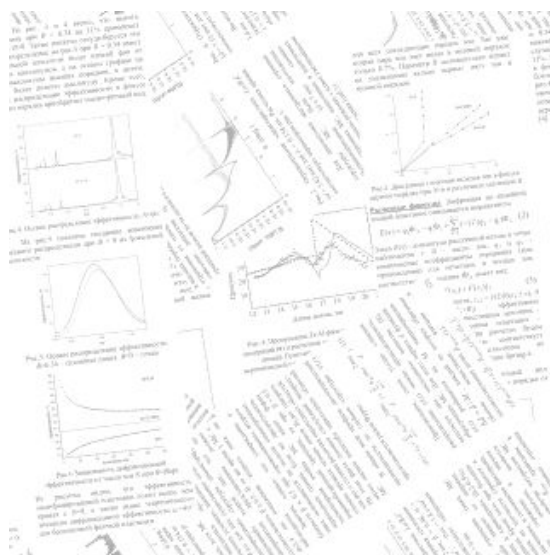


Рентгеновская оптика – 2012



Доклады конференции
г. Черноголовка, 1-4 октября 2012

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов
Российской академии наук

2012

Конференция «Рентгеновская оптика — 2012» г. Черноголовка, 1-4 октября 2012 г.

Организатор конференции

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов
Российской академии наук (ИПТМ РАН, г. Черноголовка)

При поддержке

Российской Академии Наук
Российского Фонда Фундаментальных Исследований

Комитет по проведению конференции

Председатель: Рощупкин Д.В., ИПТМ РАН
Ученый секретарь: Иржак Д.В., ИПТМ РАН
Ответственный секретарь: Казьмирук Л.А, ИПТМ РАН
Григорьев М.В., ИПТМ РАН

Программный комитет

Аристов В.В., ИПТМ РАН, Черноголовка
Салашенко Н.Н., ИФМ РАН, Н.Новгород
Чукалина М.В., ИПТМ РАН, Черноголовка
Бушуев В.А., МГУ, Москва
Суворов Э.В., ИФТТ РАН, Черноголовка

Программа конференции

- рентгеновская кристаллооптика
- многослойная оптика для рентгеновского и экстремального ультрафиолетового диапазона
- технология изготовления элементов рентгеновской оптики
- применение рентгеновской оптики для исследования микро- и наноструктур
- рентгеновская литография
- рентгеновская микроскопия и томография
- новые методы исследования микро- и наноструктур с использованием синхротронных и лабораторных источников рентгеновского излучения

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов Российской академии наук
142432, г. Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, д. 6, Московская обл., Россия
Тел.: (496)5244058
e-mail: x-ray@iptm.ru
web: <http://purple.iptm.ru/xray>

СОДЕРЖАНИЕ

<u>М.А. Андреева</u> , Ю.Л. Репченко Кинематический предел в теории рентгеновской магнитной рефлектометрии.....	7
<u>В.В. Аристов</u> Значение эффекта Комптона в интерпретации квантовой механики	10
<u>В.Е. Асадчиков</u> , А.В. Бузмаков, А.Е. Благов, В.И. Гулимова, Д.А. Золотов, А.С. Орехов, А.С. Осадчая, К.М. Подурец, С.В. Савельев, Р.А. Сенин, А.Ю. Серегин, Е.Ю. Терещенко, М.В. Чукалина Сочетание методов рентгеновской микротомографии и флуоресцентного анализа при изучении особенностей строения костной ткани гекконов.....	27
<u>А.В. Бузмаков</u> , В.Е.Асадчиков, Д.А. Золотов, М.В. Чукалина, Д.П. Николаев, В.Е. Прун Новые программно-аппаратные ресурсы для улучшения качества обработки томографических данных	29
<u>В. А. Бушуев</u> Влияние динамики теплового самовоздействия мощных импульсов в кристалле на монохроматизацию излучения рентгеновского лазера на свободных электронах	31
<u>В. А. Бушуев</u> , Л. Самойлова Особенности формирования когерентных фемтосекундных импульсов при дифракционном прохождении излучения рентгеновского лазера на свободных электронах в геометрии Брэгга	34
И. А. Артюков, А.С.Бусаров, <u>А.В.Виноградов</u> , Н.Л. Попов Оптические преобразования для когерентной отражательной микроскопии скользящего падения	37
<u>Е. А. Вишняков</u> , Д. Л. Воронов, Э. М. Гулликсон, В. В. Кондратенко, И. А. Копылец, М. С. Лугинин, Е. Н. Рагозин Многослойные зеркала на основе структуры Sb/W ₄ C ($\lambda \approx 8.5$ нм).....	40
<u>Ю.О. Волков</u> , И.В. Кожевников, Б.С. Роцин, Е.О Филатова, В.Е. Асадчиков Сравнение модельного и безмодельного подходов к решению обратной задачи рефлектометрии	42
<u>Гольденберг Б.Г.</u> , Резникова Е.Ф., Лемзяков А.Г. Формирование глубоких микроструктур методом микропучковой рентгенолитографии	43
<u>Л. И. Горай</u> , М. Н. Лубов Об использовании нелинейной модели роста тонких пленок для строгого анализа интенсивности рентгеновского рассеяния на шероховатых и профилированных поверхностях.....	45
З. Бжеумихова, О. Шарф, <u>Р. Губжиков</u> Специализированная рентгеновская оптика – от малого фокуса до широкого поля зрения.....	48
<u>В.К. Егоров</u> , Е.В. Егоров Исследования параметров радиационных потоков, возбуждаемых рентгеновскими трубками прострельного типа нового поколения	49
<u>Е.В. Егоров</u> , В.К. Егоров Особенности рентгенофлуоресцентной элементной диагностики материалов при ионном возбуждении флуоресценции.....	51

<u>Е.В. Емелин</u> , Д.В. Рошупкин, Д.В. Иржак, О.А. Бузанов, С.Д. Лавров Изготовление и исследование сегнетоэлектрических доменных структур в кристаллах LiTaO_3 конгруэнтного, стехиометрического и надстехиометрического состава.....	54
<u>Д.В. Иржак</u> , Д.В. Рошупкин, Р.Р. Фахртдинов Измерение независимых пьезоэлектрических и упругих констант кристалла КТГС с использованием метода рентгеновской дифрактометрии.....	57
<u>К.А. Кедало</u> , Е.Н.Овчинникова, В.Е.Дмитриенко, Э.Х.Мухамеджанов, D.V.Novikov, C.Richter Изучение температурной зависимости "запрещенных" отражений в кристалле RDP вблизи К-края рубидия.....	62
<u>М.А. Князев</u> , В.В. Старков, Д.В. Рошупкин Изготовление «глубоких» дифракционных решеток на основе кремния и исследование их рентгенооптических свойств.....	65
<u>В. Г. Кон</u> Численное моделирование оптических свойств рентгеновского 30-линзового интерферометра.....	67
К.Т. Айрапетян, С.Н. Нореян, <u>В.В. Маргарян</u> Анализ поведения параметров перебрасываемых рентгеновских пучков в зависимости от значения приложенного температурного градиента.....	70
<u>Е.В. Минеев</u> , А.В. Бузмаков, В.Е. Асадчиков, Р.А. Сенин, А.А. Воробьев Исследования тепловыделяющих элементов с использованием метода компьютерной томографии.....	73
<u>В.К. Мирзоян</u> , К.Г. Труни, П.А. Григорян, К.М. Геворкян, M. Ghannad Dezfouli, В.Н. Агабекян Зависимость интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения от кристалла АДП при наличии внешнего воздействия.....	75
<u>А. В. Митрофанов</u> Тонкие пленки формвара в рентгеновской оптике.....	77
<u>Л.И. Огнев</u> , И. Букреева, A. Cedola, A. Diaz, A. Sorrentino, E.Giovine, F. Scarinci, W. Jark, S. Lagomarsino Рентгеновский фильтр на периодическом структурированном волноводе.....	80
В. Г. Кон, <u>М. А. Орлов</u> Численное исследование двумерных изображений, формируемых в методе фазового контраста Цернике в жестком рентгеновском излучении.....	83
Гайкович П. К., <u>Парьев Д. Е.</u> , Салащенко Н. Н., Стариков С. Д., Чхало Н. И. Короткопериодные многослойные зеркала на основе углерода и переходных металлов.....	86
И.Г. Забродин, И.А. Каськов, И.М. Нефедов, <u>А.Е. Пестов</u> , Н.Н. Салащенко, Н.И. Чхало Установка ионно-пучковой и плазмохимической коррекции формы оптических поверхностей. Первые эксперименты.....	89
Ю.А. Вайнер, Е.Б. Клюенков, <u>В.Н. Полковников</u> , Н.Н. Салащенко, С.Д. Стариков Применение ионно-пучковых методов распыления для синтеза многослойных зеркал $\text{La}/\text{V}_4\text{C}$	92
Голованов Д.Г., <u>Прибора В.Н.</u> Современное рентгеновское аналитическое оборудование фирмы Bruker AXS ...	95
<u>В.И. Пунегов</u> , Д.В. Иржак, Д.В. Рошупкин Особенности рентгеновской дифракции на кристалле с металлической фазосдвигающей решеткой.....	96

<u>В.И. Пунегов</u> Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей на кристалле с порами треугольного сечения	99
<u>Ю. Л. Репченко, М. А. Андреева, Э. П. Домашевская, В. А. Терехов, П. А. Середин, В. М. Кашкаров</u> Исследования $L_{2,3}$ спектров поглощения Р в плёнках GaInP в скользящей геометрии	102
<u>Е.В. Емелин, Д.В. Рошупкин, Д.В. Иржак, Р.Р. Фахртдинов, С.А. Сахаров</u> Высокотемпературные сенсорные устройства на основе пьезоэлектрических кристаллов $La_3Ga_5SiO_{14}$	105
<u>Д.В. Рошупкин, Д.В. Иржак, О.А. Плотицына, Р.Р. Фахртдинов, А.И. Шишаков,</u> <u>М.В. Григорьев, О.А. Бузанов</u> Перспективные материалы акустоэлектроники: исследование структурного совершенства и акустических свойств методами рентгеновской топографии и дифрактометрии	108
<u>Егоров А.А., Монахов И.С., Е.Г. Новоселова, И.С. Смирнов</u> Возможности и ограничения метода in situ рентгеновской рефлектометрии для определения параметров растущих пленок	112
<u>И.А. Смирнова, Э.В. Суворов, Е.В. Шулаков</u> Интегральная интенсивность рентгеновского излучения в ограниченном кристалле	115
<u>Ю.А. Вайнер, Б.А. Грибков, М.В. Зорина, В.Н. Полковников, Н.Н. Салашенко,</u> <u>С.Д. Стариков, Н.Н. Цыбин</u> Многослойные структуры Cr/Y для компенсации внутренних напряжений и реставрации подложек элементов рентгеновской оптики	118
<u>Э.В.Суворов, И.А.Смирнова</u> Об основных механизмах формирующих изображение дислокаций в рентгеновской дифракционной топографии	121
<u>Александр Фирсов, Мария Бржезинская, Александр Свинцов, Анатолий Фирсов, Алексей Ерко</u> Дифракционные элементы для исследований с использованием современных источников излучения	124
<u>С.Ю. Зув, М.Н. Дроздов, С.В. Кузин, А.Я. Лопатин, В.И. Лучин, Н.Н. Салашенко,</u> <u>Н.Н. Цыбин, С.В.Шестов</u> Абсорбционные многослойные фильтры в космических проектах по изучению солнечной короны	128
<u>М.В. Чукалина, А.В. Бузмаков, В.Е. Прун, Д.П. Николаев, В.Е. Асадчиков</u> Алгебраический метод реконструкции в решении томографических задач	132
<u>Д.Г. Волгунов, Н.Н. Салашенко, М.Н. Торопов, Н.И. Чхало, А.В. Щербаков</u> Развитие интерферометрии с дифракционной волной сравнения для аттестации сверхточной оптики	135
<u>Я. Л. Шабельникова, Е. Б. Якимов</u> К вопросу о функции генерации в методе наведенного рентгеновским пучком тока	138
<u>С. В. Кузин, С. В. Шестов, С. А. Богачев, И. В. Зимовец, А. А. Перцов,</u> <u>А. С. Кириченко, А. С. Ульянов</u> Рентгеновский телескоп СОРЕНТО для миссии Интергелио-Зонд	141

<u>Е.В. Шулаков, И.А. Смирнова</u> Рентгеновская экспресс топография с использованием бесщелевого коллиматора	142
<u>В. А. Юнкин, В. Г. Кон, С. М. Кузнецов, М. В. Григорьев, И. И. Снигирева, А. А. Снигирев</u> Разработка 30-линзового рентгеновского интерферометра	145
<u>Е. Б. Якимов</u> Возможности метода ХВІС для характеристики электрически активных дефектов в полупроводниковых кристаллах, сравнение с методами ЕВІС и LBIC	148
<u>И. В. Якимчук, А.В. Бузмаков, А.В. Андреев, В.Е. Асадчиков</u> Перспективы разработки метода контроля качества вогнутых осесимметричных поверхностей скользящим рентгеновским пучком.....	150

Кинематический предел в теории рентгеновской магнитной рефлектометрии

М.А. Андреева¹, Ю.Л. Репченко²

¹ Физфак МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

² Воронежский Государственный Университет, Воронеж, Россия

e-mail: Mandreeva1@yandex.ru

Рентгеновская магнитная рефлектометрия (XRMR - X-ray resonant magnetic reflectivity) предоставляет уникальную элементно- и пространственно-селективную информацию о магнитном упорядочении в многослойных пленках. Магнитное рассеяние, существенное вблизи краев поглощения магнитных атомов, вносит радикальное усложнение в теорию рефлектометрии, поскольку рентгеновская восприимчивость среды при наличии такого рассеяния становится в общем случае тензором. Теория рентгеновского отражения от анизотропных (магнитных) мультислоев развита в работе С.А. Степанова с соавторами [1] на базе формализма собственных волн и в работах М.А. Андреевой и А.Г. Смеховой [2,3] с использованием метода матриц распространения. Применение этих алгоритмов для интерпретации реальных экспериментальных данных достаточно времязатратно, что делает актуальным упрощение расчетов. Такие попытки были предприняты, например, в работах [4-6]. В работе [7] была использована необычная смесь динамического (для изотропной части рассеяния) и кинематического (для магнитной части рассеяния) приближения.

Мы проверили применимость такого «смешанного» подхода модельным расчетом (Рис. 1). Расчет отражения проведен для образца $Nb(4 \text{ нм})/[Dy\uparrow(5 \text{ нм})/Lu(3 \text{ нм})/Dy\downarrow(5 \text{ нм})/Lu(3 \text{ нм})]_{150}/Y(70 \text{ нм})/\text{сапфир}$, характеризующегося антиферромагнитным межслойным упорядочением, на излучении вблизи L_3 -края поглощения диспрозия ($E_{ph}=7790 \text{ eV}$), в предположении, что намагниченность слоев диспрозия лежит в плоскости рассеяния (L-МОКЕ геометрия). При скользких углах падения в такой геометрии правую и левую круговую поляризацию излучения можно считать собственными поляризациями задачи [6]. Восприимчивости слоев Lu, Nb, Y и сапфира были взяты из таблиц [8-9], а для резонансного магнитного слоя Dy рассчитывались по XAS и XMCD данным из работы [10], нормированным на табличные данные [8-9], и с использованием преобразования Крамерса-Кронига для получения реальной части диагональной и недиагональной компонент тензора восприимчивости.

Расчет показал, что для углов, существенно превышающих критический угол полного

внешнего отражения ($\theta \gg 3\theta_c$), кинематическое приближение, как и следовало ожидать, дает приемлемый результат по сравнению с точным расчетом (по формулам Паррата или эквивалентно с помощью 2×2 - матриц распространения). Существенно, что «смешанный» подход оказывается справедливым только в той области, где применимо полное кинематическое приближение. То есть фактически не имеет смысла рассматривать два вклада в отраженную волну в разных приближениях.

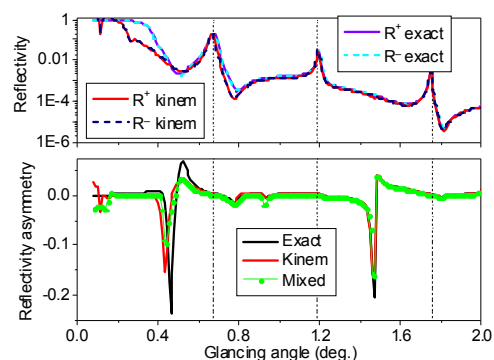


Рис. 1. Рассчитанные коэффициенты отражения для излучения правой и левой круговой поляризации R^+ и R^- (верхний график), а также асимметрии отражения по знаку круговой поляризации $(R^+ - R^-)/(R^+ + R^-)$ (нижний график) ($\lambda = 0.159 \text{ нм}$). Тонкие вертикальные линии отмечают положение брэгговских максимумов разного порядка. «Магнитные» максимумы полуполого порядка, отвечающие удвоению магнитного периода, практически не видны на кривых отражения R^+ и R^- , но хорошо проявляются (наиболее ярко для $1/2$ и $5/2$ максимумов) на графиках асимметрии отражения.

Кинематический предел известного алгоритма Паррата в теории рентгеновской рефлектометрии рассмотрен в работах [11-12]. Для получения кинематической формулы 1) пренебрегают многократным отражением в каждом слое (то есть отбрасывают знаменатель в формуле Паррата), 2) используют приближенное выражение для квадратного корня:

$$\eta_j = \sqrt{\sin^2 \theta + \chi_j} \approx \sin \theta + \frac{\chi_j}{2 \sin \theta}, \quad (1)$$

определяющего нормальные компоненты волновых векторов в слое (θ - угол скольжения, χ_j восприимчивость j -го слоя) и, соответственно,

3) упрощают формулу Френеля:

$$\Gamma_{j-1,j} \approx \frac{(\chi_{j-1} - \chi_j)}{4 \sin^2 \theta}. \quad (2)$$

В результате амплитудный коэффициент отражения от многослойной структуры R может быть представлен как сумма градиентов восприимчивости на границах раздела с соответствующим фазовым сдвигом:

$$R = \frac{1}{4 \sin^2 \theta} \sum_{j=1}^L (\chi_{j-1} - \chi_j) e^{i(Qz_{j-1} + \frac{\kappa}{\sin \theta} \sum_{k=1}^{j-1} \chi_{0k} d_k)} \quad (3)$$

В (3) $Q = 2\kappa \sin \theta$ - вектор рассеяния, $\kappa = \frac{\omega}{c}$, z_{j-1} - глубина границы раздела $j-1$ и j слоев, d_k - толщины слоев. Отметим, что, как показывают непосредственные расчеты, пренебрегать χ_k в показателе экспоненты нельзя, однако, слабые магнитные добавки к χ_k в показателе экспоненты можно не учитывать. Это обстоятельство важно при рассмотрении анизотропного случая.

В случае анизотропных слоев рекуррентные соотношения для вычисления 2×2 -матричного коэффициента отражения для тангенциальных компонент магнитного поля излучения $\hat{p}_{j-1,j}$ выглядят следующим образом [13]:

$$\hat{P}_{j-1,j} = \hat{p}_{j-1,j} + \hat{t}'_{j-1,j} (\hat{p}'_{j-1,j})^{-1} \hat{W}_j [(1 - \hat{W}_j)^{-1}] \hat{t}_{j-1,j} \quad (4)$$

где

$$\hat{W}_j = \hat{p}'_{j-1,j} e^{-ikd_j \hat{N}_j^-} \hat{p}_{j,j+1} e^{ikd_j \hat{N}_j^+}, \quad (5)$$

$$\hat{p}_{j-1,j} = (\hat{\gamma}_j^+ - \hat{\gamma}_{j-1}^-)^{-1} (\hat{\gamma}_{j-1}^+ - \hat{\gamma}_j^+), \quad (6)$$

$\hat{p}_{j-1,j}$, $\hat{t}_{j-1,j}$ - матричные коэффициенты однократного отражения и пропускания на границе $j-1$ и j слоев, штрихи соответствуют обратному отражению и пропусканию, значки $^+$ и $^-$ относятся к проходящим и отраженным волнам, 2×2 -матрицы $\hat{\gamma}$ и \hat{N} представляют планарные тензоры поверхностного импеданса и нормальной рефракции [14].

Следуя процедуре перехода от динамического подхода к кинематическому пределу, то есть, пренебрегая многократным отражением и пренебрегая анизотропными добавками в матричных экспоненциалах, приводим (4) к выражению:

$$\hat{P} \approx \sum_{j=1}^L e^{i(Qz_{j-1} + \frac{\kappa}{\sin \theta} \sum_{k=1}^{j-1} \chi_{0k} d_k)} \hat{p}_{j-1,j} \quad (7)$$

Для вычисления матричного коэффициента отражения от границы раздела $j-1$ и j слоев $\hat{r}_{j-1,j}$ (для тангенциальных компонент магнитного поля излучения) в кинематическом приближении надо упростить (6). Общее выражение для $\hat{\gamma}$ дано в [14]:

$$\hat{\gamma}^\pm = [(\eta_1^\pm + \eta_2^\pm) \hat{B} - \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{D}]^{-1} \times [\hat{B} \hat{C} + (\hat{A} - \eta_1^\pm \hat{I})(\hat{A} - \eta_2^\pm \hat{I})] \quad (8)$$

где \hat{A} , \hat{B} , \hat{D} - 2×2 -блоки матрицы распространения для тангенциальных компонент электрического и магнитного поля излучения, \hat{I} - единичная 2×2 -матрица.

Для случая, когда намагниченность многослойной структуры ориентирована в плоскости поверхности, тензор диэлектрической проницаемости имеет вид (4,6):

$$\hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} 1 + \chi_0 & 0 & -i\Delta\chi_m \cos \psi \\ 0 & 1 + \chi_0 & -i\Delta\chi_m \sin \psi \\ i\Delta\chi_m \cos \psi & i\Delta\chi_m \sin \psi & 1 + \chi_0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $\Delta\chi_m$ - магнитная добавка к восприимчивости среды, отвечающая за круговой дихроизм (существенная вблизи краев поглощения), угол ψ определяет азимут намагниченности ($\psi = 0^\circ$, если вектор намагниченности M лежит в плоскости рассеяния). Используемая система координат приведена на Рис. 2.

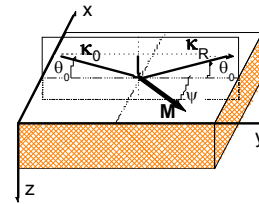


Рис. 2. Геометрия эксперимента.

Для этого случая матрица распространения получена в виде (6):

$$\hat{M}(z) = \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{B} \\ \hat{C} & \hat{D} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} a & 0 & (1 + \chi_0) & 0 \\ -b & 0 & 0 & \eta^2 \\ \frac{\eta^2}{1 + \chi_0} & 0 & -a & b \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где $a = i\Delta\chi_m \cos \theta \sin \psi$, $b = i\Delta\chi_m \cos \theta \cos \psi$, $\eta^2 = \sin^2 \theta + \chi_0$. Для нахождения собственных волновых векторов $k_i = \kappa(b + \eta_i q)$ имеем биквадратное уравнение, из которого получаем:

$$\eta_{1,2} \cong \pm \sqrt{\eta^2 \pm \Delta\chi_m \cos \theta \cos \psi}. \quad (11)$$

Учитывая также соотношение:

$$\eta_1 \eta_2 + \eta^2 = \frac{(\eta_1 + \eta_2)^2}{2}, \quad (12)$$

приводим тензоры $\hat{\gamma}^{\pm}$ к виду:

$$\hat{\gamma}^{\pm} \cong \frac{1}{\det} \begin{pmatrix} 4\eta^2 \tilde{\eta}^2 (\pm \tilde{\eta} - a) & 2b\tilde{\eta}^2 \\ 2b\tilde{\eta}^2 & \pm 4(1 + \chi_0)\tilde{\eta}^3 \end{pmatrix} \quad (13)$$

$$\text{где } \tilde{\eta}^{\pm} = \frac{(\eta_1^{\pm} + \eta_2^{\pm})}{2} \approx \pm \eta,$$

$$\det = (1 + \chi_0)\eta^2(\eta_1 + \eta_2)^2 + b^2 \cong 4(1 + \chi_0)\eta^2 \tilde{\eta}^2. \quad (14)$$

Используя обычные для кинематического предела приближенные выражения для квадратных корней, приходим к выражению:

$$\hat{\rho}_{j-1,j} \cong \frac{1}{4\sin^2 \theta} \begin{pmatrix} -\chi_{0j-1} \cos 2\theta + 2a_{j-1} \sin \theta & -b_{j-1} \sin \theta \\ -\frac{b_{j-1}}{\sin \theta} & \chi_{0j-1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\chi_{0j} \cos 2\theta + 2a_j \sin \theta & -b_j \sin \theta \\ -\frac{b_j}{\sin \theta} & \chi_{0j} \end{pmatrix} \quad (15)$$

Переход от матричных коэффициентов отражения для тангенциальных компонент магнитного поля излучения к стандартным π и σ поляризациям осуществляется достаточно просто

$$\hat{R} = \begin{pmatrix} R_{\sigma\sigma} & R_{\sigma\pi} \\ R_{\pi\sigma} & R_{\pi\pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_{22} & -P_{21} \sin \theta \\ P_{12} & -P_{11} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Окончательно коэффициент отражения в кинематическом приближении получаем в виде

$$\hat{R} \approx \sum_{j=1}^L e^{i(Qz_{j-1} + \frac{\kappa}{\sin \theta} \sum_{k=1}^{j-1} \chi_{0k} d_k)} \hat{R}_{j-1,j}, \quad (17)$$

где

$$\hat{R}_{j-1,j} \cong \frac{1}{4\sin^2 \theta} \begin{pmatrix} \chi_{0j-1} - \chi_{0j} \\ -i(\Delta\chi_{mj-1} - \Delta\chi_{mj}) \cos \theta \cos \psi \\ i(\Delta\chi_{mj-1} - \Delta\chi_{mj}) \cos \theta \cos \psi \\ (\chi_{0j-1} - \chi_{0j}) \cos 2\theta - i(\Delta\chi_{mj-1} - \Delta\chi_{mj}) \cos \psi \sin 2\theta \end{pmatrix} \quad (18)$$

Легко видеть, что матрицы отражения совпадают с матричным представлением амплитуды рассеяния, получаемой как свертка тензора восприимчивости среды с векторами поляризации падающего и рассеянного квантов. В

выбранной системе координат (Рис. 2) эти векторы имеют вид :

$$\begin{aligned} e_{\sigma 1} &= (1.0.0), & e_{\sigma 2} &= (1.0.0) \\ e_{\pi 1} &= (0, \sin \theta, -\cos \theta), & e_{\pi 2} &= (0, -\sin \theta, -\cos \theta) \end{aligned} \quad (19)$$

Свертка этих векторов с тензором восприимчивости общего вида дает:

$$\begin{pmatrix} \chi_{xx} \\ -\chi_{yx} \sin \theta - \chi_{zx} \cos \theta \\ \chi_{xy} \sin \theta - \chi_{xz} \cos \theta \\ \chi_{zz} \cos^2 \theta - \chi_{yy} \sin^2 \theta + \cos \theta \sin \theta (\chi_{yz} - \chi_{zy}) \end{pmatrix} \quad (20)$$

что вполне соответствует (18).

В заключение отметим, что использование кинематического алгоритма существенно упрощает счет и облегчает подгонку экспериментальных данных. Однако, сравнение с точным расчетом, изложенным, например, в [2] и реализованном в программном пакете [15], всегда необходимо.

Работа поддержана грантами РФФИ № 12-02-00924-a and №. 10-02-00768-a.

- [1] Stepanov S.A., Sinha S.A., Phys. Rev. B, 61, 15302 (2000).
- [2] Andreeva M.A., Smekhova A.G., Applied Surface Science, 252, 5619 (2006).
- [3] Андреева М.А., Смехова А.Г., Изв. РАН, сер. физическая, 72, No.5, 693 (2008).
- [4] Ishimatsu N., Hashizume H., Hamada S., et al., Phys. Rev. B, 60, 9596 (1999).
- [5] Kravtsov E., Haskel D., Velthuis T., et al., Phys. Rev. B, 79, 134438 (2009).
- [6] Одинцова Е.Е., Андреева М.А., Поверхность: рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 11, 46 (2010).
- [7] Ott H., Schubertaler-Langeheine C., et al., Appl. Phys. Lett., 88, 212507 (2006).
- [8] Henke, B. L., Gullikson, E. M. & Davis, J.C. Atomic Data and Nuclear Data Tables 54 (No.2), 181 (1993).
- [9] http://henke.lbl.gov/optical_constants/getdb2.html
- [10] Sorg C. «Magnetic Properties of 3d and 4f Ferromagnets Studied by X-Ray Absorption Spectroscopy» (2005). (http://users.physik.fu-berlin.de/~bab/start_frame2/diss/CSdiss.pdf).
- [11] Hamley I.W., Pedersen J.S., J Appl. Cryst. 27, 29 (1994).
- [12] Andreeva M.A., Lindgren B., Phys. Rev. B, 72, 125422 (2005).
- [13] Смехова А.Г., канд. диссер., физфак МГУ (2006).
- [14] Барковский Л.М., Борздов Г.Н., Лаврукович В.И., Журнал прикладной спектроскопии, 25, 526 (1976).
- [15] <http://kftt.phys.msu.ru/personalii/Andreeva/XRMR.zip>

Значение эффекта Комптона в интерпретации квантовой механики

В.В. Аристов

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН,
Черноголовка, Россия
e-mail: aristov@iptm.ru

Аннотация

В этом году исполняется 90 лет с момента обнаружения эффекта Комптона: квантового, некогерентного характера рассеяния жесткого рентгеновского излучения электронами в атомах. Его интерпретация как эффекта рассеяния частиц света свободными или слабосвязанными электронами в атомах оказала громадное влияние на формирование современной квантовой физики. Открытие дифракции рентгеновского излучения, предполагающей когерентное рассеяние электромагнитной волны всеми электронами всех атомов кристалла, практически не повлияло ни на теорию эффекта Комптона, ни на принятие фотонной концепции. В настоящей работе обсуждаются альтернативы общепринятой интерпретации эффекта Комптона. Показано, что этот эффект свидетельствует не о квантовании электромагнитного излучения, а о волновой структуре свободного неподвижного электрона. Показано, что некогерентное и когерентное рассеяние рентгеновских волн объясняется в рамках теории, предполагающей, что все особенности спектров рассеяния связаны не с квантовой структурой излучения, а с волновой структурой электрона. Проанализированы следствия интерпретации эффекта Комптона в понимании физического смысла уравнений Шредингера, брэгговской дифракции и рассеяния электромагнитного излучения на релятивистских электронах.

Введение. При создании теории формирования некогерентного рассеяния рентгеновского излучения электроном, Комптон использовал предположение о том, что электрон является частицей, размер которой существенно меньше длин волн рентгеновского излучения [1]. Теория де Бройля, описывающая движение электрона и его рассеяние на квантовых объектах электронными волнами, была опубликована несколько позже. Возможно, поэтому Комптон не воспользовался идеей де Бройля, выдвинув диаметрально противоположную идею, позволяющую, по его мнению, описывать рассеяние излучения квантовыми объектами. Он постулировал превращение излучения в обладающий энергией и импульсом квант, рассеиваемый точечным классическим электроном. Эта теория была принята как единственно верная, объясняющая некогерентное рассеяние, а эффект Комптона был положен в основу квантовой электродинамики – «has been termed a «turning point in physics» and gave great impetus to acceptance of the photon model» [2]. Справедливость этой теории обосновывается обычно тем, что ее выводы основаны на законах сохранения энергии, импульса, релятивистски инвариантны и подтверждаются экспериментально. Однако в основе теории Комптона лежит не только закон сохранения энергии и импульса, но и дополнительная «ad hoc» гипотеза о сохранении числа квантов-фотонов, энергия каждого из которых изменяется при рассеянии электронами пропорционально изменению частоты. Новый «закон сохранения» был принят без достаточных экспериментальных доказательств, поэтому сомнения в справедливости квантовой теории Комптона, содержащей постулат, изменяющий

физический смысл процессов рассеяния, высказывались рядом ученых, включая Шредингера, Бора и других. Анализируя интерпретацию эффекта Комптона Шредингером, Стрнад отмечал: «Schrödinger's treatment of the Compton effect remind us that a theory cannot be deduced directly from experiment; the same result may even be explained by two different theories. It also shows that the reaction of a physicist to empirical date is often governed by his common belief» [3]. Ниже будет показано, что гипотеза Комптона противоречит смыслу электродинамического взаимодействия заряда и поля, которое оставляет неподвижный электрон неподвижным после прохождения электромагнитной волны. Теория Комптона не связывает параметры взаимодействующих частиц релятивистскими преобразованиями. Противоречие гипотезы Комптона релятивистской механике может быть продемонстрировано на примере неудачной попытки Шредингера объяснить эффект Комптона эффектом Доплера при рассеянии электромагнитных волн на волнах де Бройля движущегося электрона [4]. Неудача Шредингера и других, кто предлагал различные модели эффекта Комптона заключалась в том, что рассматривалась возможность изменения частоты рассеянного излучения только в связи с движением электрона и со скоростью, обеспечивающей доплеровский эффект [5]. На самом деле угловое изменение частоты в эффекте Комптона не описывается релятивистским преобразованием Лоренца. Его можно получить, рассматривая рассеяние волны не на движущемся, а на неподвижном заряде со сферически симметричным периодическим распределением электронной плотности [6]. Более того, приняв концепцию Комптона

сохранения числа квантов, электродинамика, став квантовой теорией, столкнулась с парадоксами. Так, в статье «Парадоксы квантовой теории эффектов Вавилова-Черенкова и Доплера» Скобельцын писал: «Что же касается квантовой теории Черенков-эффекта, то в активе этой теории вообще нет каких-либо подтверждений, а в пассиве ее – противоречия кардинальным требованиям релятивистской механики. На данном этапе квантовой теории эффектов Вавилова-Черенкова и Доплера можно приписывать лишь эвристическое значение» [7].

Таким образом, вопреки сложившемуся мнению общепринятая теория эффекта Комптона не является релятивистски инвариантной – «закон сохранения» числа фотонов при рассеянии их электронами ведет в эффекте Доплера к утверждению о том, что «частица» света – фотон, всегда двигающаяся со скоростью света, изменяет свою энергию при переходе от одной системы координат к другой за счет изменения скорости движения источника, - кинетической энергии электрона, в то время как из закона сохранения энергии следует, что преобразования Лоренца ведут к изменению частоты и плотности потока энергии электромагнитного излучения и сохраняют скорость источника постоянной. Рассмотрим возможные механизмы, обеспечивающие эффект Комптона без привлечения идеи о квантах рентгеновских лучей. Проанализируем экспериментальные результаты, полученные Комптоном [8] и покажем, что они не позволяют считать теорию, сформулированную Комптоном, экспериментально обоснованной, не допускающей других интерпретаций. Сформулируем теорию эффекта Комптона, как в борновской интерпретации волновой функции электрона в квантовой механике, так и в интерпретации волновой функции электрона Шредингера, используемой в неоклассической теории [9].

1. О выполнении закона сохранения энергии и импульса при рассеянии электромагнитной волны на свободном электроне в классической электродинамике. Движение свободного электрона в поле электромагнитной волны описывается уравнением:

$$m\dot{\mathcal{G}} = e(\vec{E} + \frac{\mathcal{G}}{c} \times \vec{B}) \quad (1)$$

здесь \mathcal{G} – скорость электрона, $\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{d\vec{A}}{dt}$ – напряженность электрического поля, $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$, \vec{A} – векторный потенциал. $\vec{E} = \vec{E}_0 \cos 2\pi\nu t$, ν – частота электромагнитного поля, c – скорость света (в неоклассической теории, в уравнении (1) величины массы m и заряда e заменяются на dm и de , при этом считается $de/dm=e/m$). При рассеянии плоской поляризованной

электромагнитной волны, распространяющейся в направлении оси z (\vec{n}_0), электрон осциллирует в направлении x ($E_0=E_x$) со скоростью:

$$\mathcal{G}_x = \beta c = c\eta \cos(2\pi\nu t) \quad (2)$$

$\eta = eE_0/2\pi m\nu c$ – инвариант Лоренца. Во всех практических случаях рассеяния электромагнитного излучения считается, что $\eta \ll 1$, т.е. $\mathcal{G}_x \ll c$, а амплитуда колебаний $x_{\max} = \eta\lambda/2\pi \ll \lambda$. В этом приближении движением электрона в направлении z , определяемым вторым членом уравнения (1) можно пренебречь и считать излучение дипольным. Сечение рассеяния этого излучения для плоскополяризованной волны определяется формулой Томсона $\sigma_0 = 8/3\pi r_e^2$, здесь $r_e = e^2/mc^2$. Учет второго члена в уравнении (1) приводит к появлению «дрожания» и «дрейфа» электрона в направлении z , которое происходит со скоростью

$$\mathcal{G}_z = \frac{(\eta/2)^2}{1 + (\eta/2)^2} c \quad \text{только во время действия}$$

электромагнитной волны [10]¹. Итак, согласно классической теории электрон осциллирует во время прохождения электромагнитной волны, и излучает дипольную волну. Энергия этого излучения равна той энергии, которую теряет плоская волна. «Дрейф» и «дрожание» электрона в направлении \vec{n}_0 , так же, как и колебание в направлении x , прекращаются после прохождения падающего на электрон излучения. Свободный электрон остается неподвижным или продолжает двигаться равномерно с прежней скоростью после действия на него электромагнитного излучения. Обычно в учебниках физики этот результат решения уравнений электродинамики игнорируется. Дополнительно к вычислению сечения рассеяния предлагается определить ускорение электрона в направлении \vec{n}_0 под действием радиационного давления [12], поскольку на электрон, помещенный в поле плоской электромагнитной волны, в направлении \vec{n}_0 действует средняя сила пропорциональная сечению рассеяния:

$$f_p = \sigma_0 |E_0|^2 / 4\pi \quad (3)$$

На самом деле, действие этой силы на свободный электрон уравновешивается силой радиационной

реакции $f_L = \frac{2}{3} \frac{e^2}{mc^3} \dot{V}^2 = -f_p$, так, что:

$$\Delta f = f_p + f_L = 0 \quad (4)$$

¹ В неоклассической теории квантовый электрон Дирака также осциллирует («dragged») в направлении z только внутри классической электромагнитной волны [11], так что его эффективная масса становится равной $m(1+\eta^2)^{1/2}$, и при $\eta \leq 1$ электрон останавливается после прекращения действия поля.

Происхождение силы радиационной реакции не столь ясно, сколь ее существование [13]. Лоренц рассматривал электрон конечных размеров и считал эту силу силой самодействия одной части электрона на другую. Дирак, наоборот, не обсуждая происхождение этой силы, предлагал рассматривать не только запаздывающий, но и опережающий потенциал в решении уравнений Максвелла. Это позволило ему учесть действие сферических волн, распространяющихся от электрона («out» wave) и к нему («in» wave), и, соответственно, к появлению сил, действующих на электрон со стороны этих волн. Полуразность создаваемых «in-out» волнами сил, дает точное значение силы f_L (4). О своем решении Дирак писал: «there is good reason for believing them to be exact within the limits of the classical theory» [14]. Задача определения силы f_L и доказательства формулы равенства сил f_L и f_p решалась и другими авторами. Общий вывод: *в слабых полях ($\eta < 1$) плоская волна или, более точно, длинный импульс электромагнитного излучения, близкий к плоской волне, не может передать энергию электрону. После окончания действия поля электрон возвращается в прежнее состояние.* Этот результат классической электромагнитной теории подтверждается результатами современных экспериментов по исследованию влияния лазерного излучения на быстролетающие свободные электроны (см. раздел 5).

Таким образом, согласно классической электродинамике, давление света на свободный электрон вызывает только колебательное движение и незначительный дрейф а направлении \vec{n}_0 . Колебания электрона приводят к дипольному излучению. Энергия этого излучения равна энергии, теряемой первичной электромагнитной волной и пропорциональна сечению рассеяния σ_0 . *Электрон после прохождения волны возвращается в первоначальное состояние покоя или равномерного прямолинейного движения. Закон сохранения импульса при рассеянии электромагнитной волны электроном, у которого отсутствует внутренняя структура, сводится к закону сохранения энергии электромагнитного поля. Давление на электрон со стороны поля компенсируется силой радиационной реакции.* Естественным развитием представлений классической электродинамики о рассеянии электромагнитной волны свободным электроном после открытия Комптоном эффекта некогерентного рассеяния рентгеновского излучения являлось бы предположение о том, что с приближением значений длины волны и частоты излучения λ , ν к величинам $\Lambda_e = h/mc$ и $\nu_e = mc^2/h$ определяющим связанные с электроном квантовую длину и частоту, начинает проявляться его внутренняя структура, в

результате чего изменяется частота вторичного излучения. Изменение частоты рассеяния волны должно изменить томсоновское сечение рассеяния пропорционально величине $\varepsilon = \Delta\nu/\nu$, так что при рассеянии часть энергии излучения поля должна поглотиться электроном; в результате этого электрон приобретает импульс $p \sim (\sigma_0 \varepsilon)^{1/2}$ в направлении \vec{n}_0 .

Вопреки этой логике, позволяющей распространить представления классической электродинамики на область квантовых объектов без радикального пересмотра теории рассеяния, Комптоном была предложена теория с другой логикой, отвергающей детерминизм классической физики в поведении микрообъектов [15]. В теории, рассматривающей эффект Комптона, предполагается, что электромагнитное излучение состоит из коротких импульсов энергии $h\nu$, которые распространяются в направлении \vec{n}_0 и рассеиваются подобно частицам свободными электронами в направлении \vec{n}_φ . Электрон приобретает кинетическую энергию, которую теряет фотон, равную E_k . Рассеянный фотон получает энергию $h\nu' = h\nu - E_k$. Величина E_k определяется уравнением:

$$E_k = h\Delta\nu(\varphi) = h\nu \frac{\nu'}{\nu_e} (1 - \cos\varphi) \quad (5)$$

φ – угол рассеяния фотона. Частота и длина волны рассеянного фотона, также как и направление движения электронов определяются из законов сохранения энергии и импульса. Для длины волны и частоты рассеянных на угол φ фотонов имеем:

$$\lambda'(\varphi) = \lambda + 2\Lambda_e \sin^2 \frac{\varphi}{2}, \quad \nu'(\varphi) = \frac{c}{\lambda'} \quad (6)$$

Сечение рассеяния в теории Комптона играет роль вероятности рассеяния одного фотона одним электроном. Это означает, что предсказания квантовой теории Комптона носят статистический характер. Согласно этой теории, например, все тождественные свободные электроны после рассеяния ими излучения должны получить различные по величине и направлению импульсы p , при этом $p_{\min} = 0$, а величина p_{\max} вырастает до значения $(2mE_k)^{1/2}$, в σ_0 раз больше, чем при рассеянии волны. Согласно логике классической физики все электроны рассеивают излучение одинаково. Обратим внимание на то, что квантовая электродинамика, приняв гипотезу Комптона, постулирует, что электрон может поглощать электромагнитную энергию фиксированными порциями - квантами, хранить ее некоторое время, и преобразовывать частоту излучения, уменьшая или увеличивая энергию ранее поглощенного кванта. Это предположение представляется крайне сомнительным, при

последующем развитии теории рассеяния в квантовой электродинамике было постулировано наличие промежуточных состояний, содержащих виртуальные частицы – фотоны, электроны, позитроны [54]. По мнению Дирака, в квантовой электродинамике «abandon logical deduction and replace it by working rules ...very heavy price and no physicist should be content to pay it» [55]. Обычно считается, что решающим аргументом в пользу фотонной теории Комптона является правильно предсказанное положение центра спектральной линии рассеяния - значения $\lambda'(\varphi)$ (6). Этот аргумент, как указывалось выше, не является достаточно убедительным. Кроме того, аналогичные угловые зависимости спектра рассеяния наблюдаются также в эффекте Парселла-Смита, где рассматривается другой механизм рассеяния [16]. На самом деле, главным аргументом в пользу утверждения гипотезы Комптона послужило утверждение о существовании электронов «отдачи» с кинетической энергией, равной E_k (см. например, [17]); однако до сих пор никто не акцентировал внимания на том, что все электроны «отдачи» наблюдаются только в экспериментах на связанных в атомах электронах, тогда как основополагающим в теории Комптона является утверждение о их наличии при рассеянии на свободных электронах. На наш взгляд, проблема появления электронов «отдачи» в экспериментах по комптоновскому рассеянию рентгеновского излучения является проблемой электронной эмиссии атомами, и решается в рамках теории фотоэффекта [18-20] (см. раздел 4).

Необходимо заметить: «комптоновский» сдвиг частоты (5)-(6) не связан непосредственно с энергетическими уровнями в атоме, являясь функцией угла рассеяния, частоты первичного излучения и параметров электрона. Все это дает основания для поиска другой теории, объясняющей все особенности эффектов, возникающих при рассеянии рентгеновского излучения. Следуя рекомендации Лауэ, будем предполагать, что все особенности экспериментальных спектров рассеяния рентгеновского излучения связаны не с квантованием поля, а со структурой вещества. В этом случае имеется две возможности объяснить эффект Комптона. Первая и простейшая из них – воспользоваться идеей де Бройля о волновом представлении движущегося электрона². Вторая возможность - предположить, что как движущийся, так и свободный электрон

² Некоторые авторы делают попытки включить представление о волнах де Бройля в теорию Комптона [21]. Эти попытки нельзя признать успешными, поскольку электронные волны в этом случае появляются уже после взаимодействия электрона с фотоном и не могут изменить понимание механизма рассеяния.

описывается реальной волной электронной плотности [6, 19].

2.0 Рассеяние электромагнитной волны на точечном квантовом электроном. Квантовая механика, считающая электрон математической точечной частицей предполагает одновременно, что он обладает энергией покоя $E_e=mc^2$. С этой частицей, находящейся в состоянии покоя, связывают колебания с частотой $\nu_e=E_e/h$, которые синхронны во всем окружающем пространстве. Волновая функция де Бройля неподвижного свободного электрона представляется как $\exp(2\pi i\nu_e t)$. При движении такой частицы со скоростью $\mathcal{V}=\beta c$ в направлении r ее масса, энергия и частота колебаний возрастают как $\gamma=(1-\beta^2)^{-1/2}$. Из приведенных рассуждений следует, что при таком представлении, с точечной частицей, двигающейся в направлении r со скоростью \mathcal{V} , можно связать электронную волну, переносящую колебания с частотой $\nu_e'=\gamma\nu_e$ в том же направлении с фазовой скоростью $V=c/\beta$:

$$\phi = e^{2\pi i(\nu_e' t - \frac{p}{h} r)} = e^{2\pi i(\nu_e' t - kr)} = e^{2\pi i\nu_e' (t - \frac{r}{V})} \quad (7)$$

Здесь $p=\gamma m \mathcal{V}$ или $p=h/\Lambda_B$, Λ_B – длина волны де Бройля, $k=\Lambda_B^{-1}$. Эти волны описываются дифференциальным уравнением Клейна-Гордона:

$$\nabla^2 \Phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \Lambda_e^{-2} \Phi \quad (8)$$

Уравнение (8) является релятивистски-инвариантным. Ему удовлетворяют все возможные плоские электронные волны, в том числе и волна покоящегося электрона ($k=0$, $\nu_e=mc^2/h$). В такой записи электронная волна представляется волной, которая не переносит ни энергию, ни импульс и является волной вероятности (по определению де Бройля, «pilot wave»)³. Уравнения (7) и (8) связывают волновые функции ϕ с равномерным движением электрона. Предположим, что поперечным колебаниям электрона со скоростью $\mathcal{V}_x(t)$ (2) под действием электромагнитного излучения также можно сопоставить волну де Бройля, переносящую в пространстве колебания электрона с частотой ν_e . Рассмотрим следствие такого представления колебательного движения электрона под действием электромагнитного поля.

³ Исследование уравнения движения точечного электрона приводит к выводу о быстром колебании электрона (zitterbewegung) в свободном пространстве (Шредингер), и, как показано в работе [22] к тому, что его можно описывать как волну безмассовой (виртуальной) частицы, находящейся в постоянном состоянии «creation and annihilation», которые происходят за время ν_e^{-1} на расстоянии Λ_e и распространяются со скоростью света.

2.1 Волна де Бройля свободного электрона помещенного в электромагнитное поле.

Следуя логике де Бройля, позволившей ему получить выражение (7), предположим следующее рассуждение. При рассеянии электромагнитной плоской волны с частотой колебаний $\nu=c/\lambda$ электроном, находящимся в точке $r=0$ и характеризующимся волной де Бройля $\exp(2\pi i\nu_e t)$, возникают поперечные направлению распространения электромагнитной волны \vec{n}_0 вынужденные колебания со скоростью $\mathcal{G}_x(t)$, описываемые классическим уравнением (1), синхронизировано с собственными колебаниями с частотой ν_e во всем окружающем электрон пространстве. Найдем электронную волну, описывающую стационарное состояние свободного электрона, помещенного в электромагнитное поле. Рассмотрим состояние, характеризующееся мгновенной поперечной распространению поля скоростью $\mathcal{G}_x=\text{const}$. Пусть, в момент времени $t=0$ $\mathcal{G}_x=0$ в точке $r=0$, фазовая скорость распространения возбуждения - состояния с мгновенной скоростью \mathcal{G}_x , создаваемого электромагнитным полем в радиальном направлении \vec{n}_φ от точки $r=0$ в пространстве окружающем электрон, равна $V_F=c/\cos\varphi$, где φ - угол между \vec{n}_0 и \vec{n}_φ . Эта скорость значительно меньше фазовой скорости волн де Бройля, обусловленных движением электрона со скоростью \mathcal{G}_z во всем интервале углов⁴ φ . Амплитуда поперечных колебаний электрона в высокочастотном поле рентгеновского излучения $x_{\max}\ll\lambda\leq\Lambda_e$. В связи с этим волну электрона, помещенного в электромагнитное поле и излучающего дипольную волну нужно считать сферической волной «pilot wave» колебаний с частотой ν_e , т.е. функцию φ в (8) можно заменить на $r\varphi$. Учитывая только фазовую скорость распространения колебаний поля V_F получим функцию, описывающую искомые мгновенные со скоростью \mathcal{G}_x состояния свободного электрона, помещенного в электромагнитное поле:

$$\begin{aligned} r\Phi &= \exp(2\pi i\nu_e(t - \frac{\cos\varphi}{c}r)) \equiv \exp(2\pi i\nu_e t(1 - \cos\varphi)) \equiv \\ &\equiv \exp(2\pi i\frac{r}{\Lambda_e}(1 - \cos\varphi)) \end{aligned} \quad (9)$$

Электронная «pilot wave» волна де Бройля (7) «управляет» положением и фазой электрона при

его рассеянии на препятствиях, например, на дифракционной решетке. Волна (9) определяет запаздывание отклика электронной волны свободного электрона на действие электромагнитного поля в радиальных направлениях \vec{n}_φ под углом φ к направлению распространения поля. Поэтому можно считать, что волна де Бройля (9) «управляет» фазой электронной волны свободного неподвижного электрона, помещенного в электромагнитное поле и, следовательно, «управляет» частотой электромагнитных плоских волн, составляющих дипольную рассеянную электроном волну, распространяющуюся в направлении \vec{n}_φ . Из (9) следует, что состояния электрона с частотой колебаний ν , возбуждаемых полем, распространяются вдоль радиуса r со скоростью V_F , тогда как вторичные вынужденные колебания ν' распространяются во всех радиальных направлениях со скоростью c . Время запаздывания Δt между достижением этими колебаниями полей в точках разделенных расстоянием Λ_e определяется частотой собственных колебаний ν_e (см. сноску 3). Поэтому условием синхронизации колебаний плоской электромагнитной волны с частотой ν , собственных колебаний электронной волны ν_e с частотами колебаний волн дипольного вторичного излучения $\nu'(\varphi)$ являются условия, определяемые:

$$\left(\frac{1}{\nu'} - \frac{1}{\nu}\right) = \frac{1}{\nu_e}(1 \pm \cos\varphi)$$

или

$$\lambda' - \lambda = \Delta\lambda = \Lambda_e(1 \pm \cos(\varphi)) \quad (10)$$

Знак (-) относится к электромагнитным волнам, распространяющимся от электрона, («out» wave), соответствующим реальным волнам комптоновского рассеяния. Знак (+) относится к волнам, бегущим по направлению к электрону («in» wave), отвечающие согласно теории Дирака опережающему потенциалу в решении волнового уравнения. Итак, заменив неподвижный классический точечный электрон квантовыми колебаниями ν_e во всем окружающем его пространстве, удаётся, сохранив электромагнитную волну (не заменяя ее фотонами), получить объяснение, как эффекта Комптона, так и причину появления силы радиационного торможения. Обратим внимание на то, что, согласно Дираку, для нахождения значения силы радиационной реакции нужно при решении уравнений учитывать не только запаздывающий, но и опережающий потенциалы, которые в дальнем поле вызывают встречные «in-out» сферические электромагнитные волны. Мы показали, что учет волновой природы электрона приводит к появлению угловой зависимости частоты этих волн. Легко видеть,

⁴ Мы рассматриваем дипольные колебания в слабом электромагнитном поле ($\eta\ll 1$). Условие слабого поля выполняется во всех экспериментах по рассеянию рентгеновского излучения. «Дрожанием» и «дрейфом» в направлении n_0 можно пренебречь также как и в классической электродинамике.

что в нашей интерпретации эффект Комптона имеет близкую аналогию с эффектами Смита-Парселла и Черенкова. Мы получили результат, согласующийся как с выводами классической электродинамики, так и с волновой механикой де Бройля без привлечения понятия фотона. Согласно классической электродинамике, радиационное давление на свободный электрон может возникнуть только в случае, если есть запаздывание между действием электромагнитной волны и реакцией электрона [24]. Запаздывание по фазе между действиями запаздывающей и опережающей волн Дирака даваемое формулами (9) и (10), приводит к изменению частоты рассеянного излучения и ведет к появлению радиационной силы $\Delta f(\varphi)$, пропорциональный $\Delta v(\varphi)/v$, действующей в направлениях \vec{n}_φ на свободный электрон⁵.

Сравнивая (3) - (5) можно предположить⁶, что:

$$\Delta f = f_p - f_L = \sigma_0 \frac{E^2 v}{4\pi v_e} \quad (11)$$

Здесь $0 \leq |\varphi| \leq \pi/2$. Сравнение (5) и (11) позволяет увидеть разницу между предсказаниями теории Комптона, рассматривающей рассеяние фотонов классическими электронами, и теории, основанной на представлении о волновых свойствах покоящегося электрона, на котором рассеивается электромагнитная волна. В нашей теории свободный электрон испытывает давление излучением, пропорциональное томсоновскому сечению рассеяния, отношению v/v_e , и квадрату напряженности поля $E = E_0 \cos(2\pi i v t)$. Сила $\Delta f(\varphi)$ вызывает электронную волну де Бройля, распространяющуюся от точки $r=0$ в направлении \vec{n}_0 импульсом $p = m \vartheta_z = (2m\Delta W)^{1/2}$, где ΔW – поглощенная электроном энергия (о физическом смысле этой волны подробнее в разделе 4). Еще раз обратим внимание на то, что в теории Комптона каждый электрон взаимодействует с индивидуальным фотоном, а томсоновское сечение рассеяния играет роль вероятности события. Этот вывод не подтверждается ни одним экспериментом, но обычно мы имеем дело с множеством событий, и поэтому предполагается, что разница в понимании сечения рассеяния не сказывается на результатах эксперимента. Тем не менее, разница между этими представлениями о смысле сечения рассеяния в теориях, объясняющих эффект Комптона, имеет принципиальное значение при

рассмотрении рассеяния излучения на связанных в атомах и на свободных релятивистских электронах.

2.2 Теория комptonовского рассеяния на связанных электронах. Ширина и форма линии. Одним из наиболее интересных явлений, которые не объясняются в теории Комптона без дополнительных гипотез, является эффект очень незначительного смещения центра линии спектра при рассеянии на электронах, энергия связи которых достаточно велика. Согласно импульсному приближению⁷ существующей теории, центр комptonовской линии должен смещаться на величину $\Delta\lambda'/\lambda \approx -\lambda E_i/hc$, где E_i энергия связи, λ – длина волны излучения [25]. Если $E_i/h = v_i$, то:

$$\Delta\lambda/\lambda = \Delta v/v = v_i/v \quad (12)$$

Для К-электронов даже легких элементов при $\lambda \leq 1 \text{ \AA}$ это отношение сравнимо с величиной v/v_e , определяющей комptonовский сдвиг. Многочисленные экспериментальные исследования, проведенные различными авторами, показывают, что изменение положения центра спектральной линии незначительно и составляет не более нескольких процентов [28]. Такое различие между экспериментальными результатами и теорией привело к различным дополнительным предположениям по «улучшению» теории. Рассмотрим теперь эффект смещения центра линии спектра в рассматриваемом варианте нашей теории эффекта Комптона. В атомах легких элементов электрон, обладающий энергией связи E_i и потенциальной энергией $V(r)$, характеризуется «импульсом» орбитального движения $p_i = 2m(E_i - V)$, с соответствующей релятивистской частотой $v_e = (mc + p_i)c/h$. Ниже при проведении численных оценок значений p_i приближенно считаем, что в атомах легких элементов $p_i \approx (2mE_i)^{1/2}$. Согласно (9), (10), комptonовская длина волны Λ_e' , определяющая величину комptonовского сдвига на связанном электроне, определится выражением:

$$\Lambda_e' \cong \Lambda_e(1 - \alpha_i) \quad (13)$$

Где $\alpha_i = p_i/mc$. Для электронов атомов легких элементов $\Delta\Lambda_e = \alpha_i \Lambda_e < 10^{-1} \Lambda_e$ (для К-электронов углерода $\alpha_i \approx 3.3 \cdot 10^{-2}$). Сравнивая (12) и (13) отметим, что предлагаемая нами теория в отличие от «импульсного приближения» правильно описывает экспериментальные

⁵ Под действием электромагнитного излучения электрон, двигающийся с некоторой скоростью вблизи металлической поверхности с нанесенными на нее рельефом, ускоряется. Это обратный эффект, Парселла-Смита [23].

⁶ Такое значение для Δf получается в неоклассической теории (см. раздел 4).

⁷ Теория, учитывающая влияние энергии связи электрона в атоме на спектр некогерентного рассеяния была сформулирована в тридцатые годы прошлого века [26], известна как «импульсное приближение». Она содержит дополнительные к первоначальной теории Комптона «ad hoc» гипотезы и ведет к парадоксу «двойного рассеяния» [18, 27].

результаты без дополнительных «ad hoc» гипотез.

Итак, смещение центра комптоновской линии при рассеянии на связанном электроде определяется не «вырыванием» электрона из атома, а эффектом, аналогичным эффекту Лэмба – изменением длины волны рассеянного излучения на величину, пропорциональную $\alpha_e \Lambda_e$. Рассуждая аналогичным образом можно утверждать, что, хотя положение электрона в атоме в борновской интерпретации функции Шредингера описывается некоторым распределением «импульсов» $\chi(p)$, ширина комптоновской линии определяется не предполагаемым общепринятой теорией эффекта Комптона доплеровским смещением при рассеянии волны на движущемся в атоме электроде⁸, а величинами:

$$\Delta\lambda' = 2\Lambda_e \frac{p}{mc} \sin \frac{\varphi}{2} \quad (14)$$

Здесь p проекция «импульса» на вектор рассеяния. Величина $\Delta\lambda'$ вычисляемая по формуле (14) в Λ_e/λ раз меньше, чем предсказываемое импульсным приближением [28], и также не может объяснить наблюдаемую в эксперименте большую ширину спектральной линии, которая наблюдается при рассеянии жесткого излучения на атомах легких элементов, когда электрон является практически свободным. Уточнение (точнее, подгонка) «импульсного приближения» теории некогерентного рассеяния с целью объяснения экспериментальных результатов, предпринимались на протяжении десятилетий путем принятия различных гипотез. В развиваемой нами теории согласие с экспериментальными результатами достигается следующим образом. Исследуя спектр рассеяния синхротронного излучения $\lambda=0.88\text{\AA}$ на монокристалле алмаза, мы установили, что этот спектр в любом сечении $\varphi=\text{const.}$ хорошо аппроксимируется квадратом спектра Фурье от функции $\text{sinc}^2(\pi R)$, где $R=r/\Lambda_e$ [19]. Это можно объяснить в рамках рассматриваемой теории, вспомнив, что мы нашли угловую зависимость $v'(\varphi)$ в приближении «дальнего поля», при $r \gg h/mc$. При рассеянии электромагнитной волны с длиной λ близкой к Λ_e следует обратиться в идее Шредингера о том, что рассеяние происходит не на волне виртуальных осцилляторов, а на реальном пространственном распределении электронной плотности, описываемой этой волной [9]. Сделаем в (9) замену переменных $r=tc$ и учтем, что реальное распределение пространственного расположения

осцилляторов должно описываться положительной функцией. Кроме того, поскольку напряженность поля электрона убывает от точки $r=0$ как $1/r^2$, следует записать функцию реального распределения электронной плотности свободного электрона в виде $\Phi_R=(1+\cos 2\pi R)/r^2$, где $R=rv_e$. В формуле (9), описывающей состояние электрона в поле электромагнитной волны следует заменить R на $R(1-\cos\varphi)$, (см. (18)). При рассеянии на такой структуре спектральный состав излучения в каждом из направлений φ изменится и будет точно соответствовать экспериментально наблюдаемому (подробнее в следующем разделе). Таким образом, заметное уширение линии некогерентного рассеяния при эффекте Доплера может происходить только за счет реальных колебаний рассеивающих электронов подобно тому, как это происходит при когерентном рассеянии.

Подводя итог сказанному выше можно утверждать, что изложенная теория некогерентного рассеяния рентгеновского излучения полностью описывает экспериментальные результаты без принятых в теории Комптона гипотез о квантах света. Рассмотренная нами теория эффекта Комптона не противоречит классической электродинамике и удовлетворяет копенгагенской интерпретации квантовой механики за исключением признания дуализма в понятии электромагнитного излучения и понимания смысла волновой функции свободного электрона при определении ширины спектральной линии. Тем не менее, на ее основе нельзя построить единую теорию как некогерентного, так и когерентного рассеяния рентгеновского излучения. В самом деле, некогерентное рассеяние на электронах наблюдается на углы φ , при которых вектор рассеяния $2\sin(\varphi/2)/\lambda$ больше $p/h=\Lambda_B^{-1}$, где Λ_B длина волны де Бройля связанного состояния электрона. Практически это означает, что при рассеянии на любом веществе излучения с длиной волны большей, чем 10\AA , некогерентного рассеяния не происходит. Физический смысл такого условия: некогерентное рассеяние осуществляется, когда

$$2\Lambda_B \sin(\varphi/2) > \lambda \quad (15)$$

И наоборот, рассеяние электромагнитной волны становится когерентным при углах φ , для которых условие (15) имеет обратный знак. Знак равенства означает выполнение условия брэгговской дифракции на волне де Бройля⁹.

⁸ Обратим внимание на то, что предположение о возможности прямого наблюдения «орбитального» движения, всего спектра «импульсов» связанного в атоме электрона, является еще одной гипотезой, не подтверждаемой в других экспериментах.

⁹ В существующей теории условию (15) соответствует условие, при котором энергия, потерянная первичным фотоном при рассеянии на электроде $E=h\Delta v(\varphi)$, больше энергии связи. Физический смысл такого условия в принятой сегодня теории не понятен, поскольку в импульсном приближении, как уже указывалось выше, наличие энергии связи электрона

Более того, всегда, наряду с некогерентным рассеянием при любых углах φ , даже когда условие (15) выполнено, на связанных электронах наблюдается когерентное (рэлеевское) рассеяние без изменения длины волны первичного излучения. Оно связано с наличием в атомах распределения электронной плотности, описываемого квадратом функции Шредингера $|\psi|^2$. Рассеяние на кристаллах всегда становится полностью когерентным при углах $\varphi=2\theta_B$ (θ_B – брэгговский угол в кристалле). Представляется, что единая теория рассеяния может быть создана только при сделанной выше замене в волне де Бройля временных колебаний свободного неподвижного электрона с частотой $\nu_e=mc^2/h$ на пространственные колебания с частотой $\Lambda_e^{-1}=mc/h$. Такая теория реализует идею де Бройля и Шредингера о том, что электронные волны являются волнами материи, а не волнами вероятности и названа неоклассической [19].

3. Рассеяние электромагнитной волны на реальных электронных волнах в неоклассической теории. Рассеяние электромагнитного излучения на свободном неподвижном электроне всегда является частично когерентным в том смысле, что длина волны центра спектральной линии рассеянного излучения зависит от угла рассеяния, при этом длина когерентности определяется шириной спектра и равна приблизительно $2\Lambda_e \sin^2 \varphi$ [19]. В свободном неподвижном электроне после рассеяния им электромагнитной волны возникает волна де Бройля, определяемая силой Δf (11). Это рассеяние является фундаментальным квантовым явлением, обусловленным волновыми свойствами электрона, на которые впервые обратил внимание де Бройль. Вопрос о реальности волн де Бройля, то есть вопрос о том, переносят ли эти волны энергию и импульс или они являются «pilot function» - функциями, описывающими вероятность поведения электрона, обсуждался неоднократно, но после принятия копенгагенской интерпретации квантовой механики, концепция «pilot wave» за волнами де Бройля закрепились, и, как казалось до сих пор, окончательно.

