09

Лауэ-дифракция рентгеновских пучков в клиновых многослойных структурах

© В.И. Пунегов

Физико-математический институт ФИЦ „Коми научный центр УрО РАН“, Сыктывкар, Россия
E-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

Поступило в Редакцию 17 сентября 2025 г.
В окончательной редакции 13 октября 2025 г.
Принято к публикации 29 октября 2025 г.

Исследовано динамическое рентгеновское рассеяние в секционной клиновой многослойной структуре в случае Лауэ. Получены новые рекуррентные соотношения, описывающие дифракцию пространственно ограниченных рентгеновских пучков в периодической градиентной системе. Вычислены карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве для клиновой многослойной структуры W/Si в случае геометрической оптики и приближения Френеля. Показано, что расчетные q_x-сечения карт для геометрической оптики и приближения Френеля совпадают, при этом q_z-сечения существенно различаются.

Ключевые слова: клиновая многослойная структура, динамическая лауэ-дифракция, пространственно ограниченные рентгеновские пучки, геометрическая оптика, приближение Френеля.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.04.62325.20501

В работе [1] показано, что предложенные в [2] многослойные лауэ-линзы не позволяют фокусировать синхротронное излучение до размеров пятна в несколько нанометров. Это находится в противоречии с результатами исследований других научных коллективов [3,4]. Спорным является также мнение, что лучшие фокусирующие свойства обеспечивают клиновые лауэ-линзы [5]. Вычисление карт распределения интенсивности рентгеновского рассеяния в обратном пространстве (reciprocal space maps, RSM) от многослойных лауэ-линз является весьма сложной задачей, тем более от линз с клиновым распределением периода многослойной системы. Поэтому первым шагом в решении данной проблемы является исследование дифракции от секционной клиновой многослойной структуры (МС), в которой в каждой локальной точке по глубине системы (в горизонтальном направлении по оси x, рис. 1) период линейно изменяется, а в направлении по толщине остается постоянным (в вертикальном направлении по оси z).

Для падающей плоской рентгеновской волны на секционную клиновую МС в геометрии Лауэ численно исследованы кривые дифракционного отражения [6]. Показаны профили коэффициентов отражения и прохождения в зависимости от градиента изменения периода в глубь многослойной системы вдоль оси x. Однако плоской, бесконечно широкой рентгеновской волны в природе не существует. В реальном эксперименте рентгеновские пучки ограничены щелями, коллиматорами или фокусирующей оптикой. Кроме того, в рамках модели плоской рентгеновской волны невозможно выполнить вычисления карт RSM [7]. Отметим, что лауэ-дифракция ограниченных рентгеновских пучков в многослойной системе Mo/Si с постоянным вдоль оси x периодом рассмотрена в [8]. С другой стороны, угловое распределение интенсивности рассеяния ограниченных рентгеновских пучков в обратном пространстве от клиновых МС в геометрии Лауэ ранее не исследовалось. Поэтому цель настоящей работы состоит в разработке вычислительного алгоритма для расчетов карт RSM от многослойных систем с градиентом изменения периода по глубине структуры в рамках геометрической оптики (ГО) и приближения Френеля (ПФ).

При прохождении излучения через щель или какой-либо другой оптический элемент, ограничивающий фронт волнового поля, различают три функции пропускания, относящиеся к геометрической оптике, а также к приближению Френеля и Фраунгофера. В случае ГО не

