

Теория дифракции ограниченных пучков синхротронного излучения в монокристалле в геометрии Лауэ

Кон В. Г. ⁽¹⁾, Смирнова И. А. ⁽²⁾

Кристаллография, 2024, 69, №3 (Май)

1. НИЦ КИ, Москва; 2. ИФТТ, Черноголовка

Сайт докладчика <http://kohnvict.narod.ru>

On the Theory of Diffraction of Limited Synchrotron Radiation Beams in Single Crystal in the Laue Case

V. G. Kohn^a and I. A. Smirnova^{b,*}

^a National Research Centre “Kurchatov Institute,” Moscow, 123182 Russia

^b Osipyan Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow oblast, 142432 Russia

*e-mail: irina@issp.ac.ru

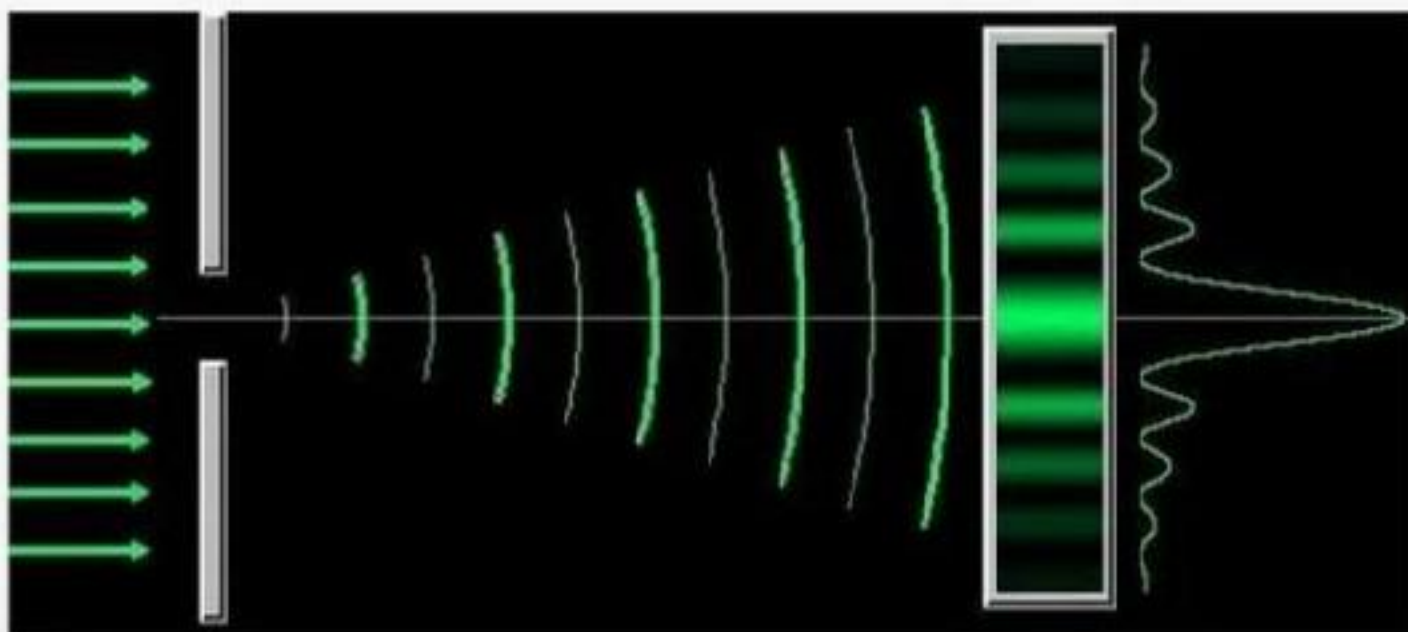
Received August 25, 2023; revised October 12, 2023; accepted October 27, 2023

Abstract—The features of the Bragg diffraction of coherent synchrotron radiation from the atomic lattice of a single crystal in the Laue geometry have been studied theoretically, provided that the radiation beam is limited by a relatively large slit placed in front of the crystal. The method of numerical simulation is used, and dependences of the intensity distribution are obtained for different crystal thicknesses. It is shown that the slit edges introduce inhomogeneous intensity distortions inside the Borrmann fan with an angle of $2\theta_B$, where θ_B is the Bragg angle. In the area where the triangles intersect the intensity distribution is similar to that for the diffraction from a slit in air at a certain (large) distance. An equation for the correspondence between the distance and crystal thickness is derived, which describes well the numerical calculation results.

