y}\text{Si}_y$

© В.И. Пунегов

Физико-математический институт ФИЦ „Коми научный центр УрО РАН“, Сыктывкар, Россия

E-mail: vrunegov@ipm.komisc.ru

Поступило в Редакцию 30 июня 2026 г.

В окончательной редакции 10 июля 2026 г.

Принято к публикации 11 июля 2026 г.

С использованием двумерных рекуррентных соотношений исследовано распределение интенсивности рассеяния рентгеновского пучка вблизи узла обратной решетки от изогнутого градиентного кристалла $\text{Ge}_{1-y}\text{Si}_y$ в зависимости от радиуса изгиба и концентрации примеси y . Выполнено численное моделирование картирования дифрагированной интенсивности в обратном пространстве.

Ключевые слова: изогнутый градиентный кристалл, картирование интенсивности рентгеновского рассеяния в обратном пространстве, двумерные рекуррентные соотношения.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.21.63656.20827

Рентгенодифракционные исследования выигрывают, если используется коллиматор излучения, обеспечивающий параллельный пучок с малым поперечным сечением. В середине 90-х годов XX века были получены первые экспериментальные данные по новым рентгенооптическим элементам для источников синхротронного излучения. К таким элементам относятся аперийодические кристаллы с латеральным градиентом на основе твердых растворов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [1]. Такие структуры выращивались методом Чохральского.

Период решетки такого кристалла, содержащего до нескольких атомных процентов Ge в монокристалле кремния, изменялся линейно вдоль плоскости дифракции. Это компенсировало изменение угла Брэгга расходящегося падающего излучения на кристалл. Поэтому открываются возможности применения кристаллических монохроматоров без коллимирующего зеркала. Технологические успехи в выращивании кристаллов твердых растворов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [1] делают эту цель достижимой. Высокое качество этих кристаллов экспериментально подтверждено в условиях дифракции в геометрии Лауэ [2]. В последующем исследовании (уже в случае Брэгга) показано, что градиентные кристаллы позволяют создавать высококачественные коллиматоры пучков, преодолевая ограничения на увеличение потока, накладываемые плоскими или изогнутыми монокристаллами [3]. В [3] на основе асимметричных градиентных кристаллов предложено несколько типов коллиматоров, обеспечивающих параллельный рентгеновский пучок с малым поперечным сечением.

Благодаря уникальным свойствам градиентные коллиматоры на основе твердых растворов находят применение в рентгеновской оптике. В случае горизонтальной фокусировки синхротронных пучков градиентный коллиматор может иметь более широкую угловую апертуру, чем отражающее зеркало. Высокая параллельность пуч-

ка возможна без значительного увеличения фокусного расстояния существующей оптики. Это улучшает характеристики пучка в условиях жестких пространственных ограничений. Имеется возможность получения чрезвычайно широких пучков для приложений визуализации больших площадей [4].

Автоматизированное управление формой кристалла в процессе роста методом Чохральского позволяет достигать постоянного градиента концентрации путем непрерывного уменьшения диаметра кристалла [5]. Градиентные кристаллы могут быть образованы и другими методами, например в результате ионной имплантации [6], при создании метаморфных подложек, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии [7], и за счет диффузионного внедрения примеси [8].

Первые тесты градиентного рентгеновского монохроматора $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ на установке BESSY были проведены в 1999 г. Использовались методы рентгеновской топографии, а также измерения кривых качения и энергетических спектров при заданном угле Брэгга [4]. Однако эти методы менее информативны по сравнению с измерением карт распределения интенсивности рентгеновского рассеяния в обратном пространстве (X -ray reciprocal space maps, RSM), которые в последнее время широко применяются для исследования различных периодических и аперийодических структур [6,9].

Двумерные рекуррентные соотношения (ДРС) впервые были получены в работе [10]. Для совершенного кристалла исследовался переход от ДРС к уравнениям Такаги–Топена [11]. Было показано, что эти два подхода эквивалентны, при этом ДРС описывают дифракцию в дискретно-слоистой структуре, в то время как уравнения Такаги–Топена применимы для случая континуальной периодической среды.

На рис. 1 показана схема дифракции рентгеновского пучка от изогнутого градиентного кристалла.

