

ДВУМЕРНАЯ ФОКУСИРОВКА РЕНТГЕНОВСКОГО ПУЧКА НА ВЫХОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛА С ГРАНИЦЕЙ КРУЧЕНИЯ

Л.В. ЛЕВОНЯН, А.М. МАНУКЯН*

Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

*e-mail: hasmikm@ysu.am

(Поступила в редакцию 10 декабря 2025 г.)

Исследован случай двумерной дифракционной фокусировки сферической рентгеновской волны при расположении фокуса на выходной поверхности кристалла. Фокусировка осуществляется с помощью кристалла с малоугловой границей кручения с применением температурного градиента. Фокусное изображение регистрируется сразу за кристаллом. Показано, что размеры фокуса в направлении, перпендикулярном плоскости дифракции, имеют порядок нанометров.

1. Введение

Известно, что при дифракции сферической рентгеновской волны на монокристалле в геометрии Лауэ происходит явление фокусировки слабо поглощаемой моды дифрагированного волнового поля как внутри кристалла [1], так и за кристаллом – в вакууме [2, 3], причем эти два эффекта так связаны между собой, что при отсутствии одного из них отсутствует и второй [1].

Интересно, что при фокусировке пучка на выходной поверхности кристалла эти два фокуса (внутри и вне кристалла) сливаются в один, и в итоге получается лишь один фокус на выходной поверхности. С практической точки зрения в эксперименте удобнее всего регистрировать именно этот случай, поскольку отпадает необходимость в поиске второго фокуса. Такую возможность может предоставить применение температурного градиента, направленного перпендикулярно к входной поверхности кристалла. Как показано в работе [4], фактически наличие градиента небольшой величины (порядка 10^2 K cm^{-1}) дает возможность полностью контролировать фокусную глубину в кристаллической пластинке.

Отметим, что все вышесказанное относится только к фокусировке в плоскости рассеяния, т.е. получится линейный фокус, что обусловлено плоской симметрией атомных отражающих плоскостей. Поскольку получение двумерной или точечной фокусировки очень важно для создания рентгенооптических элементов, таких как рентгеновская линза, рентгеновский микроскоп и т.д., то для ограничения вертикальной расходимости дифрагированного пучка обычно используются особенности кристаллических элементов и систем под влиянием внешних воздействий, таких как упругий и пластический изгибы, температурный градиент в разных направлениях, акустические волны и другие виды деформаций.

В настоящей работе для ограничения вертикальной расходимости дифрагированного пучка предложено использовать кристалл с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности [5].

В работах [6, 7] проведено исследование двухволновой дифракции рентгеновских лучей в кристалле с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности кристалла. Методом молекулярной динамики исследованы кристаллы с границами кручения и наклона в работах [8–13]. В работе [14] исследовано влияние температурного градиента, параллельного вектору дифракции, на интерференционное поглощение рентгеновских лучей в кристалле.

2. Теория

Дислокационная структура малоугловой границы кручения хорошо известна [15–19]. В этом случае в кристалле образуется дислокационная стенка, перпендикулярная плоскости рассеяния, которая настолько ограничивает вертикальную расходимость дифрагированного излучения, что не только фокусное изображение, но и все изображение в этом направлении получается порядка субмикрона [5–7].

Задача отображения дислокационной стенки сводится к отображению одномерной сверхрешетки (СР) винтовых дислокаций с вектором Бюргерса \mathbf{b} [5]. При малых углах разориентации блоков период СР определяется соотношением

$$z_0 = b/\Delta\theta, \quad (1)$$

где b – модуль вектора Бюргерса, $\Delta\theta$ – угол разориентации блоков.

Как известно при дифракции рентгеновских лучей на одномерной СР с малым периодом $z_0 \ll \bar{\Lambda}$ (z_0 – период СР, $\bar{\Lambda}$ – усредненная по периоду СР экстинкционная длина кристалла) дифракционная картина представляет собой систему неперекрывающихся сателлитов, угловое расстояние между которыми обратно пропорционально периоду СР.

