

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ПОЛНОГО ОТРАЖЕНИЯ В ЗАПРЕЩЕННЫЙ РЕФЛЕКС ПРИ МНОГОВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В КРИСТАЛЛАХ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

В. Г. Кон [1], А. Ю. Казимиров [2]

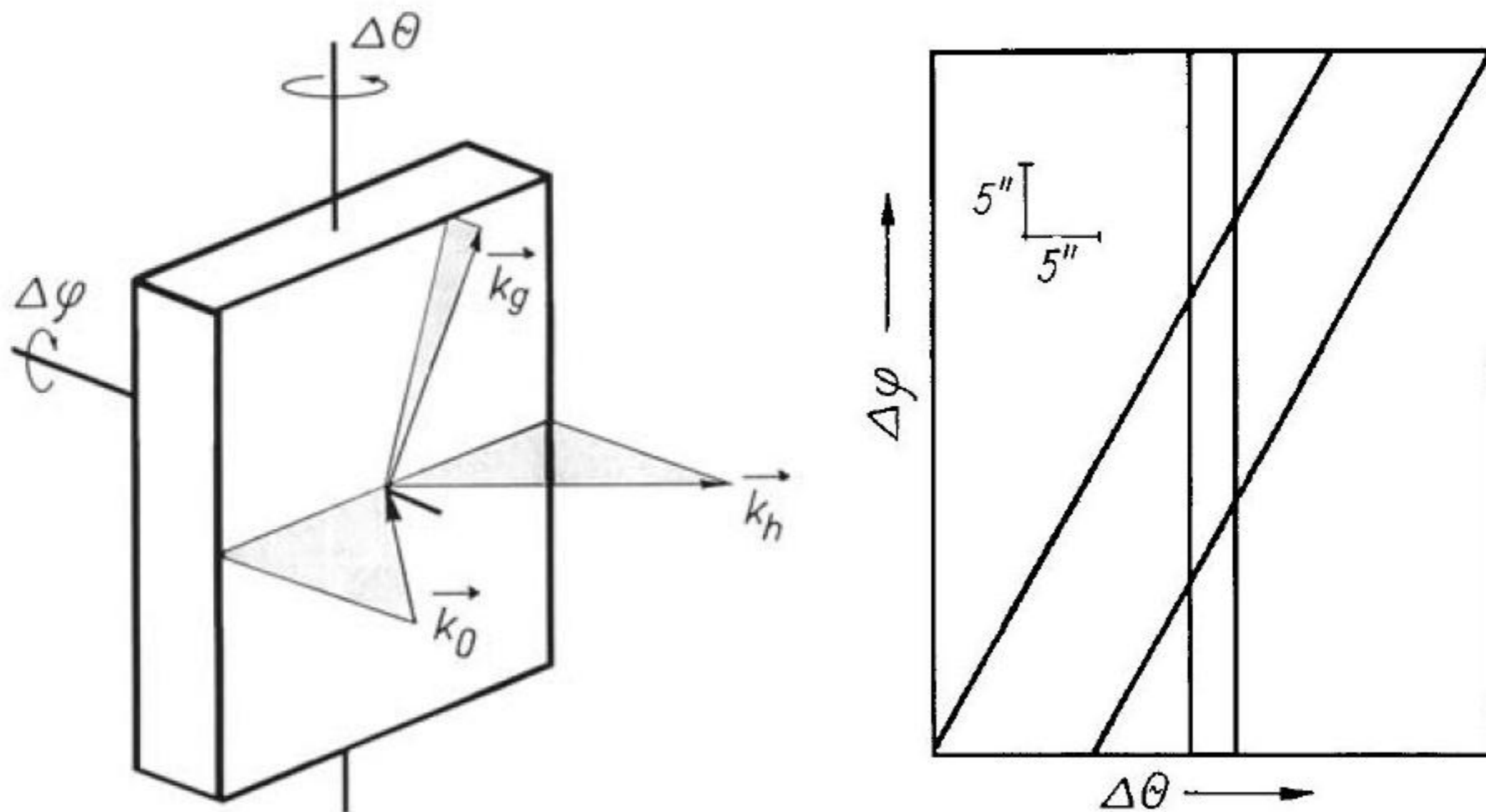
[1] Национ. исследоват. центр "Курчатовский Институт", Москва

[2] CHESS, Cornell University, Ithaca, NY 14853, USA



ГЕОМЕТРИЯ ТРЕХВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ

монохроматическая плоская волна полностью характеризуется волновым вектором \mathbf{k}_0 с заданной длиной и направлением, а кристалл можно вращать вокруг двух осей θ и φ

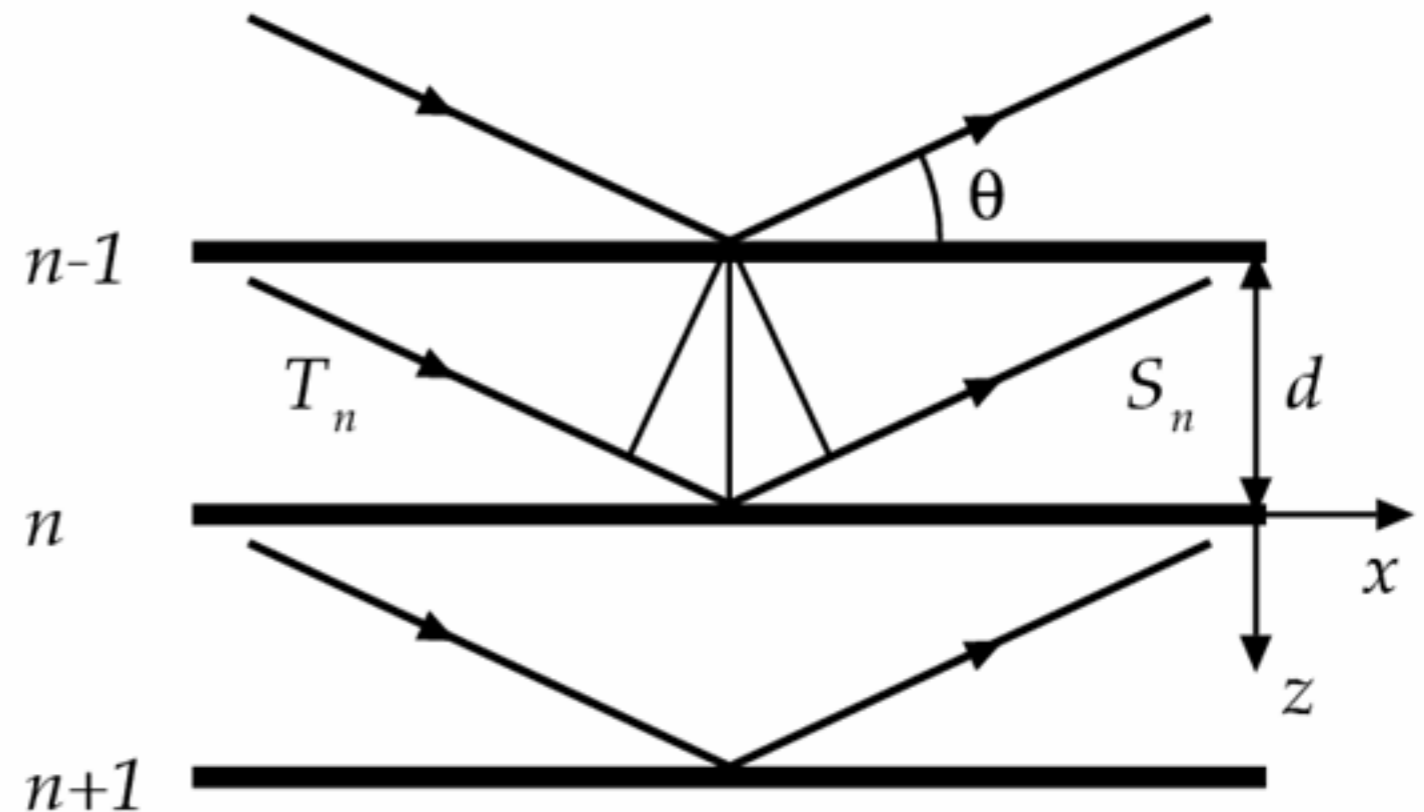
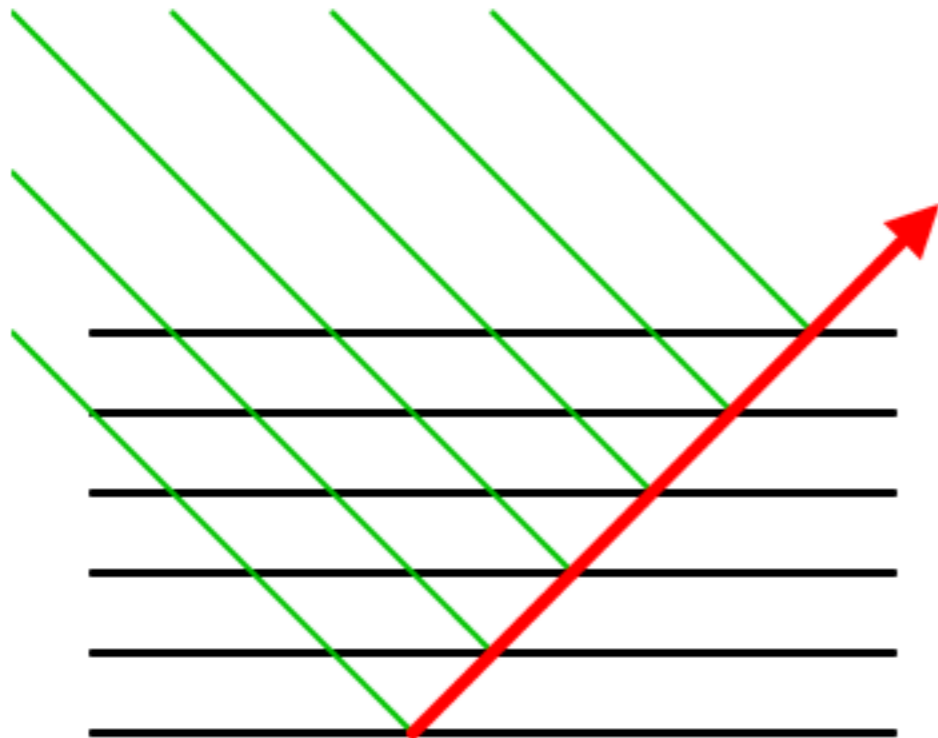