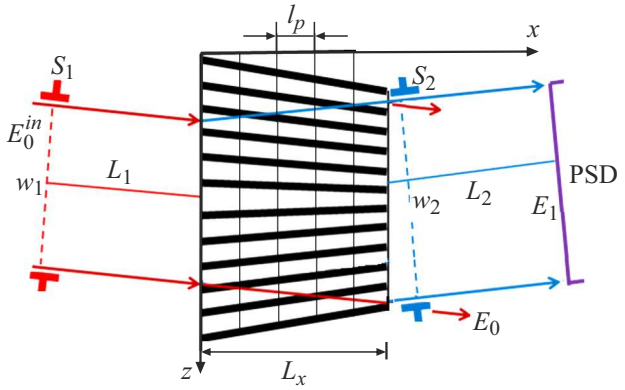

Рис. 1. Схема лауэ-дифракции в клиновой МС глубиной L_x. $E_{0,1}^{in}$ — амплитуда падающей рентгеновской волны, $E_{0,1}$ — амплитуды прошедшей и дифракционной волны, w_1 и w_2 — размеры падающего и дифракционного пучка соответственно, L_1 — расстояние от щели S_1 до входной поверхности многослойной структуры. Щель S_2 находится близко к выходной грани МС. L_2 — расстояние от выходной поверхности до позиционно-чувствительного детектора (PSD).

учитывается дифракция на краях щели, излучение распространяется прямолинейно, без изменения направления. Поэтому такая функция пропускания неприменима к узким щелям. Наиболее полное описание прохождения излучения через щель дается в ПФ.

В рамках ГО для щели размером w функция пропускания (граничное условие для падающего пучка) в прямом пространстве имеет вид

$$Y(z, l_z^{(in)}) = \begin{cases} 1, & -l_z^{(in)}/2 \le z \le l_z^{(in)}/2, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \quad (1)$$

где $l_z^{(in)}$ — ширина засветки поверхности периодической структуры падающей рентгеновской волной, которая связана с размером щели соотношением $l_z^{(in)} = w/\cos\theta_B$. Поскольку в случае лауэ-дифракции на МС угол Брэгга мал ($\cos\theta_B \approx 1$), можно считать $l_z^{(in)} \approx w$.

Фурье-образ функции (1) запишется как

$$\hat{Y}\left(\kappa, l_z^{(in)}\right) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-i\kappa x) Y\left(z, l_z^{(in)}\right) = \frac{\sin(\kappa l_z^{(in)}/2)}{\kappa/2}. \quad (2)$$

В приближении Френеля функция пропускания зависит не только от размера щели, но и расстояния L от щели до входной поверхности МС

$$Y(z, l_z^{(in)}, L) = \frac{1}{\sqrt{i\lambda L}} \int\limits_{-l_z^{(in)}/2}^{l_z^{(in)}/2} \exp\left(i\pi \frac{(z'-z)^2}{\lambda L}\right) dz'. \quad (3)$$

Фурье-преобразование (3) приводит к выражению вида

$$\hat{Y}(\kappa, l_z^{(in)}, L) = P(\kappa, L) \frac{\sin(\kappa l_z^{(in)}/2)}{\kappa/2}, \quad (4)$$

где $P(\kappa, L) = \exp\left(-i\lambda \frac{L\kappa^2}{4\pi(\cos\theta_B)^2}\right)$ — пропагатор в фурье-пространстве [9] в ПФ.

Приближение Фраунгофера является частным случаем приближения Френеля, когда расстояние L от щели до входной поверхности МС становится очень большим. Функция пропускания излучения через щель в приближении Фраунгофера запишется как

$$Y(z, l_z^{(in)}, L) = \frac{1}{\sqrt{i\lambda L}} \left[\frac{\sin\left(\pi z l_z^{(in)}/(\lambda L)\right)}{\pi z/(\lambda L)}\right]. \quad (5)$$

Фурье-образ этой функции соответствует выражению (4).

На рис. 1 показана схема лауэ-дифракции рентгеновского пучка в клиновой МС. У клиновой МС период изменяется по глубине структуры вдоль оси x. К сожалению, уравнения, описывающие лауэ-дифракцию в системе с постоянным периодом, для клиновых МС использовать нельзя. В этом случае клиновую МС необходимо представить в виде секционной системы, состоящей из элементарных вертикальных полос. Период в отдельной вертикальной полосе в пределах элементарной глубины $l_p = x_p - x_{p-1}$ считается постоянной величиной, при этом $p = 1, 2, \ldots, P$ определяет номер полосы. Если для первой полосы период МС равен d, то для полосы с номером p с рассогласованием Δd_p период запишется как $d_p = d - \Delta d_p$.

