

Картографирование рентгеновской Лауэ-дифракции от совершенных и клиновых многослойных структур

Д. В. Казаков, С. И. Колосов, В. И. Пунегов

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

kazakov@ipm.komisc.ru,
kolos@ipm.komisc.ru,
vpunegov@ipm.komisc.ru

Аннотация

Выполнено численное моделирование распределения интенсивности рентгеновской Лауэ-дифракции в обратном пространстве от совершенных и клиновых многослойных структур. Показано, что для пространственно ограниченных пучков необходимо учитывать дифракцию рентгеновских волн на краях коллиматоров или щелей дифракционной схемы. Проведено сравнение численного картографирования ограниченных рентгеновских пучков в рамках геометрической оптики и приближения Френеля.

Ключевые слова:

рентгеновская дифракция в геометрии Лауэ, многослойные структуры, карты рассеяния в обратном пространстве, приближение Френеля, геометрическая оптика, клиновые структуры, пространственно ограниченные пучки

Введение

Многослойные структуры (МС) широко применяются в установках синхротронного излучения для транспортировки рентгеновских пучков, фокусировки излучения, EUV-литографии и астрономии [1–4]. Преимущественно такие МС функционируют в геометрии скользящего падения Брэгга. Динамическая же Лауэ-дифракция рентгеновских лучей в МС обладает рядом особенностей. Одной из ключевых является возникновение маятникового эффекта, в результате которого интенсивность рентгеновского пучка проходящей волны периодически перекачивается в дифракционный пучок и обратно по мере движения сквозь объем МС [5]. Эта важная особенность Лауэ-дифракции в МС принципиально меняет распределение энергии рентгеновского пучка по глубине МС и требует строгого учета [6].

Новая волна интереса к изучению Лауэ-дифракции в многослойных структурах возникла совместно с идеей создания многослойных Лауэ-линз (МЛЛ) для фокусировки жесткого синхротронного излучения [7]. Однако в работе [8] показано, что МЛЛ не являются фокусирующими рентгенооптическими элементами в полном смысле этого слова. Тем не менее научные группы продолжают разработку и изго-

Reciprocal space mapping of X-ray Laue diffraction in perfect and wedge multilayers

D. V. Kazakov, S. I. Kolosov, V. I. Punegov

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

kazakov@ipm.komisc.ru,
kolos@ipm.komisc.ru,
vpunegov@ipm.komisc.ru

Abstract

Numerical simulation of the X-ray Laue diffraction intensity distribution in reciprocal space from perfect and wedge multilayers was performed. It is shown that for spatially bounded X-ray beams, diffraction at the edges of collimators or slits in the diffraction scheme should be taken into account. A comparison of numerical reciprocal space mapping simulations using the geometrical optics approximation and the Fresnel approximation was conducted.

Keywords:

X-ray Laue diffraction, multilayer structures, reciprocal space mapping, Fresnel approximation, geometrical optics, wedged structures, spatially bounded beams

товление МЛЛ методом магнетронного напыления — процессом, сопряженным со значительными технологическими сложностями. Важно, что при разработке МЛЛ исследователи отдают предпочтение их клиновым модификациям, где период структуры изменяется как по толщине, так и по глубине секционированной (sectioned) системы [9, 10].

В связи с этим первым этапом в исследовании МЛЛ является детальное изучение дифракции Лауэ в МС как с постоянным периодом, так и в клиновых (градиентных) многослойных структурах. Для клиновых структур с градиентом периода по глубине применяются рекуррентные соотношения, где система разбивается на элементарные вертикальные полосы с локально постоянным периодом [11]. При этом важно отметить, что в случае пространственно ограниченных рентгеновских пучков, используемых в экспериментах, необходимо учитывать дифракционные эффекты на краях коллиматоров и щелей, что выходит за рамки простой модели неограниченных плоских волн [12]. Для моделирования таких экспериментов требуется применение двумерных уравнений Такаги-Топена или методов, учитывающих распространение волн в приближении Френеля.