3.1 Экспериментальные предпосылки ревизии смысла копенгагенской интерпретации квантовой механики и волновой функции Шредингера в атоме. Выше уже указывалось, что стройность и последовательность официальной квантовой механики нарушается при анализе рассеяния электромагнитного излучения на связанных электронах, когда некогерентное комптоновское рассеяние сопровождается когерентным или полностью

заменяется на когерентное, то есть рассеянное на определенный угол φ излучение становится монохроматическим с длиной волны, соответствующей первичной ($\lambda'=\lambda$). Наиболее отчетливо этот эффект проявляется при брэгговском рассеянии на больших кристаллах, когда почти 100 % падающего на него излучения отражается под углом Брэгга ($\varphi=2\theta_B$). Теория дифракции рентгеновского излучения была сформулирована в современном виде фон Лауэ в 1931 году [29]. Он использовал теорию Эвальда, основанную на представлении о когерентном рассеянии электромагнитных волн на трехмерной решетке осцилляторов. Положение этих осцилляторов он определил, основываясь на теории Шредингера, считавшего, что найденная им волновая функция описывает реальную электронную волну, а модуль ее квадрата $|\psi|^2$ - распределение электронного заряда в пространстве, окружающем атом. В каждом элементе объема dV такого распределения отношение элемента заряда de к элементу массы dm сохраняется постоянным и равно e/m , где e и m_e заряд и масса электрона. Такая интерпретация уравнений Шредингера дает возможность использовать уравнения классической электродинамики для описания когерентного взаимодействия излучения с веществом, распределение заряда в котором определяется уравнением квантовой механики. Теория, основанная на интерпретации Шредингера волновой функции электрона и отрицании существования квантов электромагнитного поля, названа полуклассической, позже неоклассической. Неоклассическая теория оказалась интуитивно привлекательной и была поддержана Ферми, использовалась Лэмбом, Скалли, Джеймсом для расчета спонтанной эмиссии, фотоэффекта и других явлений [30-33]¹⁰. Таким образом, явление брэгговской дифракции хорошо описывается в рамках неоклассической теории, предполагающей, что электронная волна в атоме является реальной, а функция $|\psi|^2$ описывает распределение плотности заряда электронов в атоме. Эта теория уже почти 100 лет успешно и широко используется при расчетах электронной структуры атомов и молекул по данным рентгеноструктурного анализа, в рентгенографии для определения реальной структуры кристаллов и в рентгеновской микроскопии. При этом сторонники принятой сегодня интерпретации квантовой механики с большим упорством не обращают внимание на очевидное противоречие между борновской интерпретацией функции Шредингера, и экспериментами по когерентному

прямо на положение центра линии не влияет (см. также сноску 11).

¹⁰ В работе [34] была сделана попытка применения полуклассической теории для описания эффекта Комптона.

брэгговскому рассеянию, предлагая сомневающимся в полноте квантовой механики предложить или описать какой-либо другой эксперимент, ей противоречащий.

Более того: интенсивность линии когерентного (рэлеевского) рассеяния слабыми электронами в атомах (при выполнении условия (15)), вычисляется в предположении о том, что одновременно и независимо происходит как некогерентное рассеяние на точечных электронах, положение которых описывается функцией вероятности $|\psi|^2$ и, соответственно, функцией распределения импульсов $|\chi(p)|^2$, так и когерентное рассеяние, соответствующее реальному распределению электронной плотности $|\psi|^2$. В таком предположении была сформулирована теория рассеяния рентгеновского излучения [25], согласно которой интенсивность рассеяния при углах $\varphi \neq 2\theta_B$ приближенно определяется выражением:

$$R = R_{ch} + R_{in} = \frac{I_{ch} + I_{in}}{I_{cl}} \approx \left| \sum_{i=1}^Z f_i \right|^2 + Z - \sum_{i=1}^Z |f_i|^2 \quad (16)$$

Здесь I_{ch} , I_{in} , I_{cl} – интенсивность рэлеевского, комптоновского и томсоновского (одним электроном) рассеяния. $\sum_{i=1}^Z f_i$ – атомный фактор

рассеяния. Величины f_i являются преобразованием Фурье, отражающим рассеяние плоской волны с волновым вектором \vec{k}_0 в направлении \vec{k}_φ (под углом φ ($\varphi=2\theta$) к падающей волне на распределении электронной плотности электрона в атоме $|\psi|^2$)

$$(\vec{k}_0 - \vec{k}_\varphi) = \vec{H}, \quad |H| = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}, \quad f_i = f_i(H) = F(|\psi|^2).$$

При больших значениях $|H|$, $f_i(H)$ стремится к нулю. Зависимость величин $f_i(H)$ от φ определяется боровским радиусом электрона, так что можно ожидать, что при рассеянии излучения с $\lambda \leq 1 \text{ \AA}$ на атомах легких элементов вклад рэлеевского рассеяния в суммарную интенсивность сопоставим с комптоновским даже при выполнении условия (15). Выражение (16) многократно уточнялось; в результате были составлены таблицы интегральных интенсивностей когерентного и некогерентного рассеяния для широкого спектра материалов и длин волн излучения [35]. Считается, что приведенные в таблицах данные по когерентному рассеянию проверены экспериментально. Это совсем не так.

Измерения величины R_{ch} обычно проводились в условиях брэгговской дифракции, когда $R_{in}=0$.

Это дает основание полагать, что в интервале углов рассеяния φ при которых $f(H) \geq 0.5$, но условие (15) выполнено, реальное значение интенсивности рэлеевского рассеяния

должно существенно отличаться от указанного в таблицах. На рис.1 приведен спектр рассеяния синхротронного излучения ($E=14 \text{ keV}$, $\lambda=0.88 \text{ \AA}$) на углероде в интервале углов φ от 10° до 160° .

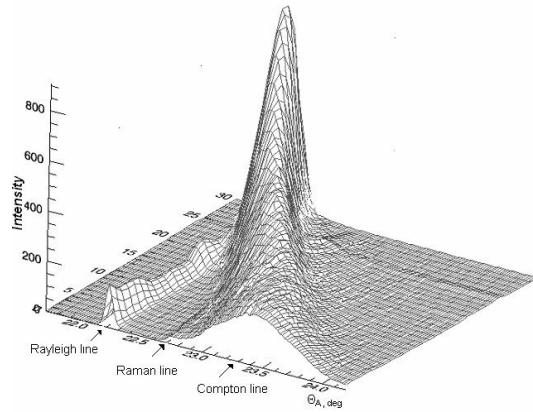


Рис. 1 Спектр рассеяния на монокристалле углерода (алмаз, Bessy-2, С.Н.Якунин, 2010 г.)

Регистрировались спектры рассеяния с интервалом 5° (тридцатому номеру соответствует угол в 10°). По оси θ_A отложен угол спектрометра-анализатора рассеянного образцом излучения. Видно, что на всех углах $\varphi \geq 30^\circ$ интегральная интенсивность некогерентного спектра существенно больше интенсивности рэлеевской линии. Отметим также, что вопреки тому, что величина $|\sum f_i|^2$ должна монотонно уменьшаться с ростом φ , интенсивность рэлеевской линии существенно не меняется и даже несколько возрастает при углах $\varphi \geq 120^\circ$.

На рис. 2 приведены экспериментальная и табличная зависимости отношений R_{ch}/R_{in} в интервале значений $\sin \theta / \lambda$ ($2\theta = \varphi$) от 0.4 до 1.1 полученные при рассеянии излучения $\lambda=0.88 \text{ \AA}$ на монокристаллах С и Si и вычисленные из данных, приведенных в [35]. Значительное расхождение экспериментальных и табличных данных в соотношении сечений когерентного и некогерентного рассеяния указывает на справедливость высказанного выше утверждения: несмотря на то, что неоклассическая теория, принявшая интерпретацию Шредингера смысла волновой функции $|\psi|^2$ правильно описывает брэгговское рассеяние рентгеновского излучения, а с помощью «копенгагенской интерпретации» смысла электронной волны де Бройля как «pilot function» можно объяснить особенности комптоновского рассеяния на свободном электроне, понимание рассеяния на связанных электронах при $\varphi \neq 2\theta_B$, отсутствует.

И в самом деле, формула (16) выводилась в предположении эклектического совмещения двух механизмов рассеяния, наблюдаемых одновременно. Парадоксальность такого

процесса с точки зрения классической физики очевидна, но допускается в квантовой механике

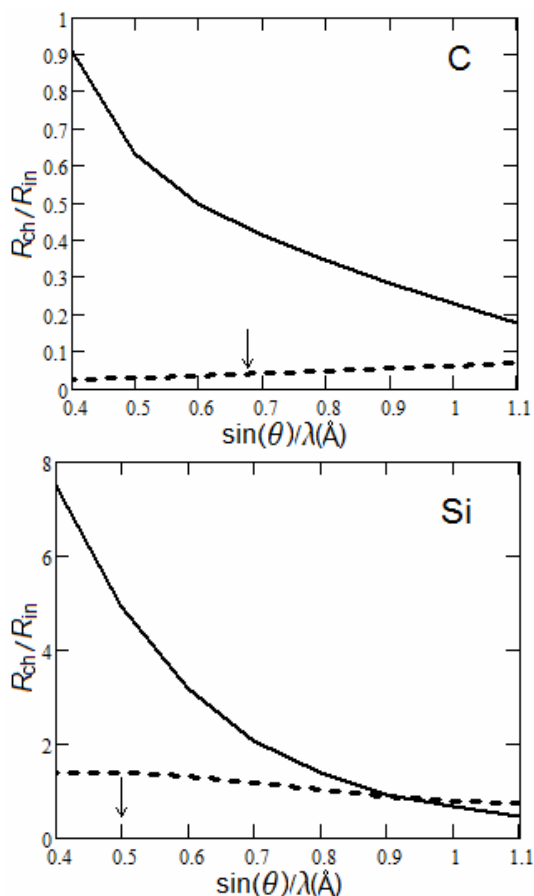


Рис. 2 Отношение интегральных интенсивностей когерентного к некогерентному рассеянию для углерода и кремния. Сплошная линия – табличные данные, пунктир – эксперимент (см. текст). Стрелкой отмечено значение параметра $\sin(\theta)/\lambda$, соответствующее условию (15) для K- и L- электронов (C и Si соответственно).

Согласно теории Комптона, электрон при взаимодействии с фотоном вылетает из атома сохраняя свой импульс (напомним, что энергией связи при этом фактически пренебрегают¹¹).

¹¹ «The interpretation of the Compton lineshape, usually referred to as the Compton profile, is wittingly or unwittingly based upon an impulse approximation. Du Mond and Jauncey pretended that they were seeing scattering from free but moving electrons. If their assumption is to be appropriate to electrons bound in atoms, molecules etc., the collision between photon and electron must be impulsive. The other electrons are mere spectators when the interaction are extremely brief; they cannot relax to take account of the hole left by recoiling electron until it completely escaped from the system. In other words, the potential seen by the target electron is the same immediately before and immediately after the interaction: the potential energy term will therefore cancel

Этот процесс занимает очень короткий промежуток времени $\Delta t \leq v^{-1} \approx 10^{-19} \text{с}$ [28]. В течение этого времени электрон излучает вторичный фотон, который становится частью спектра некогерентного рассеяния. Предполагается, что при такой практически мгновенной потере электрона атом сохраняет как свое состояние, так и способность рассеивать по механизму когерентного (рэлеевского) рассеяния. Развивая идею парадокса «кота Шредингера» можно назвать предлагаемый механизм формирования рэлеевского рассеяния парадоксом «улыбки без кота Л. Кэрролла»: «кот» исчез, но его «состояние» сохраняется и доступно наблюдению. Единственным выходом из такой ситуации является, на наш взгляд, возвращение к идее Шредингера описывать рассеяние рентгеновского излучения на свободном электроне как рассеяние на реальной волне де Бройля [4] и дать новую интерпретацию волновой функции электронов в атоме.

3.2 Рассеяние электромагнитной волны на свободном электроне. До настоящего времени большинство попыток объяснения эффекта Комптона рассеянием электромагнитных волн на реальном электроне сводились к предположению о том, что электрон (или связанная с ним волна де Бройля в модели Шредингера [4]) должен двигаться с такой скоростью, чтобы рассеянное излучение испытывало необходимое для объяснения эффекта Комптона доплеровское смещение частоты излучения. Рассмотрим с точки зрения решения задачи, поставленной в заголовке раздела, схему объяснения эффекта Комптона, предложенную Доддом [5]. На электроне, летящем в направлении \vec{n}_0 со

скоростью β , рассеивается плоская электромагнитная волна, распространяющаяся в том же направлении. В системе координат электрона (в состоянии взаимодействия¹²) формируется дипольная волна, угловое распределение частот которой в лабораторной системе в результате релятивистских преобразований описывается формулами Комптона (6) в том случае, когда скорость электрона определяется выражением:

$$\beta = c\beta = \frac{ch\nu}{h\nu + mc^2} = \frac{c\varepsilon}{1 + \varepsilon}, \quad \varepsilon = \frac{\nu}{\nu_e} = \frac{\beta}{1 - \beta} \quad (17)$$

in the conservation of energy equation. In this sense the collision occurs between a photon and an individual electron which appears to be moving but unbound» [28].

¹² Термин «interaction state» был использован Доддом по аналогии с тем, как определяются состояния электронов в теории атома Шредингера. Переход электрона из одного состояния в другое в квантовой механике связан, как правило, с изменением его импульса.

Модель Додда, также как и Шредингера, не объясняла причины, по которой электрон оказывается в «interaction state», т.е. приобретает скорость \mathcal{V} , поэтому эти модели не рассматривались как альтернативные выдвинутому Комптоном и Дебаем. Однако следует отметить, что обоснование причины, по которой электрон движется до или после взаимодействия, нет не только в модели Додда, но и Комптона. И в первой, и во второй моделях постулировано движение рассеивающего электрона как необходимый процесс, позволяющий объяснить угловое положение центра линии некогерентного рассеяния. Различие этих моделей заключается только в том, что, согласно Комптону, неподвижный классический электрон получает импульс $h\nu/c$ и после этого мгновенно приходит в состояние движения с конечной скоростью и испускает новый фотон; согласно модели Додда электрон при рассеянии уже находится в состоянии, которое создается передачей электрону импульса $h\nu/c$ и определяется скоростью \mathcal{V} , см. (11). Такой же смысл имеет и модель Шредингера. С точки зрения физического смысла модели Додда и Шредингера предпочтительнее модели Комптона¹³. Обратим внимание на то, что преобразование частоты при рассеянии излучения на свободном электроне в эффекте Комптона является не релятивистским преобразованием Лоренца, а преобразованием Галилея рассеяния при движении частицы со скоростью se . Это преобразование тождественно преобразованию при рассеянии электромагнитной волны с длиной λ на неподвижной электронной волне с периодом Λ_e [6]. Учитывая сказанное выше замечание относительно формы линии некогерентного рассеяния (см. раздел 2.2), следует считать экспериментально доказанным¹⁴, что эффект рассеяния рентгеновского излучения на свободном электроне свидетельствует о том, что электрон представляет собой стоячую волну электронной плотности, образованную двумя встречными сферическими электронными волнами «in» и «out» с частотами $mc^2/2h$, сходящимися в точке $r=0$. Электронная стоячая волна в дальней зоне представлена реальной волной пространственных колебаний электронного заряда - функцией $(1+\cos(2\pi r/R))$, где $R=r/\Lambda_e$. Реальная волна электронной

плотности свободного электрона при таком понимании описывается функцией:

$$\Phi_e(r) = \left(\frac{\sin \pi R}{\pi R}\right)^2 \quad (18)$$

Все рассуждения относительно особенностей некогерентного рассеяния на свободном и связанном электроне, проведенные в предыдущем разделе, где волна де Бройля представлялась временным колебанием, в основном сохраняются. Следует лишь отметить, что при реалистическом понимании электронной волны свободного электрона выясняется физический смысл давления, определяемый формулой (11). Сила Δf вызывает появление импульса, распространяющегося по волновой структуре свободного электрона¹⁵. Это следует из принципа подобия при сравнении рассматриваемой схемы рассеяния с моделями Додда и Шредингера.

4. Закон сохранения энергии и импульса. Волна де Бройля свободного электрона в эффекте Комптона. Свободный неподвижный электрон, на который действует сила Δf (11), начинает двигаться в направлении \vec{n}_0 . Это движение обусловлено фазовым сдвигом между сферическими электронными «in»-«out» волнами, интерференция между которыми приводит к образованию волны электронной плотности, перемещающейся в направлении \vec{n}_0 . В дальней зоне при $r \gg \Lambda_e$ длину волны де Бройля электрона, рассеивающего электромагнитное излучение легко оценить следующим образом. Пусть источник, находящийся на расстоянии R от электрона излучил энергию, соответствующую N фотонам Планка $W_0 = N h \nu$. В этом случае из (11) следует, что энергия, поглощенная электроном за счет наличия у него волновой структуры будет равна $\Delta W \cong N h \nu \sigma_e \varepsilon / 4\pi R^2$, где $\varepsilon = 2\nu/\sigma_e$. Эта энергия соответствует импульсу электрона $p = (2m\Delta W)^{1/2}$. Длина волны де Бройля $\Lambda_B = h/p$ и величина $\beta_0 = \mathcal{V}/c$ определяются следующим образом:

$$\Lambda_B = \left(\frac{4}{3} N\right)^{-\frac{1}{2}} \frac{\lambda}{r_e} R, \quad \beta_0 = \left(\frac{4}{3} N\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\Lambda_e r_e}{\lambda R} \quad (19)$$

В неоклассической теории из законов сохранения энергии и импульса следует, что каждый свободный электрон, помещенный в электромагнитное поле, переизлучает дипольную

¹³ В квантовой электродинамике предлагается учитывать оба состояния как взаимодействующие. На наш взгляд эти схемы исключают друг друга.

¹⁴ Такой вывод может сделать любой физик, знакомый с основами Фурье преобразований используемых в оптике и радиофизике для определения формы и структуры объектов по спектрам рассеянного электромагнитного излучения.

¹⁵ Обратим внимание на то, что приближенно величина силы, даваемая выражением (11) может быть получена и в классической электродинамике, если воспользоваться представлением Лоренца о «самодействии» электрона, имеющего конечный радиус r . Для этого в (11) следует заменить отношение ν/ν_e на λ/r . Величина r была экспериментально определена Флоренс, Ишида, и др. и оценена Комптоном в 1919 году как равная приблизительно 10^{-10} см. [36], т.е. $r \approx h/mc$.

волну, энергия которой пропорциональна $\sigma_0(1-\epsilon)$. Небольшая доля энергии первичной волны, пропорциональная $\sigma_0\epsilon$ поглощается электроном и вызывает его равноускоренное движение в направлении \vec{n}_0 . Из (19) видно, что скорость движения электрона в направлении \vec{n}_0 после прохождения электромагнитной волны незначительна при $\lambda \gg \Lambda_e$. Ситуация изменяется в том случае, когда рассеивающий электрон связан с атомом. Наличие у электрона внутренней структуры с частотой собственных колебаний ν_e должна учитываться в уравнениях движения связанного электрона. Уравнение движения связанного электрона под влиянием электромагнитной волны

$$E(t) = -\frac{1}{c} \frac{d\vec{A}}{dt}$$

определяется частотой собственных колебаний электронов в атоме $E_i/h=\nu_i$

$$V(t) = \frac{e}{mc} \frac{A(t)}{\omega^2 - \omega_i^2 - i\omega\gamma} \quad (20)$$

Здесь $\gamma = \frac{2}{3} \frac{e^2}{m^2} (2\pi\nu_i)^2$ коэффициент затухания.

Естественно предположить, что учет внутренней периодической структуры электрона, которая приводит к угловому смещению частоты рассеиваемого им излучения, приведет к замене в уравнении движения частоты ν на частоту $\nu - \Delta\nu(\varphi)$ и к дополнительному затуханию, обусловленному силой Δf , т.е. также частотой $\Delta\nu(\varphi)$. Известно, что как поглощение энергии излучения атомами вещества, так и ее испускание в виде электромагнитной энергии или кинетической энергии фотоэлектронов происходит квантовым образом. При отсутствии комптоновского рассеяния, поглощение кванта излучения $h\nu$ сопровождается фотоэффектом, описываемым уравнением Эйнштейна, то есть появлением фотоэлектронов с кинетической энергией $E_k = h\nu - E_i$, а также рамановским излучением¹⁶ с частотой $\nu_{j0} = (\nu - \nu_j)$. Наличие эффекта Комптона (при выполнении условия (15)) согласно логике наших рассуждений должно сопровождаться появлением фотоэлектронов с кинетической энергией

$$E_k' = h\nu - E_i - h\Delta\nu = E_k - h\Delta\nu(\varphi) \quad (21)$$

Экспериментально электроны с энергией E_k' наблюдались в работе [38]. Аналогично, спектр рамановского излучения должен содержать частоты $\Delta\nu(\varphi)$: $\nu_j = \nu - \nu_j - \Delta\nu(\varphi) = \nu_{j0} - \Delta\nu(\varphi)$, или

$$\nu_{j0} \leq \nu_j \leq \nu_{j0} - \Delta\nu_{\max} \quad (22)$$

Электроны с энергией E_k' должны излучать электромагнитные волны в диапазоне частот $\Delta\nu(\varphi)$, а J-излучение с частотами $(\nu_j - \nu_{j0})$ должно приводить к появлению низкоэнергетических фотоэлектронов, называемых сегодня комптоновскими электронами «отдачи», с энергией $E_k = h\Delta\nu(\varphi)$.

Выясним теперь причину возникновения когерентного рассеяния. Для этого следует понять, как реальная структура свободного электрона (18) деформируется в атоме, и каков действительный смысл модуля квадрата волновой функции Шредингера.

5. Физический смысл уравнений Шредингера и когерентного рассеяния рентгеновского излучения на связанных электронах. Рассмотрим задачу о том, как изменяется структура свободного электрона (18), находящегося в стационарном состоянии в атоме. Будем считать, что «размер» атома или «стационарной орбиты» электрона в атоме $a \gg \Lambda_e$. В этом случае можно воспользоваться приближением дальнего поля и считать, что функция (18) является чисто периодической сферической функцией, $\Phi_e = \exp(2\pi i r/\Lambda_e)$. Помещение электрона в центральное поле атома приводит к деформации его периодической структуры. В рассматриваемом приближении дальнего поля (на достаточно большом расстоянии до ядра атома) мы получим также сферически симметричную волновую функцию для i -го электрона (по аналогии с (7)),

$$\Phi_{ea} = (1 + \mu(V)) \exp\left(2\pi i \frac{mc}{h} r \left(1 + \frac{\Delta m_i}{m} - \frac{\delta m_i(r)}{m}\right)\right) \quad (23)$$

где $\mu(V)$ характеризует амплитудную модуляцию структуры Φ_e , обусловленную потенциальным полем атома. В атомах легких элементов $\mu(V) \ll 1$. В (23) величине $\Delta m_i/m$ соответствует изменение периода структуры или эффективной массы электрона (энергии $E_i - V$, см. (13)); $\delta m_i/m$ описывает распределение «импульса» - деформации структуры электрона вблизи этого состояния (см. (14)). Ограничившись этим приближением, сделаем замену переменных $r = ct$ в двух первых экспоненциальных членах (23) и представим Φ_{ea} в виде функции $\psi_a(r, t) \exp(2\pi i \nu_e t)$, сведя нашу задачу к той, которую решал Шредингер¹⁷, с той разницей, что энергия стационарного состояния определяется теперь не кинетической энергией, обусловленной вращением электрона вокруг ядра, а энергией уругий деформации. Смысл функции $|\psi_a|^2$ описывающей распределение электронной плотности в таком понимании сводится теперь к тому, что в фазовой высокочастотной

¹⁶ Излучение, называемое рамановским, было, вероятно, обнаружено Баркла [37], и названо им J-излучением. Связь J-излучения с комптоновским обсуждалась в двадцатые годы прошлого века. Как следует из настоящей статьи, физический смысл этого излучения отличается от смысла классического рамановского рассеяния.

¹⁷ Нерелятивистское уравнение Шредингера для $\psi_a(r, t)$ получается подстановкой (23) в (8) в приближении $\Delta m \ll m$ [19, 32]. Эта функция описывает фазовую и амплитудную модуляцию функции $\Phi_e(r)$.

дифракционной периодической структуре, соответствующей свободному электрону, появляется постоянная составляющая $|\psi_a|^2$, а величина модуляции уменьшается. В (23) Δmc^2 соответствует энергии $E_f - V$ в выражении электронной волны в обычном уравнении Шредингера, предполагающего движение электрона в атоме, Δmc – импульсу в распределении $\chi(p)$.

Из проведенного анализа следует, что уравнение Шредингера в атоме описывает не распределение плотности заряда электрона и не плотность вероятности нахождения его в той или иной точке, а деформацию высокочастотной периодической структуры свободного электрона, приводящую к появлению сферически симметричного однородного низкочастотного распределения только части заряда на расстоянии, близком к радиусу борновской «орбиты». Эта часть заряда Δe определяется величиной¹⁸ $\Delta m = am$. Оценим теперь соотношение интенсивностей рэлеевского и комптоновского рассеяния. Будем считать, что однородная часть электронной массы электрона, определяемая функцией Шредингера при углах, превышающих брэгговское рассеяние на волнах деформации де Бройля ($\varphi \neq 2\theta_B$), рассеивает когерентно. Амплитуда этой части рассеяния равна $\alpha_i f_i$. Кроме того, предположим, что когерентно рассеивающая часть электрона, расположенная на радиусе порядка $\Lambda_{Vi}/2\pi$, где $\Lambda_{Vi} = \Lambda_c / \alpha_i \gg \Lambda_c$ дополнительно увеличивается за счет уменьшения амплитуды комптоновского «некогерентного» рассеяния этим электроном еще на величину порядка $\alpha_0 = \sum \alpha_i$. В результате коэффициенты рэлеевского R_{ch} и комптоновского R_{in} рассеяний, представленные ранее формулой (19) переписываются следующим образом:

$$R_{ch} \approx \alpha_0^2 \left(Z + \sum \frac{\alpha_i}{\alpha_0} f_i \right)^2,$$

$$R_{in} \approx Z(1 - \alpha_0)^2 - 2\alpha_0 \sum |\alpha_i f_i| \quad (24)$$

Численная оценка отношения R_{ch}/R_{in} показывает, что полученные нами экспериментальные данные, приведенные на рис.2 качественно правильно описываются формулой (24). Для создания теории рэлеевского рассеяния с учетом того, что оно происходит в ближнем поле осцилляторов, составляющих электрон, необходимы дополнительные исследования вблизи областей углов $\varphi = 2\theta_B$, когда некогерентное рассеяние превращается в когерентное. Теория брэгговской дифракции широко используемая сегодня в кристаллографии, не является теорией,

объясняющей причину когерентного рассеяния, а только использует его. Представляется, что когерентное рассеяние при брэгговской дифракции рентгеновских лучей происходит по механизму резонансной флуоресценции периодически расположенных атомов, спектр излучения каждого из которых определяется комптоновским и рэлеевским рассеянием содержащихся в них электронов. Наличие атомной периодической структуры формирует периодическую электронную структуру, состоящую из связанных электронов со сферически симметричным распределением заряда. При выполнении условий брэгговской дифракции в кристалле создается стоячая электромагнитная волна, которая синхронизирует колебания зарядов в атомах в соответствии с распределением колебания в той части электронной плотности, которая описывается функцией Шредингера $|\psi|^2$. Это излучение можно сопоставить с излучением корреляционного голографического лазера с периодически расположенными слоями активной среды. Такой подход к явлению дифракции может оказаться полезным при изучении дефектов кристаллической структуры, структуры тонких пленок с толщиной меньше экстинкционной длины и др. Можно ожидать и обнаружения принципиально новых дифракционных эффектов. Так, возможно наблюдение кинематической дифракции комптоновского излучения на тонких пленках, которые обсуждались нами ранее [40]. Более интересным представляется исследование комптоновского рассеяния на совершенных кристаллах в условиях брэгговской дифракции. Такие исследования, проведенные различными авторами [41], выявили возможность наблюдения когерентных интерференционных эффектов комптоновского рассеяния, но не послужили основой: для создания новых методов исследования структуры кристаллов; изучения механизма формирования излучения в области перехода некогерентного рассеяния совокупностью неупорядоченных индивидуальных электронов со слабой связью в атомах, сопровождающегося низкоинтенсивным рэлеевским или «атомным» рассеянием, в брэгговское рассеяние электронами, связанными в кристаллической структуре. Представляется, например, что когда угол падающего на кристаллическую решетку излучения соответствует запрещенному брэгговскому отражению, то в кристалле «запрещается» рэлеевское рассеяние, и, как следствие, комптоновское. Такой эффект «прозрачности» должен проявляться в «окне» достаточно широкого диапазона углов. На границах этих окон, а также вблизи околного возбуждения, интерференционные эффекты в спектре

¹⁸ Обратим внимание на определенную аналогию нашей интерпретации уравнения Шредингера с интерпретацией в теории скрытых параметров, и коэффициента α с квантовым потенциалом Бома [39].

комптоновского рассеяния должны проявляться особенно четко.

Возвращение электромагнитному излучению реального физического смысла волн, переносящих энергию без помощи фотонов, делает понятным физический смысл квантовых процессов, происходящих не только при рассеянии рентгеновского излучения. Представляется интересным проанализировать вывод о том, что когерентное излучение формируется в результате проявления не особых свойств фотонов, а свойств электронной структуры атомов. Значимых практических результатов можно ожидать в тех областях физики, в которых представление о том, сохраняется энергия поля, или количество фотонов при рассеянии, изменяет представление о происходящих процессах существенным образом. Речь, например, может идти о физике горячей плазмы, содержащей электромагнитное излучение, которое, рассеиваясь на быстрых электронах, изменяет свою частоту в результате эффекта Доплера. Сечения их рассеяния в неоклассической и квантовой (фотонной) теориях должно различаться существенным образом. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

6. Физический смысл обратного комптоновского рассеяния на релятивистских электронах. В начале прошлого века М.Планком, А.Эйнштейном и др. было показано, что электромагнитная энергия может поглощаться атомами вещества и излучаться ими только квантовым образом. Это нашло отражение и в формулировке Льюиса, который предложил каждый такой квант считать фотоном - «носителем лучистой энергии, являющимся важным составным элементом в пределах атома». Принятие концепции Комптона о том, что электромагнитная энергия не только «хранится» в квантовом состоянии, но распространяется и распределяется при рассеянии также дискретными порциями, оказало громадное влияние на области физики, в которых важную роль играет рассеяние электромагнитного излучения релятивистскими электронами. Относительно того, распространяется ли электромагнитная энергия строго фиксированными порциями, так же как она «содержится» в атомах, долгое время существовали и существуют разногласия. Эйнштейн говорил, например: «Although beer is sold only in pint bottles, it does not follow that it exist only in indivisible pint portions» [42]. Лэмб выразил свое отношение к концепции фотонов следующим образом: «only a comedy of errors and historical accidents lead to its [photon conception] popularity among physicist and optical scientist» [43]. В предыдущем разделе мы показали, что теория, рассматривающая рассеяние квантов рентгеновского излучения на электронах,

содержащихся в атомах, предсказывает сечение рэлеевского рассеяния, которое в несколько раз отличается от экспериментально измеренного. Такое расхождение наблюдается в достаточно узком диапазоне частот электромагнитного излучения. Кроме того, комптоновское рассеяние как метод исследования электронной структуры атомов и молекул до настоящего времени практически не используется, поэтому ошибка в интерпретации механизма рассеяния не повлияла на развитие физики твердого тела и рентгеноструктурного анализа. Совершенно другой вывод можно сделать относительно того, как замена электромагнитного излучения на фотоны при рассеянии свободными релятивистскими электронами изменяет понимание кинетики процессов в высокотемпературной плазме.

6.1 Эффекты Доплера и Комптона при рассеянии на релятивистских электронах. Сравнение выводов фотонной и неоклассической теорий.

Экспериментальные исследования рассеяния электромагнитного излучения на релятивистских электронах проводятся в течение длительного времени в связи с возможностью использования этого явления для получения жесткого рентгеновского и γ -гамма излучения и ускорения электронов мощными лазерными пучками. В первой группе экспериментов изучаются характеристики вторичного излучения, получаемого при «встречном» обратном комптоновском рассеянии лазерных пучков на релятивистских электронах [44]. Используя неоклассическую теорию эффекта Комптона, изложенную выше, можно показать, что если в лабораторной системе координат K частота плоской волны распространяющейся в направлении \vec{n}_0 , противоположном скорости

электрона $\mathcal{G}=cb$ равна ν ($\nu \ll \nu_e$), то частоты рассеянного излучения ν_1 , $\nu_1'(\varphi)$ в системе координат электрона K' при $\gamma \gg 1$ ($\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$), и частоты $\nu_{2\max}$ рассеянного излучения в лабораторной системе K равны соответственно:

$$\nu_1 \approx 2\gamma\nu, \nu_1'(\varphi) \approx \frac{2\gamma\nu}{1 + 2\gamma \frac{\nu}{\nu_e} (1 - \cos \varphi)},$$

$$\nu_{2\max} \approx \frac{4\nu\gamma^2}{1 + \gamma \frac{4\nu}{\nu_e}} \approx 4\nu\gamma^2 \quad (25)$$

(считаем, что $\nu\gamma < \nu_e$). Обратно рассеянное излучение сосредоточено в узком конусе углов $\Delta\theta$ порядка γ^{-1} , величина $\nu_{2\max}$ соответствует частоте излучения, распространяющейся по направлению скорости электрона. Все выводы относительно спектральных свойств рассеянного излучения, сделанные на основе неоклассической, так и традиционной фотонной

теории комптоновского рассеяния, идентичны и подтверждены экспериментально. Существенно отличаются выводы этих теорий об изменении энергии, как электронов, так и электромагнитного излучения, в зависимости от представления о том, рассеивается ими электромагнитная волна или фотоны. Сечение рассеяния в рамках фотонной гипотезы вычисляется в предположении, что выполняется не только закон сохранения энергии, но и сохраняется число фотонов N , участвующих в рассеянии. В результате такого «ad hoc» предположения о сохранении частиц, как полагают, хорошо проверенного в экспериментах по комптоновскому рассеянию [7], первичная энергия E фотонов в фотонном газе равная $Nh\nu_0$ при рассеянии изменяется (увеличивается) в среднем на величину [45]:

$$\Delta E_{ph} = \frac{4}{3} \gamma^2 \sigma_0 (h\nu N) \approx \frac{h\nu_{2\max}}{3} N\sigma_0 \quad (26)$$

Здесь σ_0 – томсоновское сечение рассеяния. На эту величину в среднем уменьшится кинетическая энергия электронов. При условии однократного рассеяния только часть электронов, пропорциональная сечению рассеяния σ_0 потеряет максимум кинетической энергии равный $h\nu_{2\max}$. Большая их часть сохранит прежнюю энергию. Такой эффект никогда не наблюдался, но предполагается, что он существует, поскольку существуют электроны «отдачи» в экспериментах по рассеянию жесткого излучения на связанных электронах.

При многократном рассеянии согласно хорошо известной теории Компанейца [46], в которой постулируется закон сохранения числа фотонов, тормозные кванты света быстро и необратимо увеличивают свою энергию, что становится главной причиной потерь энергии электронов в высокотемпературной плазме [47], оказывает влияние на кинетику электромагнитного излучения во вселенной [48]. Экспериментальное исследование влияния обратного комптоновского рассеяния на скорость движения электронов, изучалось в связи с задачей ускорения и модуляции релятивистских электронов. Оказалось, что практически в соответствии с законами классической электродинамики, при $\eta \leq 1$ изменение скорости электронов возможно лишь в ближнем поле рассеянного на неоднородностях поверхности электромагнитного излучения [49]. Это было экспериментально показано впервые в работе [23] при исследовании обратного эффекта Парселла-Смита. Эффект влияния ближнего поля рассеянного излучения на скорость электронов используется также для модуляции движения быстро летящего пучка электронов [50], что проявляется также в эффекте Шварца-Хоры [51]. Эти экспериментальные результаты

подтверждают выводы неоклассической теории о механизме комптоновского рассеяния и показывают, что изменение интерпретации процессов электрон-фотонного рассеяния может существенно повлиять на понимание процессов, происходящих в горячей плазме.

6.2 Реальная роль эффекта Комптона в охлаждении высокотемпературной плазмы в неоклассической теории. В неоклассической теории отсутствует понятие о фотонах, и, следовательно, учитывается только закон сохранения энергии и импульса. Преобразование Лоренца используется для определения частот ν_1 и ν_2 . В результате этих преобразований изменяются плотность энергии и частота электромагнитного поля в различных системах координат. Изменение энергии поля и изменение кинетической энергии электронов может происходить лишь в процессе комптоновского рассеяния волны с частотой ν_1 в связанной с электронами системе координат. В этой системе координат все электроны испытывают давление, определяемое формулой (11), в которой плотность электромагнитной энергии поля в лабораторной системе равную $W_0 = E_0^2/4\pi$, следует увеличить в $4\gamma^2$ раз. Это эквивалентно увеличению в $4\gamma^2$ раз сечения рассеяния. Для удобства сравнения нашего результата с результатом квантовой теории обратного комптоновского рассеяния, также, как и при выводе формулы (19) мы формально нормируем поток энергии плоской волны квантами Планка $h\nu$. В результате мы получим, что среднее изменение (уменьшение) энергии электромагнитного поля ΔE_k , будет равно приблизительно:

$$\Delta E_k \approx -\frac{\sigma_0}{3} \varepsilon_1 4\gamma^2 N h \nu = \frac{\sigma_0}{3} \varepsilon_1 N h \nu_{2\max} \quad (27)$$

Здесь $\varepsilon_1 \approx \nu_1/\nu_e$. Эта энергия, которая поглощается электроном, придает ему импульс в направлении \vec{n}_0 . Из уравнения (27) видно, что поскольку изменение плотности энергии эквивалентно увеличению сечения рассеяния в $4\gamma^2$ раз, можно формально считать, что число рассеянных «первичных квантов» $N\sigma_0$ сохраняется в потоке обратного рассеянного излучения, а их энергия возрастает. На самом деле, не энергия квантов, а плотность потока жесткого рентгеновского излучения увеличивается до значения, определяемого формулой (26) с коэффициентом $(1-\varepsilon_i)$

$$\Delta E \approx \sigma_0 N \frac{h\nu_{2\max}}{3} (1-\varepsilon_i) \quad (28)$$

Обратим внимание на существенное отличие физического смысла формул (26) и (28) в квантовой и неоклассической теориях. Увеличение потока энергии жесткого рентгеновского излучения при встречном комптоновском рассеянии происходит не за счет

эквивалентной потери энергии электронами, а за счет изменения сечения рассеяния в системе координат движущегося электрона. Комptonовское рассеяние приводит к уменьшению, а не увеличению полной электромагнитной энергии поля на величину ΔE_k .

Итак: в фотонной теории фотоны приобретают энергию при увеличении частоты, в неоклассической теории энергия в электромагнитном поле уменьшается как с увеличением, так и с уменьшением частоты в результате рассеяния электроном вне зависимости от направления движения и первоначальной энергии электрона. Уменьшение энергии поля сопровождается увеличением плотности потока рассеянного излучения и уменьшением кинетической энергии каждого электрона в плазме на величину ΔE_k . Изменение энергии релятивистского электрона при рассеянии электромагнитного излучения может стать существенным только при очень высокой первоначальной плотности энергии поля. При перерассеянии излучения в плотной плазме энергия поля необратимо уменьшается, а не увеличивается. Общие потери кинетической энергии электронов не могут превысить энергию первичного тормозного излучения плазмы, и реальная роль «комptonизации» излучения в кинетике плазмы, оцененная ранее на основе квантовой теории рассеяния, оказывается сильно преувеличенной. Обратим внимание на то, что в результате многократного рассеяния излучения в плазме действительно быстро возрастает частота излучения, но это ведет к быстрой потере электромагнитной энергии. Плотная плазма экранирует возникающее внутри нее тормозное излучение. Из проведенного в настоящей статье анализа следует, что все выводы относительно поведения горячей плазмы на основе закона сохранения фотонов при рассеянии на электронах отражают поведение математической модели, а не реального объекта [47].

Заключение. Странники полноты современной интерпретации квантовой механики утверждают, что ни одной из существующих альтернативных теорий не удалось, а по убеждению многих, не удастся и в будущем, описать или предложить эксперимент, результаты которого отличались бы от предсказываемого квантовой теории в «копенгагенской интерпретации». Тем не менее, попытки создания альтернативных современной квантовой механике теорий предпринимались неоднократно и ведутся в настоящее время [52, 53]. В настоящей работе показано, что эксперименты, демонстрирующие необходимость ревизии квантовой теории известны, и выполняются уже на протяжении 100 лет. К этим экспериментам относятся работы по исследованию явлений когерентного

(брэгговского) и некогерентного (комptonовского) рассеяния жесткого рентгеновского излучения и эффекта Доплера (обратного комptonовского эффекта) при рассеянии лазерного излучения на релятивистских электронах. Такой вывод имеет принципиальное значение, поскольку эффект Комптона до сих пор рассматривается как главный аргумент в пользу фотонной концепции в квантовой механике. Как фотоэффект, так и приводимые в настоящее время работы с регистрацией слабых пучков света показывают лишь то, что электромагнитное излучение поглощается и испускается веществом фиксированными порциями - квантами. То, что свет не только хранится, но и распространяется и переизлучается электронами также порциями, причем при переизлучении частота (т.е. «крепость пива в пинтах» Эйнштейна) может изменяться, следует только из интерпретации эффекта Комптона, данного Комптоном и Дебаем. В течение длительного периода, используя, по выражению Джейнса, «the technology of QM like that of epicycles, has run far ahead of real understanding» [32], экспериментальные результаты по некогерентному рассеянию рентгеновского излучения были «встроены» в принятую концепцию. При этом на некорректность использования измерений интенсивностей при брэгговском рассеянии для интерпретаций и вычислений спектров некогерентного и рэлеевского рассеяния не обращалось внимания. По-видимому, только убежденность в справедливости фотонной гипотезы Комптона не позволила признать, что эффекты Черенкова и Доплера не являются квантовыми, и понять, что обратный эффект Парселла-Смита доказывает волновую природу взаимодействия свободного электрона с электромагнитной волной. Можно утверждать, что имеющихся экспериментальных данных достаточно для того, чтобы, по крайней мере, усомниться в справедливости общепринятой интерпретации эффекта Комптона. Пересмотр теории эффекта Комптона не только ведет к ревизии ряда положений и выводов квантовой механики, но и открывает новые возможности исследования структуры материи. В частности, рассеяние свободным электроном жесткого излучения с $\lambda < 2\lambda_c$ должно приводить к появлению в угловом спектре комptonовского рассеяния участков когерентного (подобно рэлеевскому на атомах) рассеяния. Новые возможности возникают при создании единой теории рассеяния рентгеновского излучения кристаллами. Большое влияние может оказать новая интерпретация эффекта Комптона на развитие физики элементарных частиц, физики горячей плазмы, квантовой информатики.

- [1] Compton A.H., Phys. Rev., 21, 483 (1923).
- [2] Stuewer R., The Compton effect: turning point in physics. Science History Publications. (N.-Y., 1975).
- [3] Strad J., Eur. J.Phys., 7, 217 (1986).
- [4] Schrödinger E., Ann. der Phys., 82, 257 (1927).
- [5] Dodd J.N., Eur. J.Phys., 4, 205 (1983).
- [6] Аристов В.В., ДАН, 425, 6, 1 (2009).
- [7] Скобельцын Д.Б., УФН, 122, 2, 295 (1977).
- [8] Compton A.H., Phys. Rev., 22, 409 (1923).
- [9] Schrödinger E., Ann. der Phys., 79, 361 (1926).
- [10] Mc.Donald K.T., Shmakov K., Phys. Rev. ST Accel. Beams 2, 121301 (1999).
- [11] Volkov D.M., Zeit.f.Phys., 94, 250 (1935).
- [12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля (М., 1988).
- [13] Wheeler J., Feynman R., Rev. Mod. Phys., 17, 2-3, 157 (1945).
- [14] Dirac P.A., Proc. Roy. Soc A, 167, 148 (1938).
- [15] Ахиезер А.И., Половин Р.В., УФН, 107, 3, 464 (1972).
- [16] Smith L., Purcell E., Phys. Rev., 92, 1069 (1953).
- [17] Guardala N.A. et. al., Nucl. Instr. Methods Phys. Res. A, 347, 504 (1994).
- [18] Аристов В.В. «Неоклассическая теория рассеяния на свободных и слабосвязанных электронах», в сб.: Тр. XVI Межд. симп. *Нанотехника и нанотехнология*, Н.-Новг., 2012, т.2, с.530-533.
- [19] Aristov V.V. «Neoclassical Theory of X-Ray Scattering by Electrons», in: *Electromagnetic radiation* (ed. by S.O.Bashir), (InTech, Croatia, 2012), p.107-136.
- [20] Аристов В.В., ДАН, 425, 5, 1 (2009).
- [21] Venugopal V., Bhagdikar P.S. «de Broglie wavelength and frequency of the scattered electrons in Compton effect», arXiv:1202.4572v2
- [22] Arbab I.A., J. Mod. Phys., 2, 1012 (2011).
- [23] Mizuno K., Pae T., Nozokido T., Furuya K., Nature, 328, 45 (1987).
- [24] Hagenbuch K., Amer. J. Phys. 45, 693 (1977)
- [25] Kirkpatrick P., Ross P.A., Phys. Rev., 46, 668 (1934)
- [26] DuMond J., Rev. Mod. Phys., 5, 1(1933).
- [27] Compton A., Phys. Rev., 47, 367 (1935).
- [28] Cooper M.J., Rep. Prog. Phys. 48, 415 (1985)
- [29] Laue M., Naturwiss., 10, 133 (1931)
- [30] Crisp M.D., Jaynes E.T., Phys. Rev. 179, 1253 (1969).
- [31] Lamb W.E., Scully M.O. The Photoelectric Effect without Photons. (Univ. France Press, 1969).
- [32] Jaynes E. T. «Scattering of light by free electrons», in Workshop Proc. *The Electron-1990*, ed. by A. Weingartshofer, Kluwer Academic Publisher, Holland, 1990
- [33] Crisp M.D., Phys. Rev. A, 42, 3703 (1990)
- [34] Bosanac S.D., Eur. Phys. J. D, 1, 317 (1998)
- [35] Hubbell J.H. et al., J. Phys. Ref. Date, 4, 471 (1975)
- [36] Compton A.H., Phys. Rev., 14, 20 (1919)
- [37] Barkla Ch.G., Characteristic Röntgen radiation. (Nobel Lecture, 1920)
- [38] Hollerman W.A. et al. «Measurement of Compton scattered electrons using monochromatic X-rays», in *XVI Int. Conf. appl. accel. research and industry*, ed. by J.L. Duggan, AIP Conference Proceedings 576, Texas, 2001, pp. 193-196.
- [39] Bohm D., Phys. Rev., 85, 166 (1952)
- [40] Аристов В.В., Шулаков Е.В., «Первичное брэгговское рассеяние с изменением длины волны», в сб.: *Рентг. оптика – 2010. Раб. Совец.* Черноголовка, 20-23 сентября 2010, с.57-59.
- [41] Vartanyants I.A., Kovalchuk M.V., Rep. Prog. Phys., 64, 1009 (2001)
- [42] Frank P. Einstein. His life and times. (Knopf, New York., 1947)
- [43] Lamb W.E., Appl.Phys.B., 60, 77 (1995)
- [44] Арутюнян Ф.Р., Туманян В.А., УФН, 133, 1, 3 (1964)
- [45] Melrose D.B. Astr. Space Sci. 10, 186 (1971)
- [46] Компанец А.С., ЖЭТФ, 31, 5, 876 (1956)
- [47] Марчук Г.И., Имшенник В.С., Баско М.М., УФН, 179, 3, 289 (2009)
- [48] Сюняев Р.А. «Комптонизация», в кн. Физика космоса: мал. энциклопедия. 2 изд. (Гл. ред. Р.А. Сюняев), (М.: С.Э., 1986), с.306
- [49] Palmer R.B., Particle Accel., 11, 81 (1980)
- [50] Ishikawa R., Bae J., Mizuno K., J. Appl. Phys. 89, 4065 (2001)
- [51] Schwarz H., Hora H., Appl. Phys. Lett. 15, 349 (1969).
- [52] Khrennikov A., «Bell argument: Locality or Realism?», in *Foundation of Probability and Physics-6*, ed. by M. D’Ariano et al., AIP Conf. Proc. 1424, New York, 2012, pp. 160-175.
- [53] Memorandum of European Concerted Research Action COST Action MP1006: Fundamental Problems in Quantum Physics, Brussels, 2010.
- [54] Гайтлер В. Квантовая теория излучения (М: ИЛ, 1956)
- [55] Dirac P.A., Phys. Rev., 139, B684 (1965)

Сочетание методов рентгеновской микротомографии и флуоресцентного анализа при изучении особенностей строения костной ткани гекконов

В.Е. Асадчиков¹, А.В. Бузмаков¹, А.Е. Благоев¹, В.И. Гулимова², Д.А. Золотов¹,
А.С. Орехов¹, А.С. Осадчая¹, К.М. Подурец³, С.В. Савельев², Р.А. Сенин³,
А.Ю. Серегин¹, Е.Ю. Терещенко¹, М.В. Чукалина¹

¹Институт кристаллографии РАН, Москва

²Научно-исследовательский институт Морфологии человека РАМН, Москва

³Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва

e-mail: asad@crys.ras.ru

Во время различных заболеваний и при экстремальных нагрузках структура живых тканей подвергается частичным внутренним изменениям, которые не имеют внешних физиологических или анатомических проявлений. Исследование таких структурных изменений позволяет выявить причины их вызывающие, что играет важную роль при постановке диагноза. Одним из наиболее интересных объектов исследований является костная ткань. Одна из причин возникновения ее патологии, в частности, связана с длительным нахождением позвоночных в условиях микрогравитации (невесомости).

Дегенерация тканей в невесомости является серьезным препятствием на пути к продолжительному пребыванию человека в космосе и межпланетным перелетам, вызывая резкое уменьшение объема костей и мышц [1]. Отмечено, что пребывание в таких условиях приводит к декальцификации костной ткани. Однако при этом можно ожидать изменение концентрации и иных более тяжелых элементов. Другие ткани организма также могут обладать механочувствительностью и нуждаться в гравитации для сохранения нормального метаболизма. Таким образом, костная и мышечная ткани являются своего рода "сигнальными системами", демонстрируя наиболее ранний и очевидный ответ на влияние микрогравитации. При более длительном пребывании в невесомости могут последовать другие серьезные изменения - например, в иммунной системе или в регенеративной способности органов и тканей. Существует концепция о необходимости гравитационно-опосредованной механической нагрузки для сохранения здоровья живых организмов, которую можно проверить только при анализе последствий микрогравитации.

Исследования позвоночных животных в условиях микрогравитации проводятся нами с начала 1990-х [2–3] по настоящее время [4–5]. Объектами исследований были амфибии, рептилии и млекопитающие – как взрослые, так и на разных стадиях личиночного или эмбрионального развития (головастики шпорцевой лягушки *Xenopus laevis*, а также эмбрионы крыс, развитие которых проходило на борту КА "Шаттл") [6]. На основании

полученных данных высказано предположение, что степень деминерализации скелета в невесомости у разных животных при близкой или одинаковой продолжительности полета может быть различной в зависимости от морфологических и поведенческих адаптаций исследуемых животных к их среде обитания. Так, различной оказалась реакция скелета на пребывание в невесомости у личинок амфибий и взрослых животных. У головастиков шпорцевых лягушек после 11.5 сут в невесомости (КА "Биокосмос") был выявлен ряд отклонений в развитии скелета, не приводящих, однако, к деминерализации. В то же время, у взрослых испанских тритонов (*Pleurodeles waltlii*) результатом 2-недельных полетов на КА "Космос 1887", "Космос 2044", "Бийон" и "Фотон" стала заметная деминерализация костной и хрящевой ткани. Количество кальция, фосфора и серы у них уменьшалось на 7, 3 и 7% соответственно по сравнению с контролем.

Наравне с традиционными гистологическими исследованиями таких образцов возможно использование альтернативных методов исследования элементного состава костных тканей с использованием мощных синхротронных либо протонных источников. Данные методы основаны на взаимодействии зондирующего излучения или потока частиц с атомами. При облучении атомов высокоэнергетичными рентгеновскими фотонами или электронами происходит возбуждение электронов внутренних оболочек этих атомов. Возбужденные электроны выбиваются со своих оболочек и на эти вакантные места перескакивают электроны с внешних оболочек. Высвободившаяся энергия выделяется в виде кванта рентгеновского диапазона или передается электрону из внешней оболочки (оже-электрон). По энергиям и количеству испущенных квантов (или электронов) судят о количественном и качественном составе анализируемого вещества. Однако при сканировании электронным пучком глубина проникновения электронов в исследуемый объект обычно не превышает 10 мкм, что позволяет получать информацию только с поверхности объекта, не позволяя заглянуть внутрь. Такие же ограничения накладываются и при детектировании вторичных электронов, поскольку их глубина

выхода также не превышает нескольких микрометров. Оптическая схема эксперимента определяет пространственное разрешение выполняемых измерений. Для построения трехмерного распределения химических элементов был разработан метод рентгенофлуоресцентной томографии [7, 8]. Схема эксперимента предполагает регистрацию флуоресцентного излучения от образца с высоким пространственным разрешением. Для этого отдельные части образца засвечиваются микрофокусированным пучком зондирующего излучения, а перед энергодисперсионным детектором располагается коллимирующий элемент (чаще всего поликапиллярная линза-концентратор), что позволяет получать сигнал не от всего образца, а только от малой его части. При изменении положения пучка и детектора проводится трехмерное сканирование всего исследуемого образца. В настоящее время такие исследования проводятся лишь на ограниченном количестве станций в современных синхротронных центрах [31, 32].

Нами впервые проведено комплексное исследование влияния микрогравитации на процессы, происходящие в элементах опорно-двигательного аппарата (проксимальных хвостовых позвонках) хрящепалого геккона. В проведенной работе данные традиционных гистологических исследований сопоставлялись с результатами рентгеновской микротомографии, а также рентгенофлуоресцентного анализа и данными растровой электронной микроскопии. Установлено, что в зависимости от условий эксперимента и способов приготовления препаратов поглощающая плотность названных позвонков может заметно меняться. Выявлены области повышенной плотности, расположенные ближе к центральному каналу позвонка. Следует отметить, что соотношение поглощений на разных участках костной ткани изменяется при варьировании длины волны зондирующего рентгеновского излучения. Это косвенно указывает на неравномерность распределения элементного состава в объеме костей. В этом смысле установлена корреляция данных рентгенофлуоресцентного анализа с результатами рентгеновской микротомографии.

По данным рентгенофлуоресцентного анализа впервые установлен факт наличия в данных структурах ряда тяжелых элементов (Fe, Ni, Cu, Zn, Br, Sr) и выявлена неравномерность их распределения. Сопоставление данных электронной микроскопии и рентгенофлуоресцентного анализа показывают, что эти элементы расположены в глубине костной ткани (явно глубже, чем на расстоянии 10 мкм от ее поверхности), что также соответствует результатам рентгеновской микротомографии.

Логично предположить, что выявленные области повышенной плотности (электронной плотности) возможно, являются первичными центрами оссификации.

Мы полагаем, что в ходе дальнейших исследований необходимо установить, насколько наличие сильнопоглощающих элементов, а также неравномерность их распределения являются особенностями только названных позвонков, либо это справедливо и для других частей опорно-двигательного аппарата хрящепалого геккона.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ-11-02-12110-офи-м-2011, часть работы выполнена на оборудовании центра коллективного пользования ИК РАН и центра коллективного пользования "Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий" в рамках государственного контракта №16.552.11.7003.

- [1] Савельев С.В., Макаров А.Н., Прощина А.Е. и др. // Актуальные вопросы современной гистопатологии. М.: 1993. С. 141.
- [2] Бесова Н.В., Савельев С.В., Гулимова В.И. // Тез. Докл. X конф. «Косм. Биол. и авиакосм. Медицина», Москва, 7–10 июня 1994. С. 98.
- [3] Савельев С.В., Макаров А.Н., Прощина А.Е. и др. // Тез. Докл. X конф. «Косм. Биол. и авиакосм. Мед.», Москва, 7–10 июня 1994. С. 96.
- [4] Гулимова В.И., Никитин В.Б., Барабанов В.М. и др. Материалы докладов IX конгресса МАМ. Морфология. 2008. Т. 133. № 2. С. 37.
- [5] Никитин В.Б., Гулимова В.И., Харламова А.С. и др. // Тез. докл. международной конференции SPEXP 2008 «Научные и технологические эксперименты на автоматических космических аппаратах и малых спутниках». Самара, 2008. С. 133.
- [6] Proshchina A.E., Besova N.V., Voronov K.A. et al. // Bull Exp Biol Med. 2000. V. 130(9). P. 908.
- [7] Асадчиков В.Е., Бузмаков А.В., Золотов Д.А. и др. // Кристаллография. 2010. Т. 55. № 1. С. 167.
- [8] Сенин Р.А., Хлебников А.С., Анохин К.В. и др. // Тез. Докл. РСНЭ-2011. 14-18 ноября 2011. С. 510.

Новые программно-аппаратные ресурсы для улучшения качества обработки томографических данных

¹А.В. Бузмаков, ¹В.Е. Асадчиков, ¹Д.А. Золотов, ¹М.В. Чукалина, ²Д.П. Николаев, ¹В.Е. Прун

¹ Институт кристаллографии им А.В. Шубникова РАН, Москва

² Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН, Москва
e-mail: buzmamkov@gmail.com

Развитие технологий двумерного цифрового детектирования привело к колоссальному прогрессу и в рентгеновских технологиях, предлагающих широкий круг приложений в областях медицинской диагностики, систем безопасности, средств неразрушающего контроля и других. Изображающие рентгеновские методы предлагают пространственно разрешенную визуализацию двух- и трехмерных структур в веществе или организме, что принципиально для понимания их свойств. Сверх того эти методы позволяют распознавать детали строения объектов в широком диапазоне пространственного разрешения – от микро до макро размеров. Дополнительное временное разрешение позволяет получить доступ к динамике процессов, информация о которой даст понимание функционирования устройств или организмов и путей оптимизации технологических процессов.

Для достижения этих замечательных результатов зачастую используется новейшее измерительное оборудование (датчики, детекторы и т.п.), создающие огромные потоки цифровой информации. Естественным путём обработки этой информации является сохранение её для последующего анализа. Однако, разработка новых высокопроизводительных методов обработки этой информации позволила бы управлять течением эксперимента на основе текущих данных.

Например, реконструкция пространственной структуры объекта в реальном времени, позволит оптимизировать параметры проведения эксперимента, тем самым уменьшив времени сканирования и радиационную нагрузку на образец. Для этого необходимо разрабатывать новые алгоритмы реконструкции и их эффективные реализации. Работы в этом направлении ведутся по всему миру, например проект FASTRA [1] разрабатываемый группой университета г. Антверпен, Бельгия является программно-аппаратным комплексом обработки томографических данных для лабораторных микротомографов, использующим технологию вычислений на графических процессорах NVIDIA CUDA.

Важность работ в этом направлении понимают и группы, занимающиеся томографией на синхротронных источниках - проект UFO [2] направленный на сверхбыстрое получение рентгеновских изображений процессов с управлением, основанным на непрерывном анализе

данных на синхротрона ANKA, Карлсруэ, Германия.

Для достижения этих результатов разумным предоставляется воспользоваться мощностью современных многоядерных процессоров (CPU) и графических процессоров (GPU). Графические процессоры все чаще используются в научных вычислениях. Они предлагают параллельную архитектуру и оптимизированы для параллельных вычислений. По сравнению со стандартными центральными процессорами большая область чипа специализирована для вычислений с плавающей точкой. Высокая скорость увеличения вычислительной мощности, контролируемая промышленностью компьютерных игр, делает эти аппаратные средства весьма привлекательными для систем обработки потоковых данных. За последние несколько лет созданы стандартные вычислительные пакеты, расширяющие возможности и простоту разработки "неграфических" приложений. Прорыв был сделан компанией NVIDIA, создавшей технологию Вычислительной Унифицированной Архитектуры Устройства (CUDA). Наиболее важные алгоритмы, такие как быстрое преобразование Фурье (FFT) или матричное умножение и другие поставляются вместе со средством разработки CUDA. Поставляемый в составе NVIDIA CUDA SDK язык программирования CUDA делает аппаратные средства GPU доступными для более широкого круга программистов. В числе уже созданных и доступных на сайте NVIDIA CUDA более 1000 приложений из совершенно различных областей.

Интересным является и стандарт программирования параллельных устройств OpenCL предложенный группой Khronos. Большое количество компаний, включая AMD, Apple, Intel и NVIDIA, участвуют в процессе стандартизации. В то время как CUDA доступна только для аппаратных средств NVIDIA, OpenCL обеспечивает стандартный интерфейс программирования для широкого диапазона устройств параллельных вычислений и изготовителей. Первые средства разработки OpenCL были выпущены в 2009, и теперь все больше библиотек стандартных алгоритмов доступно для OpenCL. Разработка в OpenCL позволит создать переносимые приложения для платформ параллельных вычислений, включая многоядерные центральные процессоры, графические процессоры или

кластеры. Программный код не будет столь компактным как аналогичный на CUDA, но может быть выполнен на той же скорости.

GPU могут использоваться для помощи в обработке и реконструкции томографических изображений. На самом деле графические процессоры могут обеспечить намного более быстрое восстановление трехмерного изображения по сравнению с решениями на центральном процессоре. В рамках представляемой работы планируется создать программную реализацию методов микрофотографической реконструкции для гетерогенных вычислительных систем, включающих в себя, как традиционные центральные процессоры, так и графические ускорители.

В настоящее время нами разработан и реализован алгебраический метод RegART. RegART является итерационным и поэтому обработка 180 проекций 1000 на 1000 px на процессоре AMD Opteron 275 (2.4 ГГц) занимает порядка 5 минут. Для повышения производительности нами была написана реализация RegART с использованием технологии CUDA, т.е. для расчетов использовалась графическая карта. Это позволило на видеокарте NVIDIA GeForce GTX280 получить ускорение порядка 300 раз и сократить время реконструкции до 1 сек.

Кроме того, в дальнейшем будут проведены работы по созданию новых быстрых алгоритмов алгебраической реконструкции основанных на быстром преобразовании Хафа. Это позволит сократить время обработки данных на порядок или больше. Работоспособность программного обеспечения будет проверена на комплексе лабораторных микрофотографов разработанных в ИК РАН и после тестирования оно будет интегрировано с этим комплексом.

[1] <http://fastra.ua.ac.be/en/index.html>

[2] <http://ufo.kit.edu/>

Влияние динамики теплового самовоздействия мощных импульсов в кристалле на монохроматизацию излучения рентгеновского лазера на свободных электронах

В. А. Бушув

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
e-mail: vabushuev@yandex.ru

На основе решения уравнения теплопроводности получены пространственно-временные зависимости распределения температуры кристалла под действием импульсов рентгеновского лазера на свободных электронах (РЛСЭ). Рассмотрено влияние температуры, ее градиента и деформации кристаллической решетки на дифракционное отражение и прохождение импульсов в кристаллах синтетического алмаза.

Излучение РЛСЭ представляет собой импульсы с длиной волны $\lambda \sim 0.05-0.16$ нм, длительностью $\tau_p \sim 10-100$ фс и расходимостью $\sim 1-3$ мкрад [1]. Импульсы характеризуются практически полной пространственной когерентностью и крайне низкой временной когерентностью с временем $\tau_c \sim 0.1-0.3$ фс $\ll \tau_p$, что приводит к спектральной ширине $\Delta E/E \sim 10^{-3}$. Дифракция импульсов РЛСЭ от кристаллов и многослойных структур с целью их монохроматизации до уровня $\Delta E/E \sim 10^{-4}-10^{-5}$ и повышения степени временной когерентности рассматривалась в [2-7].

Энергии импульсов Европейского РЛСЭ в каналах SASE1 и SASE2 в зависимости от величины заряда банчей составят $20 \div 2500$ мкДж [1], что приведет к средним потокам энергии от 60 Вт/см² до 80 кВт/см² в области расположения первых элементов рентгеновской оптики на расстоянии $500-800$ м от ондулятора. В связи с этим одной из серьезных проблем является учет и предотвращение сильнейшего теплового разогрева кристаллов и рентгеновских зеркал.

Так как интенсивность падающих на кристалл импульсов зависит от координаты, то температура кристалла, деформация решетки $\Delta d/d = \alpha_T \Delta T$ и изменение локального угла Брэгга $\Delta \theta = -(\Delta d/d) \operatorname{tg} \theta_B$ в разных точках кристалла разная, где α_T – температурный коэффициент линейного расширения. Из условия $|\Delta \theta| < \Delta \theta_B/2$ получим, что допустимые отклонения температуры ΔT , которые не приводят к выходу за пределы области “сильного” дифракционного отражения с полной шириной $\Delta \theta_B$, определяются соотношением $\Delta T \leq \Delta T_c$, где $\Delta T_c = \Delta \theta_B \operatorname{ctg} \theta_B / 2 \alpha_T$. Критическая величина ΔT_c увеличивается с увеличением ширины $\Delta \theta_B$, а также с уменьшением угла Брэгга θ_B и коэффициента теплового расширения α_T .

В дальнейшем будем рассматривать симметричное брэгговское отражение (400) от

кристалла алмаза ($\lambda = 0.1$ нм, $\theta_B = 34.19^\circ$, $\Delta \theta_B = 5.12$ мкрад, $\mu = 3.15$ см⁻¹, толщина $l = 50$ мкм). Резкая зависимость α_T от температуры [8] приводит к тому, что критические значения ΔT_c уменьшаются от 75 К при $T = 100$ К до крайне малого значения 1.2 К при $T = 600$ К. Отсюда следуют чрезвычайно жесткие условия на интервал значений температуры в пределах области кристалла, на которую падают импульсы РЛСЭ, особенно при комнатной и более высоких температурах.

Излучение РЛСЭ представляет собой серии импульсов с длительностью отдельных импульсов $\tau_p \sim 10-100$ фс и энергией $Q_p = \hbar \omega N$, где N – число фотонов в импульсе. Импульсы сгруппированы в пачки с длительностью $\tau_b \approx 0.6$ мс и частотой повторения 10 Гц, число импульсов в пачке $n_b \approx 2700$, $N \sim (0.1 \div 20) \cdot 10^{11}$ [1].

Пространственно-временное распределение температуры $T(\mathbf{r}, t)$ определяется из параболического уравнения теплопроводности

$$c_p \rho (\partial T / \partial t) = \operatorname{div}(\kappa \cdot \operatorname{grad} T) - s(T - T_s) + F, \quad (1)$$

где c_p – удельная теплоемкость, ρ – плотность, κ – теплопроводность, s – коэффициент теплообмена с окружающей средой с температурой T_s , $F(\mathbf{r}, t)$ – плотность тепловых источников. Температура в (1) и ниже отсчитывается от начальной температуры $T_0(x, y, 0) = \operatorname{const}$. Рассмотрим кристалл в виде пластинки с размерами $L \times L \times l$, где l – толщина кристалла. В случае тонкого кристалла доля поглощенной энергии $\eta = \mu l / \gamma_0 \ll 1$, где μ – коэффициент поглощения, $\gamma_0 = \cos \theta$, θ – угол падения импульса, поэтому можно перейти от (1) к двумерной задаче. Для импульсов с гауссовой формой по \mathbf{r} и t плотность тепловых источников $F(x, y, t) = \eta(\gamma_0 Q_p / \pi l r_1^2) g_x g_y f(t)$, где

$$g_x = \exp(-x^2 / r_x^2), \quad g_y = \exp(-y^2 / r_y^2), \quad (2)$$

$$f(t) = (1 / \pi^{1/2} \tau_0) \sum_{j=1}^p \exp[-(t - t_j)^2 / \tau_0^2]. \quad (3)$$

Здесь $r_x = r_1 / \gamma_0$, $r_y = r_1$, t_j – моменты времени падения импульсов на кристалл. Число импульсов p определяется условием $t < t_p$. Поперечный радиус импульса r_1 и его длительность τ_0 связаны с полным размером r_p и длительностью τ_p на полувысоте (FWHM) соотношениями $r_1 \approx 0.6 r_p$, $\tau_0 \approx 0.6 \tau_p$. На расстоянии z от РЛСЭ $r_p = r_s M$, где

r_s – радиус импульса на выходе из РЛСЭ, $M = [(1 + \alpha_s D)^2 + D^2]^{1/2}$, $D = \lambda z / (2.26 r_s^2)$, α_s – параметр, характеризующий искривление волнового фронта импульса в плоскости $z = 0$ [5-7]. Из данных в [1] следует, что на расстояниях $z \sim 500$ -800 м размеры импульсов $r_p \sim 500$ -1500 мкм.