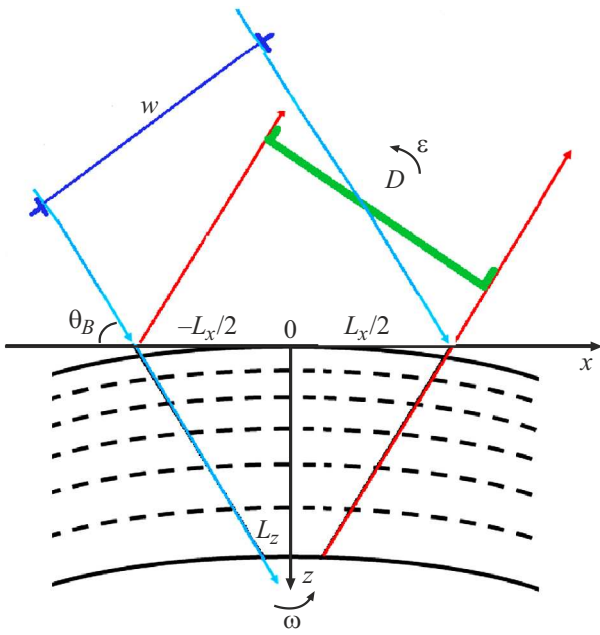


Рис. 1. Схематическое изображение дифракции рентгеновского пучка от изогнутого градиентного кристалла. Толщина кристалла $L_z = 20 \mu\text{m}$, поперечный размер падающего пучка $w = 100 \mu\text{m}$, ширина засветки входной поверхности $L_x = 140 \mu\text{m}$. D — позиционно чувствительный детектор; ω, ε — угловое положение образца и анализатора (позиционно чувствительного детектора D).

ДРС для проходящей (T) и дифрагированной (S) волн в случае деформированной периодической структуры имеют вид

$$\begin{aligned} T_{n+1}^m &= (aT_n^{m-1} + b_1S_n^{m-1})f_{n+1}^m, \\ S_n^m &= (aS_{n+1}^{m-1} + b_2T_{n+1}^{m-1})g_n^m, \end{aligned} \quad (1)$$

где $a = (1 - iq_0) \exp(i\varphi)$, $b_1 = -i\bar{q} \exp(i\varphi)$, $b_2 = -iq \exp(i\varphi)$, $\bar{q} = C\pi\chi_{-h}d/(\lambda\gamma_0)$, $q = C\pi\chi_h d/(\lambda\gamma_0)$, d — период структуры, λ — длина волны рентгеновского излучения, C — фактор поляризации рентгеновских лучей, $\gamma_0 = \sin \theta_B$, θ_B — угол Брэгга, $\chi_{0,-h,h} = -r_0\lambda^2 F_{0,-h,h}/(\pi V_c)$ — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, V_c — объем элементарной ячейки, $r_0 = e^2/(mc^2)$ — классический радиус электрона, e, m — заряд и масса электрона, $F_{0,-h,h}$ — структурные факторы. Коэффициент $\varphi = 2\pi d(\lambda \sin \theta_B)^{-1}$ в ДРС учитывает разность фаз, возникающую при распространении рентгеновского пучка в периодической структуре от одного узла до другого на сетке, для численных расчетов совершенной периодической структуры. Коэффициенты $f_n^m = \exp(ih\Delta u_{m-1,n-1})$ и $g_n^m = \exp(-ih\Delta u_{m-1,n+1})$ являются аналогами фазовых факторов в уравнениях Такаги–Топена, возникающих из-за деформаций кристаллической решетки. Здесь $\Delta u_{m-1,n-1} = u_{m,n} - u_{m-1,n-1}$ и $\Delta u_{m-1,n+1} = u_{m,n} - u_{m-1,n+1}$, $u_{m,n}$ — смещение узла

(m, n) на двумерной вычислительной сетке. Поскольку для диагональных элементов тензора деформаций и изменения поля атомных смещений имеется связь вида $\Delta u_j = \varepsilon_{jj} \Delta l$, в случае дискретно-слоистой среды можно записать $\Delta u_{m,n} \approx \varepsilon_{m,n} \Delta l$, где $\varepsilon_{m,n}$ — деформация кристаллической решетки в точке с координатами (m, n) , $\Delta l \approx \sqrt{(\Delta d)^2 + (\Delta[\Delta x])^2}$ — элементарное расстояние, на котором изменяются атомные смещения, d и Δx — расстояния между узлами на расчетной дискретной сетке двумерных рекуррентных соотношений.

Численное моделирование карт распределения дифрагированной интенсивности в обратном пространстве выполнено для кристалла $\text{Ge}_{1-y}\text{Si}_y$, где концентрация примеси y линейно изменяется от нуля на поверхности до 0.003 на нижней границе кристалла (толщина кристалла $L_z = 20 \mu\text{m}$). Использовано отражение (333) σ -поляризованного излучения (фактор поляризации $C = 1$) с длиной волны $\lambda = 0.154 \text{ nm}$. Поперечный размер падающего рентгеновского пучка составлял $100 \mu\text{m}$. Размер засветки входной поверхности кристалла равен $140 \mu\text{m}$. Деформация в кристалле из-за композиционного изменения состава определялась по формуле $\varepsilon_{\text{GeSi}} = (d_{\text{Si}} - d_{\text{Ge}})y/d_{\text{Ge}}$, где d_{Si} и d_{Ge} — межплоскостные расстояния в кристаллах кремния и германия соответственно. Радиус изгиба R кристалла $\text{Ge}_{1-y}\text{Si}_y$ в процедуре вычисления картирования изменялся.

