

Брэгг–Лауэ дифракция рентгеновских пучков от изогнутого кристалла

Д. В. Казаков¹⁾, С. И. Колосов, В. И. Пунегов

Физико-математический институт Коми научного центра Уральского отделения РАН, 167982 Сыктывкар, Россия

Поступила в редакцию 5 июня 2026 г.

После переработки 22 июня 2026 г.

Принята к публикации 22 июня 2026 г.

Рассмотрено рассеяние рентгеновских пучков от изогнутого латерального кристалла для трех случаев Брэгг–Лауэ дифракции. На основе двумерных рекуррентных соотношений динамической дифракции разработан алгоритм вычисления карт распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве. Выполнено численное моделирование картирования в зависимости от области засветки рентгеновским пучком боковой грани и верхней поверхности кристалла. Для трех случаев вычислено распределение дифрагированной рентгеновской интенсивности внутри изогнутого латерального кристалла.

DOI: 10.7868/S3034576626080041

1. Введение. Под латеральными кристаллами (ЛК) понимают периодические структуры прямоуглового или произвольного поперечного сечения. Рентгеновские кривые качания от плоского ЛК в рамках динамической дифракции вычислялись с использованием уравнений Такаги–Топена [1–3].

В последние годы для определения различных искажений в монокристаллах и наноструктурированных системах все чаще используется метод высоко разрешающей рентгеновской трехосевой дифрактометрии [4]. Схема трехосевой дифрактометрии впервые была предложена в [5] для исследования теплового диффузного рассеяния в кристаллах. Однако эта работа не нашла последующего развития, поскольку не был сделан упор на исследование дефектов в кристаллических структурах. В современной реализации метод трехосевой дифрактометрии описан в работе [4]. В середине восьмидесятых годов прошлого столетия этот метод использовался для исследования тонких пленок и приповерхностных кристаллических слоев [6]. Из-за несовершенства технологических процессов и ограничения доступа к источникам синхротронного излучения карты распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве (*reciprocal space maps*, RSMs) с использованием трехосевой дифрактометрии измерялись крайне редко. С введением новых источников синхротронного излучения третьего и четвертого поколения и созданием различных структур наноэлектроники и микроэлектромеханических систем [7], метод трехосевой дифрактометрии не толь-

ко не утратил актуальности, но и успешно развивается [8]. Этот метод более трудоемкий, чем двухкристалльная дифрактометрия, однако является более информативным. Трехосевая дифрактометрия позволяет измерять карты распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки как для диффузного, так и когерентного рассеяния [8]. Несмотря на то, что картирование является наиболее перспективным методом получения информации о структуре исследуемых объектов, оно крайне редко используется для изучения изогнутых кристаллов. Это связано с рядом причин, прежде всего с отсутствием алгоритмов вычисления карт в обратном пространстве с целью извлечения данных о распределении деформаций. Практически во всех работах расчетные профили кривых качания от изогнутых кристаллов являются ошибочными, поскольку получены при решении одномерной дифракционной задачи.

Впервые вычисление карт распределения дифрагированной интенсивности вблизи узла обратной решетки от совершенного плоского ЛК выполнено на основе новых двумерных рекуррентных соотношений (ДРС) дарвиновского типа [9]. В рамках этого подхода исследована Брэгг–Лауэ дифракция в зависимости от размеров латеральной структуры [10].

Изогнутые ЛК широко применяются в различных сферах человеческой деятельности, например, в оптике рентгеновского и синхротронного излучения, обеспечивая необходимую фокусировку для различных исследований [11, 12], могут выступать в качестве волноводов для пучка релятивистских заряженных частиц благодаря явлению каналирования [13],

¹⁾e-mail: kazakov@pmi.komisc.ru

использоваться в структуре чипов микроэлектромеханических систем [7].