Решение неоднородного уравнение (1) будем искать в приближении постоянных коэффициентов с начальным условием $T(x, y, 0) = 0$ и граничными условиями $T(\pm L/2, \pm L/2, 0) = 0$; $s = 0$. В итоге с учетом (1) и (2) получим следующее выражение для температуры кристалла:

$$T(x, y, t) = \Delta T_1 \sum_{j=1}^p \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} Q_{mn}(t - t_j) S_{mn}(x, y), \quad (4)$$

где

$$Q_{mn}(t - t_j) = \exp[-a^2(q_m^2 + q_n^2)(t - t_j)], \quad (5)$$

$$S_{mn}(x, y) = g_{xm} g_{yn} \cos(q_m x) \cos(q_n y), \quad (6)$$

$$g_{im} = (2/L) \int_{-L/2}^{L/2} g_i(\xi) \cos(q_m \xi) d\xi, \quad i = x, y. \quad (7)$$

Здесь $\Delta T_1 = \mu Q_p / (\pi c_p r_1^2)$ – температура нагрева в точке $x, y = 0$ под действием одного импульса, $a^2 = \kappa / c_p \rho$ – коэффициент температуропроводности, $q_k = \pi(2k - 1)/L$, $k = m, n$. При выводе (4) использовано условие $\tau_0 \ll \tau_T$, где $\tau_T = r_1^2 c_p \rho / 4\kappa$ – характерное время расплывания температуры из-за теплообмена (приближение мгновенных δ -образных падающих импульсов).

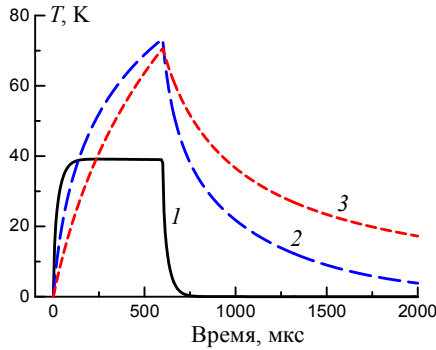


Рис. 1. Зависимость температуры кристалла в точке $x = y = 0$ от времени при $T_0 = 100$ К (1), 200 К (2) и 300 К (3); $N = 2.8 \cdot 10^{11}$, $r_p = 1.2$ мм.

Температура ΔT_1 уменьшается с уменьшением поглощения μ и энергии импульса Q_p , а также с увеличением радиуса импульса r_1 . С увеличением температуры T_0 от 100 К до 600 К теплоемкость алмаза типа Па увеличивается почти в 50 раз, а теплопроводность уменьшается в 11 раз [8]. Поэтому температура ΔT_1 уменьшается тоже почти в 50 раз, однако одновременно с этим резко увеличивается время остывания τ_T (от 1.4 мкс до 730 мкс) и уменьшается критическая температура ΔT_c . Ясно, что для уменьшения времени τ_T и увеличения ΔT_c

желательно работать при низких температурах. При $T_0 \geq 100$ К времена теплообмена τ_T на 1-3 порядка превышают интервалы времени $\Delta t_0 \approx 0.22$ мкс между импульсами в пачке, однако τ_T много больше интервала времени 0.1 с между пачками, что приводит к практически полному остыванию кристалла к моменту прихода следующей пачки (рис. 1).

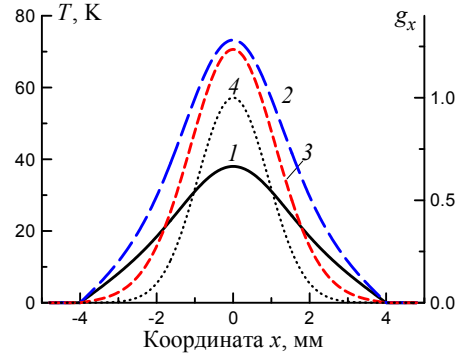


Рис. 2. Пространственное распределение температуры $T(x, 0, 600$ мкс) при $T_0 = 100$ К (1), 200 К (2) и 300 К (3); 4 – профиль интенсивности падающего импульса g_x (правая шкала)

Важно подчеркнуть, что при $T_0 = 100$ К температура кристалла практически не зависит от времени в течение падения импульсов (кривая 1 на рис. 1), что объясняется быстрым оттоком тепла к границе с термостатом (рис. 2). Так как $T_{\max} = 38$ К $<$ $\Delta T_c = 75$ К, то в отражении будут участвовать все облучаемые области кристалла. Для сравнения укажем, что при $T_0 = 300$ К ситуация обратная: $T_{\max} = 71$ К \gg $\Delta T_c = 4$ К.

Рассмотрим дифракцию случайных импульсов РЛСЭ в кристалле с пространственно-неоднородным и зависящим от времени распределением температуры $T(\mathbf{r}, t)$. Амплитуды отраженных (R) и прошедших (T) импульсов на поверхности кристалла определяются соотношением

$$A_C(\mathbf{r}, t) = \iint A_s(\Omega) B_s(\mathbf{q}) C(\alpha) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r} - i\Omega t) d\mathbf{q} d\Omega, \quad (8)$$

где $C(\alpha) = R, T$ – амплитудные коэффициенты дифракционного отражения и прохождения, $A_s(\Omega)$ и $B_s(\mathbf{q})$ – частотный и угловой спектры излучения на выходе из РЛСЭ. Величина $\alpha = [k^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{h})^2] / k^2$ описывает локальное отклонение от точного условия Брэгга $\alpha = 0$, где \mathbf{h} – вектор обратной решетки, $h = 2\pi/d$, d – межплоскостные расстояния, $k = (\omega_0 + \Omega)/c$. Область “сильного” дифракционного отражения определяется условием $|\alpha| \leq 2|\chi_h|$, где χ_h – фурье-компонента поляризуемости кристалла. Так как из-за линейного расширения величина d зависит от температуры $T(\mathbf{r}, t)$, то α является функцией координат и времени, а также зависит от угловой отстройки $\Delta\theta = \theta - \theta_B$, от частоты Ω в

энергетическом спектре падающего импульса и от его угловой расходимости q/k_0 :

$$\alpha = 2\sin 2\theta_B [\Delta\theta + (\Omega/\omega_0 + \alpha_T T) \operatorname{tg}\theta_B - q/k_0]. \quad (9)$$

Интегрирование в (8) и процедура вычисления интенсивностей R - и T -импульсов $I_C = \langle |A_C|^2 \rangle$ существенным образом зависят от когерентных свойств импульсов РЛСЭ (подробнее см. в [9]). В итоге получим, что

$$I_C(\mathbf{r}, t) = I_0(\mathbf{r}) I_s(t) \int |C(\alpha)|^2 G(\Omega) d\Omega, \quad (10)$$

где $G(\Omega)$ - спектральная плотность случайных импульсов РЛСЭ, $I_0(\mathbf{r}) = |B(\mathbf{r}, z)|^2$ - интенсивность падающего импульса, $I_s(t) = \langle |A_s(t)|^2 \rangle$.

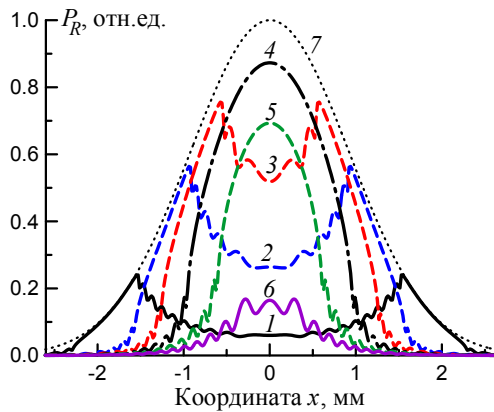


Рис. 3. Интегральные коэффициенты отражения $P_R(x)$ при $\varepsilon = -2$ (1), -3 (2), -3.5 (3), -4 (4), -4.5 (5) и $\varepsilon = -5$ (6); 7 – профиль интенсивности $I_0(x, 0, z)$, $T_0 = 200$ К, $t = 600$ мкс.

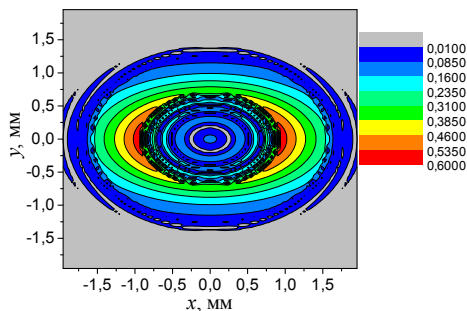


Рис. 4. Карта распределения интенсивности отражения $I_R(x, y)$ в области спектра $\varepsilon = -3$ в конце падения пачки импульсов ($t = 600$ мкс).

Интенсивности R - и T -импульсов зависят от времени, координаты и спектральной отстройки $\varepsilon = \Omega/\Delta\Omega_B$, где $\Delta\Omega_B = \omega_0 |\chi_h| / \sin^2 \theta_B$ – спектральная ширина отражения от идеального кристалла (рис. 2, 3).

Наличие неоднородного температурного поля $T(x, y, t)$ приводит к уменьшению интегрального (по x, y и t) коэффициента

прохождения, к его уширению, асимметрии и к смещению минимума в отрицательную область спектра (рис. 5). С уменьшением температур T_0 и T_{\max} (например, за счет уменьшения энергии импульсов Q_p) коэффициент прохождения приближается к таковому для совершенного кристалла, что позволяет реализовать процедуру self-seeding (см. в [4]) для кардинального повышения степени временной когерентности импульсов РЛСЭ.

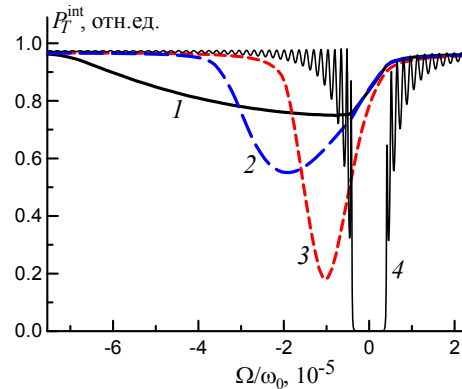


Рис. 5. Интегральные кривые дифракционного прохождения при начальных температурах кристалла $T_0 = 300$ К (1), 200 К (2) и 150 К (3); 4 – кривая прохождения для идеального кристалла.

Таким образом, в настоящей работе показано, что использование кристаллов синтетического алмаза типа Па с низкой начальной температурой позволяет существенно уменьшить влияние неоднородного и нестационарного нагрева кристалла на дифракцию импульсов РЛСЭ.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 10-02-00768, № 12-02-00924) и BMBF Project 05K10CHG.

- [1] Tschentscher Th., XFEL, EU TN-2011-001, Hamburg, Germany (2011).
- [2] Бушуев В.А., Изв. РАН. Сер. физ., 69, 1710 (2005).
- [3] Bushuev V.A., J. Synchr. Rad., 15, 495 (2008).
- [4] Geloni G., Kocharyan V., Saldin E. Report DESY 10-053, Hamburg, Germany (2010).
- [5] Bushuev V.A., Samoylova L., Nucl. Instrum. Methods A., 635, S19 (2011).
- [6] Бушуев В.А., Самойлова Л., Кристаллография, 56, 876 (2011).
- [7] Бушуев В.А., Самойлова Л., Изв. РАН. Сер. физ., 76, 180 (2012).
- [8] Новиков Н.В., Кочержинский Ю.А., Шульман Л.А. и др. Физические свойства алмаза. Справочник, Киев: Наукова думка, 1987.
- [9] Бушуев В.А., Изв. РАН. Сер. физ., 77 (2013) (принята в печать).

Особенности формирования когерентных фемтосекундных импульсов при дифракционном прохождении излучения рентгеновского лазера на свободных электронах в геометрии Брэгга

В. А. Бушув¹, Л. Самойлова²

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²European XFEL GmbH, 22607 Hamburg, Germany

e-mail: vabushuev@yandex.ru

Излучение рентгеновского лазера на свободных электронах (РЛСЭ) основано на явлении самоусиливающейся спонтанной эмиссии фотонов сгустками релятивистских электронов (банчами) в протяженном ондуляторе. В этой схеме РЛСЭ представляет собой, фактически, однопроходный усилитель спонтанного шума (или лазер с несинхронизированными модами). Это приводит к весьма низкой степени временной когерентности испускаемых импульсов ($\tau_c \ll \tau_p$) и к большой спектральной ширине излучения $\Delta E/E \sim 10^{-3}$, где $\tau_c \sim 0.2$ фс – время когерентности, $\tau_p \sim 10-100$ фс – длительность импульсов [1]. Импульсы РЛСЭ состоят из случайно расположенных субимпульсов (спайков) со случайной фазой, с длительностью $\approx \tau_c$ и средним интервалом времени между ними $\approx 0.3-0.4$ фс.

Для уменьшения ширины спектра до уровня $\Delta E/E \sim 10^{-5}$ в [2] предложены различные четырех- и однокристалльные схемы, расположенные в промежутке между двумя ондуляторами, что позволяет реализовать так называемый режим самоотбора (self-seeding) и более качественную лазерную генерацию. Следует, однако, отметить, что какой-либо анализ функции временной когерентности импульсов, прошедших через кристалл в геометрии Брэгга, в [2] не проводился.

В настоящей работе на основе статистической волновой теории дифракции показано, как после прохождения падающего слабо когерентного импульса, практически не ослабленного по сравнению с падающим импульсом, с некоторой временной задержкой (несколько десятков или сотен фемтосекунд) происходит высвечивание из кристалла слабого излучения (с интенсивностью $\sim 10^{-3}-10^{-4}$ от интенсивности падающего импульса), имеющего вид затухающего “хвоста” с осцилляциями. Это излучение является практически когерентным. Время его когерентности составляет десятки фемтосекунд, что на два порядка превышает типичное время когерентности падающих импульсов.

Пусть на плоскопараллельный кристалл с толщиной l , расположенный в геометрии Брэгга, падает слаборасходящийся импульс XFEL (рис. 1) с амплитудой $A(t)$, длительностью τ_p и

произвольным временем когерентности τ_c . Необходимо найти зависимость интенсивности прошедшего импульса $I_T(t)$ от времени, а также функцию временной когерентности $\gamma_T(t, \tau)$ в различные моменты времени t .

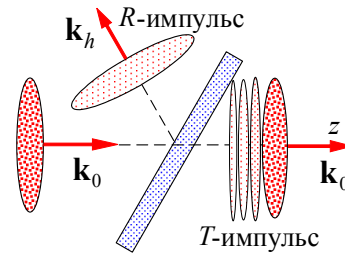


Рис. 1. Схематическое изображение дифракционного отражения и прохождения импульса в геометрии Брэгга. Запаздывающий слабоинтенсивный “хвост” T-импульса показан с помощью ослабленного штрихового заполнения.

Интенсивность и статистические свойства T-импульса определяются временной корреляционной функцией

$$\Gamma_T(t, \tau) = \langle A_T(t) A_T^*(t + \tau) \rangle, \quad (1)$$

$$\text{где } A_T(t) = \int_{-\infty}^{\infty} T(\Omega) A(\Omega) \exp[-i\varphi(\Omega, t)] d\Omega \quad (2)$$

- амплитуда прошедшего импульса, $A(\Omega)$ – спектральная амплитуда падающего импульса, $T(\Omega)$ – амплитудный коэффициент прохождения; $\Omega = \omega - \omega_0$, ω_0 – центральная частота, фаза $\varphi(\Omega, t) = \Omega \cdot (t - z/c)$. Так как амплитуда $A(t)$ случайная, то $A(\Omega)$ в (2) также является случайной функцией. Интенсивность прошедшего импульса $I_T(t) = \Gamma_T(t, 0)$. Подстановка (2) в (1) приводит к

$$\Gamma_T(t, \tau) = \iint g(\Omega, \Omega') T(\Omega) T^*(\Omega') \Phi(\Omega, \Omega'; t, \tau) d\Omega d\Omega', \quad (3)$$

где $g(\Omega, \Omega') = \langle A(\Omega) A^*(\Omega') \rangle$ – спектральная корреляционная функция падающего импульса, $\Phi(\Omega, \Omega'; t, \tau) = \exp[-i\varphi(\Omega, t) + i\varphi(\Omega', t + \tau)]$. Энергетический спектр падающего импульса определяется соотношением $S(\Omega) = \langle |A(\Omega)|^2 \rangle = g(\Omega, \Omega)$. Формулы (1)-(3) позволяют найти функцию временной когерентности прошедшего импульса:

$$\gamma_T(t, \tau) = |\Gamma_T(t, \tau)| / [I_T(t)I_T(t + \tau)]^{1/2}. \quad (4)$$

В случае импульсов с длительностью $\tau_p \gg \tau_c$ амплитуда $A(t) = F(t)a(t)$, где $F(t)$ – медленно меняющаяся огибающая, $a(t)$ – случайный стационарный процесс с $\langle a(t) \rangle = 0$ и функцией временной когерентности $\gamma(\tau) = \langle a(t)a^*(t + \tau) \rangle$. Для такого процесса $\langle a(\Omega)a^*(\Omega') \rangle = G(\Omega)\delta(\Omega - \Omega')$, где $G(\Omega)$ – спектральная плотность:

$$G(\Omega) = (1/2\pi) \int \gamma(\tau) \exp(-i\Omega\tau) d\tau. \quad (5)$$

В итоге для спектральной корреляционной функции $g(\Omega, \Omega')$ в (3) получим, что

$$g(\Omega, \Omega') = \int F(\Omega - \Omega_1) F^*(\Omega' - \Omega_1) G(\Omega_1) d\Omega_1, \quad (6)$$

где $F(\Omega)$ и $a(\Omega)$ – фурье-амплитуды огибающей $F(t)$ и сигнала $a(t)$ (подробнее см. в [3, 4]).

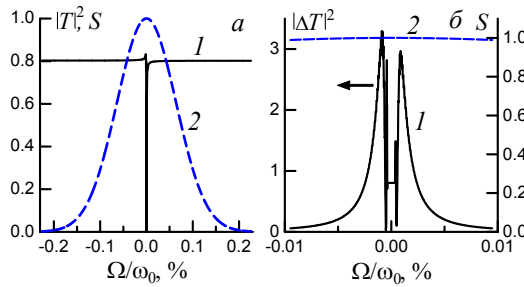


Рис. 2. *a* - коэффициент прохождения $|T(\Omega)|^2$ (1) и спектр падающего импульса $S(\Omega)$ (2) в зависимости от частоты; *b* - функции $|\Delta T(\Omega)|^2$ (1) и $S(\Omega)$ (2). Параметры: $\lambda = 0.15$ нм, $\tau_p = 0.15$ фс, кристалл алмаза, отражение (400), $l = 100$ мкм.

Перейдем к обсуждению. Соотношение (3) для корреляционной функции $\Gamma_T(t, \tau)$ является общим, справедливым при любых соотношениях между τ_p и τ_c . Рассмотрим вначале простейший предельный случай $\tau_c \gg \tau_p$, т.е. падающий импульс является практически полностью когерентным. Тогда функции $A(t)$ и $A(\Omega)$ можно считать полностью детерминированными и интенсивность проходящего импульса определяется непосредственно из (2) просто как квадрат модуля амплитуды: $I_T(t) = |A_T(t)|^2$. Структура этого выражения очень простая: под знаком интеграла (2) стоит произведение двух функций – $A(\Omega)$ и $T(\Omega)$. Коэффициент прохождения $T(\Omega)$ для кристаллов с $l > 10$ -20 мкм имеет глубокий узкий провал в интервале $|\Omega| \leq \Delta\Omega_B$ и при увеличении $|\Omega|$ стремится к постоянной величине $T_\infty = T(|\Omega| \gg \Delta\Omega_B)$, где $\Delta\Omega_B$ – спектральная ширина брэгговского отражения. Если падающий импульс короткий ($\tau_p \sim 0.1$ -10 фс), то ширина его спектра $\Delta\Omega_p \approx 1/\tau_p$ превышает $\Delta\Omega_B$ на 1-2 порядка (рис. 2а).

Для упрощения процедуры вычисления интегралов в бесконечных пределах используется

следующий простой прием: представим коэффициент прохождения в виде $T(\Omega) = T_\infty + \Delta T(\Omega)$. Удобство этого метода состоит в том, что величина T_∞ является константой, которую можно выносить из-под знака интеграла, а функция $\Delta T(\Omega)$ отлична от нуля лишь в области сравнительно малых частот $|\Omega| < (20 \div 50) \times \Delta\Omega_B$ (рис. 2б). Видно, что главная информация об особенностях дифракционного прохождения содержится в узком спектральном интервале $dE/E < 0.005$.

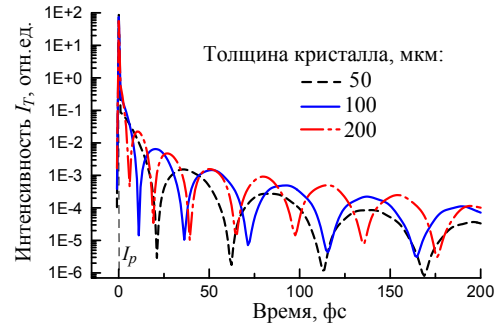


Рис. 3. Интенсивности импульсов $I_T(t)$, прошедших через кристаллы с различной толщиной.

На рис. 3 приведен расчет интенсивности прошедшего импульса при падении на кристалл одного сверхкороткого когерентного импульса (спайка) с длительностью $\tau_p = 0.15$ фс. В данном масштабе времени этот импульс представляет собой практически δ -функцию (см. вертикальную “кривую” $I_p(t)$). Область спектра вне провала на кривой прохождения (рис. 2а) приводит к формированию “быстрого” импульса $I_T(t) \approx I_p(t)|T_\infty|^2$, совпадающего по форме с падающим. Так как в окрестности брэгговского условия $\Omega = 0$ в кристалле существуют две волны с разными амплитудами и с разными законами дисперсии, т.е. с разными эффективными показателями преломления и, соответственно, с разными фазовыми и групповыми скоростями, то в результате из кристалла эти волны выходят с некоторыми запаздываниями и формируют характерный “хвост” с осцилляциями (рис. 3). С увеличением толщины кристалла период осцилляций задержанных во времени “хвостов” уменьшается, а интенсивность излучения несколько увеличивается. Характерную длительность задержанного импульса τ_T и период осцилляций можно оценить как $\tau_T \approx \tau_B = 2/\Delta\Omega_B$. В данном случае $\tau_B = 21$ фс, что неплохо согласуется с данными на рис. 3 для толстого ($l = 200$ мкм) кристалла.

Рассмотрим теперь случай, когда время когерентности много меньше длительности импульса, т.е. $\tau_c \ll \tau_p$. Именно эта ситуация характерна для частично когерентных случайных импульсов XFEL. Ширина спектра $\Delta\Omega_p \approx 2/\tau_c$ такого квазистационарного импульса определяется временем когерентности τ_c . Очевидно, что время τ_c и

связанная с ним ширина спектра фактически определяются средней длительностью спайков.

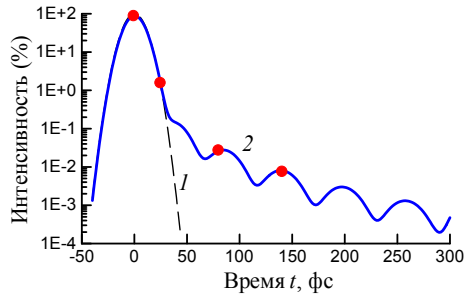


Рис. 4. Временная зависимость T -импульса $I_T(t)$ (2) при падении на кристалл с толщиной 50 мкм импульса XFEL $I_p(t)$ (1) с длительностью 20 фс и временем когерентности 0.22 фс.

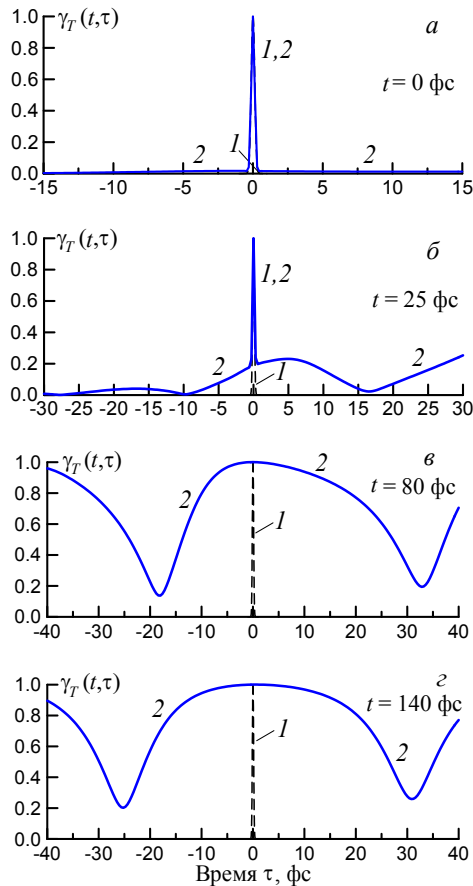


Рис. 5. Функции временной когерентности падающего (кривые 1) и прошедшего (кривые 2) импульсов в различные моменты времени t .

Статистические свойства нестационарного T -импульса не подчиняются известной теореме Винера-Хинчина. По этой причине функция когерентности $\gamma_T(t, \tau)$ зависит не только от разности $\tau = t - t'$, но и от времени t , в окрестности которого рассматриваются статистические свойства

прошедшего импульса. Следует особенно подчеркнуть, что интенсивность $I_T(t)$ не является суммой интенсивностей случайной совокупности импульсов прошедших спайков, а определяется более сложным соотношением (3).

На рис. 4 изображена временная зависимость прошедшего импульса. Кругами показаны моменты времени, для которых вычислялись функции временной когерентности (см. рис. 5): в максимуме прошедшего импульса ($t = 0$), на его склоне ($t = 25$ фс), и в области задержанного “хвоста” ($t = 80$ фс и 140 фс), где интенсивность падающего импульса уже практически нулевая.

Из рис. 5а видно, что функция $\gamma_T(0, \tau)$ практически совпадает с узкой ($\tau_c = 0.22$ фс) исходной функцией когерентности, т.е. в этой области проходящий импульс является практически некогерентным. С увеличением времени (рис. 5б) роль некогерентного вклада склона падающего импульса уменьшается, растет роль близкого к когерентному сложению амплитуд на “хвостах” спайков. Четко видно, как увеличились боковые “крылья” и возросла их ширина, что свидетельствует об увеличении степени когерентности прошедшего импульса. Одновременно с этим видно, что “память” о некогерентном падающем импульсе еще осталась (см. острый “клюв” (максимум) с шириной, примерно равной τ_c).

В области $t > 50$ фс, где $I_p(t) = 0$ (рис. 4), время когерентности прошедшего импульса превышает несколько десятков фемтосекунд (рис. 5в, г), т.е. излучение становится почти полностью когерентным. В отличие от $\gamma(\tau)$, функция $\gamma_T(t, \tau)$ становится несимметричной, помимо максимума при $\tau = 0$ имеются еще широкие максимумы и минимумы, вызванные интерференцией практически когерентных волн на “хвостах”. Из анализа (3) следует, что функция $\Gamma_T(t, \tau)$ описывает когерентный вклад от “хвостов” спайков, так как из-за множителя $\Delta T(\Omega)\Delta T^*(\Omega')$ основной вклад в (3) дают низкочастотные компоненты спектра падающего импульса. Иными словами, именно эта часть интеграла (3) описывает монохроматизацию задержанного импульса за счет “удаления” из спектра высокочастотных компонент.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 10-02-00768, № 12-02-00924) и BMBF Project 05K10CHG.

[1] Tschentscher Th. // XFEL. EU TN-2011-001. 2011. P. 1.

[2] Geloni G., Kocharyan V., Saldin E. // Report DESY 10-053. Hamburg, Germany, 2010. P. 1.

[3] Bushuev V.A., Samoylova L., Nucl. Instrum. Methods A., 635, S19 (2011).

[4] Бушуев В.А., Самойлова Л., Кристаллография, 56, 876 (2011).

Оптические преобразования для когерентной отражательной микроскопии скользящего падения

И. А. Артюков, А.С.Бусаров, А.В.Виноградов, Н.Л. Попов¹

¹Институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

e-mail: vinograd@sci.lebedev.ru

Разработка лабораторных рентгеновских лазеров и рентгеновских источников на основе ускорителей 3-го и 4-го поколений делает доступным когерентное рентгеновское излучение для широкого круга исследователей и множества приложений. Когерентное излучение позволяет использовать для безлинзового построения изображения (ПИ) метод восстановления фазы и довести разрешение до одной длины волны, снизить радиационную нагрузку на исследуемые образцы, заснять дифракционный паттерн с субпикосекундной экспозицией и многое другое. Теоретические основы для когерентного рентгеновского ПИ, включая теорию распространения Френеля и метод восстановления фазы, хорошо разработаны и обычно применяются для прозрачных объектов [1,2]. Однако, многие объекты непрозрачны и не могут быть изучены в режиме пропускания. Поэтому существует потребность в методах когерентного рентгеновского ПИ для режима отражения [3-5]. В этих работах модифицированный дифракционный интеграл Кирхгоффа применяется для безлинзового ПИ от наклонно освещенного предмета при отражении. Другой подход, основанный на приближении параболического волнового уравнения (ПВУ)

$$2ik \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (1)$$

$$u(x, z) = e^{-ikz} E(x, z),$$

изложен в работах [6-9]. В настоящей работе мы расширяем этот подход для ПИ наклонного объекта с помощью идеальной линзы.

Теория дифракции Френеля дает следующую формулу для распределения поля в пространстве (ξ, ζ) за линзой [10]:

$$u(\xi, \zeta) = c(\xi, \zeta) \int_{-1}^1 dx u_0(x) \exp \left\{ \frac{ik}{2} \left[x^2 - \frac{(x^2 + \zeta^2)}{f} \right] \right\} \quad (2)$$

$$c(\xi, \zeta) = \frac{1}{\zeta} + \frac{1}{\zeta'} = \frac{1}{f}$$

$$c(\xi, \zeta) = \sqrt{\frac{k}{2\pi i \zeta}} \frac{\exp \left(\frac{ik\zeta^2}{2f} \right)}{\sqrt{\frac{1}{\zeta} - \frac{1}{\zeta'}}} \quad (3)$$

где ζ' оптически сопряжено с ζ , f - фокусное расстояние идеальной линзы, представляющей собой фазовый множитель $T(x) = \exp(-ikx^2/2f)$, $u_0(x)$ – начальное распределение поля. Важно, что поле $u_0(x)$ взято в (2) на плоскости нормальной к волновому вектору \mathbf{k} (Рис.1).

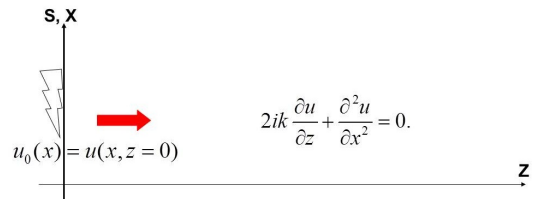


Рис. 1. Дифракция Френеля.

При $\zeta \rightarrow \zeta'$ формула (2) переходит в

$$u(\xi) = \frac{\exp \left\{ \frac{ik\xi^2}{2f} \left(\frac{1}{M} + 1 \right) \right\}}{iM} u_0 \left(-\frac{\xi}{M} \right), M = \frac{\zeta'}{\zeta} \quad (4)$$

т.е. представляет собой увеличенное и перевернутое изображение объекта $u_0(x)$ [10]. Предположим теперь что объект наклонен к оптической оси на угол θ (Рис.2).

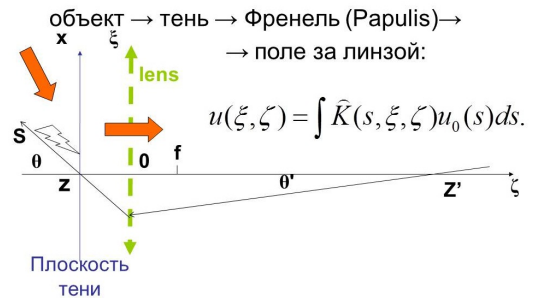


Рис. 2. Построение наклонного объекта с помощью линзы.

Тогда, как показано в [8,9], поле в вертикальной плоскости («тень»), расположенной на правом краю объекта, дается формулой

$$u(x) = \sqrt{\frac{k}{2\pi i \cos \theta}} x \int_0^x ds \frac{u_0(s)}{s^2} \exp \left\{ \frac{ik(x-s) \sin^2 \theta}{2s \cos \theta} \right\}, x > 0 \quad (5)$$

$$u_0(x) = 0, x < 0$$

где s – координата вдоль объекта. Формула (5) при $x \gg 0$ является точным решением ПВУ (1), а при $x < 0$ – разумным приближением для поля ограниченного краем $s = 0$ объекта. Она обобщает интеграл Френеля, позволяя найти поле в плоскости тени от наклонного объекта $u_0(x)$. Для того чтобы найти поле от наклонного объекта за линзой нужно подставить (5) в (2) и проинтегрировать по x вдоль плоскости тени.

$$u(\xi, \zeta) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k(\zeta)}{s \cos \theta}} \exp \left\{ \frac{ik\zeta^2}{2f} \left[\frac{1}{\zeta} - \frac{1}{\zeta'} \right] \right\} \int_0^{\xi} ds \frac{u_0(s)}{s^2} \exp \left\{ \frac{ik(x-s) \sin^2 \theta}{2s \cos \theta} \right\} F(\eta) \exp(i\eta^2)$$

$$\frac{1}{\zeta(\zeta')} = \frac{1}{\zeta} - \frac{1}{\zeta'}, \quad A(s) = \frac{1}{s} \frac{1}{\zeta(\zeta')} + \frac{1}{s \cos \theta} = \frac{\zeta\zeta' - \zeta(x+\zeta)}{s^2(\zeta'\zeta - \zeta^2)} + \frac{1}{s \cos \theta}$$

$$F(\eta) = \exp(-\eta^2) - \eta \sqrt{\pi} (1 - \Phi(\eta)), \quad \Phi(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\eta \exp(-t^2) dt \quad (6)$$

$$u = \frac{f \cdot I(\xi)}{z^2} + \dots \quad v(\xi) = f \sqrt{\frac{ik}{2A(\xi)}} \quad (7)$$

Малая положительная добавка $\gamma \rightarrow 0$ введена для того, чтобы обеспечить сходимость интеграла. Выражение (6) можно использовать для нахождения поля излучения в произвольной точке пространства (ξ, ζ) за линзой.

Возникает естественный вопрос: как нужно расположить детектор, для того чтобы получить наиболее четкое изображение? Интуитивный ответ: наилучшее подобие между изображением и объектом достигается, когда детектор находится на оптически сопряженной плоскости (Рис.2). Для точек (ξ, ζ) на этой плоскости выполнены соотношения:

$$\xi = (z - z') \tan \theta', \quad \eta = \frac{z}{z'} \tan \theta', \quad \xi' = z' \sin \theta', \quad \zeta = z' - z' \cos \theta' \quad (8)$$

Подстановка (8) в (6) и (7) приводит к выражению:

$$u(\xi') = -\frac{e^{i\pi}}{2\pi} \sqrt{\frac{ik \cos \theta'}{z' \cos \theta'}} \exp\left\{-\frac{ikz' \sin^2 \theta'}{2 \cos \theta'}\right\} \int \frac{u_0(\xi)}{\sqrt{z' z - z'^2 - \eta^2}} \exp\left\{\frac{ikz' \sin^2 \theta'}{2 \cos \theta'}\right\} \quad (9)$$

$$s^*(s') = \frac{z z' \sin \theta'}{z' \sin \theta - z' \sin(\theta + \theta')}$$

Где s^* - прообраз точки s' . Формула (9) дает поле $u(s')$ в плоскости детектора для заданного поля объекта $u_0(s)$. Она обобщает формулу (4) на случай наклонного объекта. Качественное различие между (4) и (9) в том, что для наклонного объекта в общем случае не существует подобия между изображением $(|u(s')|^2)$ и объектом $(|u_0(s)|^2)$. При $\theta \rightarrow \pi/2$ аргумент экспоненты в интеграле (9) большой и можно использовать соотношение:

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \frac{e^{i\pi x}}{z - x - iy} = 2i\pi \delta(x).$$

Тогда формула (9) упрощается:

$$u(\xi') = \sqrt{\frac{ik \cos \theta'}{z' \cos \theta'}} \exp\left\{\frac{ikz' \sin^2 \theta'}{2 \cos \theta'}\right\} u_0(s') \quad (10)$$

Формулы (4) и (10) обладают общими свойствами: а) интенсивность распределения поля объекта $|u_0(s)|^2$ воспроизводится с некоторым масштабированием в плоскости детектора и б) фазовый множитель зависит только от геометрии оптической схемы и не зависит от структуры поля на объекте $u_0(s)$. в) Общая формула (9) этими свойствами не обладает. Безразмерный параметр $\Phi = 2\lambda \cos \theta / a \sin^2 \theta$, отвечающий за переход от (9) к (10), уже вводился ранее в [7]. Таким образом, для $\Phi \ll 1$, что означает нормальное падение излучения на объект, и длину волны $\lambda = 2\pi/k$ малую по сравнению с характерным размером a мы приходим к формуле (10), представляющую собой приближение параксиальной геометрической оптики. При $\theta \approx \pi/2$ (9) трансформируется точно в (4). В

противоположном случае $\Phi \gg 1$, маленькие a и θ , формула (9) переходит в:

$$u(\xi') = -\frac{e^{i\pi}}{2\pi} \sqrt{\frac{ik \cos \theta'}{z' \cos \theta'}} \exp\left\{-\frac{ikz' \sin^2 \theta'}{2 \cos \theta'}\right\} \left[\int \frac{u_0(s')}{\sqrt{z' z - z'^2 - \eta^2}} + \int \frac{u_0(s) \sin \theta}{\sqrt{z' z - z'^2 - \eta^2}} \right] \quad (11)$$

состоящую из двух частей. Первая часть – локальная воспроизводит форму объекта, вторая часть – интегральная приводит к размыванию изображения. Таким образом, изображение наклонного объекта не только искажается, но и размывается.

Для того чтобы продемонстрировать полученные результаты были проведены численные эксперименты с параметрами оптической схемы близкими к тем, которые используются в экспериментах с лабораторными рентгеновскими лазерами: длина волны 10 нм, фокусное расстояние 1 мм, числовая апертура 0.5 (бесконечность), расстояние от объекта до линзы и от детектора до линзы 2 мм, ширина всего изображения 460 мкм. В качестве объекта использовался фрактальный шаблон в котором изображены числа, значение которых равно их собственной высоте в тысячных долях от ширины всего объекта. На Рис.3 приведено сравнение изображений, полученных при двух разных малых углах скольжения $\theta = 0.1$ и $\theta = 0.01$ (на врезках показаны части изображений вчетверо меньшего размера). Это сравнение показывает, что изображение мелких деталей остается узнаваемым вплоть до очень малых углов скольжения и чем меньше угол, тем более оно размыто.

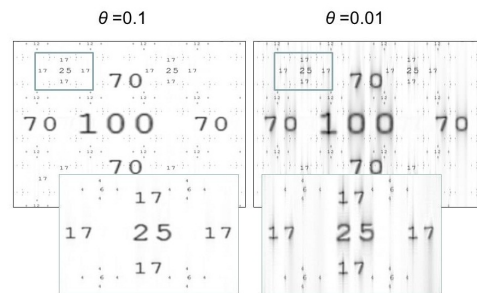


Рис. 3. Сравнение изображения для двух углов скольжения 0.1 и 0.01 рад. Полная ширина каждой картинке 460 мкм.

Основные выводы таковы: а) когерентное изображение наклонного объекта наблюдается в оптически сопряженной плоскости, б) качество изображения зависит от безразмерного параметра $\Phi = 2\lambda \cos \theta / a \sin^2 \theta$, где a – характерный размер, θ – угол скольжения, в) расчеты показывают, что сходство между изображением и объектом сохраняется вплоть до очень малых углов скольжения (линза идеальная).

[1] Paganin, D. M.: Coherent X-ray Optic, Clarendon Press, Oxford, 2005.

- [2] Nugent, K.: 'Coherent methods in the X-ray sciences', *Advances in Physics*, 59, 1, 1–99, 2010.
- [3] Fenter, F., Park, C., Kohli, V. and Zhang, Z.: 'Image contrast in X-ray reflection interface microscopy: comparison of data with model calculations and simulations', *J. Synchrotron Rad.*, 15, 558-571, 2008.
- [4] Marathe, S., Kim, S. S., Kim, S. N., Kim, C., Kang, H. C., Nickles, P. V. and Noh, D. Y.: 'Coherent diffraction surface imaging in reflection geometry', *Optics Express*, 18, 7253-7262, 2010.
- [5] Roy, S., Parks, D., Seu, K. A., Su, R., Turner, J. J., Chao, W., Anderson, E. H., Cabrini, S. and Kevan, S. D.: 'Lensless X-ray imaging in reflection geometry', *Nature Photonics*, 5, 243–245, 2011.
- [6] Artyukov, I. A., Popov, A. V., Vinogradov, A. V.: 'Wave field transformation at coherent imaging of a flat reflection mask', *Proc. SPIE*, 745114, 2009.
- [7] Artyukov, I. A., Mitrofanov, A. N., Popov, A. V., Vinogradov, A. V.: 'Theory and computation towards coherent reflection imaging of tilted objects', *X-ray Lasers 2010: Proceedings of the 12th International Conference on X-ray Lasers*, Springer-Verlag, Berlin & Heidelberg, 329-340, 2010.
- [8] Artyukov, I. A., Mikhailov, S. I., Popov, N.L., Vinogradov, A. V.: 'Theoretical study of coherent reflection imaging at grazing angles', *Proc. SPIE*, 81400V, 2011.
- [9] Artyukov, I. A., Vinogradov, A. V., Popov, N.L., Seleznev, V.N.: 'Simulation of grazing-incidence coherent imaging', *Quantum Electronics*, 42,2,140-142, 2012.
- [10] Papoulis, A.: 'Systems and Transforms With Applications in Optics', McGraw-Hill, New-York, 1968.
- [11] Vinogradov, A. V., Popov, A. V., Kopylov, Yu.V., Kurokhtin, A.N.: 'Numerical Simulation of X-ray diffractive Optics', A&B Publishing House, Moscow, 1999.

Многослойные зеркала на основе структуры Sb/B₄C ($\lambda \approx 8.5$ нм)

Е. А. Вишняков^{1,2}, Д. Л. Воронов³, Э. М. Гулликсон³, В. В. Кондратенко⁴,
И. А. Копылец⁴, М. С. Лугинин^{1,2}, Е. Н. Рагозин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

²Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Москва, Россия

³Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, USA

⁴Национальный технический университет «Харьковский политехнический институт», Харьков, Украина

e-mail: juk301@mail.ru, eavish@mail.ru, enragozin@gmail.com

С момента создания первого многослойного рентгеновского зеркала и проведения тщательного и последовательного анализа его свойств прошло уже более 30 лет [1,2]. За это время были освоены методы расчета многослойных структур (МС) в широком диапазоне длин волн в вакуумной ультрафиолетовой (ВУФ) и мягкой рентгеновской (МР) области спектра. Многослойные зеркала (МЗ) нормального падения быстро стали популярными, так как позволяют строить приборы с меньшими абберациями, чем в схемах скользящего падения.

С точки зрения синтеза сегодня лучше всего освоен диапазон длин волн 13-30 нм, в котором изготовление периодических зеркал давно стало технологией [3,4]. Основной парой материалов для таких МЗ являются Mo/Si. Однако в последнее время все возрастает потребность в МС со специфическими формами спектральной кривой отражения МЗ, в том числе и на длинах волн короче 13 нм [5]. Из-за наличия L-края поглощения в Si на длине волны $\lambda = 12.5$ нм пара Mo/Si оказывается несостоятельной в более коротковолновой области спектра, что ставит задачу поиска пар материалов, более подходящих для работы в этом диапазоне.

Как было показано в [6], сурьмосодержащие многослойные покрытия перспективны для создания отражающих МЗ нормального падения для МР диапазона. В частности, МЗ на основе ранее неисследованной структуры Sb/B₄C способны дать достаточно высокие значения коэффициента отражения в области $\lambda < 13$ нм.

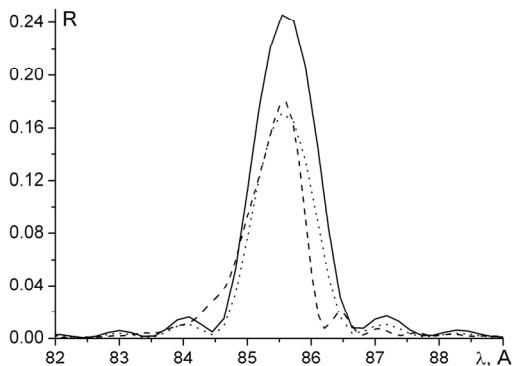


Рис. 1. Спектры отражения МЗ Sb/B₄C: сплошная кривая – расчет с $\rho(\text{Sb}) = 6.9$ г/см³, пунктир – экспериментальное измерение в Беркли, точки – расчет с $\rho(\text{Sb}) = 6.0$ г/см³

В данной работе на основе структуры Sb/B₄C были рассчитаны и синтезированы первые образцы периодических МЗ с максимумом отражения на длине волны $\lambda \approx 8.5$ нм. МС Sb/B₄C были нанесены на вогнутые подложки из кристаллического кварца (радиус кривизны $R = 467$ мм, диаметр апертуры 50.8 мм). Данные МЗ были изготовлены методом магнетронного напыления в НТУ «Харьковский политехнический институт». Число слоев в каждой синтезированной МС $N = 150$.

Один из пилотных образцов синтезированных МС был направлен в Беркли для абсолютных измерений спектрального профиля коэффициента отражения МЗ. Результаты измерений в Беркли, наряду с теоретическими расчетами с учетом различных значений возможной плотности сурьмы после магнетронного напыления, приведены на Рис. 1. Теоретический расчет с меньшим значением плотности сурьмы был проведен после сравнения экспериментального графика и первоначального расчета. Измерения в Беркли были проведены с использованием синхротронного источника МР излучения.

Еще два образца синтезированных МЗ были направлены в ФИАН. Характеризация отражающих свойств синтезированных МЗ проводилась с использованием стигматического (изображающего) дифракционного спектрографа [4], фокусирующим элементом в котором служило исследуемое МЗ. Спектрограф [7] собирался на оптическом столе в вакуумной камере ИКАР и включал в себя входную щель, исследуемое МЗ, затем широкоапертурную дифракционную решетку (ДР) на пропускание (5000 штр./мм) и детектор (Рис. 2). В качестве детектора была использована вогнутая кассета радиусом кривизны $R = 167$ мм с рентгеновской фотоэмульсией УФ-4.

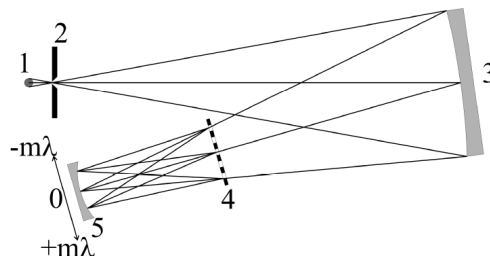


Рис. 2. Схема МР спектрографа: 1 – источник, 2 – входная щель, 3 – МЗ, 4 – ДР, 5 – детектор.

Источником МР излучения в схеме на Рис. 2 служила лазерная плазма, образующаяся при фокусировке наносекундных импульсов лазера на кристалле ортоалюмината иттрия, легированного неодимом (Nd:YAlO_3 , $\lambda = 1.08$ мкм, 0.5 Дж, 6 нс), на вращающуюся вольфрамовую мишень. Причина выбора вольфрама в качестве мишени лежит в его высоком атомном номере, вследствие чего МР излучение получаемой плазмы представляет собой квазинепрерывный спектр с интенсивностью, плавно изменяющейся в диапазоне длин волн 2–35 нм [8,9]. Это позволяет использовать МР излучение вольфрамовой плазмы для исследований в достаточно широком спектральном диапазоне. Лазерный пучок фокусировался на мишени в пятно с эффективной площадью $S_{\text{эф}} \sim 10^{-5}$ см² с помощью линзы из тяжелого флинта с фокусом $f = 75$ мм. Максимальная интенсивность лазерного излучения в центре фокального пятна составляла $\sim 10^{13}$ Вт/см².

Источник МР излучения и детектор в схеме на Рис. 2 находились в слегка нероуладновской установке: расстояние от входной щели до МЗ составляло 500 мм, а от МЗ до детектора – 434 мм. Расстояние от середины входной щели до центра детектора было 90 мм. Таким образом, отражение от МЗ происходило при небольших (~ 0.1 рад) углах падения, в результате чего аберрации схемы были малы, и спектральные изображения входной щели, создаваемые на чувствительной поверхности детектора при помощи МЗ, обладали высокой стигматичностью. Обратная линейная дисперсия на детекторе была 20 Å/мм, спектральная ширина входной щели составляла 0.6 Å.

Измерения, проведенные с использованием лазерно-плазменного источника МР излучения, дают следующие результаты: максимальный коэффициент отражения зеркал приходится на $\lambda_{\text{max}} = 8.43 \pm 0.03$ нм, полуширина спектрального максимума отражения $\Delta\lambda = 0.11 \pm 0.02$ нм FWHM. Было также обнаружено, что одно из двух зеркал оказалось нестабильным и через 2 месяца после синтеза потеряло свое оптическое качество. Мы предполагаем, что это связано с худшей адгезией у сурьмы к кварцевой подложке, чем у карбида бора. МЗ, направленные в ФИАН, были напылены на магнетроне в одном эксперименте, и единственное, чем они отличались, был первый слой в МС. Спектр отражения стабильного МЗ, зарегистрированный при помощи МР спектрографа с использованием излучения лазерной плазмы вольфрама, приведен на Рис. 3. Пятна на фотопленке сверху и снизу от основных дифракционных максимумов $\lambda \approx 8.5$ нм (в скрещенном направлении к направлению основной дисперсии) соответствуют дифракции излучения на поддерживающей структуре ДР 5000 штр./мм. Участок квазинепрерывного спектра, заполняющий на пленке область между нулевым и первыми дифракционными максимумами, как мы полагаем, соответствует одной из поляризаций ближнего ИК излучения, испытывавшего дифракцию на тонкой

поддерживающей структуре ДР (период 150 мкм) после прохождения через нее со значительно меньшим затуханием, чем вторая поляризация.

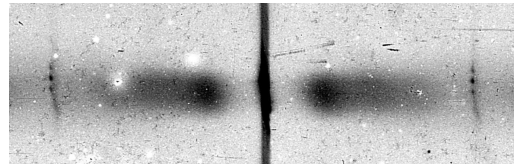


Рис. 3. Спектр отражения МЗ Sb/B₄C, снятый с использованием излучения лазерной плазмы.

- [1] Spiller E., Appl. Phys. Lett., 20 (9), 365 (1972).
- [2] Виноградов А.В., Зельдович Б.Я., Оптика и спектроскопия, 42 (4), 709 (1977).
- [3] Андреев С.С., Гапонов С.В., Гусев С.А., Зуев С.Ю., Клоенков Е.Б., Прохоров К.А., Полушкин Н.И., Садова Е.Н., Салашенко Н.Н., Суслов Л.А., Haidl M.N., Поверхность, 1, 66 (2001).
- [4] Вишняков Е.А., Медников К.Н., Перцов А.А., Рагозин Е.Н., Рева А.А., Ульянов А.С., Шестов С.В., Квантовая электроника, 39 (5), 474 (2009).
- [5] Вишняков Е.А., Каменец Ф.Ф., Кондратенко В.В., Лугинин М.С., Панченко А.В., Першин Ю.П., Пирожков А.С., Рагозин Е.Н., Квантовая электроника, 42 (2), 143 (2012).
- [6] Вишняков Е.А., Лугинин М.С., Пирожков А.С., Рагозин Е.Н., Старцев С.А., Квантовая электроника, 41 (1), 75 (2011).
- [7] Житник И.А., Кузин С.В., Митропольский М.М., Рагозин Е.Н., Слемзин В.А., Сухановский В.А., Квантовая электроника, 20, 89 (1993).
- [8] Колачевский Н.Н., Пирожков А.С., Рагозин Е.Н., Квантовая электроника, 25 (9), 843 (1998).
- [9] Henke B.L., Gullikson E.M., Davis J.C., Atomic Data and Nuclear Data Tables, 54 (2), 181 (1993); http://henke.lbl.gov/optical_constants/.

Сравнение модельного и безмодельного подходов к решению обратной задачи рефлектометрии

Ю.О. Волков¹, И.В. Кожевников¹, Б.С. Рошин¹, Е.О. Филатова², В.Е. Асадчиков¹

¹Институт кристаллографии РАН, Москва, Россия

²Институт физики СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: neko.cryst@gmail.com

Существенное преимущество применения рентгеновской рефлектометрии к исследованию многослойных плёночных структур заключено в высокой чувствительности кривой отражения даже к малейшим особенностям внутренней структуры изучаемого образца. Однако задача извлечения информации о структуре по данным рефлектометрии (т.н. обратная задача) по ряду причин фундаментально неоднозначна [1].

В настоящее время разработано множество различных подходов к решению обратной задачи рентгеновской рефлектометрии. В данной работе рассматриваются три подхода: простейший, основанный на параметрической модели; стохастический подход на основе максимума энтропии [2]; и, наконец, „безмодельный“ подход на основе экстраполяции амплитудного коэффициента отражения в область больших углов скольжения [3].

В основе модельного подхода лежит численная оптимизация сравнительно простой параметрической модели, которая строится на основе общей информации об исследуемой структуре, известной априори. Оптимизация проводится путём подгонки моделируемой кривой отражения $R_{sim}(\theta)$ к экспериментальной кривой $R_{exp}(\theta)$ до сходимости невязки между ними в пределах экспериментальной ошибки:

$$MF = \sqrt{\frac{1}{N} \sum [\log R_{exp}(\theta) - \log R_{sim}(\theta)]^2} \leq \delta R_{exp}$$

где N — количество точек экспериментальной кривой.

Нами рассмотрен алгоритм выбора физически разумной модели, основанный на поэтапном увеличении числа слоёв. Показано, что неоднозначности получаемого решения, вызванная большим количеством локальных минимумов функции невязки, можно избежать, сопоставляя результаты восстановления для однотипных структур, а также используя алгоритмы глобальной численной оптимизации (в частности, имитацию отжига).

Метод максимума энтропии основан на введении дополнительной регуляризационной функции, количественно описывающей степень отклонения найденного решения от некоторой исходной модели:

$$S = \sum_j [\chi_j - m_j - \chi_j \log(\chi_j/m_j)]$$

где χ_j — значение диэлектрической постоянной в j -й точке восстановленного распределения $\chi(z)$, а m_j — значение диэлектрической постоянной в этой же точке для исходной модели.

Нами показано, что применение максимума энтропии с учётом информации, полученной в модельном подходе, позволяет более точно определить особенности изучаемой структуры, не описываемые простой моделью.

„Безмодельный“ подход, рассмотренный в данной работе, основан на определении т.н. точек разрыва n -го порядка — точек, в которых функция $\chi(z)$ либо её (n) -я производная меняются скачком. Количество и порядок точек разрыва, а также расстояния между ними однозначно определяют асимптотику кривой отражения $R(\theta)$ в области больших углов θ . Это позволяет ввести в функцию невязки дополнительной регуляризации, позволяющей выбрать из множества возможных решений лишь то, которое удовлетворяет требуемой асимптотике:

$$Q = Q_1 \sum_{i=2, \dots, N-1} (\chi_{i-1} + \chi_{i+1} - 2\chi_i)^2 + Q_2 \sum_{i=i_1, \dots, i_m} [(\chi_{i+1} - \chi_i)^2 + \chi_i^2]$$

В свою очередь, сведения о количестве, порядке и взаимном расположении точек разрыва могут быть извлечены из Фурье-анализа экспериментальной кривой отражения.

Нами показано, что применение данного подхода эффективно в случаях, когда адекватная модель структуры не может быть определена априори; в частности, для структур с сильно нарушенными границами раздела. Однако этот подход требует тщательного предварительного анализа кривой отражения.

[1] I. W. Hamley, J. S. Pedersen // J. Appl. Cryst. (1994) 27, p. 29.

[2] D. S. Sivia, W. A. Hamilton, G. S. Smith // Physica B (1991) 173, p. 21.

[3] I. V. Kozhevnikov // Nucl. Instr. Meth. A (2003) 508, p. 519.

Формирование глубоких микроструктур методом микропучковой рентгенолитографии

Гольденберг Б.Г., Резникова Е.Ф., Лемзяков А.Г.
Институт ядерной физики им.Г.И.Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия
e-mail: goldenberg@inp.nsk.su

На станции "LIGA" на накопителе ВЭПП-3 Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучения (СЦСТИ) реализован режим работы микропучкового рентгенолитографа – нового устройства для прямого формирования микроструктур в толстых слоях рентгенорезистов, в том числе для изготовления рентгеношаблонов. С использованием специального программного обеспечения, диафрагмированным микропучком синхротронного излучения (СИ), при перемещении подложки векторным образом, непосредственно в слое негативного резиста SU-8 толщиной до 1 мкм, формируется рисунок микроструктуры с произвольно заданной топологией (рис.1).

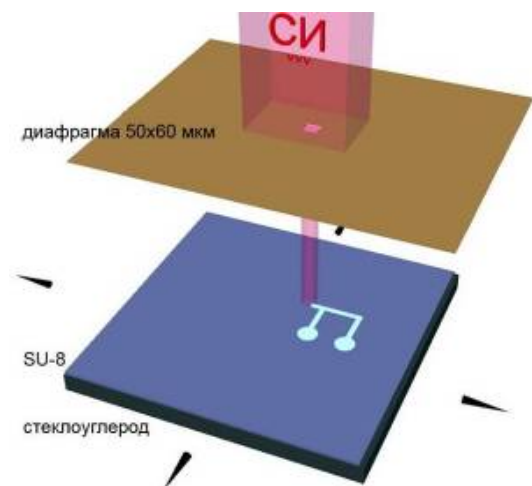


Рис.1. Схема работы микропучкового рентгенолитографа.

На канале №0 вывода СИ из накопителя ВЭПП-3 функционирует станция глубокой рентгенолитографии «LIGA» [2, 4]. Экспериментальный объем станции оснащен двумя независимыми автоматизированными трёх-координатными позиционерами с точностью перемещения 0.1 мкм. Первый позиционер предназначен для размещения в пучке СИ рентгеновской диафрагмы, а второй для перемещения подложки с нанесенным резистом относительно микропучка СИ, сформированного с помощью диафрагмы. Рентгеновская диафрагма была изготовлена по той же технологии, что и рентгеношаблоны [1],

с апертурой 53x63 мкм, поглощающим слоем золота толщиной 20 мкм на подложке из стеклоглерода толщиной 500 мкм. Как известно [2] для формирования структуры в высокочувствительном резисте SU-8 необходима доза поглощенного излучения 10-40 Дж/см³. Соответствующую этой дозе скорость перемещения резиста относительно микропучка рассчитывали для стандартного режима работы накопителя ВЭПП-3 (энергия электронов 2 ГэВ, магнитное поле в точке излучения 20 кГс, ток электронов 100 мА). При указанных выше размерах диафрагмы диапазон скоростей 15 - 50 мкм/сек является оптимальным для перемещений резиста относительно микропучка СИ. Для формирования топологии в резисте SU-8 используются две скорости перемещения подложки с резистом. При скорости 20 мкм/сек доза локального облучения слоя SU-8 составляет 29.6 Дж/см³, а при перемещении со скоростью 20 мм/сек доза поглощенного излучения в тысячу раз меньше, что недостаточно для инициализации процессов полимеризации в резисте SU-8. В результате участки резиста, облученные при малой скорости движения подложки, станут нерастворимыми, тогда как остальной резист будет удален в процессе проявления. Установленный в канале вывода синхротронного излучения радиационный затвор имеет скорость открытия/закрытия порядка 2 секунд и не предназначен для оперативного перекрытия пучка СИ в процессе рисования микроструктур. В течение всего времени экспонирования радиационный затвор открыт, а контроль поглощенной в резисте дозы обеспечивается управлением скоростью перемещения резиста относительно пучка СИ.

Разработано специальное программное обеспечение для прецизионного перемещения подложки с контролем набора дозы. Реализована возможность формирования непрерывных ломаных линий из отрезков прямых. Формирование произвольно заданной топологии структуры осуществляется векторным способом.

Представленный на рис. 2 фрагмент микроструктуры из резиста SU-8 толщиной 29 мкм на стеклоглеродной подложке иллюстрирует возможность формирования микроструктур с гладкими вертикальными стенками. Прямой угол пересечения линий четко сформирован по всей глубине, что недостижимо

методами фотолитографии на слоях толщиной в несколько десятков микрон.

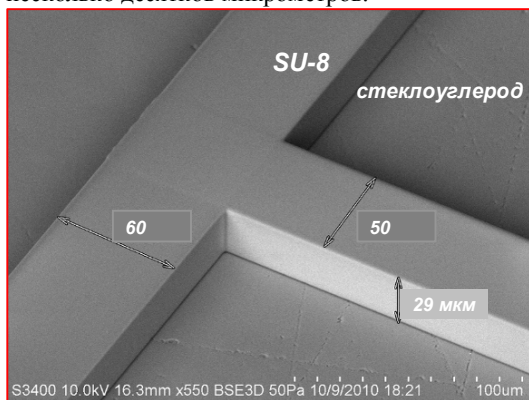


Рис. 2. Фрагмент микроструктуры заготовки рентгеношаблона, сформированной из резиста SU-8 на стеклоуглеродной подложке.

Данный образец является заготовкой рентгеношаблона для последующего изготовления рентгенолитографическим методом микрофлюидных модулей из ПММА. Структура из резиста SU-8 служит маской при гальваническом осаждении на стеклоуглеродную подложку слоя золота толщиной 20 мкм для получения поглощающего рентгеновское излучение, контрастного покрытия.

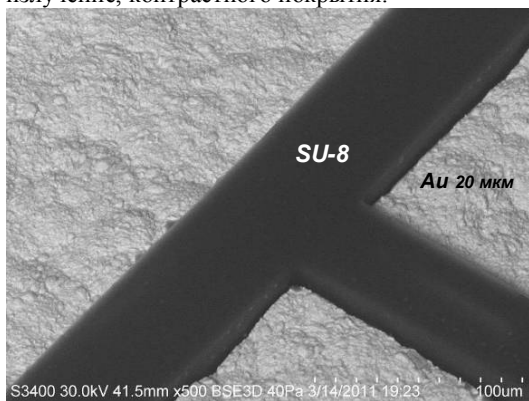


Рис. 3. Фрагмент готового рентгеношаблона.

Рисунок 4 иллюстрирует возможность прямого формирования микроструктур с произвольной топологией и с вертикальными гладкими стенками в очень глубоких резистивных слоях. В слое SU-8 толщиной 740 мкм микропучком СИ был нарисован логотип ИЯФ СО РАН. Скорость рисования 20 мкм/сек, ширина линий рисунка 53 мкм, металлическая подложка – монета.

Оборудование станции «LIGA» позволяет формировать микроструктуры площадью до 10x10 см². Это ограничение определяется диапазоном перемещения координатных позиционеров.

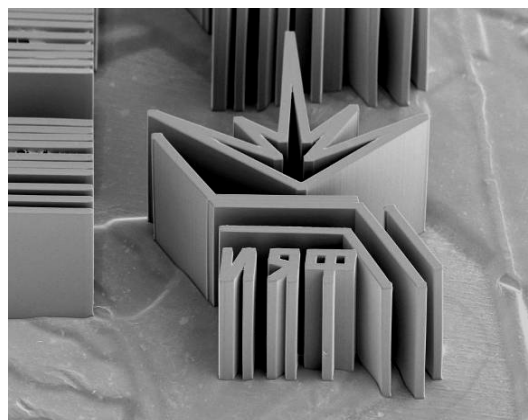


Рис.4. Пример созданной суперглубокой микроструктуры из SU-8.

Нужно учитывать, что длительность процесса формирования структуры складывается из времени необходимого для прохождения полной длины всех элементов рисунка со скоростью 20-50 мкм/сек. Для примера, время формирования логотипа (Рис.4) составляет около 10 минут при токе в накопителе 100 мА. В настоящее время минимальный размер элементов определяется используемой рентгеновской диафрагмой 53x63 мкм.

С развитием микропучкового рентгенолитографа в СЦСТИ появилась возможность оперативного изготовления рентгеношаблонов для глубокой рентгеновской литографии с различными экспериментальными топологиями – такими как микрофлюидные модули, сеточные элементы для фильтрации терагерцового излучения и т.п. Изготовлены образцы глубоких микроструктур из негативного резиста SU-8 и рентгеношаблоны с 20 мкм поглощающим слоем золота для глубокой рентгенолитографии в спектральном диапазоне СИ 1-3 Å.

[1] Б.Г. Гольденберг. «Создание LIGA-технологического комплекса на источнике синхротронного излучения ВЭПП-3». Дис. канд. техн. наук. Новосибирск, 2011, 146 страниц.

[2] Reznikova E, Mohr J, Boerner M, Nazmov V, Jakobs P-J, "Soft X-ray lithography of high aspect ratio SU8 submicron structures", *Microsystem Technologies* 14 (2008) 1683-1688.

[3] Lorenz, H., M. Despont, N. Fahrni, N. LaBianca, P. Renaud, and P. Vettiger. SU-8: A low-cost negative resist for MEMS. *Journal of Micromechanics and Microengineering*, 1997. 7(3): p. 121-124.