Особую актуальность это исследование приобретает для структур типа W/Si и Mo/Si, где при энергиях 9.5–19.5 кэВ наблюдаются выраженные эффекты фотоэлектрического поглощения и интерференции [13]. При этом традиционный подход к определению глубины МС по периоду интерференционных полос ($L_x = 2\pi/\eta_0$), широко используемый в экспериментах [13], может приводить к существенным ошибкам при низком угловом разрешении, что показано в численных расчётах [11].

В данной работе представлен сравнительный анализ дифракции в совершенных и клиновых МС с учетом волновой природы рентгеновского излучения и пространственных ограничений пучка.

1. Динамическая Лауэ-дифракция ограниченных рентгеновских пучков в плоскопараллельной МС

Используя уравнения дифракции рентгеновских лучей в периодических структурах с учетом граничных условий Лауэ-дифракции, получаем решение для амплитуды дифракционного пучка в обратном пространстве (reciprocal space mapping, RSM):

$$E_1(q_x, q_z) = i \frac{a_1}{2\pi} f e^{i\psi L_x} \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\kappa \frac{\sin(\hat{\xi} L_x/2)}{\hat{\xi}/2} \hat{Y}_{in}(\kappa) \hat{Y}_{ex}(\kappa - q_z), \quad (1)$$

где $\hat{\xi} = \sqrt{(q_x - (q_z - 2\kappa) \tan \theta_B)^2 + 4a_1 a_{-1}}$, $a_0 = \pi\chi_0/(\lambda \cos \theta_B)$, $a_1 = C\pi\chi_1/(\lambda \cos \theta_B)$, $a_{-1} = a_1$, θ_B — угол Брэгга, χ_0 и χ_1 — коэффициенты Фурье рентгеновской поляризуемости в направлении прохождения и дифракции соответственно, λ — длина волны рентгеновского излучения в вакууме, C — поляризационный фактор, f — фактор затухания, величина которого зависит от совершенства МС.

Трехосевая регистрация рентгеновских волн в обратном пространстве зависит от углового положения образца ω и анализатора ε (или от положения канала позиционно-чувствительного детектора). В симметричной геометрии Лауэ эти углы связаны с проекциями отклонения вектора дифракции в горизонтальном и вертикальном направлениях соотношениями $q_x = k \sin \theta_B (2\omega - \varepsilon)$ и $q_z = -k \cos \theta_B \varepsilon$.

Множитель

$$\hat{Y}_{in}(\kappa) = P(\kappa, L_1) \frac{\sin(\kappa L_z^{(in)}/2)}{\kappa/2}$$

в (1) является граничной функцией падающей рентгеновской волны в пространстве Фурье, где $L_z^{(in)} = w_1/\cos \theta_B$, w_1 — ширина падающего рентгеновского микропучка (рис. 1).