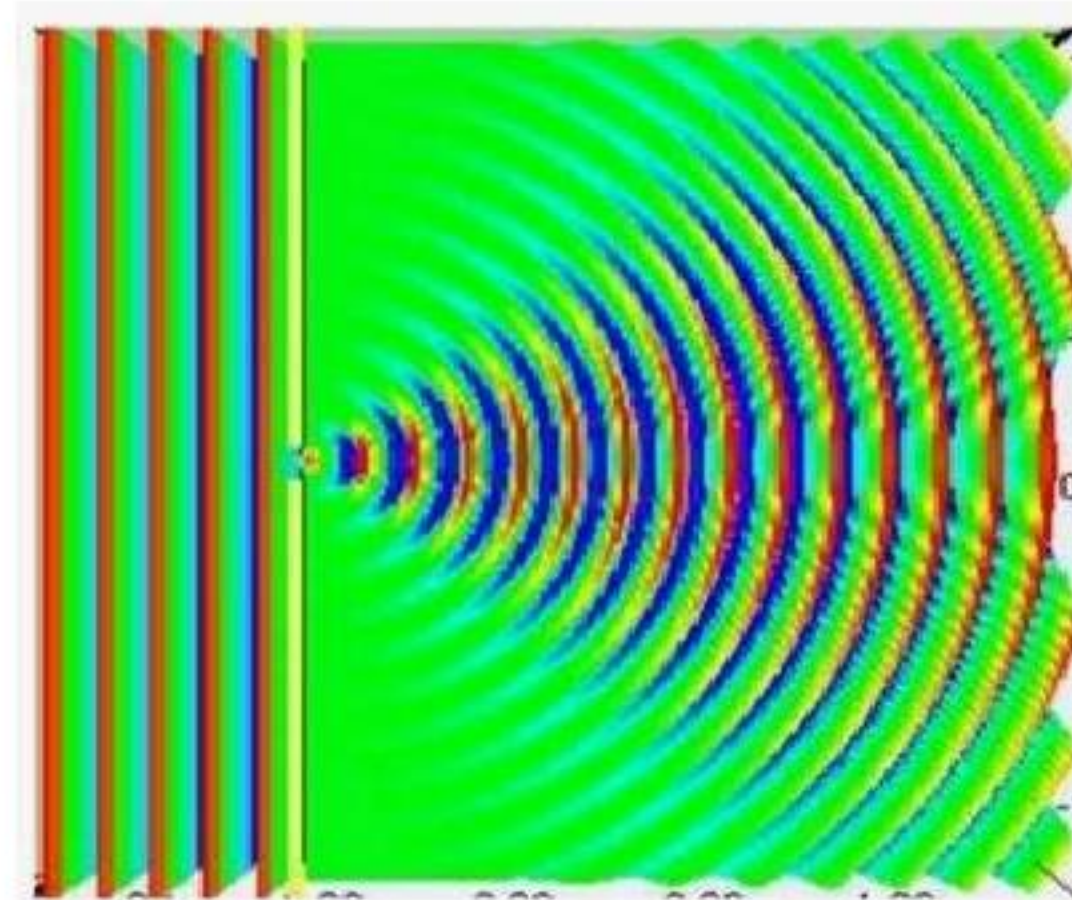
DOI: 10.1134/S1063774524600492

ДИФРАКЦИЯ ФРАУНГОФЕРА (ДИФРАКЦИЯ В ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЛУЧАХ)

Относится к случаю, когда источник света и точка наблюдения бесконечно удалены от препятствия, вызвавшего дифракцию. Практически для этого достаточно точечный источник света поместить в фокусе собирающей линзы, а дифракционную картину исследовать в фокальной плоскости второй собирающей линзы, установленной за препятствием.



Ближнее поле
(ничего не происходит)
Дифракция Френеля
(возможна фокусировка)
Дифракция Фраунгофера
(дальнее поле, Фурье оптика,
угол расходимости $\alpha = \lambda / d$)