В работе [6] показано, что при малом периоде, в пределах m -го сателлита СР можно рассматривать как идеальный кристалл с модифицированным структурным фактором:

$$F_{hm} = |M_m| F_h, \quad (2)$$

где m – номер дифракционного максимума (сателлита), M_m – сверхструктурный фактор СР.

Значение сверхструктурного фактора основного максимума кристалла с малоугловой границей кручения, перпендикулярной поверхности кристалла, получено в работе [6]:

$$M_{0,n} = \exp(-\pi n y / z_0), \quad (3)$$

где $n = \mathbf{h} \mathbf{b} \operatorname{sgn} y$, \mathbf{h} – вектор дифракции.

Наличие температурного градиента, перпендикулярного входной поверхности кристалла, приводит к веерообразному расположению отражающих атомных плоскостей [20]. В результате имеет место вогнутая конфигурация вместо плоской области на входной поверхности кристалла вокруг точки точной брэгговской ориентации сферической рентгеновской волны, и фокусная глубина в кристалле увеличивается. При обратном направлении градиента, наоборот, имеет место выпуклая конфигурация, и фокусная глубина в кристалле уменьшается по сравнению со случаем плоской входной поверхности [4].

Выбирая величину температурного градиента нужной величины [4], получаем ситуацию, когда единственный фокус получается на выходной поверхности кристалла, а до фокуса в кристалле получают описанные в работе [5] эффекты каналирования. После фокуса в вакууме за кристаллом получают подобные эффекты, поскольку эти области разделены только выходной поверхностью кристалла.

В работе [4] получено выражение для интенсивности сателлитов при наличии температурного градиента, которое для основного максимума с учетом (3) приводится к виду:

$$I_h(x, y, z) = \frac{\exp(-\pi ny/z_0) \exp\left(-\frac{\mu z}{\cos \theta} (1 - \exp(-\pi ny/z_0)) C \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{0i}}\right)}{4L_0 \Gamma\left(\left(\frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)} - z\right)^2 + \left(z \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2\right)^{1/2}} \times$$

$$\times \exp\left(-\pi \frac{z \exp(-\pi ny/z_0) |\chi_{hi}| C}{\lambda \cos \theta} \frac{x^2 \cot^2 \theta}{\left(\frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)} - z\right)^2 + \left(z \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2}\right), \quad (1)$$

где λ – длина падающей волны, L_0 – расстояние между точечным источником и кристаллом, θ – угол Брэгга, C – фактор поляризации ($C=1$ для σ -поляризации и $C = \cos 2\theta$ для π -поляризации), $\mu = 2\pi\chi_{0i}/\lambda$ – коэффициент линейного поглощения рентгеновских лучей в кристалле, χ_0 и χ_h – коэффициенты Фурье комплексной поляризуемости кристалла $\chi = \chi_r + i\chi_i$, величина $\Gamma = \sin \theta \sin 2\theta / (C|\chi_{hr}|)$, $\gamma = \alpha a$ – температурный фактор, α – коэффициент линейного расширения, a – величина температурного градиента.

Сначала в кристалле на глубинах $z \leq t$, где t – толщина кристалла, удовлетворяющая условию

$$t = \frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)}, \quad (5)$$

поле усиливается.

При распространении излучения за кристаллом выражение для интенсивности поля принимает следующий вид [4]:

$$I_h(x, y, L_h) = \frac{\exp(-\pi ny/z_0) \exp\left(-\frac{\mu t}{\cos \theta} (1 - \exp(-\pi ny/z_0)) C \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{0i}}\right)}{4(L_0 + L_h) \Gamma\left(\left(\frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)} + \frac{L_h \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 + \gamma L_h/\cos \theta)} - t\right)^2 + \left(t \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2\right)^{1/2}} \times$$

$$\times \exp\left(-\pi \frac{t \exp(-\pi ny/z_0) |\chi_{hi}| C}{\lambda \cos \theta} \frac{x^2 \cot^2 \theta}{\left(\frac{L_0 \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0/\cos \theta)} + \frac{L_h \exp(-\pi ny/z_0)}{\Gamma(1 + \gamma L_h/\cos \theta)} - t\right)^2 + \left(t \frac{|\chi_{hi}|}{\chi_{hr}}\right)^2}\right), \quad (6)$$

где L_h – расстояние кристалл–детектор.

