ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 548.732
DOI 10.19110/1994-5655-2019-3-5-7

А.В. КАРПОВ, В.И. ПУНЕГОВ

ОТРАЖЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА ОТ ОГРАНИЧЕННОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ ДИФРАКЦИОННОЙ РЕШЕТКИ

*Физико-математический институт
ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
г. Сыктывкар*

karpov@ipm.komisc.ru
vpunegov@ipm.komisc.ru

A.V. KARPOV, V.I. PUNEGOV

X-RAY BEAM REFLECTION ON BOUNDED MULTILAYER DIFFRACTION GRATING

*Institute of Physics and Mathematics,
Federal Research Centre Komi Science Centre,
Ural Branch, RAS,
Syktyvkar*

Аннотация

Разработана динамическая теория дифракции жесткого рентгеновского излучения от многослойной дифракционной решетки (МДР) с конечным числом периодов. Для этого использован формализм ограниченного фронта падающей волны. Решение одномерных уравнений дифракции получено с использованием теоремы Котельникова. Исследованы граничные условия задачи и влияние ширины засветки падающего пучка на распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве.

Ключевые слова:
многослойная дифракционная решетка, динамическая дифракция, карта распределения интенсивности в обратном пространстве

Abstract

The paper briefly presents the main provisions of the dynamic theory of diffraction of a monochromatic X-ray beam on a lamellar multilayer grating (LMG) with a finite number of periods. The application of the Kotelnikov's theorem allowed to present integro-differential diffraction equations in a simple matrix form. The solution of these equations by the method of numerical integration allows us to find the intensity of the reflected wave from the LMG. The angular distribution of the scattering intensity is represented in the form of reciprocal space mapping (RSM). Using the conclusions of the theory, a numerical experiment was carried out for Ni/C LMG in two configurations. In the first configuration, the incident wave is entirely highlighted by a finite number of periods of LMG. In the second configuration, a narrow beam was reflected on a rather wide LMG. The RSM and their sections along the q_z axis of these two configurations are analyzed and their differences are shown. We consider the traditional LMG produced by lithographic method with etching.

Keywords:
lamellar multilayer grating, dynamic diffraction, reciprocal space mapping

Введение

С появлением новых подходов к задачам рентгеновского рассеяния на многослойных дифракционных решетках (МДР) совершенствуются методы анализа дифракционных данных, в частности, все интенсивнее используется картографирование интенсивности рассеяния в обратном пространстве. Традиционно когерентное рассеяние на МДР описывается в рамках пространственно неограниченной рентгеновской волны, при этом дифракционные порядки становятся бесконечно узкими в латеральном направлении. Такой теоретический подход к задачам картографирования не применим. Поскольку в экспериментальных исследованиях рентгеновские пучки латерально ограничены, необходим новый формализм для рассмотрения дифракционной задачи. Работа посвящена развитию теории дифракции от МДР с использованием нового подхода.

Теория

Пусть на МДР, состоящая из N_Λ числа периодов шириной Λ (рис. 1), под углом ϑ_1 к оси x падает монохроматическое синхротронное излучение с длиной волны λ. Считаем, что фронт падающей волны ограничен и имеет поперечный размер s_1. Штрихи дифракционной решетки параллельны оси y, а ось z нормальна к поверхности образца и направлена вверх. Период многослойного рентгеновского зеркала (МРЗ) обозначим параметром d, общую толщину – s_z, а толщину вытравленной части МРЗ – s_{zg}. Найдем интенсивность отраженной волны I_h в направлении угла ϑ_2.

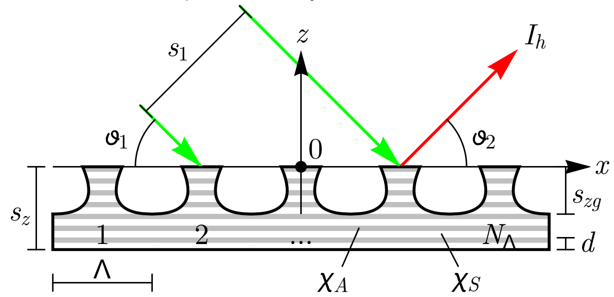

Рис. 1. Схема отражения рентгеновского пучка от ограниченной МДР.
Fig. 1. X-ray beam reflection scheme on the bounded multilayer grating.