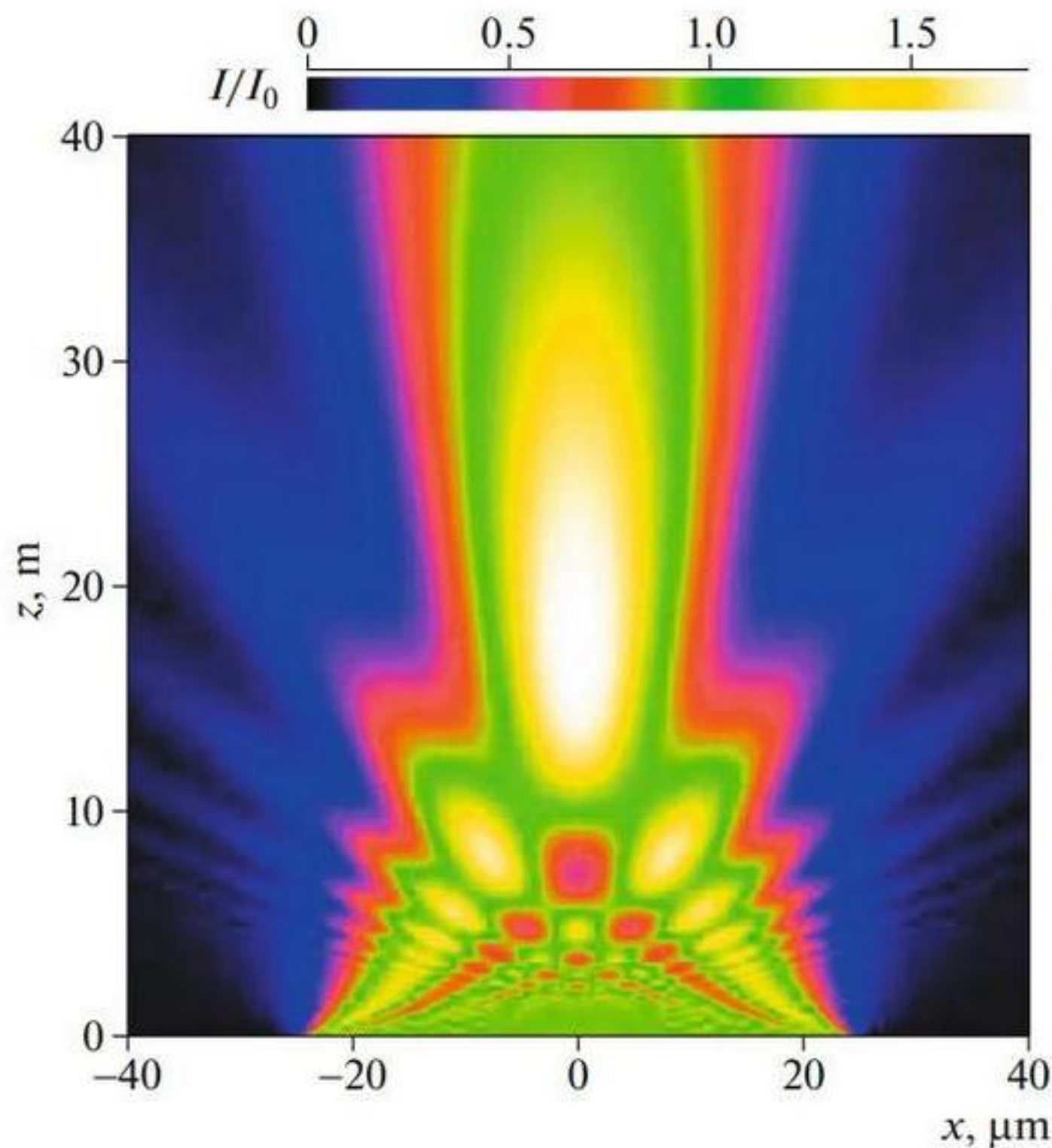


Fig. 3. Dependence on x for the relative SR beam intensity in the region of distances corresponding to the Fresnel diffraction at $d = 50 \mu\text{m}$ and photon energy of 25 keV.

Расчет по программе XRWP
Дифракция плоской волны СИ на щели относительно большого размера показывает признаки фокусировки. То есть щель работает как зонная пластинка с одной зоной. Интенсивность в максимуме почти в 2 раза больше падающей. А расширение пучка происходит не сразу, а на очень больших расстояниях.

Параметр z_d называется длиной дифракции. При $z = z_d$ косинус интеграл Френеля имеет максимальное значение. Интенсивность максимальна при $z = 0.7 z_d$.

