

Брэгговские отражения многослойной дифракционной решетки

А.В. Карпов

Физико-математический институт
ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,
г. Сыктывкар
karpov@ipm.komisc.ru

Аннотация

Исследовано обратное пространство многослойной дифракционной решетки в некомпланарной геометрии дифракции. Выписаны прямые и обратные соотношения между углами волновых векторов и координатами обратного пространства. Записаны углы брэгговского и дифракционного отражений. На примере продемонстрированы конусы дифракции и карты обратного пространства.

Ключевые слова:

многослойная дифракционная решетка, условие Вульфа-Брэгга, конус дифракции, карты обратного пространства

Введение

Известные и простые условия дифракции Вульфа-Брэгга рентгеновских лучей в кристаллах основываются на принципе конструктивной интерференции и законе отражения. Похожие условия брэгговской дифракции можно записать для многослойных дифракционных решеток (далее — МДР). Их можно найти в ряде работ, например в [1, 2]. Однако они посвящены компланарной дифракции. Настоящая статья призвана восполнить этот пробел для некомпланарной дифракции рентгеновских лучей в МДР. На рис. 1 представлена схема некомпланарной дифракции. Введем систему координат: пусть оси x и y направлены вдоль поверхности МДР, ось z — уходит вглубь. МДР может иметь произвольный азимутальный поворот вокруг оси z с углом φ . Период дифракционной решетки обозначим как d_φ , период многослойного рентгеновского зеркала (МРЗ) — как d_z . Считаем, что плоская волна с длиной волны λ и волновым вектором \vec{k}_T падает на МДР под углом скольжения ϑ_T , а отраженная волна распространяется с волновым вектором \vec{k}_R , направление которого можем обозначить полярным ϑ_R и азимутальным φ_R углами:

$$\begin{cases} \vec{k}_T = k \cos \vartheta_T \vec{e}_x + k \sin \vartheta_T \vec{e}_z, \\ \vec{k}_R = k \cos \vartheta_R \cos \varphi_R \vec{e}_x + k \cos \vartheta_R \sin \varphi_R \vec{e}_y - k \sin \vartheta_R \vec{e}_z. \end{cases} \quad (1)$$

Модуль волновых векторов равен волновому числу в вакууме $k = 2\pi/\lambda$.

Bragg's reflections of a multilayer grating

A.V. Karpov

Institute of Physics and Mathematics,
Federal Research Centre Komi Science Centre, Ural Branch, RAS,
Syktyvkar
karpov@ipm.komisc.ru

Abstract

The reciprocal space of multilayer grating in the non-coplanar geometry of diffraction is investigated. Direct and inverse relations between the angles of wave vectors and coordinates of reciprocal space are written out. The Bragg's and diffraction reflection angles are written. By example, cones of diffraction and reciprocal space mapping are demonstrated.

Keywords:

multilayer grating, Bragg's law, diffraction cone, reciprocal space mapping

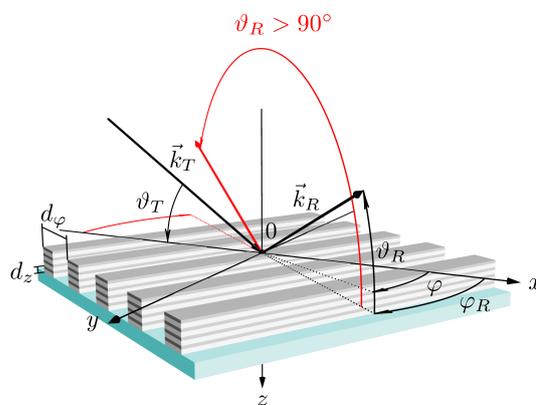


Рисунок 1. Схема некомпланарной дифракции рентгеновской волны на МДР.

Figure 1. Schematic representation of non-coplanar X-ray diffraction on multilayer grating.