В серии работ японских физиков (см. [14] и ссылки в этой статье) исследовались рентгеновские интерференционные полосы от миражных дифракционных пучков [15], возникающих в изогнутом ЛК. В частности, описаны характеристики трехкристального дифрактометра с использованием миражной дифракции [16]. Также полосы миража использовались для оценки градиента деформации в изогнутом кристалле [17]. Ранее были получены ДРС для недеформированных совершенных кристаллов [9]. В данной работе ДРС впервые обобщены на случай деформированных кристаллов.

Поскольку вычисление карт интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки от изогнутого ЛК не проводилось, настоящая работа посвящена исследованию данной проблемы.

2. ДРС в случае изогнутых кристаллов.

Двумерные рекуррентные соотношения для проходящей T и дифрагированной S волны в планарном совершенном кристалле получены в работе [9]. Рентгеновская Лауэ-дифракция в деформированных кристаллах с термомиграционными каналами на основе ДРС исследовалась в [18]. Далее, в рамках ДРС рассмотрим описание дифракции в деформированных кристаллах в геометрии Брэгга. В этом случае ДРС можно записать в виде:

$$\begin{aligned} T_{n+1}^m &= (aT_n^{m-1} + b_1S_n^{m-1})f_{n+1}^m, \\ S_n^m &= (aS_{n+1}^{m-1} + b_2T_{n+1}^{m-1})g_n^m, \end{aligned} \quad (1)$$

где $a = (1 - iq_0) \exp(i\phi)$, $b_1 = -i\bar{q} \exp(i\phi)$, $b_2 = -iq \exp(i\phi)$, $q_0 = -\pi\chi_0 d/(\lambda\gamma_0)$, $q = C\pi\chi_h d/(\lambda\gamma_0)$, $\bar{q} = C\pi\chi_{\bar{h}} d/(\lambda\gamma_0)$, d – период отражающих атомных плоскостей, λ – длина волны рентгеновского излучения, C – фактор поляризации рентгеновских лучей, $\gamma_0 = \sin \theta_B$, θ_B – угол Брэгга, $\chi_g = -r_0\lambda^2 F_g/(\pi V_c)$ – Фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, $g = 0, h, \bar{h}$. Здесь V_c – объем элементарной ячейки, $r_0 = e^2/(mc^2)$ – классический радиус электрона e , m – заряд и масса электрона, F_g – структурный фактор, $h = 2\pi/d$ – величина вектора обратной решетки. Параметр $\phi = 2\pi d(\lambda \sin \theta_B)^{-1}$ в динамических коэффициентах a и $b_{1,2}$ соотношений (1) на сетке для численных расчетов учитывает разность фаз, возникающую при распространении падающей рентгеновской волны в совершенном кристалле от одного узла до другого. ДРС (1) записаны в прямоугольной системе координат, в которой ось x направлена вдоль входной поверхности кристалла, ось z направлена вглубь периодической структуры. В двумерной вычислитель-

ной сетке ось z разбивается на равные отрезки d , соответствующие периоду решетки кристалла. Отрезки нумеруются сверху вниз $1, 2, \dots, n, \dots, N_z$, где N_z – число отражающих атомных плоскостей, n задает номер узла в вертикальном направлении. Ось x разбивается на отрезки $\Delta x = d \cot \theta_B$. Расположения этих отрезков имеют нумерацию $1, 2, \dots, m, \dots, M_x$, где m – номер узла в горизонтальном направлении, а M_x – число узлов вдоль оси x .