Для описания дифракции в периодической структуре можно воспользоваться уравнениями для медленно меняющихся рентгеновских амплитуд в периодической структуре в условиях дифракции [10,11]. В фурье-пространстве эти уравнения в пределах p-й полосы имеют вид

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{E}_0^p(\kappa,\eta^p;x)}{\partial x} = i(a_0 - \kappa\tan\theta_B)\hat{E}_0^p(\kappa,\eta^p;x) + ia_1\hat{E}_1^p(\kappa,\eta^p;x), \\ \frac{\partial \hat{E}_1^p(\kappa,\eta^p;x)}{\partial x} = i(a_0 + \eta^p + \kappa\tan\theta_B)\hat{E}_1^p(\kappa,\eta^p;x) + ia_1\hat{E}_0^p(\kappa,\eta^p;x). \end{cases} \quad (6)$$

Здесь $\hat{E}_{0,1}^p(\kappa, \eta; x)$ — амплитуды проходящей и дифракционной волны, $a_0 = \pi\chi_0/(\lambda\cos\theta_B)$, $a_1 = C\pi\chi_1/(\lambda\cos\theta_B)$, λ — длина волны рентгеновского излучения в вакууме, C — поляризационный фактор. В системе уравнений (6) присутствует угловой параметр для p-й полосы $\eta^p = \eta - h\varepsilon_p^x$, где $\eta = 4\pi\sin(\theta_B)\omega/\lambda$, $\omega = \theta - \theta_B$ — отклонение падающего пучка от угла Брэгга θ_B, $h = 2\pi/d$, $\varepsilon_p^x = \Delta d_p \tan\theta_B/d$. Фурье-коэффициенты рентгеновской поляризуемости в направлении прохождения χ_0 и дифракции χ_1 для МС с двухслойным периодом запишутся как [1]:

$$\chi_0 = \frac{\chi_t d_t + \chi_b d_b}{d}, \qquad \chi_1 = \frac{\chi_t - \chi_b}{\pi} \sin\left(\pi \frac{d_t}{d}\right).$$

Здесь $\chi_{t,b}$ и $d_{t,b}$ — фурье-коэффициенты поляризуемостей и толщины верхнего (t) и нижнего (b) слоев периода структуры. Рентгеновские поляризуемости химических элементов $\chi_j = 2(\delta_j + i\beta_j)$, $j = t, b$, вычисляются с использованием табличных значений оптических констант $\delta_j = r_0 \frac{N_j\lambda^2}{2\pi}(Z_j + \Delta f'_j)$, $\beta_j = -r_0 \frac{N_j\lambda^2}{2\pi}(\Delta f''_j)$, $r_0 = e^2/mc^2$ — классический радиус электрона, e, m — заряд и масса электрона, N_j — атомная плотность, Z — число электронов в атоме, $\Delta f'_j$ и $\Delta f''_j$ — дисперсионные поправки к атомной амплитуде.

Для пространственно ограниченных пучков уравнения (6) должны быть дополнены граничными условиями. В фурье-пространстве для падающего рентгеновского пучка граничное условие имеет вид $\hat{E}_0^1(\kappa, \eta^1; x_1) = \hat{Y}(\kappa, l_z^{(in)}, L_1)$. Для дифракционной волны выполняется второе граничное условие $\hat{E}_1^1(\kappa, \eta^1; x_1) = 0$. Используя граничные условия дифракции для каждой полосы клиновой МС, получаем рекуррентные соотно-

шения для амплитуд рентгеновских полей

$$\hat{E}_0^{p+1}(\kappa, \eta^p; x_{p+1}) = \Big[B_1^0 \exp\left(i\hat{\xi}_1^p l_p\right) - B_2^0 \exp\left(i\hat{\xi}_2^p l_p\right)\Big] \hat{Y}(\kappa, l_z^{(in)}, L_1),$$

$$\hat{E}_1^{p+1}(\kappa, \eta^p; x_{p+1}) = \Big[B_1^1 \exp\left(i\hat{\xi}_1^p l_p\right) - B_2^1 \exp\left(i\hat{\xi}_2^p l_p\right)\Big] \hat{Y}(\kappa, l_z^{(in)}, L_1), \quad (7)$$