КАК ВОЗНИКАЕТ ПОЛНОЕ ОТРАЖЕНИЕ

Теория была построена Дарвиным еще в 1914 году.

$$A'_0 = (1 - iq_0)A_0, \quad A_1 = -iq_1A_0, \quad q_{0,1} = \frac{\lambda r_0 N d}{\sin \theta} f_{0,1} \approx 10^{-4}$$

$r_0 = e^2/mc^2$ – классический радиус электрона, λ – длина волны,
 d – толщина слоя, содержащего одну атомную плоскость,
 N – число атомов в единице объема, θ – угол падения пучка,
 $f_{0,1}$ – атомные факторы, то есть компоненты Фурье электронной плотности в атомах, соответствующие рассеянию на угол θ и 2θ



Рекуррентные соотношения

$$T_n = T_{n-1}(1 - iq_0)e^{i\varphi} - iq_1 S_n e^{i2\varphi}, \quad S_n = -iq_1 T_n + S_{n+1}(1 - iq_0)e^{i\varphi}$$

положим $\varphi = m\pi + a$, где m – целое число, и далее считая, что

$$R_n = \frac{S_n}{T_n} = R = \frac{q_1}{a - q_0 \pm ([a - q_0]^2 - q_1^2)^{1/2}}$$

условие $\varphi = m\pi$ эквивалентно

$2d \sin \theta = m\lambda$, т.е. определяет

угол Брэгга, а параметр a

определяет меру отклонения

от условия Брэгга. Все можно

переписать в терминах углов

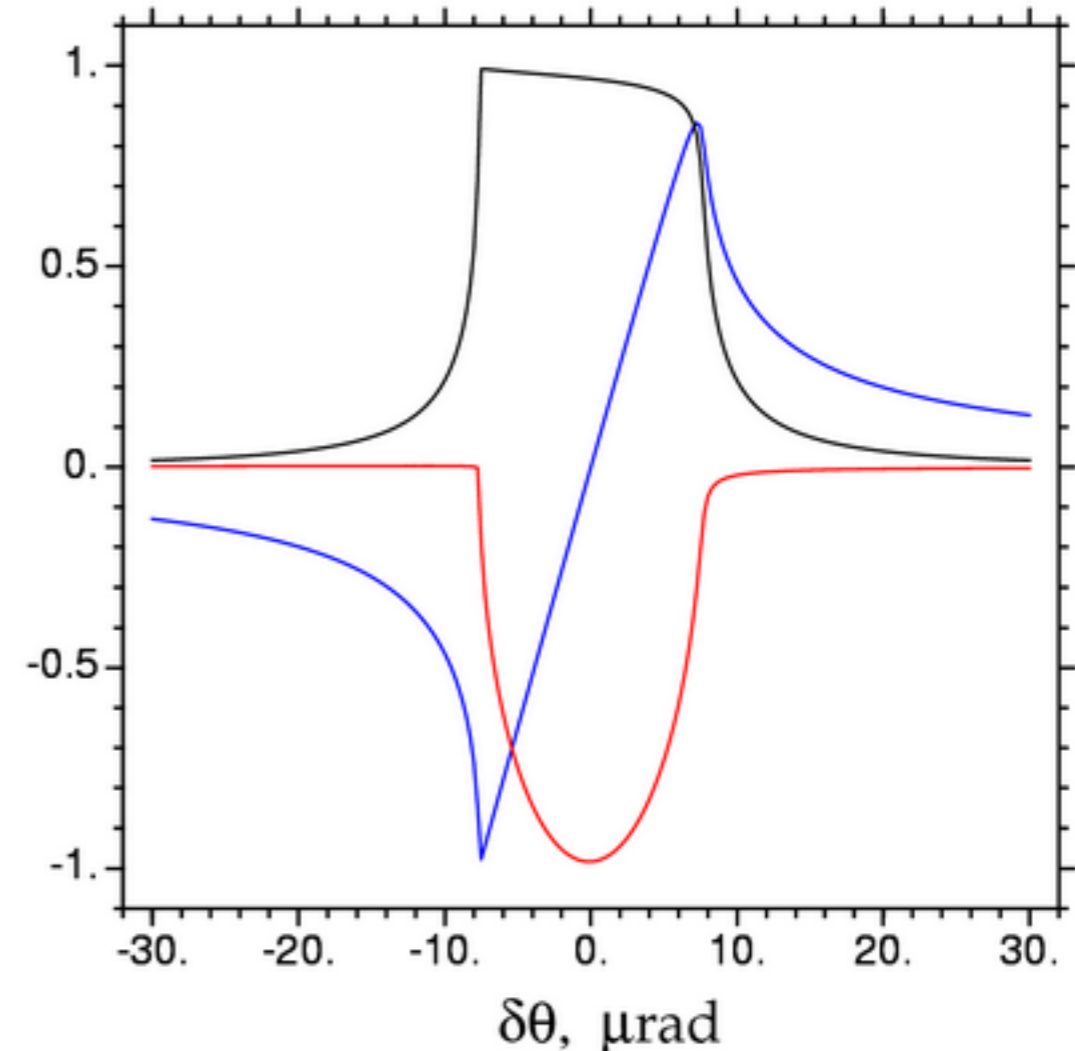
$$\theta_{0,1} = q_{0,1} \lambda / (2\pi d \cos \theta_B),$$

$$\theta = \theta_B + \Delta\theta, \quad \delta\theta = \Delta\theta - q_0,$$

тогда полное отражение

происходит в области $|\delta\theta| < \theta_1$

$$R = \frac{\theta_1}{\delta\theta \pm (\delta\theta^2 - \theta_1^2)^{1/2}}$$



Si, 220, $\lambda = 1 \text{ \AA}$

ВСЕГДА ЛИ ОТРАЖЕНИЕ БУДЕТ ПОЛНЫМ

Даже из простой теории следует, что в угловой области полного отражения амплитуда прямого пучка убывает как

$$T(z) = \exp\left(-\frac{z}{L_{ex}} \left[1 - \frac{\delta\theta^2}{\theta_1^2}\right]^{1/2}\right)$$

$$L_{ex} = \frac{\sin\theta_B}{\lambda r_0 N f_1} = \frac{\lambda}{2\pi \cos\theta_B} \frac{1}{\theta_1} = \frac{d}{q_1} \approx 10^4 d$$

а в обычном случае имеем $T(z) = \exp(-z/L_a)$, $L_a = \sin\theta_B/\mu_0$, где μ_0 – линейный коэффициент поглощения рентген. лучей

В стандартных условиях отражения с низкими индексами Миллера и при высоких энергиях фотонов $L_{ex} \ll L_a$, то есть на глубине отражения излучение поглощается слабо.

При таких условиях можно наблюдать полное отражение.

В обратном случае, когда $L_{ex} > L_a$ процессы неупругого поглощения приведут к потере излучения в кристалле и отражение будет неполным с максимумом интенсивности

$$I_{\max} \approx (L_a/L_{ex})^2$$

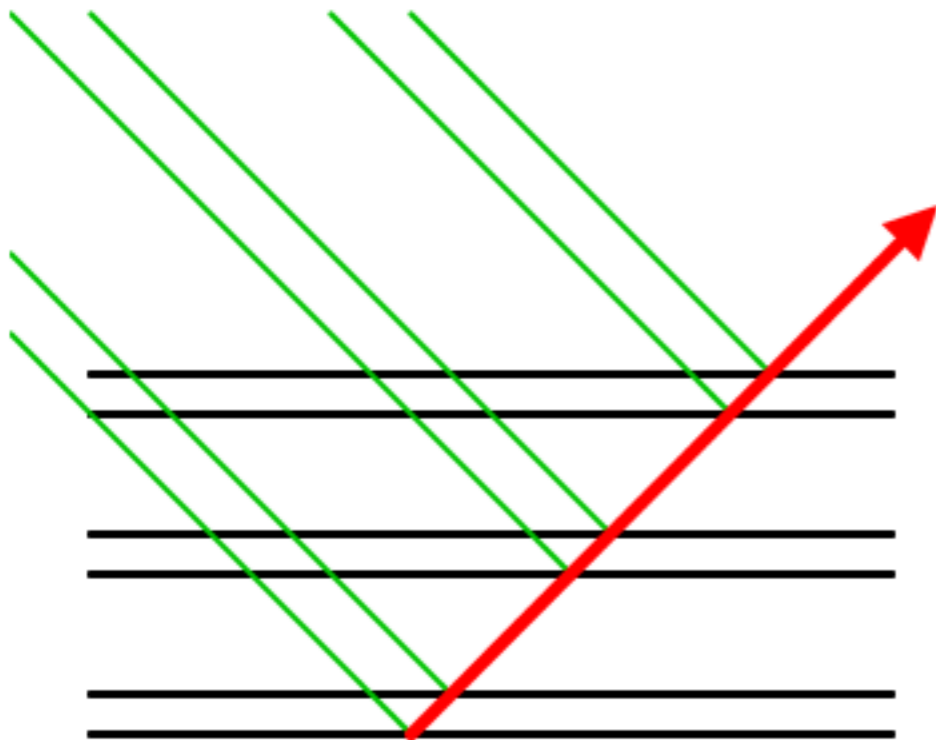
ЧТО ТАКОЕ ЗАПРЕЩЕННОЕ ОТРАЖЕНИЕ

Кристаллы Si и Ge имеют два атома в элементарной ячейке, то есть имеют две простые подрешетки. При этом атомные слои в некоторых направлениях могут чередуются не вполне периодически, есть базис. Разность фаз при отражении на разных подрешетках может быть любой. Так в Si и Ge имеем $\pi/2$ для 111, π для 222, $3\pi/2$ для 333 и 2π для 444. Итак 222 – *запрещенное*, а для 444 наличие подрешеток не важно

В формулах надо сделать замену

$$f_1 \Rightarrow \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \exp(-i\mathbf{hr}_k) f_{1k}$$