В континуальной модели среды деформации решетки в уравнениях Такаги–Топена задаются фазовым фактором $\phi(x, z) = \exp[ihu_z(x, z)]$, где $u_z(x, z)$ – проекция вектора атомных смещений в деформированной кристаллической решетке на направление, перпендикулярное отражающим атомным плоскостям [19]. Функция $u_z(x, z)$ в случае изогнутого кристалла запишется в виде суммы:

$$u_z(x, z) = u_z(x) + u_z(z), \quad u_z(x) = \frac{x^2}{2R},$$

$$u_z(z) = \begin{cases} -\nu \frac{(z - L_z/2)^2}{2R}, & z \leq L_z/2, \\ +\nu \frac{(z - L_z/2)^2}{2R}, & z > L_z/2, \end{cases}$$

R – радиус изгиба кристалла, ν – коэффициент Пуассона (зависит от модулей упругости и ориентации кристалла), L_z – толщина кристалла. При переходе от континуальной среды к дискретной модели кристалла расстояние вдоль горизонтального направления для произвольного узла m равно $x_m = (m - M_x/2)\Delta x$, расстояние вглубь кристалла определяется как $z_n = nd$. Смещение узла (m, n) в изогнутом кристалле задается в виде

$$u_{m,n} = \frac{1}{2R} \begin{cases} x_m^2 - \nu \left(\frac{L_z}{2} - z_n \right)^2, & z_n \leq \frac{L_z}{2} \\ x_m^2 + \nu \left(\frac{L_z}{2} - z_n \right)^2, & z_n > \frac{L_z}{2} \end{cases}. \quad (2)$$

В ДРС (1) для изогнутого кристалла множители $f_n^m = \exp(ih[u_{m,n} - u_{m-1,n-1}])$, $g_n^m = \exp(-ih[u_{m,n} - u_{m-1,n+1}])$ являются аналогами функций $\phi(x, z)$ и $\phi^*(x, z)$ континуальной модели структуры [19].

Рассмотрим три конфигурации Брэгг–Лауэ дифракции в изогнутом ЛК (рис. 1). Падающий рентгеновский пучок ограничен входной щелью, а дифрагированный – апертурой детектора. В первом случае рентгеновский пучок падает на входную поверхность и левую боковую грань изогнутого кристалла (рис. 1а). Граничные условия дифракционной задачи на левой боковой грани кристалла имеют вид:

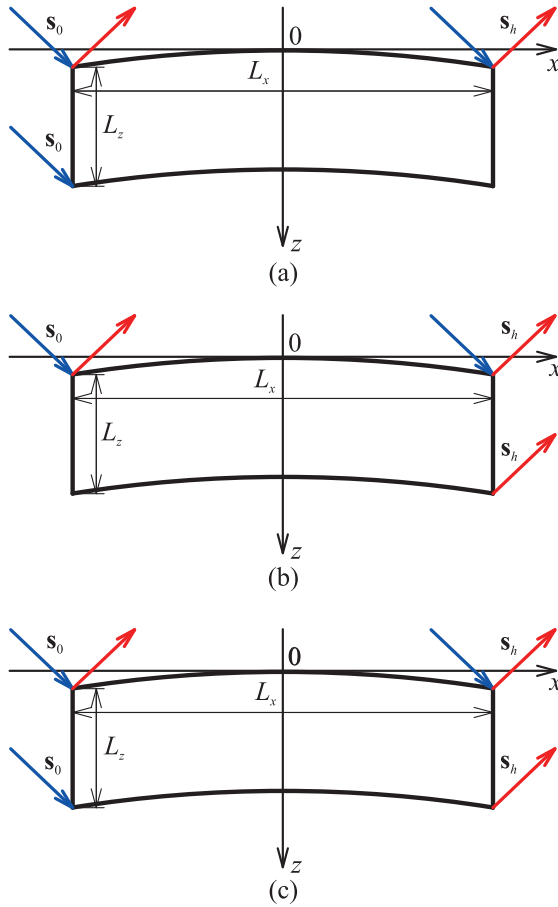


Рис. 1. (Цветной онлайн) Схемы Брэгг–Лауэ рентгеновской дифракции в латерально изогнутом кристалле. Вектор s_0 задает направление падающего пучка, вектор s_h – дифрагированного. Падающий рентгеновский пучок засвечивает: (a) и (c) – верхнюю поверхность и левую боковую грань кристалла; (b) – верхнюю поверхность кристалла. Дифрагированная интенсивность регистрируется: (a) – с верхней поверхности кристалла; (b) и (c) – с верхней поверхности и правой боковой грани кристалла

$$T_n^0 = \exp \left(i \frac{2\pi}{\lambda} [nd + u_{0,n}] \sin \theta_1 \right), \quad (3)$$