где

$$B_{1,2}^0 = \phi_{1,2}^0 \hat{E}_0^p(\kappa, \eta^p; x_p) + a_1 \hat{E}_1^p(\kappa, \eta^p; x_p)/\hat{\xi}^p,$$

$$B_{1,2}^1 = \phi_{1,2}^1 \hat{E}_1^p(\kappa, \eta^p; x_p) + a_1 \hat{E}_0^p(\kappa, \eta^p; x_p)\hat{\xi}^p,$$

$$\phi_{1,2}^0 = (a_0 - \kappa \tan\theta - \hat{\xi}_{2,1}^p)/\hat{\xi}^p,$$

$$\phi_{1,2}^1 = (a_0 + \eta^p + \kappa \tan\theta_B - \hat{\xi}_{2,1}^p)/\hat{\xi}^p,$$

$$\hat{\xi}^p = \sqrt{(\eta^p + 2\kappa \tan\theta_B)^2 + 4a_1^2},$$

$$\hat{\xi}_{1,2}^p = (2a_0 + \eta^p \pm \hat{\xi}^p)/2.$$

В трехосевой схеме дифракции, которая применяется для измерения карт RSM, помимо монохроматора и образца имеется анализатор (или позиционно-чувствительный детектор). Угловое положение анализатора ε определяется как $\varepsilon = \bar{\omega} + \omega$, где $\bar{\omega}$ — отклонение дифрагированного пучка от угла Брэгга θ_B [12]. В симметричной лауэ-геометрии угловые отстройки ω и ε связаны с проекциями отклонения вектора дифракции в горизонтальном $q_x = k \sin\theta_B(2\omega - \varepsilon)$ и вертикальном $q_z = -k \cos\theta_B \varepsilon$ направлении. Угловой параметр в обратном пространстве выражается через эти проекции как $\eta = q_x - q_z \tan\theta_B$. В результате решения для амплитуды проходящей и дифрагированной волны запишутся в виде

$$E_0(q_x, q_z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \hat{E}_0^p(\kappa, q_x - q_z \tan\theta_B - h\varepsilon_p^x x_p) \times \hat{Y}(\kappa, l_z^{(in)}, L_1)\hat{Y}(\kappa - q_z, l_z^{(ex)}, L_2),$$

$$E_1(q_x, q_z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \hat{E}_1^p(\kappa, q_x - q_z \tan\theta_B - h\varepsilon_p^x, x_p) \times \hat{Y}(\kappa, l_z^{(in)}, L_1)\hat{Y}(\kappa - q_z, l_z^{(ex)}, L_2), \quad (8)$$

где $\hat{Y}(\kappa - q_z, l_z^{(ex)}, L_2) = P([\kappa - q_z], L_2)\frac{\sin([\kappa - q_z] l_z^{(ex)}/2)}{[\kappa - q_z]/2}$ — граничное условие для рентгеновских полей на выходной грани, L_2 — расстояние от близко расположенной к боковой поверхности МС щели S_2 до анализатора (позиционно-чувствительного детектора PSD, рис. 1).

Моделирование карт распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей в обратном пространстве выполнено для МС W/Si. Во всех случаях падающая интенсивность синхротронного излучения на клиновую МС нормировалась на единицу. Засветка падающим рентгеновским пучком многослойной системы вдоль оси z равна $w_1 \approx L_z = 14\,\mu$m, секционная глубина $L_x = 7\,\mu$m. В численных расчетах использовалось σ-поляризованное излучение (фактор поляризации $C = 1$) с длиной волны $\lambda = 0.062$ nm. Период системы W/Si равен $d = d_{\mathrm{W}} + d_{\mathrm{Si}} = 6$ nm, где $d_{\mathrm{W}} = d_{\mathrm{Si}} = 3$ nm, угол Брэгга $\theta_B = 5.17$ mrad. Оптические константы для МС равны $\chi_0 = (-9.35 + i0.68) \cdot 10^{-6}$ и $\chi_1 = (-4.6 + i0.43) \cdot 10^{-6}$. Период клиновой МС изменяется по глубине x с 6 до 5.97 nm, общее рассогласование периода равно 0.03 nm.