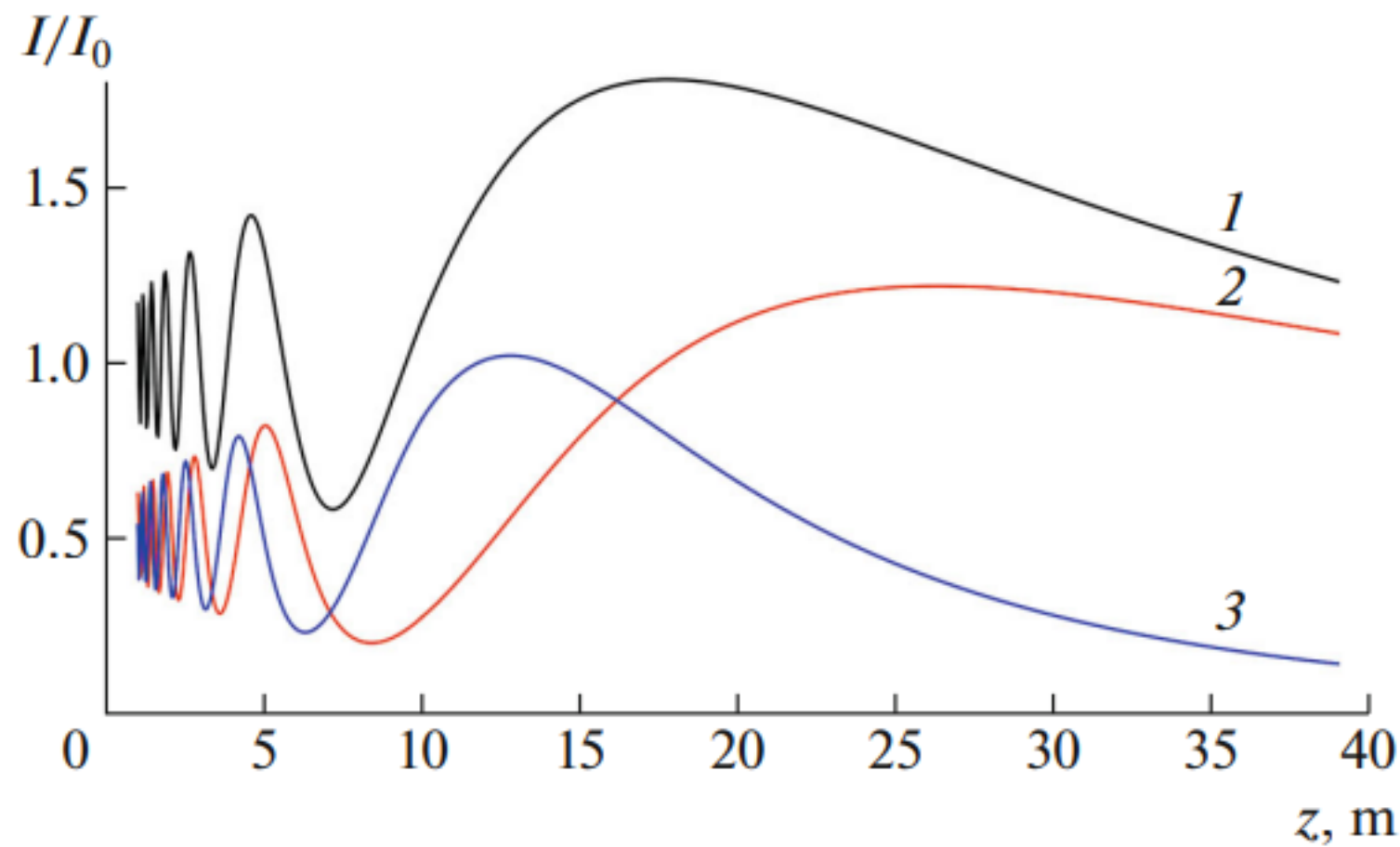


Fig. 2. Relative intensity of the SR beam at the slit center in dependence of the distance to the detector (I) and the contributions to this intensity from the cosine (2) and sine (3) parts for $d = 50 \mu\text{m}$ and photon energy of 25 keV.

$$\psi(x, z) = \int dx_1 P(x - x_1, z) \theta(x_0 - |x_1|)$$

$$P(x, z) = (i\lambda z)^{-1/2} \exp(i\pi x^2 / \lambda z)$$

$$x_0 = d/2, d - \text{размер щели}$$

$$\psi(0, z) = (2/i)^{1/2} [C(r) + iS(r)]$$

$$C(r) = \int ds \cos(\pi s^2 / 2) \theta(s[r - s])$$

$$S(r) = \int ds \sin(\pi s^2 / 2) \theta(s[r - s])$$

$$r = (z_d / z)^{1/2}, \quad z_d = d^2 / 2\lambda$$

Расчет выполнен по программе XRWP

Зависимость интенсивности отраженного пучка от толщины кристалла t_c при дифракции плоской волны, ограниченной щелью. Предполагается идеальная когерентность, то есть источник СИ 4-го поколения.

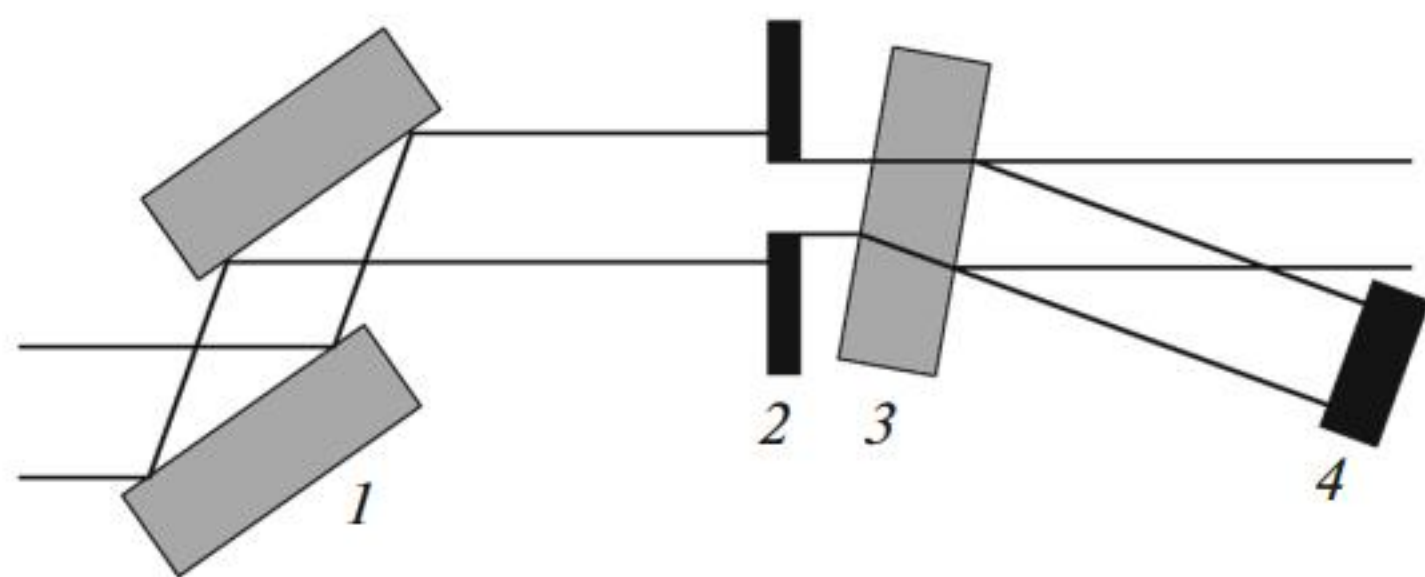


Fig. 1. Part of the experimental scheme (without a source): (1) monochromator, (2) slit, (3) single crystal, and (4) detector.