Об использовании нелинейной модели роста тонких пленок для строгого анализа интенсивности рентгеновского рассеяния на шероховатых и профилированных поверхностях

Д. И. Горай,^{1,2} М. Н. Лубов^{1,3}

¹Санкт-Петербургский академический университет РАН, ул. Хлопина, 8/3, СПб, 194021, Россия

²Институт аналитического приборостроения РАН, Рижский пр. 26, СПб, 190103, Россия

³Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе РАН, Политехническая ул., 26, СПб, 194021, Россия
e-mail: lig@pcgrate.com

На сегодняшний день тонкие пленки играют все большее значение в оптике и нанoeлектронике. Пленки могут быть разной природы: монокристаллические, поликристаллические, аморфные, органические и т.д. Характеристики создаваемых на их основе устройств существенным образом зависят как от мелкомасштабного (шероховатости), так и от крупномасштабного (геометрии профиля) рельефа пленки [1]. Следовательно, изучение особенностей временной и статистической эволюции профилей тонких пленок представляет одно из наиболее важных направлений в физике конденсированного состояния.

Следует отметить, что для исследования эволюции профиля тонких пленок широко используются микроскопические методы, такие как ПЭМ, РЭМ, АСМ, БСОМ и др. Большинство из них являются дорогостоящими, локальными и дают возможность изучать процесс роста лишь косвенно – по характеристикам получившейся структуры, не позволяя непосредственно изучать сам процесс. Одним из наиболее перспективных и универсальных подходов при изучении морфологии и состава тонких пленок является рефлектометрия (скаттерометрия), в т.ч. коротковолновая, позволяющая интегрально и более точно определять характеристики нанорельефа практически любых тонкопленочных материалов [2]. Особенно целесообразным нам представляется комплексный теоретический подход, во многом заменяющий эксперимент и позволяющий рассчитывать как эволюцию профиля тонкой пленки, так и ее оптический отклик методом рентгеновской рефлектометрии.

Исследуемые пленки могут состоять из слоев различных материалов с интерфейсами, имеющими периодические, квазипериодические и/или случайные компоненты. Основой для предлагаемого метода диагностики является строгий метод граничных интегральных уравнений, разработанный для решения прямых и обратных задач рассеяния и пригодный для точного анализа абсолютной интенсивности коротковолнового рассеяния на случайно-шероховатых и решеточных структурах с произвольным профилем границ [3,4]. Впервые

нами предлагается использовать в качестве начального приближения при решении плохо-обусловленной и неоднозначно-разрешимой обратной задачи рассеяния результаты моделирования роста пленки для восстановления морфологии и/или состава пленки. Это позволяет сделать решение обратной задачи устойчивым и однозначным и частично избавиться от проведения затратных экспериментальных исследований. Целью настоящей работы является получение количественной информации об эволюции роста протяженных и крупномасштабных рельефов, получаемых, в первую очередь, методами магнетронного осаждения.

Существует три основных подхода к расчету роста неоднородной поверхности: дискретный (метод кинетического Монте-Карло), континуальный (непрерывный) и расчет методами молекулярной динамики (классической и ab-initio) [5-7]. В первом подходе задаются все возможные на поверхности процессы (осаждение, диффузия, испарение, встраивание атомов в пленку и т.д.) и их скорости (вероятности наступления событий), затем в соответствии с заданными процессами моделируется эволюция системы.

Во втором подходе (континуальном) изменение высоты профиля h во времени t описывается кинетическим уравнением массопереноса, в котором учитываются различные физические процессы.

Третий подход основан на расчетах элементарных процессов, происходящих на осаждаемой поверхности и вблизи нее. В зависимости от метода динамика системы задается классическими или квантово-химическими потенциалами.

В данной работе для расчета роста пленки используется континуальный подход, который в отличие от методов Монте-Карло и молекулярной динамики позволяет рассматривать эволюцию профиля на больших временных $\sim 10^3$ сек и пространственных ~ 10 мкм масштабах. Кроме того, подобный подход позволяет непосредственно изучить влияние

различных нелинейных эффектов на процесс роста.

В непрерывных моделях роста уравнение эволюции h в точке с радиус-вектором r в зависимости от t имеет следующий вид:

$$\frac{\partial h(\vec{r}, t)}{\partial t} = f(\nabla h(\vec{r}, t), \nabla^2 h(\vec{r}, t), \dots) + \eta(\vec{r}, t). \quad (1)$$

В (1) первый член f описывает релаксацию поверхности пленки – изменение высоты, вызванное стремлением системы (поверхности пленки) перейти в состояние, при котором химический потенциал μ одинаков во всех точках системы. Второй член в (1), $\eta(\vec{r}, t)$, задает величину потока осаждаемых на поверхность атомов. При этом необходимо учитывать, что поток атомов на поверхности не является постоянным во времени t , а изменяется вблизи среднего значения $\langle \eta(\vec{r}, t) \rangle = g(\vec{r})$.

Отметим, что функция f представляет собой сумму линейных $\nabla^n h(\vec{r}, t)$ и нелинейных $\nabla^l \left([\nabla^n h(\vec{r}, t)]^k \right)$ членов, где $l, k, n = 1 \dots N$, (N – натуральное). При рассмотрении эволюции мелкомасштабного рельефа можно считать, что релаксация происходит локально вблизи какой-либо точки, поэтому такой процесс можно описать в линейном приближении. В этом случае функция f может быть представлена несколькими первыми членами разложения f по градиентам высоты, $\nabla^n h(\vec{r}, t)$. При рассмотрении эволюции поверхности, на которой происходит массоперенос между различными частями поверхности (например, диффузия атомов между ступенями) или содержащей крупномасштабный рельеф, необходимо учитывать нелинейные члены в (1).

В работе исследуется эволюция профилей поверхности, содержащих крупномасштабный рельеф при магнетронном осаждении. Примером такой поверхности является Si пилообразная решетка, имеющая следующие параметры: угол блеска 6° , угол при вершине $\sim 110^\circ$, период 100 нм.

Как отмечалось ранее, для описания крупномасштабного рельефа необходимо рассматривать нелинейные члены в (1). Наиболее часто для описания роста пленки при баллистическом осаждении используется нелинейная модель Кардара-Паризи-Жанга (KPZ)[8]:

$$\frac{\partial h(\vec{r}, t)}{\partial t} = v_2 \nabla^2 h(\vec{r}, t) + \xi [\nabla h(\vec{r}, t)]^2 + \eta(\vec{r}, t). \quad (2)$$

В (2) первый член описывает изменение профиля поверхности вследствие релаксации

поверхностного натяжения. Второй член в (2) описывает изменение профиля вследствие латерального роста. Расчет эволюции профиля от t проводился для различных значений параметров v_2 и ξ . На рис. 1 представлено изменение пилообразного профиля во времени для $v_2 = 0.1 \text{ нм}^2$, $\xi = 0.1 \text{ нм}$, времени роста $t_d = 225$ сек. и $g = 0.3 \text{ нм/сек}$. Подобное изменение профиля наблюдается при росте пилообразных решеток с Mo/Si покрытием [9]. Однако оно не является универсальным – в многослойной системе Al/Zr треугольная решетка эволюционирует в синусоидальную [10].

Для описания эволюции профиля из треугольного в синусоидальный нами предложено модифицированное уравнение KPZ:

$$\frac{\partial h(\vec{r}, t)}{\partial t} = v_2 \nabla^2 h(\vec{r}, t) + \xi [\nabla h(\vec{r}, t)]^2 + \eta(\vec{r}, t) - v_4 \nabla^4 h(\vec{r}, t). \quad (3)$$

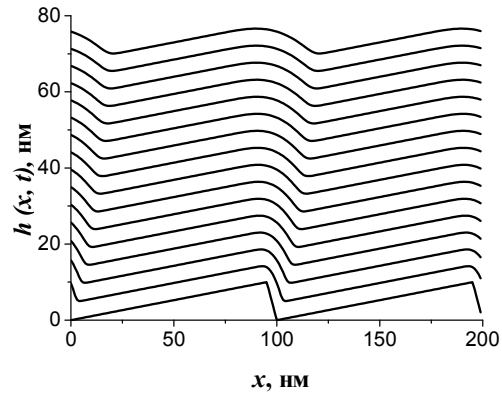


Рис. 1. Пространственно-временная эволюция пилообразного профиля подложки в модели KPZ, $v_2 = 0.1 \text{ нм}^2$, $\xi = 0.1 \text{ нм}$.

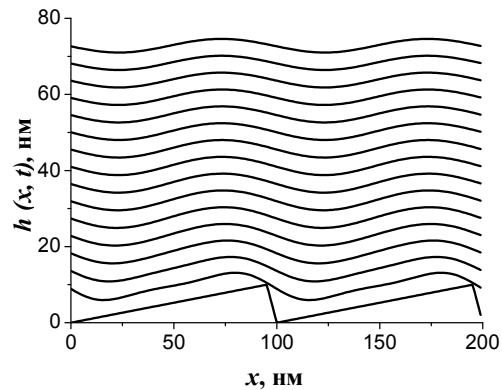


Рис. 2. Пространственно-временная эволюция пилообразного профиля подложки в модифицированной модели KPZ, $v_2 = 0.1 \text{ нм}^2$, $v_4 = 150 \text{ нм}^4$, $\xi = 0.1 \text{ нм}$.

В (3) четвертый член описывает релаксацию профиля вследствие поверхностной диффузии. На рис. 2 представлено изменение пилообразного профиля во времени для $v_2 = 0.1 \text{ нм}^2$, $\xi = 0.1 \text{ нм}$, $v_4 = 150 \text{ нм}^4$, $t_d = 225 \text{ сек.}$, $g = 0.3 \text{ нм/сек.}$

Очевидно, что член $v_4 \nabla^4 h(\vec{r}, t)$ может существенным образом влиять на эволюцию профиля. Как представляется, это связано с тем, что диффузионные потоки слева и справа от вершин треугольника не равны вследствие его несимметричности.

В заключение продемонстрируем влияние структуры границы пленки на интенсивность рассеяния рентгеновского излучения. На рис. 3 представлены расчеты абсолютной интенсивности диффузного отражения Au зеркала в зависимости от скользящего угла рассеяния вблизи критического угла на длине волны $\lambda = 1.54 \text{ нм}$ в ТЕ поляризации. АСМ-измерения свидетельствуют о том, что Au покрытие зеркала имеет заметную грануляцию с характерным диаметром зерен $\sim 30 \text{ нм}$. Для исследования влияния шероховатости зеркала на интенсивность малоуглового рентгеновского рассеяния в расчетах по методу Монте-Карло нами использовано 9 статистических наборов двумерных АСМ-сканов образца с 512 точками каждый на интервале 1 мкм. Для учета сложной структуры шероховатой поверхности и достижения сходимости результатов в программе PCGrate-SXTM v.6.5 [11] использовано число точек коллокации $N = 2000$ на границу. Для сравнения на рис. 3 приведены интенсивности рассеяния сгенерированной Au гауссовой поверхности с СКО шероховатости 1 нм и корреляционной длиной 15 нм, которые наилучшим образом описывают статистику шероховатости измеренного образца. Для набора необходимой статистики и точности расчетов для гауссовой поверхности требуется использовать до 200 статистических наборов и $N = 1200$.

Как следует из приведенных на рис. 3 кривых, интенсивности диффузного отражения образца с реальной статистикой шероховатости значительно превышают аналогичные интенсивности образца с гауссовой шероховатостью в диапазоне скользящих углов рассеяния $\gamma_s = 5 \div 10^\circ$ для обоих рассмотренных углов скольжения падающего излучения: $\gamma = 1^\circ$ и $\gamma = 3^\circ$. Следует отметить, что для интенсивностей зеркального рентгеновского отражения I наблюдается обратная ситуация: для АСМ-измеренной поверхности $I = 74.3\%$, а для усредненной гауссовой поверхности $I = 77.3\%$ при $\gamma = 1^\circ$. Для $\gamma = 3^\circ$, $I = 34.8\%$ и $I = 37.3\%$ соответственно.

В работе показано, что учет определенных линейных и нелинейных членов в непрерывной

модели роста позволяет использовать ее для моделирования сложных рельефов, в т.ч. с большой высотой и скачками градиента. Продемонстрировано, что диффузные и зеркальные интенсивности рентгеновского отражения могут значительно отличаться для реальных профилей границ (полученные путем моделирования роста или из измерений профилей) и сгенерированных гауссовых (например, найденных путем подгонки экспериментальных данных профилей или используемых в простых моделях).

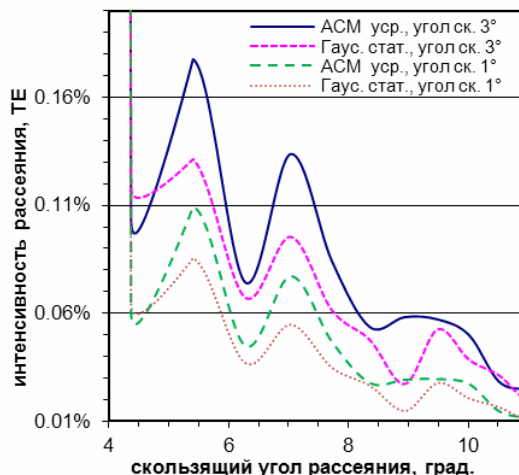


Рис. 3. Интенсивность рассеяния Au зеркал с различной статистикой шероховатости от угла скольжения рассеянного излучения с $\lambda = 1.54 \text{ нм}$.

Авторы благодарны В.В. Ящучку, Д.Л. Воронову и Ю.В. Трушину за предоставленную информацию.

- [1] Smith D.L., Thin-film deposition: principles and practice (McGraw-Hill, 1995).
- [2] Pietsch U., Holy V., Baumbach T., High-Resolution X-Ray Scattering: From Thin Films to Lateral Nanostructures (Springer-Verlag, Heidelberg, 2004).
- [3] Goray L.I., J. Appl. Phys., **108**, 033516 (2010).
- [4] Goray L.I., Waves Random Media, **20**, 569 (2010).
- [5] Pellicione M., Lu T.-M., Evolution of thin film morphology. Modelling and simulations (Springer, Berlin, 2007).
- [6] Haile J.M., Molecular dynamics simulation (Wiley, New York, 1992).
- [7] Jensen F., Introduction to computational chemistry, (Wiley, New York, 2006)
- [8] Kardar M., Parisi G., Zhang Y.-C., Phys. Rev. Lett., **56**, 889 (1986).
- [9] Voronov D.L., Anderson E.H., Cambie R., *et al.*, J. Appl. Phys., **111**, 093521 (2012).
- [10] Voronov D.L., Gawlitza P., Cambie R., *et al.*, Proc. SPIE, **8139**, 81390B (2011).
- [11] <http://www.pcgrate.com>.

Специализированная рентгеновская оптика – от малого фокуса до широкого поля зрения

З. Бжеумихова,¹ О. Шарф² Р. Губжоков¹

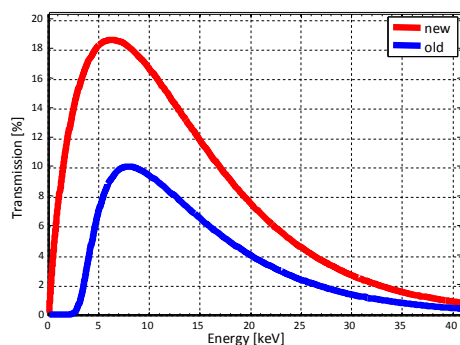
¹IfG – Institute for scientific Instruments, Берлин, Германия

²IAP – Institute for Applied Photonics e.V., Берлин, Германия

e-mail: gubzhokov@ifg-adlershof.de

Рентгеновская капиллярная оптика может применяться в различных рентгеноаналитических методах, например, таких как рентгенофлуоресцентный и рентгенодифракционный методы анализа.

Усовершенствования в технологии изготовления рентгеновской поликапиллярной оптики позволили достичь фокусные пятна в размере до 10 мкм и значительное увеличение трансмиссии в более широком диапазоне энергий. Такая рентгеновская оптика используется для реализации РФА в сканирующем электронном микроскопе.



Для применения рентгеновской поликапиллярной оптики в микро-РФА, было создано иновое поколение оптики с улучшенными физическими параметрами, такими как размер пятна – 10мкм для энергии $Mo_{K\alpha}$ и усилением интенсивности примерно в 10000 раз. Кроме того, была разработана рентгеновская оптика с большей эффективностью в диапазоне энергий 1 – 30 keV.

Для новой рентгеновской CCD камеры, так называемой „full-field color X-ray camera“ (SLcam [1]) необходим новый тип оптики. – это большие (для площади 12 x 12 мм), поликапиллярные, сменные „объективы“ для транспортировки рентгеновских фотонов от исследуемого образца к пикселю с энергетическим разрешением на CCD сенсоре камеры. Такая транспортировка рентгеновских фотонов внутри капилляров позволяет получить изображение исследуемого образца. Таким образом, становится возможным визуализировать распределение химических

элементов в образце, в реальном времени без сканирующей системы.

Параллельная поликапиллярная оптика (Рис.1) позволяет получить изображение 1:1 с разрешением в 50мкм без ограничения глубины резкости. Использование конической поликапиллярной оптики с увеличением в 6 раз позволяет достичь разрешения в 10 мкм.

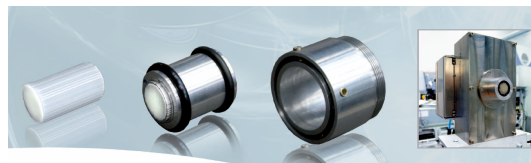


Рис.1 Пример использования параллельной поликапиллярной оптики.

Дальнейшее развитие капиллярной оптики направлено на увеличения эффективности, в частности на уменьшение размеров фокусного пятна и увеличения усиления интенсивности. Такие параметры могут быть гарантированы за счет уменьшения фокального пятна рентгеновского источника и увеличения потока рентгеновского излучения, а так же более высокого качества рентгеновской капиллярной оптики.

Для получения таких результатов в развитии рентгеновской капиллярной оптике, необходимо было решить ряд технологических проблем, для использования капилляров других размеров, другого стеклосырья при изготовлении капилляров.

[1] O. Scharf et al., Analytical Chemistry, Vol. 83 (7), 2011, pp. 2532-2538

Исследования параметров радиационных потоков, возбуждаемых рентгеновскими трубками прострельного типа нового поколения

В.К. Егоров, Е.В. Егоров
ИПТМ РАН, Черноголовка, 142432 Россия
e-mail: Egorov@iptm.ru

Рентгеновские трубки являются основными источниками рентгеновской радиации как в условиях исследовательских, так и заводских лабораторий. Генерация потока рентгеновского излучения в них возникает за счет торможения потока электронов с энергией 10÷50 кэВ в материалах, к которым предъявляются требования высокой электро- и теплопроводности. Конструкции рентгеновских трубок достаточно разнообразны. В то же время среди них могут быть выделены три основные конструкционные типы: устройства с массивным вращающимся или неподвижным анодом [1], так называемые острофокусные трубки [2], а также маломощные миниатюрные приборы «прострельного» типа [3]. Прострельные рентгеновские трубки считаются наиболее эффективными преобразователями энергии потока электронов. Конструкция подобной трубки показана на рисунке 1. В ней потенциал ускорения электронов создается между металлическим торцом 2, служащим анодом, и катодом в форме нити накала 4. Ускоренный поток электронов тормозится в тонкопленочной мишени, нанесенной на бериллиевое окно 1, впаенное в торцевую часть трубки.

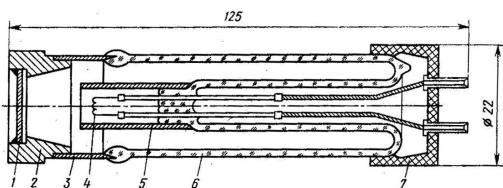


Рисунок 1. Конструкция малогабаритной рентгеновской трубки прострельного типа БХ-1.

1 – Ве окно с пленкой материала мишени; 2 – металлический торец трубки, являющийся анодом; 3 – вставка из кобара; 4 – катодная нить; 5 – фокусирующая вставка; 6 – стеклянная колба трубки; 7 – цоколь трубки.

Возбуждаемое в мишени излучение выходит почти без ослабления через бериллиевое окно. Мощность подобных излучателей не может превышать несколько десятков ватт, вследствие ограниченной возможности теплоотвода с материала мишени. Поэтому трубки этого типа находят ограниченное применение и используются лишь в малогабаритной рентгеновской аппаратуре. В то же время

прострельные рентгеновские трубки вызывают определенный интерес, с одной стороны, вследствие того, что характеризуются пониженным вкладом в генерируемый рентгеновский поток белой составляющей, а с другой – являются модельным объектом, достаточно подробно описанным теоретически [4].

Интенсивность белой компоненты спектра выхода рентгенофлуоресценции при возбуждении потоком электронов тонкой мишени определяется выражением [3,5-7]:

$$I(\varphi) = \frac{e^2 \dot{v}^2}{4\pi c^3 R^2} \frac{\sin^2 \varphi}{(1 - \beta \cos \varphi)^6} \quad (1)$$

где c – скорость света, e – заряд электрона, \dot{v} – значение тормозящего ускорения, R – расстояние до детектора, $\beta = v/c$, φ – угол между направлением распространения потока электронов и положением детектора. Для каждой длины волны, а, следовательно, и значения β зависимость $I(\varphi)$ будет различной. Направление распространения максимальной интенсивности, которое может быть найдено из условия $dI/d\varphi=0$, определяется соотношением:

$$\varphi_{\max} = \arccos \frac{1}{4\beta} \left\{ \sqrt{1 + 24\beta^2} - 1 \right\}$$

Для энергии электронного потока $E_0=31$ кэВ эта величина для фотонов с энергией, близкой к границе возбуждения $\left\{ \lambda_s(A) = 12.4 / E_0(\text{кэВ}) \right\}$

соответствует $\varphi_{(31)}=55^\circ$. При больших энергиях потока электронов значение угла φ_{\max} уменьшается.

Для характеристической компоненты выхода рентгеновской флуоресценции подобные расчеты в литературе отсутствует. Имеются лишь оценки для угловой зависимости вынужденной ядерной гамма-флуоресценции, которая описывается функцией, похожей на выражение (1) [8]. В то же время экспериментальные исследования угловой интенсивности потока, создаваемого прострельными рентгеновскими трубками типа БХ-1 и БС-1, показали широкий угол расходимости $\delta\varphi \sim 60^\circ$ как для белой, так и для характеристической компонент.

В данной работе предполагается проведение систематических исследований эффективности преобразования потока электронов в рентгеновский пучок, а также угловых зависимостей интенсивности для его белой и характеристической компоненты в излучении новой высокоэффективной прострельной трубки ТРМ2-02/40 (Mo) выпускаемой научно-производственным предприятием «Фон» г. Рязань (рис. 2). Предполагается также проведение прямого сопоставления параметров потоков, генерируемых данной трубкой, и стандартным источником БСВ-24 (Mo). Ввод в строй стенда под трубку ТРМ2-02/40 и выполнение систематических исследований ее параметров будет осуществлено в течение 2 квартала 2012 года.

Работа выполняется при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант №08-12-00315).



Рисунок 2. Фотография малогабаритной рентгеновской трубки ТРМ2-02/40 (Mo) прострельного типа мощностью 8 Вт.

- [1] Рентгентехника, справочник в 2х книгах / Под ред. Клюева В.В.. М.: Машиностроение. 1980.
- [2] Пинес Б.Я., Островкусные рентгеновские трубки и прикладной рентгеноструктурный анализ. М.: ГИТТЛ. 1955. 267 стр.
- [3] Боровский И.Б., Физические основы рентгеноспектральных исследований. М.: МГУ. 1956. 463 стр.
- [4] Kirkpatrick P., Wiedmann L., Phys. Rev., **v67**, 321 (1945).
- [5] Блохин М.А., Физика рентгеновских лучей, М.: ГИТТЛ. 1957. 518 стр.
- [6] Agarwal B.K., X-ray Spectroscopy (an introduction), Berlin: Springer-Verlag. 1991. 419 p.
- [7] Павлинский Г.А., Основы физики рентгеновского излучения, М.: Физматлит. 2007. 240 стр.
- [8] Chang C.S.W., Falkof D.L., Phys. Rev., **v76**, 365 (1949).

Особенности рентгенофлуоресцентной элементной диагностики материалов при ионном возбуждении флуоресценции

Е.В. Егоров, В.К. Егоров
ИПТМ РАН, Черноголовка, 142432 Россия
e-mail: Egorov@iptm.ru

Стандартные рентгенофлуоресцентные исследования материалов обычно выполняются в условиях возбуждения вторичной характеристической флуоресценции пучками электронов [1] или потоками жесткого рентгеновского излучения [2]. Использование рентгеновского излучения и пучков электронов средних энергий характеризуется относительной экспериментальной простотой и дешевизной. Особенности этих методов широко описаны в литературе [3,4]. Средства их реализации имеются в исследовательских и заводских лабораториях. В то же время существует весьма эффективный альтернативный способ возбуждения рентгенофлуоресценции потоком легких ионов с энергией $E_0=1\div 2$ МэВ [5-7]. Как и в случае использования электронных пучков, возбуждение рентгенофлуоресценции с помощью потоков ионов нуждается в использовании вакуумных камер. Для генерации высокоэнергетических потоков ионов требуются ускорительные устройства. Кроме того, регистрация выхода вторичного характеристического рентгеновского излучения требует применения специальных средств, защищающих регистрирующие кристаллы рентгеновских детекторов от воздействия рассеянных ионов. Наличие этих факторов существенно усложняет и удорожает метод рентгенофлуоресцентного анализа при ионном возбуждении в сравнении с рентгенофлуоресцентными методами, основанными на взаимодействии с материалом пучков электронов или потоков рентгеновской радиации. Однако метод рентгеновской ионофлуоресценции имеет и ряд преимуществ перед своими стандартными аналитическими аналогами. В отличие от возбуждения пучком электронов ионопучковая генерация характеристического рентгеновского излучения не требует при изучении диэлектриков нанесения поверхностного проводящего слоя, а также характеризуется пониженным значением фоновой составляющей регистрируемого спектра. Однако важнейшим преимуществом возбуждения рентгенофлуоресцентного выхода потоками легких ионов в сравнении с использованием рентгеновских и электронных пучков является повышенное сечение возбуждения флуоресценции легких элементов.

На рисунках 1 [8] и 2 [9] показаны диаграммы, характеризующие параметры сечения возбуждения вторичной рентгенофлуоресценции с помощью пучка протонов с различной энергией и потока излучения $MoK\alpha$.

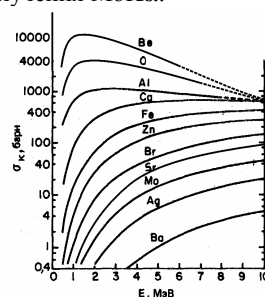


Рисунок 1. Сечения возбуждения выхода рентгеновского излучения $K\alpha$ различных элементов при использовании пучка протонов различной энергии.

На рисунке 1 даны расчетные значения сечения возбуждения $\sigma_{K\alpha}$, выраженные в барнах (10^{-24} см²), как функция энергии пучка протонов, соответствуют соотношению $\sigma_{K\alpha}=\sigma_1\omega_x$, где σ_1 – сечение ионизации, а ω_x – выход флуоресценции [10]. Для значительного числа элементов эти значения подтверждены экспериментально. Приведенные данные показывают, что при использовании пучка протонов с энергией $E_0=1$ МэВ сечение возбуждения флуоресценции линий $AlK\alpha$ окажется приблизительно на 4 порядка выше, чем линии $SrK\alpha$. На рисунке 2 показана зависимость сечения выхода вторичной рентгенофлуоресценции (в относительных единицах) как функция атомного номера возбуждаемого элемента. Сравнение сечений возбуждения тех же элементов показывает для них обратное соотношение, соответствующее приблизительно тем же 4 порядкам. Приведенные данные дают основание ожидать, что использование рентгеновской ионофлуоресценции позволит снизить пределы обнаружения при анализе элементов с малыми атомными массами.

Экспериментальные исследования ожидаемого эффекта были выполнены с использованием вакуумной камеры РОР ионопучковой установки Сокол-3 [11] и макета

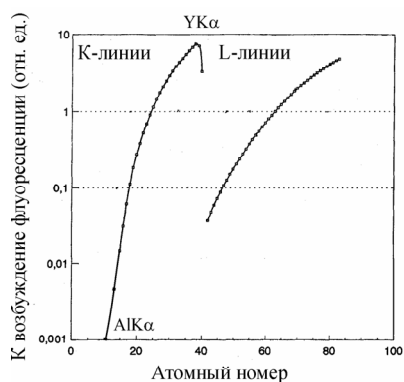


Рисунок 2. Сечения возбуждения выхода рентгеновского излучения $K\alpha$ и $L\alpha$ при использовании пучка рентгеновских лучей $MoK\alpha$.

перестраиваемого РФА – РФА ПВО спектрометра [12]. Камера POP предназначена для двух детекторной регистрации спектров резерфордского обратного рассеяния и получения спектров выхода характеристической рентгеновской флуоресценции при ионном возбуждении. В качестве модельного объекта исследований был выбран монокристалл $SrTiO_3$ в положении случайной ориентации относительно направления распространения возбуждающего потока ионного потока. На рисунке 4 показан спектр POP потока ионов H^+ на поверхности $SrTiO_3$. Аппроксимационная обработка спектра, выполненная с использованием интерактивной программы RUMP [13], показала, что его состав действительно соответствует указанной стехиометрии.

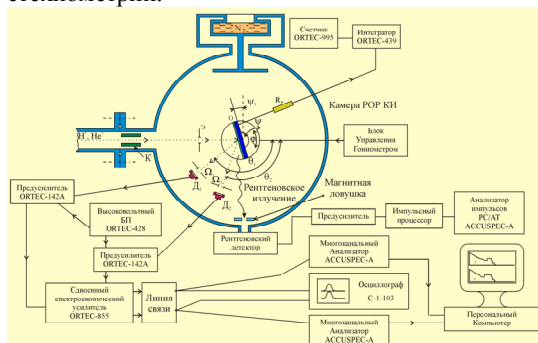


Рисунок 3. Геометрия размещения основных узлов экспериментальной камеры установки Сокол-3 и системы регистрации рассеянных ионов и выхода характеристического рентгеновского излучения.

На рисунке 5 показан спектр выхода характеристической рентгеновской флуоресценции для кристалла $SrTiO_3$ в условиях ее возбуждения пучком протонов с энергией $E_0=1.55$ МэВ. Наблюдаемый спектр состоит из двух интенсивных линий $SrL\alpha$ и $TiK\alpha$. Линия

$SrK\alpha$ имеет едва заметную интенсивность. Слабые линии $FeK\alpha$ и $TaL\alpha\beta$ связаны с наличием в кристалле некоторого количества примесных атомов. Линия $SrL\alpha$ (1.81 кэВ) близка по энергии линии $AlK\alpha$. Экспериментально наблюдаемое соотношение $I(SrL\alpha)/I(SrK\alpha)$ составляет величину 950. Это значение несколько ниже теоретически ожидаемого, поскольку в системе регистрации был задействован детектор XR-100CR фирмы Amptec с относительно толстым Be окном, более чем на 30% снижающий эффективность регистрации линии $SrL\alpha$. Наблюдаемые на рисунке пики характеризуются пониженным энергетическим разрешением. Снижение разрешения от 170 до 290 эВ связано с наличием магнитной ловушки, установленной вблизи детектора, защищающей его от воздействия рассеянных ионов водорода.

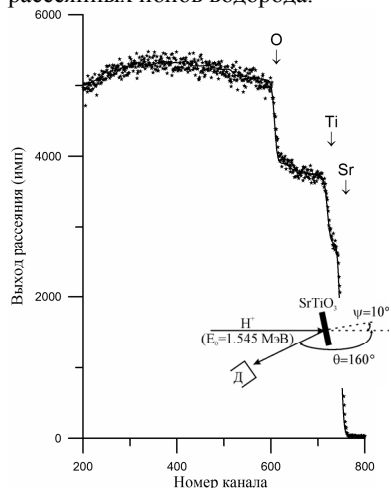


Рисунок 4. Спектр POP H^+ ($E_0=1.545$ МэВ) кристалла $SrTiO_3$ в положении случайной ориентации относительно направления распространения диагностирующего пучка. Энергетическая цена канала $\delta E=1.9$ кэВ/канал.

На рисунке 6 показан спектр выхода вторичной рентгенофлуоресценции для того же кристалла в условиях его возбуждения потоком рентгеновского излучения $MoK\alpha$ ($U=25$ кэВ, $I=10$ мА), сформированным кварцевым волноводом-резонатором с шириной рентгеновской щели 100 нм. Выход флуоресценции фиксировался той же системой регистрации, которая была задействована при ионнопучковом возбуждении. Полученный спектр характеризуется паспортным энергетическим разрешением. Он состоит из интенсивных линий $TiK\alpha$ и $SrK\alpha$, заметных линий $TiK\beta$ и $SrK\beta$, а также линий, соответствующих примесным элементам. В то же время интенсивность линии $SrL\alpha$ почти не видна на уровне фона (она становится различимой в геометрии РФА ПВО). Для данного спектра отношение $I(SrK\alpha)/I(SrL\alpha)$

соответствует значению 11000. В данном случае существенное поглощение мягкой линии спектра привело к некоторому завышению ожидаемого соотношения. Подобные результаты были получены и на ряде других материальных объектов. Приведенные измерения подтвердили высокую относительную эффективность РФА при ионном возбуждении для диагностики в материалах легких элементов.

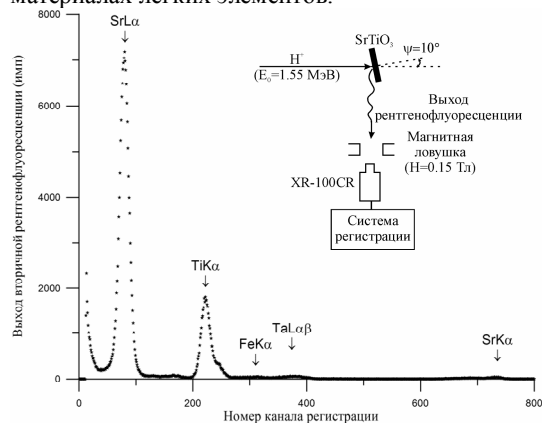


Рисунок 5. Спектр выхода характеристической рентгеновской флуоресценции кристалла SrTiO_3 в условиях ее возбуждения пучком протонов с $E_0=1.55$ МэВ. Энергетическая цена канала $\delta E=20$ эВ/канал.

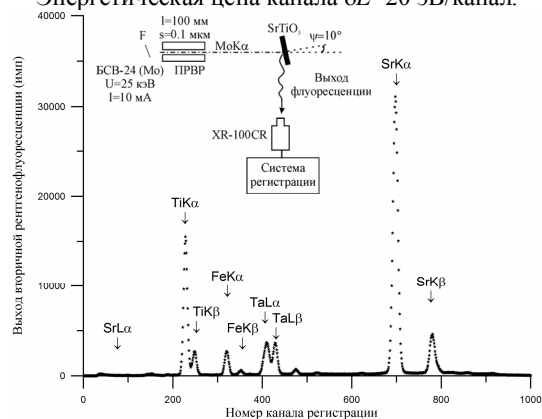


Рисунок 6. Спектр выхода вторичной рентгенофлуоресценции кристалла SrTiO_3 в условиях ее возбуждения потоком $\text{MoK}\alpha$ ($I=4 \cdot 10^5$ фотон/сек). Энергетическая цена канала 20 эВ/канал.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант №08-12-00315).

[1] Рид С.Дж.Б., Электронно-зондовый микроанализ и растровая электронная микроскопия в геологии. М.: Техносфера. 2008. 229 стр.

[2] Боровский И.Б., Физические основы рентгеноспектральных исследований. М.: МГУ. 1956. 463 стр.

[3] Количественный электронно-зондовый микроанализ / под ред. Скотта В., Лава Г. М.: Мир. 1986. 352 стр.

[4] X-ray spectrometry: Recent technological advanced / Ed. by Tsuji K., Injuk J., van Grieken R. Chichester: Wiley. 2004. 603 p.

[5] Коляда М.В., Зайченко А.Н., Дмитриенко Р.В., Рентгеноспектральный анализ с ионным возбуждением. М.: Атомиздат. 1978. 248 стр.

[6] Johansson S.A.E., Campbell J.L., Malqvist K.G., Particle induced x-ray emission spectrometry (PIXE). New York: Wiley. 1995. 451 p.

[7] Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Ташлыков И.С., Неразрушающий анализ поверхностей твердых тел ионными пучками. Минск: Университетское. 1987. 256 стр.

[8] Cahill T.A., Annu. Rev., Nucl. Part. Sci., **v30**, 751 (1980).

[9] Hein M., Hoffmann P., Lie K.H., Orter H.M., Fresenius J. Anal. Chem., **v343**, 760 (1992).

[10] Фельдман Л., Майер Д., Основы анализа поверхности и тонких пленок. М.: Мир. 1989. 342 стр.

[11] Егоров В.К., Егоров Е.В., Материалы 10й международной конференции «Высокие технологии в промышленности России», М.: Техномаш, 82 (2004).

[12] Егоров В.К., Егоров Е.В., Афанасьев М.С., Поверхность (рент. синх. нейтр исследования), **№11**, 34 (2008).

[13] Doolittle L.R., NIM, **B9**, 344 (1985).

Изготовление и исследование сегнетоэлектрических доменных структур в кристаллах LiTaO_3 конгруэнтного, стехиометрического и надстехиометрического состава

Е.В. Емелин,¹ Д.В. Рошупкин,¹ Д.В. Иржак,¹ О.А. Бузанов,² С.Д. Лавров³

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особых чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

²ОАО «ФОМОС Материалс», Москва, Россия

³Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики, Москва, Россия

e-mail: eemelin@iptm.ru

В докладе представлены результаты по исследованию процесса переполаризации сегнетоэлектрического кристалла LiTaO_3 методом прямой электронно-лучевой литографии. Продемонстрирована возможность формирования доменной структуры с шириной доменной от 1 до 10 мкм. Показано, что в 127° Y' -срезе кристалла LiTaO_3 сегнетоэлектрические домены формируются под углом 37° к поверхности кристалла и растут от отрицательной поверхности к положительной поверхности вдоль полярной оси Z .

На рисунке 1 представлена фотография сегнетоэлектрического кристалла LiTaO_3 , выращенного методом Чохральского вдоль полярного направления Z . В силу минимизации энергии выращенный кристалл является полидоменным. Для монодоменизации кристалла его нагревают до температуры Кюри, прикладывают внешнее электрическое поле вдоль полярной оси Z (внешнее электрическое поле превышает значение коэрцитивного поля) и медленно охлаждают до комнатной температуры, осуществляя, таким образом, монодоменизацию синтезированного кристалла.

Для исследования процесса переполаризации кристалла LiTaO_3 были изготовлены пластины 127° Y' -среза (плоскости (104) параллельны поверхности кристалла)

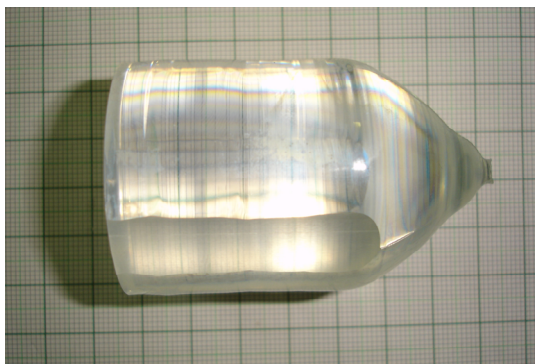


Рис. 1. Кристалл LiTaO_3 выращенный методом Чохральского вдоль оис роста Z .

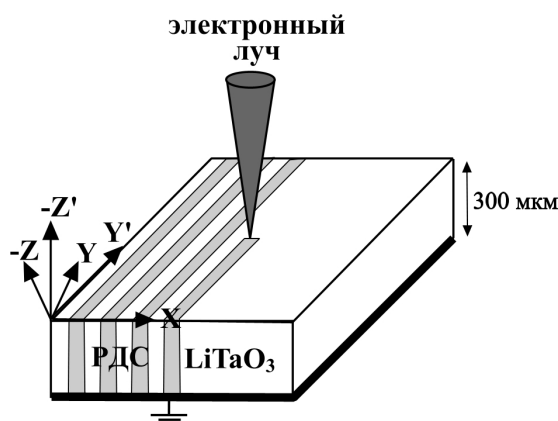


Рис. 1. Схема прямой электронно-лучевой переполаризации 127° Y' -среза кристалла LiTaO_3 .

толщиной 300 мкм с двусторонней полировкой поверхности.

На рис. 2 схематично представлен процесс электронно-лучевой переполаризации 127° Y' -среза кристалла LiTaO_3 . Для исследований были использованы подложки толщиной 300 мкм. В Y' -срезе кристалла LiTaO_3 полярная ось Z составляет 37° с поверхностью подложки. Процесс электронно-лучевой переполаризации осуществляется на $-Z'$ поверхности подложки. На $+Z'$ поверхность подложки напыляется слой Al толщиной 1000 Å и данная поверхность заземляется. Особенностью процесса электронно-лучевой переполаризации кристалла LiTaO_3 является то, что доменная структура прорастает от отрицательной поверхности к положительной поверхности и процесс переполаризации является контролируемым. В кристаллах LiNbO_3 процесс переполаризации осуществляется также путем электронно-лучевой литографии на отрицательной поверхности подложки, а процесс переполаризации начинается с положительной поверхности и идет к отрицательной поверхности.

На рис. 3 представлены доменные

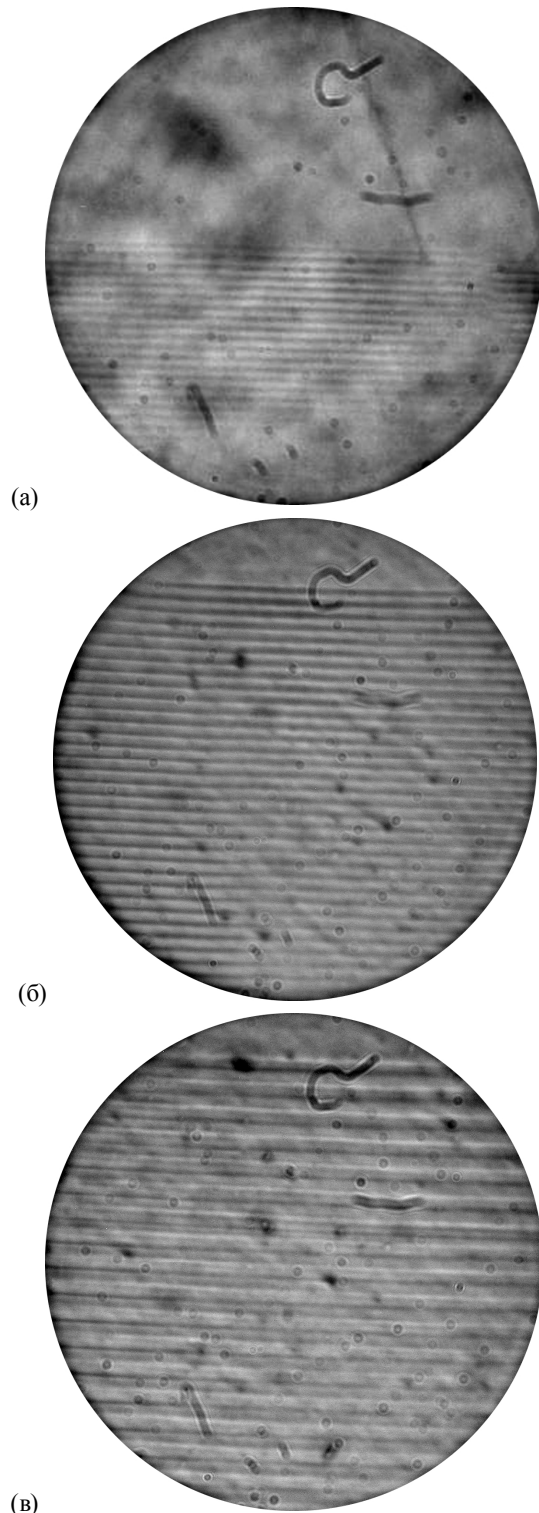


Рис. 3. Сегнетоэлектрические доменные структуры, сформированные методом прямой электронно-лучевой переполаризации в кристалле LiTaO_3 : (а) ширина доменов 1 мкм, (б) ширина доменов 5 мкм, (в) ширина доменов 10 мкм.

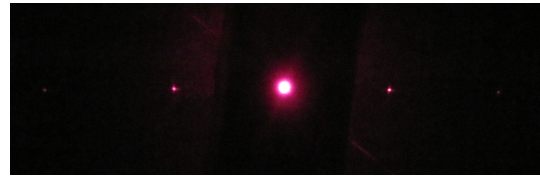


Рис. 4. Дифракция оптического излучения на доменной структуре с шириной доменов 5 мкм.

структуры, сформированные методом электронно-лучевой литографии в $127^\circ Y'$ -среза кристалла LiTaO_3 с шириной домена 1 мкм, 5 мкм и 10 мкм. Площадь доменной структуры составляет 400×400 мкм².

Для исследования сегнетоэлектрических доменных структур были использованы оптические дифракционные методы. На рис. 4 представлена дифракция оптического излучения на сегнетоэлектрической доменной структуре в случае нормального падения. В данном случае доменная структура является эффективной дифракционной решеткой.

Также было проведено исследование процесса генерации второй гармоники (ГВГ) оптического излучения на сегнетоэлектрической доменной структуре с шириной доменов 5 мкм.

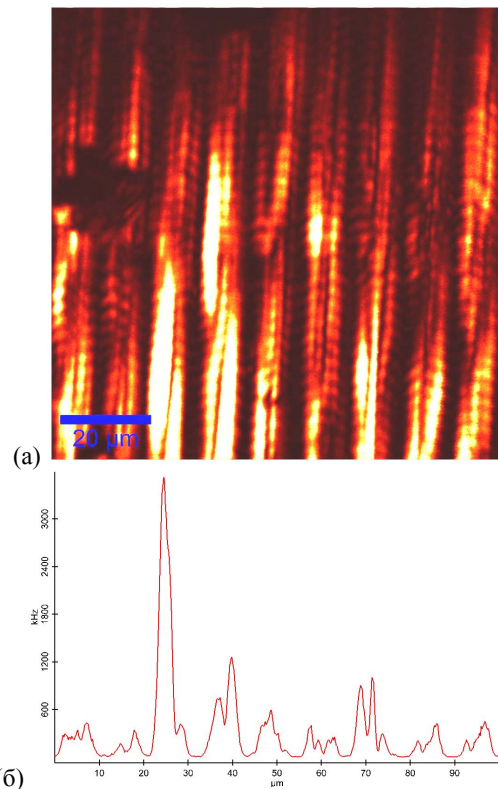


Рис. 5. Генерация второй гармоники оптического излучения с длиной волны 800 нм на доменной структуре в кристалле LiTaO_3 с шириной доменов 5 мкм: двумерное (а) и cross-section (б) распределение выхода второй гармоники оптического излучения.

Для исследования процесса ГВГ был femтосекундный титан-сапфировый лазер с частотой повторения импульсов 100 МГц и шириной импульсов 90 фс. В ходе эксперимента использовалась длина волны накачки, равная 800нм. Средняя выходная мощность излучения составляет 0.3 Вт. Таким образом, сегнетоэлектрические доменные структуры,

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект № 10-02-00117-а).

Измерение независимых пьезоэлектрических и упругих констант кристалла КТГС с использованием метода рентгеновской дифрактометрии

Д.В. Иржак, Д.В. Рощупкин, Р.Р. Фахртдинов

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов Российской академии наук
142432, г. Черноголовка, ул. Академика Осипяна, д. 6
e-mail: irzhak@iptm.ru

Устройства, преобразующие механическую энергию в электрическую и наоборот, действуют на основе прямого или обратного пьезоэлектрического эффекта. В них широко используются такие традиционные материалы, как кварц, ниобат и танталат лития а так же другие материалы. Вместе с тем, даже для таких известных материалов измеренные значения пьезоэлектрических модулей существенно различаются, так как при расчете пьезоэлектрических коэффициентов по результатам измерений используются параметры (скорость распространения ультразвука, упругие константы), которые могут различаться от образца к образцу [1].

Пьезоэлектрический эффект состоит в том, что приложенное к кристаллу электрическое поле вызывает его деформацию (обратный пьезоэффект). Высокая чувствительность рентгеновского излучения к искажениям кристаллической решетки позволяет использовать его для изучения данного явления [2]. С использованием метода трехкристалльной рентгеновской дифрактометрии были проведены измерения пьезоэлектрических констант d_{11} и d_{14} кристалла α -SiO₂ [3]. Определение пьезоэлектрических констант было основано на анализе смещения крутого склона кривой качания кристалла при приложении к нему электрического поля. Измеренные значения пьезоэлектрических констант оказались отличными от значений, приведенных в справочной литературе. В других работах, посвященных измерению компонент пьезоэлектрического тензора так же наблюдалось существенное отличие измеренных с использованием рентгеновских методов констант, от значений, полученных с использованием традиционных методик [4, 5].

В данной работе было продемонстрировано, что измерения пьезоэлектрических констант, основанные на прямом измерении деформации кристаллической решетки при помощи рентгеновского излучения, характеризуются более высокой точностью получаемых результатов. Вместе с тем, для высококачественных кристаллов можно обойтись более простым и доступным методом

рентгеновской дифрактометрии, а именно двухкристалльным методом.

В данной работе представлены результаты измерения компонент пьезоэлектрического тензора кристалла КТГС - галлосиликата тантала-кальция (Ca₃TaGa₃Si₂O₁₄). Кристалл КТГС принадлежит к семейству кристаллов лантан-галлиевого силиката [6]. Для кристаллов группы лантан-галлиевого силиката (группа симметрии 32), тензор пьезомодулей может быть представлен в матричном виде:

$$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

и, таким образом, данный тензор имеет только две независимые компоненты: d_{11} и d_{14} .

В основе метода, использовавшегося для измерения пьезоэлектрических модулей исследуемого кристалла, лежит явление обратного пьезоэлектрического эффекта. Данный эффект выражается в том, что при приложении внешнего электрического поля к пьезоэлектрическому кристаллу, он испытывает деформацию, описываемую следующим выражением:

$$r_{jk} = d_{ijk}E_i \quad (2),$$

где d_{ijk} - компоненты тензора пьезомодулей, E_i — компоненты вектора напряженности электрического поля. В определенных кристаллографических направлениях приложение внешнего электрического поля будет вызывать деформации сжатия или растяжения. Этим деформациям соответствуют изменения межплоскостных расстояний в кристалле, которое может быть измерено с использованием метода рентгеновской дифрактометрии по изменению положения максимума брэгговского пика. Выражение (3) связывает изменение углового положения максимума брэгговского пика с изменением межплоскостного расстояния:

$$\delta\Theta = -\operatorname{tg}(\Theta) \cdot \Delta d/d \quad (3),$$

где $\Delta d/d$ - изменение межплоскостного расстояния, Θ - угол Брэгга, $\delta\Theta$ - изменение углового положения брэгговского максимума.

Если к пластине X-среза (вырезанной перпендикулярно кристаллографической оси X) исследуемого кристалла приложить некоторое электрическое напряжение, то тензор деформации, согласно выражению (2), в исходной системе координат будет иметь следующий вид:

$$\begin{pmatrix} r_{11} & 0 & 0 \\ 0 & -r_{11} & r_{23} \\ 0 & r_{23} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где

$$r_{11} = d_{11} \cdot V/D; r_{23} = d_{14} \cdot V/D,$$

V – приложенное электрическое напряжение, D – толщина монокристаллической пластинки в направлении X.

Величина r_{11} соответствует изменению межплоскостного расстояния для атомных плоскостей, перпендикулярных оси X. В то же время для плоскостей, перпендикулярных оси Y будет наблюдаться такая же деформация, но с обратным знаком. Таким образом, на пластине X-среза можно проводить изменения в двух геометриях: на отражение (геометрия Брэгга, системы отражающих плоскостей типа (110)) и на прохождение (геометрия Лауэ, системы отражающих плоскостей типа (100)). В первом случае значение пьезоэлектрического модуля d_{11} будет определяться выражением:

$$d_{11} = -\frac{\delta\Theta \cdot D}{V \cdot \text{tg}(\Theta)}, \quad (5)$$

во втором - точно таким же, но противоположным по знаку. Таким образом, для измерений можно использовать целый набор отражений (как на отражение, так и на просвет), что позволяет повысить точность проводимых измерений.

Измерение пьезомодуля d_{14} основано на том, что можно найти такую ориентацию монокристалла, при которой вклад в деформацию сжатия или растяжения будет зависеть от величины искомого пьезомодуля.

При повороте кристалла вокруг оси X компонента тензора пьезоэлектрических модулей, отвечающая за деформацию сжатия или растяжения вдоль оси Y, изменяется следующим образом:

$$d'_{12} = -\cos^2(\alpha) \cdot d_{11} + \sin(\alpha) \cdot \cos(\alpha) \cdot d_{14}, \quad (6)$$

где d'_{12} – значение пьезомодуля в новой системе координат; α – угол поворота вокруг оси X. В результате анализа выражения (6) можно сделать вывод о том, что при повороте кристаллической пластинки на один и тот же угол, но в различных направлениях, значение пьезомодуля d'_{12} будет различаться, что объясняется свойствами тригонометрических функций, входящих в выражение (6): функция косинус является четной, а синус – нечетной. Различие при повороте в противоположные стороны будет равно:

$$d'_{12(+)} - d'_{12(-)} = 2\sin(\alpha) \cdot \cos(\alpha) \cdot d_{14} \quad (7)$$

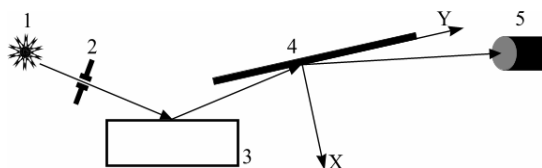
Таким образом, для проведения измерений пьезоэлектрического модуля d_{14} без использования результатов измерения значения пьезомодуля d_{11} необходимо найти соответствующие отражения.

В случае кристалла КТГС можно повернуть кристаллическую пластину X-среза вокруг оси X на $35,16^\circ$. Таким образом, в отражающее положение будет выведена плоскость типа (201). При этом исследования необходимо проводить в геометрии на просвет.

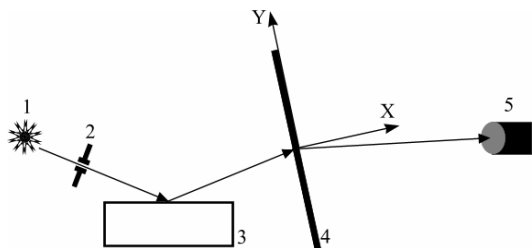
Измерения проводились на пластинах X-среза кристалла КТГС с размерами $16 \times 8 \times 0,2$ мм. На обе стороны монокристаллической пластины была нанесена алюминиевая пленка толщиной 200 нм для обеспечения равномерного приложения электрического поля к исследуемому образцу. Крепление исследуемого кристалла осуществлялось при помощи пластичного диэлектрического материала к специальному держателю, обеспечивающему проведение исследований как в геометрии на отражение, так и в геометрии на просвет. Кроме того, конструкция держателя позволяла прикладывать к образцу высокое электрическое напряжение. Использование для крепления монокристаллической пластины пластичного диэлектрического материала обусловлено необходимостью обеспечить свободную деформацию кристалла под действием прикладываемого электрического поля.

Исследования проводились на источнике рентгеновского излучения с вращающимся золотым анодом Rigaku ROTAFLEX RU200. Излучение монохроматизировалось при помощи одиночного кристалла-монокроматора Si(111), перед которым располагалась щель шириной 200 мкм. Расстояние от точки излучения до входной щели составляло 1,4 м. Таким образом, на исследуемый образец падало рентгеновское излучение с энергией, соответствующей $L\alpha_1$ линии характеристического излучения золота ($E=9,713$ кэВ, $\lambda=1,2765$ А). Дифрагированное на исследуемом кристалле излучение регистрировалось сцинтилляционным

детектором. Образец исследовался как в геометрии на отражение (по Брэггу), так и в геометрии на просвет (по Лауэ). Схема эксперимента представлена на рисунке 1.



а



б

Рис. 1. Схемы измерения кривых качания:
а) геометрия на отражение; б) геометрия на просвет. 1 – источник рентгеновского излучения, 2 – входная щель, 3 – кристалл-монокроматор, 4 – исследуемый кристалл, 5 – детектор.

В ходе эксперимента к исследуемому образцу прикладывалось электрическое поле в положительном и отрицательном направлениях. Для каждого из исследовавшихся отражений были получены кривые качания для трех значений прикладываемого напряжения: +1900 В, -1900 В и 0 В. По величине смещения углового положения брэгговского максимума можно вычислить значение деформации кристаллической решетки в соответствии с выражениями (5, 7).

В таблице 1 представлены характеристики отражений, которые использовались для проведения измерений пьезомодуля d_{11} . Кроме того, в данной таблице представлены результаты измерения смещения углового положения максимума пика брэгговского отражения в результате приложения электрического поля. В таблице представлен модуль данной величины.

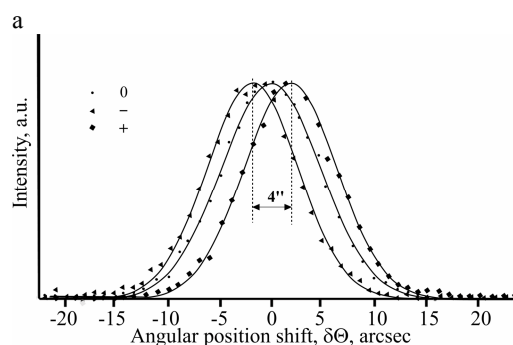
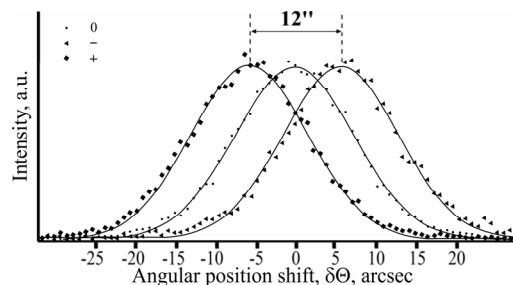
В действительности, значения смещения углового положения максимума пика брэгговского отражения в результате приложения электрического поля, представленные в таблице 1, различаются по знаку, в зависимости от геометрии измерения кривой качания кристалла.

Отражение	Геометрия измерения	Угол Брэгга, градус	$ \delta\Theta $, угл. сек
-----------	---------------------	---------------------	-----------------------------

Отражение	Геометрия измерения	Угол Брэгга, градус	$ \delta\Theta $, угл. сек
440	Bragg	39,018	6
600	Laue	33,03	4,5
330	Bragg	28,169	4
500	Laue	27,02	3,5
400	Laue	21,3	3
220	Bragg	18,34	2,5
300	Laue	15,82	2
200	Laue	10,47	1,5

Табл. 1. Отражения, использовавшиеся для измерения пьезомодуля d_{11}

На рисунке 2 представлены кривые качания для отражений (440) – геометрия на отражение (рисунок 2а) и (300) – геометрия на просвет (рисунок 2б). При приложении электрического поля одного знака максимумы кривых качания для отражения на просвет и на отражение сдвигаются в различные стороны.



б

Рис. 2. Кривые качания при приложении к образцу внешнего электрического поля: «+» +1900 В, «-» -1900 В, «0» 0 В: а) отражение (440); б) отражение (300).

Вместе с тем, полуширины и интенсивность дифрагированного излучения в пике кривых качания не изменяются. Это говорит о том, что исследуемый образец не испытывает изгибных деформаций, которые могли бы появиться вследствие жесткого крепежа.

Для вычисления пьезомодуля d_{11} была построена экспериментальная зависимость $\delta\Theta$ от $\text{tg}(\Theta_B)$. Данная зависимость представлена на рисунке 3.

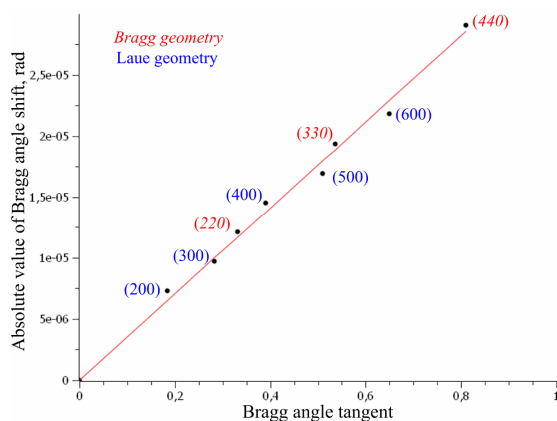


Рис. 3. Экспериментальная зависимость величины смещения максимума кривой качания под воздействием внешнего электрического поля от угла дифракции.

Затем с помощью метода наименьших квадратов был найден соответствующий коэффициент пропорциональности, после чего с учетом известных величин электрического напряжения и толщины образца был вычислен искомый пьезомодуль d_{11} .

В результате расчетов было найдено, что коэффициент пропорциональности составил величину равную $3,52432 \cdot 10^{-5}$. Отклонение χ^2 составило $2,6604 \cdot 10^{-13}$. Относительная погрешность измерения толщины образца составляло 1,5%. Точность установки высокого напряжения, прикладывавшегося к исследуемому кристаллу была в пределах 0,1%. Таким образом, набор полученных в ходе исследования, позволяет вычислить пьезомодуль d_{11} с погрешностью $\sim 3\%$.

Абсолютное значение пьезомодуля d_{11} составило:

$$|d_{11}| = (3,7098 \pm 0,1113) \cdot 10^{-12} \text{ Кл/Н.}$$

Знак пьезоэлектрического модуля зависит от выбора системы координат. Определение расположения кристаллографической системы координат относительно лабораторной проводилось при измерении пьезоэлектрического модуля d_{14} .

Как было упомянуто выше, данные измерения удобно проводить в геометрии на просвет, отражение (201). Для данной плоскости угол Брэгга при энергии падающего излучения $E=9,713 \text{ кэВ}$ составляет $12,84^\circ$.

В результате проведенных исследований было измерено смещение угловых положений максимумов кривых качания при приложении

электрического поля противоположной направленности. Результаты данных измерений представлены в таблице (2).

Приложенное напряжение, В	Изменение углового положения брэгговского максимума при повороте образца на угол α , угл. сек	
	$\alpha = -35.16^\circ$	$\alpha = +35.16^\circ$
-1900	-6	+4
0	0	0
+1900	+6	-4

Табл. 2. Результаты измерения кривых качания при повороте образца

В результате проведенных исследований было обнаружено, что при приложении электрического поля одной полярности к образцу развернутому в противоположных направлениях угловое положение максимума кривой качания смещается в противоположные стороны. На основании этих данных можно определить знак пьезоэлектрического модуля d_{11} в лабораторной системе координат:

$$d_{11} = -3,7098 \cdot 10^{-12} \text{ Кл/Н}$$

Расчет величины пьезоэлектрического модуля d_{14} приводит к следующему значению:

$$d_{14} = 24,29 \cdot 10^{-12} \text{ Кл/Н.}$$

Погрешность измерений в данном случае так же определяется точностью измерения параметров, входящих в выражения для расчетов, и составляет $\sim 3\%$.

Таким образом, в данной работе представлены результаты измерения независимых пьезоэлектрических модулей кристалла КТГС с использованием метода рентгеновской дифрактометрии. Показано, что измерения обеих констант могут проводиться на одном образце. При условиях измерения, использовавшихся в экспериментах, погрешность измерения пьезоэлектрических модулей составила $\sim 3\%$.

Вместе с тем, было обнаружено, что измеренные в данной работе значения пьезоэлектрических констант отличаются от значений, полученных в [7]

[1] Акустические кристаллы: справочник; под ред. М.П. Шаскольской. М.: Наука, 1982. 632 с.

[2] G. R. Barsch, "X-ray determination of piezoelectric constants", Acta Cryst., vol. A32, pp. 575-586, 1976.

[3] S. Annaka, A. Nemoto, "Piezoelectric constants of [alpha]-quartz determined from

dynamical X-ray diffraction curves”, *J. Appl. Cryst.*, №10, pp. 354-355, 1977.

[4] R. Guillot P. Fertey, N.K. Hansen, P. Allre, E. Elkaim, and C. Lecomte, “Diffraction study of the piezoelectric properties of low quartz”, *Eur. Phys. J. B*, vol. 42, pp. 373–380, 2004.

[5] O. Schmidt, S. Gorfman, W. Morgenroth, U. Pietsch, P. Becker, L. Bohaty, “X-ray diffraction study of $\text{Li}_2\text{SeO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ single crystals under external electric field – II” in *HASYLAB Annual report – 2007 part 1*, Hamburg: HASYLAB, 2007, pp 1141-1142

[6] Xuzhong Shi, Duorong Yuan, Aijian Wei, Zengmei Wang, Baolin Wang, “Growth and optical activity of $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ (CTGS) single crystal”, *Materials Research Bulletin.*, №41, pp. 1052–1055, 2006.

[7] Xuzhong Shi, Duorong Yuan, Xin Yin, Aijian Wei, Shiyi Guo, Fapeng Yu, “Crystal growth and dielectric, piezoelectric and elastic properties of $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ single crystal”, *Solid State comm.*, vol. 142, pp. 173–176, 2007.

Изучение температурной зависимости "запрещенных" отражений в кристалле RDP вблизи К-края рубидия

К.А.Кедало¹⁾, Е.Н.Овчинникова¹⁾, В.Е.Дмитриенко²⁾, Э.Х.Мухамеджанов³⁾,
D.V.Novikov⁴⁾, C.Richter⁴⁾

¹⁾Физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия

²⁾Институт кристаллографии РАН им. А.В.Шубникова, Москва, Россия

³⁾Курчатовский НБИК центр, Москва, Россия

⁴⁾ Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY, Hamburg, Germany
e-mail: ksenia.kedalo@gmail.com

В работе исследована температурная зависимость «запрещенных» отражений 006 и 550, которые возникают при резонансной дифракции синхротронного излучения в кристаллах RbH_2PO_4 (RDP) при энергии падающего излучения, близкой к К-краю рубидия. На синхротроне DESY были измерены энергетические спектры указанных отражений в широком интервале температур, а также спектр EXAFS. Экспериментальные исследования, показали резкий скачок интенсивности отражения 006 при температуре 147 К, соответствующей фазовому переходу из пара- в сегнетоэлектрическую фазу. В параэлектрической фазе интегральная интенсивность обоих рефлексов не падает в соответствии с фактором Дебая-Валлера, а растет (рис. 1). Для отражения 550 температурная зависимость более резко выражена, чем для отражения 006.

В данной работе проводится математическое моделирование энергетических спектров «запрещенных» отражений при различных температурах с целью объяснения наблюдаемых экспериментальных данных. Показано, что оба отражения являются результатом интерференции трех резонансных вкладов в атомный фактор: диполь-квадрупольного, термоиндуцированного, а также вклада, обусловленного мгновенными конфигурациями протонов.

