09

Дифракция рентгеновских пучков от изогнутого градиентного кристалла $Ge_{1-y}Si_y$

© В.И. Пунегов

Физико-математический институт ФИЦ „Коми научный центр УрО РАН“, Сыктывкар, Россия
E-mail: vpunegov@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 $Ge_{1-y}Si_y$ 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 апериодические кристаллы с латеральным градиентом на основе твердых растворов $Si_{1-x}Ge_x$ [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 $Si_{1-x}Ge_x$ [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 пучка 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 $Si_{1-x}Ge_x$ на установке BESSY были проведены в 1999 г. Использовались методы рентгеновской топографии, а также измерения кривых качания 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 апериодических 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.

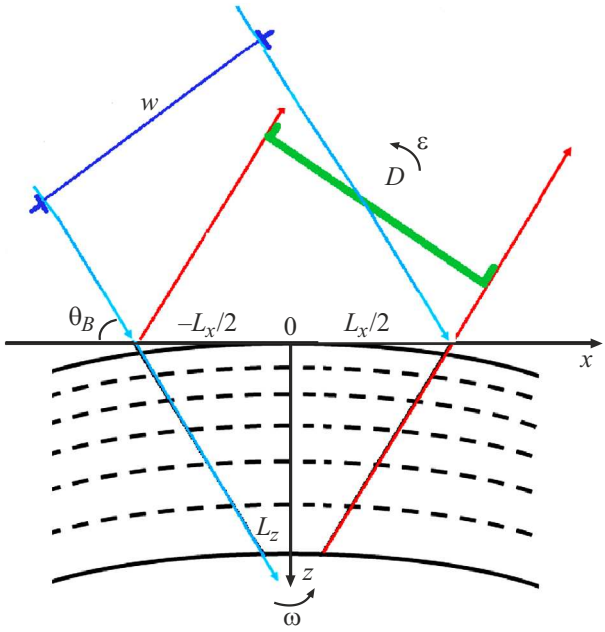


Рис. 1. Схематическое изображение дифракции рентгеновского пучка от изогнутого градиентного кристалла. Толщина кристалла $L_z = 20\,\mu$m, поперечный размер падающего пучка $w = 100\,\mu$m, ширина засветки входной поверхности $L_x = 140\,\mu$m. D — позиционно-чувствительный детектор; ω, ε — угловое положение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

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

$$T_{n+1}^m = \left(aT_n^{m-1} + b_1 S_n^{m-1}\right) f_{n+1}^m,$$

$$S_n^m = \left(aS_{n+1}^{m-1} + b_2 T_{n+1}^{m-1}\right) g_n^m, \qquad (1)$$

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 $\partial u_j = \varepsilon_{jj}\partial j$, 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 $Ge_{1-y}Si_y$, где концентрация примеси y линейно изменяется от нуля на поверхности до 0.003 на нижней границе кристалла (толщина кристалла $L_z = 20\,\mu$m). Использовано отражение (333) σ-поляризованного излучения (фактор поляризации $C = 1$) с длиной волны $\lambda = 0.154$ nm. Поперечный размер падающего рентгеновского пучка составлял $100\,\mu$m. Размер засветки входной поверхности кристалла равен $140\,\mu$m. Деформация в кристалле из-за композиционного изменения состава определялась по формуле $\varepsilon_{GeSi} = (d_{Si} - d_{Ge})y/d_{Ge}$, где d_{Si} и d_{Ge} — межплоскостные расстояния в кристаллах кремния и германия соответственно. Радиус изгиба R кристалла $Ge_{1-y}Si_y$ 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 $Ge_{1-y}Si_y$ приводит к удлинению полосы главного пика в вертикальном направлении (рис. 2, *b*). Влияние слабого изгиба кристалла $Ge_{1-y}Si_y$ ($R = 5$ m) на формирование контуров равной интенсивности в обратном пространстве демонстрирует рис. 2, *c*. Распределение интенсивности рассеяния для сильноизогнутого кристалла ($R = 1$ 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.

