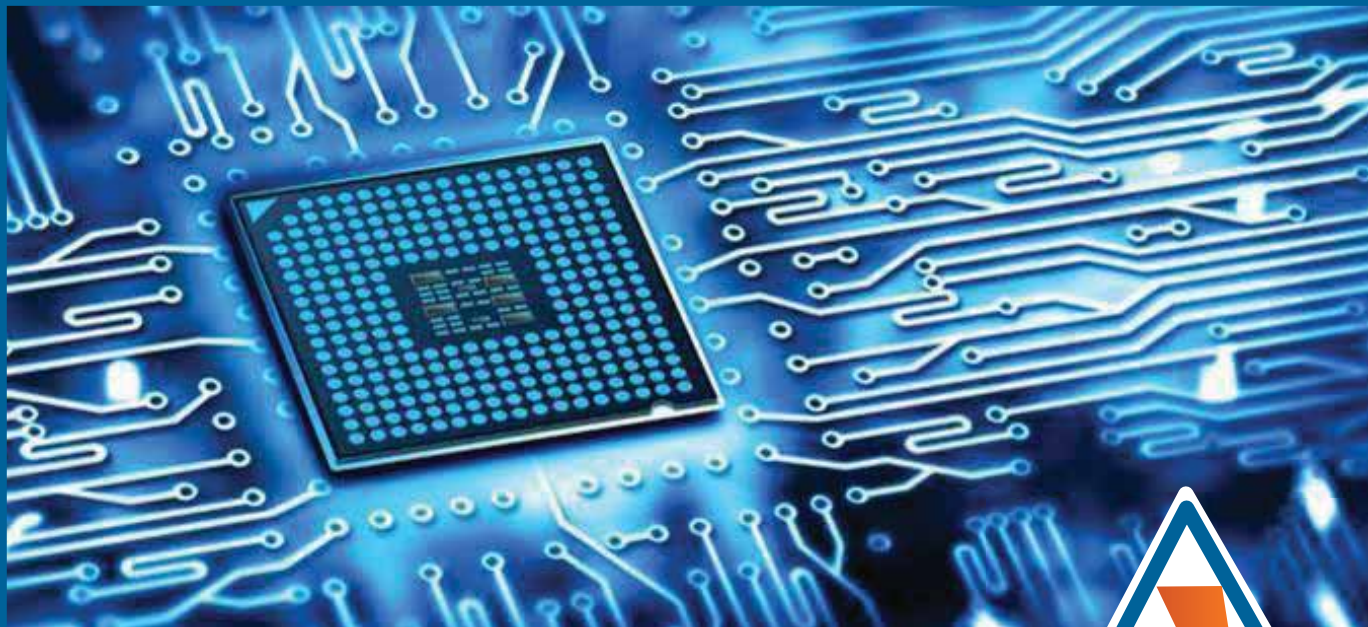


КЭЛТ-2021



Объединенная конференция
**«Электронно-лучевые технологии
и рентгеновская оптика
в микроэлектронике»**

КЭЛТ - 2021

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

г. Черноголовка, 13 – 17 сентября 2021 г.

Рентгеновский дифракционный интерферометр с одной щелью: численное моделирование и аналитика.

В.Г. Кон^{1,2}, И. А. Смирнова³

¹ НИЦ "Курчатовский институт", пл. Курчатова, 1, 123182, Москва, Россия

² ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Ленинский проспект, 59, Москва, Россия

³ Институт физики твердого тела РАН, ул. Акад. Осипьяна 2, 142432, Черноголовка, Московская обл., Россия,

В настоящее время известны интерферометры разных типов, но более широко используется интерферометр Юнга с двумя щелями. При дифракции на щели с шириной d монохроматическое излучение с длиной волны λ приобретает угловую расходимость с шириной $\alpha = \lambda/d$. При дифракции на двух щелях пучки от них начинают пересекаться на расстоянии $z_0 = x_0/\alpha$, вдоль оптической оси, где x_0 – расстояние между щелями в поперечном направлении. В когерентном излучении фазовые соотношения в разных пучках согласованы и при сложении двух полей возникают интерференционные полосы с периодом $p = \lambda z_1/x_0$, где $z_1 > z_0$ – расстояние от щелей до детектора.