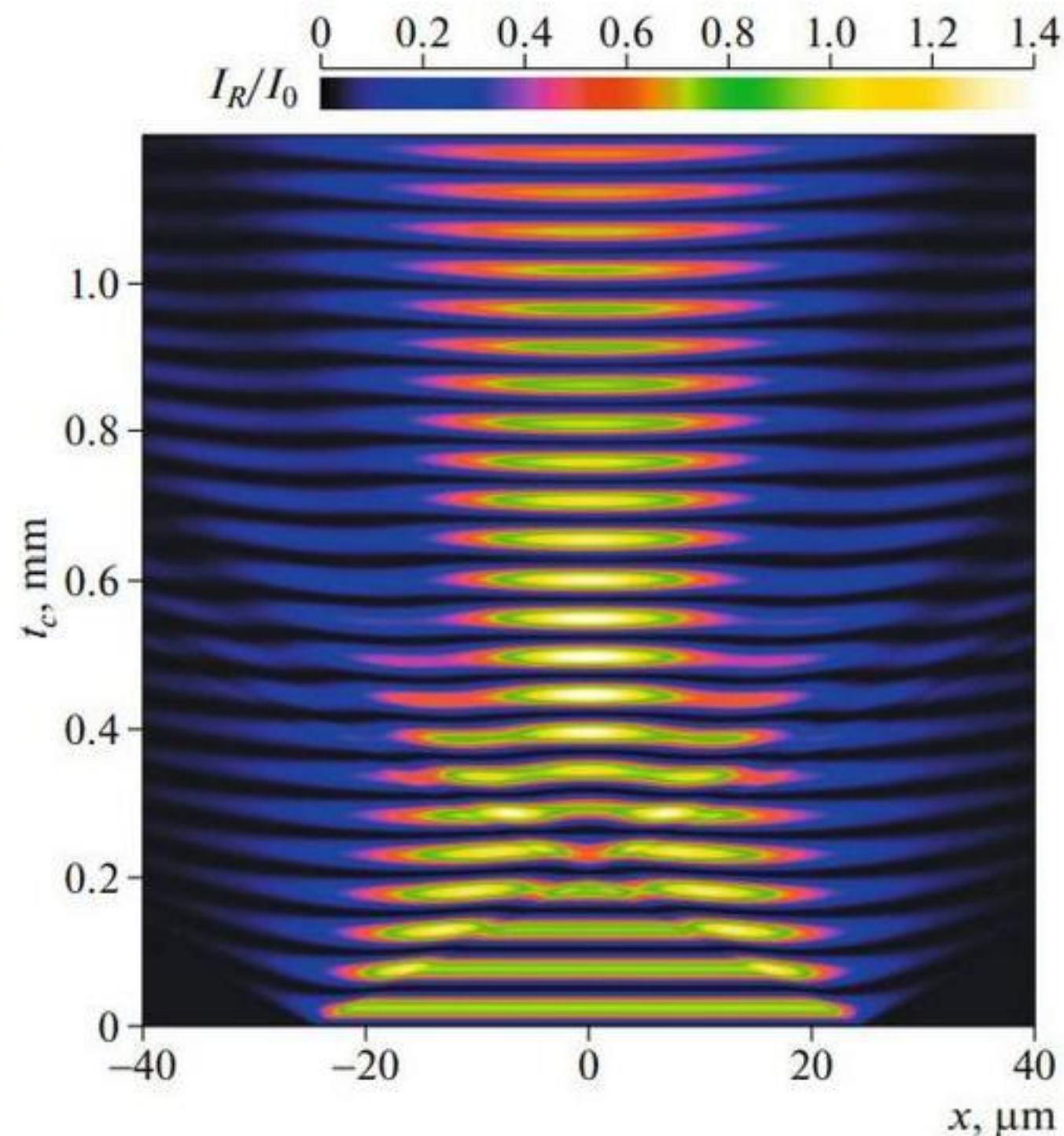


Fig. 4. Dependence on x for the relative intensity of reflected (220) SR beam at diffraction in a silicon single crystal for the range of thicknesses corresponding to the Fresnel diffraction at $d = 50 \mu\text{m}$ and photon energy of 25 keV.

При увеличении размера щели картинка получается при больших толщинах кристалла t_c , причем даже больше фрагментов картины для дифракции на воздухе можно обнаружить. Главный результат данной работы состоит в указании на аналогию дифракции на воздухе и в кристалле с тем отличием, что огромные расстояния (десятки метров) заменяются на толщину кристалла, не более нескольких миллиметров.