1. Обратное пространство

Рентгенодифракционный анализ кристаллов принято проводить в обратном пространстве. Исследование обратного пространства кристаллов некомпланарной дифракции в Брэгг- и Лауэ-геометрии можно найти в работе [3]. Следуя этой традиции, рассмотрим вектор дифракции \vec{Q} как радиус-вектор обратного пространства МДР:

$$\vec{Q} = \vec{k}_R - \vec{k}_T. \quad (2)$$

Запишем определение (2) для каждой проекции $Q_{x|y|z}$:

$$\begin{cases} Q_x = k \cos \vartheta_R \cos \varphi_R - k \cos \vartheta_T, \\ Q_y = k \cos \vartheta_R \sin \varphi_R, \\ Q_z = -k \sin \vartheta_T - k \sin \vartheta_R. \end{cases} \quad (3)$$

Равенства (3) будем называть *прямыми соотношениями*. Добавим к ним *определенное условие*:

$$\vartheta_R = 90^\circ \Rightarrow \varphi_R = 0^\circ. \quad (4)$$

Углы в уравнениях (3) имеют естественные ограничения:

$$\begin{cases} 0^\circ < \vartheta_T < 180^\circ, \\ 0^\circ < \vartheta_R < 180^\circ, \\ -90^\circ < \varphi_R \leq 90^\circ. \end{cases} \quad (5)$$

Следовательно, есть ограничения для \vec{Q} :

$$\begin{cases} Q_x^2 + Q_y^2 + Q_z^2 \leq 2k\sqrt{Q_x^2 + Q_z^2}, \\ (Q_x \pm k)^2 + Q_y^2 + Q_z^2 \geq k^2, \\ Q_z \leq 0. \end{cases} \quad (6)$$

Все множество векторов \vec{Q} , удовлетворяющих условию (6), назовем *областью определения* \mathbb{Q} уравнений (3). Область \mathbb{Q} показана на рис. 2. Она имеет форму половины тора, на торцах которого вырезаны две полусферы радиусом k . Если вектор \vec{Q} принадлежит \mathbb{Q} , то возможны *обратные соотношения*.

$$\begin{cases} \cos \vartheta_T = -\frac{Q_x}{2k}C - s\frac{Q_z}{2k}\sqrt{\frac{(2k)^2}{Q_x^2 + Q_z^2} - C^2}, \\ \cos \vartheta_R = S\sqrt{\left(\cos \vartheta_T + \frac{Q_x}{k}\right)^2 + \left(\frac{Q_y}{k}\right)^2}, \\ \sin \varphi_R = \frac{Q_y}{k \cos \vartheta_R}, \end{cases} \quad (7)$$

здесь $S = \text{sign}(\cos \vartheta_T + Q_x/k)$, $C = 1 + \frac{Q_y^2}{Q_x^2 + Q_z^2}$.

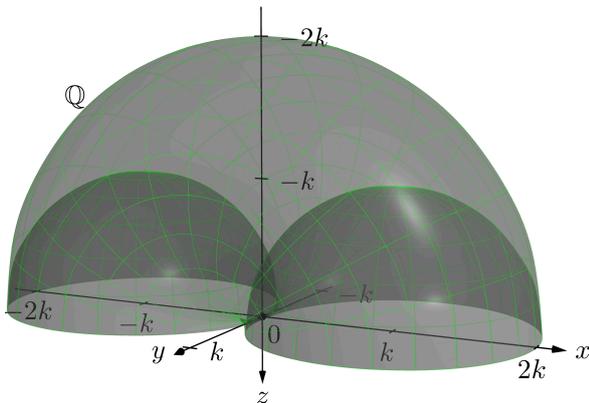


Рисунок 2. Область определения \mathbb{Q} .
Figure 2. The definition region \mathbb{Q} .

Уравнения (3) имеют два решения, и знак $s = \pm 1$ различает их. На рис. 3 синими (нижними) векторами показано решение с $s = +1$, красными (верхними) – с $s = -1$.