Для рентгеновских лучей развитие такой интерферометрии долгое время сдерживалось отсутствием когерентных источников. Но сейчас это уже не так и опубликовано много работ по рентгеновской интерферометрии разного типа. В работах [1–2] тестировались наиболее интересные интерферометры на основе составных преломляющих линз.

Вместе с тем в оптике рентгеновских лучей существует возможность принципиально новой интерферометрии на основе дифракции рентгеновских лучей в монокристаллах. Известно, что при двухволновой дифракции в монокристалле пучок, ограниченный узкой щелью, засвечивает так называемый треугольник Бормана с углом $2\theta_B$, где θ_B – угол Брэгга [3, 4].

Дифракционная интерферометрия от двух щелей, то есть аналог интерферометра Юнга, но в монокристалле, была исследована теоретически в [5]. В этой работе была получена аналитическая формула для периода интерференционных полос

$$p = 2\Lambda t \operatorname{tg}^2(\theta_B)/x_0, \quad (1)$$

где x_0 – расстояние между щелями, $\Lambda = \lambda \cos(\theta_B)/|\chi_h|$ – длина экстинкции, χ_h – параметр дифракции, t – толщина кристалла. Параметры p и x_0 измеряются в направлении, параллельном поверхности кристалла.

Однако можно сделать аналог такого интерферометра, в котором две щели отсутствуют. Достаточно одной щели либо для расширения пучка, либо для выделения когерентной части излучения. Дело в том, что дифракция в кристалле сразу создает два пучка (прямой и отраженный) и есть эффект дифракционной фокусировки [6]. Для заданной толщины кристалла t сферическая волна фокусируется на определенном расстоянии между источником и детектором $Z = t F_B / |\chi_h|$, где $F_B = \sin\theta_B \sin(2\theta_B)$.

Фокусировка происходит при достаточно большой толщине t_1 кристалла, когда дополнительно есть эффект Бормана, который состоит в том, что для части излучения коэффициент поглощения

уменьшается во много раз. И именно эта часть и фокусируется. При этом фокусировка в прямом и отраженном пучках происходит идентично, а волновые функции имеют одинаковую фазу. На выходе из кристалла два почти одинаковых пучка с очень малой поперечной шириной двигаются каждый в своем направлении и разделяются в пространстве на расстоянии $2 t_g \sin(\theta_B)$ перпендикулярно направлению пучков, где t_g – толщина слоя воздуха.

Если поставить второй кристалл с толщиной t_2 , то каждый из них снова будет засвечивать в кристалле область в виде треугольника Бормана, а при пересечении этих областей возникнет интерференция. Единственное отличие от схемы с двумя щелями, которая рассматривалась в [5], состоит в том, что прямой пучок будет дифрагировать на векторе обратной решетки \mathbf{h} , а отраженный пучок будет дифрагировать на векторе $-\mathbf{h}$. Описанную ситуацию иллюстрирует рисунок 1.

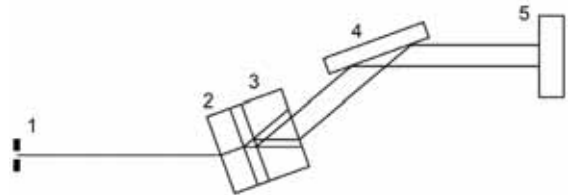


Рис. 1. Схема предполагаемого эксперимента. 1 – вторичный источник в виде щели, 2 – первый кристалл, 3 – второй кристалл, 4 – кристалл для изменения направления отраженного пучка, 5 – детектор.

На рисунке 1 кристалл 2 фокусирует пучки, а в кристалле 3 они интерферируют. Кристалл 4 нужен только для того, чтобы вернуть отраженный пучок в первоначальное направление, что важно при работе на источниках СИ.

Одним из преимуществ такой схемы является возможность эффекта полихроматической фокусировки для отраженного пучка, описание которого можно найти в [7]. Такая фокусировка реализуется при равных расстояниях от интерферометра до источника и детектора. Соответственно имеет место спектральная устойчивость результата.