Вычисления проводились применительно к трехосевой дифрактометрии. Угол поворота образца ω и анализатора ε связаны с проекциями q_x и q_z вектора $\mathbf{q} = \mathbf{Q} - \mathbf{h}$ соотношениями $q_x = (2\pi/\lambda) \sin \theta_B (2\omega - \varepsilon)$, $q_z = -(2\pi/\lambda) \cos \theta_B \varepsilon$, где $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$ — вектор дифракции, $\mathbf{h}$ — вектор обратной решетки, $\mathbf{k}_h$ и $\mathbf{k}_0$ — волновые векторы дифракционной и падающей волны соответственно.

На рис. 2, *a* приведены расчетные карты RSM от недеформированного кристалла германия. Наличие линейного изменения концентрации кремния y с глубиной от 0 до 0.003 в твердом растворе $\text{Ge}_{1-y}\text{Si}_y$ приводит к удлинению полосы главного пика в вертикальном направлении (рис. 2, *b*). Влияние слабого изгиба кристалла $\text{Ge}_{1-y}\text{Si}_y$ ($R = 5 \text{ m}$) на формирование контуров равной интенсивности в обратном пространстве демонстрирует рис. 2, *c*. Распределение интенсивности рассеяния для сильноизогнутого кристалла ($R = 1 \text{ m}$) показано на рис. 2, *d*.

Таким образом, в работе впервые представлены расчетные карты распределения интенсивности рассеяния рентгеновского пучка в обратном пространстве от изогнутого градиентного кристалла.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Физико-математического института ФИЦ „Коми НЦ УрО РАН“ по теме НИР № 125020501562-1.