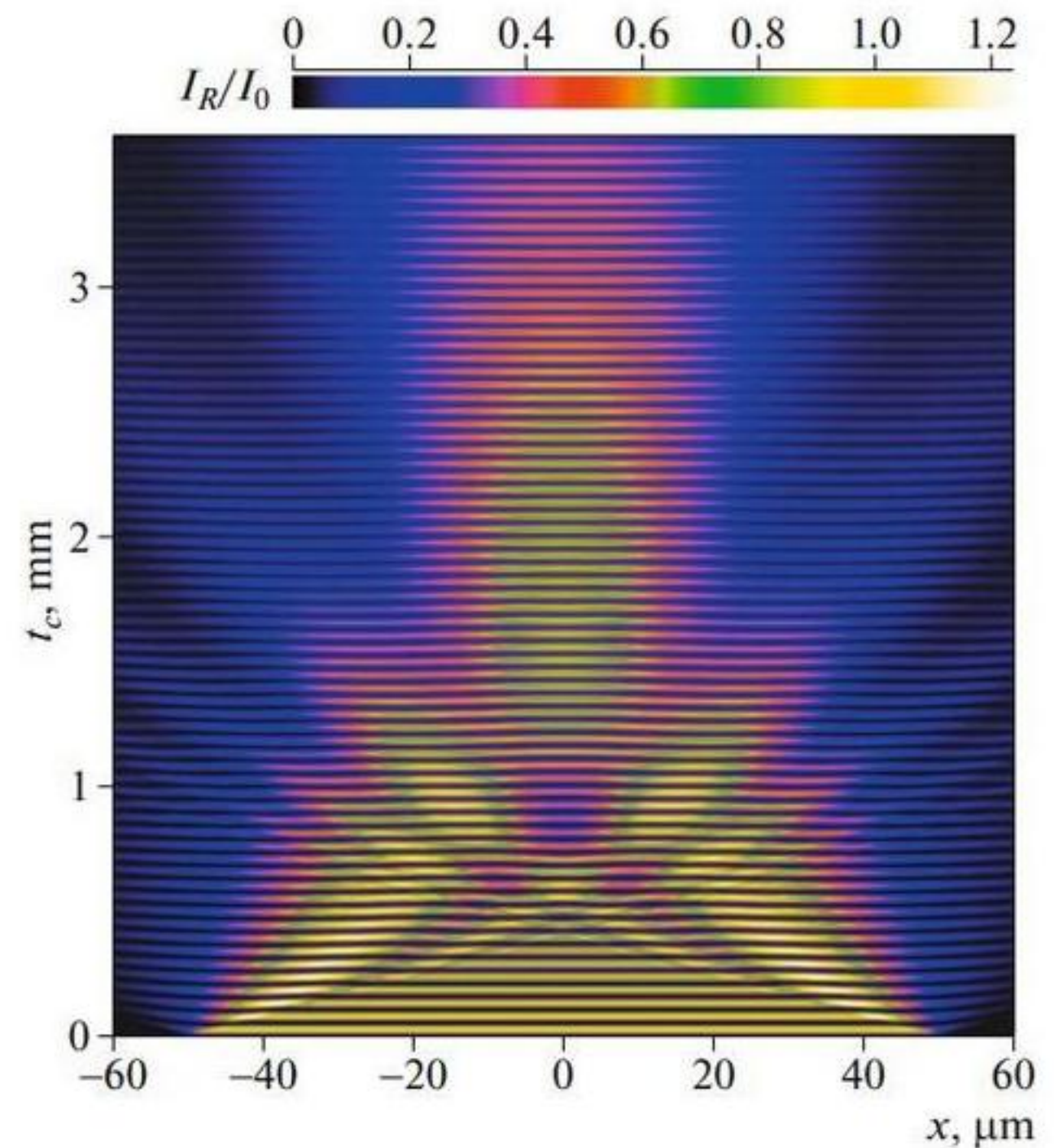


Fig. 5. Dependence on x for the relative intensity of reflected (220) SR beam at diffraction in a silicon single crystal for the range of thicknesses corresponding to the Fresnel diffraction at $d = 100 \mu\text{m}$ and photon energy of 25 keV.

$P(q, z) = \exp(-i[\lambda z/4\pi] q^2)$ – образ Фурье пропагатора Френеля

$P_c(q, t_c) = F(q)(X_h/2g)\exp(iA)[\exp(iG) - \exp(-iG)]$ – то же для

пропагатора кристалла, при этом: $A = (X_0 + \alpha_q)t_c/2\gamma_0$, $G = gt_c/2\gamma_0$,

$g = (\alpha_q^2 + X^2)^{1/2}$, $X = (X_h X_{-h})^{1/2}$, $\alpha_q = q \sin(2\theta_B)$, $\gamma_0 = \cos\theta_B$,

$F(q) = \exp(-iqt_c \sin\theta_B)$, $X_h = K\chi_h$, χ_h – параметр дифракции.

Решение для кристалла известно давно, еще в первой половине 20-го века. Оно получается без $F(q)$. Эта функция просто сдвигает начало отсчета в центр палатки Бормана. Но тогда функция $F(q)\exp(iA)$ не зависит от q . Можно заметить, что при малых $|q| < X/\sin(2\theta_B)$ имеем эквивалентность $\exp(-iG)$ и $P(q, z)$ при условии, что $z = C t_c$, $C = 2\sin^2\theta_B \cos\theta_B / \operatorname{Re}(\chi)$

Не все совпадает ! У кристалла есть свои особенности.

1))). Экспонент 2, а не 1. То есть реализуются + и – расстояния.

Две экспоненты создают периодические осцилляции.

Длина экстинкции (период) $L_{\text{ex}} = \lambda \cos\theta_B / \text{Re}(\chi)$

Соответственно $z = (2\sin^2\theta_B L_{\text{ex}} / \lambda) t_c$

2))). В кристалле есть поглощение, **очень существенное отличие**.