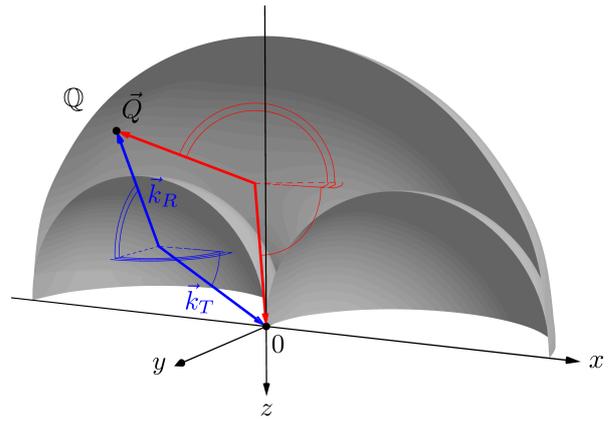


Рисунок 3. Два решения для \vec{Q} . Одинарной линией показаны углы ϑ_T , двойной – ϑ_R , тройной – φ_R .
Figure 3. The two solutions for \vec{Q} . Single lines show angles ϑ_T , double lines – ϑ_R , triple lines – φ_R .

2. Брэгговские отражения

Периодичности кристаллической решетки в прямом пространстве соответствует сетка узлов, составленная из векторов обратной решетки \vec{h}_i , в обратном пространстве. МДР имеет латеральную и вертикальную периодичность. Латеральной периодичности МДР сопоставим вектор

$$\vec{h}_\varphi = h_\varphi \cos \varphi \vec{e}_x + h_\varphi \sin \varphi \vec{e}_y, \quad (8)$$

вертикальной –

$$\vec{h}_z = -h_z \vec{e}_z, \quad (9)$$

а сетке узлов обратной решетки МДР –

$$\vec{h}_{m,n} = m \vec{h}_\varphi + n \vec{h}_z, \quad (10)$$

где m и n – целые числа, называемые *порядками дифракции*. Модули векторов равны $h_{\varphi|z} = 2\pi/d_{\varphi|z}$.

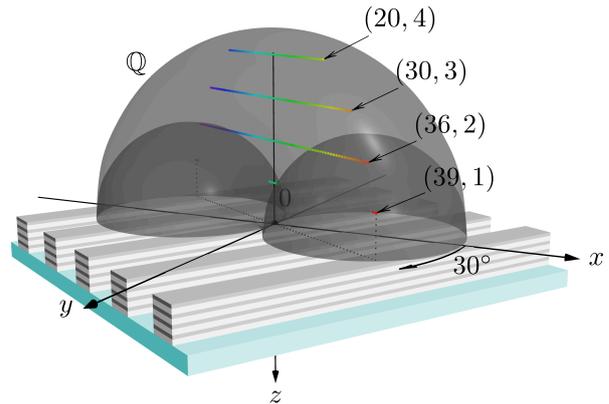


Рисунок 4. Пример обратной решетки МДР.
Figure 4. The example of a reciprocal lattice of multilayer grating.

На рис. 4 показан пример сетки из узлов $\vec{h}_{m,n}$. Цифрами указаны дифракционные порядки (m, n) . Цветом выделены точки с одинаковыми m . Все точки лежат в одной плоскости. В моделировании используем следующие значения параметров (безразмерные):

$$d_\varphi = 1, d_z = d_\varphi/10, \lambda = \sqrt{4/2125}, \varphi = 30^\circ. \quad (11)$$

На примере видно, как полусферы разрывают цепочку узлов с $n = 1$. В связи с этим можно говорить о разрешенных (реализуемых) и запрещенных (нереализуемых) дифракционных порядках.