Математическая модель рентгеновской поляризуемости МДР $\chi = (\chi_A \mathrm{a} + \chi_S(1-\mathrm{a}))\mathrm{b}$ зависит от функции $\mathrm{a}(z)$, которая моделирует распределение слоя поглотителя в объеме МРЗ, и функции $\mathrm{b}(x,z)$, позволяющей описать рельеф МДР. Считаем, что слой поглотителя и разделителя находится в аморфном состоянии, и их поляризуемости равны χ_A и χ_S соответственно. Функция a равна единице в слое поглотителя и равна нулю в слое разделителя. Функция b равна единице внутри отражающей полосы и нулю – за ее пределами. В приближении двух сильных волн считается, что в объеме МРЗ распространяется проходящая волна, поле которой имеет вид $E_0(\mathbf{r}) = A_0(\mathbf{r})\,e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}$, и дифрагированная – $E_1(\mathbf{r}) = A_1(\mathbf{r})\,e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}$. Здесь $\mathbf{k}_0$ – волновой вектор падающей волны, $|\mathbf{k}_0| = k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$, $\mathbf{h}$ – вектор обратной решетки многослойной структуры, $|\mathbf{h}| = h = 2\pi/d$. Амплитуды $A_{0,1}(\mathbf{r})$ являются медленно меняющимися функциями от пространственных координат. Формально из уравнения Гельмгольца $(\triangle + k^2(1+\chi(\mathbf{r})))E(\mathbf{r}) = 0$ можно получить следующую систему уравнений относительно неизвестных функций $\tilde{A}_{0,1}(\xi,z) = (2\pi)^{-1}\!\int\! dx\, A_{0,1}(x,z)\,e^{-i\xi x}$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} - i\eta_n(\xi)\right)\tilde{A}_n(\xi,z) = \sum_{n'=0,1} i a_{n,n'}\!\int\! d\xi'\,\tilde{\mathrm{b}}(\xi',z)\,\tilde{A}_{n'}(\xi-\xi',z). \quad (1)$$

Здесь индекс n равен 0 или 1. Пределы интегрирования от $-\infty$ до $+\infty$. В уравнениях (1): $\tilde{\mathrm{b}}$ – Фурье образ функции b, $\eta_n(\xi) = [nh(k\sin\vartheta_1 - nh/2) - \xi(k\cos\vartheta_1 + \xi/2)]/(nh - k\sin\vartheta_1)$, $a_{n,n'} = k^2\chi_{n-n'}/(2nh - 2k\sin\vartheta_1)$, $\chi_n = \chi_S\,\mathrm{sinc}(\pi n) + (\chi_A - \chi_S)\,\mathrm{sinc}(\pi n\gamma)\,e^{i\pi n\gamma}$ – Фурье коэффициенты рентгеновской поляризуемости МРЗ, γ – отношение толщины слоя поглотителя к периоду МРЗ. Заметим, что система перевязанных интегро-дифференциальных уравнений (1) зависит только от параметра ϑ_1. Граничные условия задачи: $\tilde{A}_0(\xi,0) = (A_1 s_1/\sin\vartheta_1)\,\mathrm{sinc}(\xi s_1/(2\sin\vartheta_1))$ и $\tilde{A}_1(\xi,-s_z) = 0$. Так как амплитуды $A_{0,1}(x,z)$ имеют компактный носитель на оси x, то согласно теореме Котельникова их Фурье образы можно записать в виде ряда:

$$\tilde{A}_n(\xi,z) = \sum_{m'} \tilde{A}_n(\xi_{m'},z)\,\mathrm{sinc}(B\xi - \pi m'), \quad (2)$$

где $\xi_m = \pi m/B$ – эквидистантные отчеты на оси ξ, пределы суммирования от $-\infty$ до $+\infty$. Произвольная величина $B = \Lambda N_B/2$ характеризует компактность носителя функций $A_{0,1}(x,z)$, N_B – подходящее целое число. Подставим ряд (2) в систему уравнений (1). Запишем полученные уравнения в матричной форме, ограничившись числом неизвестных функций $\tilde{A}_{0,1}(\xi_m,z)$:

$$\frac{\partial \mathbf{A}(z)}{\partial z} = \mathbf{M}(z)\cdot\mathbf{A}(z). \quad (3)$$