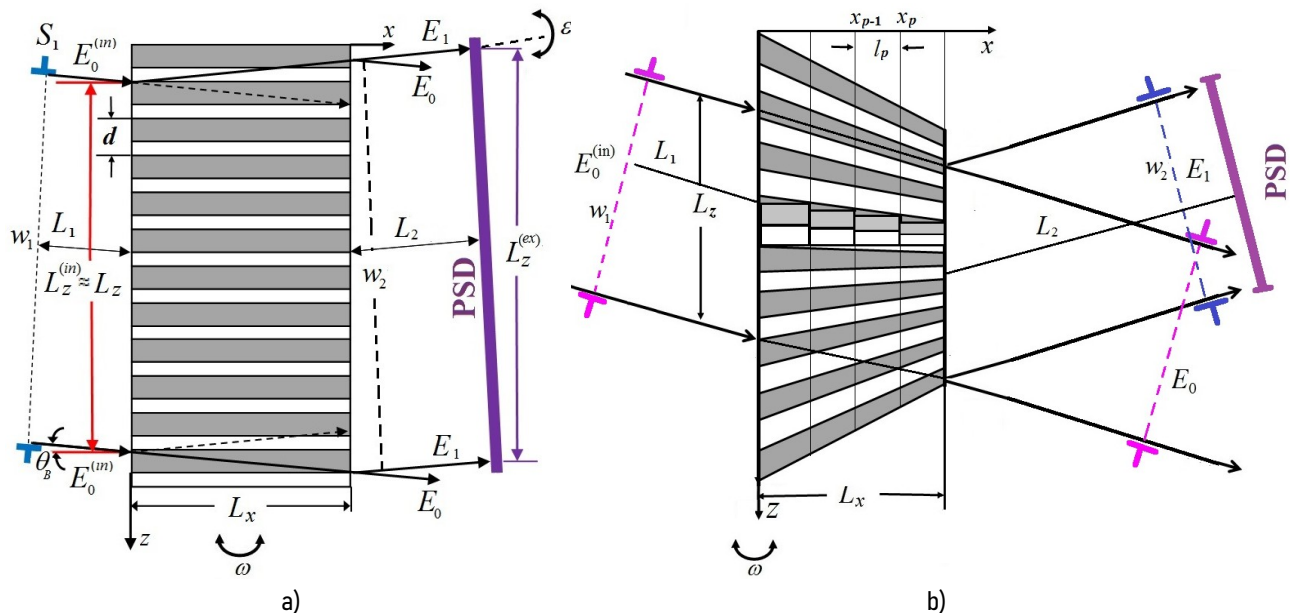


Рисунок 1. Схема Лауэ-дифракции в: а) совершенной и б) клиновой многослойных структурах.

Обозначения: L_x — глубина структуры; L_z — толщина засветки; S_1 — коллимирующая щель; w_1 — размер падающего пучка; $L_z^{(in)}$ — проекция падающего пучка на входную грань мультислоя; L_1 — расстояние от щели S_1 до входной грани мультислоя; L_2 — расстояние от выходной грани до позиционно-чувствительного детектора (PSD); w_2 — поперечная ширина выходящего пучка; $L_z^{(ex)}$ — проекция выходящего пучка на ось z .
Figure 1. Laue diffraction scheme in: a) perfect and b) wedged multilayer structures. Symbols: L_x — structure depth; L_z — exposure thickness; S_1 — collimating slit; w_1 — incident beam size; $L_z^{(in)}$ — projection of the incident beam onto the multilayer input facet; L_1 — distance from slit S_1 to the multilayer input facet; L_2 — distance from the output facet to the position-sensitive detector (PSD); w_2 — output beam width; $L_z^{(ex)}$ — projection of the output beam onto the z -axis.

Коэффициент

$$P(\kappa, L_1) = \exp \left(-i\lambda \frac{L_1 \kappa^2}{4\pi(\cos \theta_B)^2} \right)$$

представляет собой пропагатор излучения в пространстве Фурье в приближении Френеля, где L_1 — расстояние от пространственного ограничителя S_1 (коллиматора или щели) до входной поверхности МС. В случае геометрической оптики пропагатор $P(\kappa, L_1) = 1$.

Второй множитель $\hat{Y}_{ex}$ в (1)

$$\hat{Y}_{ex}(\kappa - q_z) = P(\kappa - q_z, L_2) \frac{\sin \left(L_z^{(ex)}(\kappa - q_z)/2 \right)}{(\kappa - q_z)/2}$$

является коэффициентом пропускания дифрагированной волны в пространстве Фурье, где $L_z^{(ex)}$ — ширина дифрагированного рентгеновского пучка. Распространение отраженной рентгеновской волны от МС до PSD-детектора (анализатора) описывается пропагатором

$$P(\kappa - q_z, L_2) = \exp \left(-i\lambda \frac{L_2}{4\pi(\cos \theta_B)^2} (\kappa - q_z)^2 \right),$$

где L_2 — расстояние от выходной поверхности МС до PSD-детектора.