Условие фокусировки в этом случае определяется следующим выражением:

$$\frac{L_0 \exp(-\pi n y / z_0)}{\Gamma(1 - \gamma L_0 / \cos \theta)} + \frac{L_h \exp(-\pi n y / z_0)}{\Gamma(1 + \gamma L_h / \cos \theta)} = t. \quad (7)$$

Интенсивность поля при удалении от кристалла постепенно уменьшается.

3. Численные расчеты

Распределение волнового поля внутри кристалла и сразу за кристаллом представлено на рис.1 и рис.2.

Численные расчеты проведены для кремния с границей кручения,

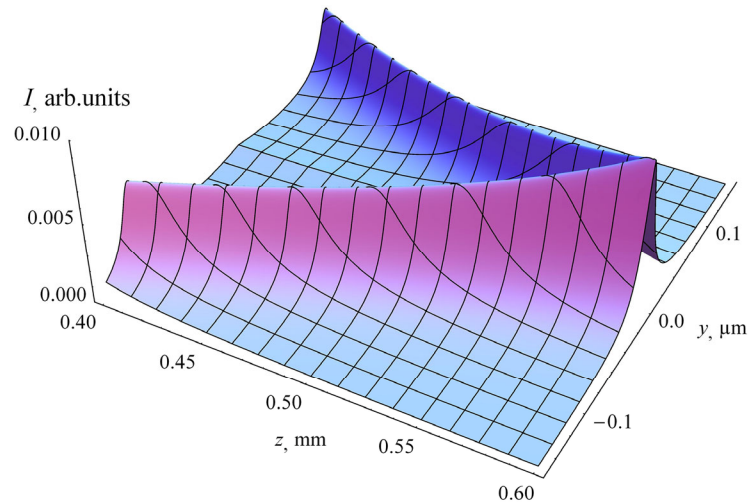


Рис.1. Распределение интенсивности дифрагированной волны в зависимости от глубины z внутри кристалла и координаты y .

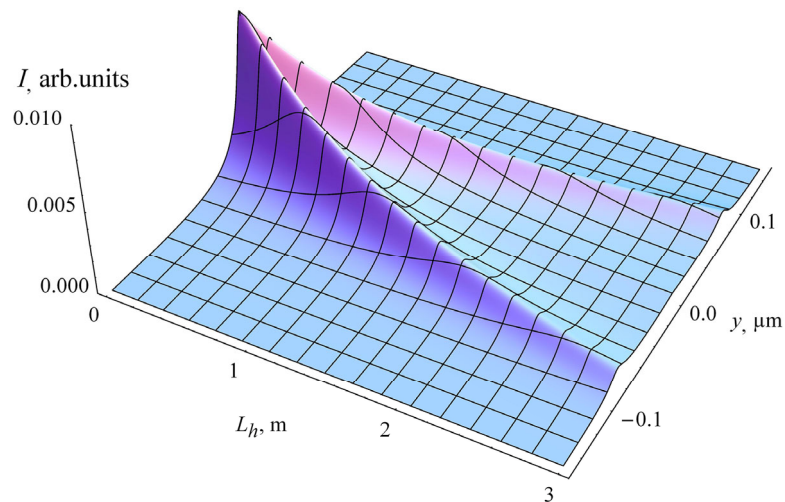


Рис.2. Распределение интенсивности дифрагированной волны в зависимости от расстояния L_h кристалл–детектор и координаты y .