Здесь вектор $\mathbf{A}(z) = (\mathbf{A}_0(z)\,\mathbf{A}_1(z))^{\mathrm{T}}$, $(\mathbf{A}_{0,1}(z))_r = \tilde{A}_{0,1}(\xi_r,z)$, блочная матрица $\mathbf{M}(z)$ состоит из квадратных матриц $(\mathbf{M}_{11}(z))_{r,c} = \eta_0(\xi_r)\,\delta_{rc} + a_{0,0}\,\tilde{\mathrm{B}}_{r-c}(z)$, $(\mathbf{M}_{12}(z))_{r,c} = a_{0,1}\,\tilde{\mathrm{B}}_{r-c}(z)$, $(\mathbf{M}_{21}(z))_{r,c} = a_{1,0}\,\tilde{\mathrm{B}}_{r-c}(z)$, $(\mathbf{M}_{22}(z))_{r,c} = \eta_1(\xi_r)\,\delta_{rc} + a_{1,1}\,\tilde{\mathrm{B}}_{r-c}(z)$, индексы строки r и столбца c пробегают значения от $-M$ до M, δ_{rc} – символ Кронекера, $\tilde{\mathrm{B}}_m(z) = \Gamma(z)/N_B\,\mathrm{sinc}(\pi m\Gamma(z)/N_B)\,L_N(\pi m/N_B)$, $L_N(x) = \sin(Nx)/\sin(x)$, $N = \min(N_B, N_\Lambda)$ – эффективное число периодов МДР. Функция $\Gamma(z)$ задает модель формы отражающих полос и равна отношению ширины отражающей полосы к периоду МДР на глубине z. В области $z < -s_{zg}$ функция $\Gamma(z) = 1$. Уравнение (3) решается численным методом. Интенсивность отраженной волны в направлении угла ϑ_2 (рис. 1) равна $I_h = \left|k\sin\vartheta_2\,\tilde{A}_1(q_x,0)\right|^2$, где $q_x = k(\cos\vartheta_2 - \cos\vartheta_1)$ – проекция на ось x отклонение вектора рассеяния от узла обратной решетки, $q_z = k(\sin\vartheta_1 + \sin\vartheta_2) - h$. Для частичной суммы по m в выражении (2) необходимо, чтобы $M \geqslant B|q_x|/\pi$.

Численное моделирование

Численное моделирование проводилось для Ni/C МДР с параболической моделью формы отражающих полос [1] ($\Gamma_b = 1$, $\Gamma_t = 0{,}4$, $\Gamma_\tau = -0{,}21$). В вычислениях были использованы следующие значения параметров: $\lambda = 0{,}154$ нм,

$d = 3{,}9$ нм, $\gamma = 0{,}37$, $s_z = 0{,}273$ мкм, $s_{zg} = 0{,}156$ мкм, $\Lambda = 0{,}8$ мкм. Численный эксперимент проведен в двух конфигурациях (рис.2). В первой конфигурации пучок полностью засвечивал 41 период МДР, во второй – узкий пучок шириной 0,648 мкм испытывал дифракцию на МДР с большим числом периодов. На рис.3 представлены карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве для первой и второй конфигурации эксперимента. На рис.4 показаны сечения этих карт вдоль оси q_z при разных значениях q_x.

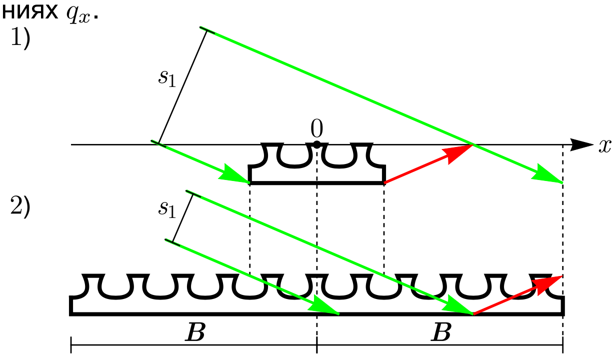

Рис. 2. Схема 1-й и 2-й конфигурации численного эксперимента.
Fig. 2. Diagram of the first and second configurations of a numerical experiment.

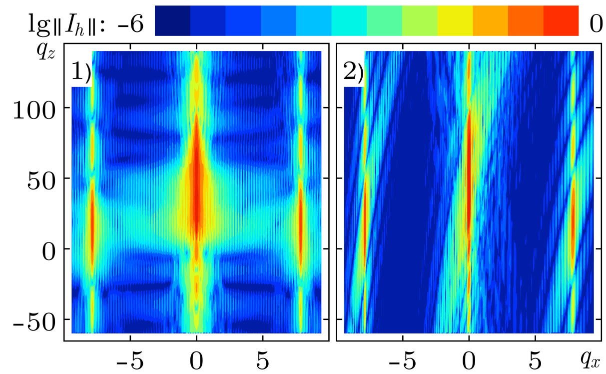

Рис. 3. Карты функции $\lg I_h(q_x, q_z)$ для 1-й и 2-й конфигурации численного эксперимента.
Fig.3. Maps of the function $\lg I_h(q_x, q_z)$ for the first and second configurations of a numerical experiment.