Запишем условие Вульфа-Брэгга в векторном виде для МДР:

$$\vec{Q} = \vec{h}_{m,n}. \quad (12)$$

Из (7) и (12) следуют решения:

$$\begin{cases} \cos \theta_{m,n}^{(T)} = -\frac{m\lambda C \cos \varphi}{2d_\varphi} + sn \sqrt{\frac{d_\varphi^2}{(md_z \cos \varphi)^2 + (nd_\varphi)^2} - \left(\frac{\lambda C}{2d_z}\right)^2}, \\ \cos \theta_{m,n}^{(R)} = S \sqrt{\left(\cos \theta_{m,n}^{(T)} + \frac{m\lambda \cos \varphi}{d_\varphi}\right)^2 + \left(\frac{m\lambda \sin \varphi}{d_\varphi}\right)^2}, \\ \sin \phi_{m,n}^{(R)} = \frac{m\lambda \sin \varphi}{d_\varphi \cos \theta_{m,n}^{(R)}}. \end{cases} \quad (13)$$

Здесь

$$S = \text{sign} \left(\cos \theta_{m,n}^{(T)} + \frac{m\lambda \cos \varphi}{d_\varphi} \right),$$

$$C = \frac{(md_z)^2 + (nd_\varphi)^2}{(mh_z \cos \varphi)^2 + (nd_\varphi)^2}.$$

Если выполняется условие

$$\vartheta_T = \theta_{m,n}^{(T)}, \quad \vartheta_R = \theta_{m,n}^{(R)}, \quad \varphi_R = \phi_{m,n}^{(R)}, \quad (14)$$

то будем говорить, что наблюдается *брэгговское отражение* в (m, n) -й дифракционный порядок. Заметим: 1) одному и тому же дифракционному порядку соответствуют две конфигурации углов; 2) брэгговское отражение некомпланарной дифракции характеризуется тремя углами Брэгга.

3. Дифракционные отражения и конусы дифракции

Если угол ϑ_T не соответствует точному условию (14), то, чтобы найти направление отраженной волны в (m, n) -й дифракционный порядок, необходимо использовать *закон отражения для МДР*:

$$\left(\vec{Q} - \vec{h}_{m,n} \right) \cdot \vec{e}_{x|y} = 0. \quad (15)$$

Уравнение (15) сохраняет только тангенциальные компоненты векторов \vec{k}_T и \vec{k}_R в условии Вульфа-Брэгга. Из (15) следует, что

$$\begin{cases} \cos \theta_m^{(R)} = S \sqrt{\left(\cos \vartheta_T + m \frac{\lambda \cos \varphi}{d_\varphi} \right)^2 + \left(m \frac{\lambda \sin \varphi}{d_\varphi} \right)^2}, \\ \sin \phi_m^{(R)} = m \frac{\lambda \sin \varphi}{d_\varphi \cos \theta_m^{(R)}}, \end{cases} \quad (16)$$

здесь $S = \text{sign} \left(\cos \vartheta_T + \frac{m\lambda \cos \varphi}{d_\varphi} \right)$. Равенства (16) определяют углы *дифракционного отражения* $\theta_m^{(R)}$ и $\phi_m^{(R)}$. Эти углы однозначны и не зависят от n . Углы брэгговских отражений (13) являются частным случаем углов дифракционных отражений (16): если $\vartheta_T = \theta_{m,n}^{(T)}$, то $\theta_m^{(R)} = \theta_{m,n}^{(R)}$ и $\phi_m^{(R)} = \phi_{m,n}^{(R)}$.

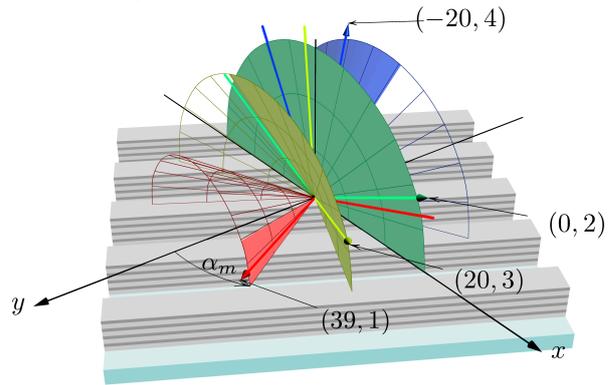


Рисунок 5. Пример конусов дифракции и брэгговских отражений отдельных (m, n) -х дифракционных порядков.