На рис. 2, *a* показана расчетная карта RSM в логарифмическом масштабе от клиновой многослойной структуры W/Si в приближении геометрической оптики. В вычислениях как в случае ГО, так и в приближении Френеля размеры падающего и дифрагированного пучка равны: $w_1 = w_2 = 14.0\,\mu$m. Для ГО расстояния от элементов, ограничивающих ширину падающего пучка до клиновой МС и дифрагированного пучка до детектора, не влияют на распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве. Расчетные карты распределения интенсивности рентгеновского рассеяния в геометрии Лауэ в приближении Френеля зависят от расстояний, на которых установлены щели, ограничивающие падающий и дифрагированный пучок. На рис. 2, *b* представлена дифракционная картина, вычисленная в ПФ, расстояние от входной щели до МС $L_1 = 2$ m. Такое же расстояние $L_2 = 2$ m от выходной поверхности до детектора. Рис. 2, *c* показывает распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве для случая $L_1 = L_2 = 0.8$ m. Согласно данным рис. 2, контуры равной интенсивности на расчетных картах RSM для геометрической оптики и разных схем в приближении Френеля визуально различаются.

Сечения расчетных карт RSM демонстрирует рис. 3. Вычисленные q_x-сечения (дифракционные профили главных пиков в геометрии Лауэ) для ГО и разных случаев приближения Френеля совпадают (рис. 3, *a*). С другой стороны, q_z-сечения имеют заметные различия (рис. 3, *b*). Следовательно, искажения, возникающие в структуре рентгеновского волнового фронта при прохождении щелей, ограничивающих поперечные размеры пучков, влияют на форму q_z-сечений карт RSM. На профилях q_z-сечений наблюдается периодическое распределение дифракционной интенсивности. При этом период осцилляций для трех рассмотренных случаев различен. К сожалению, аналитический анализ возникновения осцилляций интенсивности рассеяния в общем случае невозможен из-за сложных уравнений дифракции, тем более в рамках рекуррентных соотношений. В наиболее простом случае ГО период осцилляций интенсивности q_z-сечений карт RSM обратно пропорционален размеру окна детектора $w_2 = l_z^{(ex)} \cos\theta_B$. Отметим, что в приближении Френеля период осцилляций зависит