перпендикулярной поверхности кристалла при $n = 2$. Излучение $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda = 1.54056 \text{ \AA}$), отражение Si (111). При этом экстинкционная длина кристалла 18.45 мкм . Расстояние точечного источника от кристалла $L_0 = 7 \text{ м}$, период СР $z_0 = 1.845 \text{ мкм}$, толщина пластинки $t = 0.6 \text{ мм}$, $a_F = 5242.6 \text{ Км}^{-1}$.

Кажущийся медленный рост интенсивности дифрагированного волнового поля в кристалле до фокуса необходимо сравнивать с влиянием поглощения кристалла. Несмотря на то, что мы имеем дело со слабо поглощаемой модой поля, с увеличением глубины в кристалле интенсивность должна уменьшаться, а наблюдаемый рост интенсивности обусловлен сходящимся характером лучей для данной моды.

Отметим, что рис.1 и рис.2 надо рассматривать как единое распределение интенсивности дифрагированной волны – сначала в зависимости от глубины z внутри кристалла, а потом, сразу за кристаллом, от расстояния L_h кристалл–детектор, поскольку имеет место непрерывность их распределения.

На рис.3 приведено распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла.

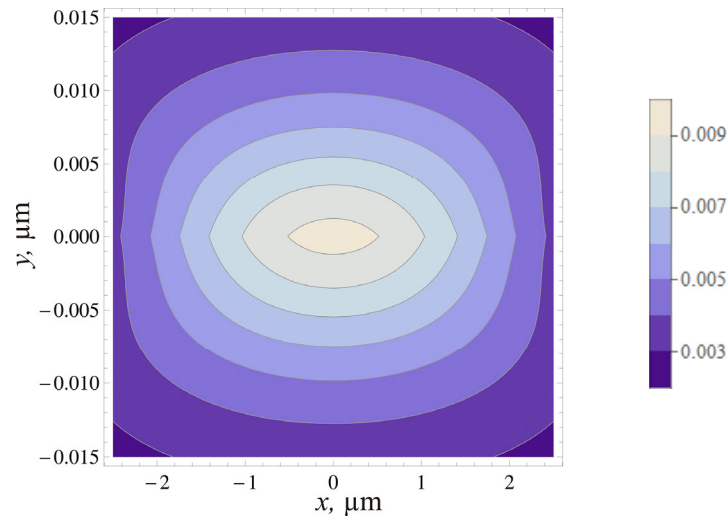


Рис.3. Распределение интенсивности дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла.

Из рис.1 и рис.2 видно, что как внутри кристалла, так и в вакууме за кристаллом, дифрагированное волновое поле имеет вид двух расщепленных пучков, которые сливаются в едином фокусе. Такой характер дифрагированного волнового поля обусловлен наличием границы кручения.

Из рис.3 можно определить размеры фокуса на выходной поверхности кристалла. В направлении оси x размер фокуса равен приблизительно 4 мкм , а в направлении оси y – около 20 нм .

4. Заключение

На примере дифракции сферической рентгеновской волны на кристалле с малоугловой границей кручения показано, что можно получить двумерный фокус на выходной поверхности кристалла. Для этого применен температурный градиент, перпендикулярный входной поверхности кристалла.