а на верхней входной поверхности кристалла:

$$T_0^m = \exp \left(i \frac{2\pi}{\lambda} [m\Delta x \cos \theta_1 + u_{m,0} \sin \theta_1] \right). \quad (4)$$

Детектор регистрирует дифракционную интенсивность, выходящую только с верхней поверхности кристалла. Во втором случае (рис. 1b) рентгеновский пучок засвечивает только входную поверхность кристалла, поэтому следует использовать только граничное условие (4). Детектор регистрирует дифракционную интенсивность, выходящую с верхней поверхности и правой боковой грани кристалла. На-

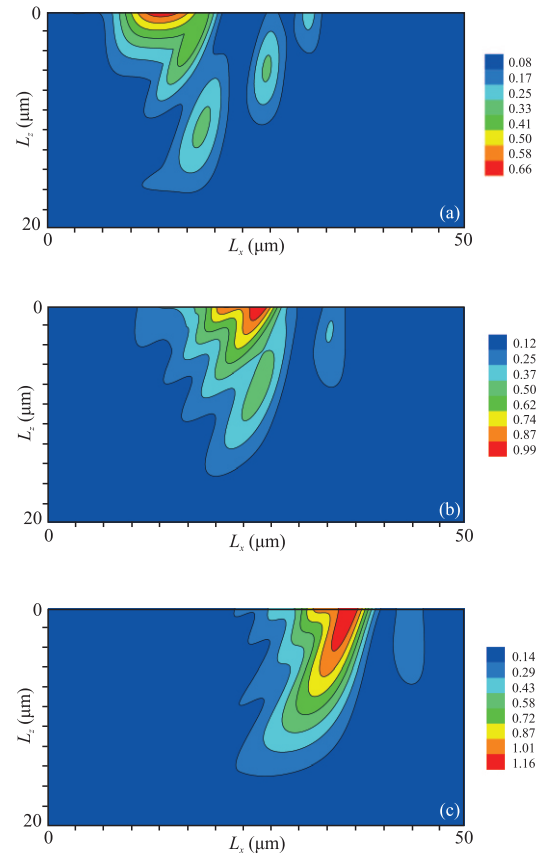


Рис. 2. (Цветной онлайн) Распределение дифрагированной интенсивности внутри изогнутого кристалла (радиус изгиба $R = 1$ м) при различных угловых отклонениях падающего пучка от угла Брэгга: (a) – $\Delta\theta_1 = 0$; (b) – $\Delta\theta_1 = 2$ угл. с; (c) – $\Delta\theta_1 = 4$ угл. с

конец, в третьей конфигурации (кристалл “купается” в падающем пучке), применяются условия (3) и (4). Детектор регистрирует дифракционную интенсивность с верхней поверхности и правой боковой грани кристалла. В соотношениях (3) и (4) угол падения рентгеновского пучка $\theta_1 = \theta_B + \Delta\theta_1$, где $\Delta\theta_1$ – отклонение от угла Брэгга.

Определим угол отражения рентгеновского пучка от ЛК как $\theta_2 = \theta_B + \Delta\theta_2$, где $\Delta\theta_2$ – отклонение от угла Брэгга дифрагированного пучка. Тогда детектор соберет дифрагированную интенсивность $I(q_x, q_z) = |S(q_x, q_z)|^2$, где амплитуда в случае два и три равна

$$S(q_x, q_z) = \sum_{m=0}^{M_x} S_0^m \Phi_m^{(1)} + \sum_{n=1}^{N_z} S_n^{M_x} \Phi_n^{(2)}, \quad (5)$$

$$\Phi_m^{(1)} = \exp \left(-i \frac{2\pi}{\lambda} [m\Delta x \cos \theta_2 - u_{m,0} \sin \theta_2] \right),$$

$$\Phi_n^{(2)} = \exp \left(-i \frac{2\pi}{\lambda} [M_x \Delta x \cos \theta_2 - (nd + u_{0,n}) \sin \theta_2] \right).$$