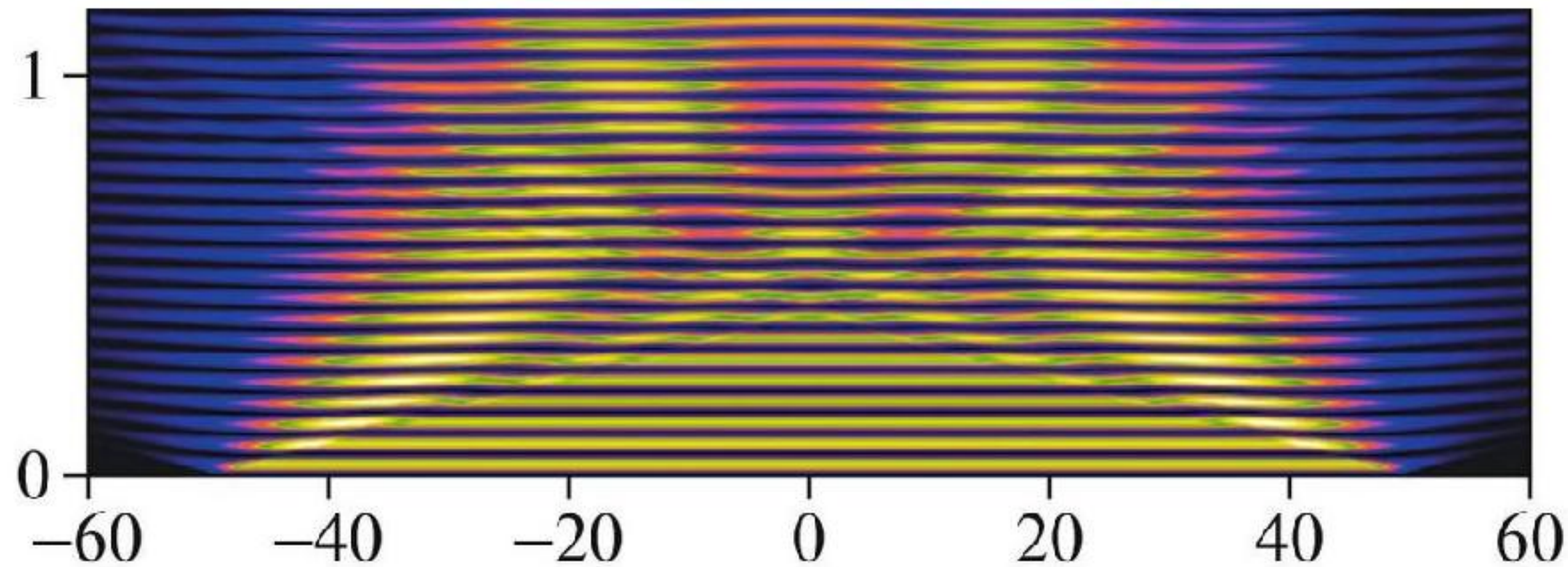
Оно разное для разных знаков расстояния. Минимальное поглощение у **отрицательного** расстояния. Для щели это

не важно, так как щель одинаково реагирует на знак

расстояния. Есть аналогия с ЗП. Там есть положительные и отрицательные порядки фокусировки. И тут так же.

Но дальнее поле в кристалле невозможно, как и ближнее поле.

Дальнее поле невозможно из-за поглощения. Кристалл все же не воздух. А ближнее поле формируется большими $|q| > X/\sin(2\theta_B)$. В этом случае пропагатор кристалла линейно зависит от q а не как q^2 . Известно, что пропагатор кристалла локализован внутри веера Бормана с углом $2\theta_B$. Неоднородности на краях щели сначала развиваются независимо, пока не пересекутся. $\theta_B = 7.42^\circ$, $L_{\text{ex}} = 52.7$ мкм, $d/\sin(2\theta_B) = 390$ мкм.



Еще одно отличие кристалла от воздуха — это весьма высокая чувствительность к параметрам, конкретно, отклонению от выполнения условия Брэгга. Нужна сильная монохроматизация, точная ориентация кристалла и высокая когерентность пучка. Что получится, если этого не будет пока не изучалось. Эксперимент сделать не просто. Высокая чувствительность не всегда минус, в будущем может пригодиться.