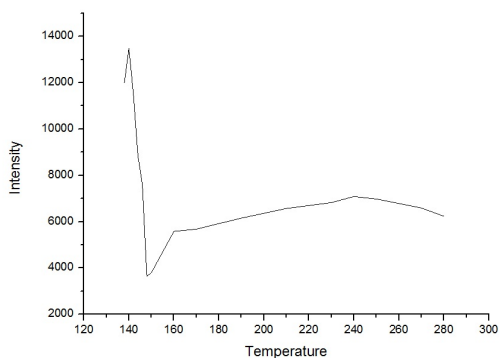


Рис.1. Экспериментальная температурная зависимость интегральной интенсивности рефлекса 006.

Феноменологическое рассмотрение всех трех вкладов в структурную амплитуду запрещенных отражений было проведено в работе [1].

В параэлектрической фазе ($T > 147$ К) кристаллы RDP являются тетрагональными, имеют группу симметрии $I\bar{4}2d$. В разупорядоченной фазе запрещены отражения типов hhl , $2h+l=4n+2$, в частности, рефлекс 006 и 550. Структурный фактор таких отражений вблизи края поглощения равен:

$$F_{jk}(hkl) = 2(f_{jk}^1 - f_{jk}^2)$$

где f_{jk}^1 и f_{jk}^2 – тензорные факторы атомов рубидия с координатами $(0\ 0\ 1/2)$ и $(1/2\ 0\ 1/4)$, связанных между собой осью 2_y .

В диполь-дипольном приближении тензорные атомные факторы рубидия одинаковы, а структурный фактор равен нулю. Это погасание может быть снято за счет диполь-квадрупольного резонансного рассеяния рентгеновского излучения, термоиндуцированного эффекта и вклада от флуктуаций положений водорода. При $T < 147$ К кристаллы RDP становятся орторомбическими с пространственной группой симметрии $Fdd2$. В сегнетоэлектрической фазе рассматриваемые рефлекс разрешены в диполь-дипольном приближении.

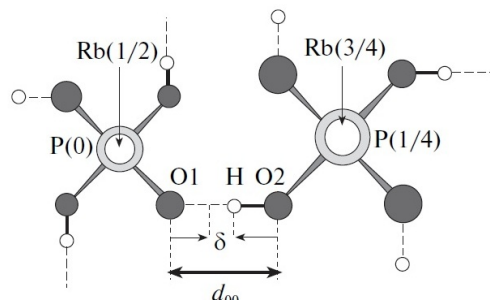


Рис.2. Схематическое представление структуры RDP вдоль тетрагональной оси [2].

Диполь-квадрупольный вклад в запрещенные рефлекс имеет вид:

$$F^{dq}(\mathbf{H}) = 2ie^{-M} \begin{pmatrix} f_{xz}^s H_z & 0 & f_{xz}^s H_x + f_{xz}^a I_x \\ 0 & -f_{xz}^s H_z & -f_{xz}^s H_y - f_{xz}^a I_y \\ f_{xz}^s H_x - f_{xz}^a I_x & -f_{xz}^s H_y + f_{xz}^a I_y & 0 \end{pmatrix}$$

где f_{xz}^s и f_{xz}^a - феноменологические коэффициенты, отвечающие симметричной и антисимметричной частям тензорной компоненты f_{xz} , $\mathbf{l}=\mathbf{k}+\mathbf{k}'$, $\mathbf{H}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'$.

Термоиндуцированный вклад в структурный фактор запрещенных рефлексов в высокотемпературной фазе имеет вид:

$$F^{TM}(\mathbf{H}) = 8\pi e^{-M} \begin{pmatrix} \frac{\partial f_{xz}^{dd}}{\partial z} H_z \overline{u_z^2} & 0 & \frac{\partial f_{xz}^{dd}}{\partial x} H_x \overline{u_x^2} \\ 0 & -\frac{\partial f_{xz}^{dd}}{\partial z} H_z \overline{u_z^2} & -\frac{\partial f_{xz}^{dd}}{\partial x} H_x \overline{u_x^2} \\ \frac{\partial f_{xz}^{dd}}{\partial x} H_x \overline{u_x^2} & -\frac{\partial f_{xz}^{dd}}{\partial x} H_x \overline{u_x^2} & 0 \end{pmatrix}$$

где $\frac{\partial f_{ij}^{dd}}{\partial u_k}$ - производная от диполь-дипольного

атомного фактора по смещениям $\overline{u_k^2}$. В данной модели учитываются только смещения атома Rb.

Вклад, обусловленный квантовыми скачками, возникает из-за того, что в каждый момент симметрия конфигураций, которые образуют атомы водорода, ниже симметрии кристалла в целом. Учитывая, что в результате этого остальные атомы могут быть слегка смещены относительно средних положений, может возникнуть дополнительный вклад в резонансный атомный фактор рубидия:

$$F_{jk}^{jump}(\mathbf{H}) = 8\pi i \sum_s e^{-M} \Delta f_{jk}^{dd,s} u_l^s H_l \exp(i\mathbf{H}\mathbf{r}_0^s)$$

где $\Delta f_{jk}^{dd,s}$ - поправка диполь-дипольного атомного фактора, соответствующая мгновенным конфигурациям протонов, u_l^s - смещения Rb для каждой конфигурации протонов.

Поскольку позиция водорода заполнена только наполовину, наиболее вероятно, что вблизи группы PO_4 находится два атома водорода. Эти атомы могут быть расположены так, что создают дипольный момент вдоль оси с кристалла (полярная конфигурация) или ее не создают (конфигурация Слэтера). В работе [3] был выполнен расчет с помощью подхода *ab initio* энергий, соответствующих различным конфигурациям. На рисунке 3 приведены три возможные конфигурации, которые образуют атомы водорода вблизи группы PO_4 , включая такую, где вблизи одной группы находится три водорода, а вблизи другой – один. Такая конфигурация, как следует из работы [3], имеет большую энергию, и менее вероятна.

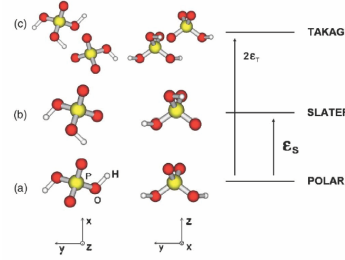


Рис.3. Различные конфигурации атомов водорода в структуре RDP: а) полярная, б) Slater, в) Takagi [3].

Нами были вычислены структурные факторы запрещенных отражений, которые, соответствуют полярным конфигурациям (p1, p2), конфигурация Слэтера (s1, s2) и Такаги (t1, t2). Феноменологический подход без учета релаксации кристалла, которая различна для разных конфигураций, дает следующие выражения для соответствующих вкладов в структурную амплитуду запрещенного отражения:

$$F_{006}(p1) = -F_{006}(p2) = 4\pi i u_z e^{-M} \begin{pmatrix} f_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & -f_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$F_{006}(s1) = -F_{006}(s2) = 4\pi i u_z e^{-M} \begin{pmatrix} 0 & f_{xy} & 0 \\ f_{xy} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$F_{006}(t1) = -F_{006}(t2) = 4\pi i u_z e^{-M} \begin{pmatrix} f_{xx} & f_{xy} & 0 \\ f_{xy} & -f_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Из приведенных выражений следует, что без учета релаксации решетки в том случае, если конфигурации равновероятны, диполь-дипольный вклад в запрещенные отражения должен обратиться в нуль. Однако, если учесть релакцию решетки, то двум конфигурациям водорода, например, p1, p2, соответствуют разные тензорные коэффициенты и, как следствие, разные вклады в резонансный атомный фактор рубидия. Это, в свою очередь, является одной из причин появления «запрещенных» отражений. На рис. 4 показана рассчитанная с помощью программы FDMNES [4] энергетическая зависимость диполь-дипольных вкладов в резонансный атомный фактор рубидия, соответствующих конфигурациям протонов p1 и p2 без учета релаксации решетки. Видно, что сумма двух вкладов дает нуль. С помощью программы *ab initio* были вычислены мгновенные положения атомов, соответствующие конфигурациям протонов p1 и p2. Далее с помощью программы FDMNES рассчитаны энергетические

зависимости диполь-дипольных вкладов в резонансный атомный фактор рубидия, соответствующих конфигурациям протонов p1 и p2 с учетом релаксации решетки (рис. 5). Видно, что в этом случае диполь-дипольные вклады, соответствующие двум конфигурациям протонов, неэквивалентны, и могут служить причиной появления запрещенных отражений.

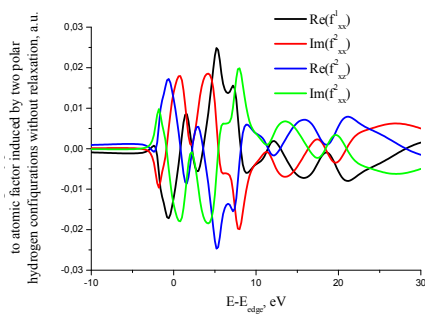


Рис. 4. Рассчитанная энергетическая зависимость диполь-дипольных вкладов в резонансный атомный фактор рубидия, соответствующих конфигурациям протонов p1 и p2 без учета релаксации решетки.

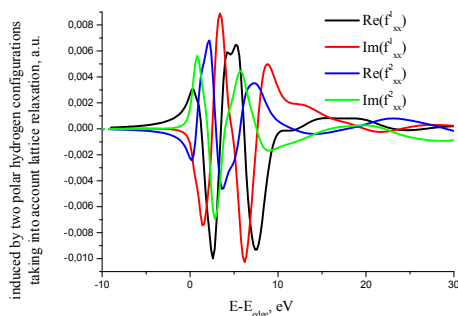


Рис. 5. Рассчитанная энергетическая зависимость диполь-дипольных вкладов в резонансный атомный фактор рубидия, соответствующих конфигурациям протонов p1 и p2 с учетом релаксации решетки.

Аналогичные образом рассчитаны энергетические зависимости диполь-дипольных вкладов в резонансный атомный фактор рубидия, соответствующих конфигурациям протонов s1 и s2, t1, t2 с учетом релаксации решетки.

Нами были также смоделированы энергетические зависимости диполь-квадрупольного вклада в запрещенные отражения и термоиндуцированный вклад.

Учет всех трех вкладов в резонансное рассеяние синхротронного излучения позволяет описать наблюдаемое поведение интегральной интенсивности запрещенных отражений в RDP с температурой. Дальнейшая математическая

обработка экспериментальных данных может позволить разделить три вклада в резонансное рассеяние.

Работа поддержана грантом РФФИ № 10-02-00768. Вычисления проводились на суперкомпьютере СКИФ МГУ.

[1] Э.Х. Мухамеджанов, М.В. Ковальчук, М.М. Борисов, Е.Н. Овчинникова, Е.В. Трошков, В.Е. Дмитриенко. Кристаллография, 2010, том 55, № 2, с. 187–196.

[2] “Ferroelectricity and isotope effects in H-bonded KDP crystals” S.Koval, J.Kohanoff, R.L.Migoni and E.Tosatti. 2008.

[3] J.Lasave, S.Koval, N.S.Datal and R.L.Migoni Phys. Rev. B72, 104104, 2005.

[4] <http://www-cristallo.grenoble.cnrs.fr/simulation>

Изготовление «глубоких» дифракционных решеток на основе кремния и исследование их рентгенооптических свойств

М.А. Князев,¹ В.В. Старков, Д.В. Рошупкин

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

e-mail: maleksak@iptm.ru

В докладе представлены результаты создания «глубоких» дифракционных решеток рентгеновского излучения на основе кристалла Si(400).

Структура кремниевой дифракционной решетки представляет собой профилированную поверхность кремниевой пластины в виде квадрата, состоящего из набора параллельных друг другу кремниевых полосок, разделенных воздушным пространством. Размер квадрата составляет $(400\text{-}400)\text{ nm}^2$. Размеры кремниевых полосок и расстояние между ними задаётся, во первых, топологической маской, а во вторых, процессами травления при формировании разделительных областей между полосками кремния.

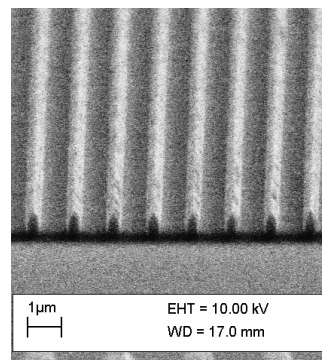
Учитывая необходимость создания наноразмерных структур для формирования маски применялся метод электронно-лучевой литографии. Электронно-лучевая литография осуществлялась на лабораторном литографе, созданном на базе сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) ZEISS EVO-50 и программно-аппаратного комплекса NanoMaker. Данные для экспонирования подготавливались в программной части NanoMaker. Литографическая часть состояла из следующих операций: нанесение на кремниевую подложку Si(400) с помощью центрифуги электронного резиста ПММА 950К, сушка электронного резиста при температуре $170\text{ }^{\circ}\text{C}$, экспонирование на литографе при ускоряющем напряжении 25 кВ, проявление электронного резиста в растворе ИПА-Н₂O 8:1. После создания топологического профиля в электронном резисте на его поверхность напылялась металлическая пленка, в которой с помощью взрывной литографии “lift-off” формировалась металлическая маска для последующего реактивного ионно-плазменного травления (РИТ) кремниевой подложки. Были опробованы одно и двухслойные маски. Для однослойной маски применялась пленка никеля с толщиной до 300 нм. Двухслойная маска представляла собой пленку хрома толщиной 30 нм, на которую напылялся слой никеля толщиной 100 нм.

Формирование структуры дифракционной решетки в кремнии осуществлялось методами РИТ на установке плазменного травления в условиях электронного циклотронного резонанса

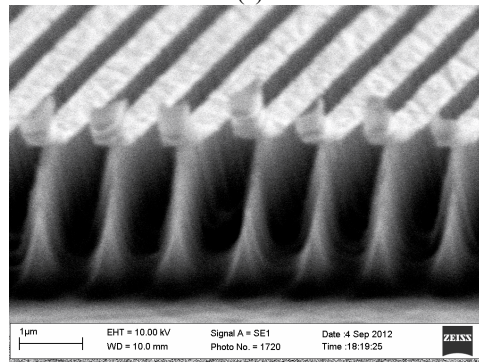
(ЭЦР-плазма). Отличительной особенностью СВЧ плазмы ($f=35\text{ ГГц}$) в условиях ЭЦР является высокая электронная плотность (экспериментально подтверждена $N_e=4\cdot 10^{13}\text{ cm}^{-3}$). Это позволяет осуществлять глубокое травление кремниевой подложки (до 100 мкм) при минимальном подтравливании под маску (5-10)% от глубины травления.

На рисунке 1 представлены изображение сформированных кремниевых дифракционных решеток, полученных при следующем режиме реактивного ионно-плазменного травления: $P_{\text{ост}}=2\cdot 10^{-5}\text{ мм. рт. ст.}$, газовая смесь Ag + CF₄ при давлении $P=1.4\cdot 10^{-3}\text{ мм. рт. ст.}$, СВЧ ток I- 150 мА, напряжение смещения $U_{\text{bias}}=100\text{ в.}$

Как видно, при травлении однослойная маска исчезла с поверхности кремния (рис.1(a)), а маска на основе Cr 30 нм/ Ni 100 нм демонстрирует большую устойчивость в идентичных условиях травления.



(a)



(б)

Рис. 1. Кремниевая дифракционная решетка с периодом 1 мкм: (а) травление через однослойную маску, (б) травление через двухслойную маску.

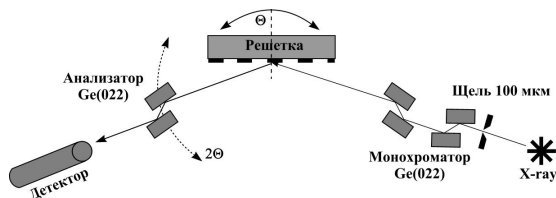


Рис. 2. Схема трехкристального рентгеновского дифрактометра.

На рис. 2 схематично представлена оптическая схема трехкристального рентгеновского дифрактометра для измерения дифракционных свойств дифракционных решеток. Исследования были выполнены на четырехкружном рентгеновском дифрактометре Bruker D8 Discover. В качестве источника рентгеновского излучения был использован вращающийся медный анод (излучение $\text{CuK}\alpha$, $\lambda=1.54 \text{ \AA}$). В ходе исследований были измерены кривые качания и карты распределения дифрагированной рентгеновской интенсивности. В случае измерения кривых качания угловая расходимость между дифракционными сателлитами определяется как

$$\delta\theta = d/D, \quad (1)$$

где d - межплоскостное расстояние для плоскостей (400), а $D=1 \text{ мкм}$ – период дифракционной решетки.

На рис. 3-4 представлены результаты исследования дифракции рентгеновского излучения на Si(400) дифракционной решетке с периодом $D=1 \text{ мкм}$. Была исследована дифракционная решетка, представленная на рис. 1(б). Глубина дифракционной решетки составляет 2.5 мкм при периоде 1 мкм . Соответственно аспектное отношение дифракционной решетки составляет ~ 5 . Из двумерной карты распределения дифрагированной рентгеновской интенсивности на рис. 3 видно, что распределение носит одномерный характер, т.е. в данном случае можно наблюдать дифракционные сателлиты только на кривой качания и нельзя наблюдать дифракционные порядки на дифракционной кривой. На рис. 4 представлена кривая качания Si(400) дифракционной решетки, на которой можно наблюдать большое количество дифракционных сателлитов. Угловая расходимость между дифракционными сателлитами на кривой качания соответствует расчетному значению из выражения (1). Следует отметить, что на рис. 3 можно наблюдать небольшое различие положения четных и нечетных дифракционных сателлитов по углу 2θ , что требует проведения дальнейших исследований. Можно, однако, предположить, что данный сдвиг может быть связан с различием фазового сдвига для четных и нечетных порядков дифракции и преломлением

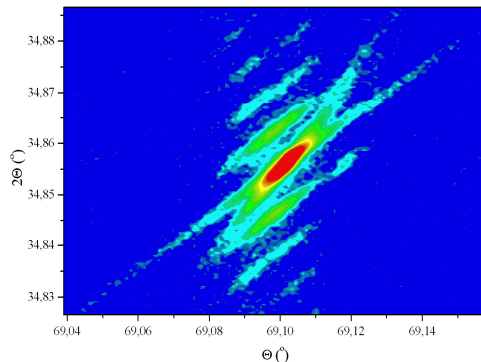


Рис. 3. 2D карта распределения рентгеновского излучения, дифрагированного на Si(400) дифракционной решетке с периодом $D=1 \text{ мкм}$.

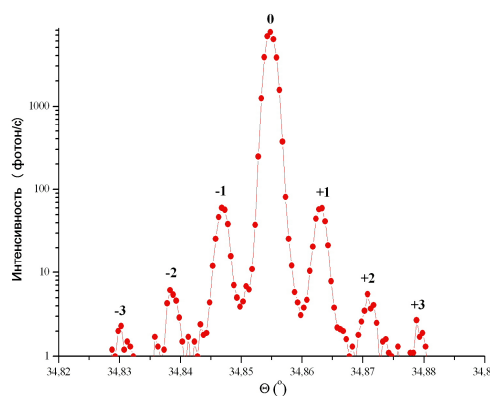


Рис. 4. Кривая качания Si(400) дифракционной решетки с периодом $D=1 \text{ мкм}$.

рентгеновского излучения на границе Si/вакуум. Следует отметить, что поверхность штрихов дифракционной решетки имеет большую шероховатость, что в свою очередь приводит к увеличению диффузного прассеяния рентгеновского излучения.

Таким образом, проведенные исследования демонстрируют возможность создания «глубоких» дифракционных решеток рентгеновского излучения. Потенциально возможно как уменьшение периода дифракционных решеток, так и увеличение аспектного отношения дифракционных решеток до 100 при использовании «Bosch Process» и «Cryo cooling».

Численное моделирование оптических свойств рентгеновского 30-линзового интерферометра

В. Г. Кон

Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия
e-mail: kohnvict@yandex.ru

Планарные составные преломляющие линзы на поверхности кремниевой пластины могут быть изготовлены с малым радиусом кривизны, то есть короткофокусные, и с малой апертурой. При этом относительно легко изготовить две параллельно расположенные линзы, которые создают два вторичных источника пучков с относительно большой расходимостью и с малым поперечным расстоянием, равным апертуре линз при условии, что между ними нет зазора. На некотором продольном расстоянии пучки от разных источников перекрываются и происходит их интерференция.

Первый такой билинзовый интерферометр был разработан в ИПТМ РАН и протестирован на Европейском источнике синхротронного излучения (ESRF) во Франции [1]. Он показал отличную интерференционную картину, аналогичную таковой в классическом опыте Юнга [2]. Апертура линз была равна $A = 50$ мкм. Этот успех позволил перейти к исследованию 6-линзового интерферометра, в котором четкая интерференционная картина возникает только на определенных расстояниях от вторичных источников [3].

В настоящее время в ИПТМ РАН разработан новый тип интерферометра из 30 линз с апертурой $A = 30$ мкм [4]. Новый тип интерферометра в принципе позволяет генерировать уникальную интерференционную структуру с очень узкими и высокими пиками, разделенными большими интервалами, в которых излучение отсутствует.

Данная работа посвящена разработке алгоритма и компьютерной программы на его основе для численного моделирования оптических свойств 30-линзового интерферометра. Здесь представлены первые результаты, полученные с помощью разработанной программы.

Рассмотрим наиболее типичный случай, когда энергия фотонов такова, что общая полная длина составной линзы значительно меньше фокусного расстояния. В этом случае для расчета 30-линзового интерферометра можно использовать тот же метод, что и в обычном фазовом контрасте на просвет [5], а именно, трансмиссионную функцию для тонкой линзы и метод Кирхгофа для переноса излучения в воздухе.

Сложность состоит в том, что поперечный размер интерферометра равен 900 мкм, в то время как ширина пучка в фокусе равна 0.05 мкм. Размер расчетной сетки для процедуры быстрого преобразования Фурье необходимо брать заметно больше размера интерферометра для устранения боковых

артефактов и с учетом сильной расходимости пучков. Для расчетов был выбран шаг сетки 0.02 мкм и число точек $2^{17} = 128 \times 1024$. Таким образом полный размер расчетной области равен 2621 мкм.

Радиус кривизны поверхности одного элемента равен $R = 3.75$ мкм. Расчеты были выполнены для энергии фотонов $E = 20$ кэВ и для конкретного интерферометра с числом двояко-вогнутых элементов $N = 78$. Апертура интерферометра вставлена в щель для устранения паразитной интерференции с боковым излучением, но в данном случае интерферометр практически полностью поглощает, поэтому эта процедура ничего не меняет.

Трансмиссионная функция $T(x) = \exp(i\varphi(x))$, где $\varphi(x) = k[-\delta + i\beta]t(x)$. Здесь $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число, δ и β – параметры комплексного показателя преломления материала линзы $n = 1 - \delta + i\beta$, $t(x)$ – толщина объекта вдоль луча, имеющего поперечную координату x .

$$\begin{aligned} t(x) &= (x - x_{\pm k})^2/R_0, & |x - x_{\pm k}| < A/2 \\ t(x) &= t_0, & |x| > AN_0/2 \\ x_{\pm k} &= \pm A(k - 0.5), & t_0 &= A^2/4R_0 \end{aligned}$$

Здесь $k = 1, 2, \dots, N_0/2$, $N_0 = 30$, $R_0 = R/N$ – эффективный радиус кривизны составной линзы из N элементов, t_0 – полная длина линзы вдоль пучка, $t_1 > t_0$ – толщина эффективного материала, ограничивающего пучок за пределами апертуры линз (щель), может быть сколь угодно большой.

Пусть $E_0(x)$ – поперечное распределение амплитуды электрического поля излучения, падающего на интерферометр. Процесс переноса излучения через него описывается умножением этой амплитуды на трансмиссионную функцию линзы

$$E_1(x) = E_0(x) T(x) = E_0(x) \exp(i\varphi(x)).$$

Последующий перенос амплитуды по воздуху описывается методом вычисления свертки амплитуды $E_1(x)$ с пропагатором Кирхгофа

$$P(x) = (i\lambda z_d)^{-1/2} \exp(ipx^2/\lambda z_d),$$

где z_d – расстояние от интерферометра до детектора.

Расчет свертки делается в три этапа: Сначала численно вычисляется преобразование Фурье для функции $E_1(x)$. Затем оно умножается на Фурье образ пропагатора, известный в аналитическом виде. Затем численно вычисляется обратное преобразование Фурье от произведения.

Заметим, что поверхности реальных линз разделены перемычкой, толщина которой делается как можно меньше, но все таки она не может быть равной нулю. Эти перемычки поглощают излучение и влияют на конечную интенсивность. Однако в

расчетах для простоты толщина перемычки положена равной нулю, что отражено в формулах для $I(x)$.

Известно, что оптические характеристики пучков, фокусируемых с помощью преломляющих линз, для случая точечного источника на конечном расстоянии z_0 легко пересчитываются по простым формулам из случая падения плоской волны (точечный источник на бесконечном расстоянии). Так, если фокусное расстояние для плоской волны равно f , то для источника на расстоянии z_0 оно равно $z_f = f/(1 - f/z_0)$. При этом распределение интенсивности остается тем же самым, только поперечный размер масштабируется множителем $(z_0 + z_d)/z_0$.

По этой причине достаточно исследовать только случай падающей плоской волны. На Рис. 1 показано распределение относительной интенсивности излучения сразу за интерферометром, то есть фактически квадрат модуля трансмиссионной функции. Учитывая, что рисунок имеет малое число точек, на верхней панели показано распределение на всей длине интерферометра (50000 точек), а на нижней – только центральная часть, но более детально.

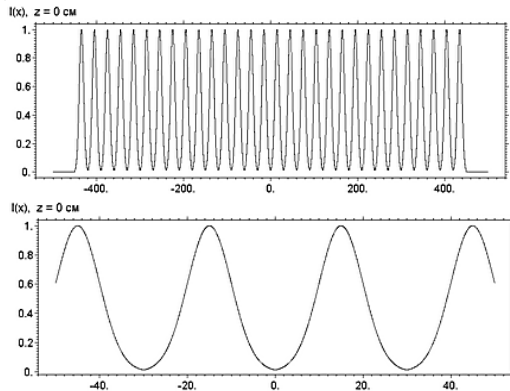


Рис. 1. Интенсивность за интерферометром

На оси абсцисс указывается поперечное расстояние в микронах, на оси ординат – отношение интенсивности в схеме с рентгеновским 30-линзовым интерферометром (РТЛИ) и без него. Расстояние между минимумами равно апертуре линз, которые упакованы без зазора.

Следующей важной точкой на продольной оси оптической схемы является фокусное расстояние линз $z_f = 1.988$ см. На этом расстоянии программа вычисляет распределение, показанное на Рис. 2. В данном случае верхний график не в состоянии показать ширину пиков. Поэтому на нижнем графике показана очень узкая область вблизи фокуса первой правой линзы. Полуширина фокуса, измеренная графически равна 0.057 мкм, то есть примерно три шага сетки. А весь фокус прописывается на нескольких шагах сетки.

Согласно общей теории резонансы возникают на расстояниях $z_m = A^2/(\lambda m)$ от фокусов РТЛИ. При малой длине волны первые резонансы находятся очень далеко, и там используемый

метод расчета может оказаться не вполне корректным. Поэтому рассмотрим 10-й резонанс на расстоянии $z_{10} = 147.168$ см от РТЛИ. Расчет на этом расстоянии показан на Рис. 3.

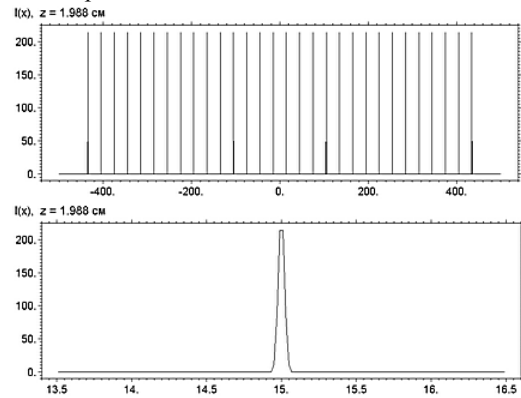


Рис. 2. Интенсивность на фокусном расстоянии

В этом случае расстояние между пиками резонансов в 10 раз меньше апертуры линз и равно 3 мкм. При этом во всей широкой области резонансы не разрешаются, и интерес представляет только изменение высоты пиков.

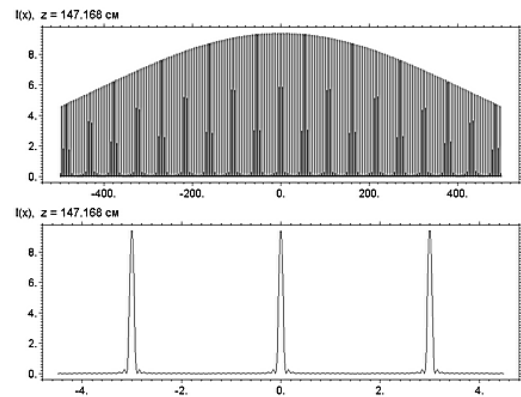


Рис. 3. Интенсивность в 10-м резонансе

Из общей теории следует, что максимальная интенсивность в пиках на резонансном расстоянии должна быть в 30 раз выше средней, а средняя интенсивность – в 30 раз выше, чем интенсивность для одной линзы. Рассмотрим какой должна быть интенсивность для одной линзы. Будем считать что форма пика грубо соответствует гауссовому профилю, при этом интегральная интенсивность почти равна произведению полуширины на высоту.

Угловая расходимость пучка $\alpha = A_e / z_f$ равна отношению эффективной апертуры линзы A_e к фокусному расстоянию z_f . На расстоянии $z_{fd} = z_{10} - z_f = 145.18$ см пучок будет иметь полуширину $w_{10} = \alpha z_{fd}$ и максимальное значение интенсивности $I_{10} = I_f w_f / w_{10}$. С другой стороны, полуширина пучка в фокусе определяется известной формулой, следующей из соотношения неопределенности $w_f = 0.47\lambda / \alpha$. При этом коэффициент 0.47 следует писать для гауссовых пучков, в отличие от непоглощающих линз в оптике.

Величину A_e можно оценить на нижнем графике Рис. 1 как 11.2 мкм. Соответственно получаем $\alpha = 5.6 \cdot 10^{-4}$. Продолжая вычисления находим $w_f = 0.052$ мкм, и $w_{10} = 813$ мкм. Оценка на полуширину пучка в фокусе получилась близкой к расчетному значению. Относительная интенсивность в фокусе оценивается по формуле $I_f = A_e/w_f = 215$, что хорошо соответствует значению на графике. Далее получаем оценку на $I_{10} = A_e/w_{10} = 0.0138$, а интенсивность в пиках интерференции должна быть в 900 раз больше, то есть $I_{m10} = 12.4$.

Эта оценка получилась чуть больше, чем значения, получаемые в расчете, так как на нижнем графике Рис. 3 максимум равен 9.4. Различие легко понять, если учесть, что поперечный размер линзы 900 мкм, а половина полуширины области засветки одной линзой 406 мкм, и при этом на краях этой области интенсивность уже в два раза меньше, чем в центре. То есть крайние линзы интерферируют уже не на 100%, а меньше, что и приводит к уменьшению высоты максимумов, так как в оценке этот эффект не учитывается.

Однако и такую высоту пики резонансов имеют только в центральной части рассмотренной области. На краях области они уменьшаются вдвое, что легко объяснить тем, что интерферирует только половина линз. Хотя область интерференции (перекрывтия излучения от разных линз) равна $w_{10} = 824$ мкм, но на краях этой области интенсивность уже составляет половину от максимальной.

Согласно общей теории полуширина пиков интерференции должна быть примерно в 30 раз меньше их периода $p = A/10$, то есть равна 0.1 мкм. Из нижнего графика Рис. 3 следует, что полуширина пиков равна 0.11 мкм, то есть расчет вполне соответствует теории. Интересно сравнить ширину пиков резонанса с шириной пика в фокусе для более высоких резонансов, которые происходят на более близких расстояниях от фокусов линз.

Для m -го резонанса имеем оценки $z_m = A^2/(\lambda m)$, $p = A/m$, $w_m = 0.9p/n_m$. Здесь введен параметр n_m как эффективное число линз, участвующих в интерференции для m -го резонанса. Оно может быть меньше полного числа линз по причине конечной угловой расходимости пучка $\alpha = A_e/z_f$ после фокуса. Это число грубо можно оценить как $n_m = z_m \alpha / A$. Подставляя оценку и проводя простые вычисления получаем, что $w_m = 0.9\lambda/\alpha \approx 2w_f$. Таким образом, полуширина пиков резонанса не может быть меньше, чем удвоенная полуширина фокусов. Это соотношение вполне соответствует расчету для 10-го резонанса.

Для экспериментального наблюдения пиков интерференции с такой узкой шириной необходимо использовать пучки с очень высокой

степенью поперечной когерентности. Другими словами длина поперечной когерентности x_{lc} должна быть больше полной поперечной длины интерферометра 900 мкм. Величина $x_{lc} = \lambda \alpha_s$, где α_s – угловая ширина источника на расстоянии z_0 от источника до РТЛИ. При $E = 20$ кэВ, $z_0 = 50$ м и размере источника $S = 50$ мкм (типичные условия для ESRF) получаем $x_{lc} = 62$ мкм, что намного меньше ширины интерферометра.

Тот же вывод можно получить, если оценить размеры проекции источника на детекторе $s = S z_{10}/z_0 = 1.5$ мкм. То есть для наблюдения пиков с полушириной 0.1 мкм размер источника необходимо уменьшить более, чем в 15 раз. Интересно, что при рассмотренных условиях источник расширяет пик на величину, равную половине периода, то есть экспериментально будет видна синусоида точно такая же, как и в билинзовом интерферометре.

Полученные оценки позволяют сделать вывод о том, что наблюдать указанную структуру пучка при использовании сырого пучка ESRF невозможно. Решение проблемы можно получить, если использовать вторичный источник, возникающий в фокусе короткофокусной линзы, апертура которой меньше длины поперечной когерентности. При этом расходимость пучка в такой линзе должна быть достаточно велика, чтобы обеспечить засветку всего интерферометра на разумных расстояниях.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 10-02-01021а.

- [1] Snigirev A., Snigireva I., Kohn V., et al., Phys. Rev. Lett, 103, 064801 (2009).
- [2] смотри визуальную симуляцию опыта Юнга на сайте <http://vsg.quasihome.com/interf.htm>
- [3] Юнкин В. А., Кузнецов С. М., Григорьев М. В. и др. В кн. "Тезисы докладов. РСНЭ-НБИК 2011", ИК РАН, Москва, ноябрь 2011, с. 599.
- [4] Юнкин В. А., Кон В. Г., Кузнецов С. М., и др., В кн. "Материалы совещания Рентгеновская Оптика 2012", ИПТМ, Черногловка, 2012.
- [5] Snigirev A, Snigireva I, Kohn V., et al. Rev. Sci. Instr. 66, 5486 (1995)

Анализ поведения параметров перебрасываемых рентгеновских пучков в зависимости от значения приложенного температурного градиента

К.Т. Айрапетян¹, С.Н. Норейян¹, В.В. Маргарян¹
¹“X-Ray Pungs Laboratory”, Армения, Ереван, Вагаршян 19,
 E-mail:x-ray@web.am

Исследование реальной структуры монокристаллов, а также существующих в них дефектов и искажений, обусловленных внешними воздействиями, является одной из актуальных задач современной физики твердого тела. Развитие этой области особенно связано с исследованием рассеяния рентгеновских лучей в монокристаллах, а также с созданием и номинацией новых элементов рентгеновской оптики с такими кристаллами. Как известно, при наличии внешних воздействий [1] (температурный градиент, ультразвуковые колебания), в результате отражения рентгеновских лучей от семейства атомных плоскостей (10-11) монокристалла SiO_2 в геометрии Лауэ при определенных значениях этих воздействий, наблюдается полная переборка интенсивности первичного пучка от направления прохождения в направлении отражения. Для изучения и выявления особенностей данного явления, проведены многочисленные теоретические и экспериментальные исследования. Исследованы угловая и энергетическая дисперсии полностью перебрасываемых рентгеновских пучков [2-4]. В частности, в работе [5; 6] показано, что угловая ширина полностью перебрасываемого пучка сильно зависит от толщины перебрасывающего монокристалла и от расстояния источник – исследуемый образец, и с увеличением этого расстояния она уменьшается.

В представленной работе экспериментально исследовано поведение параметров перебрасываемых рентгеновских пучков в зависимости от значения приложенного температурного градиента. На (рис.1.) показана трехкристальная схема эксперимента. Для этих исследований было использовано монохроматическое излучение $\text{MoK}\alpha_1$. В качестве исследуемых образцов были использованы плоскопараллельные монокристаллы кварца толщиной $t = 0,7\text{мм}$ с отражающими плоскостями (10-11), (10-10), которые находились в условии отражения геометрии Лауэ.

При геометрии Брэгг-Лауэ, по схеме (n; n), получили дифракционное Лауэ отражение от отражающих атомных плоскостей (10-11)

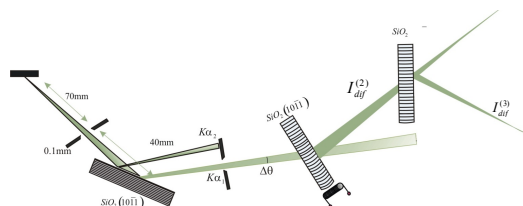


Рис.1. Схема эксперимента

второго кристалла для излучения $\text{MoK}\alpha_1$. Затем, по схеме (n; -n), третий кристалл юстировали по отношению ко второму кристаллу, так чтобы отражающие атомные плоскости третьего кристалла оказались в условии отражения Брега, и измерили интенсивность отраженного пучка. В ходе эксперимента с приложенным температурным градиентом ко второму монокристаллу измерили интенсивность дифрагированных отраженных пучков от второго и третьего монокристалла. Эксперименты проводились при параллельном ($\vec{B} \uparrow \uparrow \vec{g}$) и антипараллельном ($\vec{B} \uparrow \downarrow \vec{g}$) направлении вектора приложенного температурного градиента (\vec{B}) и вектора дифракции (\vec{g}). С приложением и постепенным увеличением величины температурного градиента, приложенного ко второму монокристаллу, измерена интенсивность как отраженных ($I_{dif}^{(2)}; I_{dif}^{(3)}$) так и проходящих ($I_{np}^{(2)}; I_{np}^{(3)}$) пучков от второго и третьего монокристалла.

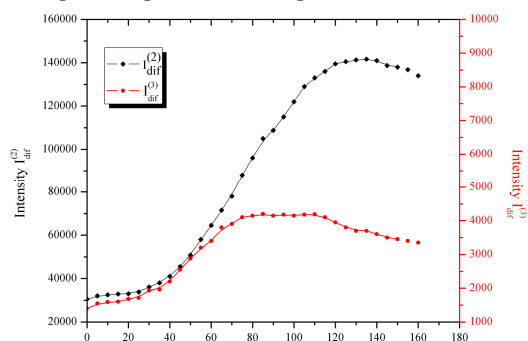


Рис.2. Зависимости интенсивностей пучков при ($\vec{B} \uparrow \downarrow \vec{g}$) и (10-11)

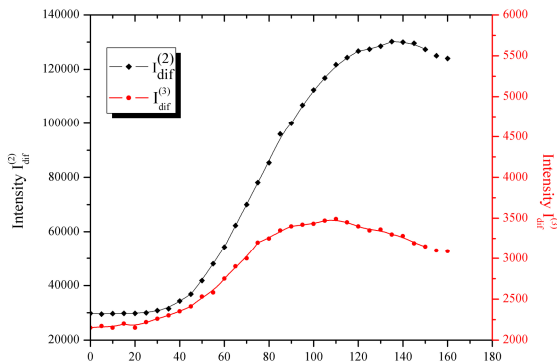


Рис.3. Зависимости интенсивностей пучков при ($\vec{B} \uparrow \vec{g}$) и (10-11)

На (рис. 2.) приведены зависимости интенсивностей пучков, отраженных вторым и третьим монокристаллом, от величины приложенного температурного градиента при антипараллельном расположении векторов дифракции и температурного градиента, когда отражающие атомные плоскости третьего кристалла являются (10-11). На (рис. 3.) приведены те же самые зависимости при параллельном расположении векторов дифракции и температурного градиента. Как видно из приведенных кривых, по ходу увеличения величины температурного градиента, которое обусловлено явлением переброски рентгеновских излучений от направления прохождения в направление отражения, интенсивности обеих пучков постепенно увеличиваются.

Поскольку увеличивается интенсивность дифрагированного отраженного пучка ($I_{dif}^{(2)}$) от второго кристалла, который служит как падающий пучок на третий кристалл, естественно должна увеличиваться и интенсивность отраженного пучка от третьего кристалла.

Но, следуя увеличению величины температурного градиента, заметим что начиная от некоторой величины приложенного воздействия, интенсивность отраженного ($I_{dif}^{(3)}$) пучка от третьего кристалла насыщается, несмотря на то что интенсивность отраженного ($I_{dif}^{(2)}$) пучка продолжает увеличиваться.

Для объяснения данного явления детально рассмотрим особенности эксперимента. При отсутствии внешних воздействий, ширина столика Дарвина ($\Delta\theta(10-11)$) отражающих атомных плоскостей намного меньше по отношению угловой апертуры $\Delta\theta_{Ka_1}$, поэтому второй кристалл отражает угловую часть апертуры падающего монохроматического излучения $MoKa_1$. Поскольку третий кристалл

также является кварцевым, отражающие атомные плоскости одинаковы и примененная схема бездисперсионная, значит, для третьего кристалла вся угловая апертура отраженного пучка от второго монокристалла находится в условии дифракционного отражения. Как известно, присутствие внешнего воздействия (температурный градиент), перпендикулярно приложенного к отражающим атомным плоскостям, приводит к увеличению интенсивности отраженного рентгеновского пучка за счет проходящего и при определенной величине температурного градиента происходит полная переброска [1]. В данном эксперименте соответственные увеличения интенсивностей пучков ($I_{dif}^{(2)}$) и ($I_{dif}^{(3)}$) обусловлены переброской интенсивности проходящего пучка от направления прохождения в направлении отражения внутри угловой апертуры столика Дарвина ($\Delta\theta(10-11)$). Присутствие температурного градиента приводит к формированию определенного деформационного поля в монокристалле, за счет чего отражающие атомные плоскости изгибаются. Это приводит к тому, что, начиная с определенных значений температурного градиента, во втором кристалле увеличивается угловая ширина перебрасываемого пучка и за счет чего увеличивается интегральная интенсивность отраженного пучка ($I_{dif}^{(2)}$).

Третий кристалл отражает только часть ($\Delta\theta(10-11)$) ширины $\Delta\theta$ падающего пучка, что и приводит к насыщению отраженной интенсивности. В данной работе так же проведены экспериментальные исследования для отражающих атомных плоскостей (10-10) третьего кристалла. На (рис. 4., 5.) приведены зависимости интенсивностей пучков, отраженных вторым и третьим монокристаллом, от величины приложенного температурного градиента соответственно при антипараллельном и параллельном расположении векторов

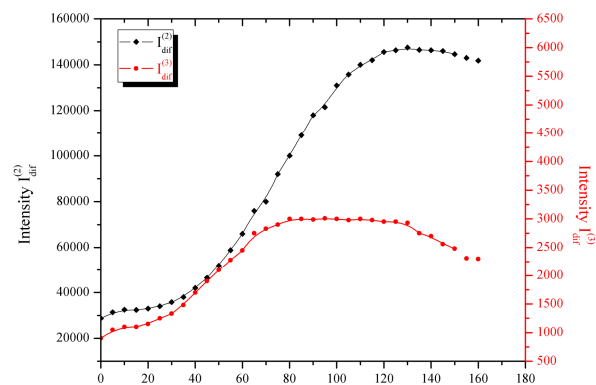


Рис.4. Зависимости интенсивностей пучков при ($\vec{B} \uparrow \vec{g}$) и (10-10)

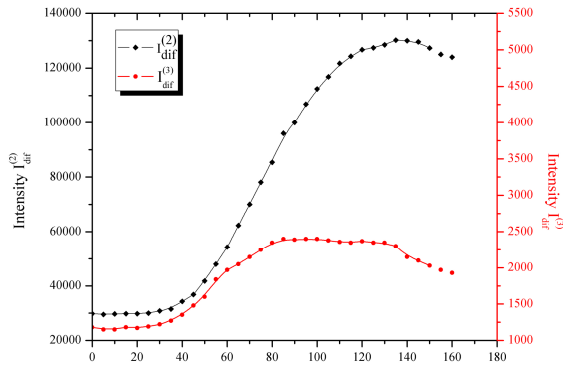


Рис.5. Зависимости интенсивностей пучков при ($\vec{B} \uparrow \vec{g}$) и (10-10)

дифракции и температурного градиента, когда отражающие атомные плоскости третьего кристалла являются (10-10). И поскольку $\Delta\theta(10-11) > \Delta\theta(10-10)$ на (рис. 4.,5.) более

четко видна разница пределов насыщения интенсивностей.

[1] Мкртчян А. Р., Навасардян М. А., Мирзоян В. К.. Письма в ЖТФ, 1982, Т.8, В.11, С.677-680.А.Р.

[2] Мкртчян, Р.Г. Габриелян, А.А. Аслаян и др. Изв. АН Арм.ССР, Физика, 21, 297 (1986)

[3] М.А. Навасардян, В.К. Мирзоян, К.Т. Айрапетян и др. Изв. АН Арм.ССР, Физика, 21, 217 (1986)

[4] А.Р. Мкртчян, М.А. Навасардян, В.К. Мирзоян. Изв. АН Арм.ССР, Физика, 21, 340 (1986)

[5] С.Н. Нореян, В.К. Мирзоян, В.Р. Кочарян. Изв. НАН Армении, Физика, 39, 2, 124 (2004)

[6] Вардан Маргарян, Сероб Нореян, Карлен Айрапетян. Известия НАН Армения, Физика, Т45, №3, 2010, с. 215-220.

Исследования тепловыделяющих элементов с использованием метода компьютерной томографии

Е.В. Минеев^{1*)}, А.В. Бузмаков¹⁾, В.Е. Асадчиков¹⁾, Р.А. Сенин²⁾, А.А. Воробьев²⁾

¹ Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН

² Курчатовский центр синхротронного излучения

e-mail: mineev_eugene@mail.ru

В работе описывается неразрушающий метод исследования тепловыделяющих элементов особо малого размера (микротвэлов) с помощью метода компьютерной томографии на синхротронном источнике рентгеновского излучения. В результате проделанной работы удалось получить характерные размеры, химический состав и плотность оболочек, из которых состоит микротвэл.

Микротвэлы используются в современных высокотемпературных газовых реакторах как основной источник топлива[1]. Они представляют собой частицы топлива с ядром из оксида урана UO_2 и последовательности многослойных оболочек из пиролитического графита и карбида кремния. Важнейшими параметрами при изготовлении таких элементов являются диаметр и сферичность ядра, плотность и толщина оболочек.

Одним из методов неразрушающего контроля внутренней структуры объектов является метод компьютерной томографии[2]. Основа метода заключается в следующем: рентгеновское излучение падает на непрозрачный объект, частично поглощается внутри, и затем получается теневая проекция на детекторе. При этом объект помещается на гониометр, который позволяет вращать образец вокруг собственной оси. Для восстановления внутренней структуры необходимо получить все проекции от 0^0 до 180^0 с шагом в один градус. Реконструкция производится на персональном компьютере с применением модифицированного алгоритма ART[3].

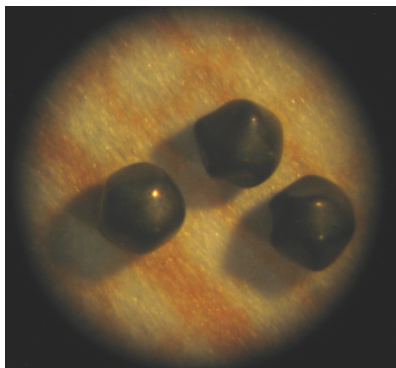


Рис. 1. Фотография микротвэлов на миллиметровой бумаге.

Поскольку размер микротвэлов не превышает 1 мм в диаметре, а размер оболочек лежат в диапазоне от 50 до 100 мкм, нужен высокоразрешающий детектор с малым размером пикселя. В данной работе использовался детектор Hamamatsu с эффективным размером пикселя 2,5x2,5 мкм. Во время проведения эксперимента использовалось излучение с энергией квантов $E=13\text{keV}$. Время экспозиции одной проекции составило 8 секунд, общее время эксперимента 1 час 25 минут.

В результате выполненных экспериментов были получены значения толщины всех оболочек, окружающих ядро внутри микротвэла. Результаты измерений приведены на рис. 2.

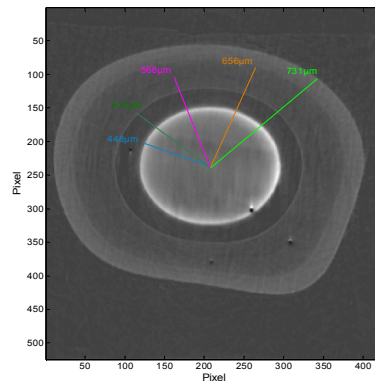


Рис. 2 Изображение центрального слоя микротвэла с размерами оболочек.

Кроме того, были определены величины плотностей этих оболочек и материалы, которым они соответствуют: $\mu_1=(2.7\pm 1.0)\text{мм}^{-1}$ – карбид кремния, $\mu_2=(1.3\pm 0.5)\text{мм}^{-1}$ и $\mu_3=(1.0\pm 0.5)\text{мм}^{-1}$ – пироуглерод высокой плотности, $\mu_4=(0.3\pm 0.1)\text{мм}^{-1}$ – пироуглерод низкой плотности.

Полученные результаты подтверждают возможность использования современных методов компьютерной томографии для неразрушающего контроля внутренней структуры подобных непрозрачных объектов.

[1] N. N. Ponomarev-Stepnoi, N. G. Abrosimov, A. G. Vasyaev, et al., At. Energ. 108, 71 (2010).

[2] A.C.Kak, M. Slaney Principles of Computerized Tomographic imaging //IEEE Press, NY 1988.

[3] Klaus Mueller. “Fast and accurate three-dimensional reconstruction from cone-beam projection data using algebraic methods” //The Ohio State University. Dissertation. 1998.

Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования "Курчатовский центр синхротронного излучения и нанотехнологий" в рамках государственного контракта №16.552.11.7003.

Зависимость интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения от кристалла АДП при наличии внешнего воздействия

В.К. Мирзоян, К.Г. Труни, П.А. Григорян, К.М. Геворкян,
М. Ghannad Dezfouli, В.Н. Агабекян
Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван
e-mail: konstantin@iapp.sci.am

Исследована зависимость интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения от монокристалла дигидрофосфата аммония (ADP) в геометрии Лауэ при наличии температурного градиента. Установлено, что интенсивность отраженного рентгеновского пучка от монокристалла почти линейно зависит от величины температурного градиента приложенного перпендикулярно к отражающим атомным плоскостям вплоть до насыщения. При малых величинах температурного градиента интенсивность отраженного рентгеновского излучения сначала уменьшается примерно на 10%, а затем монотонно увеличивается с повышением величины температурного градиента.

Проблема влияния внешних воздействий на параметры отраженного рентгеновского излучения была поставлена в тридцатых годах двадцатого века в основополагающих работах [1, 2]. В последующие годы в вышеуказанной области сделаны многочисленные и разнообразные работы, однако интерес к этой проблеме непрерывно возрастает.

В работе [3] впервые было получено явление полной переброски интенсивности рентгеновского излучения от направления прохождения в направлении отражения под действием температурного градиента или акустического возбуждения в геометрии Лауэ для тонких кристаллов $\mu t \sim 1$, где μ – линейный коэффициент поглощения, t – толщина монокристалла.

В работах [4, 5] поставлена и реализована задача модуляции интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения в низкочастотном диапазоне с целью передачи сигналов звуковой частоты. В работах [4, 5] амплитудная модуляция была осуществлена с помощью пьезокристалла кварца X – среза, который не позволял модулировать интенсивность дифрагированного излучения во всем диапазоне звуковых частот из-за высокой добротности монокристаллов кварца. В настоящей работе представлены результаты экспериментов выполненных на дигидрофосфате аммония (ADP) с разной толщиной монокристаллов. Использовались $AgK\alpha$ и $MoK\alpha$ излучения для которых линейный коэффициент поглощения равен 2.75см^{-1} и 54см^{-1} , соответственно.

Рассматривались отражения от атомных плоскостей (100), (110), (200)... На рисунке указана зависимость интенсивности отраженного рентгеновского излучения от атомных плоскостей (100), (101), (220), в зависимости от величины приложенного температурного градиента.

В таблице приведены данные о числе отраженных фотонов рентгеновского излучения в зависимости от величины приложенного на кристалл температурного градиента. Как видно из таблицы при малых величинах температурного градиента число отраженных рентгеновских фотонов сначала уменьшается примерно на 10%, а затем монотонно увеличивается до насыщения.

$\Delta T, \text{мм}$ (hkl)	2.5			1.3
	(100)	(110)	(101)	(220)
0	1400		4400	11000
1.5	1100		3900	10000
3	1200	1600	4000	9500
4.5	2100		5300	9600
6	3400	2500	6700	10000
12	5000	3600	12000	17000
18	6600	4200	17000	24000
24	9700	5800	22000	31000
30	13000	7500	24000	32500
36	17000	9000	20000	33500
42	20000	10200	30000	35000
48	26000	11500	33000	62000
54	28000	14000	32000	68000
60	30000	15000		74000
66	34000	18000		
72	36000	20000		
78	38000	27000		
84	40000	29000		
90		32000		
96				
K	28.6	20	7.3	6.7

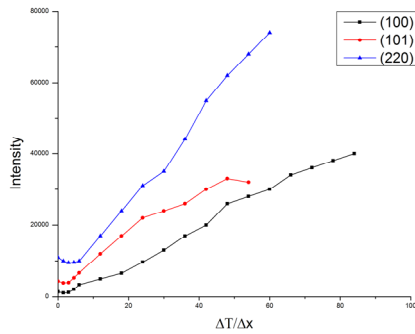


Рис. Зависимость интенсивности рентгеновского излучения, отраженного от атомных плоскостей (hkl) монокристалла ADP от толщины кристалла и от величины приложенного температурного градиента и соответствующие коэффициенты усиления K [6]

Спад интенсивности отраженного пучка при малых величинах температурного градиента на наш взгляд связано с блочной структурой монокристалла, т.е. малые величины температурного градиента способствуют сглаживанию границ блочности, вследствие чего повышается степень совершенства монокристалла, что и является причиной уменьшения интенсивности. Дальнейшее увеличение величины температурного градиента приводит к анизотропной деформации и изгибу отражающих атомных плоскостей, вследствие чего увеличивается интенсивность отраженного пучка вплоть до насыщения. Аналогичные явления были наблюдаемы в работе (6), где в качестве образца использовались монокристаллы KDP . Увеличение интенсивности отраженного пучка на наш взгляд обусловлено увеличением отражательной способности атомных плоскостей и их изгибом [7] под влиянием температурного градиента.

- [1] A.W. Fox, P. H. Corr. Phys. Rev. v.37, N12, 1622 – 1625 (1931)
- [2] S. Nishikava, I. Sakisaka, I. Sumoto, Rev. v.38, N12, 1078 – 1079 (1931)
- [3] А. Р. Мкртчян, М. А. Навасардян, В. К. Мирзоян Письма в ЖЭТ, т8, 11 677 – 680 (1982)
- [4] М. А. Навасардян, Ю. Р. Назарян, В. К. Мирзоян Изв.НАН Армении, физика, 14, 425 – 428 (1979)
- [5] А. Р. Мкртчян, М. А. Навасардян, В. К. Мирзоян, А. А. Кочарян, С.С. Галстян, О. А. Унанян, К. Г. Галоян Авторское свидетельство N1327716, 1987г.
- [6] В. К. Мирзоян, К. М. Геворкян, П. А. Григорян, Т. Г. Довлатян Изв. НАН Армении, Физика т5, N3, 221 – 228 (2010)

- [7] В. К. Мирзоян, А. А. Егиазарян, Э. Г. Багдасарян, П. В. Мирзоян Изв. НАН Армении, Физика т42, N6, 355 – 362 (2007)

Тонкие пленки формвара в рентгеновской оптике

А. В. Митрофанов

Учреждение РАН, Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, 119991, Москва, Россия

e-mail: mitrofar@sci.lebedev.ru

В приборах солнечной рентгеновской астрономии обычно используются рентгеновские фильтры, которые служат для селекции рабочего излучения и одновременно для уменьшения тепловой нагрузки на оптические элементы телескопа или радиометра и защиты детектора от УФ, видимого и ИК фонового излучения и рассеянного света [1,2]. Существуют разнообразные однослойные и многослойные тонкопленочные системы, применяемые в качестве фронтальных фильтров, которые устанавливаются перед объективом телескопа и, так называемые, фильтры детекторов изображения, находящиеся в фокальной плоскости прибора или вблизи неё. Фильтром детектора может быть покрытие на поверхности детектора изображения или одноканального датчика радиометра [3,4]. Высокие требования к функциональным, механическим и тепловым характеристикам фильтров, выводимых на земную орбиту при ракетном запуске аппаратуры и эксплуатируемых в условиях длительного орбитального полета существенно ограничивают выбор материалов и методик, с помощью которых делают фильтры. Рентгеновские фильтры телескопов и радиометров, как правило, могут состоять из нескольких тонких и сверхтонких слоев металлов, окислов, керамики и полимеров. В данном сообщении рассматриваются приёмы изготовления тонкопленочных рентгеновских защитных и спектрально-селективных фильтров, использующие технику тонких (субмикронных) полимерных формваровых слоев, применяемых в качестве базовых элементов в технологических цепочках при создании фильтров для орбитальных рентгеновских телескопов [3] и радиометров [4], работающих в мягкой рентгеновской области спектра (с энергией квантов примерно 20 – 300 эВ).

Как известно, формвар [5] – это одно из торговых или сокращенных названий карбоцепного полимера, ацетала поливинилового спирта и формальдегида, поливинилформалья ($C_3H_8O_2$), структурная формула которого приведена на рис.1.

Другие названия этого же полимера – формадур, мовиталь F пиолоформ F, ревил F или ровиналь F. Поливинилформаль (poly (vinyl formal)) был впервые синтезирован в 1927 г. В.О.Германом и В.Генелем [5], и в настоящее время служит базовым материалом для изготовления разного рода тонкопленочных

мишеней, опорных структур, и реплик или капсулирующих слоев при препарировании образцов, изучаемых методами электронной и атомно-силовой микроскопии. В технике формвар применяется главным образом в качестве изоляционного лака, с температурой эксплуатации до 105 °С, стойкого к действию масел и жиров. Поливинилформаль (PVFM) входит также в состав некоторых клеевых композитов.

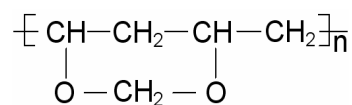


Рис.1 Структурная формула формвара [3].

Поливинилформаль – аморфный бесцветный полимер (белого цвета в порошке). В тонких слоях на просвет и отражение имеет цветовую окраску, зависящую от условий наблюдения и освещения (цвета интерференции тонких плёнок). Принято считать, что его плотность в сплошных плёнках находится в пределах $(1.23 - 1.24) \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$. Прочность на разрыв плёнок формвара около 60 – 70 МПа, то есть в 3 – 4 раза меньше, чем у такого полимера, как полиэтилентерефталат (ПЭТФ), часто используемого в рентгеновской оптике (в виде двухосноориентированных пленок). Модуль упругости – 4 ГПа, с точностью до 2 примерно такой же, как у других «тонкопленочных» полимеров (ПЭТФ, ПЭНФ, ПИ и др.). Температура стеклования формвара 85 – 95 °С, то есть чуть выше, чем у ПЭТФ (70 – 80 °С). Верхний предел рабочих температур формвара при кратковременной эксплуатации около 120 °С, при длительном нагреве порог не должен превышать 60 – 80 °С [5]. Если нагреть полимер выше 150 °С, то он разрушается и в результате термоокислительной деструкции выделяет формальдегид и воду [5].

Формваровые пленки в лабораторной технике заменили коллодиевые, так как они оказались более прочными и термически более стойкими под электронным пучком [6]. Свободные тонкие и однородные пленки формвара как прозрачные для пучка подложки в технике ЭМ получают, как правило, методом отслаивания со стекла на воду [6] с последующим закреплением на опорной сетке или стандартной бленде. Очищенную и обработанную детергентом гладкую стеклянную подложку опускают в раствор формвара в

хлороформе или дихлорэтаноле и в парах растворителя с градиентом концентрации (в длинном вертикальном сосуде) медленно вынимают заготовку на воздух при комнатных условиях (желательно без заметных следов пыли). Свежую (но уже сформировавшуюся) пленку полимера удаётся снять с подложки на поверхности чистой воды, пользуясь известными рекомендациями и приёмами [6]. В дальнейшем пленка формвара переносится на другую подложку или опорную сетку, а остатки воды на плёнке удаляются. Толщина одного слоя пленки зависит от концентрации раствора и скорости сушки слоя на стекле. Для свободно висящих подложек чаще всего готовят слои формвара толщиной в пределах 40 – 60 нм. Отметим, что формвар растворим также в уксусной кислоте, смеси (40:60) этанола с толуолом и в некоторых других распространенных (простых) растворителях. Не растворим он в спиртах, алифатических эфирах и углеводородах.

Качество изготавливаемой формваровой пленки в свободном состоянии, ее прочность и однородность определяются прежде всего чистотой исходного материала и растворителя, а также временем жизни раствора (его историей). Не рекомендуется «загрязнять» раствор следами воды и хранить его долго на свету. Некоторые условия накладываются на качество стеклянной подложки. Хорошо зарекомендовало себя исходное сырьё-реактивы поливинилформаль, поставляемое известными фирмами Monsanto, Merck, Fluka chemika (товарный номер 47716, Formvar® 15/95 E) и др. Если в растворе формвара присутствует вода, то в пленках могут появиться сквозные отверстия. Этот факт используется на практике при изготовлении пористых формваровых плёнок-подложек.

Для рентгеновской оптики и солнечной рентгеновской астрономии тонкие пленки формвара представляют особый интерес, так как сравнительно простыми средствами удаётся изготавливать большие по размеру, однородные и тонкие, малопоглощающие рентгеновское излучение пленки (фазовый материал). Ещё в 1975 г. F. Williamson и C. W. Maxson (Вильямсон и Мэксон) [7] опубликовали метод изготовления формваровых тонких пленок большой площадью (до 1800 см²) для входных окон газоразрядных счётчиков приборов рентгеновской астрономии (для экспериментов с ракетными запусками аппаратуры в верхние слои атмосферы) в мягкой рентгеновской области спектра (энергия квантов в диапазоне примерно 0.1 – 1.0 кэВ), включая область «углеродного» окна. Среди результатов исследований этих авторов следует отметить предложенный в работе способ изготовления многослойных формваровых пленок и разработанная методика тонкоплёночного

покрытия формваровых слоёв В и С с целью защиты детектора от УФ излучения Солнца.

Одно из замечательных свойств свежеприготовленных формваровых пленок состоит в том, что при слипании двух одинаковых слоёв образуется сплошная однородная (без складок) пленка формвара удвоенной толщины без оптического интерфейса на границе слипания пленок, в отличие, скажем, от электростатического прилипания двух или нескольких тонких рулонированных полимерных фольг, например, майлара (ПЭТФ), когда толщина пленок определяется суммой толщин всех слоев, но в спектрах пропускания всегда регистрируется наличие оптического интерфейса между слипшимися слоями, то есть оптические толщины пленок не складываются, даже если предположить отсутствие пыли в условиях опыта. Авторы работы [7] не исследовали этот вопрос детально, но, можно предположить, что они, видимо, использовали физические особенности устройства многослойника из формваровых пленок (у которого отсутствовали оптически неоднородные переходные слои на границе слипания соседних пленок) при метрологии формварового многослойника оптическими методами или в оценках степени его неоднородности и воспроизводимости суммарной толщины пленочного сэндвича. Со времён написания статьи [7] экспериментаторы и инженеры, занимающиеся изготовлением приборов рентгеновской оптики и астрономии неоднократно использовали поливинилформаль в своих разработках и опытах. См. например, ссылку на публикацию [8]. В ряде работ изучались не только вопросы конструирования и изготовления фильтров из формвара, но исследовались подробно физические свойства этого материала в тонких слоях [9].

В рентгеновской оптике и астрономии применение формвара вовсе не сводится только к изготовлению и использованию сверхтонких свободно-висящих пленок, разделительных мембран или многослойников для окон газоразрядных детекторов. Оно гораздо шире. На это есть веские физические причины. Кроме указанных выше свойств формвара, следует отметить еще три. Во-первых, формваровые пленки, полученные из растворов полимера при высыхании образуют прочные соединения со многими материалами (полимерами, металлами, керамикой, окислами металлов). Это свойство формвара удаётся успешно использовать при изготовлении различного рода многослойных сплошных или пористых систем из разнообразных материалов с широким спектром оптических и конструктивных свойств [10]. Композиты на основе трековых мембран со сквозными порами микронного или

субмикронного размеров (диаметров) и тонких сплошных металлических пленок с применением жертвенных (удаляемых при выполнении технологических операций) слоев могут выполнять роль эффективных защитных фильтров детекторов изображения и радиометров, предназначенных для работы в мягкой рентгеновской области спектра [3,4]. Комбинация металлизированной трековой мембраны с напыленными слоями металла на две формваровые пленки, которые приклеиваются к двум разным поверхностям мембраны, представляет собой глухую защиту для детектора от длинноволнового фонового излучения в диапазоне от УФ до ближней ИК области спектра. Блокировка светового фона такой сборкой фильтров может достигать уровня $10^{-10} - 10^{-12}$ [11].

Второе свойство формваровых пленок, интересное с точки зрения приложений рентгеновской оптики состоит в следующем. Растворы формвара в хлороформе или дихлорэтане хорошо смачивают стеклянные (и многие другие) подложки. Поэтому при равномерном высыхании раствора формвара на плоском стекле в длинном вертикальном сосуде удается получать образцы с формваровым покрытием субмикронной или микронной толщины с идеальной гладкой (атомной) поверхностью, независимо от исходной шероховатости подложки. Таким образом можно изготовить так называемое «углеродное зеркало» для отсева жесткой составляющей «белого» рентгеновского пучка с высоким коэффициентом отражения и низким уровнем рассеяного излучения в рабочей области за границей углеродного окна ($\lambda \geq 4.4i\lambda$). Тонкая металлизация (нанесение аморфных слоев металла толщиной в несколько нм, вплоть до нескольких десятков нм) гладкой поверхности формвара расширяет возможности такого рентгеновского рефлектора или спектрального фильтра «на отражение». Можно предположить, что высыхание чистого раствора формвара (при его слабой концентрации в порах или узких зазорах) будет способствовать уменьшению шероховатости стенок каналов полимерных трековых мембран и в некоторых других типов рентгеновских волноводов. Конечно, последнее предположение для каждого случая требует отдельной экспериментальной проверки.