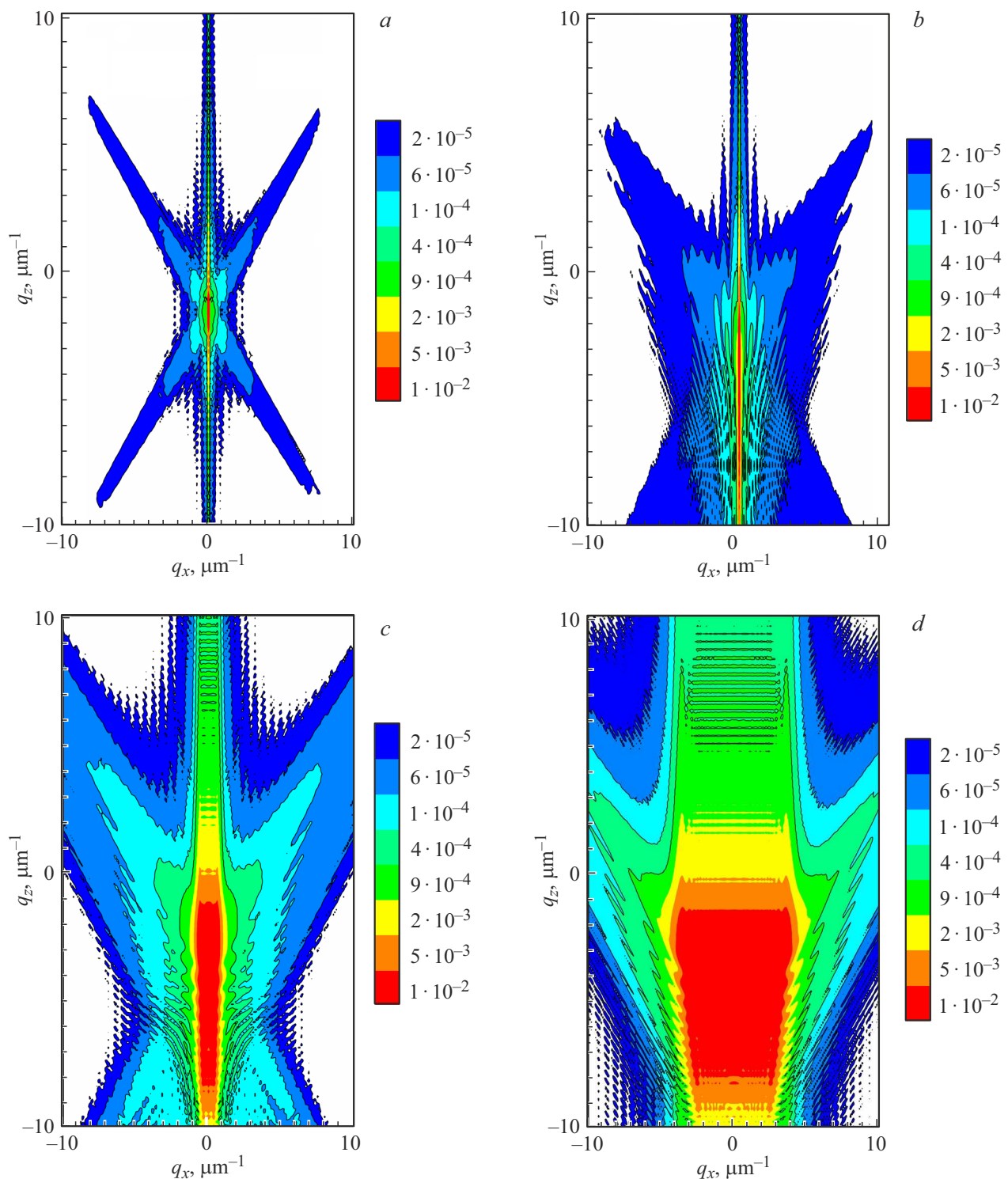


Рис. 2. Расчетные карты распределения интенсивности рассеяния рентгеновского пучка от градиентного кристалла $\text{Ge}_{1-y}\text{Si}_y$. *a* — совершенный кристалл Ge, отсутствие изгиба и $y = 0$; *b* — градиентный кристалл; *c* — изогнутый градиентный кристалл, радиус изгиба $R = 5$ м; *d* — изогнутый градиентный кристалл, радиус изгиба $R = 1$ м. На фрагментах *b–d* концентрация y линейно изменяется с глубиной от 0 до 0.003. Цветное изображение рисунка представлено в электронной версии статьи.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A. Erko, F. Schaefer, W. Gudat, K.J. Sawhney, N.V. Abrosimov, S.N. Rossolenko, V. Alex, S. Groth, S.W. Schroeder, *Proc. SPIE*, **2856**, 110 (1996). DOI: 10.1117/12.259855
- [2] S. Keitel, C. Malgrange, T. Niemueller, J.R. Schneider, *Acta Cryst. A*, **55**, 855 (1999). DOI: 10.1107/S010876739900313X
- [3] P. Petrashen, A. Erko, *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A*, **467-468**, 358 (2001). DOI: 10.1016/S0168-9002(01)00324-2
- [4] A. Erko, N.V. Abrosimov, V. Alex, *Cryst. Res. Technol.*, **37**, 685 (2002). DOI:10.1002/1521-4079(200207)37:7<685::AID-CRAT685>3.0.CO;2-Z
- [5] N.V. Abrosimov, V.N. Kurlov, R. Schewski, J. Winkler, *Cryst. Res. Technol.*, **55**, 1900097 (2020). DOI: 10.1002/crat.201900097
- [6] D. Mello, A. Severino, E. Burrese, G. Anastasi, N. Piluso, M. Arena, L. Tapfer, *J. Appl. Phys.*, **137**, 175705 (2025). DOI: 10.1063/5.0250757
- [7] М.В. Байдакова, Д.А. Кириленко, А.А. Ситникова, М.А. Яговкина, Г.В. Клишко, С.В. Сорокин, И.В. Седова, С.В. Иванов, А.Е. Романов, *Письма в ЖТФ*, **42** (9), 40 (2016). [M.V. Baidakova, D.A. Kirilenko, A.A. Sitnikova, M.A. Yagovkina, G.V. Klimko, S.V. Sorokin, I.V. Sedova, S.V. Ivanov, A.E. Romanova, *Tech. Phys. Lett.*, **42** (5), 464 (2016). DOI: 10.1134/S1063785016050023].
- [8] A. Fukuhara, Y. Takano, *J. Appl. Cryst.*, **13**, 391 (1980). DOI: 10.1107/S0021889880012368
- [9] В.И. Пунегов, *УФН*, **185** (5), 449 (2015). DOI: 10.3367/UFNe.0185.201505a.0449 [V.I. Punegov, *Phys. Usp.*, **58** (5), 419 (2015). DOI: 10.3367/UFNe.0185.201505a.0449].
- [10] V.I. Punegov, S.I. Kolosov, K.M. Pavlov, *Acta Cryst. A*, **70**, 64 (2014). DOI: 10.1107/S2053273313030416
- [11] V.I. Punegov, S.I. Kolosov, *J. Appl. Cryst.*, **55**, 320 (2022). DOI: 10.1107/S1600576722001686