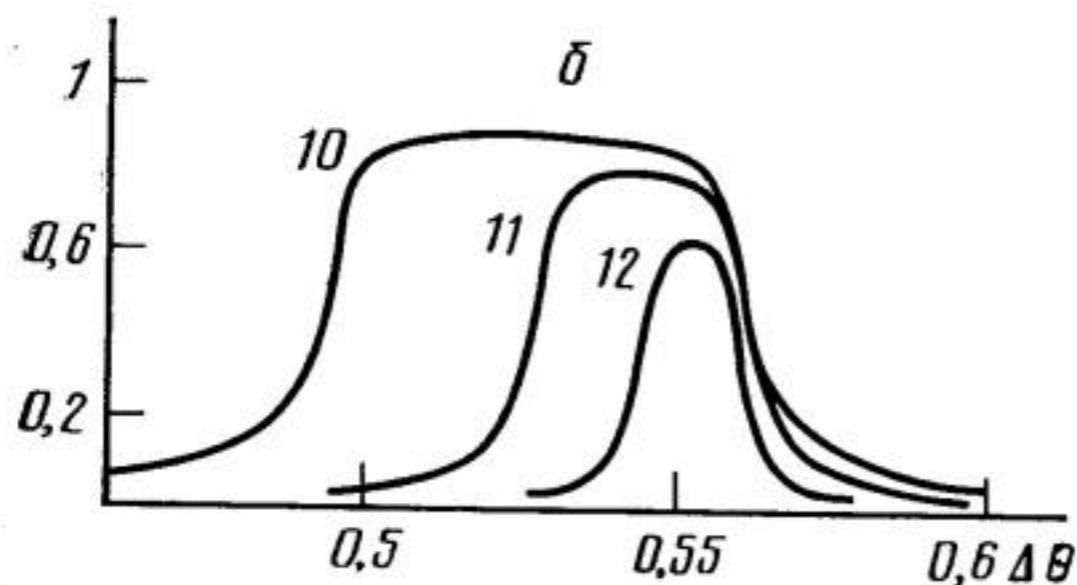
важно, что $000 \Rightarrow 222$ запрещено, но $000 \Rightarrow 113 \Rightarrow 222$ разрешено, то есть двойной дифракцией можно отразить в запрещенный рефлекс



КОН В. Г.

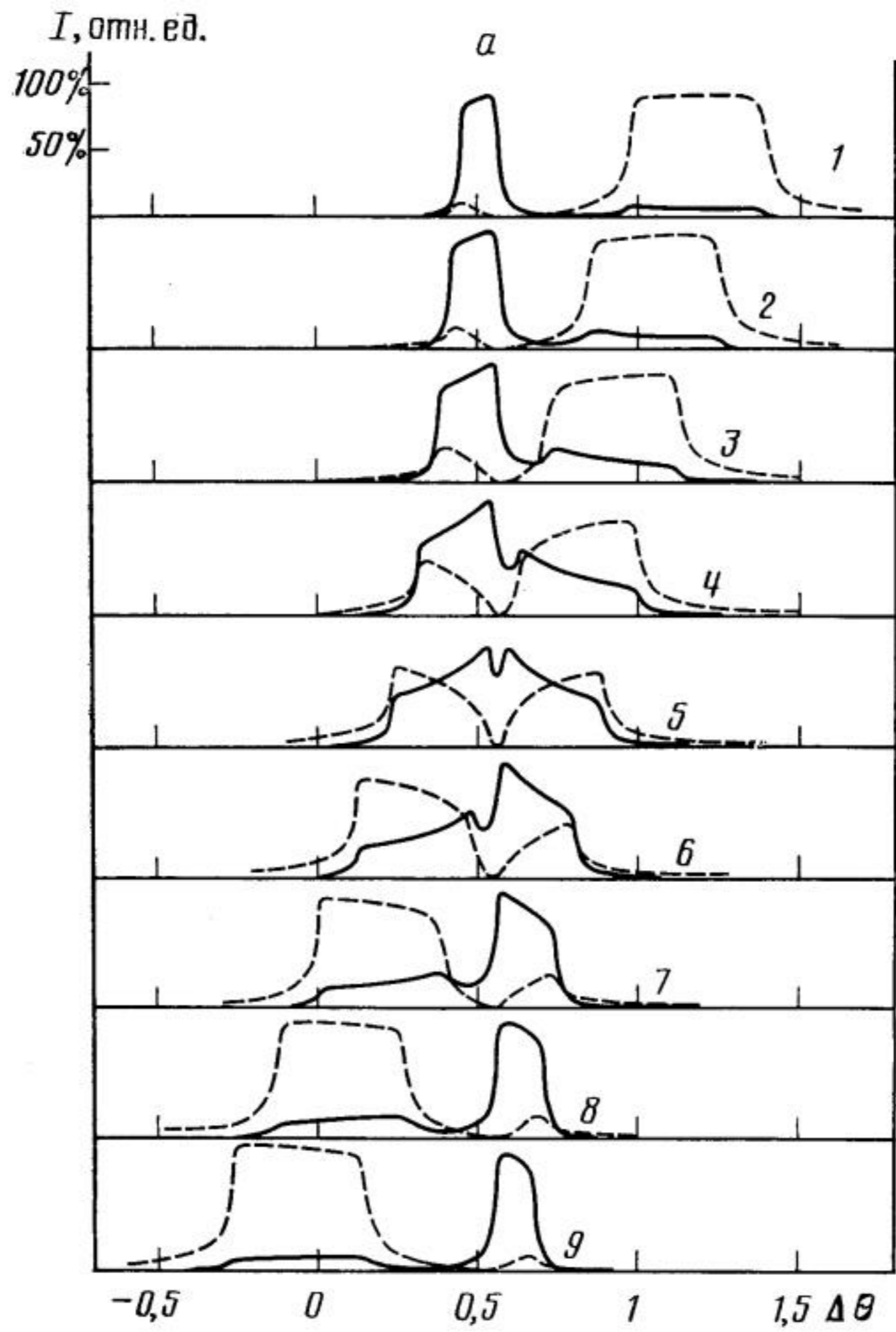
ПОЛНОЕ ОТРАЖЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ЗАПРЕЩЕННЫЙ РЕФЛЕКС ПРИ МНОГОВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ В СХЕМЕ РЕНИНГЕРА

Теоретически показана возможность существования нового эффекта — полного дифракционного отражения рентгеновских лучей в запрещенный рефлекс без возбуждения других рефлексов. Эффект имеет место при падении параллельного пучка под углом Брэгга для запрещенного рефлекса и вблизи направления, соответствующего многоволновой дифракции рентгеновских лучей (схема Ренингера). Дано качественное объяснение всех особенностей непрямого возбуждения запрещенного рефлекса, в частности, выделены два различных механизма: амплитудный и резонансный. Проведен расчет коэффициентов отражения в конкретном случае (222, 113) дифракции AgK_{α} -излучения в Si.



Угловая зависимость интенсивности запрещенного (222) (сплошные линии) и разрешенного (113) рефлексов (штриховые) в случае трехволновой (222, 113) дифракции AgK_{α} -излучения в кристалле Si при $\Delta\varphi = -1$ до 1 (а) и $\Delta\varphi = 2, 4, 8$ (б)

а — $\Delta\varphi = 1$ (1), 0,75 (2), 0,5 (3), 0,25 (4), 0 (5), -0,25 (6), -0,5 (7), -0,75 (8), -1 (9); б — $\Delta\varphi = 2$ (10), 4 (11), 8 (12). Значения углов приведены в единицах 10^{-5} рад



High-resolution study of dynamical diffraction phenomena accompanying the Renninger (222/113) case of three-beam diffraction in silicon

A. Kazimirov^{a*} and V. G. Kohn^b

^aCornell High Energy Synchrotron Source (CHESS), Cornell University, Ithaca, 14853 NY, USA, and

^bRussian Research Center 'Kurchatov Institute', 123182 Moscow, Russia. Correspondence e-mail: ayk7@cornell.edu

X-ray optical schemes capable of producing a highly monochromatic beam with high angular collimation in both the vertical and horizontal planes have been evaluated and utilized to study high-resolution diffraction phenomena in the Renninger (222/113) case of three-beam diffraction in silicon. The effect of the total reflection of the incident beam into the nearly forbidden reflected beam was observed for the first time with the maximum 222 reflectivity at the 70% level. We have demonstrated that the width of the 222 reflection can be varied many times by tuning the azimuthal angle by only a few μrad in the vicinity of the three-beam diffraction region. This effect, predicted theoretically more than 20 years ago, is explained by the enhancement of the 222 scattering amplitude due to the virtual two-stage $000 \rightarrow 113 \rightarrow 222$ process which depends on the azimuthal angle.

СТРОГАЯ ТЕОРИЯ МНОГОВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ

$$R_m^{(s)}(\theta, \varphi) = \sum_{s'} \left| \sum_j B_{ms'}(j) c_s(j) \right|^2$$

s, s' – индексы поляризаций,
 $B_{ms'}(j)$ – нормир. амплитуды волн
 $c_s(j)$ – степени возбуждения зон

$$\sum_{ns'} G_{mn}^{ss'}(\theta, \varphi) B_{ns'}(j) = \varepsilon_j B_{ms}(j)$$

$G_{mn}^{ss'}(\theta, \varphi)$ – кинематическая матрица
 ε_j – параметр преломления в зоне j

$$G_{mn}^{ss'}(\theta, \varphi) = \frac{2\pi \chi_{mn}}{\lambda \gamma_m^{1/2} \gamma_n^{1/2}} (\mathbf{e}_{ms} \mathbf{e}_{ns'}) - \alpha_m(\theta, \varphi) \delta_{mn}^{ss'}$$

$$\alpha_m(\theta, \varphi) = \frac{2}{\gamma_m} \left[(\mathbf{h}_m \mathbf{e}_1) \Delta\theta + (\mathbf{h}_m \mathbf{e}_2) \Delta\varphi - (\mathbf{h}_m \mathbf{s}_0) \frac{\Delta\lambda}{\lambda} \right]$$

$$\sum_j B_{ms'}(j) c_s(j) = \delta_{m0}^{ss'}$$

$\gamma_m = (\mathbf{s}_m \mathbf{n})$, вычисляются амплитуды
 Брэгг-пучков ($\gamma_m < 0$), а граничные
 условия задаются только для

Лауэ-пучков ($\gamma_m > 0$). Используются только затухающие зоны.