Другим преимуществом является то, что расщепление пучков в пространстве происходит после их дифракционной фокусировки, которая не приводит к потере интенсивности, то есть такая схема имеет большую светосилу. Описанная выше схема предложена впервые в данной работе.

Однако, как показал более глубокий анализ, совсем не обязательно фокусировать пучки на конце первого кристалла. Главными элементами работы нового интерферометра является разделение пучков в пространстве и эффект Бормана, то есть выделе-

ние только одного поля из двух, которое слабо поглощается. Интерференция происходит при любом расстоянии Z между вторичным источником (например, щелью) и детектором. Если это расстояние стремится к нулю, точнее достаточно мало, то наиболее четкая интерференция имеет место при равенстве толщин первого и второго кристаллов.

Основы теории и метод численного расчета.

Еще в работах [4, 6] было показано, что дифракцию рентгеновских лучей в кристаллах удобнее всего вычислять методом преобразования Фурье. В общем виде этот метод состоит в следующем. Сначала делается расчет волновой функции (ВФ) рентгеновского излучения на детекторе при отсутствии кристаллов, то есть в реальном пространстве и в плоскости дифракции (x, z) . При этом ось z направлена вдоль пучка, то есть от источника к детектору, а ось x – в перпендикулярном направлении. Расстояние между вторичным источником и детектором равно Z .

Затем ВФ на детекторе $E_0^{(0)}(x)$ представляется в виде интеграла по плоским волнам, то есть вычисляется преобразование Фурье $E_0^{(0)}(q)$. Так как при дифракции в кристалле возникает отраженная (дифрагированная) волна, то удобно учесть это в самом начале и ввести вектор ВФ из двух компонент $E_0^{(0)}(q)$ и $E_1^{(0)}(q)$. При этом первоначально $E_1^{(0)}(q) = 0$. Решение задачи о дифракции плоской волны в кристалле с толщиной t_1 , имеющем форму пластины, давно получено и описано в учебниках.

Это решение можно представить в виде умножения матрицы $M_{ik}(q, t_1)$ на вектор $E_k(q)$, где индексы i и k имеют два значения 0 и 1. Таким образом, решение на детекторе $E_i^{(1)}(q)$ при наличии на пути пучка одного кристалла с толщиной t_1 можно представить в виде

$$E_i^{(1)}(q) = M_{ik}^{(1)}(q, t_1) \times E_k^{(0)}(q) \quad (2)$$

Здесь и далее по дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

Если на пути пучка расположены несколько кристаллов, которые плотно прижаты один к другому, то необходимо дополнительно выполнить умножение для второго кристалла с толщиной t_2

$$E_i^{(2)}(q) = M_{ik}^{(2)}(q, t_2) \times E_k^{(1)}(q) \quad (3)$$

и так далее для каждого следующего кристалла. Вместо кристалла на пути пучка может находиться слой аморфного вещества или даже просто воздух. Они тоже описываются матрицей $M_{ik}(q, t)$ специального вида. Но при этом для справедливости такого подхода предполагается, что суммарная толщина всего такого комплекса не слишком велика. Для кристаллов это очевидно, так как они поглощают. Для слоев воздуха это следует из факта, что при выводе матрицы предполагается справедливость геометрической оптики.

После того, как выполнены умножения на все слои, делается обратное преобразование Фурье и получается результат снова в прямом пространстве, то есть на детекторе в плоскости дифракции, но с учетом системы кристаллов. Из описанного выше

метода расчета сразу становится ясно, что система кристаллов может находиться в любом положении между вторичным источником и детектором, так как результат от этого не зависит, если используется симметричное отражение. То есть наблюдаемая картина интерференции зависит только от суммарного расстояния Z .

В данной работе этот метод применен к схеме эксперимента, которая показана на рисунке 1. Компьютерная программа написана на языке ACL [8]. Интегралы Фурье вычислялись с помощью процедуры быстрого преобразования Фурье (FFT, [9]), встроенной в язык ACL. В расчетах использовалось число точек $N = 16384$. Шаг d_x сетки точек задается, а шаг $d_q = Kd_0 = 2\pi/(Nd_x)$ и размер расчетной области Nd_q в обратном пространстве должен быть достаточно большой, чтобы подынтегральная функция равнялась нулю на концах области.