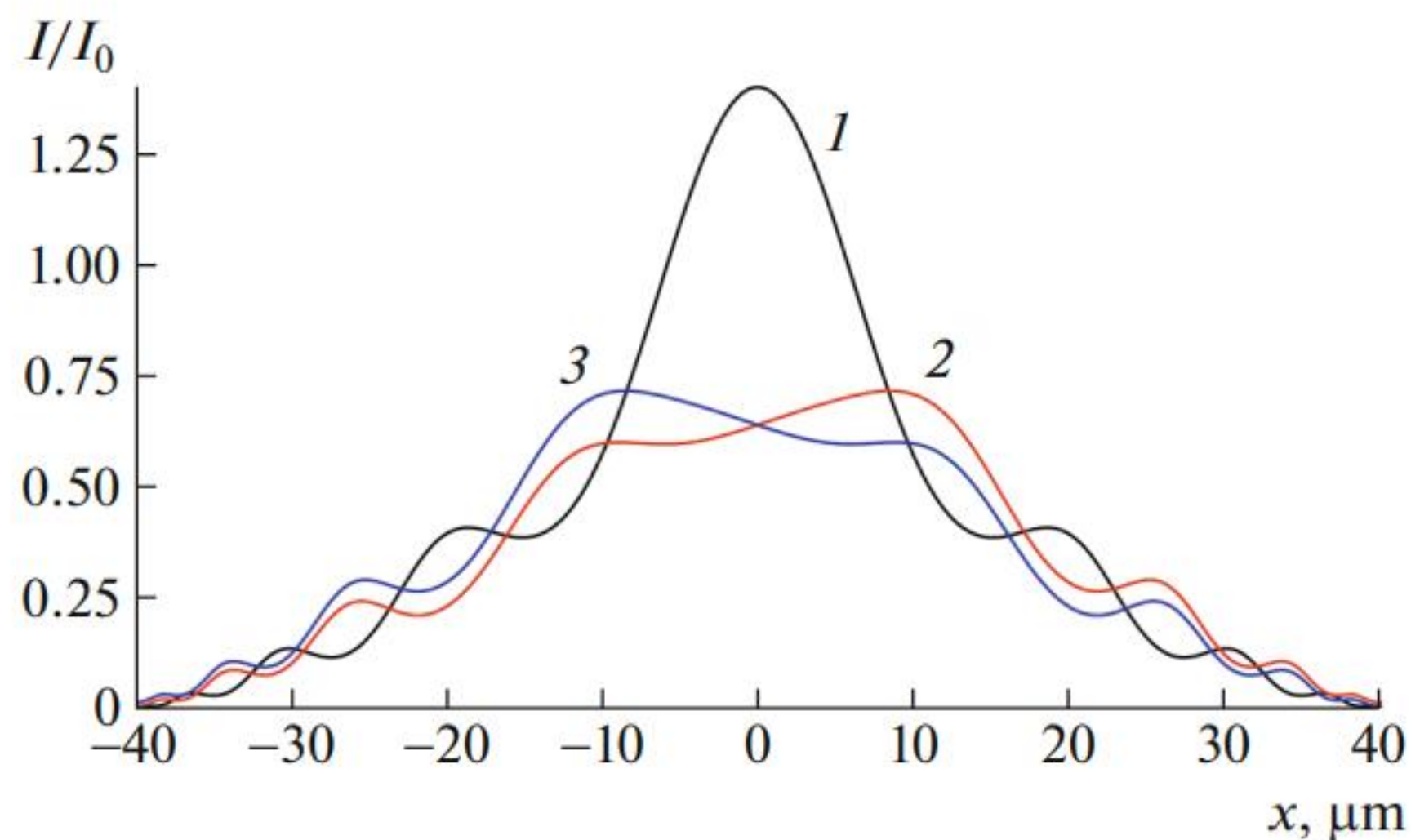


Fig. 6. Dependence on x for the relative intensity of reflected (220) SR beam at diffraction in a 500- μm thick silicon single crystal at $d = 50 \mu\text{m}$ and photon energy of 25 keV; (1) exact angular position, (2, 3) crystal rotated from the exact position by an angle of 5×10^{-7} rad to different sides.

История вопроса.

Динамическую теорию дифракции плоской волны рентгеновского излучения в кристалле впервые построил **Дарвин** в 1914 году в геометрии на отражение (случай Брэгга). В геометрии на прохождение (случай Лауэ) теорию построил **Эвальд** в серии статей от 1916 до 1933 годов. Современную формулировку теории через поляризуемость кристалла сформулировал **Лауэ** в своей книге 1931 года. Затем были другие книги, в частности **Захариазена** 1945 года (сам читал). В России важную роль сыграла книга **Пинскера** 1974 года (первое Издание), 1978 года (перевод на английский язык) и 1982 года (второе издание). Самая последняя книга была опубликована **Отье** в 2005 году. Пропагатор кристалла получается преобразованием Фурье из амплитуды отражения плоской волны. Его аналитическую форму впервые получил **Като** в 1962 году.

История вопроса.

Реально пропагатор кристалла стали использовать в расчетах Такаги, Урагами, Като, Чуховский, Кон. У последних двух были соавторы, но всех не пишу, нет смысла. Время – конец 1960-х, начало 1970-х.

Задача о дифракции пучка, ограниченного щелью, в кристалле была впервые рассмотрена Чуховским в 1970 году и в обзоре 1972 года.

Просто показали, что можно решать, но никаких выводов не сделали.

Экспериментально узкую щель перед кристаллом ставят в методе секционной топографии, но в расчетах размером щели пренебрегают.

Широкие щели никто в эксперименте не использовал, так как не было когерентности. В 1979 году Инденбом представил статью по фокусировке нейтронов зонной пластинкой на основе пропагатора. Нейтроны чтобы убрать поглощение. Эксперимент был сделан Снигиревым и Суворовым в 1993 на рентгеновском излучении. Что-то получилось, но расчетов не было. Детальный разбор дифракции в кристалле пучка СИ, ограниченного широкой щелью сделан впервые.

Новый взгляд на эффект дифракционной фокусировки

Эффект дифракционной фокусировки был указан в статье **Кона** (есть соавтор) в 1977 году. Экспериментально обнаружен в 1978 году сразу в двух лабораториях. Он состоит в том, что кристалл фокусирует расходящийся пучок рентгеновского излучения.

Впоследствии была установлена связь с линзой **Пендри**, рассмотренной в статье 2000 года. Это пластина из метаматериала, которая отклоняет пучок в другую сторону. **Сейчас есть другое понимание.** Кристалл не фокусирует. Его пропагатор такой же, как и на воздухе. Только для двух знаков расстояния. Знак (+) сжимает сходящийся пучок по законам геометрической оптики. А знак (−) отправляет пучок назад на источник. И расходящийся пучок как бы снова сжимается как в источнике, но в другом месте. Расстояние со знаком (−) соответствует слабому поглощению и в этом вся фишка. Потому что в толстом кристалле только такой пропагатор и остается. Другой полностью поглощается.

**БЛАГОДАРЮ
ЗА
ВНИМАНИЕ**