НЕСТРОГАЯ ТЕОРИЯ ЭФФЕКТА ПолОтрЗапРеф

Забудем про поляризации. Пусть $G_{10} = 0$. Тогда из системы уравнений получаем два механизма возбуждения запрещенного рефлекса:

$$B_1 = \frac{G_{12}B_2}{\varepsilon - G_{11}}$$

через числитель (амплитудный) и знаменатель (резонансный)

Пусть $|B_2| \ll 1$, тогда

$$B_2 = \frac{G_{20}B_0 + G_{21}B_1}{\varepsilon - G_{22}}$$

$$g_{00}B_0 + g_{01}B_1 = \varepsilon B_0$$

$$g_{10}B_0 + g_{11}B_1 = \varepsilon B_1$$

$$g_{mn} = G_{mn} + \frac{G_{m2}G_{2n}}{\varepsilon - G_{22}(\Delta\varphi)}$$

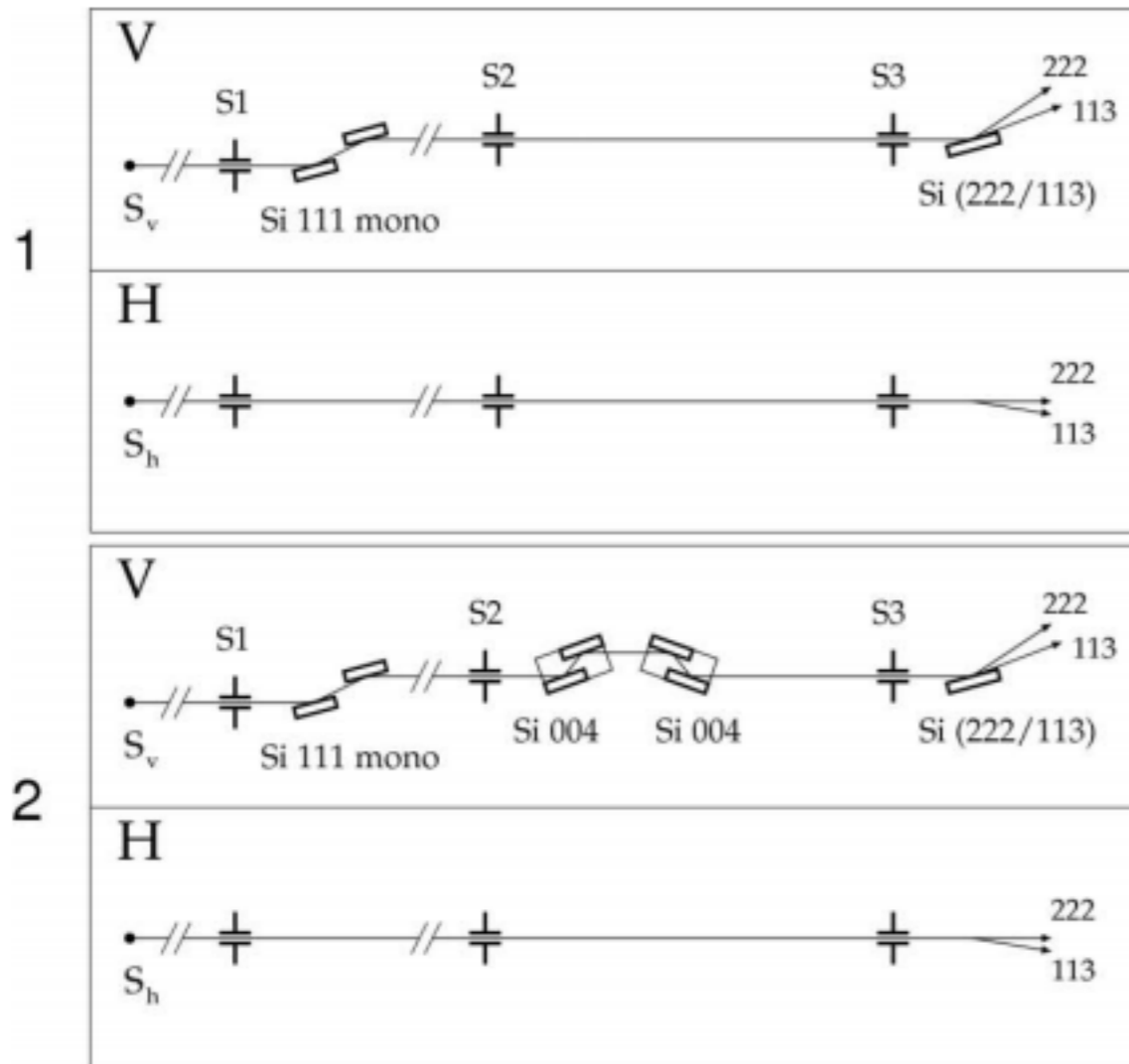
Получили двухволновую дифракцию в запрещенный рефлекс с ненулевой кинематической амплитудой отражения, которая определяет разную область полного отражения при разных $\Delta\varphi$

$$|\Delta\theta| < \frac{|D_1|}{\sin(2\theta_B)} \frac{1}{|\Delta\varphi|}$$

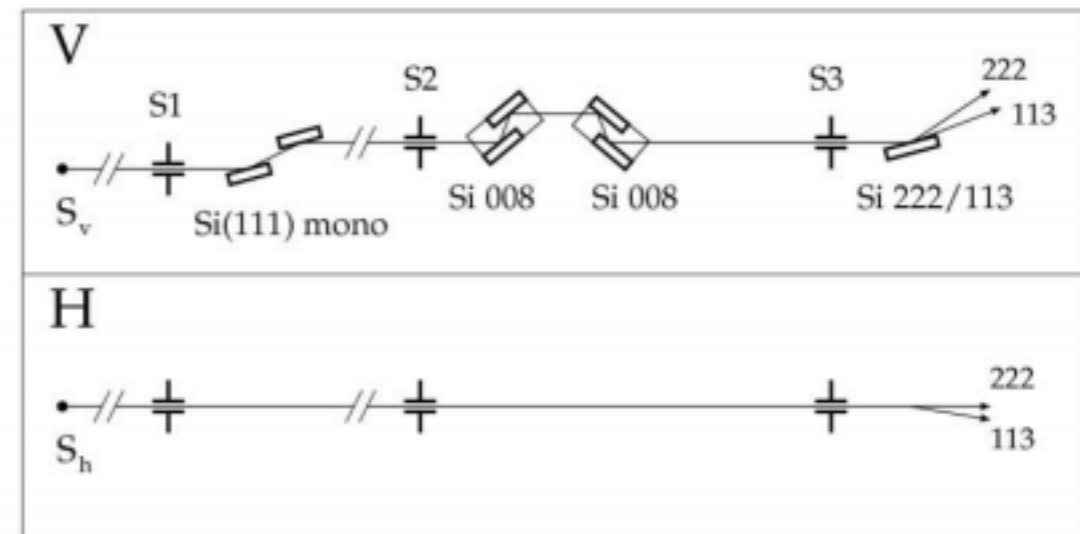
$$D_1 = \frac{(\chi_{02}\chi_{20}\chi_{12}\chi_{21})^{1/2}}{(\lambda/\pi)|\mathbf{h}_2\mathbf{e}_2|}$$

3. Experiment

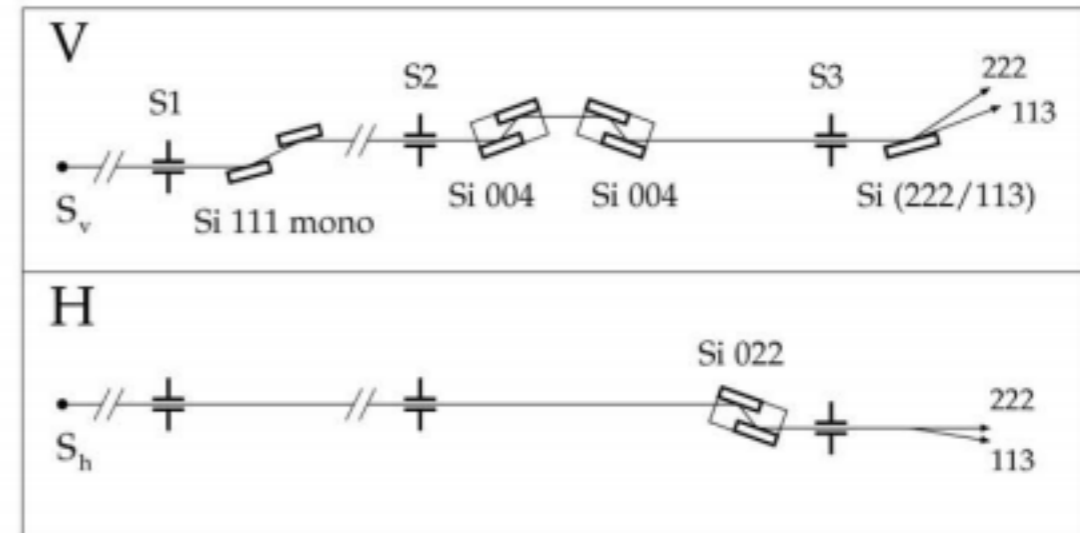
The experiment was performed at the Cornell High Energy Synchrotron Source (CHESS) at the A2 beamline. The X-ray beam from the 49-pole wiggler was monochromated to an energy of 24.982 keV by a double-crystal Si 111 upstream water-cooled monochromator. Post-monochromator optics for additional monochromatization and angular collimation were assembled on the optical table in the experimental hutch. The