Распределение интенсивности рассеяния в обратном пространстве для первой и второй конфигурации существенно отличаются друг от друга не только вдоль оси q_x, но и вдоль q_z-сечений. В случае первой конфигурации МДР «купается» в падающем пучке. Поэтому фактор засветки поверхности решетки не влияет на RSM. В отличие от этого случая для второй конфигурации фактор засветки имеет существенное влияние. Точный учет параметра $\sin\vartheta_1$ в вычислениях приводит к тому, что для второй конфигурации численного эксперимента кривые отражения вдоль $q_x = -k_\Lambda$ и $q_x = k_\Lambda$, где $k_\Lambda = 2\pi/\Lambda$, имеют разную высоту и ширину максимумов, в то время как на картах, рассчитанных по упрощенным формулам [2], сателлитная структура была симметричной. Это можно связать с нелинейностью функции $1/\sin\vartheta_1$ от q_x и q_z для Ni/C МДР, у которой угол Брэгга составляет примерно 1°.

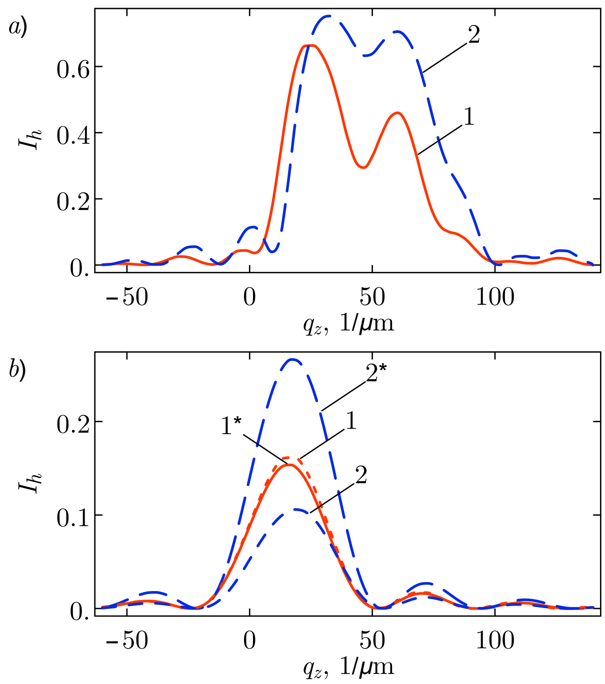

Рис. 4. Сечения карт вдоль оси q_z для первой (кривая 1) и второй (кривая 2) конфигурации численного эксперимента: *a)* $q_x = 0$; *b)* $q_x = k_\Lambda$ *и* $q_x = -k_\Lambda(^*)$.
Fig. 4. The RSM sections along the q_z axis for the first (curve 1) and second (curve 2) configurations of a numerical experiment: *a)* $q_x = 0$; *b)* $q_x = k_\Lambda$ *and* $q_x = -k_\Lambda(^*)$.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований УрО РАН (проект 18-10-2-23) и РФФИ (проект № 17-02-00090).

Литература

1. *Карпов А.В., Казаков Д.В., Павлов К.М., Пунегов В.И.* Теория рентгеновской дифракции на кристалле с поверхностным рельефом // Известия Коми научного центра УрО РАН. 2018. № 1 (33). С. 5–12.
2. *Пунегов В.И., Карпов А.В.* Статистическая динамическая теория рассеяния на многослойной дифракционной решетке // Известия РАН. Серия физическая. 2005. Т.69. № 2. С. 216–219.

References

1. *Karpov A.V., Kazakov D.V., Pavlov K.M., Punegov V.I.* Teorija rentgenovskoj difrakcii na kristalle s poverhnostnym rel'efom [Theory of X-ray diffraction on a crystal with surface relief] // Izvestija Komi nauchnogo centra UrO RAN [Proc. of Komi Sci. Centre, Ural Br., RAS]. 2018. № 1 (33). P. 5–12.
2. *Punegov V.I., Karpov A.V.* Statisticheskaja dinamicheskaja teorija rassejanija na mnogoslojnoj difrakcionnoj reshetke [Statistical dynamical theory of scattering on a multilayer diffraction grating] // Izvestija RAN. Serija fizicheskaja [Proc. of RAS. Phys. series]. 2005. Vol.69. № 2. P. 216–219.

Статья поступила в редакцию 18.03.2019.