2. Динамическая Лауэ-дифракция ограниченных рентгеновских пучков в клиновой МС

В клиновой МС период изменяется в латеральном направлении (рис. 1 б). Следовательно, рентгеновская Лауэ-дифракция на такой структуре не может быть рассчитана с использованием решения (1). Процедура расчета основана на рекуррентных соотношениях [11]. В этом случае МС разбивается на элементарные ячейки (вертикальные полосы) (рис. 1 б). Период в отдельной элементарной вертикальной полосе толщиной $l_p = x_p - x_{p-1}$, где $p = 1, 2, \dots, P$ определяет номер полосы. Если для первой полосы период МС равен d , то для полосы с номером p с рассогласованием Δd_p период записывается как $d_p = d - \Delta d_p$.

Угловая переменная выражается как $\eta^p = \eta - h\varepsilon_p^x$, где параметр $\varepsilon_p^x = \Delta d_p \tan \theta_B / d$ определяет рассогласование периода МС с номером p , $h = 2\pi/d$ — величина периода системы в обратном пространстве. Для пространственно ограниченных рентгеновских пучков рекуррентные соотношения Лауэ-дифракции имеют вид:

$$\begin{aligned} \hat{E}_0^{p+1}(\kappa, \eta^p; x_{p+1}) &= \left(B_1^0 \exp(i\hat{\xi}_1^p l_p) - B_2^0 \exp(i\hat{\xi}_2^p l_p) \right) \hat{Y}_{in}(\kappa, L_z^{(in)}, L_1), \\ \hat{E}_1^{p+1}(\kappa, \eta^p; x_{p+1}) &= \left(B_1^1 \exp(i\hat{\xi}_1^p l_p) - B_2^1 \exp(i\hat{\xi}_2^p l_p) \right) \hat{Y}_{in}(\kappa, L_z^{(in)}, L_1), \end{aligned} \quad (2)$$

где

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

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

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

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

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

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

В терминах трехосевой рентгеновской дифрактометрии решение для численного моделирования записывается как:

$$\begin{aligned} E_1(q_x, q_z) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\kappa}{2\pi} \hat{E}_1^P(\kappa, q_x - q_z \tan \theta_B - h\varepsilon, x_P) \times \\ &\times \hat{Y}_{in}(\kappa, L_z^{(in)}, L_1) \hat{Y}_{ex}(\kappa - q_z, L_z^{(ex)}, L_2). \end{aligned} \quad (3)$$

В полученном интегральном уравнении амплитуда

$$\begin{aligned} \hat{Y}_{ex}(\kappa - q_z, L_z^{(ex)}, L_2) &= P(\kappa - q_z, L_2) \times \\ &\times \frac{\sin \left([\kappa - q_z] L_z^{(ex)} / 2 \right)}{[\kappa - q_z] / 2} \end{aligned}$$

определяет граничные условия на выходящей грани для дифракционного пучка в геометрии Лауэ.

3. Численное моделирование

Численное моделирование углового распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей выполнено для МС W/Si . Длина волны падающего синхротронного излучения составляла $\lambda = 0,062$ нм. Период системы W/Si равен $d = d_W + d_{Si} = 6$ нм, где $d_W = d_{Si} = 3$ нм, угол Брэгга $\theta_B = 5,17$ мрад. Оптические константы для МС равны $\chi_0 = (-9,35 + i0,68) \times 10^{-6}$ и $\chi_1 = (-4,6 + i0,43) \times 10^{-6}$.