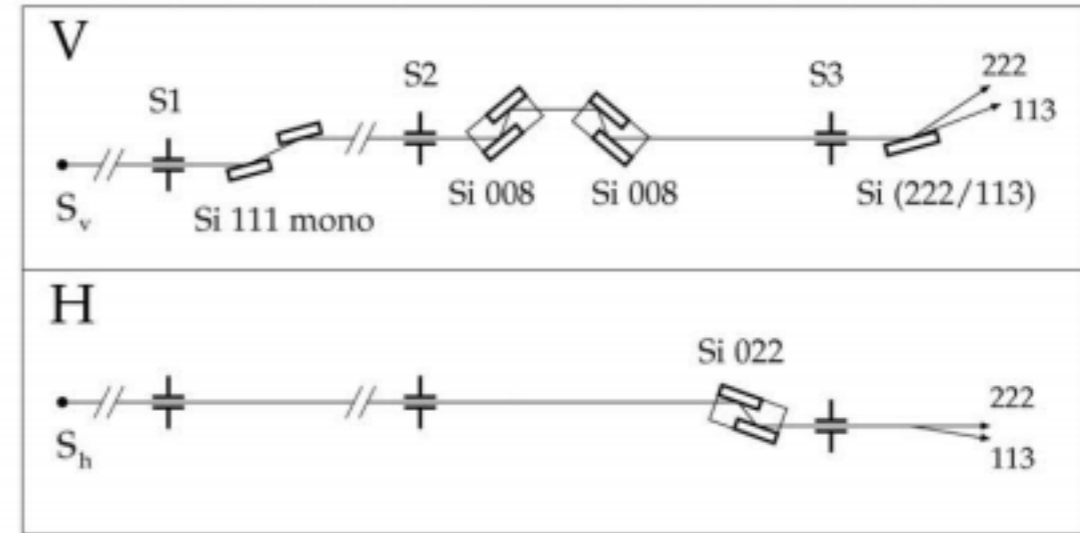
3



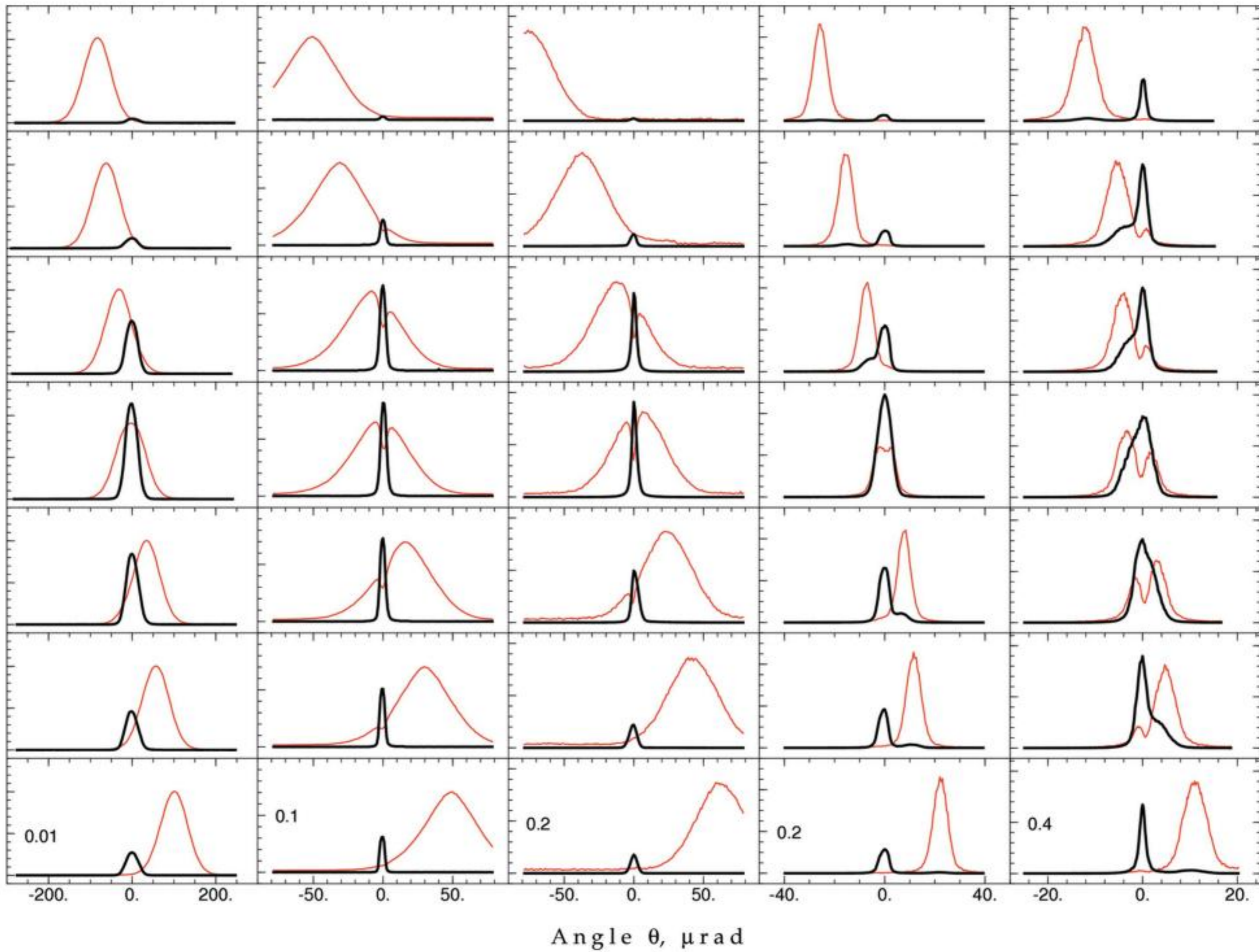
4



5



Reflectivity



Acta Cryst. (2011). **A67**, 409–414

High-resolution study of (222, 113) three-beam diffraction in Ge

A. Kazimirov^{a*} and V. G. Kohn^b

^aCornell High Energy Synchrotron Source (CHESS), Cornell University, Ithaca, NY 14853, USA, and

^bNational Research Center 'Kurchatov Institute', 123182 Moscow, Russia. Correspondence e-mail: ayk7@cornell.edu

The results of high-resolution analysis of the (222, >113) three-beam diffraction in Ge are presented. For monochromatization and angular collimation of the incident synchrotron beam a multi-crystal arrangement in a dispersive setup in both vertical and horizontal planes was used in an attempt to experimentally approach plane-wave incident conditions. Using this setup, for various azimuthal angles the polar angular curves which are very close to theoretical computer simulations for the plane monochromatic wave were measured. The effect of the strong two-beam 222 diffraction was observed for the first time with the maximum reflectivity close to 60% even though the total reflection of the incident beam into a forbidden reflection was not achieved owing to absorption. The structure factor of the 222 reflection in Ge was experimentally determined.

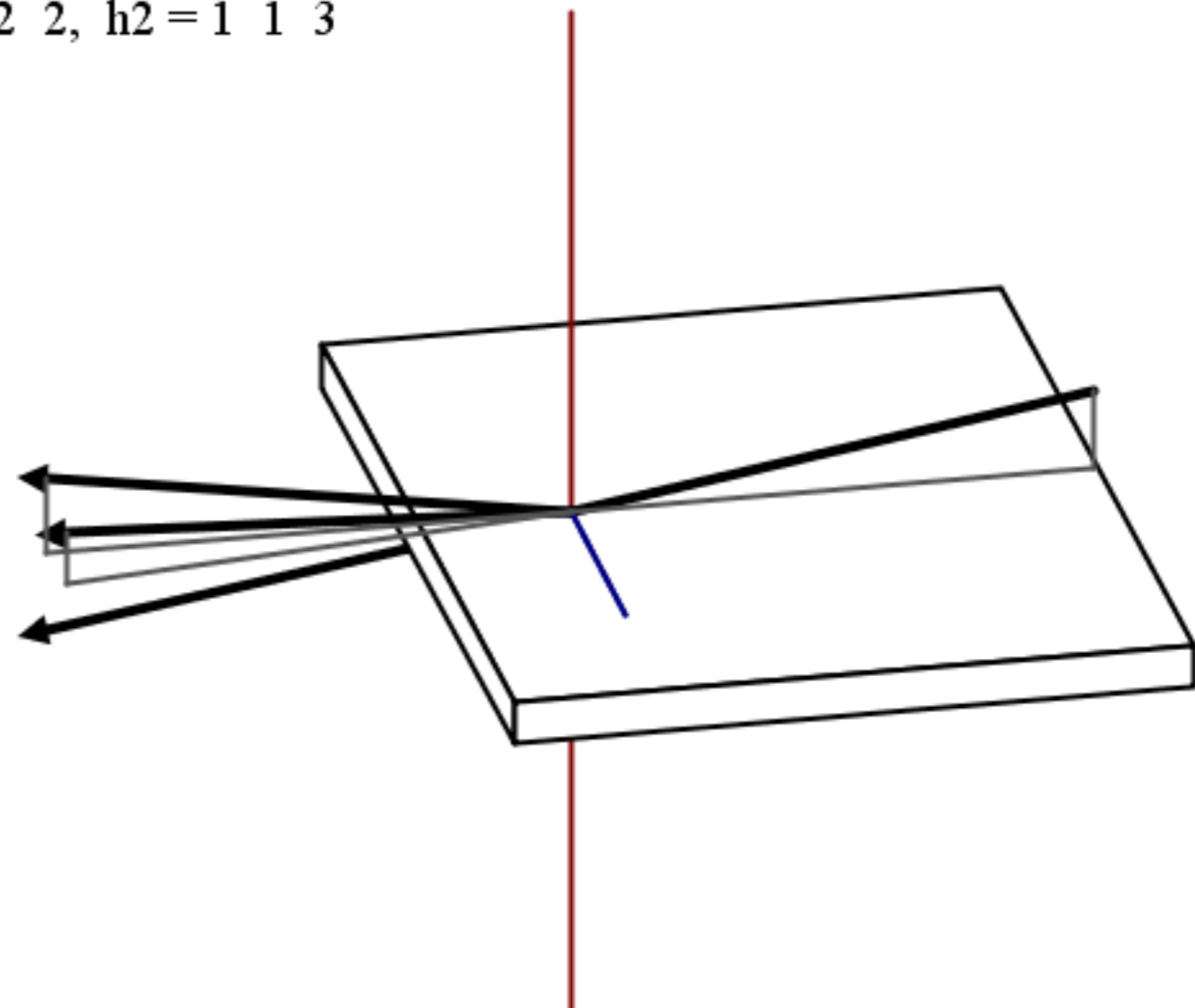
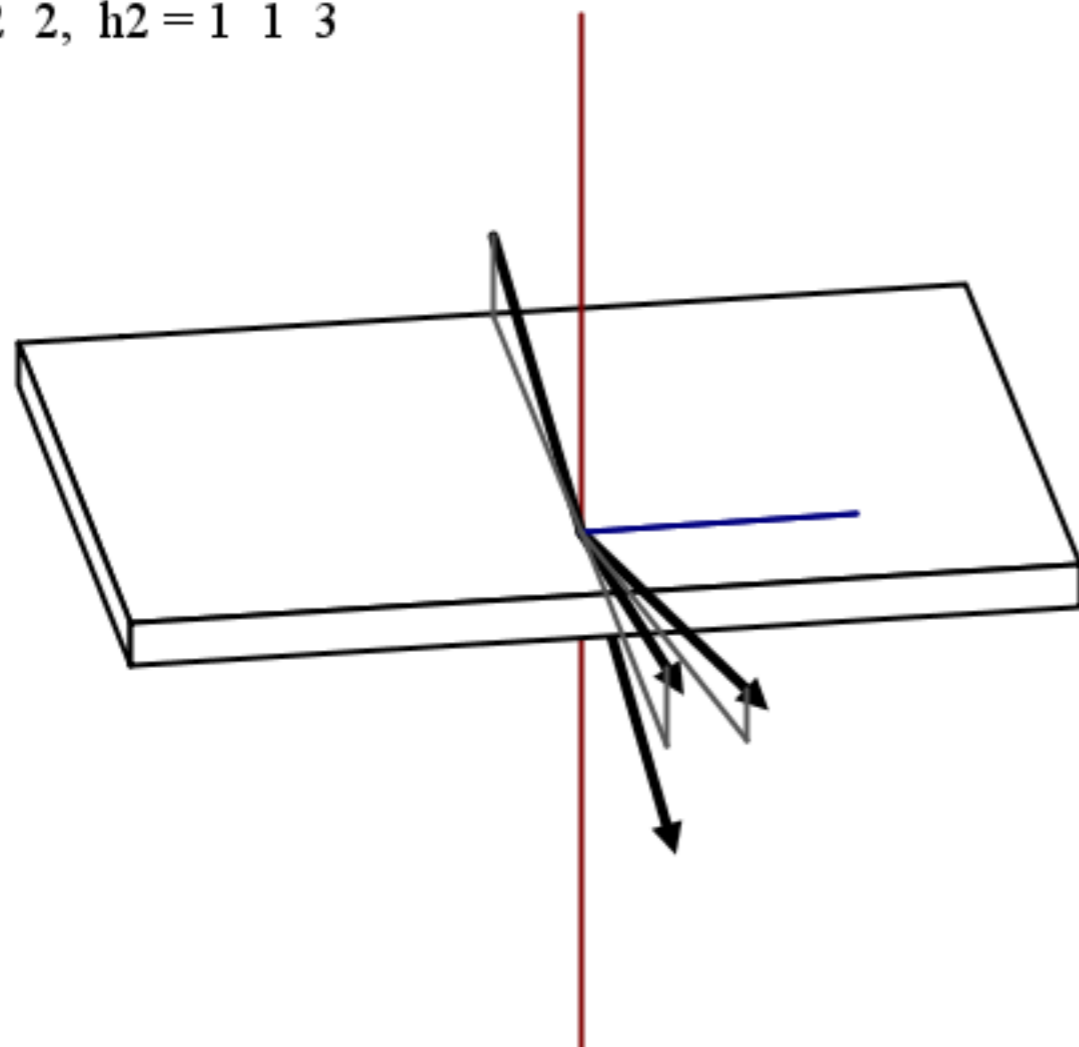
Ge, E = 25 keV, n = -1 -1 -1 (x,y)