Результаты расчета и их обсуждение.

Разработанная программа позволяет выполнять расчеты как угловой зависимости интенсивности при дифракции плоских волн, так и различные схемы дифракции сферической волны. В данной работе представлены результаты расчета для двух случаев. Первый случай соответствует дифракционной фокусировке в первом кристалле. Он имеет аналогию с интерферометром Баляна [5]. В этом случае толщина первого кристалла t_1 соответствует фокусировке излучения в плоскости детектора при отсутствии второго кристалла. На некотором расстоянии после выхода из второго кристалла пучки расходятся в пространстве и каждый из них нужно рассматривать независимо. Легко понять, что в прямом пучке интерферируют дважды прошедшая и дважды отраженная волны, а в отраженном пучке – сначала прошедшая, потом отраженная и сначала отраженная, потом прошедшая волны.

Соответственно, мы получаем асимметричную картину в прямом пучке и симметричную картину в отраженном пучке. На рисунке 3 показан результат расчета интерференционной картины в отраженном пучке при изменении толщины 2-го кристалла и без отражения 3-м кристаллом для следующих значений параметров: размер щели $d = 5$ мкм, расстояние $Z = 9.6$ м, кристалл Si, отражение 220, энергия фотонов 8 кэВ ($\lambda = 0.1598$ нм). Показан интервал толщин второго кристалла t_2 от 0.33 мм до 1.08 мм. Предполагается, что СИ поляризовано в плоскости, перпендикулярной плоскости дифракции. При указанных значениях параметров $\theta_B = 23.8^\circ$.

На рисунке можно видеть два типа интерференционных полос. Первые полосы находятся по краям треугольников Бормана для каждого из пучков при малых значениях толщины второго кристалла t_2 . Они имеют переменный период и соответствуют интерференции слабо и сильно затухающих волновых полей при дифракции сферической волны и малом расстоянии от источника до кристалла. Эти полосы были изучены еще в работе [4]. С ростом толщины кристалла эти полосы пропадают из-за поглощения сильно затухающего волнового поля.

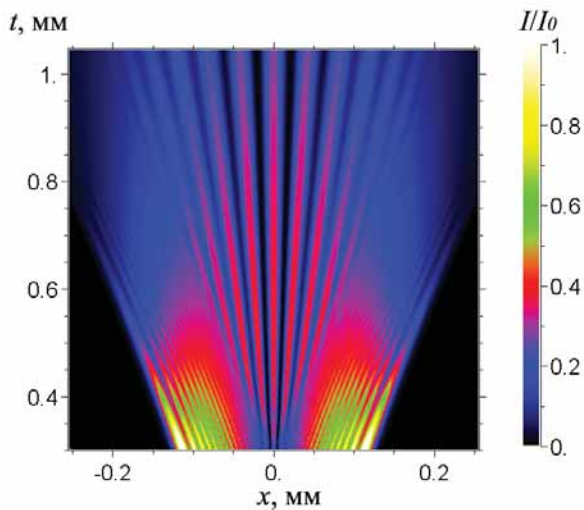


Рис. 3. Двумерное распределение относительной интенсивности в отраженном пучке при изменении толщины 2го кристалла t_2 . Другие параметры равны $t_1 = 0.33$ мм, $t_g = 0.15$ мм, $Z = 9.6$ м.

Второй тип полос находится в центре картины при больших значениях t_2 . В этой области интерферируют слабопоглощающие волновые поля от разных источников. По этой причине они не исчезают в центре картины даже при больших толщинах второго кристалла. Это и есть интерференция, аналогичная той, которая наблюдается в эксперименте Юнга. Но здесь, два источника были созданы в воздушном промежутке между кристаллами. Интерференция возникает благодаря тому, что кристалл добавляет к проходящей волне отраженную волну. Период этих полос пропорционален толщине кристалла и соответствует формуле (1).