Третья особенность слоев из формвара связана с высокой скоростью радиационного окисления поливинилформала под действием вакуумного ультрафиолетового излучения в кислородосодержащей среде (или на воздухе) даже при температуре, не сильно отличающейся от комнатной [12]. Поэтому в арсенале экспериментатора или технолога имеется простой инструмент (коммерческие отпаянные

газоразрядные лампы с окнами из фтористого магния) для полного удаления технологического слоя формвара на воздухе при комнатных условиях (за экспозицию в пределах нескольких минут) или для уменьшения его толщины (на сплошной или пористой подложке, или же в свободном состоянии). Эта свойство формвара особенно полезно, если присутствие следов органики на поверхности элементов рентгеновской оптики нежелательно, например для рентгеновского телескопа, рассчитанного на рабочую длину волны 30.4 нм, которая соответствует в спектре Солнца интенсивной линии He II [3] или рентгеновского микроскопа, функционирующего в «водяном» окне ($2.3i\lambda \leq \lambda \leq 4.4i\lambda$).

- [1] Хантер В.Р. Изготовление свободных металлических пленок и их применение в качестве светофильтров для ультрафиолетовой области спектра. В книге "Физика тонких пленок" под ред. Дж.Хасса, М.Х.Франкомба и Р.У. Гофмана. Т 7, пер. с англ. "Мир", 1977. С 52–132.
- [2]. Spiller E., Grebe K, Golub L. Proc. SPIE. V.1160, 66 (1989).
- [3] Mitrofanov A., Pudonin F., Starodubzev N. and Zhitnik I. Proceedings of SPIE. V 3406, 35 (1998).
- [4] Dominique M., Mitrofanov A.V., Hochedez J.-F. at al. Appl. Opt., 48, №5, 834 (2009).
- [5] Энциклопедия полимеров. Издательство «Советская энциклопедия» под ред. В.А.Кабанова (главный редактор) и др. М., 1974. Т.2. С.798.
- [6] Б.Уитни. Электронная микроскопия для начинающих. Издательство «Мир», М. 1975. С.305.
- [7] Williamson F. and Maxson C.W. Rev. Sci. Instrum. V 46. N1, 50 (1975).
- [8] Chowdhury A., Naik P.A. and Gupta P.D.. Sadhana. V 24. N6, 551 (1999).
- [9] Dey S. and Williams J.F. Phys. D: Appl Phys. . V 21, 108. (1988).
- [10] Mitrofanov A.V. and Tokarchuk D.N. Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Res. V. A282, 546 (1989).
- [11]. Митрофанов А.В. ПТЭ.. №5, 137 (1997).
- [12]. Mitrofanov A.V. Proc. of Moscow Phys.Soc.. V.9, 147. (1999).

Рентгеновский фильтр на периодическом структурированном волноводе

Л.И. Огнев¹, И. Букреева², А. Cedola², А. Diaz³, А. Sorrentino^{2,4}, Е. Giovine²,
F. Scarinci², W. Jark⁵, S. Lagomarsino⁶

¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

²IFN-CNR, Rome, Italy

³PSI, Villigen, Switzerland

⁴ALBA, CELLS, Spain

⁵Sincrotrone Trieste, Trieste, Italy

⁶IPCF-CNR, Rome, Italy

e-mail: liognev@gmail.com

К настоящему времени диагностика высокотемпературной плазмы в токамаках по рентгеновскому излучению, не требующая применения зондовых измерений, становится весьма важным методом. Поэтому актуально создание как миниатюрных коллиматоров рентгеновского излучения с ограничением по углу ниже геометрического предела, так и спектрометров, например, на основе рентгеновских волноводов [1, 2].

В работе [3] было предложено использовать структурированный по длине щелевой канал для фильтрации рентгеновского излучения. Ранее наличие продольных периодических малых возмущений канала исследовалось в работе [4] для объяснения нарушения монотонности энергетической зависимости пропускания рентгеновским волноводом [5]. В настоящей работе экспериментально на синхротронном источнике и теоретически на основе численного

излучения через щелевую структуру, изображённую на Рис. 1.

При численном моделировании на входе в канал задавалась плоская рентгеновская волна с гауссовым профилем интенсивности, ширина которого в несколько раз превосходила ширину щели. Для решения параболического уравнения использовался как метод конечных разностей, так и схема расщепления [4] с последовательным учётом дифракции и изменения фазы на каждом шаге. Из результатов расчётов следует, что пропускание излучения с энергией 8 keV каналом в зависимости от ширины щели имеет несколько максимумов при 164 nm, 232 nm, 292 nm. Результаты для интенсивности, интегрированной по ширине канала 164 nm, показаны на Рис. 2 для различных углов влёта, причём положительные углы соответствуют направлению на гладкую стенку канала. Для сравнения на Рис. 3 приведено прохождение интегральной интенсивности в канале с гладкими стенками. Критический (френелевский) угол $\theta_F=0.0039$ радиан.

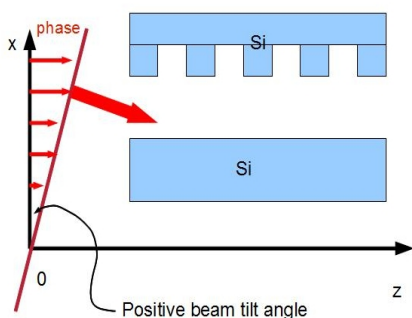


Рис. 1. Волноводный канал длиной 4 mm, образованный гладкой и структурированной поверхностями кремния с шагом 100 μm (гребень) +100 μm (бороздка) и шириной щели $d=150 - 400$ nm.

интегрирования параболического уравнения для амплитуды поля рентгеновского излучения исследуется прохождение рентгеновского

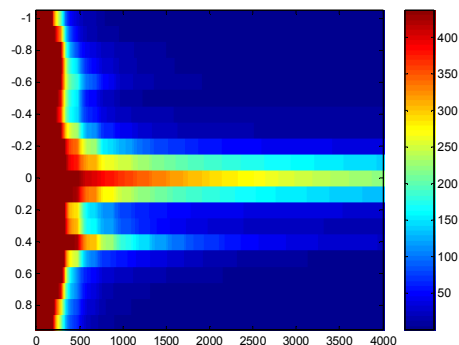


Рис. 2. Динамика по глубине интегральной интенсивности в канале шириной 164 nm с продольной структурой при входных углах от $-1 \theta_F$ (верх) до $0.9 \theta_F$ (низ) критического угла.

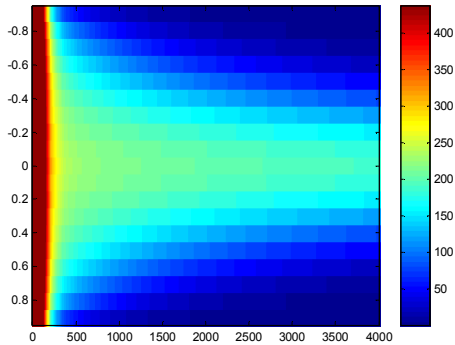


Рис. 3. Динамика по глубине интегральной интенсивности в гладком канале при входных углах от -0.9 (верх) до $0.9 \theta_F$ (низ) критического.

На Рис. 4 приведена зависимость интенсивности в центре структурированного канала шириной 164 nm , близкой к резонансу, для первых 4 mm . На том же рисунке условно показан профиль ступенек структурированной поверхности кремния. Видно, что максимумы интенсивности пучка совпадают с положением выступов гребёнки в канале, что обеспечивает эффективное отражение от структурированной стенки.

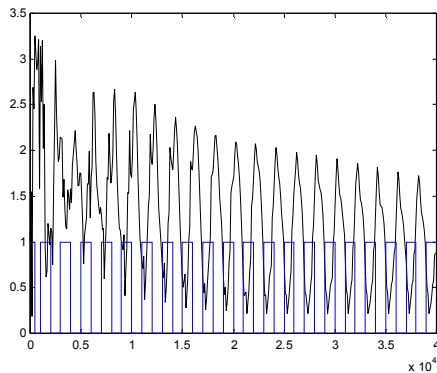


Рис. 4. Динамика по глубине интенсивности в центре структурированного канала при нулевом входном угле. Ширина 164 nm . $E=8 \text{ keV}$. Выступы в нижней части рисунка соответствуют структуре стенки волновода.

Из результатов на Рис. 2 видно, что пропускание в структурированном канале максимально при нулевом угле влёта. Значительно более слабое пропускание имеет место при угле влёта $0.4 \theta_F$, причём при отрицательных углах, когда пучок направлен на структурированную стенку, максимум отсутствует. Для сравнения в канале с гладкими стенками (Рис. 3) пропускание канала существенно возрастает, происходит лишь сдвигом углов падения и ограничено лишь углом θ_F . Зависимости интегральной интенсивности в структурированном канале при нулевом угле падения и $0.4 \theta_F$ показаны на Рис. 5

кривыми 1 и 2. Затухание пучка для нерезонансной ширины канала 158 nm показано кривой (3) для нулевого угла влёта. Видно, что затухание в структурированном канале в максимуме пропускания примерно в 2 раза больше, чем в гладком канале (кривая 4), однако в несколько раз меньше, чем в нерезонансном случае ширины 158 nm .

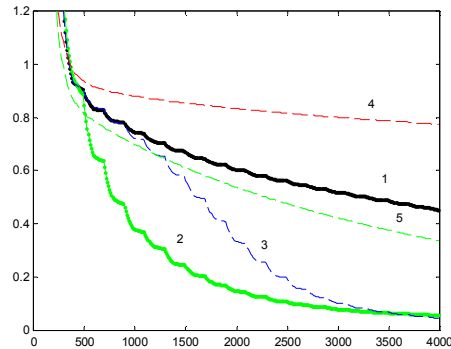


Рис. 5. Динамика по глубине интегральной интенсивности в структурированном канале шириной 164 nm при нулевом входном угле (1) и $0.4 \theta_F$ (2). Ширина канала 158 nm при нулевом входном угле (3). В гладком канале 160 nm при нулевом входном угле (4) и $0.4 \theta_F$ (5).

Динамика по глубине канала поперечного фурье-спектра волновой функции показана на Рис. 6 для нулевого угла влёта. При падении пучка под отрицательными углами на структурированную поверхность происходит быстрое расплывание поперечного спектра, что приводит к падению пропускания, если же пучок сначала падает на гладкую поверхность, как на Рис. 7, то происходит формирование центрального пучка.

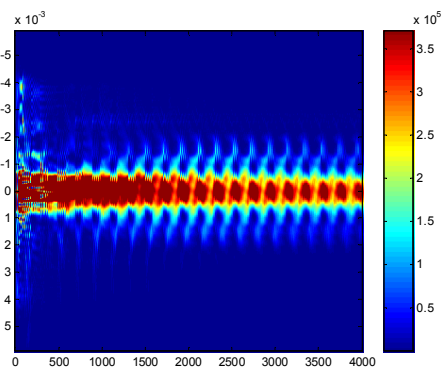


Рис. 6. Динамика по глубине углового спектра в структурированном канале 164 nm при нулевом входном угле.

Для сравнения на Рис. 8 показана динамика спектра в гладком канале для угла падения $0.4 \theta_F$.

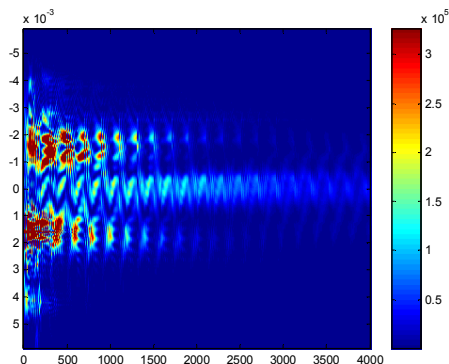


Рис. 7. Динамика по глубине углового спектра в структурированном канале 164 nm при входном угле $0.4\theta_F$ (паде-ние на гладкую стенку).

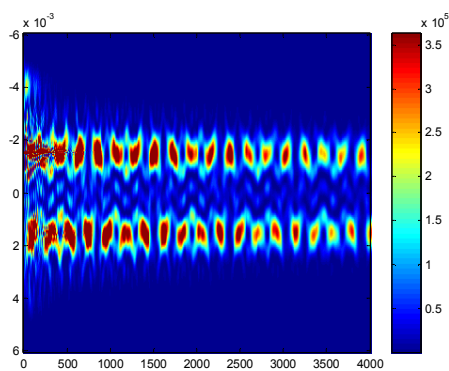


Рис. 8. Динамика по глубине углового спектра в гладком канале 160 nm при угле входа $-0.4\theta_F$.

Характерные экспериментальные распределения интенсивности на детекторе на расстоянии 7.2 m от выхода волновода показаны на Рис. 9 и 10. По горизонтальной оси отложен угол качания наклона волновода. Вертикальная ось графика отражает распределение интенсивности на детекторе при различных углах наклона волновода. Видно, что прохождение пучка через волновод на Рис. 9 ограничено узким диапазоном углов, аналогично Рис. 2 для резонансного прохождения через структурированный волновод. Распределение на Рис. 10 характерно для пропускания гладкого волновода (в данном измерении канал слегка расширился). Выходное распределение соответствует угловому спектру резонансных волноводных мод, номер которых возрастает при увеличении угла влёта пучка по отношению к плоскости канала.

Работа частично поддержана грантом НШ-4361.2012.2 Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ.

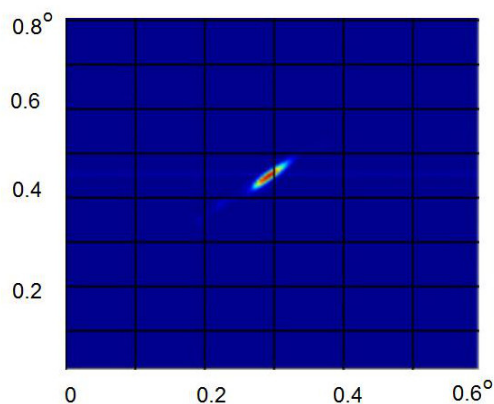


Рис. 9. Измеренная интенсивность излучения на детекторе (вертикальная ось) за структурированным каналом при качании входного угла волновода (горизонтальная ось на рисунке). Расстояние до детектора равно 7.2 m, размер пикселя 172 μm . Ширина канала около 200 nm.

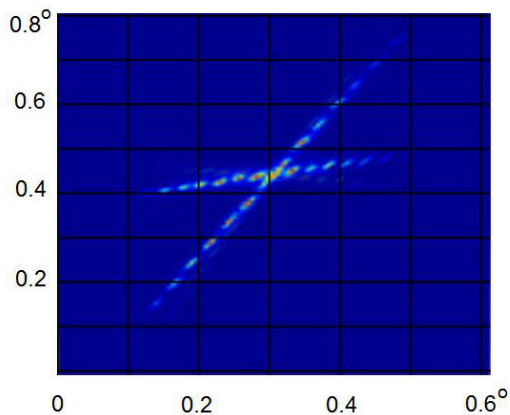


Рис. 10. Измеренная интенсивность излучения на детекторе при качании волновода с гладким каналом.

- [1] S. Lagomarsino, W. Jark, S. Di Fonzo, A. Cedola, B. Muller, P. Engstrom and C. Riekel, *J. Appl. Phys.* 79, 4471 (1996).
- [2] Y.P. Feng, S.K. Sinha, E.E. Fullerton, G. Grubel, D. Abemathy, D.P. Siddons, and J.B. Hastings, *Appl. Phys. Lett.* 67, 24 (1995).
- [3] Bukreeva I., Cedola A., Sorrentino A., Pelliccia D., Asadchikov V., Lagomarsino S., *Optics Letters*, 36, 2602 (2011).
- [4] Боброва Т.А., Огнев Л.И., *ПЖТФ*, 26, вып. 23, 1 (2000).
- [5] Yark W., Di Fonzo S., Soullie G., *et al.*, *J. Alloys Compd.*, 286, 9 (1999).

Численное исследование двумерных изображений, формируемых в методе фазового контраста Цернике в жестком рентгеновском излучении

В. Г. Кон,¹ М. А. Орлов²

¹ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

e-mail: mikhorlov@yandex.ru

С появлением источников синхротронного излучения (СИ) 3-го поколения, характеризующихся высокой степенью пространственной когерентности пучков рентгеновского излучения, открылись новые возможности для неразрушающего исследования внутренней структуры слабопоглощающих некристаллических объектов. В частности, получил развитие метод фазового контраста, позволяющий существенно снизить дозу излучения, поглощенного образцом в процессе получения изображения.

Однако обе разновидности этого метода, а именно, фазодисперсионная интроскопия [1] и in-line голография Габора [2], обладают существенными недостатками. Например, эти методы не позволяют видеть точный профиль сдвига фазы, создаваемый объектом, непосредственно на детекторе. Они являются слабо чувствительными к плавным изменениям плотности в образце и не применимы для исследования структуры объектов субмикронного размера.

Этих недостатков можно избежать, если применить в рентгеновском диапазоне длин волн известный из оптики видимого света метод фазового контраста Цернике [3], в котором для формирования изображения используется фокусирующий элемент (объектив), а в плоскости фокусировки источника помещается четвертьволновая фазосдвигающая пластинка. При этом наличие объектива позволяет увеличивать изображение в десятки раз. В [4] были представлены результаты компьютерного моделирования эксперимента по визуализации объектов микронных размеров с помощью метода Цернике в одномерном случае.

В данной работе представлены результаты расчетов в двумерном случае. Рассмотренная схема эксперимента показана на Рис. 1. Все указанные объекты считались плоскими. В расчетах использовалось стандартное парааксиальное приближение, в котором перенос излучения вдоль оптической оси (ось z) по пустому пространству описывается с помощью свертки амплитуды электрического поля излучения (волновой функции) с пропагатором Кирхгофа

$$P(x, y, z) = \frac{1}{i\lambda z} \exp\left(i\pi \frac{x^2 + y^2}{\lambda z}\right),$$

где x и y – координаты в плоскости, перпендикулярной оптической оси, λ – длина волны излучения.

Перенос излучения через объекты описывался методом умножения волновой функции на трансмиссионную функцию объекта

$$T(x, y) = \exp\left(-i[\delta - i\beta] \frac{2\pi}{\lambda} t(x, y)\right),$$

где функция $t(x, y)$ описывает изменение продольной толщины объекта вдоль луча, отклоненного в точку с координатами x, y (δ и β – индексы преломления и поглощения материала, из которого состоит образец).

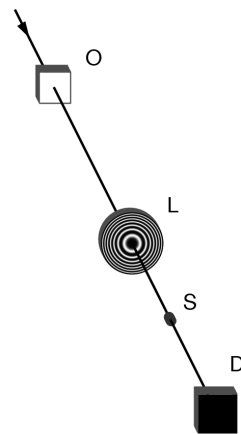


Рис. 1. Схема фазового контраста Цернике для рентгеновских лучей. Слабо расходящийся пучок СИ падает слева и сверху, O – объект, L – преломляющая параболическая линза или зонная пластинка, S – фазосдвигающая пластинка, D – координатный детектор. При изображении без увеличения объект и детектор помещаются на двойном фокусном расстоянии от объектива.

Расчет свертки волновой функции излучения с пропагатором Кирхгофа проводился методом двойного преобразования Фурье, то есть в три этапа, а именно, сначала вычислялся фурье-образ волновой функции, затем он умножался на фурье-образ пропагатора Кирхгофа, известный в аналитическом виде, затем вычислялось обратное фурье-преобразование. Использовался метод быстрого преобразования Фурье (FFT).

Особенность двумерных расчетов заключается в том, что приходится использовать относительно малое число точек по обоим поперечным осям. При использовании FFT для получения отчетливых изображений желательнее задавать одновременно большие размеры расчетной области и маленькие шаги сетки. Это достижимо в одномерном случае, однако в двумерных расчетах такая возможность ограничивается параметрами современных компьютеров. В данной работе использовалась расчетная сетка из $N = 1024 \times 1024$ точек. Малое число точек расчетной сетки приводит к возникновению известных артефактов, в частности, краевых искажений. При этом необходимо задавать расчетную область больше изображения объекта (oversampling), а затем обрезать изображение по краям.

В процессе расчетов комплексная волновая функция поля излучения в прямом пространстве записывалась в числовой массив на диск. И затем три раза выполнялось пропагирование излучения через объект и через пустое пространство. При этом каждый раз использовалась фактически одна и та же вычислительная процедура, в которой менялись объекты (сам изображаемый образец, объектив, фазосдвигающая пластинка) и расстояния между ними.

На Рис. 2 (а) показано изображение серии кремниевых объектов одинакового продольного размера, формируемое в схеме с использованием составной преломляющей бериллиевой линзы. Использовались стандартные для Европейского центра синхротронного излучения (ESRF, Гренобль, Франция) параметры эксперимента, а именно, расстояние источник – линза 50 м, поперечный размер источника 50 мкм. Линза состояла из 60 двояковогнутых элементов с радиусом кривизны 50 мкм. Энергия излучения $E = 16$ кэВ, фокусное расстояние линзы 31.4 см.

На рисунке виден постепенный спад фоновой интенсивности при движении от центра к краю, связанный с поглощением в периферийных участках линзы. Контрастность изображения удаленных от оптической оси объектов также оказывается ниже, чем у центральных образцов. Однако этот дефект можно исправить и получить качественное изображение всех объектов, если применить метод, аналогичный используемому в птихографии [5].

Он заключается в том, что крупный объект изображается не целиком, а по частям, то есть закрывается диафрагмой определенного размера, которая располагается напротив той области объектива, где получается наиболее качественное изображение. При этом каждый раз рассматриваемая часть объекта располагается перед диафрагмой. В случае с линзой это центральная часть апертуры линзы.

Затем полученные изображения участков объекта складываются в единую картину. При этом существенно, что изображается только часть объекта, которая выделяется диафрагмой, в то время как остальная часть пучка блокируется. На Рис. 2 (б) показано изображение тех же объектов, что и на Рис. 2 (а), но полученное описанным выше методом. Видно, что такой подход позволяет заметно улучшить качество изображения и выровнять контраст.

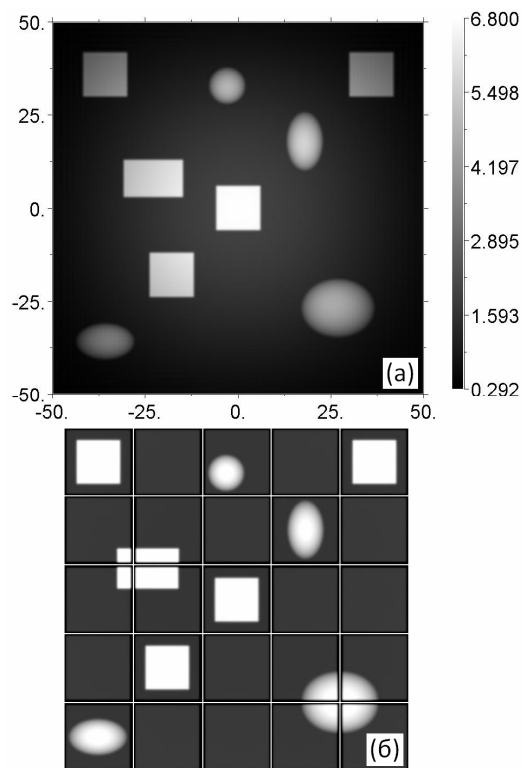


Рис. 2. Изображение линзой серии кремниевых объектов: (а) без применения птихографии; (б) с применением птихографии. На осях верхнего рисунка координаты измеряются в микронах.

Расчеты показали, что при изображении объектов различного продольного размера относительная интенсивность изображения равна удвоенному сдвигу фазы, вносимому объектами, что и должно наблюдаться в методе фазового контраста Цернике. Однако при этом проседает фоновая интенсивность около изображения объектов. Последний эффект следует из закона сохранения интегральной интенсивности, поскольку увеличение интенсивности не связано с дополнительными источниками и происходит только за счет когерентного перераспределения.

В работе также были выполнены расчеты двумерных изображений, формируемых зонной пластинкой. Качество изображений при этом оказывается хуже, чем при использовании составной преломляющей линзы, поскольку

зонная пластинка обладает большим числом порядков фокусировки и на формирование изображения в первом порядке используется лишь 40% интегральной интенсивности. Кроме того, при использовании зонной пластинки необходимо искусственно уменьшать степень пространственной когерентности, чтобы ослабить влияние спеклов, связанных с резкими краями зон.

Расчеты показали, что если объекты располагаются в центральной области апертуры зонной пластинки, то на изображение объектов накладывается изображение центральных зон зонной пластинки. С другой стороны, при рассмотрении зонных пластинок с большим числом зон, когда размер крайней зоны становится сравнимым с шагом сетки, в изображении возникают артефакты.

Поэтому в расчетах с использованием зонной пластинки, как и в случае с линзой, для улучшения качества изображения удобно применять методику наложения диафрагмы, аналогичную методу птихографии. Однако в данном случае диафрагму, вырезающую часть объекта, следует помещать не в центре, а на определенном удалении от него. Обычно в экспериментах объект помещают ближе к краю апертуры, где находятся наиболее мелкие зоны, и за счет этого улучшают разрешение.

В численных расчетах объект следует расположить так, чтобы, с одной стороны, зоны были достаточно мелкими, с другой – чтобы на одну зону приходилось достаточное число точек для адекватного описания рельефа зонной пластинки. Как и в случае с линзой, данный подход позволяет сделать изображение более качественным.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 10-02-00047а.

- [1] Соменков В. А., Ткалич А. К., Шильштейн С. Ш. ЖТФ, т. 61, стр. 197-201 (1997)
- [2] A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn, S. Kuznetsov, I. Schelokov. Rev. Sci. Instrum., vol. 66, N. 12, p. 5486-5492 (1995).
- [3] Zernike F. Z. tech. Phys., 16, 454 (1935).
- [4] В.Г. Кон, М.А. Орлов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, вып. 11, с. 76-81 (2010).
- [5] J. M. Rodenburg. Ptychography and Related Diffractive Imaging Methods, в серии «Advances in imaging and electron physics», V. 150, P. 87.

Короткопериодные многослойные зеркала на основе углерода и переходных металлов

Гайкович П. К., Парьев Д. Е., Салашенко Н. Н., Стариков С. Д., Чхало Н. И.
Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия
E-mail: Pariev@ipmras.ru

«Углеродное окно», лежащее в интервале от 4.4 нм (край поглощения углерода) до 5 нм, занимает особое место в диапазоне мягкого рентгеновского излучения. Это связано с тем, что углеродосодержащие материалы, к числу которых относятся биологические и медицинские объекты, полимеры, углеродные волокна, конгломераты нанотрубок и др., наиболее прозрачны для мягкого рентгеновского излучения в этой части спектра, что обусловлено К-скачком поглощения углерода на длине волны 4.37 нм. Как писалось в [1], разница в коэффициентах поглощения клеточных структур и веществ (органелл) в «углеродном окне» в 5-6 раз больше, чем в «водном окне». Такая разница в величине поглощения, например, позволяет исследовать различные органические объекты, находящиеся в парафине, и получать рентгенооптические изображения веществ и биологических структур приемлемого контраста. Развитие рентгеновской микроскопии «углеродного окна» связано с созданием эффективной рентгенооптической системы, которая, в наибольшей степени определяется пиковыми и интегральными коэффициентами отражения многослойных интерференционных структур (МИС). Для задач рентгеновской диагностики различных объектов важным является и спектральное разрешение многослойных дисперсионных элементов. В [2] изучались характеристики зеркал на основе Co/C. Сообщается о достижении коэффициентов отражения в окрестности длины волны 4.47 нм до 14.8% при спектральном разрешении $\lambda/\Delta\lambda \approx 217$.

Особенно важна величина коэффициента отражения многослойных зеркал в случае применения их в многозеркальных схемах. Например, оптическая схема рентгеновского микроскопа даже в простейшем случае состоит из 3-х зеркал (2 зеркала объектива и коллектор). При такой оптической схеме даже для рекордных значений коэффициента отражения зеркал, $R \approx 0.15$, энергетическая эффективность микроскопа составляет малые доли процента. Поэтому поиск новых материалов многослойных структур, которые обеспечат более высокие коэффициенты отражения зеркал нормального падения, является крайне актуальным.

На рис. 1 приведены расчетные спектральные зависимости коэффициентов отражения наиболее перспективных материалов

в окрестности длины волны 4.7 нм. Оптические константы материалов брались из [3]. Как видно из рисунка, по расчетному пиковому коэффициенту отражения наиболее оптимальными зеркалами являются многослойные зеркала на основе Ni/C, Cr/C и Co/C. Как правило, для нанесения подобных многослойных покрытий применяется технология магнетронного распыления. Поэтому, учитывая, что хром в отличие от кобальда и никеля является немагнитным материалом, с точки зрения технологичности наиболее предпочтительной парой материалов является Cr/C. Ранее отмечалось [4,5], что многослойные структуры на основе Cr/C отличаются высоким качеством межслойных границ. Поэтому первым металлом для изучения был выбран Cr.

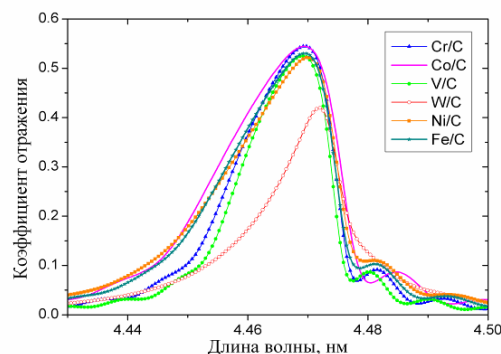


Рис. 1. Теоретический коэффициент отражения структур Cr/C, Co/C, V/C, W/C, Ni/C, Fe/C.

С целью определения оптимальных параметров для достижения максимальных отражательных характеристик было проведено моделирование отражательных характеристик Cr/C МИС нормального падения $\theta = 85^\circ$ для длины волны 4.47 нм. Были получены следующие параметры для «идеальной структуры» (без межслойных шероховатостей): число периодов $N = 378$ (коэффициент отражения равен 0.95 от максимального), период $d = 2.248$ нм, доля хрома в периоде $\beta = d_{Cr}/d = 0.25$, коэффициент отражения $R_t = 54.5\%$, спектральная селективность $S = 249$, интегральный коэффициент отражения $R_{in} = 0.0115$ нм.

Для исследований были изготовлены образцы Cr/C МИС с периодом $d = 2.27$ нм и с числом слоев $N = 200$. В таблице 1 приведены типичные отражательные характеристики

изготовленных структур (образец D10). Как видно коэффициент отражения на длине волны $\lambda = 4.47$ нм при угле скольжения $\theta = 81.6^\circ$ и спектральной селективности $S = 157$ составил $R = 15.4\%$.

Сравнение отражательных характеристик изготовленных зеркал с мировым уровнем показано в таблице 2. Данные по коэффициентам отражения были взяты из [6-7]. Из таблицы видно, что изготовленные в настоящей работе Cr/C зеркала имеют рекордные коэффициенты отражения. Более корректное сравнение коэффициентов отражения Co/C и Cr/C зеркал с учетом некоторого (до $\approx 3\%$) различия величины периодов показывает, что коэффициент отражения Cr/C МИС, изготовленной в данной работе, примерно на 10% выше, что при применении в 3-х зеркальной оптической системе дает выигрыш в эффективности на $\approx 30\%$.

Таблица 1. Рентгеновские характеристики Cr/C многослойного зеркала, образец D10.

λ , нм	R , %	θ , °	$\Delta\theta$, °	S
0.154	45.6	1.963	0.013	151
4.47	15.4	81.62	2.5	157

Таблица 2. Сравнение изготовленных многослойных зеркал для “углеродного окна” с мировым уровнем.

Структура	d , нм	Угол, °	λ , нм	R , %	Место
Cr/C	2.23	81.6	4.47	15.4	ИФМ РАН
Co/C	2.29	85	4.56	14.8	ФИАН/Харьковский политехнический институт [9]
Cr/C	2.25	85	4.47	11.5	ИФМ РАН [8]
V/C	2.3	80	4.6	7.9	Osmic, Inc. [8]
Cr/C	2.4	85	4.8	7	LBNL [8]
W/C	2.3	87	4.5	5.9	Paul Scherrer Institut [8]

Несмотря на рекордные значения, экспериментальные коэффициенты отражения оказались существенно меньше теоретических. Результаты подгонки (рис. 2) показывают, что последнее можно объяснить как отличием

плотности слоев от табличных значений, так и, в особенности, влиянием межслойных шероховатостей, которые оказывают заметное действие именно в короткопериодных структурах. Для лучшей подгонки пришлось в верхнем периоде вместо чистого хрома включить оксид хрома Cr_2O_3 . Хорошая подгонка экспериментальной кривой теоретической в широком диапазоне углов указывает на очень высокую степень периодичности структур. Уширение высших брэгговских пиков указывает на то, что флуктуации и детерминированный уход периода не превышают 0.1%.

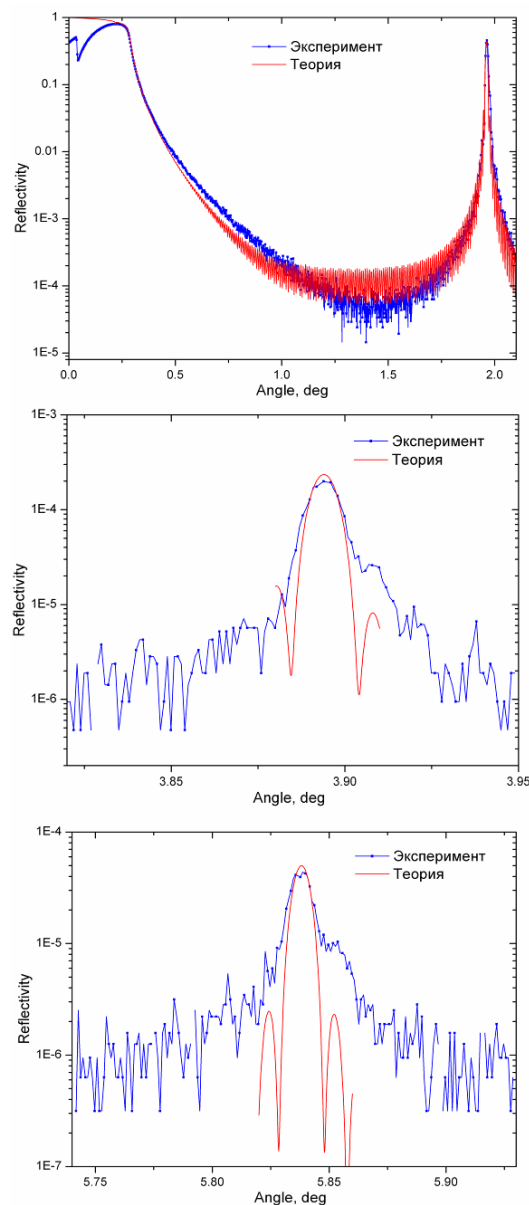


Рис. 2. Экспериментальный и вычисленный коэффициенты отражения Cr/C зеркала: в области критического угла и первого, второго и третьего брэгговского пика при $\lambda = 0.154$ нм.

На длине волны $\lambda = 4.478$ нм (рис.3) наблюдается довольно сильное расхождение эксперимента и теории, что можно объяснить недостаточно точным знанием оптических констант углерода в области аномальной дисперсии вблизи собственного края поглощения.

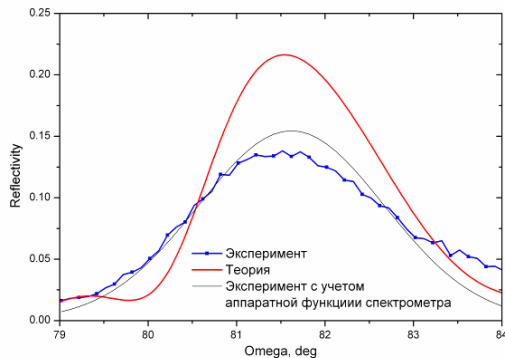


Рис. 3. Экспериментальный и вычисленный коэффициенты отражения Cr/C зеркала при $\lambda = 4.478$ нм.

В работе синтезированы и детально изучены короткопериодные Cr/C МИС, представляющие значительный интерес для применения в высокоразрешающей рентгеновской микроскопии в “углеродном окне прозрачности” ($\lambda = 4.4-5$ нм). Угловые зависимости коэффициентов отражения жесткого рентгеновского излучения ($\lambda = 0.154$ нм) показали высокую степень структурного совершенства МИС. Случайные флуктуации и систематические изменения периода зеркал не превышают 0.1%. По данным этих измерений удалось достаточно точно определить параметры “элементарной” ячейки (толщина слоев хрома 1.080 ± 0.001 нм, толщина слоев углерода 1.194 ± 0.001 нм, шероховатость границы C-Cr 0.312 нм) и плотность пленок: $\rho_{Cr} = 0.87\rho_{bulk}$, $\rho_C = 1.03\rho_{bulk}$. Обращает на себя внимание, что пленки Cr толщиной всего ≈ 1 нм имеют плотность, близкую к плотности массивного материала. Коэффициент отражения в первом брэгговском пике на длине волны $\lambda = 0.154$ нм составил 68% от теоретического предела.

В мягком рентгеновском диапазоне, в окрестности $\lambda = 4.7$ нм, измеренные коэффициенты отражения превышают полученные ранее, что особенно важно в случае применения МИС в многозеркальных системах. Таким образом, показано, что на данный момент времени наилучшей парой материалов для “углеродного окна” является Cr/C. Тем не менее, экспериментальные коэффициенты отражения на длине волны 4.7 нм оказались ниже, чем максимально возможные. Значительная часть

этого падения объясняется влиянием межслоевой шероховатости и меньшей, чем для массивно материала, плотностью хрома (0.87 от массива). Однако, часть падения, почти 30%, см. рис. 4, не может быть объяснена какими-либо структурными дефектами. По-видимому, это связано с неточностью оптических констант углерода в области К-края поглощения.

Еще одним важным результатом данной работы является демонстрация высокой степени периодичности структуры Cr/C МИС, что позволяет их использовать в качестве фазовращателей в данном спектральном диапазоне, т.к. фазосдвигающие свойства многослойных структур “на просвет” очень чувствительны к флуктуациям толщин пленок [8].

В дальнейшей работе вместо Cr будут изучаться другие металлы. Ожидается, что пара Co/C будет иметь больший интегральный коэффициент отражения.

Работа поддержана грантами РФФИ 09-02-00912, РФФИ 11-02-00961, РФФИ 10-02-00957, РФФИ 11-02-00597, РФФИ 11-02-97109-р и ФПЦ “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы”.

- [1] L. A. Artyukov, A.V. Vinogradov, Yu. S. Kas'yanov et al. X-ray microscopy in the carbon window region // *Quantum Electronics*. 2004. V. 34(8). P. 691-692.
- [2] E. A. Бугаев. PSE. 2009. V. 7. No. 1-2. P. 69-75.
- [3] B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. July 1993. V. 54. No. 2. P. 181-342.
- [4] Andreev S.S., Akhsakhalyan A.D., Bibishkin M.S., Chkhalo N.I., Gaponov S.V., Gusev S.A., Kluev E.B., Prokhorov K.A., Salashchenko N.N., Schafers F., Zuev S. Yu. Multilayer optics for XUV spectral region: technology fabrication and applications // *Central European Journal of Physics*. 2003. V. 1. P. 191-209.
- [5] Carraro L., Puiatti M.E., Scarin P., Valisa M., Chkhalo N., Kruglyakov E.P. The ultra-soft x-ray multilayer mirror-based duochromator for the reverse field pinch experiment // *Review of Scientific Instruments*. January 1997. V. 68. No. 1. P. 1043-1046.
- [6] <http://henke.lbl.gov/multilayer/survey.html>.
- [7] I. A. Artyukov, Ye. A. Bugayev, O. Yu. Devizenko et al. Carbon window soft x-ray imaging using multilayer optics // *Proc. SPIE*. 2005. V. 5919. P. 94-103.
- [8] Барышева М.М., Сатанин А.М., Чхало Н.И. Численный анализ. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2006. №2. С. 96-100.

Установка ионно-пучковой и плазмохимической коррекции формы оптических поверхностей. Первые эксперименты

И.Г. Забродин, И.А. Каськов, И.М. Нефедов, А.Е. Пестов, Н.Н. Салашенко, Н.И. Чхало
Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия
e-mail: aepestov@ipm.sci-nnov.ru

Введение

В настоящее время в ИФМ РАН активно развивается методика прецизионной коррекции формы поверхностей оптических (рентгенооптических) элементов методом ионно-пучкового травления [1]. Методика призвана обеспечить изготовление поверхностей (в том числе асферических) со среднеквадратическим отклонением формы (пространственные частоты 10^{-3} – 10^0 мкм⁻¹) от расчетных параметров на уровне 0,3–1,0 нм и шероховатостью в диапазоне средних (10^0 – 10^2 мкм⁻¹) и высоких пространственных частот (10^2 – 10^6 мкм⁻¹) лучше 0,4 нм.

Эксперименты проводятся на установке ионно-пучкового травления, описание которой представлено в [1]. Несмотря на то, что прибор позволяет проводить изучение влияния ионно-пучкового травления на параметры поверхности в широком диапазоне энергий и углов падения ионов на поверхность образца, его размеры не позволяют корректировать крупногабаритные детали. В частности, подложка зеркала M2 объектива ЭУФ нанолитографа [2] с диаметром 220 мм могла корректироваться только при углах падения ионов на поверхность больше $\theta=45^\circ$ (от нормали), что не эффективно с точки зрения динамики шероховатости [3].

Для сохранения шероховатости поверхности на исходном уровне, кроме приближения угла падения ионов к нормали необходимо снижать энергию налетающих ионов, что, однако, приводит к значительному падению скорости травления. Поэтому перспективным видится применение плазмохимического травления, которое обладает большей скоростью распыления, соответственно можно значительно понизить энергию налетающих ионов с сохранением заметной скорости распыления.

Кроме того, коррекция формы поверхности через маску [1], приводит к развитию среднечастотных шероховатостей (образование острых кромок и подпыление на границе маски). Поэтому желательно проведение коррекции и “ретуши” безмасочным способом.

Для решения обозначенных выше проблем разработан стенд ионно-пучкового и плазмохимического травления, позволяющий проводить коррекцию формы поверхности (выпуклых, вогнутых) диаметром до 300 мм.

Описание установки

Установка ионно-пучкового и плазмохимического травления имеет значительно большие габариты, чем лабораторный стенд [1].

Схема и фотография прибора со стойкой управления представлены на рис. 1.

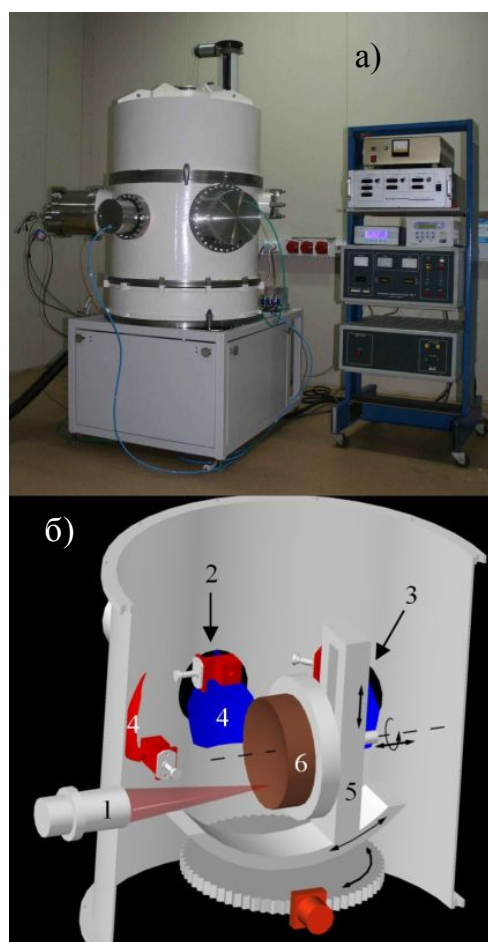


Рис. 1. Фотография (а) и схема (б) установки ионно-пучкового и плазмохимического травления. 1. источник с фокусировкой ионного пучка; 2. источник с холодным катодом (апертура $\varnothing 150$ мм); 3. источник с накаливаемым катодом (апертура 60x90 мм2); 4. заслонка - измеритель ионного тока; 5. пятиосный гониометр; 6. образец.

Установка включает в себя вакуумную камеру, три источника ускоренных ионов и гониометр с пятью степенями свободы (наклон, вращение вокруг оси образца, линейное перемещение поперек и вдоль оси вращения и поворот см. рис.1б).

Гониометр позволяет проводить коррекцию во всем диапазоне углов падения ионов на поверхность образца, в частности, обеспечивает локальную нормаль к любой точке поверхности любой формы (выпуклая, вогнутая) в точке падения пучка ионов и проводить сканирование ионным пучком по поверхности образца (программное обеспечение позволяет задать матрицу координат и время экспозиции в точке).

В приборе применены три технологических источника ускоренных ионов (рис.3):

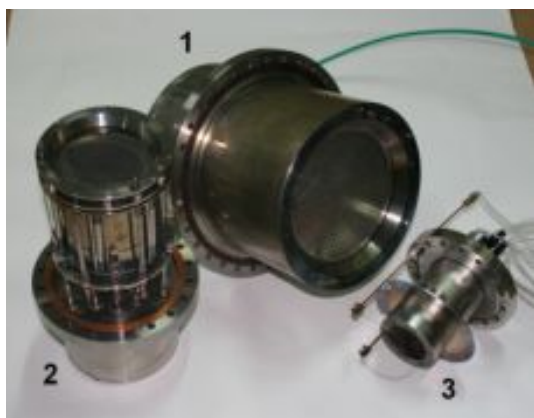


Рис.3. Источники ускоренных ионов: 1. источник с холодным катодом КЛАН-205М (апертура $\varnothing 150$ мм); 2. источник с накаливаемым катодом КЛАН-103М (апертура 60x90 мм²); 3. источник с фокусировкой ионного пучка (АКТАН, Москва).

Широкоапертурные источники ионов с квазипараллельным ионным пучком позволяют проводить коррекцию формы поверхности через маску, а источник с фокусировкой ионного пучка предназначен для проведения “ретуши” и коррекции формы безмасочным способом. На рисунке 1б представлена опция “ретуши” сфокусированным пучком ускоренных ионов без маски. Фокусировка ионов осуществляется за счет ионно-оптической системы, представляющей собой пару сколлимированных вогнутых сферических сеток, обеспечивающих сжатие ионного пучка до 10 мм в диаметре на расстоянии 70 мм от выходной апертуры источника. С помощью охлаждаемых диафрагм диаметр ионного пучка может быть уменьшен до 1 мм.

Для работы с диэлектрическими материалами применяется дополнительный термокатод-нейтрализатор, установленный на выходе ионного источника, позволяющий полностью скомпенсировать заряд ионного

пучка и проводить травление нейтральными атомами.

Применяемые в приборе источники ускоренных ионов с холодным катодом (поз.1 и поз.3 на рис.3), позволяют использовать активные газы и изучать влияние на шероховатость поверхности плазмохимического травления, которое обладает высокой скоростью травления. Следовательно, при сохранении заметной скорости распыления возможно будет снизить энергию ионов до значений в несколько десятков электрон-вольт, что интересно с точки зрения сохранения шероховатости поверхности на сверхгладком уровне.

Управление установкой, включая вакуумную откачку и напуск воздуха в камеру, включение/выключение, задание и поддержание рабочих параметров источников ускоренных ионов и положение образца относительно ионного пучка, сканирование ионным пучком по поверхности, полностью автоматизировано на базе PC совместимого (процессор AM186ES) контроллера I-8431 фирмы ICP DAS (Тайвань). Программное обеспечение контроллера написано на языке C (Borland C++ 3.1). НМИ (человеко-машинный интерфейс) построен в среде LabView 7.02 (National Instruments), что позволяет использовать любой компьютер (PC, Macintosh, Sun) с любой операционной системой (Win9x, WinNt, 2000, XP, Vista,7, MacOS, Unix), удовлетворяющей требованиям LabView.

Эксперименты

Для проведения коррекции формы сфокусированным ионным пучком написана программа по расчету времени травления в каждой точке с учетом реального распределения плотности ионного тока в пучке.

Программа на входе получает карту распределения высот (отклонения от расчетной формы) по поверхности, производится поиск минимума свертки функций пучка и поверхности и на выходе выдается карта отклонений “скорректированной” поверхности, а также время травления в точке с заданным шагом сканирования. Так для сферической поверхности радиусом кривизны 260 мм и диаметром 130 мм с исходными параметрами поверхности: P-V (peak to valley, максимальный размах высот) = 56,9 нм и RMS (среднеквадратическое отклонение от идеальной сферы) = 16,8 нм по расчетам ожидается, что пучком диаметром 2 мм (диаметр пучка задается диафрагмой, устанавливаемой в фокус ионного пучка) форма поверхности может быть улучшена до параметров: P-V = 7,5 нм и RMS = 0,74 нм при сканировании с шагом 0,2 мм пучком ионов с энергией 200 эВ и плотности ионного тока 17 мА/см². В качестве корректируемого покрытия рассматривается многослойная структура (МСС) на основе пары материалов Сг и У.

Применение многослойной структуры в качестве корректируемого покрытия оправдано рядом причин: во-первых, нанесение металлического, отражающего покрытия обеспечивает высокую интенсивность отраженного зондирующего волнового фронта и тем самым контраст интерферограмм при изучении формы поверхности подложки с помощью интерферометра с дифракционной волной сравнения [4]. Во-вторых, нанесение многослойного покрытия, в отличие от индивидуальных металлических пленок не приводит к развитию шероховатости поверхности и при определенном соотношении толщин отдельных слоев в периоде обеспечивает компенсацию внутренних напряжений, возникающих при напылении, что не приводит к деформации поверхности подложки. В-третьих, структура должна иметь возможность быть легко химически снята с поверхности без каких-либо последствий для исходной подложки. До настоящего времени для этих целей применялась МСС Cr/Sc, которая удовлетворяет всем указанным выше требованиям. Однако, как показано в работе [5] на поверхности МСС Cr/Sc образуется значительный по глубине слой окисла (порядка 7 нм), что приводит к заметному падению скорости травления и нелинейности процесса распыления от глубины травления, а также наблюдается значительный разброс результатов при аналогичных условиях эксперимента. Поэтому было проведено изучение альтернативной пары материалов.

Исследования показали, что МСС Cr/Y отвечает всем обозначенным выше требованиям (сохранение шероховатости поверхности после нанесения покрытия, возможность нанесения “бесстрессовой” структуры и может быть легко химически снята с подложки без последствий для исходной шероховатости поверхности) [6].

Таблица 1. Зависимость глубины травления МСС Cr/Y от времени.

Время, мин	Глубина, нм	Ожидание, нм
32	17,4	18,4
28	14,3	16,1
24	13,8	13,8
20	11,2	11,5
16	10	9,2
12	6,5	6,9
8	5,4	4,6
6	3,9	3,5
4	3	2,3
2	-	1,1

Изучение процедуры травления МСС Cr/Y показало хорошую линейность процесса при малых съемах материала (табл. 1, третий столбец в табл. 1 построен по данным эксперимента табл.

2) в отличие от МСС Cr/Sc (таблица 2). Что же касается динамики шероховатости поверхности при ионной бомбардировке, то первые эксперименты показали сохранение шероховатости поверхности при травлении многослойной структуры Cr/Y ионами с энергией 200 эВ (угол падения – нормаль) на глубину 10 нм.

Таблица 2. Глубина травления МСС Cr/Y и Cr/Sc при травлении ионами с энергией 200 эВ, нормальное падение, время травления 8 мин.

№	Глубина, Cr/Y, нм	Глубина, Cr/Sc, нм
1	4,6	0
2	4,8	1
3	4,3	0
4	4,7	3,0
5	4,4	0
6	5,0	1,4
Скорость травления (средняя)	0,6 нм/мин	-

В перспективе планируется провести полное изучение процессов распыления МСС Cr/Y (скорости травления и динамики шероховатости в зависимости от энергии ионов, угла падения, глубины травления и влияние плазмохимического травления), а также коррекцию формы подложек зеркал объектива ЭУФ нанолитографа на длину волны 13,5 нм при нормальном падении ионов ($\theta=90^\circ$) на поверхность.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 12-02-00659-а, 11-02-00597-а, 11-02-97109-р_поволжье_а, 11-02-00961-а, 10-02-00957-а, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

- [1] Chkhalo N.I., Kluev E.V., Pestov A.E. et al., Nucl. Instr. and Meth. A, 603, p.62 (2010)
 [2] Волгунов Д.Г., Забродин И.Г., Закалов Б.А. и др., Изв. РАН. Сер. физ., т.75, №1, с.54 (2011).
 [3] Вайнер Ю.А., Зорина М.В., Пестов А.Е. и др., Изв. РАН. Сер. физ., т.75, №1, с.65 (2011).
 [4] Клюенков Е.Б., Пестов А.Е., Полковников В.Н. и др., Российские нанотехнологии, т.3, №9-10, с.90 (2008).
 [5] Зуев С.Ю., Клюенков Е.Б., Пестов А.Е. и др., Изв. РАН. Сер. физ., т.75., № 1, с.57 (2011).
 [6] Вайнер Ю.А., Грибков Б.А., Зорина М.В. и др., Многослойные структуры Cr/Y для компенсации внутренних напряжений и реставрации подложек рентгеновской оптики, Труды этой конференции.

Применение ионно-пучковых методов распыления для синтеза многослойных зеркал La/B₄C

Ю.А. Вайнер, Е.Б. Клюенков, В.Н. Полковников, Н.Н. Салашенко, С.Д. Стариков
ФГБУН Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия
e-mail: polkovnikov@ipmras.ru

Одна из важнейших проблем современной микроэлектроники связана с уменьшением размера отдельного элемента микросхемы. Значительный успех в этом направлении достигнут с переходом в процессах литографии к рабочей длине волны $\lambda = 13,5$ нм. Фактически достигнутое на данный момент пространственное разрешение оборудования (размер элемента) составляет 22 нм. [1] В рамках технологии 13,5 нм просматриваются пути достижения в пределе 16 нм. Дальнейшее снижение размера элемента может быть связано только с уменьшением рабочей длины волны. И наиболее перспективной видится диапазон длин волн вблизи 6,7 нм, для которого теоретически можно создать высоко отражающие зеркала нормального падения и существуют эффективные источники излучения.

Серьезным препятствием развития технологии 6,7 нм является значительное несоответствие теоретически рассчитанных и экспериментально полученных коэффициентов отражения многослойных зеркал La/B₄C, оптимизированных на данную длину волны. Теоретический предел пикового коэффициента отражения для структур La/B₄C составляет величину порядка 63% для $\lambda = 6,69$ нм или 72% для $\lambda = 6,63$ нм. Однако лучшие полученные на практике коэффициенты отражения составили 44% для 6,69 нм [2] и 48,9% для 6,68 нм [3], что является недостаточным для применения таких зеркал с целью создания промышленного литографического оборудования.

Таким образом повышение коэффициента отражения многослойных зеркал для диапазона длин волн в окрестности 6,7 имеет большое практическое значение.

В работе [2] наиболее вероятной причиной наблюдаемого расхождения между расчетными и экспериментально полученными значениями коэффициентов отражения в мягком рентгеновском диапазоне названо уширение переходных областей на границах раздела материалов в структуре. Одним из методов уменьшения вкладного эффекта является осаждение на поверхность карбида бора антидиффузионных слоев углерода. Применение этой методики в [4] позволило увеличить пиковый коэффициент отражения зеркал La/B₄C с 40% до 45% (измерения на $\lambda = 6,69$ нм).

Все вышеупомянутые структуры синтезировались стандартным методом магнетронного напыления. Следует констатировать, что в его рамках практически достигнут предел возможностей улучшения отражательных

характеристик многослойных зеркал. При этом теоретический предел так и остается недостижимым. И это утверждение касается не только зеркал, оптимизированных на 6,7 нм. Оно справедливо для широкого круга отражающих покрытий, предназначенных для самых разных целей.

Дальнейшее улучшение отражательных характеристик зеркал может быть связано с переходом к качественно новым методам синтеза или с внедрением в существующий технологический цикл принципиально новых процессов, влияющих на структуру растущей пленки и на параметры межслойных границ раздела, существенным образом определяющих отражательные характеристики зеркал. К таким методам и процессам относятся ионно-пучковое распыление мишеней, ионная полировка границ раздела многослойной структуры, ионное ассистирование во время роста каждого слоя и обработка зеркала в процессе синтеза активными газами.

Для реализации этих процессов в ИФМ РАН разработана, собрана и запущена установка магнетронного и ионно-пучкового напыления многослойных структур МИПРУ. [5] Внешний вид МИПРУ представлен на рис. 1. Установка включает 4 магнетронных и 4 ионных источника.



Рис. 1. Внешний вид установки МИПРУ.

Вданной статье будут представлены результаты работы по внедрению в технологический цикл синтеза зеркал La/B₄C процессов ионной полировки. То есть процессов обработки пленок материалов, составляющих многослойное зеркало, ионными пучками.

Эксперименты с ионной полировкой проводились по следующей схеме. Индивидуальные пленки лантана и карбида бора,

составляющие многослойную структуру, напылялись стандартным методом магнетронного напыления при последовательном прохождении подложки над магнетронами с мишенями соответствующих материалов. Между магнетронами располагался полирующий ионный источник. Направление перемещения подложки зависит от выбора полируемого материала. Во всех экспериментах ионному облучению подвергался только один материал и никогда оба.

Для облучения подложки применялся ионный источник КЛАН-53М с апертурой выходного пучка порядка 50 мм. Величина полного ионного тока поддерживалась на уровне 38 мА. В экспериментах изучалась полировка с двумя ориентациями ионного пучка: под углами 90 градусов (нормальное падения) и 30 градусов к плоскости подложки. При расходимости пучка порядка 8-10 градусов и расстоянии от источника до подложки около 200 мм плотность ионного тока на подложке в первом случае составляла величину около 0,5 мА/см², а во втором 0,25 мА/см².

Экспериментам по ионной полировке предшествовал этап подбора параметров исходного зеркала, синтезированного методом магнетронного распыления без применения ионных пучков. Базовой структурой, то есть той, с которой впоследствии сравнивались результаты экспериментов по полировке, стало многослойное покрытие La/V₄C (VP-58) с параметрами: индивидуальные толщины лантана и карбида бора $d_{La} = 1,7$ нм, $d_{V_4C} = 1,68$ нм; шероховатость солев $\sigma_{La} = 0,28$ нм, $\sigma_{V_4C} = 0,69$ нм и плотность лантана $\rho_{La} = 0,9$ от табличной. При этих значениях пиковый коэффициент отражения на длине волны $\lambda = 6,69$ нм $R = 40,9\%$ (угол скольжения 87 градусов).

Прежде всего следует определить наиболее эффективную энергию ионов пучка. Заявленный изготовителем диапазон допустимых энергий источника КЛАН-53М 50-1500 эВ. Первая серия экспериментов проводилась с энергиями 300, 150, 100 и 60 эВ. В первых двух случаях ионный источник ориентирован под нормалью к плоскости подложки, в последних – под скользящим углом 30 градусов.

Сравнительный анализ и определение параметров структур производилось по данным, полученным при измерении отражательных характеристик зеркал на приборах Philips XPert Pro ($\lambda = 0,154$ нм) и рефлектометр на основе спектрометра-монокроматора РСМ-500 ($\lambda = 6,69$ нм).

Облучение слоев лантана ионами с энергиями 300 и 150 эВ приводит к существенному развитию шероховатости соответствующих слоев (до величин 1,5 и 0,9 нм соответственно). Это сопровождается снижением коэффициента отражения на рабочей длине волны: до 17% в первом случае и до 26% во втором. По всей видимости, при данных энергиях происходит не только полировка (удаление с

поверхности слабосвязанных атомов), но и распыление выросшей пленки. В дальнейших экспериментах эти энергии были исключены.

Облучение лантана ионами с энергиями 100 эВ под углом 30 градусов не приводит к заметным изменениям в отражательных характеристиках зеркал. Но уже понижение энергии до 60 эВ приводит к заметному положительному эффекту. Облученное таким образом зеркало VP-63 моделируется параметрами $d_{La} = 1,87$ нм, $d_{V_4C} = 1,75$ нм, $\sigma_{La} = 0,2$ нм, $\sigma_{V_4C} = 0,69$ нм, $\rho_{La} = 0,93$ от табличной. При этих значениях отражательные характеристики на длине волны $\lambda = 6,69$ нм $R = 41,5\%$, $\text{tg}\theta/\Delta\theta = 112$ (рис. 2).



Рис. 2. Угловая зависимость отражения зеркала VP-63 ($\lambda = 6,69$ нм).

Следует отметить, что период зеркала VP-63 составляет величину 3,62 нм, и при заданной длине волны максимум отражения приходится на угол скольжения 69 градусов. При оптимизации периода для более нормального отражения (~86 градусов) коэффициент отражения зеркала с такими параметрами должен составить 42,5-43%, то есть приращение отражения в сравнении с базовым зеркалом может составить около 2%.

Таким образом можно предположить, что при обработке поверхности пленок лантана в этом режиме происходит некоторое сглаживание поверхностной шероховатости.

К сожалению 60 В – фактически нижний порог напряжения пучка, возможный для источника КЛАН-53М. Проверить влияние облучения пленок лантана ионами с меньшими энергиями пока невозможно.

Слои карбида бора в двух экспериментах облучались с минимальными энергиями под углами 30 и 90 градусов соответственно.

Синтезированное в первом случае зеркало VP-57 имело следующие отражательные характеристики: $R = 40,5\%$, $\text{tg}\theta/\Delta\theta = 115$. То есть практически совпадающие с отражением от базовой структуры. Какого-либо заметного влияния

облучения не обнаруживается. Для синтезированное во втором случае (полировка под нормалью) зеркало VP-59 имело $R=21,5\%$ и $\text{tg}\theta/\Delta\theta = 72$. То есть имеет место катастрофическое падение эффективности отражения.

Таким образом из этой пары экспериментов следует: 1) при данных параметрах облучения полировка слоев карбида бора лишена смысла, так как положительного эффекта не наблюдается; 2) облучение под нормалью крайне отрицательно сказывается на свойствах структуры.

Вышеописанная серия экспериментов показала неэффективность полировки слоев B_4C . В то же время более ранние опыты продемонстрировали [4] положительный эффект от осаждения барьерных слоев углерода на поверхность карбида бора. Возникает мысль о необходимости сочетания двух методик, повышающих коэффициент отражения – нанесение барьерного слоя C на поверхность B_4C вкуче с ионной полировкой слоя La под углом 30 градусов с минимальной энергией.

Результатом такого эксперимента стало зеркало VP-64. Его отражательные характеристики на длине волны $\lambda = 6,69$ нм: $R = 46,3\%$, $\text{tg}\theta/\Delta\theta = 107$ (рис. 3).



Рис. 3. Угловая зависимость отражения зеркала VP-64 ($\lambda = 6,69$ нм).

Максимум отражения зеркала приходится на угол скольжения 77,5 градусов. Следует отметить тот факт, что в данном образце первым от подложки слоем является углерод, что негативно сказалось на адгезии структуры, а возможно и на отражении. Но и в этом случае приращение отражения в сравнении с отражением от базовой структуры составляет 5,4%.

При этом фактически плотность ионного тока на подложке, время облучения выбраны случайным образом и могут варьироваться в широких пределах. В ближайшее время следует провести оптимизацию параметров ионного пучка, ионного облучения структуры таким образом, чтобы добиться максимально возможного в этой конфигурации эксперимента коэффициента отражения зеркал. Для этого необходимо изучить зависимость R от плотности ионного тока на

подложке и от времени облучения структуры. То есть фактически от изменения количества бомбардирующих пленку ионов и от интенсивности их потока (количества упавших ионов в единицу времени). Энергия ионов при этом должна оставаться на минимальном для источника КЛАН-53М уровне в 60 эВ.

[1] Haran V et al. IEDM Proc. 625 (2008).

[2] С.С. Андреев, М.М. Барышева, Н.И. Чхало и др // Журнал технической физики, 2010, том 80, вып. 8, с. 93-100.

[3] Y. Platonov, J. Rodriguez, M. Kriese et al // Proc. of SPIE Vol. 8076.

[4] М.М. Барышева, Ю.А. Вайнер, С.Ю. Зуев и др // Материалы XVI симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника», с. 589.

[5] И.Г. Забродин, Б.А. Закалов, И.А. Каськов и др // Материалы XVI симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника», с. 579.

Современное рентгеновское аналитическое оборудование фирмы Bruker AXS

Голованов Д.Г., Прибора В.Н.

ООО “Брукер”, Москва, Россия

e-mail: dg@bruker.ru, vpribora@bruker.rudg@bruker.ru

Компания ООО “Брукер” на протяжении долгих лет официально представляет группу компаний Bruker на территории России и стран СНГ. Одним из направлений работы компании является подразделение Bruker AXS, производящее и разрабатывающее современные рентгеновские аналитические системы.

Спект продукции Bruker AXS достаточно широк: рентгеновские дифрактометры для фазового анализа и исследования тонкой структуры многослойных покрытий, монокристалльные дифрактометры, компактные настольные дифрактометрические системы, а также рентгенофлуоресцентные спектрометры, позволяющие решать любые задачи как в лаборатории, так и на производстве.

Дифрактометры Bruker AXS установлены в ведущих научных центрах России и всего мира, что позволяет компании реагировать даже на малейшие изменения в направлении исследований и вносить конструктивные изменения, а также адаптировать и постоянно совершенствовать программное обеспечение.

В настоящее время, для обычного фазового анализа при стандартных условиях, оптимальным выбором будет настольный дифрактометр D2 Phaser. Данный прибор позволяет проводить количественный фазовый анализ в геометрии Брегг-Брентано, но сильно ограничен в области изменения условий анализа, таких как температура. Дифрактометр сочетает компактные размеры с твердотельным многоканальным детектором и стандартной рентгеновской трубкой. При этом рентгеновская трубка работает в пониженном режиме и не требует внешнего водяного охлаждения. Сочетание многоканального детектора и рентгеновской трубки позволяет получить ускорение съемки в 20 – 30 раз по сравнению с обычным дифрактометром, работающим с точечным детектором. В комплект поставки входит полный набор программного обеспечения для количественного фазового анализа и полнопрофильного уточнения по методу Ритвельда.