h1 = 2 2 2, h2 = 1 1 3

258.0

Ge, E = 25 keV, n = -1 -1 -1 (x,y)

h1 = 2 2 2, h2 = 1 1 3



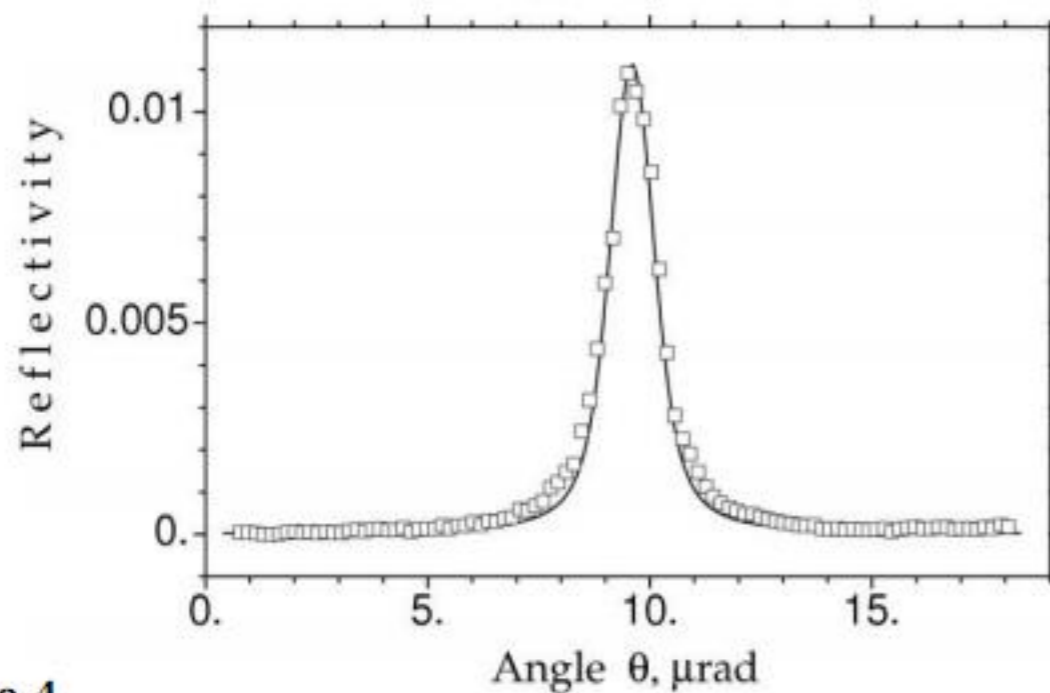
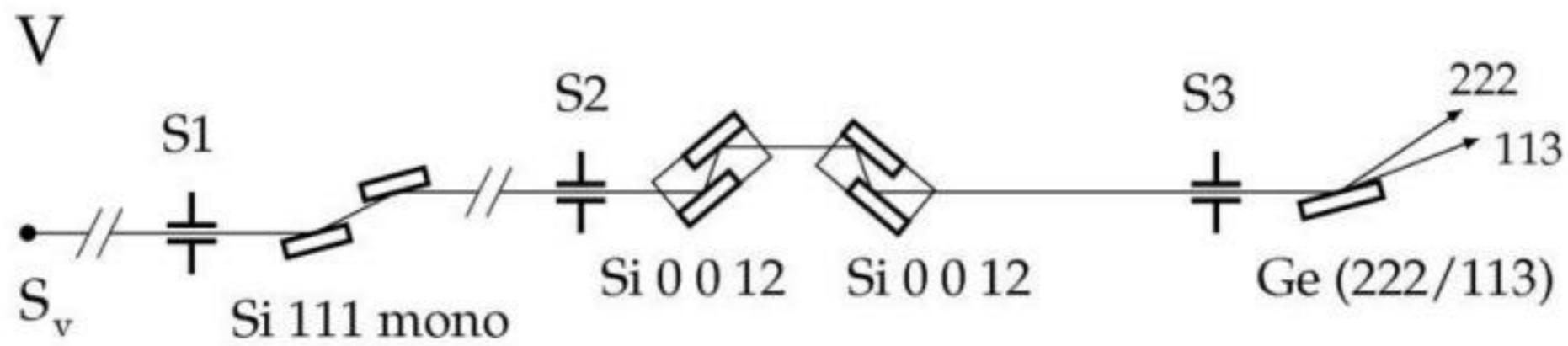


Figure 4
Experimental 222 θ curve measured at $\varphi = -750.5 \mu\text{rad}$ (symbols) and the theoretical diffraction peak calculated for $F_{\text{Ge}} = 1.06$ and convoluted with a Gaussian function of width $0.8 \mu\text{rad}$ (solid line).

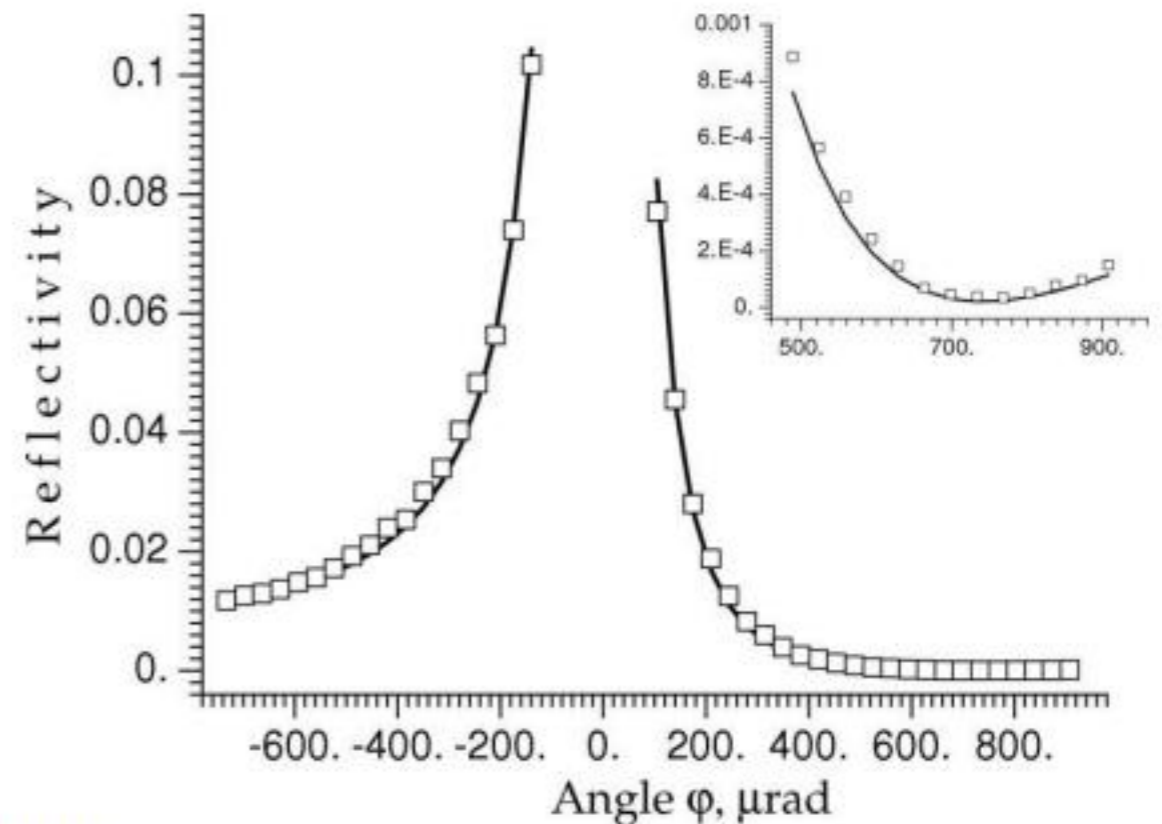


Figure 5
Experimental 222 peak intensities (symbols) and the best fit for the 222 Ge structure factor $F_{\text{Ge}} = 1.05$ (solid line). In the inset the angular region of zero 222 peak intensity is shown.