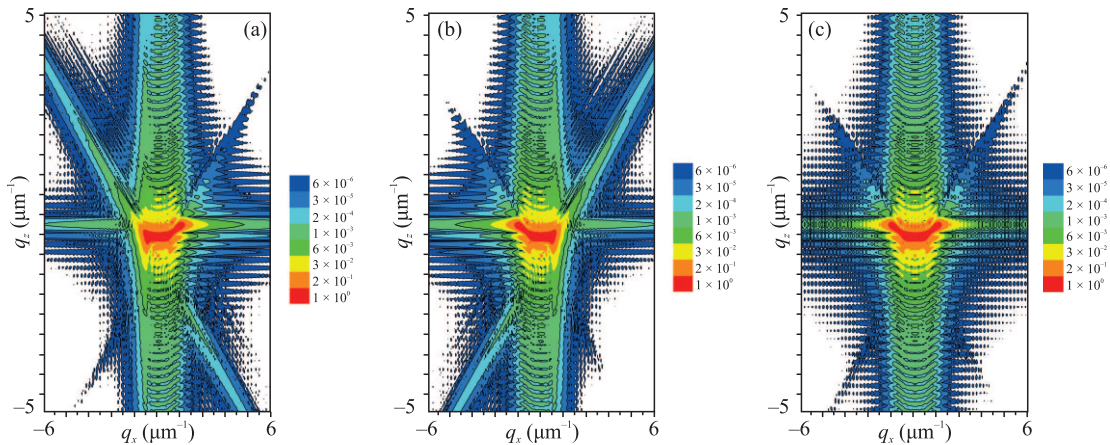


Рис. 3. (Цветной онлайн) Расчетные карты RSM Брэгг–Лауэ рентгеновской дифракции в изогнутом ЛК. Падающий рентгеновский пучок засвечивает: (а) и (с) – поверхность и левую боковую грань кристалла; (b) – поверхность кристалла. Дифрагированная интенсивность регистрируется: (а) – с поверхности кристалла; (b) и (с) – с поверхности и правой боковой грани кристалла

Для первой конфигурации $S(q_x, q_z) = \sum_{m=0}^{M_x} S_0^m \Phi_m^{(1)}$. Угловые отстройки $\Delta\theta_{1,2}$ связаны с проекциями отклонения вектора дифракции от узла обратной решетки соотношениями $q_x = k \sin \theta_B (\Delta\theta_1 - \Delta\theta_2)$ и $q_z = -k \cos \theta_B (\Delta\theta_1 + \Delta\theta_2)$ [9].

3. Численное моделирование. Численные расчеты рентгеновской дифракции от изогнутых кристаллов кремния выполнены для симметричного (333) отражения σ -поляризованного рентгеновского $\text{CuK}\alpha_1$ -излучения. Значения Фурье-коэффициентов рентгеновских поляризуемостей получены с использованием сервера “X-Ray Server” [20] и равны $\chi_0 = (-15.127 + i \cdot 0.350) \times 10^{-6}$, $\chi_h = (-4.497 + i \cdot 0.218) \times 10^{-6}$. Длина первичной брэгговской экстинкции для (333) отражения от совершенного кристалла кремния составляет

$$l_{\text{ext}} = \frac{\lambda |\sin \theta_B|}{C\pi |\chi_h|} = 8.03 \text{ мкм.}$$

Угол Брэгга для выбранного отражения равен 47.476° . В расчетах горизонтальный размер ЛК вдоль оси x равен 50 мкм, его толщина составляла 20 мкм, радиус изгиба кристалла $R = 1 \text{ м}$.