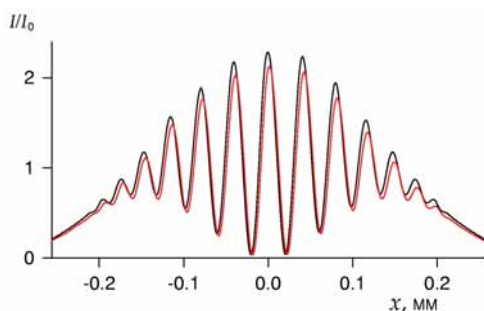


Рис. 4. Относительная интенсивность в отраженном пучке для параметров рисунка 3, $t_2 = 1$ мм. Черная кривая – без кристалла-отражателя, красная – с отражателем.

Расчет с учетом кристалла-отражателя, установленного в точном положении отражения, почти никак не меняет интерференционные полосы. Наблюдается только очень слабый, на малые доли периода, сдвиг полос вправо. Ситуацию иллюстрирует рисунок 4. Значение I_0 равно сотой части от интенсивности на детекторе без кристаллов. Видно, что интенсивность слегка уменьшается из-за неполного отражения третьим кристаллом.

Если выводить кристалл-отражатель из точного положения отражения, то интенсивность отраженного пучка уменьшается, а контраст портится.

Второй вариант интерферометра соответствует малому расстоянию Z от вторичного источника до

кристалла, в данном случае 0.1 м. На таком расстоянии эффект дифракционной фокусировки отсутствует полностью.

Преимущество такой схемы в том, что не требуется очень толстых кристаллов и поэтому потери на поглощение уменьшаются. В схеме с минимальным расстоянием оба кристалла расширяют пучки, поэтому пересечение пучков происходит при меньших толщинах второго кристалла. На рисунке 5 значение I_0 в 10000 раз меньше интенсивности на детекторе без кристаллов. Такое малое значение определяется тем, что эффект Бормана имеет место в очень ограниченной области углов, которая соответствует большому расстоянию.

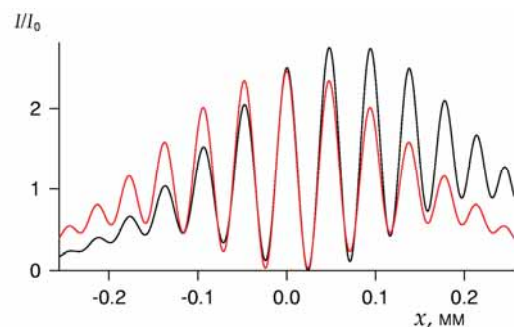


Рис. 5. Относительная интенсивность в прямом (черная кривая) и в отраженном (красная кривая) пучках для параметров: $Z = 0.1$ м, $t_2 = t_1 = 0.6$ мм и $t_g = 0.15$ мм.

Из рисунка видно, что при относительно малой толщине кристаллов можно получить до 10 интерференционных полос, контраст которых быстро уменьшается при движении от центра к краям области пересечения пучков. Период полос описывается формулой (1), если заменить толщину кристалла, на сумму толщин двух кристаллов. Кроме периода важным параметром является ширина пересекающихся пучков, оценка которой выполнена.

Работа В.Г. Кона выполнена при поддержке РФФИ, грант 19-29-12043 мк.

1. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn et al. // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103.N. 064801.
2. D. Zverev, I. Snigireva, V. Kohn, et al. // Optics Express. 2020. V. 28. P. 21856.
3. N. Kato, A.R. Lang // Acta Cryst. 1959. V. 12. P. 787.
4. N. Kato // Acta Cryst. 1961. V. 14. P. 526, 627.
5. M. K. Balyan // Acta Cryst. A. 2010, V. 66. P. 660.
6. А. М. Афанасьев, В. Г. Кон // ФТТ. 1977. Т. 19. С. 1775.
7. V. G. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev // Phys. Stat. Sol. (b) 2000. V. 222. P. 407.
8. V. G. Kohn // <http://kohnvict.ucoz.ru/acl/acl.htm>
9. J. W. Cooley, J. W. Tukey // Math. Comp. 1965. 19. 297.