Для решения более сложных задач фазового анализа, компания производит профессиональный дифрактометр широкого назначения D8 Advance. Удобная конструкция рабочей зоны прибора позволяет легко размещать различные держатели образцов, включая подвеску Эйлера, а также устанавливать

температурные и реакционные камеры. В зависимости от задач, прибор конфигурируется различной рентгеновской оптикой: классическая щелевая геометрия; фокусирующий $K_{\alpha 1}$ монохроматор; зеркало Гёбеля для работы в геометрии параллельного пучка; а также ряд других приспособлений. Помимо рентгеновской оптики, компания предлагает широкий выбор детекторов: классический сцинтилляционный счетчик, линейные твердотельный и газонаполненный детекторы, а также энергодисперсионный счетчик, избавляющий от необходимости использования вторичного монохроматора. Отдельно стоит отметить, что в большинстве случаев смена конфигурации происходит без перенастройки прибора, а современное оснащение позволяет распознавать тип модуля, установленный в дифрактометр.

Любые другие задачи, выходящие за пределы классического рентгено-фазового анализа, решаются на серии дифрактометров D8 Discover. Такие задачи, как микроанализ и картирование поверхности предъявляют высокие требования к интенсивности и качеству точечного источника рентгеновского излучения, а также к детектирующей системе. В этом случае, в зависимости от пожеланий, прибор оснащается классической керамической рентгеновской трубкой, микрофокусным источником или генератором с вращающимся анодом. Маломощный микрофокусный источник приближается по интенсивности к генератору с вращающимся анодом, но требует значительно меньших затрат на постоянное и периодическое обслуживание, а также избавляет от активного внешнего водяного охлаждения.

Анализ тонкослойных многослойных структур очень чувствителен к качеству прямого пучка, а именно: угловая расходимость и “чистота” $K_{\alpha 1}$ излучения. Немаловажным фактором является точность механики. Наши приборы серии D8 Discover удовлетворяют всем предъявляемым требованиям для проведения исследований на высоком мировом уровне.

Помимо оборудования, компания ООО “Брукер” осуществляет полную техническую поддержку оборудования: установка и введение приборов в эксплуатацию, методическая поддержка пользователей, а также все виды гарантийного и пост-гарантийного обслуживания.

Особенности рентгеновской дифракции на кристалле с металлической фазосдвигающей решеткой

В.И. Пунегов¹, Д.В. Иржак², Д.В. Рошупкин²

¹Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар, Россия

²Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

e-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

Исследуя методом высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии кристалл Si(111), на поверхности которого была сформирована фазосдвигающая решетка (ФСР) из вольфрама с периодом 1 мкм, получены карты нетривиального углового распределения интенсивности рассеяния [1]. Необычность дифракционной картины заключалась в том, что помимо ожидаемых латеральных сателлитов на картах присутствовали дополнительные вертикальные и диагональные дифракционные порядки. Следует отметить, что ранее подобное, но менее отчетливое распределение интенсивности дифракционной регистрировалось на решетке с периодом 2 мкм [2].

В данной работе разработана динамическая теория дифракции рентгеновских лучей на кристалле с поверхностной ФСР. На основе этой теории проведено численное моделирование когерентного и диффузного рассеяния на кристалле Si(111) с вольфрамовыми штрихами на его поверхности. Результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными.

Рассматривая динамическую дифракцию рентгеновских лучей на кристаллической системе с ФСР, следует исходить из уравнений Такаги. В этих уравнениях присутствуют динамические коэффициенты $a_{h,-h} \propto F_{h,-h}$, где F_h - структурный фактор кристаллической решетки.

Пусть поглотители рентгеновского излучения представляют собой полосы шириной в полпериода поверхностной решетки и направлены вдоль оси y , то есть перпендикулярно плоскости дифракции. Наличие металлических полос локально уменьшает рентгеновское поле в направлении прохождения и дифракции (рентгеновский пучок 1 на рис.1).

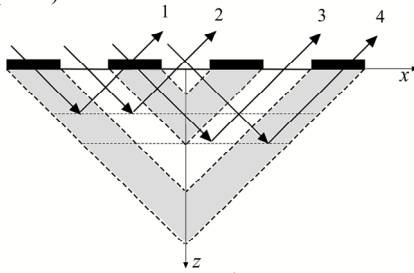


Рис.1

С другой стороны, возникают «каналы», вдоль которых как проходящий, так и

отраженный пучки не испытывают дополнительного поглощения и преломления на входной поверхности и при выходе из кристалла (пучок 2 на рис.1). Наконец, имеются участки, в которых рентгеновское поле поглощается и преломляется либо на входе (пучок 3 на рис.1), либо на выходе из кристалла (пучок 4 на рис.1). Таким образом, введя в рассмотрение коэффициент ослабления рентгеновского пучка $\gamma = \exp(-\mu_w t_w)$, где μ_w и t_w - коэффициент поглощения и толщина металлической (в нашем случае вольфрамовой) пластины, рассеивающий объем будет разбит на сегменты. В первом сегменте, в котором имеет место поглощение и преломление рентгеновского пучка на входной поверхности и на выходе из кристалла, интенсивность рентгеновского дифракционного поля пропорциональна $I_h^{dark} \propto |\gamma^2 a_h|^2$ (на рис. 2 темный сегмент в виде элементарного параллелепипеда).

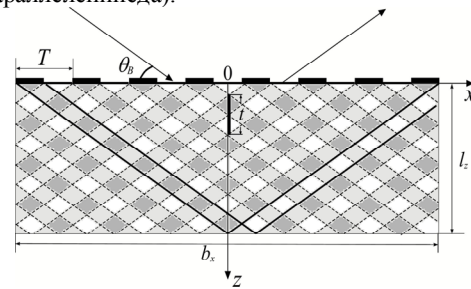


Рис.2

Во втором, освещенном сегменте отсутствует какое либо дополнительное поглощение из-за наличия металлических полос и интенсивность рассеяния пропорциональна $I_h^{light} \propto |a_h|^2$. Наконец, третий сегмент, в котором рентгеновское поле ослаблено на входе или на выходе (интенсивность рассеяния пропорциональна $I_h^{background} \propto |\gamma a_h|^2$), можно рассматривать как фоновый сегмент (на рис. 2 полутемный сегмент). В результате в приповерхностной области кристалла возникает модулированное рентгеновское поле, которое можно разделить на фоновую область и сегментарное поле в виде перевернутого треугольника основанием b_x и высотой l_z (рис.2). Долевой вклад треугольного сегментарного поля можно оценить введением коэффициента $\Gamma = \Gamma(\gamma)$, зависящего от коэффициента ослабления рентгеновского пучка.

Таким образом, наличие освещенных и затемненных «каналов» формирует латеральную и вертикальную, а также диагональную вдоль падающего пучка модуляцию рентгеновского поля (рис.2). Период модуляции в латеральном направлении определяется периодом фазовой решетки T . Вертикальный период также зависит от периода решетки и равен $t = T \tan \theta_B$.

Известно, что формирование дополнительных дифракционных порядков (сателлитов) в случае полупроводниковой, пористой или ультразвуковой сверхрешетки обусловлено чередованием слоев разного химического состава (плотности вещества) или присутствием периодической деформации кристаллической решетки. В случае кристаллической фазовой решетки причиной появления сателлитов является периодическое изменение освещенных и затемненных участков отражающих атомных плоскостей (рис.2).

Опишем принятую модель рентгеновской дифракции на фазовой решетке с помощью математического аппарата. Формально модуляция рентгеновского поля может быть задана модуляцией вышеуказанных динамических коэффициентов в уравнениях Такаги. Поскольку эти коэффициенты являются периодическими функциями вдоль латеральной и вертикальной оси, они могут быть разложены в ряд Фурье по этим направлениям:

$$a_{h,-h}(x, z) = \langle a_{h,-h} \rangle \left((1 - \Gamma) + \Gamma \Omega(x, z) \right) \times \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} C_{m,n} \exp(-i(m\kappa_x x + n\kappa_z z))$$

где $\langle a_{h,-h} \rangle$ - усредненные динамические коэффициенты, $\kappa_x = 2\pi/T$ и $\kappa_z = 2\pi/t$ - волновые числа модуляции вдоль горизонтальной и вертикальной оси соответственно. Фурье-коэффициенты $C_{m,n}$ зависят от периода ФСР и направления падающего пучка. На величину этих коэффициентов также влияют структурные характеристики фазовой решетки (коэффициент поглощения и преломления рентгеновских лучей металлическими штрихами, размеры и форма штрихов и т.д.). Интенсивности дополнительных дифракционных порядков (сателлитов) фазовой решетки находятся в строгой зависимости от численных значений этих коэффициентов. Отметим, что матрица Фурье - коэффициентов $C_{m,n}$ обладает свойствами симметрии: $C_{m,n} = C_{-m,-n} = C_{-m,n} = C_{m,-n}$.

Пространственное распределение амплитуды рентгеновского рассеяния на треугольном сегменте задается двумерным фактором формы $\Omega(x, z)$, который зависит от угла Брэгга и длины первичной экстинкции. Отметим, что в отличие от традиционных вертикальных или латеральных

сверхрешеток, в рассматриваемом случае дополнительные дифракционные порядки задаются двумя индексами (m, n) , где $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$ и $n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$.

Поскольку, как правило, фазовые решетки по своим структурным характеристикам не являются строго идеальными, то когерентная дифракция сопровождается диффузным рассеянием. Разделение дифракционного рассеяния на когерентную и диффузную составляющую проводится на основе известного формализма статистической динамической теории дифракции Като.

Для когерентных полей получены системы уравнений основного максимума и соответствующих дифракционных порядков. Поскольку период модуляции как вертикальном, так и латеральном направлении незначителен, можно пренебречь многоволновым взаимодействием между разными дифракционными порядками. Кроме того, в уравнениях пренебрежем малыми коэффициентами, не влияющими на угловое распределение интенсивности рассеяния. В итоге, для дифракционного сателлита с номером (m, n) , уравнения, описывающие угловое распределение когерентного рассеяния, имеют вид

$$\begin{cases} \frac{\partial E_0^{m,n}}{\partial z} = ia_0 E_0^{m,n} + i \langle a_{-h} \rangle f_G ((1 - \Gamma) + \Gamma \Psi(z)) \times \\ \quad \exp(in\kappa_z z) C_{m,n} E_h^{m,n} \\ - \frac{\partial E_h^{m,n}}{\partial z} = i[ba_0 - (q_z - n\kappa_z)] E_h^{m,n} + i \langle a_h \rangle f_G \times \\ \quad ((1 - \Gamma) + \Gamma \Psi(z)) \exp(-in\kappa_z z) C_{m,n} E_0^{m,n} \end{cases}$$

где функция

$$\Psi(z) = 2i \sin \left[i[q_x - mT] \left(1 - \frac{z}{l_z} \right) b_x / 2 \right]$$

учитывает модуляцию в треугольном сегменте, f_G - статический фактор Дебая-Валлера фазовой решетки. Эти уравнения служат основой для численных расчетов интенсивности когерентного рассеяния от фазовой решетки.

На рис.3а представлена расчетная карта распределения интенсивности когерентного рассеяния на фазовой решетке. Даже для столь малого долевого коэффициента $\Gamma \approx 0.06$, на карте распределения интенсивности когерентного рассеяния проявляются характерные диагональные полосы, вызванные структурированной модуляцией рентгеновского поля в рассеивающем объеме кремния. Здесь и далее контуры равной интенсивности представлены в логарифмическом масштабе, отношение интенсивностей между соседними линиями составляет 0.376. Толщина кристалла кремния в расчетах составляла 100 микрон,

ширина засветки поверхности фазовой решетки - 100 микрон.

Карта углового распределения диффузного рассеяния демонстрируется рис. 3б. Такие очертания для диффузной компоненты получены в результате количественного сравнения теоретических расчетов с данными эксперимента.

На рис. 4 показано наилучшее согласование вычисленного (рис.4а) и экспериментально измеренного (рис.4б) углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве от ФСР вблизи узла Si (111).

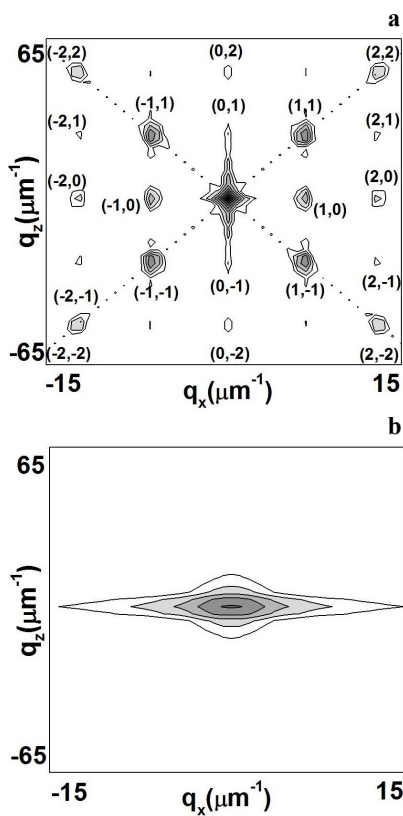


Рис.3

Сравнительный анализ с данными эксперимента показывает, что самыми интенсивными дифракционными порядками являются диагональные сателлиты (1,1), (1,-1), (-1,1) и (-1,-1).

Установлено, что длина корреляции диффузного рассеяния в латеральном направлении равна одному микрону, что соответствует с периодом фазовой решетки. В вертикальном направлении корреляционная длина составила 0.9 μm (длина экстинкции для амплитуды симметричного (111) отражения от совершенного кристалла кремния равна 1.5 μm). Статический фактор Дебая-Валлера фазовой решетки, оцененный по выходу диффузного рассеяния, оказался равным $f_G = 0.8$.

Экспериментальные измерения рентгеновского рассеяния на кристалле кремния с вольфрамовой ФСР были выполнены с применением высокоразрешающего дифрактометра Bruker D8 DISCOVER. В качестве источника рентгеновского излучения была использована трубка с вращающимся медным анодом. Коллимация рентгеновского излучения производилась входной щелью 100 мкм. Монохроматизация пучка обеспечивалась с помощью двух Ge(220)-монокроматоров с двукратным отражением. Дифракционно отраженное излучение регистрировалось с помощью сцинтилляционного детектора, расположенного в точном брэгговском положении.

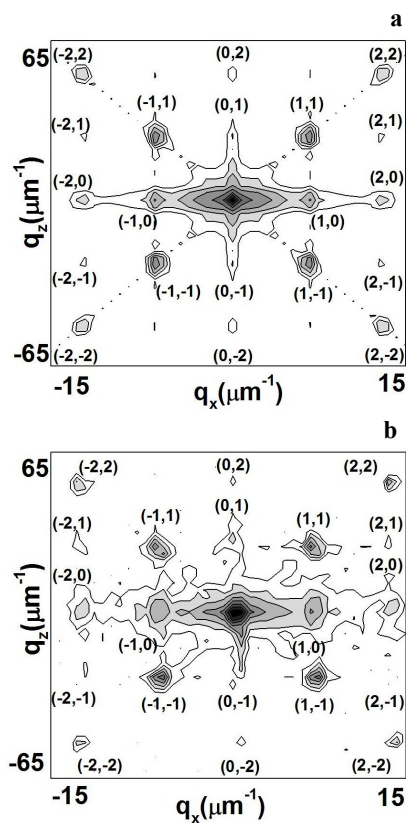


Рис.4

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-02-00445-а), программы Президиума РАН 12-П-1-1014, программы фундаментальных исследований УрО РАН 12-У-1-1010 и Программы развития вычислительных, телекоммуникационных и информационных ресурсов УрО РАН (проект РЦП-2012-П2).

[1] Иржак Д.В., Князев М.В., Рощупкин Д.В., Фахрдинов Р.Р., Шелоков И.А., Нанозифика и нанозлектроника, Н. Новгород, ИФМ РАН, Т.2, 602 (2011)

[2] Erko A., Firsov A., Proc. SPIE. 5539, 148 (2004)

Теория диффузного рассеяния рентгеновских лучей на кристалле с порами треугольного сечения

В.И. Пунегов

Коми научный центр УрО РАН, Сыктывкар, Россия

e-mail: vpunegov@dm.komisc.ru

В настоящее время пористые материалы широко используются в разных областях человеческой деятельности, в частности в изготовлении светоизлучающих приборов, биохимических сенсоров, датчиков влажности, интерференционных фильтров, оптических волноводов, фотонных кристаллов и т.д. На морфологию пористых систем, создаваемых методами электрохимической анодизации, сильно влияют структурные и химические характеристики материалов, наличие примеси в них, а также плотность тока, временной режим травления, состав электролита и т.д. Как результат, в кристаллической среде формируются поры разной формы и разного размера.

Неразрушающие и чувствительные методы высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии оказались перспективными в задачах диагностики пористых слоев.

Поры в кристалле являются источниками диффузного рассеяния (ДР) рентгеновских лучей, угловое распределение которого зависит от формы и размера пор, их пространственной ориентации и структурного порядка. Следовательно, диффузное рассеяние в рамках конкретной модели может служить основой для неразрушающей диагностики пористых структур. До настоящего времени в теории ДР рассматривались модели пор в виде прямоугольного параллелепипеда [1], цилиндрической [2] и сферической формы [3]. Не смотря на то, что во многих случаях сечения пор в кристалле имеют треугольную форму, теоретический анализ диффузного рассеяния для модели пор в виде треугольной призмы не проводился.

Основным параметром, отвечающим за угловое распределение интенсивности ДР является корреляционный объем

$$\tau(\mathbf{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\boldsymbol{\rho} g(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}).$$

Поры в кристалле нарушают строгий трансляционный порядок в расположении атомов среды, тем самым создают случайные локальные атомные смещения в строгой периодической структуре решетки. Эти локальные нарушения описываются собственной корреляционной функцией (СКФ) Като, которая может быть представлена в виде [3]

$$g(\boldsymbol{\rho}) = (1/V_p) \int D(\mathbf{r}) D^*(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) d\mathbf{r}$$

где V_p – объем поры. Функция $D(\mathbf{r})$ зависит от поля случайных деформаций и описывает локальные нарушения кристаллической решетки.

Пусть c_p – концентрация пор в кристаллической матрице, тогда с использованием $D(\mathbf{r})$ можно также записать выражение для статического фактора Дебая-Валлера:

$$f_p = \exp(-c_p \int D(\mathbf{r}) d\mathbf{r}).$$

Рассмотрим диффузное рассеяние в кристалле с порами в виде треугольной призмы. Пусть латеральное сечение пор представляет собой равносторонний треугольник со стороной a , высота пор l_z (рис. 1)

СКФ характеризует вероятность того, что две точки, расположенные на расстоянии ρ друг от друга будут находиться внутри поры. На рис. 1 показана геометрическая трактовка СКФ для пор в форме треугольной призмы. Суть этой трактовки состоит в том, что СКФ $g(\rho_x, \rho_y, \rho_z)$ равна отношению объема пересечения двух пор $v_p = s_p l_p$ к объему треугольной призмы V_{prism} .

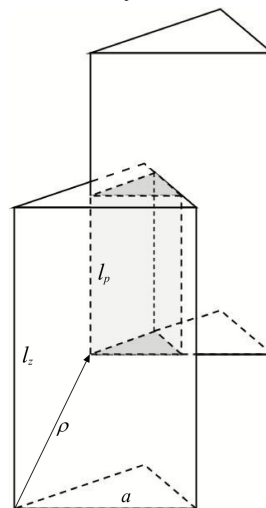


Рис. 1.

Здесь $s_p = s_p(\rho_x, \rho_y)$ – площадь пересечения двух равносторонних треугольников, представляющих основания двух треугольных призм, $l_p = l_z - \rho_z$ – длина этого пересечения.

Собственная корреляционная функция пор в форме треугольной призмы может быть записана в виде произведения

$$g(\rho_x, \rho_y, \rho_z) = g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a)g_z(\rho_z, l_z),$$

где

$$g_z(\rho_z, l_z) = \begin{cases} 1 - |\rho_z|/l_z, & |\rho_z| \leq l_z \\ 0 & |\rho_z| > l_z \end{cases}$$

и

$$g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a) = \begin{cases} (1 - (1/a)(|\rho_x| + |\rho_y|/\sqrt{3}))^2, & \text{if } |\rho_x| < |\rho_y|/\sqrt{3} \leq a/2; \\ (1 - (2/a)|\rho_y|/\sqrt{3})^2, & \text{if } |\rho_y|/\sqrt{3} < |\rho_x| \leq a; \\ 0, & \text{if } s_p(\rho_x, \rho_y) = 0 \end{cases}$$

На рис.2 показана фигура, соответствующая контурам равного значения двумерной СКФ треугольной призмы $g_{tr}(\rho_x, \rho_y, a)$.

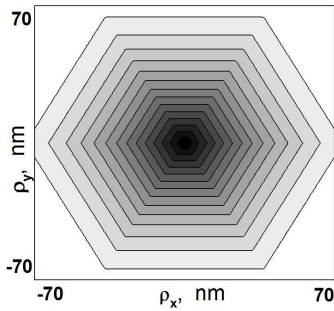


Рис.2

Длина стороны треугольника $a = 100$ nm, контуры равного значения СКФ представлены в линейном масштабе, разность величин между соседними линиями равна 0.067.

Контуры равного значения двумерной СКФ треугольной призмы $g(\rho_x, 0, \rho_z)$, где $l_z = 300$ nm, представлены на рис. 3

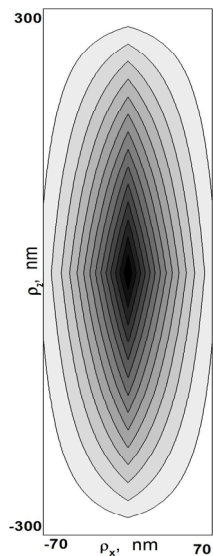


Рис.3

В рамках рассматриваемой модели порешение для корреляционного объема запишется в виде произведения латеральной корреляционной площади $\tau_{tr}(q_x, q_y)$ и вертикальной корреляционной длины $\tau_z(q_z)$:

$$\tau(\mathbf{q}) = \tau_{tr}(q_x, q_y)\tau_z(q_z)$$

где

$$\tau_{tr}(q_x, q_y) = \frac{4S_{tr}}{[p_x^2 - p_y^2]^2} \left(1 + \frac{p_y \sin(p_x)}{p_x} \times \left(\frac{p_y \sin(p_x) - 2 \sin(p_y)}{p_x} + (\cos(p_x) - 2 \cos(p_y)) \cos(p_x) \right) \right)$$

и

$$\tau(q_z) = l_z \left| \frac{\sin(p_z)}{p_z} \right|^2.$$

Здесь для удобства введены безразмерные угловые параметры $p_x = q_x a / 2$, $p_y = \sqrt{3} q_y a / 2$ и $p_z = q_z l_z / 2$. Интересно отметить, что в узле обратной решетки латеральная корреляционная площадь равна площади равностороннего треугольника (латеральному сечению треугольной призмы) $\tau_{tr}(q_x = 0, q_y = 0) = S_{tr}$, вертикальная корреляционная длина равна высоте треугольной призмы $\tau_z(q_z = 0) = l_z$, а корреляционный объем равен объему поры: $\tau(\mathbf{q} = 0) = V_{prism} = (\sqrt{3}/4) a^2 l_z$.

На рис. 4 показана карта углового распределение интенсивности диффузного рассеяния $I_h^d(q_x, q_y, 0)$. Контуры равной интенсивности на этой, а также в нижеприведенных картах обратного пространства представлены в логарифмическом масштабе, отношение между соседними линиями составляет 0.316.

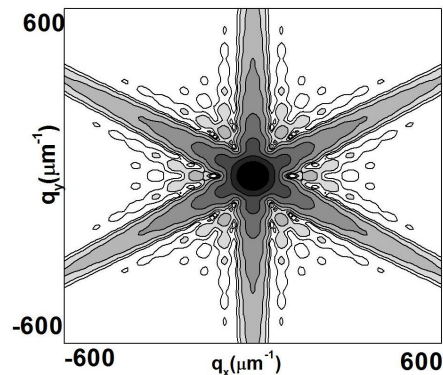


Рис.4

На рис. 5 представлена карта распределения ДР

$$I_h^d(q_x, q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq_y I_h^d(q_x, q_y, q_z)$$

от кристалла с одинаковыми по размерам порами.

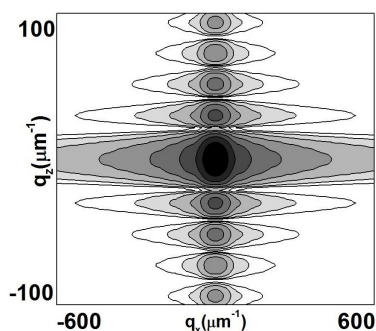


Рис.5

Известно, что имеющиеся на сегодняшний день технологии не позволяют создавать в кристаллах поры исключительно одного и того же размера. Вышеизложенная теория предсказывает осцилляционный характер углового распределения интенсивности ДР. В действительности экспериментальные измерения интенсивностей диффузного рассеяния от пористых кристаллов таких осцилляций не выявляют.

На рис. 6 приведены карты углового распределения диффузного рассеяния от кристалла, в котором поры в форме треугольной призмы имеют разброс по своим размерам. Для малой дисперсии ($\sigma_L = L/10$, $L = a, l_z$, рис.6a) сильно выраженное осцилляционное поведение диффузного рассеяния характерно для направления вдоль вектора обратной решетки. Интересно, что вдоль латерального направления осцилляции интенсивности сглажены. Поэтапный рост дисперсии (рис.6b, $\sigma_L = L/6$; рис.6с, $\sigma_L = L/4$), приводит к сглаживанию осцилляционного поведения изодиффузных линий.

Заметим, что подобная карта углового распределения интенсивности рассеяния в обратном пространстве, представленная на рис.4, может регистрироваться с использованием метода трехкристалльной дифрактометрии при условии, когда поры расположены параллельно к входной поверхности, а треугольное сечение пор находится в плоскости дифракции.

Таким образом, разработанная теория позволяет проводить численное моделирование диффузного рассеяния от кристалла с порами в форме треугольной призмы. Очевидно, что это окажется полезным при анализе пористых систем по данным высококорреляционной рентгеновской дифрактометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 10-02-00445-а), программы Президиума РАН 12-П-1-1014, программы фундаментальных исследований УрО РАН 12-У-1-1010 и Программы развития вычислительных, телекоммуникационных и информационных ресурсов УрО РАН (проект РЦП-2012-П2).

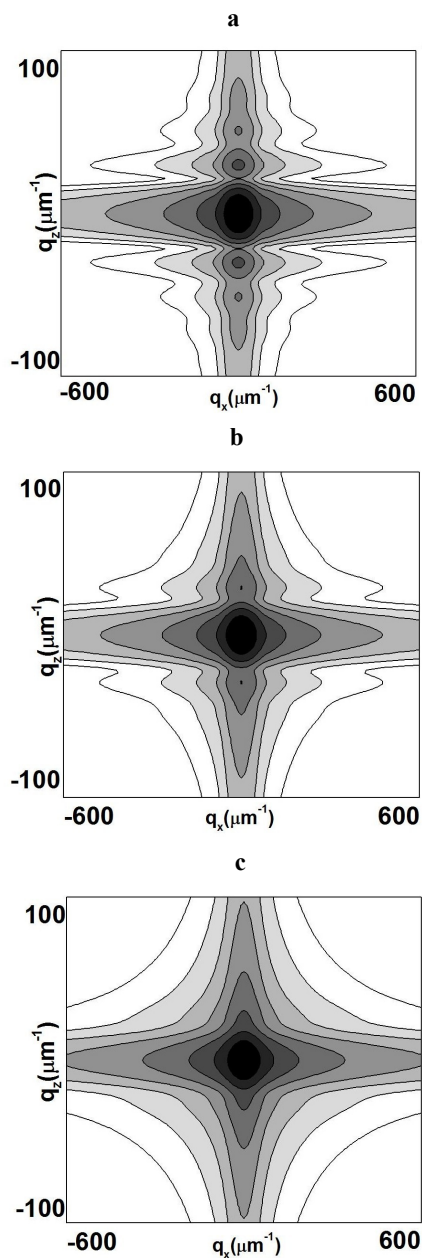


Рис.6

- [1] Ломов А.А., Бушуев В.А., Караванский В.А., Бэйлисс С., Кристаллография, 48, 362 (2003)
- [2] Punegov V.I, Lomov A.A., Shcherbachev K.D., Phys. Stat. Sol. (a), 204, 2620 (2007)
- [3] Пунегов В.И., ПЖТФ, 38 (11), 53 (2012)

Исследования $L_{2,3}$ спектров поглощения Р в плёнках GaInP в скользящей геометрии

Ю. Л. Репченко¹, М. А. Андреева², Э. П. Домашевская¹, В. А. Терехов¹, П. А. Середин¹, В. М. Кашкаров¹

¹Воронежский Государственный Университет, Воронеж, Россия

²Московский Государственный Университет имени Ломоносова, Москва, Россия

e-mail: kent160@mail.ru

Соединения $A^{III}B^V$ интересны благодаря своим оптическим свойствам. Полупроводниковые лазеры, светодиоды, полевые транзисторы на их основе широко применяются в настоящее время. Изучение структурных свойств подобных соединений и твёрдых растворов на их основе представляется очень актуальной задачей.

Исследуемые гетероструктурные плёнки GaInP/GaAs(100), были изготовлены в ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН методом МОС-гидридной эпитаксии, толщина полученных плёнок составляет порядка 1 мкрн. В работе [1] изучалось влияния условий роста на структурные и морфологические свойства данных плёнок. XANES спектры вблизи $L_{2,3}$ краёв поглощения Р были получены на канале Mark V синхротрона SRC (Synchrotron Radiation Center, University of Wisconsin-Madison, Stoughton, USA) методом измерения компенсационного тока. XANES спектры измерялись при различных углах скольжения и их трансформация представлена на Рис.1.

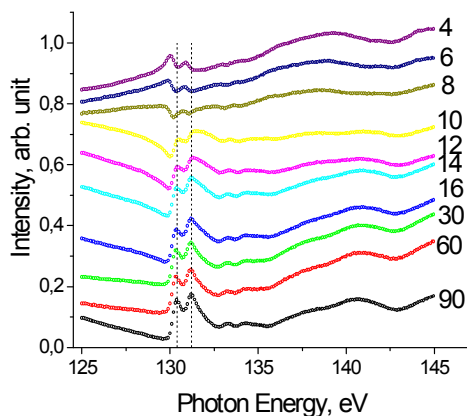


Рис. 1. Спектры XANES твёрдого раствора GaInP, измеренные вблизи $L_{2,3}$ края фосфора по выходу электронов для разных углов скольжения, указанных на рисунке (в градусах). $L_{2,3}$ резонансные линии фосфора отмечены вертикальными пунктирными линиями.

Если при больших углах скольжения резонансное поглощение проявляется как пики на кривых выхода электронов, то с уменьшением угла пики трансформируются в асимметричные кривые

дисперсионной формы, а затем в провалы вблизи резонансных энергий. При очень маленьких углах скольжения пики вновь появляются, но сдвинутые по энергии. Целью данной является попытка объяснить подобное поведение спектров выхода фотоэлектронов.

Изменение формы спектров отражения при изменении угла скольжения хорошо известны [2]: при углах скольжения меньших критического угла полного внешнего отражения резонансы проявляются в уменьшении коэффициента отражения, вблизи критического угла резонансные линии имеют дисперсионную форму, а при больших углах они становятся пиками. Трансформация резонансных спектров выхода фотоэлектронов или флуоресценции с углом скольжения менее изучена.

Для выявления характерных особенностей изменения спектров выхода электронов мы провели моделирование на простейшей резонансной зависимости, то есть взяли лоренцевскую линию для мнимой части восприимчивости и соответствующую зависимость для реальной части (полученную с помощью Крамрс-Кронига преобразования), сохранив порядок величины восприимчивости, характерный для интересующих нас энергий фотонов (Рис. 2). Для исследования влияния оптических параметров среды на выход фотоэлектронов варьировали абсолютную величину реальной части восприимчивости (сплошные и пунктирные линии на Рис. 2,3).

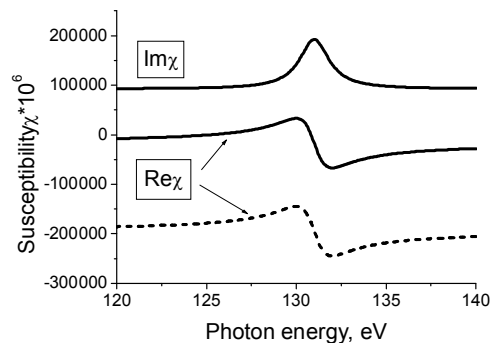


Рис. 2. Модельные спектры реальной и мнимой части восприимчивости χ .

Для расчёта теоретических спектров выхода фотоэлектронов были использованы формулы:

$$Y(\omega, \theta) = \int_0^{\infty} T(z)A(z, \omega, \theta)dz, \quad (1)$$

$$A(z, \omega, \theta) \propto \frac{\text{Im}(\chi(z, \lambda))}{\lambda} |E(z, \lambda, \theta)|^2, \quad (2)$$

где $A(z, \omega, \theta)$ – количество электронов вышедших с глубины z , $T(z)$ – функция выхода электронов с глубины z , $|E(z, \omega, \theta)|^2$ – амплитуда поля излучения на глубине z , χ восприимчивость образца, λ – длина волны излучения. [2-5].

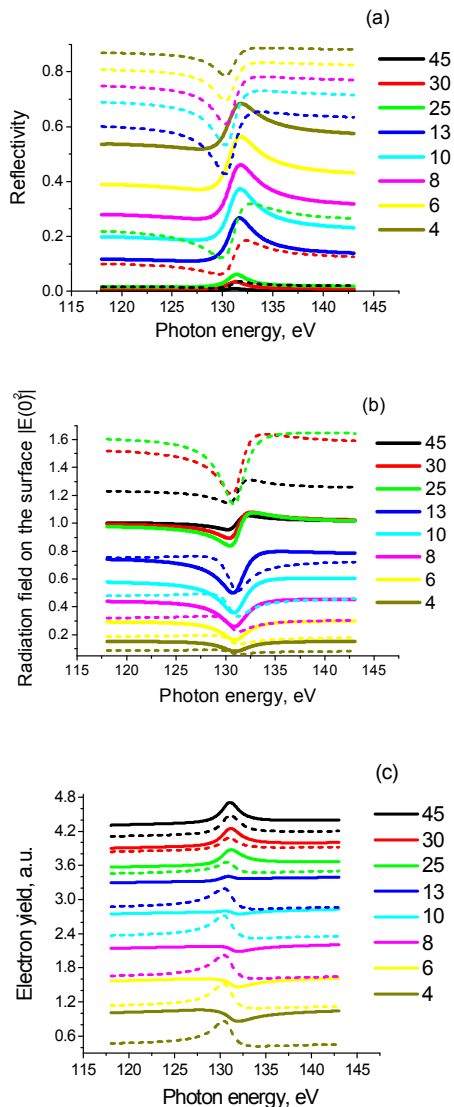


Рис. 3. Изменение с углом скольжения спектров отражения (а), амплитуды поля на поверхности (b) и выхода фотоэлектронов (с). Сплошные и пунктирные линии соответствуют двум разным $\text{Re} \chi$ (см. Рис. 2). Длина свободного пробега выбрана ~ 0.11 нм.

Вычисление спектров отражения и квадрата амплитуды поля на глубине

$$|E(z, \omega, \theta)|^2 = |E^+(z, \omega, \theta) + E^-(z, \omega, \theta)|^2 \quad (3)$$

проводили методом матриц распространения. Более подробно метод описан в пособии [2] и в работе [6] на примере вычисления спектров выхода фотоэлектронов $\text{SiO}_2(2\text{nm})/\text{Si}(10 \div 100\text{nm})/\text{SiO}_2$.

Мы убедились, что под влиянием существенного изменения амплитуды поля на поверхности форма спектров выхода фотоэлектронов значительно трансформируется. Модельные расчеты показывают также, что изменение абсолютного значения реальной части восприимчивости приводит к существенному изменению формы спектров выхода фотоэлектронов. В принципе, мы можем получить изменения, наблюдаемые в эксперименте, при соответствующем выборе абсолютных значений оптических параметров среды (восприимчивости).

Для подгонки экспериментальных данных необходимы исходные значения восприимчивости χ для исследуемой пленки $\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{P}$. Мы вычисляли эти значения аддитивным методом по формулам:

$$\begin{aligned} \chi &= \chi_{res} + \chi_0, \\ \chi_0 &= \frac{\lambda^2}{\pi} r_0 \rho^P (-Z^P + f_1^P) + if_2^P + \\ &+ (1-y)\rho^{Ga} (-Z^{Ga} + f_1^{Ga}) + if_2^{Ga} + \\ &+ y\rho^{In} (-Z^{In} + f_1^{In}) + if_2^{In}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $r_0 = 2.81794 \times 10^{-6}$ нм – классический радиус электрона, f – поправки на аномальное рассеяние, взятые из табличных значений [7].

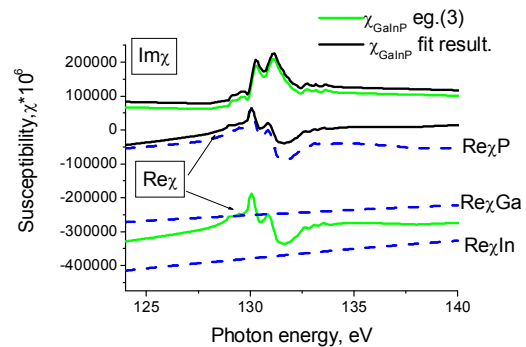


Рис. 4. Реальная и мнимая часть восприимчивости χ для $\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{P}$ в окрестности $L_{2,3}$ краев поглощения фосфора, полученная из выражения (3) (зеленые кривые) и полученная подгонкой экспериментальных спектров (черные кривые). Пунктирные линии представляют восприимчивость отдельных составляющих твердого раствора.

Твёрдый раствор $\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{P}$, в котором относительное содержание атомов In $y \approx 0.5$, обладает пространственной структурой сфалерита

Fm , содержащую 8 атомов $Ga_{1-y}In_y$ и 4 атомов P . Объёмная плотность $\rho^{Ga} = \rho^{In} = 8/a_{GaInP}^3$ и $\rho^P = 4/a_{GaInP}^3$, где $a_{GaInP} = 5.6596 \text{ \AA}$ (при $y \approx 0.5$). Мнимая часть резонансной добавки восприимчивости $Im\chi_{res}$ вблизи $L_{2,3}$ края поглощения P была взята непосредственно из спектра выхода фотоэлектронов для нормального угла падения и нормирована на табличные значения [7]. Реальная часть $Re\chi_{res}$ была получена путём преобразований Крамера-Кронига. Полученные исходные спектры реальной и мнимой части восприимчивости $Ga_{1-y}In_yP$ представлены на Рис. 4.

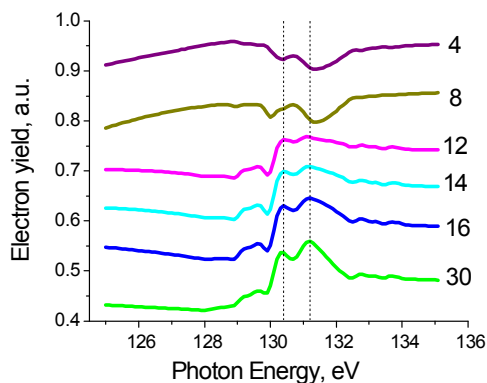


Рис. 5. Теоретические спектры выхода фотоэлектронов, полученные при подгонке экспериментальных спектров, для нескольких углов скольжения. Результирующая восприимчивость среды представлена на Рис. 4. черными линиями.

Результат подгонки экспериментальных спектров выхода фотоэлектронов (с помощью программ *Step_Flu* и *Net_Flu* [8]), представлен на Рис. 5. Нам удалось воспроизвести характерные особенности спектров, представленных на Рис. 1 при разных углах скольжения. Резонансные максимумы на спектрах при больших углах скольжения заменяются линиями дисперсионной формы при уменьшении угла скольжения и при маленьких углах намечается максимум на спектрах правее точного резонанса. Однако, для получения этого результата пришлось существенно изменить абсолютное значение реальной части восприимчивости (см. Рис. 4). Мы можем сделать заключение, что расчет оптических параметров для сложных соединений аддитивным методом по формуле (4) неадекватен в случае ультрамягкого рентгеновского излучения. Экспериментальное определение абсолютных значений восприимчивости в этом диапазоне, подобное проведенному в данной работе исследованию, является чрезвычайно востребованным.

Работа поддержана грантами РФФИ № 12-02-00924-a and №. 10-02-00768-a.

[1] Середин П.В., Домашевская Э.П., Руднева В.Е., ФТП, 39(9), 1261 (2009).

[2] Андреева М.А., Кузьмин Р.Н. Рентгеновская и мессбауэровская оптика поверхности. Изд-во Знание, 1996.

[3] Henke B.L., Phys. Rev. 6, 94 (1972).

[4] Kasrai M., Lennard W.N., Brunner R.W., Appl. Surf. Sci., 99, 303 (1996).

[5] Ejima T., Jpn. J. Appl. Phys., 42, 6459 (2003).

[6] Andreeva M.A., Domashevskaya E.P., Odintsova E.E., et al., J. Synchrotron Rad., 19, 609 (2012).

[7] Henke B.L., Gullikson E.M., Davis J.C., Atomic Data and Nuclear Data Tables, 54 (1993).

[8] Одинцова Е. Е. и Андреева М. А., XFRAM, <http://kfft.phys.msu.ru/programs/XFRAM.zip> (2012).

Высокотемпературные сенсорные устройства на основе пьезоэлектрических кристаллов $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$

Е.В. Емелин,¹ Д.В. Рошупкин,¹ Д.В. Иржак,¹ Р.Р. Фахртдинов,¹ С.А. Сахаров²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

²ОАО «ФОМОС Материалс», Москва, Россия

e-mail: rochtchr@iptm.ru

В докладе рассмотрен процесс создания высокотемпературного датчика на поверхностных акустических волнах (ПАВ), изготовленного на основе кристалла $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ (LGS).

Создание акустоэлектронных датчиков на базе кристаллов с высокой температурой плавления и отсутствием фазовых переходов является важным моментом для контроля высокотемпературных процессов. LGS сочетает в себе лучшие свойства свойства кристалла LiNbO_3 (большое значение коэффициента электромеханической связи) и кварца (практически нулевое значение температурного коэффициента частоты). Также в кристаллах LGS отсутствуют фазовые переходы вплоть до температуры плавления при 1475°C . Маленькие значения скоростей роверхностных (ПАВ) и объемных акустических волн (ОАВ) позволяют создавать миниатюрные акустоэлектронные устройства.

Для изготовления высокотемпературных датчиков большое значение имеет выбор материала электродов. Обычно для изготовления электродов используются тугоплавкие металлы Pt и Ir. Однако существует проблема окисления металлических электродов.

Y – срез кристалла LGS был использован для создания высокотемпературного датчика, способного функционировать при высоких температурах. Поверхность кристалла была отполирована до уровня шероховатости 4.1 \AA и толщины нарушенного слоя 6 нм . Высокотемпературный датчик представлял собой ПАВ-резонатор с длиной волны $\Lambda = 5.948 \text{ мкм}$. ПАВ распространяется по поверхности Y – среза кристалла LGS вдоль оси X . Для изготовления структуры встречноштыревого преобразователя (ВШП) были использованы процессы фото- и электроннолучевой литографии. Фотолитография была использована для изготовления контактных площадок ВШП, а электроннолучевая литография была использована для изготовления электродов ВШП и отражающих решеток. Были изготовлены два ПАВ-резонатора с коэффициентом металлизации 50% и 33%. Скорость ПАВ и резонансная частота возбуждения ПАВ сильно зависят от

коэффициента металлизации. Увеличение коэффициента металлизации приводит к уменьшению скорости ПАВ и уменьшению резонансной частоты возбуждения ПАВ, соответственно. Метод магнетронного напыления был использован для формирования Ir пленки толщиной 1000 \AA на поверхности резиста. Другие методы напыления Ir пленки требуют применения высоких температур, которые приводят к деградации и стеклованию резиста. Применение метода “lift-off” позволяет сформировать Ir-ВШП на поверхности кристалла LGS.

На рис. 1 представлены РЭМ-фотографии ПАВ-резонаторов с различным коэффициентом металлизации. Длина волны ПАВ составляет $\Lambda = 5.948 \text{ мкм}$. На рис. 1(а) представлен общий вид ПАВ-резонатора, состоящего из ВШП и двух отражающих решеток. На рис. 1(б) представлен ВШП с коэффициентом металлизации 33%. В этом случае резонансная частота возбуждения ПАВ составила $f = 409 \text{ МГц}$ при скорости распространения ПАВ $V = 2432,732 \text{ м/с}$. Увеличение коэффициента металлизации ВШП на рис. 1(в) приводит к уменьшению частоты возбуждения ПАВ до $f = 402 \text{ МГц}$ при скорости ПАВ $V = 2391,096 \text{ м/с}$. Таким образом, изменение коэффициента металлизации ВШП позволяет изменять резонансную частоту возбуждения и скорость распространения ПАВ.

Так как кристалл LGS не имеет фазовых переходов до температуры плавления 1475°C , для функционирования ПАВ-резонатора принципиальное значение имеет поведение Ir структуры ВШП. Хорошо известно, что при высокотемпературной обработке на воздухе поверхность тугоплавких металлов (Ir, Pt, W) окисляется. Для изучения процесса окисления пленка Ir толщиной 1000 \AA была напылена методом магнетронного напыления на поверхность X – среза кристалла LGS. На рис. 2 представлены дифракционные спектры X – среза кристалла LGS с пленкой Ir. Рентгеновские спектры демонстрируют дифракционные пики, соответствующие X – срезу кристалла LGS (отражения (110),

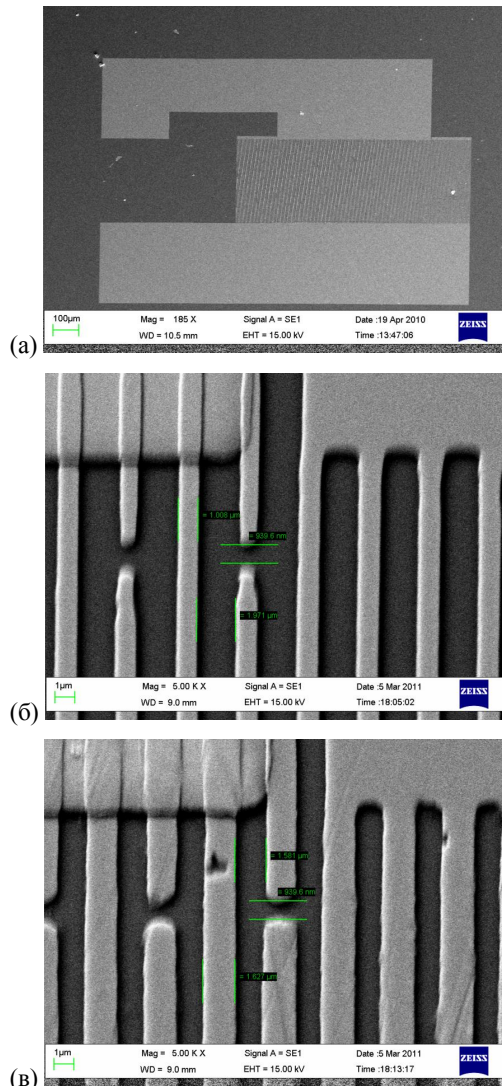


Рис. 1. ПАВ-резонаторы с длиной волны $\Lambda = 5.948$ мкм на поверхности Y – среза кристалла LGS: (а) общий вид структуры ВШП; (б) коэффициент металлизации 33%, $f = 409$ МГц, $V = 2432,732$ м/с; (в) коэффициент металлизации 50%, $f = 402$ МГц, $V = 2391,096$ м/с.

(200), (330)). Также дифракционные спектры демонстрируют дифракционные пики Ir (отражения (110), (311), (222)), соответствующие поликристаллической структуре пленки Ir. Термическая обработка X – среза кристалла LGS с пленкой Ir на воздухе в течении 400 часов при 650°C приводит к формированию токой пленки IrO₂ на поверхности пленки Ir [1]. Окисление Ir пленки приводит к появлению на дифракционном спектре пика IrO₂(110) (рис. 2(а)). Для удаления оксидной пленки IrO₂ была проведена термическая обработка в вакууме в

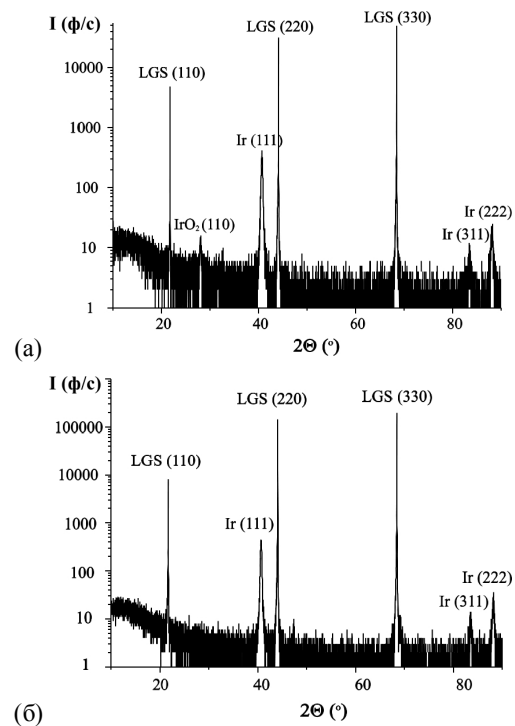


Рис. 2. рентгеновские дифракционные спектры X – среза кристалла LGS с пленкой Ir толщиной 1000 Å: (а) термическая обработка на воздухе в течении 400 часов при температуре 650°C; (б) термическая обработка в вакууме в течении 20 часов при температуре 950°C.

течении 20 часов при температуре 950°C. В данных условиях плёнка IrO₂ испаряется с поверхности Ir плёнки (рис. 2(б)).

На рис. 3 представлены структуры ВШП после термической обработки в течении 1200 часов при температуре 650°C. На рис. 3(а) представлен Ir ВШП. Различие коэффициентов расширения Ir и LGS приводит к образованию пузырьков на контактных площадках. В тоже время электроды остаются без видимых изменений. На рис. 3(б) представлен Pt ВШП, закрытый сверху напыленной пленкой Al₂O₃, которая защищает структуру ВШП от окисления. В данном случае термическая обработка структуры ВШП приводит к появлению трещин в структуре ВШП.

Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия в схеме трехкристального рентгеновского дифрактометра была использована для исследования процесса возбуждения ПАВ в ПАВ-резонаторе [2-3]. Распространение ПАВ в кристалле приводит к синусоидальной модуляции кристаллической решетки и, соответственно, к появлению дифракционных сателлитов на кривой качания вокруг брэгговского пика. Интенсивность и количество дифракционных сателлитов зависят

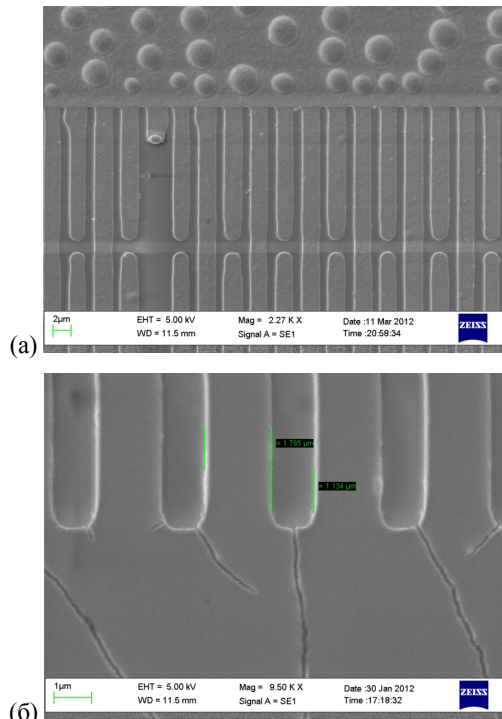


Рис. 3. Термическая обработка ВШП в течении 1200 часов при температуре 650°C: (а) Ir структура ВШП; (б) Pt структура ВШП, закрытая пленкой Al_2O_3 .

от амплитуды ПАВ. Увеличение амплитуды ПАВ приводит к увеличению числа дифракционных сателлитов на кривой качания. Угловая расходимость между дифракционными сателлитами определяется как $\delta\Theta = d/\Lambda$, где d - межплоскостное расстояние, а $\Lambda = 5.948$ мкм – длина волны ПАВ.

На рис. 3 представлены кривые качания Y – среза кристалла LGS, промодулированного ПАВ с длиной волны $\Lambda = 5.948$ мкм (резонансная частота возбуждения ПАВ $f = 409$ МГц, скорость распространения ПАВ $V = 2432,732$ м/с). Хорошо видно, что возбуждение и распространение ПАВ в кристалле приводит к появлению дифракционных сателлитов на кривой качания. Количество дифракционных сателлитов на кривой качания увеличивается с увеличением амплитуды ПАВ h . Максимальное значение интенсивности первых дифракционных сателлитов может достигать 36% от интенсивности нулевого порядка дифракции в отсутствии ПАВ.

Проведенные исследования демонстрируют возможность изготовления высокотемпературных

акустоэлектронных датчиков на основе кристалла LGS. Ключевой проблемой высокотемпературных ПАВ-датчиков является

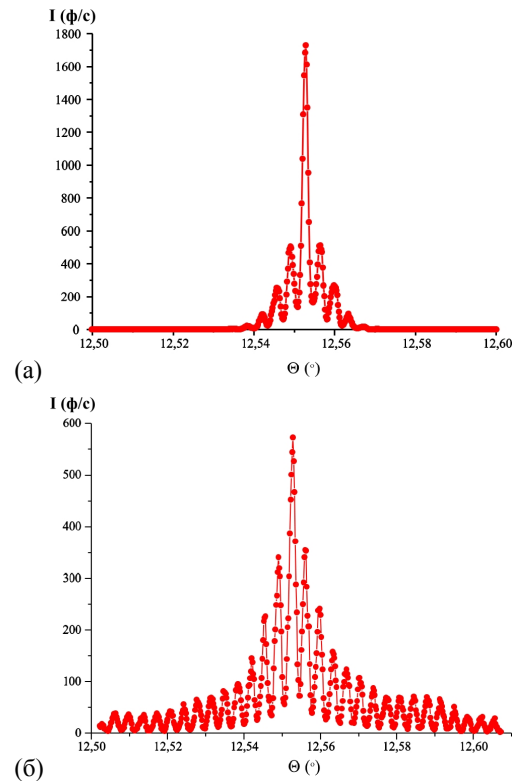


Рис. 4. Кривые качания Y – среза кристалла LGS, промодулированного ПАВ с длиной волны $\Lambda = 5.948$ мкм, полученные при различных амплитудах ПАВ (h): (а) $h = 1.2$ Å; (б) $h = 2.4$ Å. Длина волны рентгеновского излучения $\lambda = 1.54$ Å, отражение (200), угол Брэгга $\Theta_B = 12.5528^\circ$, коэффициент металлизации 33%, $f = 409$ МГц, $V = 2432,732$ м/с.

окисление Ir структуры ВШП и формирование пузырьков на контактных площадках при высоких температурах.

- [1] Chaston J.C., Platinum Metals Rev. (1965) **9** 50-61.
- [2] Roshchupkin D.V., Irzhak D.V., Tucoulou R., Buzanov O.A., J. Appl. Phys. (2003) **94** 6692-6696.
- [3] Roshchupkin D.V., Erko A.I., Ortega L., Irzhak D.V., Applied Physics A (2009) **94** 477-484.

Перспективные материалы акустоэлектроники: исследование структурного совершенства и акустических свойств методами рентгеновской топографии и дифрактометрии

Д.В. Рощупкин,¹ Д.В. Иржак,¹ О.А. Плотичина,¹ Р.Р. Фахртдинов,¹ А.И. Шишаков,¹
М.В. Григорьев,¹ О.А. Бузанов²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

²ОАО «ФОМОС Материалс», Москва, Россия

e-mail: rochtchr@iptm.ru

Развитие современной акустоэлектроники требует поиска новых перспективных пьезоэлектрических монокристаллов, которые обладают хорошими пьезоэлектрическими и термостабильными свойствами, и которые могут быть использованы в различных датчиковых устройствах, позволяющих измерять температуру, давление, ускорение, вязкость и т.д. Существенный прогресс в создании акустоэлектронных устройств связан с использованием многокомпонентных кристаллов группы кальций гало-германата. Данные кристаллы по своим термостабильным свойствам не уступают кристаллам кварца, а по значению коэффициента электромеханической связи в 4 раза превосходят последний. Кристаллы группы кальций гало-германата уступают по значениям пьезоэлектрических констант кристаллам LiNbO_3 , но отсутствие в них фазовых переходов вплоть до температуры плавления делает их незаменимыми для различных приложений.

ИПТМ РАН совместно с ОАО «ФОМОС Материалс» на протяжении последних 10 лет активно занимаются поиском и исследованием акустических и пьезоэлектрических свойств кристаллов группы кальций гало-германата, исследует возможности их применения в датчиковых системах [1]. В ходе исследований были синтезированы методом Чохральского кристаллы $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ (LGS), $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{14}$ (LGTA), $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ (CTGS), $\text{La}_3\text{Ga}_{5.5}\text{Ta}_{0.3}\text{Al}_{0.2}\text{O}_{14}$ (LGTA) (рис. 1). Для исследования кристаллов были использованы методы рентгеновской дифрактометрии и топографии, которые позволяют определять параметры элементарной кристаллической ячейки, изучать структурное совершенство, исследовать пьезоэлектрические и акустические свойства кристаллов. Ранее нами были детально исследованы свойства кристаллов LGS [2-4], LGT [5], CTGS [6]. Были измерены параметры элементарной кристаллической ячейки, структурное совершенство кристаллов, скорости распространения поверхностных акустических волн (ПАВ) и углы сноса потока акустической энергии. В настоящее время проводятся исследования кристаллов LGTA, которые

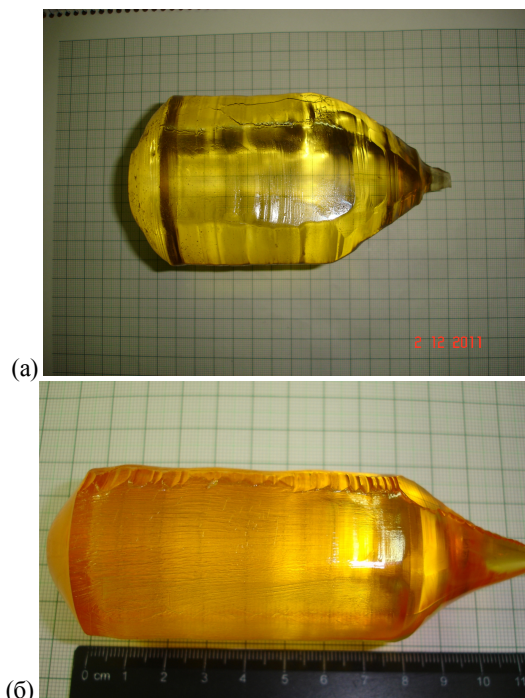


Рис. 1. Синтезированные методом Чохральского кристаллы группы кальций гало-германата: (а) CTGS, (б) LGTA.

обладают экстремально большим сопротивлением при высоких температурах. На рис. 2 представлен дифракционный спектр синтезированного кристалла LGTA (рис. 1(а)). На основе измерения позиций брэгговских пиков на дифракционном спектре и используя закон Брэгга

$$2d \sin \Theta_B = n\lambda, \quad (1)$$

где d – межплоскостное расстояние, Θ_B – угол Брэгга для соответствующих отражающих плоскостей, λ – длина волны рентгеновского излучения, можно легко определить межплоскостные расстояния и параметры элементарной кристаллической ячейки. Так как кристалл LGTA обладает пространственной группой симметрии 32, а элементарная ячейка является гексагональной, параметры элементарной кристаллической ячейки в

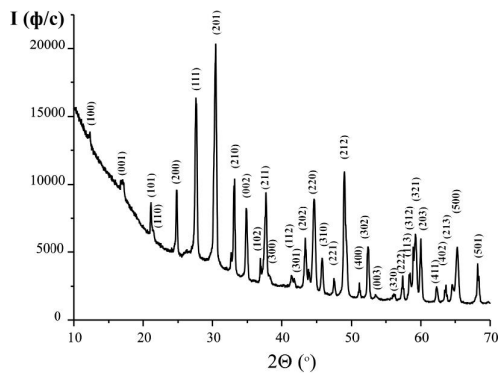


Рис. 2. Дифракционный спектр кристалла LGTA.

кристалле LGTA имеют следующие значения $a = b = 8.2764 \text{ \AA}$, $c = 5.2243 \text{ \AA}$.

Для исследования акустических свойств кристаллов группы кальций гало-германата используется метод высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии, который позволяет на основе анализа кривых качания акустически промодулированных кристаллов измерять длины волн и амплитуды ПАВ, углы сноса потока акустической энергии. Экспериментальные исследования проводятся на лабораторном источнике рентгеновского излучения с вращающимся медным анодом Bruker D8 Discover (излучение $\text{CuK}_{\alpha 1}$, $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$). Рентгеновское излучение коллимируется входной щелью с размером 100 мкм и монохроматизируется двумя $\text{Ge}(022)$ кристаллами-монохроматорами с двукратным отражением. Далее рентгеновское излучение под углом Брэгга падает на исследуемый кристалл, промодулированный ПАВ. Дифрагированное рентгеновское излучение падает на $\text{Ge}(022)$ кристалл-анализатор и затем регистрируется сцинтилляционным детектором.

Для возбуждения ПАВ на поверхности подложек были сформированы структуры Al встречноштыревых преобразователей (ВШП) с использованием методов фотолитографии и электронно-лучевой литографии. Были сформированы структуры ВШП с длинами волн $\Lambda = 6 \text{ мкм}$ и $\Lambda = 4 \text{ мкм}$. На рис. 4 представлены микрофотографии ВШП. Контактные площадки ВШП были сформированы с использованием метода фотолитографии, а для формирования электродов был использован метод электронно-

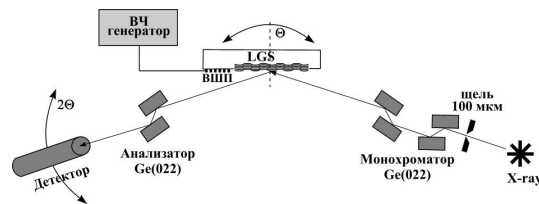
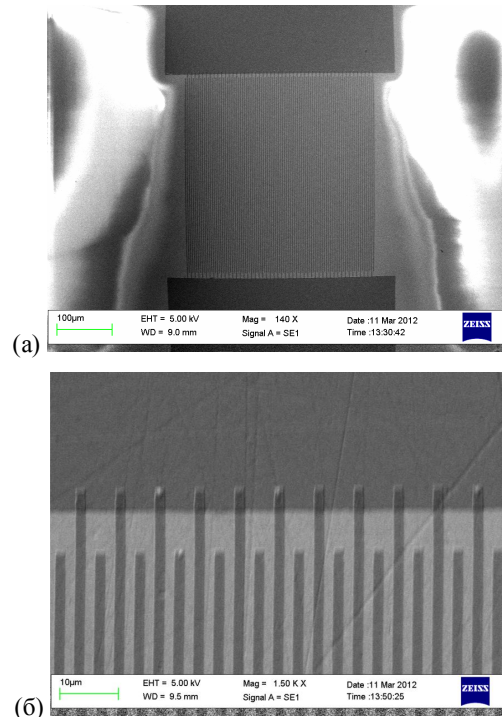


Рис. 3. Схема трехкристального рентгеновского дифрактометра для исследования акустических свойств кристаллов группы кальций гало-германата.

Рис. 4. Микрофотография структуры ВШП с длиной волны $\Lambda = 6 \text{ мкм}$: (а) общий вид ВШП, (б) структура электродов ВШП.

лучевой литографии. Структура ВШП была изготовлена из Al. Следует отметить, что поверхность подложек была отполирована таким образом, что шероховатость поверхности не превышает 6 \AA при толщине нарушенного слоя не более 60 \AA . Это позволяет при проведении рентгеновских дифракционных исследований принципиально уменьшить диффузное рассеяние рентгеновских лучей.

Возбуждение и распространение ПАВ в кристалле приводит к синусоидальной модуляции кристаллической решетки, которая приводит к появлению дифракционных сателлитов на кривой качания. Интенсивность дифракционных сателлитов определяется амплитудой ПАВ. С увеличением амплитуды ПАВ увеличивается количество дифракционных сателлитов на кривой качания. Угловая расходимость между дифракционными сателлитами на кривой качания определяется из выражения

$$\delta\theta = d/\Lambda, \quad (2)$$

где d - межплоскостное расстояние, а Λ - длина волны ПАВ.

На рис. 5 представлены результаты исследования процесса дифракции ПАВ на X - срезе кристалла CTGS, промодулированного ПАВ с длиной волны $\Lambda = 4 \text{ мкм}$ при амплитуде входного сигнала на ВШП $U = 10 \text{ В}$. Было использовано отражение от плоскостей (110) при

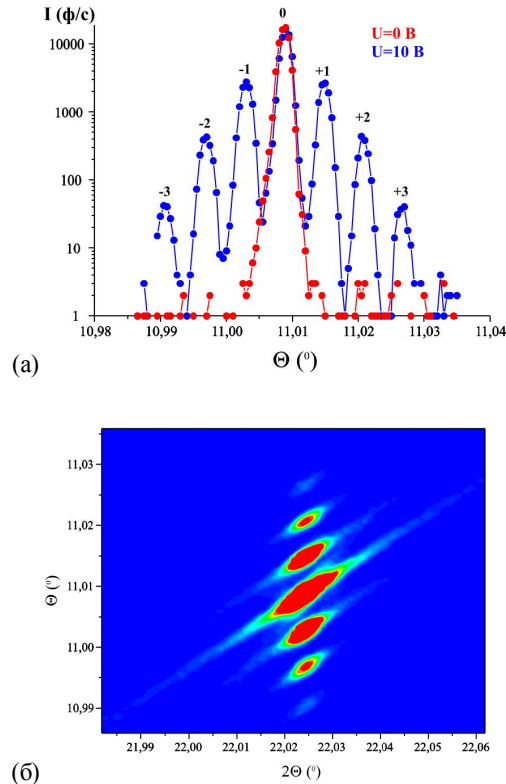


Рис. 5. Дифракция рентгеновского излучения на X – срезе кристалла CTGS, промодулированном ПАВ с длиной волны $\Lambda = 4$ мкм: (а) кривая качания, (б) двумерная карта распределения дифрагированного излучения. Отражение (110), $\Theta_B = 11.008^\circ$, $f_0 = 700$ МГц, $V = 2800$ м/с.