3.1. Распределение дифрагированной интенсивности внутри изогнутого кристалла. Ранее распределение интенсивности рассеяния внутри изогнутого кристалла для разных радиусов изгиба в случае динамической дифракции и кинематического приближения в рамках уравнений Такаги–Топена исследовано в [19]. Было показано, что в кинематическом приближении в случае сильноизогнутого кристалла картина распределения интенсивности рентгеновско-

го рассеяния для разных углов падения имеет один и тот же вид. Различие состоит лишь в том, что эта картина сдвигается вдоль горизонтального направления x .

Для ЛК в случае, когда падающая рентгеновская волна засвечивает только верхнюю поверхность (см. рис. 1а), распределение дифрагированной интенсивности внутри кристалла такое же, как в случае отсутствия боковых граней, и исследовано в [19]. На рисунке 2 показано изменение интенсивности рассеяния внутри ЛК при засветке поверхности и левой боковой грани для разных углов падения рентгеновских лучей.

Если излучение падает под точным углом Брэгга для совершенного кристалла, дифракционная картина для изогнутого ЛК показана на рис. 2а. В отличие от случая, когда боковые грани отсутствуют [19], кроме основного пятна рассеянной интенсивности у поверхности кристалла, наблюдаются три сателлита в направлении дифрагированной волны.

Изменяя угол падения рентгеновского пучка на $\Delta\theta_1 = 2$ угловые секунды, распределение интенсивности рассеяния изменяется по форме и смещается вдоль оси x (рис. 2b). Дальнейшее увеличение угла падения до $\Delta\theta_1 = 4$ угловые секунды приводит к изменению дифракционной картины и дополнительному ее смещению вдоль оси x (рис. 2с).

3.2. Угловое распределение дифрагированной интенсивности от изогнутого ЛК вблизи узла обратной решетки. Наиболее важным является вычисление карт интенсивности рентгеновского рассеяния на изогнутом ЛК вблизи узла обратной решетки.

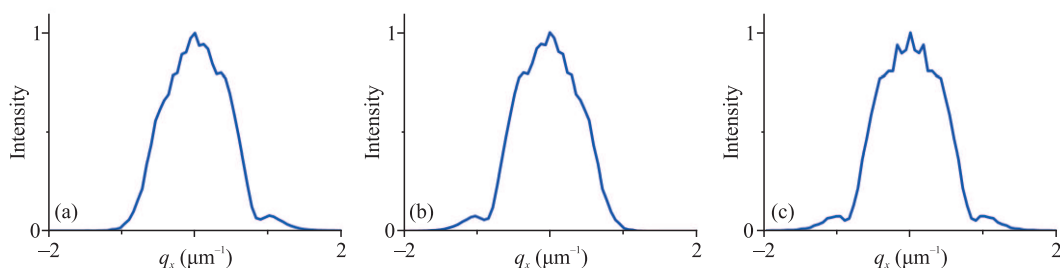


Рис. 4. (Цветной онлайн) Расчетные q_x -сечения карт распределения интенсивности рентгеновского рассеяния на изогнутом ЛК вблизи узла обратной решетки: (a) – соответствует случаю 1 (рис. 3a); (b) – случаю 2 (рис. 3b); (c) – случаю 3 (рис. 3c)

Рисунок 3 демонстрирует расчетные карты RSM для разных конфигураций рентгеновской дифракции от изогнутого ЛК. На рисунке 3a показана карта в обратном пространстве в случае, когда рентгеновский пучок падает на поверхность и левую грань кристалла, а детектор фиксирует дифрагированную интенсивность лишь с поверхности кристалла. Зеркальная по отношению к первой конфигурации дифракционная картина формируется при засветке поверхности и регистрации отраженной интенсивности с поверхности и правой боковой грани кристалла (рис. 3b). И, наконец, если изогнутый ЛК “купается” в рентгеновском пучке, т.е. падающий рентгеновский пучок засвечивает поверхность и левую боковую грань кристалла, а дифрагированная интенсивность регистрируется с поверхности и правой боковой грани кристалла, наблюдается симметричная картина изолиний в обратном пространстве (рис. 3c).