Figure 5. The example of diffraction cones and Bragg's reflections of individual (m, n) -diffraction orders.

В некомпланарной геометрии волновые векторы дифракционных отражений направлены вдоль образующих линий прямых круговых конусов. Пример с параметрами (11) демонстрирует на рис. 5 конусы дифракции. Стрелками указаны волновые вектора $\vec{k}_{m,n}^{(T)}$ и $\vec{k}_{m,n}^{(R)}$ отдельных брэгговских отражений, цифрами — номера дифракционных порядков (m, n) , цветная заливка конусов — допустимые направления дифракционных отражений. Некомпланарную дифракцию называют *конической дифракцией*. Прямой круговой конус для m -дифракционного порядка имеет раствор угла при вершине, равный $2\alpha_m$, где

$$\alpha_m = \arccos \left(m \frac{\lambda \sin \varphi}{d_\varphi} \right). \quad (17)$$

Ось конуса лежит на оси y . Если $\alpha_m < 90^\circ$, то расширение конуса сонаправлено с осью y ; если $\alpha_m > 90^\circ$, то расширение будет в противоположную сторону от оси y ; если $\alpha_m = 90^\circ$, то конус вырождается в диск.

4. Компланарная дифракция

Компланарная дифракция, когда векторы \vec{k}_T , \vec{k}_R и \vec{e}_z лежат в одной плоскости, является частным случаем некомпланарной дифракции с углом $\varphi = 0^\circ$. Следовательно, $Q_y = 0$ и $\varphi_R = 0$, а основные решения значительно упрощаются:

$$\begin{cases} \cos \vartheta_{T|R} = \mp \frac{Q_x}{2k} - s \frac{Q_z}{2k} \sqrt{\frac{(2k)^2}{Q_x^2 + Q_z^2} - 1}, \\ \cos \theta_{m,n}^{(T|R)} = \mp \frac{m\lambda}{2d_\varphi} \\ - sn \sqrt{\frac{d_\varphi^2}{(md_z)^2 + (nd_\varphi)^2} - \left(\frac{\lambda}{2d_z}\right)^2}, \\ \cos \theta_m^{(R)} = \cos \vartheta_T + \frac{m\lambda}{d_\varphi}. \end{cases} \quad (18)$$

Заметим, что если конфигурации углов $(\vartheta_T, \vartheta_R)$ соответствует вектор дифракции \vec{Q} , то нетрудно убедиться, что конфигурации углов $(\vartheta'_T, \vartheta'_R)$, где

$$\vartheta'_T = \pi - \vartheta_R, \quad \vartheta'_R = \pi - \vartheta_T \quad (19)$$

соответствует тот же вектор дифракции \vec{Q} .

5. Карты обратного пространства

Картирование интенсивности рассеяния (RSM – reciprocal space mapping), когда строится двумерная карта контуров равных интенсивностей в логарифмическом масштабе в координатах обратного пространства, является важным методом анализа дифракционных данных. В качестве пары координат выбирают (Q_y, Q_x) , (Q_y, Q_z) или (Q_x, Q_z) . Исследование некомпланарной дифракции поверхностных дифракционных решеток методом малоуглового рассеяния при скользющем падении пучка (GISAXS – grazing-incidence small-angle scattering) с помощью RSM можно найти в ряде работ [4–9]. На примере (11) проанализируем положение дифракционных отражений на RSM, представленных на рис. 6. На картах обратного пространства точкам соответствуют дифракционные отражения при угле $\vartheta_T \approx 12.5^\circ$, указаны числа m . Точечными линиями показано, как меняются положения дифракционных отражений в обратном пространстве при смене угла ϑ_T . Эти линии принято называть *усеченными стержнями дифракционной решетки* (GTR – grating truncation rod). Если дифракционные отражения на картах (Q_y, Q_x) (рис. 6 а) выстроены в линию, то дифракционные отражения на картах (Q_y, Q_z) (рис. 6 б) лежат на дуге, которую можно описать каноническим уравнением эллипса:

$$\frac{(Q_y + k \cos \vartheta_T \sin(2\varphi)/2)^2}{(k \sin \varphi)^2 (1 - \cos^2 \vartheta_T \sin^2 \varphi)} + \frac{(Q_z + k \sin \vartheta_T)^2}{k^2 (1 - \cos^2 \vartheta_T \sin^2 \varphi)} = 1. \quad (20)$$

Из (20) следует, что, зная экспериментальный угол ϑ_T и точки (Q_y, Q_z) на линии дуги дифракционных отражений, можно попытаться восстановить угол азимутального поворота φ .

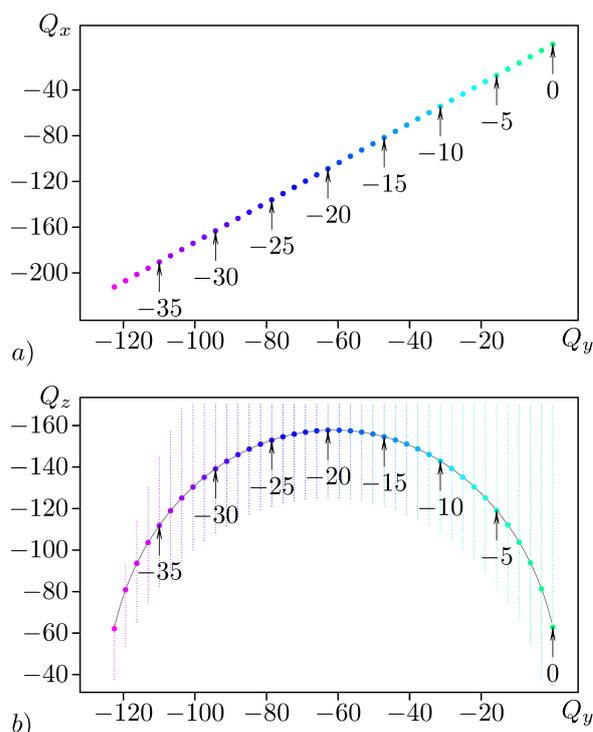


Рисунок 6. Примеры карт обратного пространства. Точками показаны дифракционные отражения для угла $\vartheta_T \approx 12.5^\circ$, точечными линиями – положения дифракционных отражений при смене угла ϑ_T ; цифрами указаны числа m .

Figure 6. The examples of reciprocal space maps. Dots show diffraction reflections for angle $\vartheta_T \approx 12.5^\circ$, dotted lines show positions of diffraction reflections when the angle changes; numbers indicate m .

Заключение

Применяя к МДР аналогичное условие Вульфа-Брэгга, записанное для кристаллов в векторном виде, в работе были получены углы Брэгга МДР в некомпланарной дифракции. Условие брэгговского отражения МДР определяется тремя углами. При углах Брэгга должно наблюдаться сильное дифракционное отражение. Однако закон Брэгга не учитывает эффект преломления рентгеновских лучей в МДР и конечного углового интервала дифракционного отражения. Понятно, что в этом случае необходимы поправки к углам, учитывающие эти эффекты. Здесь на помощь приходит закон отражения (15), который позволяет вычислить углы дифракционного отражения, если угол падающей волны отличается от условия Вульфа-Брэгга. Если МДР имеет азимутальный поворот и ее штрихи не перпендикулярны волновому вектору падающей волны, то дифракционные отражения с числом $m \neq 0$ будут распределены вдоль образующих линий прямых круговых конусов. Соответствующая дифракционному отражению область обратного пространства (6) представляет собой половинку тора, из торцов которого исключены полусферы. Радиусы окружности и оси вращения тора, а также радиус полусфер равны волновому числу падающей волны. Это приводит к тому, что для МДР так же, как и для кристаллов, существуют запрещенные и разрешенные дифракционные порядки. Одному и тому же дифракционному порядку соответствуют две разные конфигурации углов падающей и отраженной волн.