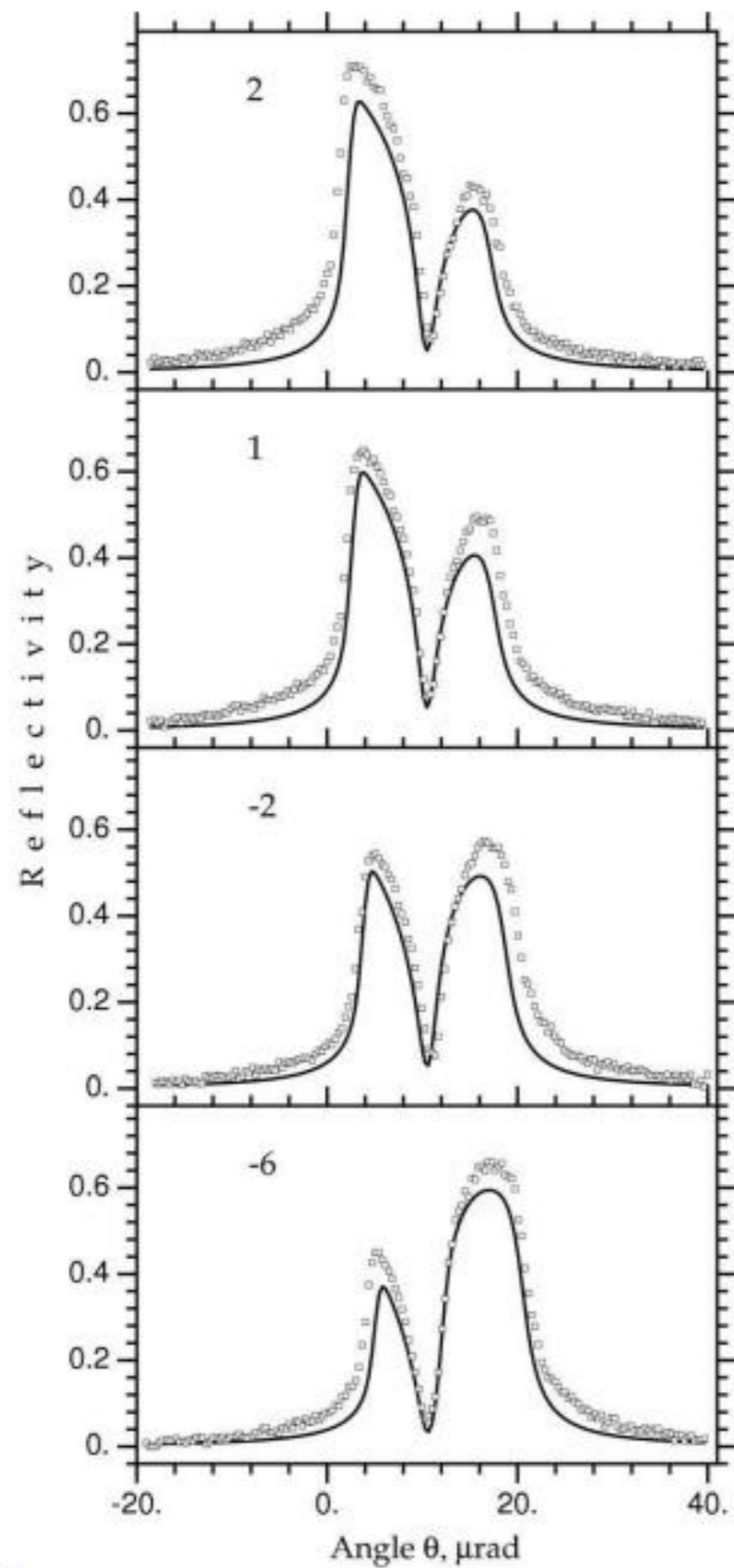


Figure 6
Comparison of the experimental polar scans (symbols) for the 113 reflection with computer simulations (solid lines).

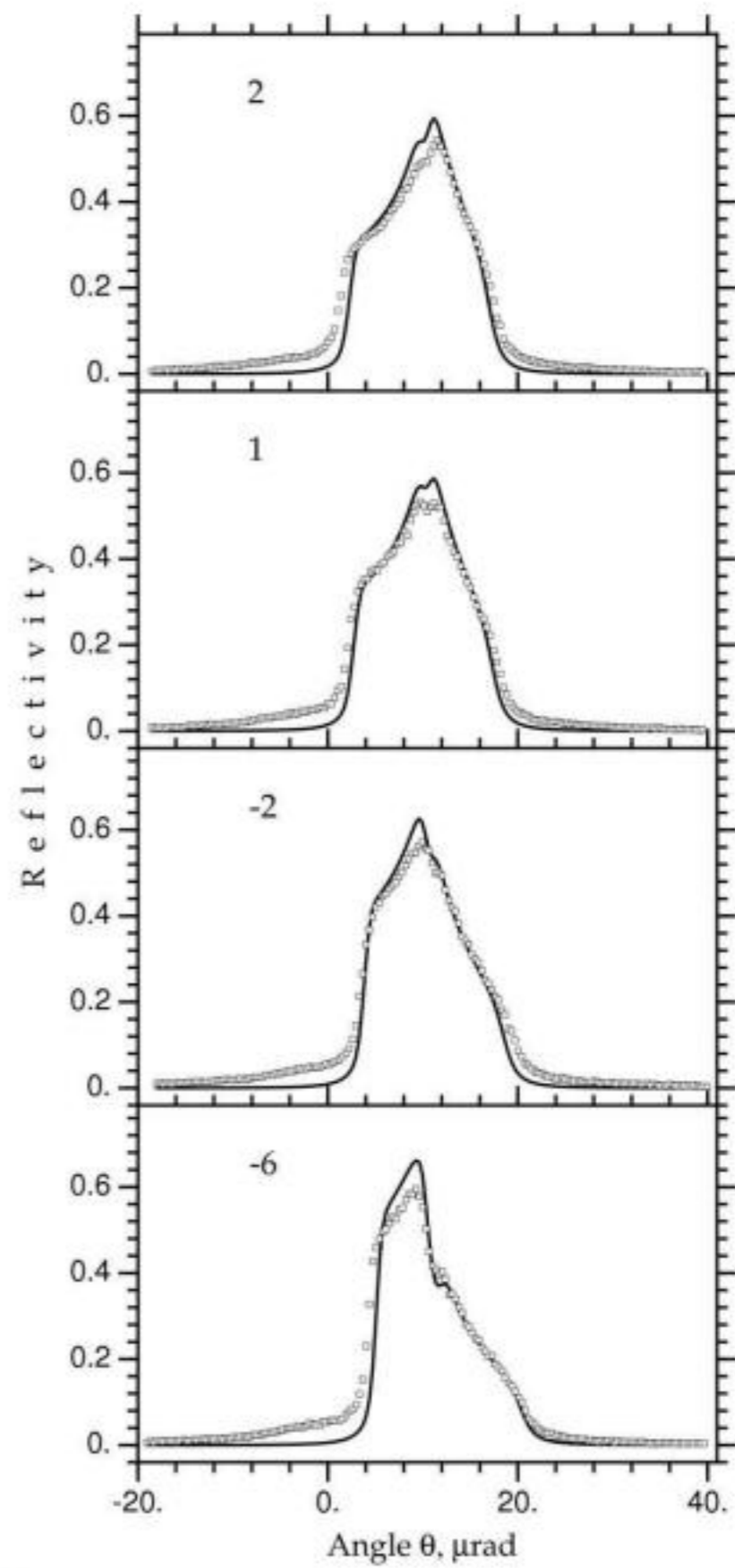
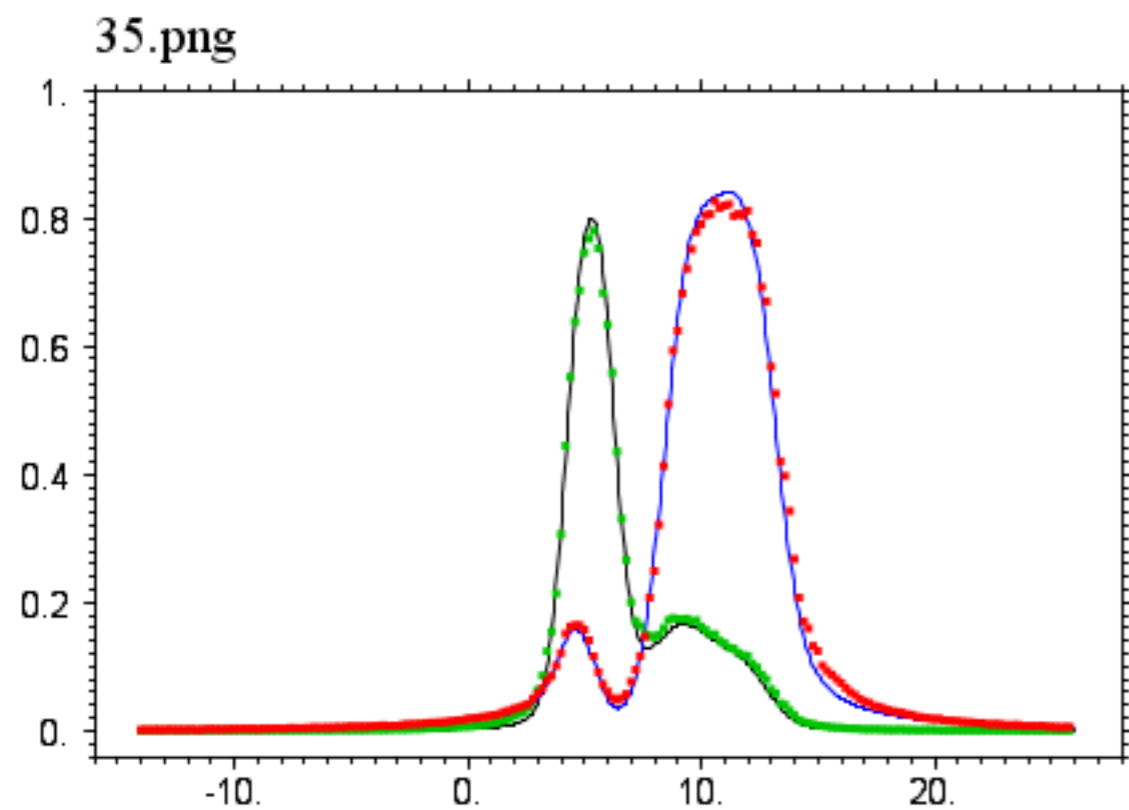
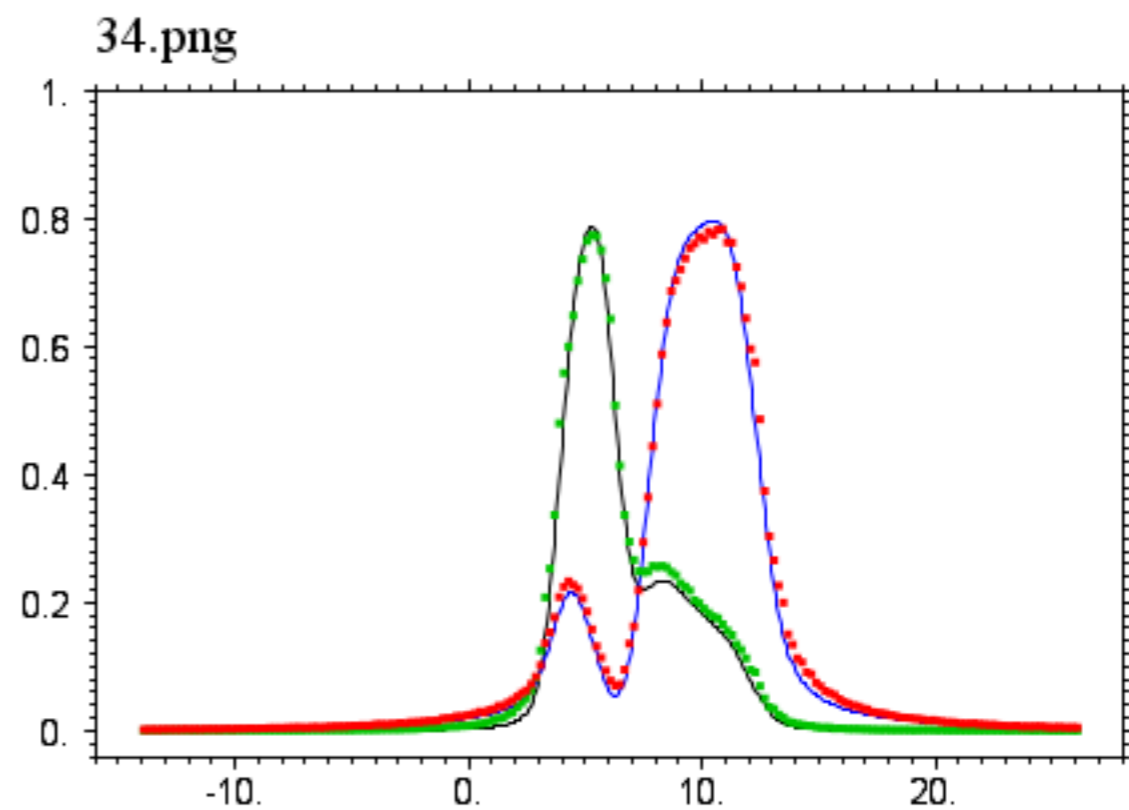