Рисунок 4 показывает расчетные q_x -сечения карт распределения интенсивности рентгеновского рассеяния на изогнутом ЛК вблизи узла обратной решетки для рассматриваемых конфигураций Брэгг–Лауэ дифракции. Сечения проходят через максимальные значения интенсивности рассеяния на картах и нормированы на единицу. В первом и во втором случае сечения имеют зеркально асимметричный вид (рис. 4a и b). В третьем случае профиль q_x -сечения симметричен относительно вертикальной оси (рис. 4c).

На рисунке 5 показаны вычисленные q_z -сечения карт распределения интенсивности рентгеновского рассеяния на изогнутом ЛК вблизи узла обратной решетки для трех конфигураций, которые полностью совпадают друг с другом.

4. Заключение. В данной работе на основе ДРС впервые исследована рентгеновская Брэгг–Лауэ дифракция на изогнутом ЛК для трех различных конфигураций засветки падающим пучком и регистрации дифрагированной интенсивности. Построен алгоритм вычислений рентгеновских полей отражен-

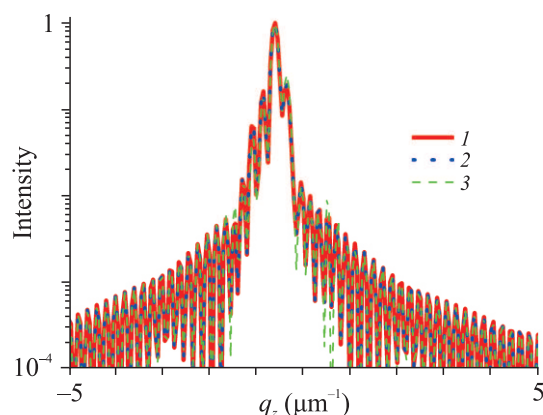


Рис. 5. (Цветной онлайн) Расчетные q_z -сечения карты распределения интенсивности рентгеновского рассеяния на изогнутом ЛК вблизи узла обратной решетки: кривая 1 соответствует первой конфигурации – сечение карты на рис. 3a; кривая 2 соответствует второй конфигурации – сечение карты на рис. 3b; кривая 3 соответствует третьей конфигурации – сечение карты на рис. 3b

ных волн внутри кристалла при разных углах падения рентгеновских пучков. Выполнено численное моделирование карт распределения интенсивности рассеяния вблизи узла обратной решетки. Результаты работы будут полезны в экспериментальных исследованиях изогнутых ЛК методом трех- и двухкристалльной дифрактометрии [7] для получения информации о деформациях и распределениях микродефектов в объеме аперриодической структуры.