Исследование выполнено при финансовой поддержке
Министерства науки и высшего образования России в рам-
ках соглашения N 075-15-2021-1351.

References

1. Sammar, A. Diffraction of multilayer gratings and zone plates in the X-ray region using the Born approximation / A. Sammar, J.-M. André // *J. of the Optical Society of America A-optics Image Science and Vision*. – 1993. – Vol. 10. – P. 600–613.
2. Yang, X. Design of a multilayer-based collimated plane-grating monochromator for tender X-ray range / X. Yang, H. Wang, M. Hand, K. Sawhney, B. Kaulich [et al.] // *J. of Synchrotron Radiation*. – 2017. – Vol. 24, № 1. – P. 168–174.
3. Yefanov, O. Accessible reciprocal-space region for non-coplanar Bragg and Laue geometries / O. Yefanov // *J. of Applied Crystallography*. – 2008. – Vol. 41. – P. 110–114.
4. Mikulík, P. Coplanar and non-coplanar X-ray reflectivity characterization of lateral W/Si multilayer gratings / P. Mikulík, M. Jergel, T. Baumbach, E. Majková, E. Pinčík [et al.] // *J. of Physics D: Applied Physics*. – 2001. – Vol. 34. – P. A188–A192.
5. Rueda, D. Grazing-incidence small-angle X-ray scatter-
ing of soft and hard nanofabricated gratings / D. Rueda, I. Martín-Fabiani, M. Soccio, N. Alayo, F. Pérez-Murano [et al.] // *J. of Applied Crystallography*. – 2012. – V. 45. – P. 1038–1045.
6. Wernecke, J. Direct structural characterisation of line gratings with grazing incidence small-angle X-ray scattering / J. Wernecke, F. Scholze, M. Krumrey // *Review of Scientific Instruments*. – 2012. – Vol. 83, № 10, – 103906.
7. Suh, H.S. Characterization of the shape and line-edge roughness of polymer gratings with grazing incidence small-angle X-ray scattering and atomic force microscopy / H.S. Suh, X. Chen, P.A. Rincon-Delgadillo, Z. Jiang, J. Strzalka [et al.] // *J. of Applied Crystallography*. – 2016. – Vol. 49, № 3. – P. 823–834.
8. Pflüger, M. Grazing incidence small angle X-Ray scattering (GISAXS) on small targets using large beams / M. Pflüger, V. Soltwisch, J. Probst, F. Scholze, M. Krumrey // *IUCrJ*. – 2017. – Vol. 4. – P. 431–438.
9. Soltwisch, V. Reconstructing detailed line profiles of lamellar gratings from GISAXS patterns with a Maxwell solver / V. Soltwisch, A. Fernández Herrero, M. Pflüger, A. Haase, J. Probst [et al.] // *J. of Applied Crystallography*. – 2017. – Vol. 50, № 5. – P. 1524–1532.

Для цитирования:

Карпов, А.В. Брэгговские отражения многослойной дифракционной решетки / А.В. Карпов // *Известия Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук. Серия «Физико-математические науки»*. – 2023. – № 4 (62). – С. 91–95.

For citation:

Karpov, A.V. Breggovskie otrazheniya mnogoslonoj difrakcionnoj reshetki [Bragg's reflections of a multilayer grating] / A.V. Karpov // *Proceedings of the Komi Science Centre of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences. Series "Physical and Mathematical Sciences"*. – 2023. – № 4 (62). – P. 91–95.

Дата поступления статьи: 27.06.2023

Received: 27.06.2023