Период МС изменяется по глубине от 6,00 до 5,95 нм, т. е. на 0,05 нм. Карты RSM рассчитаны для МС W/Si с секционной глубиной $L_x = 7$ мкм как для совершенной структуры, так и для клиновой системы. Ширина падающего рентгеновского пучка равна $w_1 \approx L_z = 14$ мкм. Для совершенных и клиновых МС вычисления выполнены в рамках геометрической оптики, когда искажениями рентгеновской волны от щели или коллиматора можно пренебречь, а также в приближении Френеля с $L_1 = L_2 = 0,3$ м, $w_1 \approx L_z^{(in)} = 14$ мкм и $w_2 \approx L_z^{(ex)} = 7$ мкм (см. рис. 1).

На рис. 2 показаны расчетные карты RSM от совершенной и клиновой многослойных структур W/Si в приближении геометрической оптики. На рис. 3 представлены результаты вычислений карт RSM от совершенной и клиновой МС W/Si в приближении Френеля. Контурные интенсивности рассеяния с учетом искажений при прохождении рентгеновской волны для геометрической оптики и приближения Френеля в деталях отличаются. Это отличие в основном проявляется в вертикальном направлении.

Таким образом, мы теоретически исследовали Лауэ-дифракцию рентгеновских пучков в секционированных многослойных структурах. Как и в геометрии Брэгга, в слу-

чае Лауэ-дифракции для ограниченных пучков в процессе расчетов карт RSM необходимо выбирать граничные условия в приближении Френеля.

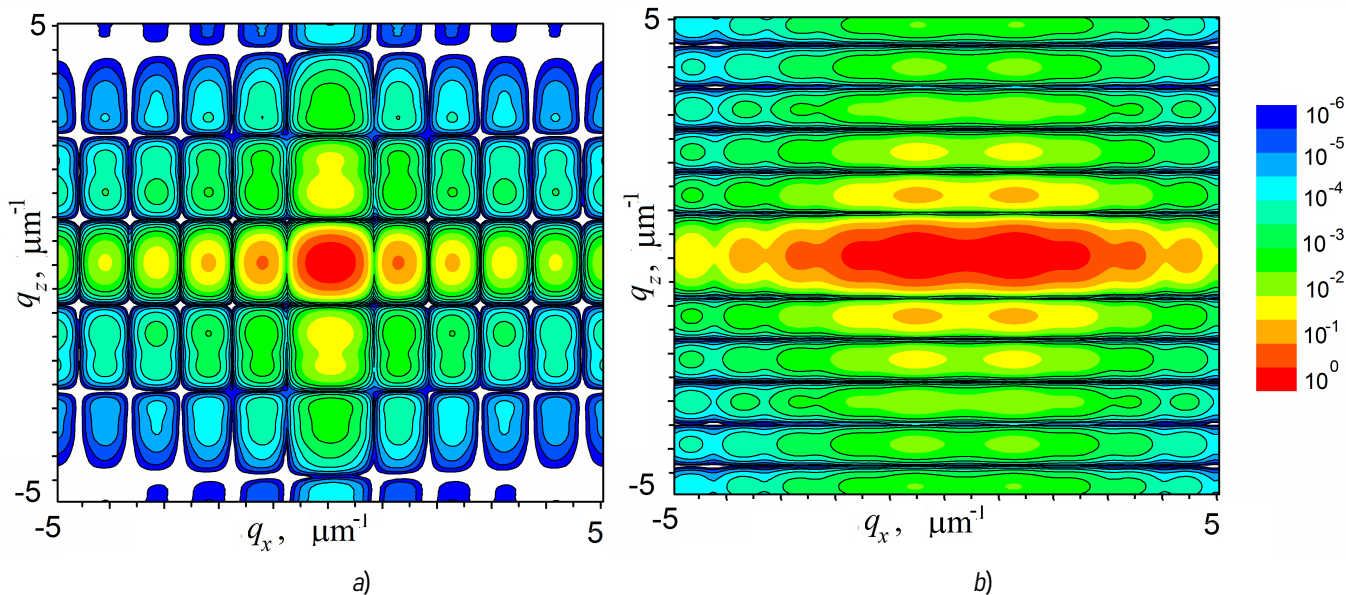


Рисунок 2. Численное моделирование RSM в приближении геометрической оптики для MC W/Si : а) совершенная структура; б) клиновидная структура. Параметры модели: $L_z^{(in)} = 14$ мкм, $L_z^{(ex)} = 7$ мкм.
Figure 2. Numerical simulation of RSM in geometric optics approximation for W/Si multilayer structures: a) perfect structure; b) wedged structure. Model parameters: $L_z^{(in)} = 14$ μm , $L_z^{(ex)} = 7$ μm .