Финансирование работы. Работа выполнена в рамках государственного задания Физико-математического института федерального государственного бюджетного учреждения науки “Федеральный исследовательский центр “Коми научный центр Уральского отделения Российской академии наук” по теме научно-исследовательской работы # 125020501562-1.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. N.M. Olekhovich and A.I. Olekhovich, "Primary Extinction for Finite Crystals. Square-Section Parallelepiped", *Acta Crystallogr. A* **34**, 321 (1978).
2. G. Thorkildsen and H.B. Larsen, "X-ray diffraction in perfect $t \times l$ crystals", *Acta Crystallogr. A* **55**, 840 (1999).
3. С.И. Колосов, В.И. Пунегов, "Методы численного интегрирования уравнений Такаги–Топена для кристалла прямоугольного сечения", *Кристаллография* **50**, 28 (2005) [S.I. Kolosov and V.I. Punegov, "Numerical integration methods for the Takagi–Taupin equations for crystals of rectangular cross section", *Crystallogr. Rep.* **50**, 357 (2005)].
4. A. Iida and K. Kohra, "Separate measurements of dynamical and kinematical x-ray diffractions from silicon crystals with a triple crystal diffractometer", *Physica status solidi (a)* **51**, 533 (1979).
5. P. Eisenberger, N.G. Alexandropoulos, and P. M. Platzman, "X-ray Brillouin Scattering", *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1519 (1972).
6. A.M. Afanas'ev, P.A. Aleksandrov, R.M. Imamov, A.A. Lomov, and A.A. Zavyalova, "Three-Crystal Diffractometry in Grazing Bragg–Laue Geometry", *Acta Crystallogr. A* **41**, 227 (1985).
7. A. Neels and A. Dommann, "Advanced In- and Out-off plane High Resolution X-ray Strain Analysis on MEMS", *NSTI-Nanotech* **2**, 182 (2010).
8. В.И. Пунегов, "Высокоразрешающая рентгеновская дифракция в кристаллических структурах с квантовыми точками", *УФН* **185**, 449 (2015) [V.I. Punegov, "High-resolution X-ray diffraction in crystalline structures with quantum dots", *Phys.-Uspekhi* **58**, 419 (2015)].
9. V.I. Punegov, S.I. Kolosov, and K.M. Pavlov, "Darwin's approach to X-ray diffraction on lateral crystalline structures", *Acta Crystallogr. A* **70**, 64 (2014).
10. V.I. Punegov, S.I. Kolosov, and K.M. Pavlov, "Bragg–Laue X-ray dynamical diffraction on perfect and deformed lateral crystalline structures", *J. Appl. Cryst.* **49**, 1190 (2016).
11. J.-P. Guigay and M. Sanchez del Rio, "X-ray focusing by bent crystals: focal positions as predicted by the crystal lens equation and the dynamical diffraction theory", *J. Synchrotron Rad.* **29**, 148 (2022).
12. Y.I. Nesterets and S.W. Wilkins, "Evaluation of the focusing performance of bent-Laue crystals using wave-optical theory", *J. Appl. Cryst.* **41**, 237 (2008).
13. M. Romagnoni, V. Guidi, L. Bandiera, D. De Salvador, A. Mazzolari, F. Sgarbossa, M. Soldani, A. Sytov, and M. Tamisari, "Bent Crystal Design and Characterization for High-Energy Physics Experiments", *Crystals* **12**, 1263 (2022).
14. T. Fukamachi and T. Kawamura, "Origin of irregular X-ray mirage fringes from a bent, thin crystal", *Acta Cryst. A* **78**, 422 (2022).
15. J. Gronkowski and C. Malgrange, "Propagation of X-ray beams in distorted crystals (Bragg case). I. The case of weak deformations", *Acta Crystallogr. A* **40**, 507 (1984).
16. T. Fukamachi, S. Jongsukswat, D. Ju, R. Negishi, K. Hirano, and T. Kawamura, "An X-ray diffractometer using mirage diffraction", *J. Appl. Crystallogr.* **47**, 1267 (2014).
17. S. Jongsukswat, T. Fukamachi, K. Hirano, D. Ju, R. Negishi, M. Shimojo, K. Hirano, and T. Kawamura, "Determination of Constant Strain Gradients of Elastically Bent Crystal Using X-ray Mirage Fringes", *Jpn. J. Appl. Phys.* **51**, 076702 (2012).
18. V. Punegov, "Reciprocal-space mapping calculations of X-ray Laue diffraction in a crystal with thermomigration channels", *J. Appl. Crystallogr.* **58**, 260 (2025).
19. D.M. Malkov and V. Punegov, "Dynamical and kinematical X-ray diffraction in a bent crystal", *J. Appl. Crystallogr.* **57**, 296 (2024).
20. S. Stepanov and R. Forrest, "Fitting dynamical X-ray diffraction data over the World Wide Web", *J. Appl. Crystallogr.* **41**, 958 (2008).