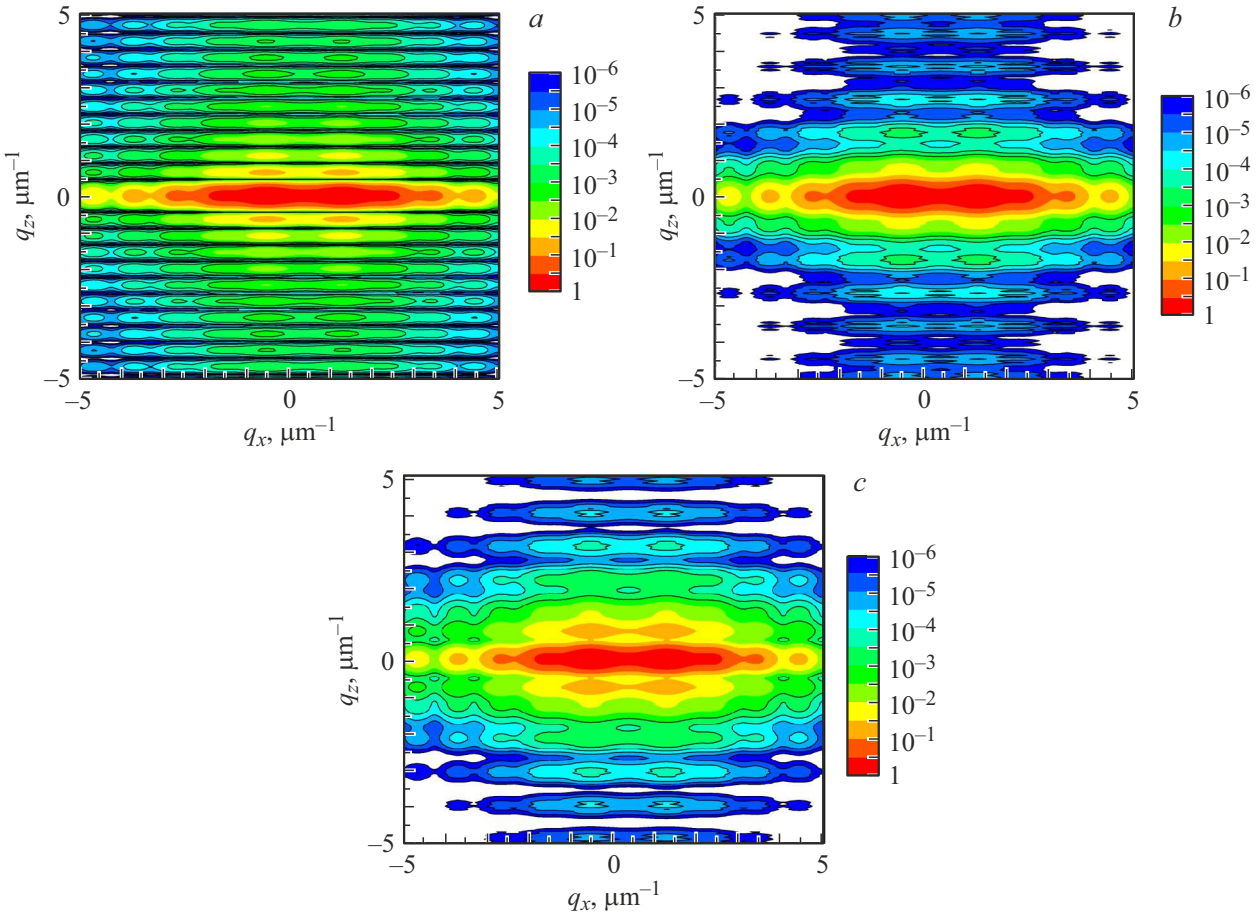

Рис. 2. Расчетные карты RSM в логарифмическом масштабе от клиновой МС W/Si, $l_z^{(in)} = 14.0\,\mu$m и $l_z^{(ex)} = 14.2\,\mu$m, *a* — геометрическая оптика; *b* — приближение Френеля, расстояние от входной щели и от выходной щели до детектора одинаково, $L_1 = L_2 = 2$ m; *c* — приближение Френеля, $L_1 = L_2 = 0.8$ m.