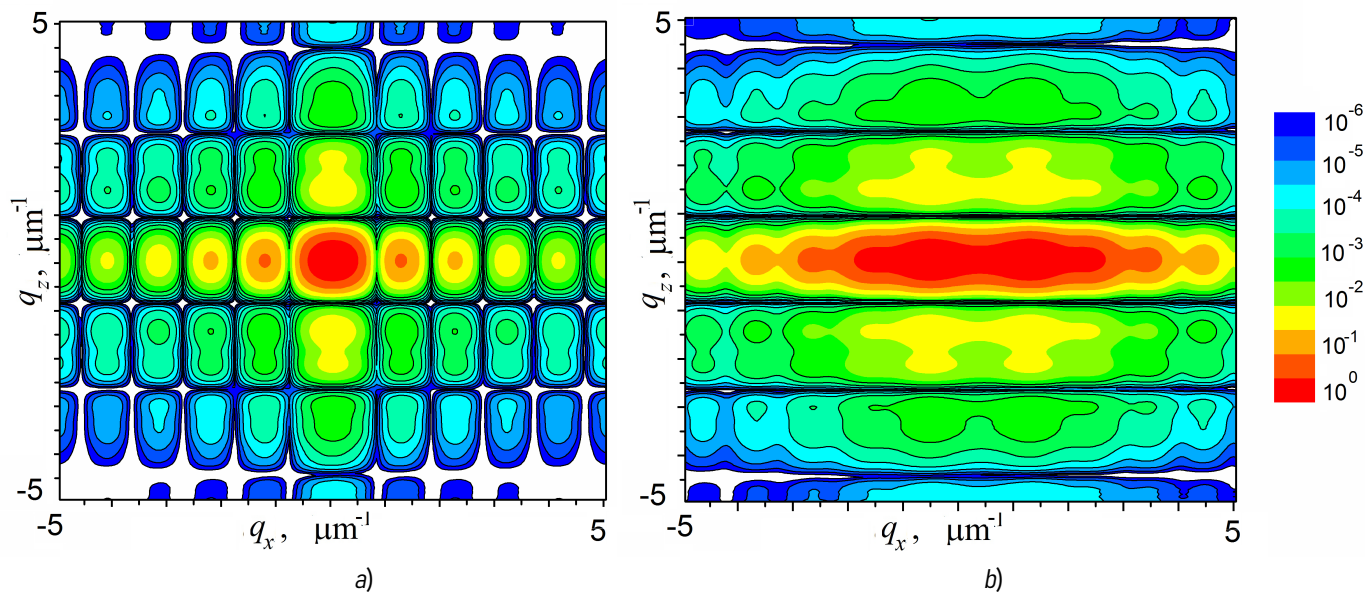


Рисунок 3. Численное моделирование RSM в приближении Френеля для MC W/Si : а) совершенная структура; б) клиновидная структура. Параметры модели: $L_z^{(in)} = 14$ мкм, $L_z^{(ex)} = 7$ мкм, $L_1 = L_2 = 0.3$ м.
Figure 3. Numerical simulation of RSM in Fresnel approximation for W/Si multilayer structures: a) perfect structure; b) wedged structure. Model parameters: $L_z^{(in)} = 14$ μm , $L_z^{(ex)} = 7$ μm , $L_1 = L_2 = 0.3$ m.