Отметим, что разные формы деформации, проводимые в плоскости дифракции, из-за ограниченности экстинкционной длины, являющейся мерой длины зоны формирования динамического дифракционного волнового поля, ограничивают размеры фокуса снизу и не могут давать значения меньше микрометра (горизонтальные размеры фокуса). В вертикальном направлении такого ограничения нет, и для размера фокуса можно получить значения порядка нанометра (вертикальные размеры фокуса). Поэтому при создании новых рентгенооптических элементов, имеющих маленький размер фокуса, следует использовать вертикальное направление, что, в частности, и рекомендовано в настоящей работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Л.В. Левонян.** Письма в ЖТФ, **7**, 269 (1981).
2. **А.М. Афанасьев, В.Г. Кон.** ФТТ, **19**, 1775 (1977).
3. **V.V. Aristov, V.I. Polovinkina, A.M. Afanas'ev, V.G. Kohn.** Acta Cryst., **A36**, 1002 (1980).
4. **L.V. Levonyan, H.M. Manukyan.** Acta Cryst., **A79**, 14 (2023).
5. **L.V. Levonyan, H.M. Manukyan.** J. Contemp. Phys., **59**, 214 (2024).
6. **D.M. Vardanyan, H.M. Petrosyan.** Acta Cryst., **A43**, 316 (1987).
7. **D.M. Vardanyan, H.M. Petrosyan.** Acta Cryst., **A43**, 322 (1987).
8. **X. Yan, H. Zhang.** Computational materials science, **48**, 773 (2010).
9. **C. Cui, X. Gong, F. Xia, W. Xu, L. Chen.** Engineering Fracture Mechanics, **243**, 107509 (2021).
10. **C. Cui, Q. Yu, W. Wang, W. Xu, L. Chen.** Vacuum, **184**, 109874 (2021).
11. **X. Long, X. Liu, W. Zhang, Y. Peng, G. Wang.** Computational Materials, **173**, 109411 (2020).
12. **G. Poletaev, Ir. Zorya, R. Rakitin.** Computational Materials Science, **148**, 184 (2018).
13. **G.M. Poletaev, I.V. Zorya, R.Y. Rakitin.** Letters on Materials, **10**, 543 (2020).
14. **V.V. Margaryan, S.N. Noreyan, V.R. Kocharyan, Yu.M. Cherepennikov, M.H. Mesropyan, A.E. Movsisyan, V.N. Aghabekyan, A.M. Mamyan, K.G. Trouni.** J. Contemp. Phys., **59**, 332 (2024).
15. **J.P. Hirth, J. Lothe.** Theory of Dislocations. New York, McGraw-Hill, 1968.
16. **D. McLean.** Grain Boundaries in Metals. Oxford, Clarendon Press, 1957.
17. **А.А. Русаков.** Рентгенография металлов. Москва, Атомиздат, 1977.
18. **А.Н. Орлов.** Введение в теорию дефектов в кристаллах. Москва, Высшая школа, 1983.
19. **S. Amelinckx, W. Dekeyser.** Solid State Phys., **8**, 325 (1959).
20. **P. Penning, D. Polder.** Philips Repts., **16**, 419 (1961).

ՌԵՆՏԳԵՆՅԱՆ ՓՆՋԻ ԵՐԿՉԱՓ ԿԻՉԱԿԵՏՈՒՄԸ ՈԼՈՐՄԱՆ ՍԱՀՄԱՆՈՎ
ԲՅՈՒՐԵՂԻ ԵԼՔԻ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԻ ՎՐԱ

Լ.Վ. ԼԵՎՈՆՅԱՆ, Հ.Մ. ՄԱՆՈՒԿՅԱՆ

Հետազոտված է գնդաձև ռենտգենյան ալիքի երկչափ դիֆրակտային կիզակետման դեպք, երբ կիզակետը գտնվում է բյուրեղի ելքի մակերևույթին: Կիզակետումն իրականացված է փոքրանկյունային ոլորման սահման ունեցող բյուրեղում ջերմաստիճանային գրադիենտի կիրառմամբ: Ցույց է տրված, որ դիֆրակտային հարթությանն ուղղահայաց ուղղությամբ կիզակետի չափերը նանոմետրերի կարգի են:

TWO-DIMENSIONAL FOCUSING OF AN X-RAY BEAM ON THE EXIT SURFACE
OF A CRYSTAL WITH A TWIST BOUNDARY

L.V. LEVONYAN, H.M. MANUKYAN

A two-dimensional diffraction focusing of a spherical X-ray wave is investigated with the focus located on the exit surface of the crystal. Focusing is achieved using a crystal with a low-angle twist boundary and a temperature gradient. The focal image is recorded immediately behind the crystal. It is shown that the focal dimensions in the direction perpendicular to the diffraction plane are of the order of nanometers.