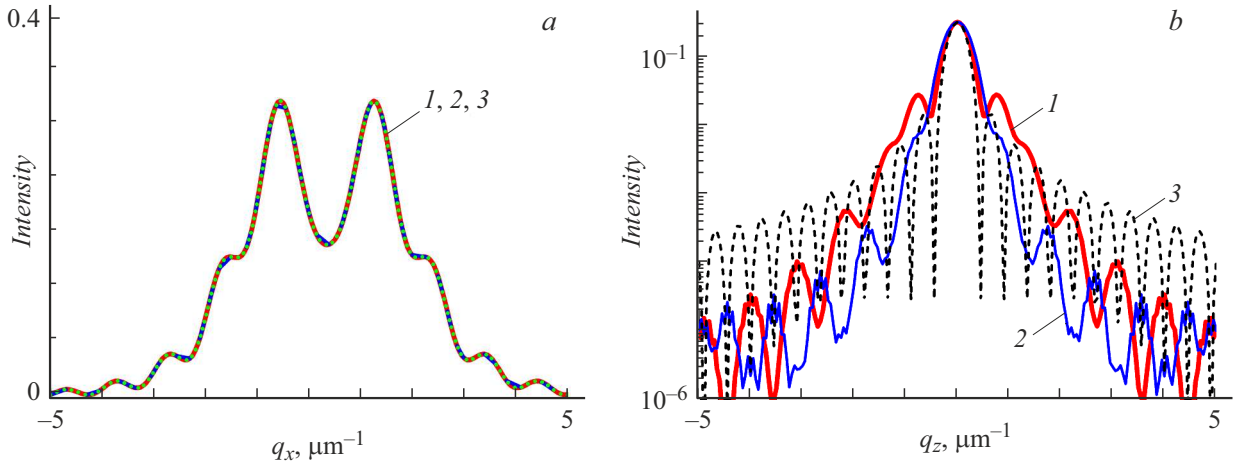

Рис. 3. Расчетные q_x-сечения (*a*) и q_z-сечения (*b*) карт RSM клиновой МС W/Si. *1* — приближение Френеля, $L_1 = L_2 = 0.8$ m; *2* — приближение Френеля, $L_1 = L_2 = 2$ m; *3* — геометрическая оптика.

не только от w_2, но и от расстояния L_2 от выходной поверхности МС до детектора.

Таким образом, разработанный метод может быть реализован для рентгенодифракционной лауэ-диагностики произвольных градиентных МС. Он также применим для исследований кристаллов с различной деформацией решетки, например, в результате упругого изгиба или наличия градиента температуры. Метод также может быть использован для изучения слоистых структур, содержащих малоугловые клинья, широко применяемых

в качестве линейных переменных фильтров в микроспектрометрах, датчиках и гиперспектральных системах визуализации.

Финансирование работы

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

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] В.И. Пунегов, Письма в ЖЭТФ, **111** (7), 488 (2020). DOI: 10.31857/S0370274X20070048 [V.I. Punegov, JETP Lett., **111** (7), 376 (2020). DOI: 10.1134/S0021364020070085].
[2] J. Maser, G.B. Stephenson, S. Vogt, W. Yun, A. Macrander, H.C. Kang, C. Liu, R. Conley, Proc. SPIE, **5539**, 185 (2004). DOI: 10.1117/12.560046
[3] H.N. Chapman, C. Li, S. Bajt, M. Butola, J.L. Dresselhaus, D. Egorov, H. Fleckenstein, N. Ivanov, A. Kiene, B. Klopprogge, V. Kremling, P. Middendorf, D. Oberthuer, M. Prasciolu, T.E.S. Scheer, J. Sprenger, J.C. Wong, O. Yefanov, M. Zakharova, W. Zhang, Struct. Dyn., **12**, 014301 (2025). DOI: 10.1063/4.0000275
[4] J.L. Dresselhaus, H. Fleckenstein, M. Domaracky, M. Prasciolu, N. Ivanov, J. Carnis, K.T. Murray, A.J. Morgan, H.N. Chapman, S. Bajt, Rev. Sci. Instrum., **93**, 073704 (2022). DOI: 10.1063/5.0092269
[5] В.И. Пунегов, Изв. Коми НЦ УрО РАН. Сер. Физ.-мат. науки, № 4 (44), 68 (2020). DOI: 10.19110/1994-5655-2020-4-68-73
[6] V.I. Punegov, J. Synchrotron. Rad., **28**, 1466 (2021). DOI: 10.1107/S1600577521006408
[7] V.I. Punegov, K.M. Pavlov, A.V. Karpov, N.N. Faleev, J. Appl. Cryst., **50**, 1256 (2017). DOI: 10.1107/S1600576717010123
[8] V.I. Punegov, J. Phys.: Conf. Ser., **2103**, 012145 (2021). DOI: 10.1088/1742-6596/2103/1/012145
[9] V.G. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev, Phys. Status Solidi B, **222**, 407 (2000). DOI: 10.1002/1521-3951(200011)222:2<407
[10] A.V. Vinogradov, B.Ya. Zeldovich, Appl. Opt., **16**, 89 (1977). DOI: 10.1364/AO.16.000089
[11] S. Takagi, Acta Cryst., **15**, 1311 (1962). DOI: 10.1107/S0365110X62003473
[12] V.I. Punegov, S.I. Kolosov, K.M. Pavlov, Acta Cryst. A, **70**, 64 (2014). DOI: 10.1107/S2053273313030416