Заключение

Настоящее исследование демонстрирует важность учета волновой природы рентгеновского излучения при моделировании дифракции Лауэ в многослойных структурах. Численное моделирование распределения интен-

сивности в обратном пространстве показало, что для пространственно ограниченных пучков приближение геометрической оптики оказывается недостаточным — необходимо учитывать дифракционные эффекты на краях щелей и коллиматоров, что успешно реализуется в рамках

приближения Френеля. Полученные в работе результаты могут быть использованы для развития точных методик анализа данных рентгеновской дифрактометрии и методов неразрушающего контроля при разработке клиновых многослойных структур фокусирующей оптики.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Литература

1. Rack, A. Transporting X-ray beams: refractive X-ray optics / A. Rack, T. Weitkamp, M. Riotte [et al.] // *J. Synchrotron Rad.* – 2010. – Vol. 17. – P. 496–510.
2. Lyatun, I. Impact of beryllium microstructure on the imaging and optical properties of X-ray refractive lenses / I. Lyatun, P. Ershov, I. Snigireva [et al.] // *J. Synchrotron Rad.* – 2020. – Vol. 27. – P. 44–50.
3. Chkhalo, N. I. High-reflectance multilayer mirrors for a vacuum-ultraviolet interval of 35–50 nm / N. I. Chkhalo, S. A. Gusev, A. N. Nechay [et al.] // *Optics Letters.* – 2017. – Vol. 42. – P. 5070–5073.
4. Tamura, K. Development of soft X-ray mirrors with multilayer coatings for the X-ray Astronomy Satellite “Hitomi” / K. Tamura, H. Kunieda, Y. Miyata [et al.] // *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* – 2018. – Vol. 4. – Art. 011209.
5. Authier, A. Dynamical theory of X-ray diffraction / A. Authier. – Oxford: Oxford University Press, 2001. – 417 p.
6. Пунегов, В. И. Влияние дефектов структуры на угловое распределение рентгеновской Лауэ-дифракции в тонком кристалле / В. И. Пунегов, К. М. Павлов // *Письма в ЖТФ.* – 1992. – Т. 18, вып. 12. – С. 60–64.
7. Maser, J. Multilayer Laue lenses as high-resolution X-ray optics / J. Maser, G. B. Stephenson, S. Vogt [et al.] // *Proc. SPIE.* – 2004. – Vol. 5539. – P. 185–194.
8. Пунегов, В. И. Влияние рассогласования толщин слоев на фокусировку рентгеновских лучей многослойными Лауэ линзами / В. И. Пунегов // *Письма в ЖТФ.* – 2020. – Т. 111, вып. 7. – С. 448–454.
9. Yan, H. F. Phase zone plate for hard X-rays fabricated by lithographic techniques / H. F. Yan, J. Maser, A. Macrander [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 76. – Art. 115438.
10. Conley, R. Wedged multilayer Laue lens / R. Conley, C. Liu, J. Qian [et al.] // *Rev. Sci. Instrum.* – 2008. – Vol. 79. – Art. 053104.
11. Punegov, V. I. X-ray Laue diffraction by sectioned multilayers. I. Pendellösung effect and rocking curves / V. I. Punegov // *J. Synchrotron Rad.* – 2021. – Vol. 28. – P. 1466–1475.
12. Punegov, V. I. Two-dimensional recurrence relations for X-ray diffraction in a sectioned crystal / V. I. Punegov, K. M. Pavlov, A. V. Karpov [et al.] // *J. Appl. Cryst.* – 2017. – Vol. 50. – P. 1256–1266.
13. Kang, H. C. Sectioning of multilayers to make a multilayer Laue lens / H. C. Kang, G. B. Stephenson, C. Liu [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – Vol. 86. – Art. 151109.