Figure 7
The same as in Fig. 6 but for the 222 reflection.

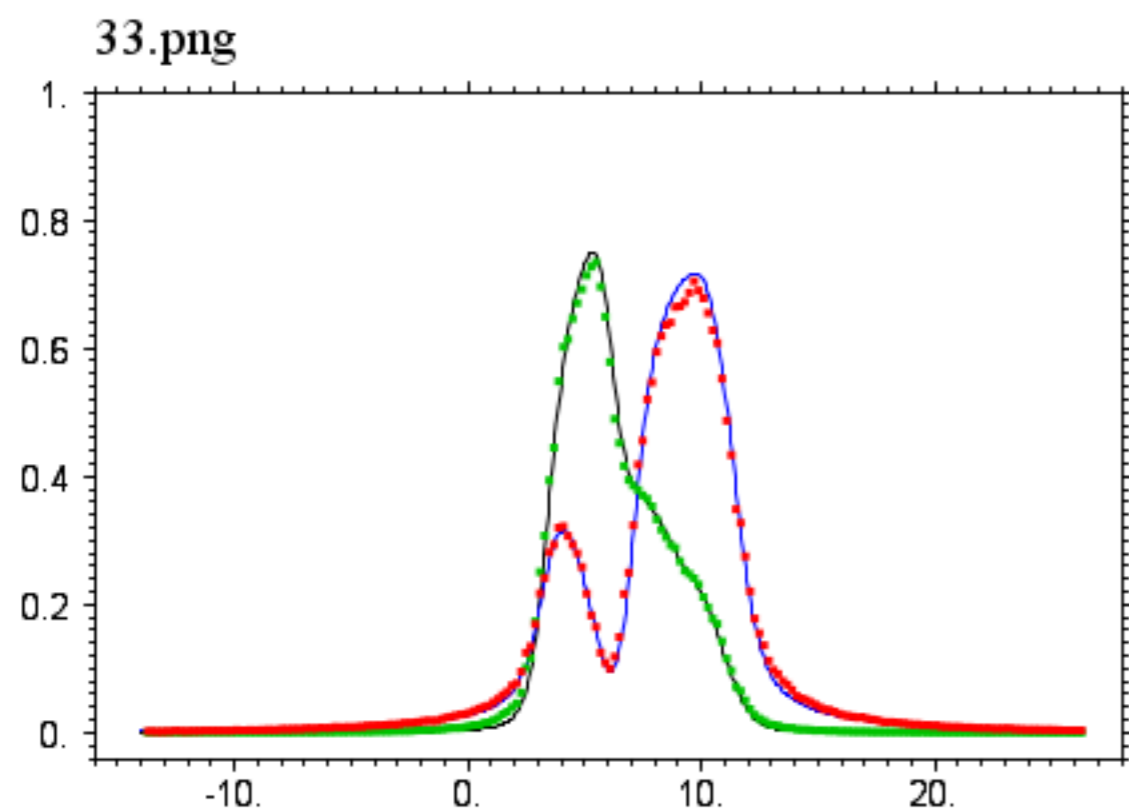
Рабочие материалы нового эксперимента с ^{222}Rn в Si будет опубликовано посмертно в будущем



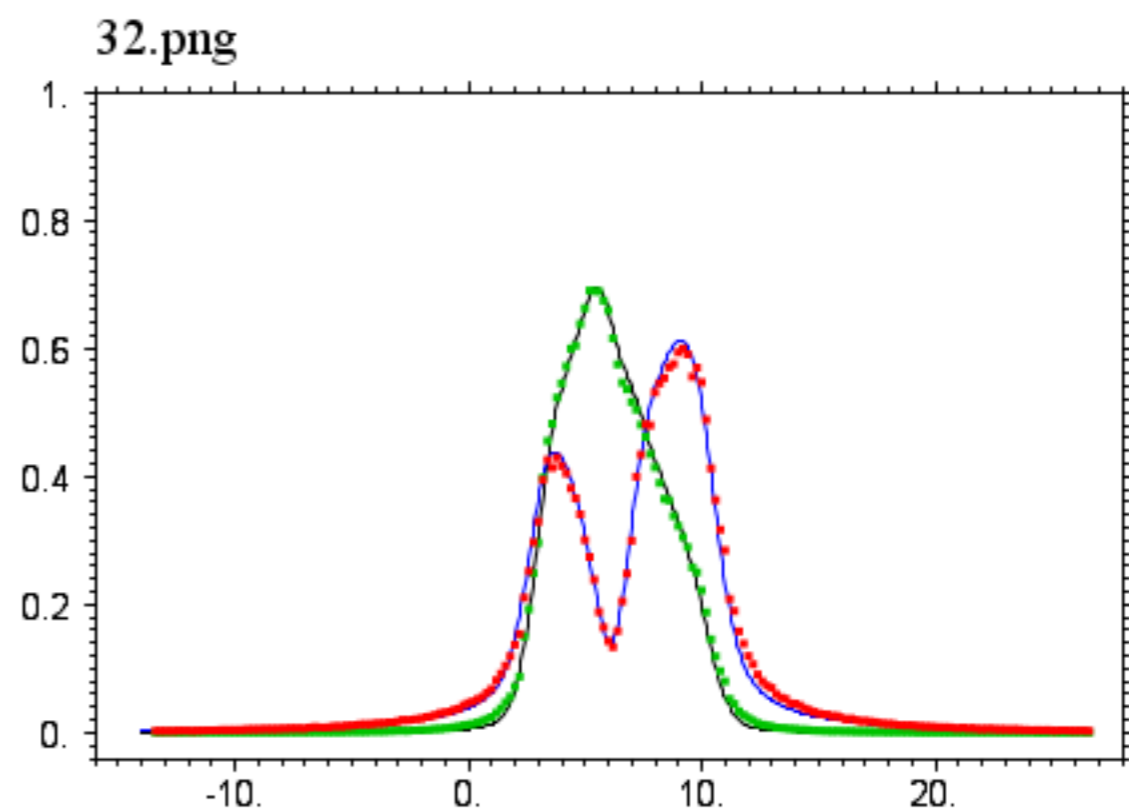
-6.9



-5.3



-3.3



-1.4

БЛАГОДАРЮ

ЗА

ВНИМАНИЕ