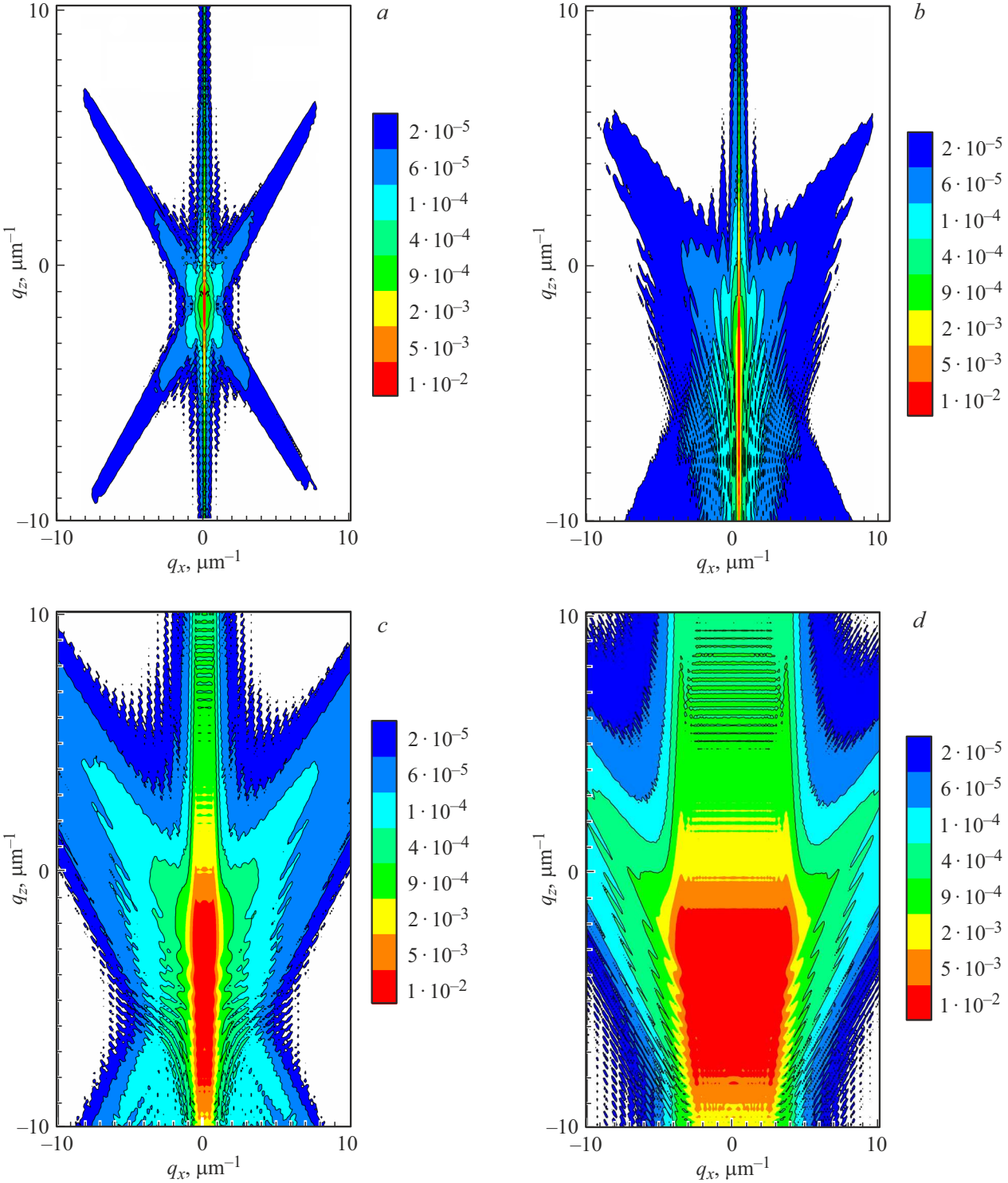


Рис. 2. Расчетные карты распределения интенсивности рассеяния рентгеновского пучка от градиентного кристалла $Ge_{1-y}Si_y$. *a* — совершенный кристалл Ge, отсутствие изгиба и $y = 0$; *b* — градиентный кристалл; *c* — изогнутый градиентный кристалл, радиус изгиба $R = 5$ m; *d* — изогнутый градиентный кристалл, радиус изгиба $R = 1$ m. На фрагментах *b*–*d* концентрация y линейно изменяется с глубиной от 0 до 0.003. Цветной вариант рисунка представлен в электронной версии статьи.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] A. Erko, F. Schaefers, 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. Burresi, 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. Климко, 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. Romanov, 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