References

1. Rack, A. Transporting X-ray beams: refractive X-ray optics / A. Rack, T. Weitkamp, M. Riotte [et al.] // *J. Synchrotron Rad.* – 2010. – Vol. 17. – P. 496–510.
2. Lyatun, I. Impact of beryllium microstructure on the imaging and optical properties of X-ray refractive lenses / I. Lyatun, P. Ershov, I. Snigireva [et al.] // *J. Synchrotron Rad.* – 2020. – Vol. 27. – P. 44–50.
3. Chkhalo, N. I. High-reflectance multilayer mirrors for a vacuum-ultraviolet interval of 35–50 nm / N. I. Chkhalo, S. A. Gusev, A. N. Nechay [et al.] // *Optics Letters.* – 2017. – Vol. 42. – P. 5070–5073.
4. Tamura, K. Development of soft X-ray mirrors with multilayer coatings for the X-ray Astronomy Satellite “Hitomi” / K. Tamura, H. Kunieda, Y. Miyata [et al.] // *J. Astron. Telesc. Instrum. Syst.* – 2018. – Vol. 4. – Art. 011209.
5. Authier, A. Dynamical Theory of X-Ray Diffraction / A. Authier. – Oxford: Oxford University Press, 2001. – 417 p.
6. Punegov, V. I. Effect of structural defects on the angular distribution of X-ray Laue diffraction in a thin crystal / V. I. Punegov, K. M. Pavlov // *Sov. Tech. Phys. Lett.* – 1992. – Vol. 18. – N. 12 – P. 390–391.
7. Maser, J. Multilayer Laue lenses as high-resolution X-ray optics / J. Maser, G. B. Stephenson, S. Vogt [et al.] // *Proc. SPIE.* – 2004. – Vol. 5539. – P. 185–194.
8. Punegov, V. I. Effect of the mismatch of layer thicknesses on the focusing of X-rays by multilayer Laue lens / V. I. Punegov // *JETP Letters.* – 2020. – Vol. 111, № 7. – P. 376–382.
9. Yan, H. F. Phase zone plate for hard X-rays fabricated by lithographic techniques / H. F. Yan, J. Maser, A. Macrander [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 76. – Art. 115438.
10. Conley, R. Wedged multilayer Laue lens / R. Conley, C. Liu, J. Qian [et al.] // *Rev. Sci. Instrum.* – 2008. – Vol. 79. – Art. 053104.
11. Punegov, V. I. X-ray Laue diffraction by sectioned multilayers. I. Pendellösung effect and rocking curves / V. I. Punegov // *J. Synchrotron Rad.* – 2021. – Vol. 28. – P. 1466–1475.
12. Punegov, V. I. Two-dimensional recurrence relations for X-ray diffraction in a sectioned crystal / V. I. Punegov, K. M. Pavlov, A. V. Karpov [et al.] // *J. Appl. Cryst.* – 2017. – Vol. 50. – P. 1256–1266.
13. Kang, H. C. Sectioning of multilayers to make a multilayer Laue lens / H. C. Kang, G. B. Stephenson, C. Liu [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – Vol. 86. – Art. 151109.

Благодарность (госзадание)

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

Acknowledgements (state task)

The work was done in frames of the State task of the Institute of Physics and Mathematics FRC Komi SC UB RAS on the topic № 125020501562-1.

Для цитирования:

Казаков, Д. В. Картографирование рентгеновской Лауэ-дифракции от совершенных и клиновых многослойных структур / Д. В. Казаков, С. И. Колосов, В. И. Пунегов // Известия Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук. Серия «Физико-математические науки». – 2025. – № 6 (82). – С. 71–76.

For citation:

Kazakov, D. V. Reciprocal space mapping of X-ray Laue diffraction in perfect and wedge multilayers / D. V. Kazakov, S. I. Kolosov, V. I. Punegov // Proceedings of the Komi Science Centre of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences. Series “Physical and Mathematical Sciences”. – 2025. – № 6 (82). – P. 71–76.

Дата поступления статьи: 19.06.2025

Received: 19.06.2025