значении угла Брэгга $\Theta_B = 11.008^\circ$. На рис. 5(а) представлена кривая качания, полученная при резонансной частоте возбуждения ПАВ $f_0 = 700$ МГц. В данном случае при длине волна ПАВ $\Lambda = 4$ мкм скорость распространения ПАВ составляет $V = 2800$ м/с. На кривой качания и на двумерной карте распределения дифрагированной рентгеновской интенсивности можно наблюдать по три дифракционных сателлита с двух сторон от брэгговского пика. Угловая расходимость между дифракционными сателлитами составляет $\delta\Theta = 0.006^\circ$, что соответствует расчетному значению, полученному из выражения (2). На кривой качания хорошо видно, что соотношение сигнал/шум превышает 10^3 .

На рис. 6 и 7 представлены результаты исследования дифракции рентгеновского излучения на Y – срезе кристалла LGS, промодулированном ПАВ с длиной волны $\Lambda = 4$ мкм при амплитуде входного сигнала на ВШП $U = 10$ В. В Y – срезе кристалла LGS существует набор последовательных рефлексов (100), (200), (300) и т.д. К сожалению при использовании излучения $\text{CuK}_{\alpha 1}$ вблизи K – края поглощения Ga

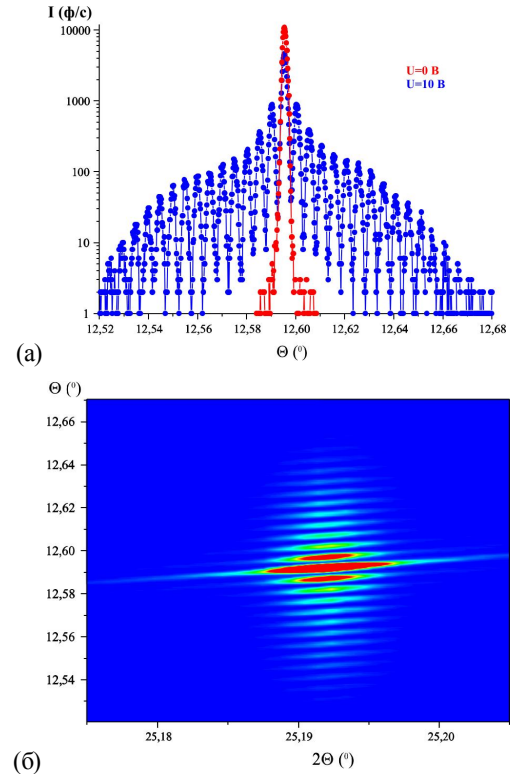


Рис. 6. Дифракция рентгеновского излучения на Y – срезе кристалла LGS, промодулированном ПАВ с длиной волны $\Lambda = 4$ мкм: (а) кривая качания, (б) двумерная карта распределения дифрагированного излучения. Отражение (200), $\Theta_B = 12.4782^\circ$, $f_0 = 577.5$ МГц, $V = 2310$ м/с.

интенсивность отражения (100) очень маленькая, что не позволяет исследовать процесс дифракции в данном случае. На рис. 6 представлены результаты исследования процесса дифракции рентгеновского излучения в случае отражения от плоскостей (200) при значении угла Брэгга $\Theta_B = 12.4782^\circ$. На кривой качания с двух сторон от брэгговского пика можно наблюдать по 14 дифракционных сателлитов. Угловая расходимость между дифракционными сателлитами составляет $\delta\Theta = 0.005^\circ$, что соответствует расчетному значению, полученному из выражения (2). Также для данного отражения (200) соотношение сигнал/шум в первых дифракционных сателлитах превышает 10^3 .

Сравнение кривых качания на рис. 5 и 6, полученных при одинаковой амплитуде входного сигнала на ВШП $U = 10$ В и близких значениях межплоскостных расстояний, свидетельствует, что в Y – срезе кристалла LGS значение коэффициента электромеханической связи (коэффициент преобразования высокочастотного электрического сигнала в акустические колебания кристаллической решетки) превышает значение для X – срезе кристалла CTG.

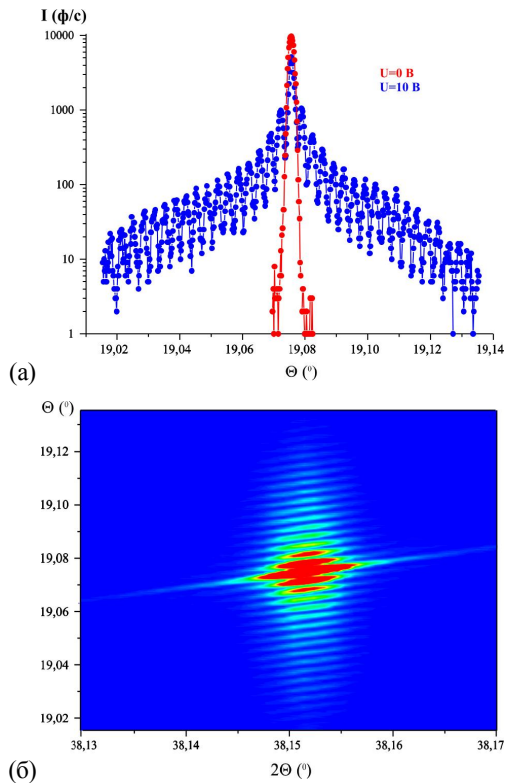


Рис. 7. Дифракция рентгеновского излучения на Y – срезе кристалла LGS, промодулированном ПАВ с длиной волны $\Lambda = 4$ мкм: (а) кривая качания, (б) двумерная карта распределения дифрагированного излучения. Отражение (300), $\Theta_B = 19.07672^\circ$, $f_0 = 577.5$ МГц, $V = 2310$ м/с.

На рис. 7 представлены результаты исследования процесса дифракции рентгеновского излучения в случае отражения от плоскостей (300) при значении угла Брэгга $\Theta_B = 19.07672^\circ$. На кривой качания с двух сторон от брэгговского пика можно наблюдать по 17 дифракционных сателлитов. Угловая расходимость между дифракционными сателлитами составляет $\delta\Theta = 0.0034^\circ$. Увеличение количества дифракционных сателлитов на кривой качания для отражения (300) по отношению к отражению (200) связано с уменьшением межплоскостного расстояния при увеличении номера отражения. Уменьшение межплоскостного расстояния приводит к увеличению отношения амплитуды ПАВ к величине межплоскостного расстояния.

В заключении следует сказать, что методы рентгеновской дифрактометрии и топографии являются оптимальными для исследования структурного совершенства и акустических свойств пьезоэлектрических кристаллов. Данные методы позволяют определить параметры элементарной кристаллической решетки, определить основные типы ростовых дефектов кристаллической решетки, определить скорости

акустических волн, амплитуды акустических колебаний кристаллической решетки и углы сноса потока акустической энергии.

Исследования проводятся в рамках ГК 16.513.12.3027 «Разработка метода получения тугоплавкого оксидного монокристаллического материала для создания высокотемпературного массочувствительного пьезорезонансного сенсора»

- [1] Sakharov S., Roshchupkin D., Emelin E., Irzhak D., Buzanov O., Zabelin A., Procedia Engineering (2011) **25** 1020-1023.
- [2] Roshchupkin D.V., Irzhak D.V., Tucoulou R., Buzanov O.A., J. Appl. Phys. (2003) **94** 6692-6696.
- [3] Roshchupkin D.V., Irzhak D.V., Roshchupkina E.D., Buzanov O.A., Crystallography Reports (2004) **49**(1) S80-S88.
- [4] Roshchupkin D.V., Roshchupkina H.D., Irzhak D.V., IEEE Transaction on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control (2005) **52**(11) 2081-2087.
- [5] Roshchupkin D.V., Erko A.I., Ortega L., Irzhak D.V., Applied Physics A (2009) **94** 477-484.
- [6] Рощупкин Д.В., Иржак Д.В., Плотицына О.А., Фахртдинов Р.Р., Бузанов О.А., Сергеев А.П., ПОВЕРХНОСТЬ. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования (2012) № 6, с. 32–35.

Возможности и ограничения метода *in situ* рентгеновской рефлектометрии для определения параметров растущих пленок

Егоров А.А., Монахов И.С., Е.Г. Новоселова, И.С. Смирнов
Московский институт электроники и математики НИУ ВШЭ, Москва.
met@miem.edu.ru

Особенностью современных технологий является использование все более тонких слоев и переход от микро- к наноразмерным пленкам. Применение таких покрытий предъявляет повышенные требования к качеству поверхности подложки, состоянию границ раздела между слоями и однородности отдельных слоев. В большинстве случаев контроль параметров наноразмерных пленок осуществляется после завершения процесса их формирования *ex-situ* методами, которые имеют ограничения, связанные с процессами адсорбции, окисления и диффузии на поверхности материалов после их извлечения из технологической камеры. Новым подходом является принцип измерения параметров выращиваемых пленок непосредственно в процессе их получения (*in-situ* методы). Поэтому в настоящее время в мире активно разрабатываются различные *in-situ* методы исследования и диагностики нанослоев: лазерная эллипсометрия, интерферометрия, внутрикамерная зондовая микроскопия и другие. Каждый из этих методов имеет свои достоинства и недостатки, ограничивающие их применения. Так, методы, основанные на использовании лазерного излучения, не применимы для диагностики непрозрачных (металлических) слоев. Зондовая микроскопия сталкивается с большими трудностями, связанными с необходимостью размещения микроскопа внутри технологической камеры. Одним из перспективных методов контроля является рентгеновская рефлектометрия *in-situ*.

В результате изменения разности фаз волн, отраженных поверхностью растущей пленки и поверхностью подложки, интерференционная картина в точке наблюдения представляет собой осцилляции интенсивности рентгеновского излучения. Положение первого экстремума определяется формулой Вульфа-Брегга с учетом преломления рентгеновских лучей.

Одним из преимуществ метода *in-situ* рентгеновской рефлектометрии является возможность получать информацию о параметрах растущей пленки непосредственно при проведении технологического процесса в реальном масштабе времени. На практике в большинстве случаев скорость формирования пленок лежит в диапазоне от десятых долей до

единиц нанометров в секунду. Это накладывает ограничения на время обработки экспериментальных данных и требует упрощения алгоритмов расчета. В общем случае коэффициент отражения от системы пленка-подложка описывается рекуррентными выражениями Паррата [1]. Регистрация временной зависимости коэффициента отражения R рентгеновских лучей при углах скольжения, значительно превышающих значение критического угла полного внешнего отражения, позволяет использовать кинематическое приближение, в рамках которого формулы для расчета параметров растущей пленки могут быть упрощены. В точках экстремумов выражение для коэффициента зеркального отражения имеет вид

$$R = \frac{1}{16 \sin^4 \theta_0} \left[(\delta_2^2 D^2 + (\delta_2 - \delta_1)^2 \pm 2\delta_2 D(\delta_1 - \delta_2)) \right],$$

где \pm соответствует минимальному и максимальному значениям коэффициента отражения R_{\min} , R_{\max} в зависимости от знака величины $(\delta_1 - \delta_2)$; δ_1 , δ_2 - декременты коэффициента преломления рентгеновских лучей для подложки и пленки соответственно. D - множитель, учитывающий изменение шероховатости границы раздела пленка-вакуум σ_{32} относительно шероховатости подложки σ_{21} , в качестве которого может быть использован фактор Дебая-Валлера.

В предположении, что величины декремента преломления и шероховатости растущей пленки являются медленно изменяющимися функциями ее толщины, их можно принять постоянными на полупериоде осцилляций. Тогда из выражений для среднего значения $\langle R \rangle$ и контрастности

$$K = \frac{R_{\max} - R_{\min}}{R_{\max} + R_{\min}}$$

коэффициента отражения от системы пленка-подложка определяются величины плотности и среднеквадратичной шероховатости пленки, усредненные по полупериоду осцилляций.

Изучение особенностей образования слоев в диапазоне толщин от единиц до сотен нанометров и сопутствующих поверхностных явлений (изменение шероховатости, образование

кластеров и т.д.) проводилось на экспериментальной установке, описанной в [2].

В докладе приведены примеры использования метода *in situ* рентгеновской рефлектометрии для определения параметров пленок различных материалов, наносимых методом магнетронного осаждения.

На рис.1 представлены результаты эксперимента по напылению титана на кремниевую подложку. Осцилляции быстро затухают, хотя периодичность в их расположении сохраняется. Толщина пленки во времени растет монотонно.

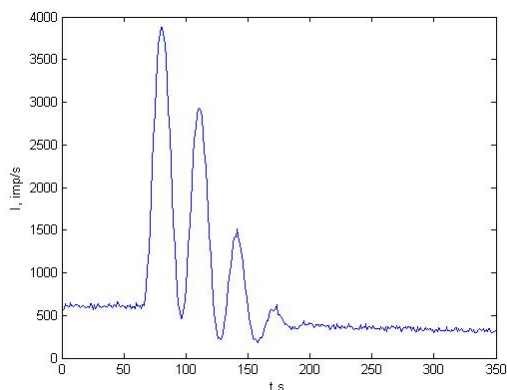


Рис.1. Зависимость коэффициента отражения рентгеновских лучей от времени напыления пленки титана. Излучение $\text{CuK}\alpha$, угол скольжения 1° .

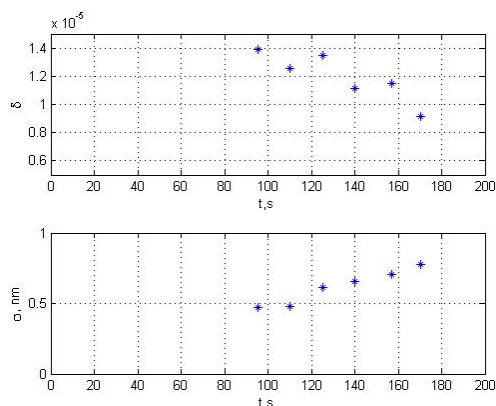


Рис.2. Временная зависимость декремента преломления и шероховатости поверхности пленки титана для эксперимента, представленного на рис. 1.

На рис.2 видно anomalous поведение рассчитанного декремента преломления с увеличением толщины пленки. Несомненно, это связано не с уменьшением плотности пленки, а с резким возрастанием влияния поглощения на результат расчета, которое а priori не было заложено в модель. Для сравнения приводятся результаты экспериментов с использованием

более жесткого излучения $\text{MoK}\alpha$ (длина волны 0.071 нм). (рис.3-4).

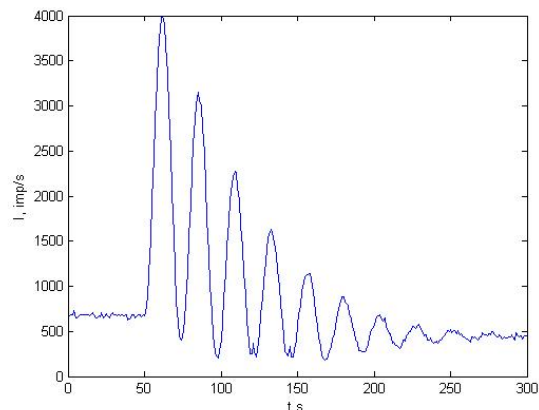


Рис.3 Зависимость коэффициента отражения рентгеновских лучей от времени напыления пленки титана. Излучение $\text{MoK}\alpha$, угол скольжения 0.45° .

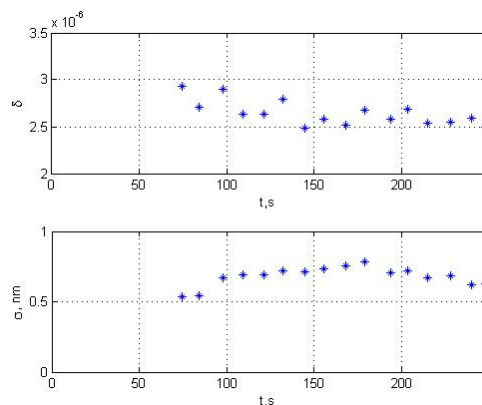


Рис.4. Зависимость декремента преломления и шероховатости поверхности пленки титана от времени напыления для эксперимента, представленного на рис.3

Из полученных результатов следует, что использование более жесткого излучения заметно улучшает ситуацию.

Очевидно, что заложенное в модель предположение о малом поглощении растущей пленки лучше выполняется при использовании жестких излучений и больших углов скольжения. Проведенные расчеты показали, что для каждой длины волны рентгеновского излучения существует верхний предел поглощающей способности пленки, ограничивающий возможности метода. Так, для излучения медного анода верхней границей поглощающей способности пленки является значение массового коэффициента поглощения меньше или равно $25 \text{ см}^2/\text{г}$. Реализация метода при напылении более тяжелых металлов (медь, вольфрам и др.) требует использования жестких излучений.

1. L. G. Parratt, C. F. Hempstead, Phys. Rev. 94, № 6, 1593-1600 (1954).
2. И.С.Монахов, Е.Г.Новоселова, И.С.Смирнов Изучение процессов роста пленок при магнетронном напылении методом *in situ* рентгеновской рефлектометрии. Труды XV Международного совещания «Радиационная физика твердого тела», М.:НИИ ПМТ, 2005, с.239-243.

Интегральная интенсивность рентгеновского излучения в ограниченном кристалле

И.А. Смирнова¹, Э.В. Суворов¹, Е.В. Шулаков²

¹Институт физики твердого тела РАН Черноголовка, Россия

²Институт проблем технологии микроэлектроники РАН, Черноголовка, Россия
irina@issp.ac.ru

В представленной работе теоретически исследована величина интегральной интенсивности рентгеновского излучения в топографии сканирования в кристалле ограниченном боковыми гранями в геометрии Бормана – Леемана I и II.

В динамической теории рассеяния рентгеновского излучения в приближении падающей плоской волны величина интегрального отражения вычисляется интегрированием интенсивности излучения по углу падения. При этом предполагается, что излучение падает на плоскопараллельный кристалл конечной толщины или бесконечно толстый кристалл [1]. В приближении падающей сферической волны дифракция рентгеновского излучения описывается хорошо известной теорией Като [2, 3], при этом интегральная интенсивность определяется интегрированием интенсивности излучения по координате вдоль выходной поверхности кристалла. В этом случае возможно рассмотрение дифракции на кристаллах произвольной формы. В работах Бормана и Леемана [4] исследовалось рассеяние в ограниченных боковой гранью толстых кристаллах кремния ($\mu = 18$ и $\mu = 76$, здесь μ - линейный коэффициент поглощения), т.е. в чисто Бормановском случае. Позже было выполнено теоретическое исследование интерференционной картины Бормана - Леемана [5], а также экспериментальное исследование на кристаллах алмаза [6] и кремния [7]. В работах [8, 9] исследовались изображения дефектов в ограниченном кристалле. В работе [10] в геометрии Бормана – Леемана I выполнено аналитическое интегрирование интенсивности излучения отраженного только от боковой грани кристалла.

Таким образом, рассеяние рентгеновского волнового поля в кристаллах ограниченных боковой гранью в секционной топографии исследовано хорошо. Но интересно посмотреть, как ведет себя величина интегральной интенсивности рентгеновского излучения в кристалле ограниченном боковыми гранями.

Рассмотрим дифракцию по Лауэ сферической волны от точечного источника излучения на плоскопараллельной кристаллической пластинке толщиной t .

Амплитуда отраженной волны, дается выражением:

$$d_g(x, z) = pJ_0(\rho_1) \quad (1)$$

Области кристалла соответствует условие $0 < z < t$, ось X направлена вдоль вектора $-g$, а координата x отсчитывается от точки O_1 на входной поверхности кристалла.

$\tau = \lambda \cos \theta / C(\chi_g \chi_{-g})^{1/2}$, χ_g – комплексный g -коэффициент Фурье - разложения поляризуемости кристалла; θ - брэгговский угол и λ - длина волны излучения; коэффициент $p = \exp(-P)$, где $P = \mu z / 2 \cos \theta$ описывает фотоэлектрическое поглощение в кристалле; $J_n(\xi)$ - цилиндрические функции Бесселя n -порядка; $\rho_1 = (\pi z / \tau)(1 - \sigma_1^2)^{1/2}$, $\sigma_1 = x / z t g \theta$ - безразмерный параметр, изменяющийся в пределах треугольника потока энергии от -1 до 1. Эта картина хорошо известна в секционной топографии как маятниковые полосы при дифракции сферической рентгеновской волны. Несколько менее известной является интерференционная картина Бормана - Леемана [4], связанная с полным внутренним отражением по Брэггу O или G -волны на границе раздела кристалл - вакуум. Геометрия дифракции, соответствующая этим двум случаям, представлена на рис. 1. Расстояние $Q = AO_1$ (рис. 1a), $Q = A_1O_1$ (рис. 1б) от боковой грани кристалла до точки O_1 удовлетворяет условию: $0 < Q < t g \theta$. Граничные условия на ED: геометрия I: $d_g = 0$, $d_o = D_o(\text{out})$, геометрия II: $d_g = 0$, $d_o = D_o(\text{out})$

Распределение амплитуды дифрагированной волны в областях $O_1T_1T_2E$ и $O_1R_1R_2E$ (рис. 1, б, а) соответствует теории Като и описывается выражением (1). Аналитические решения для областей ET_2D и ER_2D были получены в работе [5] и имеют следующий вид:

геометрия I:

$$d_g = pJ_0(\rho_1) + pJ_2(\rho_2)(1 - \sigma_2) / (1 + \sigma_2) \quad (2)$$

геометрия II:

$$d_g = pJ_0(\rho_1) + pJ_0(\rho_2), \quad (3)$$

здесь $\rho_2 = (\pi z / \tau)(1 - \sigma_2^2)^{1/2}$, $\sigma_2 = \sigma_1 + 2u$, переменная u определяется выражением $u = Q / z t g \theta$ и $q = Q / t g \theta$. Переменная σ_2 определена

только в областях ET_2D и ER_2D кристалла и изменяется от величины q в точке D до 1 на отрезках ET_2 и ER_2 . Распределения интенсивности G -волны на выходной грани ED получают подстановкой

$\sigma_2 = \sigma_1 = u$ в (2), а на выходных гранях DT_2 и DR_2 подстановкой $z=t$ в (2) и (3).

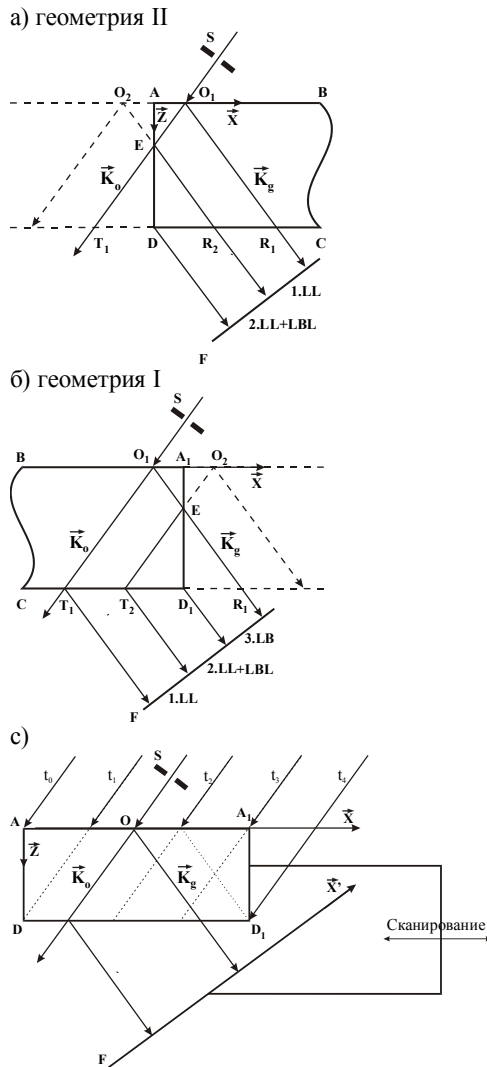


Рис.1 а), б) Геометрия наблюдения интерференционной картины Бормана - Леемана.
 в) Схема дифракции в топографии сканирования.

Многочисленные отражения рентгеновской волны в конечном кристалле описываются, согласно работе [6]. Так, в случае I топографическое изображение разбивается на три участка: 1) область Лауэ-Лауэ дифракции (LL) от отрезка T_2T_1 , 2) область интерференции волн Лауэ-Брэгг-Лауэ и Лауэ-Лауэ дифракции (LBL+LL) от отрезка D_1T_2 и 3) область

дифракции Лауэ-Брэгга (LB) от отрезка ED_1 . Аналогично в случае II можно выделить две области: 1) LL от отрезка R_2R_1 и 2) LBL+LL от отрезка DR_2 .

На рис.1с представлена геометрия дифракции в топографии сканирования в кристалле ограниченном боковыми гранями. В топографии сканирования во время экспозиции кристалл и фотолампа непрерывно перемещаются, и на фотолампе регистрируется интегральная интенсивность. В начальный момент времени излучение падает в край кристалла и далее с t_0 до t_1 реализуется область дифракции LL и LL+LBL, с t_1 до t_2 область дифракции LL, с t_2 до t_3 реализуется дифракция LL, LL+LBL и LB, с момента времени t_3 и до t_4 дифракция LL+LBL и LB.

Рассмотрим интегральное отражение.

На рис.2 представлен график величины интегрального отражения $R_i(A)$ для плоскопараллельной пластинки, где t – толщина кристалла, $A = t/\tau_0, \tau_0 = \lambda \cos \theta / C\chi_g$. График получен численным интегрированием интенсивности (1) по выходной поверхности кристалла (шаг интегрирования здесь и далее $5 \cdot 10^{-3}$ мкм). Функции Бесселя комплексной переменной ρ вычислялись с помощью аппроксимирующих полиномов в области $|\rho| \leq 3$ и асимптотических тригонометрических разложений при $|\rho| > 3$ [11]. Хорошо видно, что $R_i(A)$ при малых значениях величины A , пропорциональной толщине кристалла, монотонно возрастает, при больших A интегральная интенсивность осциллирует с постоянным периодом относительно среднего значения (для не поглощающего кристалла ($P=0$) относительно $\pi/2$). Величина интегрального отражения на рис.2 не отличаются от значения, получаемого в теории при падении падающей плоской волны.

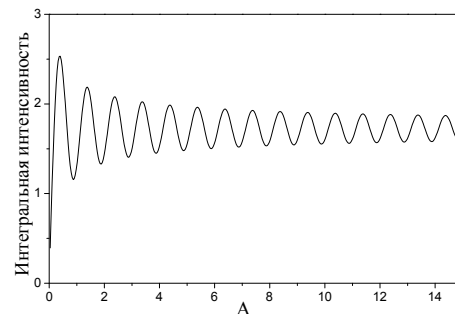


Рис.2 Интегральная интенсивность в Лауэ геометрии.

Далее представлены графики интегральной интенсивности: излучение $MoK_{\alpha 1}, \mu t=0$, толщина кристалла постоянна и равна

$t=13.745$ $\tau_0=504$ мкм, ширина кристалла
 $L=1.5*\Delta=3t\text{tg}\theta_B=$ 284.15мкм, ширина
 треугольника рассеяния $\Delta=189.5$ мкм, $\tau_0=36.668$
 мкм.

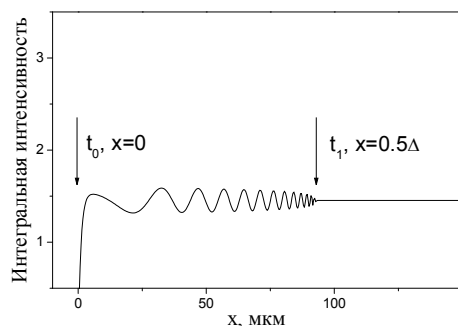


Рис.3 Интегр. интенсивность в геометрии II.

На рис.3 представлен график интегральной интенсивности отраженного излучения в функции от координаты x' в плоскости регистрации, в ограниченном кристалле в геометрии Бормана – Леемана I. Интегральная интенсивность для каждого значения x получена интегрированием интенсивности $I=d_g*(k.c.d_g)$ (3) на выходной грани DR_1 в разные моменты времени. Рассмотрим, как ведет себя величина интегральной интенсивности при смещении точки падения излучения от $x=0$ (t_0) до $x=0.5\Delta$ (t_1). В точке $x=0$ реализуется область (LBL+LL) на отрезке DR_2 и области (LL) на отрезке R_1R_2 . При $x=0$ интегральная интенсивность равна 0, при увеличении Δ интегральная интенсивность экспоненциально растет и далее осциллирует с постепенно уменьшающимся периодом и амплитудой и стремится к постоянному значению, область Лауэ-Лауэ дифракции (LL).

На рис.4 представлен график интегральной интенсивности в геометрии Бормана – Леемана II. Интегральная интенсивность отраженного излучения для каждого значения x получена численным интегрированием интенсивности (2) на выходных гранях T_1D_1 и D_1E . Рассмотрим, как ведет себя величина интегральной интенсивности при смещении точки падения излучения от $x=\Delta$ (t_2) до $x=2\Delta$ (t_4). При увеличении x от $x=\Delta$ до $x=1.5\Delta$ интегральная интенсивность осциллирует с таким же периодом, как и на рис. 3 но с более низким контрастом. При $x=1.5\Delta$ величина интегральной интенсивности равна π и не отличаются от значения, получаемого в теории при падении падающей плоской волны. В области от $x=1.5\Delta$ до $x=2\Delta$ реализуется дифракция в геометрии на отражение (LB).

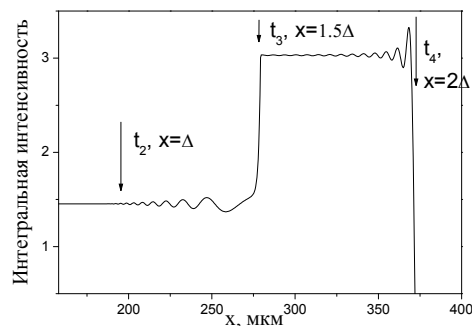


Рис.4 Интегр. интенсивность в геометрии I.

Таким образом, в данной работе впервые теоретически рассмотрена величина интегральной интенсивности отраженного излучения в кристаллах ограниченных боковой гранью, геометрия Бормана – Леемана I и II. Показано, что интегральная интенсивность является осциллирующей функцией в зависимости от точки падения на кристалл. Предельные значения интегральной интенсивности находятся в соответствии со значениями, получаемыми в теории в приближении падающей плоской волны.

- [1] Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика, М.: Наука, 77 (1982).
- [2] Kato, N., Acta Crystallogr, A14, 526, 627 (1961).
- [3] Kato, N., J. Appl. Phys., 39, 2225, 2231 (1968).
- [4] Borrmann, G., Lehmann, K., Crystallography and Crystal Perfection Ed. Ramachandran G.N. London, N.Y.: Academic Press, 101 (1963).
- [5] Saka, T., Katagawa, T., Kato, N., Acta Crystallogr. A28, 102, 113 (1972).
- [6] Lang, A.R., Kowalski, G., Makepeace, A.P.W. Moore, M. Acta Crystallogr., A42, 501 (1986).
- [7] Шулаков, Е.В., Смирнова, И.А., Суворов, Э.В., Поверхность, 7, 32 (1996).
- [8] Шулаков, Е.В., Смирнова, И.А., Суворов, Э.В., Поверхность, 1, 100 (2002).
- [9] Шулаков, Е.В., Смирнова, И.А., Суворов, Э.В., Поверхность, 6, 5 (2003).
- [10] Saka, T., Phys. Status Solidi, A206, 8, 1970 (2009).
- [11] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 688, 777 (1978).

Многослойные структуры Cr/Y для компенсации внутренних напряжений и реставрации подложек элементов рентгеновской оптики

Ю.А. Вайнер, Б.А. Грибков, М.В. Зорина, В.Н. Полковников, Н.Н. Салашенко,
С.Д. Стариков, Н.Н. Цыбин
ФГБУН Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия
e-mail: polkovnikov@ipmras.ru

Современные методики изготовления различных элементов рентгеновской оптики требуют применения вспомогательных многослойных структур МСС, не являющихся интерференционными. Они могут выполнять либо роль жертвенного слоя (для создания свободновисящих структур, для переноса многослойных покрытий с одной подложки на другую, для реставрации подложек после осаждения на них зеркал), либо роль компенсатора внутренних напряжений основной интерференционной структуры, либо роль коррекционного покрытия (в частности, для методик пленочной асферизации и пленочной коррекции формы), либо роль покрытия, по которому в свою очередь осуществляется коррекция формы поверхности подложки (ионно-пучковым травлением). Очень часто такая структура выполняет сразу несколько функций. Например, при создании зеркал для целей ЭУФ литографии это неоптическое покрытие одновременно выполняет роль коррекционного, антистрессового и реставрационного слоя.

В зависимости от той задачи, которую призвано решать неоптическое покрытие, к нему предъявляются следующие требования. Во-первых, необходимо наличие селективных травителей (для съема свободновисящих элементов без ухудшения их качества). Во-вторых, возможность варьирования величины их внутренних напряжений в широких пределах и со сменой знака с растягивающих на сжимающие (для компенсации упругих деформаций или бесдеформационного осаждения). В-третьих, покрытие, располагающееся между подложкой и многослойным зеркалом, не должно ухудшать шероховатости подложки. В-четвертых, для контролируемых сверхмалых, субнанометровых съемов при процессах ионно-пучковой коррекции крайне необходима линейность травления структуры ионными пучками. Поскольку одно покрытие может решать сразу несколько задач, желательно, чтобы оно удовлетворяло сразу всем требованиям.

В ИФМ РАН до сих пор такой универсальной структурой являлось многослойное покрытие на основе Cr/Sc. Однако оно обладает таким серьезным недостатком как существенная нелинейность зависимости скорости травления ионным пучком от глубины травления.[1] К тому

же, скандий является достаточно дорогостоящим материалом, стоимость одного килограмма составляет порядка 15 тыс. долларов США. Поэтому актуальной является задача поиска альтернативного покрытия, имеющего все достоинства Cr/Sc и лишённого его недостатков.

Настоящая работа посвящена изучению свойств МСС Cr/Y как альтернативной традиционно используемой МСС Cr/Sc. Иттрий был выбран как металл, близкий по химическим свойствам к скандию и, кроме того, имеющий стоимость на два порядка ниже.

В ходе данной работы был произведён ряд экспериментов с целью изучения внутренних напряжений в структуре Cr/Y в зависимости от индивидуальных толщин материалов. Для измерений внутренних напряжений применялся метод балки. Радиус кривизны тонкой (0,25 мм), узкой (20 мм) и длинной (до 100 мм) кремниевой подложки до и после напыления на неё МСС измерялся при помощи лазерного стенда. Два параллельных лазерных пучка отражаясь от подложки, падают на экран. Измерив отклонение лазерных пучков на экране от нулевого положения и зная расстояние между параллельными лазерными пучками и от подложки до экрана можно найти радиусы кривизны подложки до и после напыления. Точность измерений внутренних напряжений таким методом определяется точностью измерения расстояний между лазерными лучами на экране. Абсолютная погрешность измерений расстояний между лучами лазеров составляет порядка 0,5 мм. Относительная погрешность будет зависеть от абсолютных расстояний между лазерными лучами. В данных измерениях относительная погрешность составляла 1-5%. Для вычисления внутренних напряжений по результатам измерения радиуса кривизны структуры использовалась формула Стони:

$$S = \left[\frac{E_s}{6(1-\nu_s)} \right] \frac{t_s^2}{t_f} \left(\frac{1}{R_2} - \frac{1}{R_1} \right)$$

Где E_s , ν_s – модуль Юнга и коэффициент Пуассона материала подложки, t_s и t_f – толщины подложки и пленки соответственно, R_1 и R_2 – радиусы кривизны подложки до и после осаждения на нее пленки.

Результатом экспериментов стало построение зависимости внутренних напряжений

в структуре Cr/Y от индивидуальных толщин материалов (рис. 1).

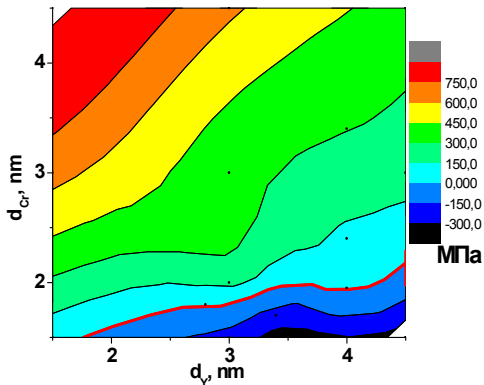


Рис. 1. Зависимость внутренних напряжений в МСС Cr/Y от толщин индивидуальных слоев.

Из приведенных результатов можно увидеть, что напряжения в Cr/Y-структуре меняются достаточно в широких пределах и могут менять свой знак. Это свойство позволяет применять данную структуру для компенсации как положительных, так и отрицательных упругих деформаций возникающих в результате осаждения на подложку различных МСС. Кроме того, имеется возможность синтеза бесстрессовой ($S=0$ МПа) Cr/Y-структуры, что может быть крайне важно в задачах плёночной коррекции подложек.

Один из экспериментов был посвящён проверке точности предсказаний по данным карты и синтезу бесстрессовой структуры. Параметры $d_{Cr}=1,8$ нм, $d_Y=2,8$ нм МСС соответствуют точке, находящейся на изолинии нулевого стресса. Осажденная структура с этими толщинами индивидуальных слоев имела величину внутренних напряжений $S=0\pm 8$ МПа, что с учётом погрешности измерений совпадает с ожидаемым значением.

Следующим изученным свойством МСС Cr/Y являлось определение влияния ее на подложку. В частности, на развитие шероховатости поверхности после осаждения и после химического удаления с подложки. Эксперимент был проведен по следующей схеме. На кварцевую подложку наносилась МСС Cr/Y с параметрами $d_{Cr}=1,5$ нм, $d_Y=3$ нм, числом периодов $N=40$. Затем структура полностью удалялась методом химического травления. Поверхность подложки до напыления, вместе с МСС и после её стравливания аттестовалась методом атомно-силовой микроскопии AFM. По данным AFM восстанавливались PSD-функции, характеризующие уровень шероховатости в широком диапазоне пространственных частот. Результаты восстановления приведены на рис. 2.

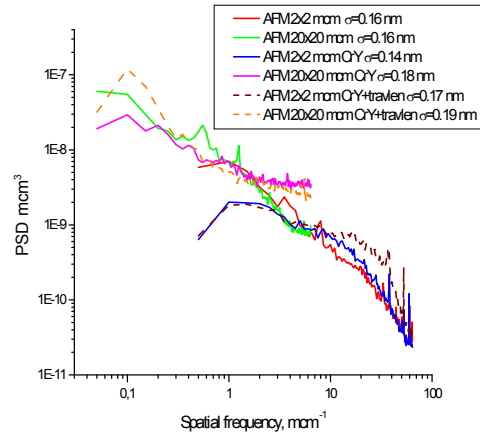


Рис. 2. PSD-функции поверхности кварцевой подложки до напыления МСС Cr/Y, после напыления и после стравливания.

Выбирались два размера кадра 2×2 мкм и 20×20 мкм для аттестации соответственно в высоких и низких пространственных частотах. Шероховатость в низких частотах практически не менялась, в то время как в высоких частотах после стравливания МСС Cr/Y наблюдалось незначительное увеличение шероховатости. На поверхности структуры Cr/Y по данным AFM шероховатость не развивается.

В конечном итоге показателем качества поверхности, уровня шероховатости являются отражательные характеристики многослойного зеркала, нанесенного на эту поверхность, коэффициент отражения и величина спектральной селективности. Из условия Дебая-Валлера $R = R_{i,d} e^{-(2\pi m \sigma / d)^2}$ следует, что чем меньше период зеркала, тем чувствительней коэффициент отражения к уровню высокочастотной шероховатости.

Поверхность Cr/Y-структуры помимо метода AFM так же аттестовалась методом нанесения МРЗ и последующим измерением коэффициента отражения. Для этого на поверхность двух кремниевых подложек в одном технологическом цикле наносилась МРЗ нормального падения Cr/Sc. Предварительно на одну из подложек был нанесён подслой Cr/Y с параметрами $d_{Cr}=1,5$ нм, $d_Y=3$ нм, $N=40$. Зеркала Cr/Sc нормального падения были выбраны исходя из того, что период данных структур составляет порядка $d=1,5$ нм, и незначительное изменение уровня шероховатости даже на $0,01$ нм изменяет пиковый коэффициент отражения практически на 1%. Измерения коэффициентов отражения зеркал производились на рефлектометре, построенном на базе РСМ-500 на длине волны $3,136$ нм. Коэффициент отражения зеркала нанесённого на чистую кремниевую подложку составил $R=10,4\%$, селективность $s=\text{tg}\theta/\Delta\theta=140$, у зеркала, нанесённого на подслои

Cr/Y $R=10,3\%$, $s=142$. С учётом погрешности измерений совпали, таким образом, подслои Cr/Y не ухудшают отражательные характеристики МРЗ, нанесённого на его поверхность.

Однако само значение пиковых коэффициентов отражения Cr/Sc многослойных зеркал значительно отличается от расчётных. Теоретический расчёт показал, что коэффициент отражения данных структур на длине волны $\lambda=3,136$ нм может достигать $R=25\%$. Наибольший же коэффициент отражения Cr/Sc-зеркал из всей серии экспериментов, осуществлённых в данной работе составил $R=11,5\%$. Кроме того по параметрам структуры, восстановленным по результатам измерений зеркал методом малоугловой рентгеновской дифрактометрии ($\lambda=0,154$ нм), теоретически предсказанный коэффициент отражения на $\lambda=3,136$ нм составляет не менее $R=17\%$. Таким образом возникла необходимость нахождения и учёта влияния аппаратной функции измерительного прибора.

Имеющийся у нас в наличии рефлектометр, построенный на базе спектрометра-монокроматора РСМ-500, как и любой другой спектральный прибор имеет аппаратную функцию конечной ширины (ширина контура линии на полувысоте), которая вносит искажения в результаты измерений. В зависимости от того, насколько ширина аппаратной функции меньше ширины пика отражения многослойного зеркала, блабла может вносить разные по значимости аппаратные искажения.

Задача учёта аппаратных искажений имеет известное решение [2]. Измеренный контур коэффициента отражения представляет собой свёртку аппаратной функции и истинного коэффициента отражения

Для того чтобы найти истинный коэффициент отражения, необходимо решить это интегральное уравнение, ядром которого как раз является искомая величина.

Все процедуры восстановления приведены на примере образца зеркала, обладающего наибольшим пиковым коэффициентом отражения среди всей серии экспериментов в данной работе. Параметры структуры: число слоёв $N=255$, период $d=1,62$ нм, доля хрома в периоде $\beta=0,44$, результаты измерений: пиковый коэффициент отражения $R=11,5\%$, селективность $s=\text{tg}\theta/\Delta\theta=150$.

Но для начала необходимо восстановить истинную аппаратную функцию $A_{\text{ист}}$. Измерения зеркал производились на Π -линии титана ($\lambda=3,136$ нм), имеющую относительно узкую спектральную ширину. В результате этого истинная аппаратная функция, то есть те параметры зондирующего пучка, с которыми и измерялись образцы, есть произведение контура линии титана на аппаратную функцию прибора $A_{\text{приб}}$. Рефлектометр построен по роулондовской схеме со сферической дифракционной решёткой, его аппаратная функция

$A_{\text{приб}}$ определяется наличием аббераций у этой решётки и точностью настройки оптической схемы. Измерения аппаратной функции $A_{\text{приб}}$ осуществлялись в нулевом порядке дифракции, её ширина составила $\Delta\lambda=0,0192$ нм. Именно этим пучком снималась спектральная зависимость Π -линии мишени титана вблизи $\lambda=3,136$ нм, в результате измерений вносились искажения, поэтому первоначально необходимо было восстановить истинный контур линии титана. Измеренная спектральная зависимость аппроксимировалась гауссовой функцией и затем по изложенному выше методу восстанавливался истинный контур спектральной линии. Произведение именно этой восстановленной спектральной линии на аппаратную функцию прибора $A_{\text{приб}}$ есть истинная аппаратная функция $A_{\text{ист}}$ ширина контура которой составила $\Delta\lambda_{\text{ист}}=0,016$ нм.

В результате того, что Π -линия титана достаточно узкая ($\Delta\lambda=0,033$ нм), снятие спектральной зависимости коэффициента отражения зеркал невозможно, и во всех измерениях снималась угловая зависимость при фиксированной длине волны $\lambda=3,136$ нм. Зависимость $R(\theta)$ переводилась в $R(\lambda)$ путём несложных преобразований $\lambda=2d\sin\theta$, при этом не учитывается дисперсия оптических констант материалов в окрестности $\lambda=3,136$ нм. Зависимость $R(\lambda)$ аппроксимировалась гауссовой функцией и после этого восстанавливался истинный контур коэффициента отражения.

Коэффициент отражения восстановленного контура составил $R=18\%$, при ширине пика $\Delta\lambda=0,013$ нм. Данные результаты находятся на уровне мировых.

Работа выполнена при поддержке РФФИ 12-02-00659-а, 11-02-00597-а, 11-02-97109-р_поволжье_а, 11-02-00961-а, 10-02-00957-а, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы».

[1] Зуев С.Ю. Технологический комплекс для изготовления прецизионной изображающей оптики / С.Ю. Зуев, Е.Б. Клоенков, А.Е. Пестов, В.Н. Полковников, Н.Н. Салашенко, Л.А. Сулов, М.Н. Торопов, Н.И. Чхало // Известия РАН. Серия физическая. – т.75. – № 1 (2011). – С. 57-60.

[2] В.И. Мальшев // Введение в экспериментальную спектроскопию, М.:Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1979.

Об основных механизмах формирующих изображение дислокаций в рентгеновской дифракционной топографии

Э.В.Суворов, И.А.Смирнова

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики твердого тела Российской академии наук,
Черноголовка, Россия
e-mail: suvorov@issp.ac.ru

Методами численного моделирования и экспериментальной секционной рентгеновской топографии изучены закономерности образования дифракционного изображения дислокаций. Изучение рассеяния рентгеновских лучей на неоднородностях кристаллической решетки, связанных с дефектами, представляет интерес по нескольким причинам. Во-первых, контраст дефектов связан с фундаментальной проблемой – развитие динамической теории рассеяния рентгеновского излучения в реальных кристаллах. Во-вторых, знания особенностей дифракции позволяют качественно, а в ряде случаев и количественно, анализировать рентгеновский дифракционный контраст дефектов кристаллической решетки [1-4] (измерять величины деформаций, определять знак и параметры вектора Бюргера и пр.). Понятно, что это очень важно в практическом отношении, т.к. позволит, в конечном счете, сделать рентгеновскую топографию количественным методом исследования реальной структуры кристаллов.

Анализ изображения дислокаций в методах рентгеновской секционной топографии показывает, что механизмы образования изображения сильно зависят от величины градиента функции локальных разориентаций отражающих плоскостей. В представленной работе рассмотрен случай винтовых дислокаций, ориентированных вдоль вектора дифракции с мощностью поля $(\mathbf{H}\mathbf{b}) > 10$. Здесь параметр \mathbf{H} – это вектор обратной решетки для плоскостей с индексами (hkl) или вектор дифракции.

Для теоретического описания рассеяния рентгеновского волнового поля на дислокациях в кристаллах и для моделирования изображений используется система дифференциальных уравнений Такаги-Топена [5, 6]. Функция β_n в этих уравнениях описывает локальные отклонения отражающих плоскостей от точного условия Брэгга.

$$\beta(\mathbf{r}) = -\left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial x}\right) \cdot (\mathbf{K}_H \mathbf{u}(\mathbf{r})),$$

здесь \mathbf{r} – текущий радиус – вектор точки, \mathbf{K}_H – волновой вектор отражающей плоскости \mathbf{H} с индексами Миллера (hkl) , $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ – векторное поле

смещений для данной дислокации. В каждом конкретном случае можно записать более простое выражение. Например, в данном случае это поле локальных разориентаций будет иметь вид

$$\beta(y, z) = \frac{(\mathbf{K}_H \mathbf{b}_x)}{2\pi} \cdot \frac{\text{ctg}\theta \cdot y}{y^2 + \text{ctg}\theta \cdot z^2}$$

На рис.1 показан вид функции локальных разориентаций кристаллической решетки и сечение этой функции при $x=0$. В областях ($y \geq [c, d]$), где функция локальных разориентаций меняется достаточно медленно на расстояниях экстинкционной длины, рентгеновское волновое поле успевает подстраиваться под изменяющуюся решетку (для описания здесь удобно применять геометрическую оптику рентгеновских лучей), возникает изгиб и смещение траекторий блоховских волн, набегает дополнительная разность фаз, образуются новые интерференционные контуры, изгибаются старые. Таким образом, формируется интерференционная картина на секционной топограмме. Этот механизм формирования динамического изображения был сформулирован В.Л.Инденбомом и описан в работе [7].

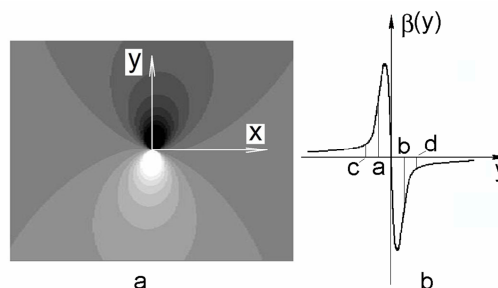


Рис.1. Вид функции локальных разориентаций отражающих плоскостей $\beta(y, z)$ для винтовой дислокации, расположенной в кристалле параллельно вектору дифракции -а), и сечение этой функции отражающей плоскостью -б).

Совершенно другие факторы начинают работать в локальных областях, где $y < [a, b]$, и

кристаллическая решетка выходит за пределы области отражения. Локальные области кристаллической решетки, находящиеся в отражающем положении, и области, вышедшие за пределы брэгговского отражения, можно разделить условной псевдограницей. Тогда на такой границе должно возникать рассеяние, очень похожее на эффект Бормана-Лемана. Следовательно, здесь наиболее ярко проявляется механизм межветвевое рассеяние (interbranch scattering). Как было показано в работах [7-10], это явление вносит наибольший вклад в формирование дифракционного изображения. В реальной ситуации, конечно, никакой резкой границы нет – кривая отражения – это плавная кривая. Поэтому речь в данном случае может идти лишь о величине рассеянной интенсивности.

Методами численного моделирования и экспериментальной секционной топографии исследованы закономерности дифракции рентгеновского излучения в тонком кристалле для случая, когда ось дислокации располагается параллельно вектору дифракции. Компьютерное моделирование проводилось для трех видов функции локальных разориентаций, сечения которых представлены на рис 2.

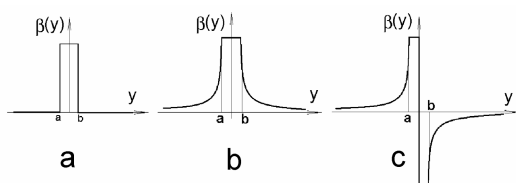


Рис.2. Модели функции локальных разориентаций использованные для численного моделирования изображения дислокации.

Для случая функции локальных разориентаций, изображенной на рис 2а, как было показано в работе [8], формируется пятно прямого изображения. Это позволяет утверждать, что одним из механизмов формирования прямого изображения является межветвевое рассеяние на псевдогранице раздела $[a,b]$. Моделирование проводилось для нескольких значений расстояния $[a,b]$. Было показано, что размеры пятна прямого изображения определяются размерами области $[a,b]$, где кристалл выходит из отражающего положения. В случае, если область разориентаций не выходит из отражающего положения, прямое изображение может вообще отсутствовать [10].

Анализ треугольника рассеяния для функций локальных разориентаций, приведенных на рис 2b, показывает, что детали тонкой структуры прямого изображения формируются в результате интерференции

множества волн, возникающих вблизи оси дислокации по всему сечению треугольника рассеяния. Взаимодействие цилиндрической области кристалла, вышедшей из отражающего положения, с максимумами волнового поля внутри треугольника рассеяния вызывает межветвевое рассеяние (нормальные и аномальные волны), приводящее к появлению множества дифрагированных лучей в брэгговском направлении. Однако, вся интерференционная картина может скрываться за ярким пятном прямого изображения, т.к. используемая модель функции локальных разориентаций имеет П-образный вид.

Другая картина будет наблюдаться для случая локальной разориентации, представленной на рис.2с. Здесь треугольник рассеяния пересекается не цилиндром, как в предыдущем случае, а сложной конусообразной поверхностью. В этой ситуации пятно прямого изображения в зависимости от ориентации конической поверхности может быть меньше области дифракционного изображения. В этом случае должна наблюдаться тонкая структура прямого изображения. Картина более близкая к реальности будет наблюдаться именно в этом случае использования модели локального поля разориентаций, показанного на рис. 2с.

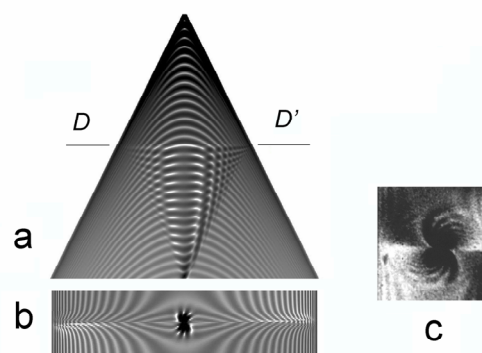


Рис.3. Результаты численного моделирования структуры волнового поля внутри треугольника рассеяния для винтовой дислокации, расположенной параллельно вектору дифракции (DD' – ось дислокации, сечение плоскости рассеяния при $x=0$) для отражения от плоскостей (220) –а); соответствующее численное изображение этой дислокации -б); с) – экспериментальная секционная топограмма винтовой дислокации, отражение (220) , излучение MoK_{α} , $(Hb)=24$. Масштаб экспериментальной топограммы увеличен для того, чтобы показать детали тонкой структуры прямого изображения.

На рис.3 показаны компьютерное моделирование плоскости рассеяния, соответствующая численная секционная

топограмма и экспериментальное изображение винтовой дислокации с дифракционной мощностью $(Hb)=24$.

На линиях пересечение различных участков пространственной (трехмерной) функции локальных разориентаций с гиперболическими поверхностями максимумов волнового поля в палатке Бормана будут рождаться новые волновые поля (нормальные и аномальные), распространяющиеся в брэгговском направлении. Эти волны будут проектировать обозначенные выше контуры пересечения на выходную поверхность кристалла, т.е. на основании палатки Бормана и, следовательно, на секционную топограмму.

В реальной ситуации изображение тонкой структуры прямого изображения должно быть двойным, так как в каждой точке пересечений рождается два поля «нормальное» и «аномальное». Нормальное поле быстро убывает за счет значительного поглощения и его изображение на экспериментальной топограмме практически отсутствует.

Сопоставление численных и экспериментальных секционных топограмм показывает хорошее согласие теории с экспериментом и, следовательно, подтверждает правильность приведенной выше интерпретации. Изменение знака локальной разориентации при изменении знака переменной Y на соседних конических поверхностях соответствует изменению знака вектора дифракции. Интерференционная структура в этом случае хорошо видна. Это - двух лепестковая розетка и её форма очень похожа на форму тонкой структуры прямого изображения дислокации.

Таким образом, каждая точка сильно искаженной области упругого поля вблизи ядра дислокации, где кристалл выходит из отражающего положения, становится источником нового волнового поля, распространяющегося под дислокацией в новом треугольнике рассеяния, аналогично тому, как происходит рассеяние на границе раздела [11, 12]. Это "новое поле" когерентно с первичным полем, т.к. порождено им за счет межветвевое рассеяния и, следовательно, интерферирует с первичным волновым полем, образуя наблюдаемое дифракционное изображение дислокации. В результате на выходной поверхности кристалла, т.е. в основании палатки Бормана формируется проекция сечения функции локальных разориентаций являющаяся результатом пересечения функции (3) с гиперболическими максимумами волнового поля в треугольнике рассеяния. Это и есть прямое изображение дислокации.

[1] Authier, A. Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Oxford, Science Publications. 734 (2001).

[2] Bowen, D.K., Bowen D.K., Tanner B.K. High Resolution X-Ray Diffractometry and Topography. London, Taylor & Francis Group, 273 (1998).

[3] Azaroff, L.V. X-rays diffraction. New York, McGraw-Hill Book Company, 617 (1974).

[4] Хирш, П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан Электронная микроскопия тонких кристаллов. М.Мир, М. 574 (1968).

[5] Takagi S. J. Phys.Soc.Japan, V.26, № 5, 1239 (1969).

[6] Toupin D. Acta Cryst. V.23, № 1, 25 (1967).

[7] Suvorov E.V., Polovinkina V.I., Nikitenko V.I., Indenbom V.L. Phys. Stat. Sol. (a), V.26, 1, 385-395 (1974).

[8] Суворов Э.В., Смирнова И.А. ФТТ Т52, №12, 2325-2329 (2010).

[9] Суворов Э.В., Смирнова И.А. ФТТ Т52, №2, 241-247 (2010).

[10] Шульпина И.Л., Суворов Э.В. Известия РАН. Серия физическая, Т74, №11, 1547-1556 (2010).

[11] Borrmann G., Lehmann K. Z.Crystallogr. V5, 4-8 (1967).

[12] Суворов Э.В., Смирнова И.А., Шулаков Е.В. Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. № 8, 67-72 (2005).

Дифракционные элементы для исследований с использованием современных источников излучения

Александр Фирсов^а, Мария Бржезинская^а, Александр Свинцов^б, Анатолий Фирсов^б,
Алексей Ерко^а

^а Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, Institut für Nanometeroptik und Technologie,
Albert-Einstein-Str. 15, D-12489 Berlin

^б Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials RAS, Institutskaya Street 6,
Chernogolovka, Moscow Region, 142432, Russia
e-mail фирсов@bessy.de

Введение.

Современные исследования материи требуют использования излучения в широком диапазоне энергий от десятков электронвольт до нескольких сотен килоэлектронвольт. Излучение в этом диапазоне энергий генерируется синхротронными источниками (СИ), лазерами на свободных электронах (FEL, XFEL) и генераторами гармоник высокого порядка (ННГ). Новейшие источники излучения обладают очень высокой спектральной яркостью, что приводит к повышенной радиационной нагрузке на оптические поверхности элементов, обеспечивающих вывод и монохроматизацию излучения для его использования в экспериментах. В том числе для экспериментов с временным разрешением и при исследовании био- и наноматериалов.

В данном докладе авторы рассматривают топологию некоторых дифракционных элементов, необходимых для современных исследований с использованием монохроматического излучения, и технологические аспекты их изготовления.

Рентгеновские дифракционные оптические элементы.

Дифракционные оптические элементы (ДОЭ) для преобразования рентгеновского излучения разнообразны по своей топологии. Топология элемента определяется длиной волны излучения (для мягкого рентгеновского излучения условно 20 эВ – 2000 эВ, жёсткого рентгеновского излучения условно 2 кэВ – 200 кэВ) и особенностями взаимодействия излучения с материалом дифракционного элемента (дифракционные элементы на просвет, дифракционные элементы на отражение, Брэгг-Френелевские дифракционные элементы). Тип дифракционного элемента выбирается исходя из цели эксперимента и/или особенностей дизайна канала вывода и монохроматизации излучения. Например, Брэгг-Френелевские фокусирующие элементы, на основе кристаллов или многослойных структур, удобно использовать, расположив их вблизи образца и осветив белым излучением. Таким образом, можно получить размер фокуса менее 1 микрона, что позволяет

выполнять многочисленные эксперименты по флуоресцентному анализу с пространственным разрешением менее 1 микрона. Использование в топологии дополнительного, третьего, дифракционного порядка позволяет увеличить интенсивность излучения в фокусе и получить лучшее отношение сигнал/шум. (Рис. 1)

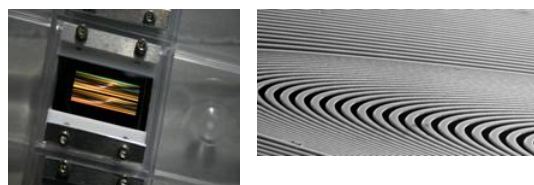


Рисунок 1. Брэгг-Френелевские фокусирующие элементы на основе кристалла кремния с первым и третьим дифракционными порядками на энергию 10 кэВ.

Брэгг-Френелевский фокусирующий элемент с сагитальной топологией, созданный на втором кристалле монохроматора позволяет осуществить взаимную корректировку двух кристаллов монохроматора – выставить их параллельно друг другу, а значит обеспечить лучшее энергетическое разрешение. (Рис. 2)

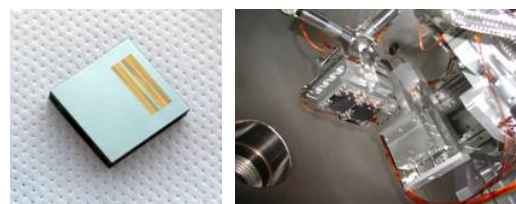


Рисунок 2. Брэгг-Френелевский фокусирующие элементы с линейной и эллиптической топологией на втором кристалле монохроматора.

Брэгг-Френелевский фокусирующий элемент с эллиптической топологией, созданный на втором кристалле монохроматора позволяет осуществить двумерную фокусировку. Угол схождения в этом случае оказывается достаточно малым, чтобы выполнять эксперименты по

микродифракционному анализу и малоугловому рассеянию.

В случае когда источник излучения обладает очень высокой спектральной яркостью, Брэгг-Френелевский фокусирующий элемент, созданный на втором кристалле монохроматора с высоким значением индексов отражения Миллера (hkl), позволяет осуществить эксперименты, в которых необходимо очень большое отношение $\lambda/\Delta\lambda$. Наличие фокусирующего элемента на втором кристалле позволяет собрать в фокусе большой поток излучения.

В последнее время на первый план выходят эксперименты с ультра-коротким временным разрешением. Эксперименты с временным разрешением менее 100 фемтосекунд позволяют в частности исследовать динамику в магнитных доменах, тонких магнитных слоях.

Однако реализация таких экспериментов в классической оптической схеме каналов вывода и монохроматизации излучения на источниках СИ неминуемо ведёт к драматическому уменьшению количества фотонов, необходимых для эксперимента. Это привело к потребностям в реализации принципиально новых оптических схем каналов вывода и монохроматизации излучения, основанных на использовании новых оптических элементов. Предложенная на BESSY II схема (Slicing beamline) включает лишь один дифракционный элемент, который осуществляет отражение, дисперсию и фокусировку излучения одновременно. Монохроматор-спектрометр имеет шесть эллиптических дифракционных элементов, каждый из которых рассчитан на фиксированную энергию и позволяет осуществлять эксперименты в диапазоне энергий 0.5 кэВ – 1.2 кэВ. (Рис. 3)



Рисунок 3. Монохроматор-спектрометр, на основе суперполированной толстой подложки кристалла кремния, работающий на полном внешнем отражении. И исследование качества структуры в интерферометре.

Было установлено, что топология ДОЭ должна быть вне-осевой, чтобы обеспечить лучшее энергетическое и пространственное разрешение в дифракционной (вертикальной) плоскости [1 – 3].

Новейшие источники излучения, обладающие высокой спектральной яркостью (приводящей к высокой радиационной нагрузке на оптический элемент), вынуждают создавать дифракционные элементы работающие на углах скольжения менее 0.3 градуса. В этом случае необходимая длина дифракционного элемента вдоль направления распространения излучения может достигать 800 мм. Увеличение размера дифракционного элемента в этом направлении ведёт к существенному увеличению толщины подложки. Это необходимо, чтобы обеспечить условие получения наилучшей полировки и планаризации поверхности. Следовательно, надо разрабатывать альтернативный электроннолучевому рисованию способ создания топологии дифракционного элемента в резисте. Таким является прямое лазерное рисование.

Фокусирующие дифракционные элементы для спектрометров, имеющие целью детектировать наличие исследуемых элементов, на данный момент являются самыми сложными по топологии и изготовлению. Имея габариты порядка 80 мм на 4 мм и минимальную зону 50 нанометров, они должны иметь переменную глубину профиля чтобы обеспечить максимальную эффективность. **Фактически это трёхмерные дифракционные оптические элементы (3D ДОЭ), имеющие сложный планарный профиль и сложный профиль по глубине. (Рис. 4)**

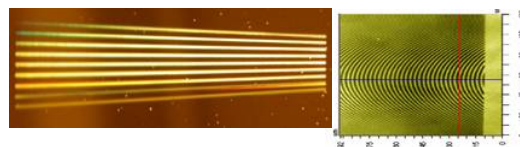


Рисунок 4. Общий вид дифракционного спектрометра на 9 основных энергиях флуоресцентного излучения в диапазоне 100 эВ - 500 эВ и его фрагмент в интерферометре [5].

Дифракционные элементы для источников излучения с высокой спектральной яркостью также как и дифракционные элементы спектрометров и дифракционные элементы для экспериментов с временным разрешением работают на полном внешнем отражении. Следовательно, создание таких элементов должно начинаться с анализа поверхности, на которой они будут изготовлены.

Вся поверхность подложки, на которой предполагается создать дифракционный элемент, должна быть исследована интерферометрическим методом. Несмотря на то что вся поверхность супер-полирована и имеет в определённом смысле наилучшие возможные параметры по всей поверхности (усредненная абберация поверхности < 0.1 arcsec; усредненная шероховатость поверхности < 0.1 nm.), тем не

менее на ней имеются области с параметрами в несколько раз лучшими. Располагая дифракционный элемент в этих областях, мы улучшаем его характеристики – эффективность и разрешение.

Теоретический анализ поведения дифракционного элемента в реальных экспериментальных условиях очень важен с точки зрения оптимизации его топологии.

Было разработано эффективное программное обеспечение как для дизайна топологии дифракционных оптических элементов, так и для моделирования их оптических свойств. Данный программный продукт, оперирующий с точечным источником излучения, состоит из нескольких частей:

- программы ZON, предназначенной для расчёта структуры дифракционных оптических элементов различного типа (круглые, Брэгг-Френелевские, работающие на полном внешнем отражении при углах скольжения порядка 0.2 градуса);
- программы KRGF, предназначенной для моделирования дифракционных свойств оптического элемента с реальной топологией в реальном эксперименте, используя точечный источник излучения;
- программы DS, предназначенной для моделирования дифракционных свойств, принимая во внимания свойства материала линзы и эффектов тени. В этом случае в расчётах учитываются толщина и профиль оптического элемента, а также и кривизна подложки, используемой для изготовления оптического элемента. Учёт данных параметров особенно критичен при изготовлении основанных на свойстве полного внешнего отражения дифракционных фокусирующих элементов и решеток с размерами вдоль распространения излучения, достигающими одного метра.

Помимо этого данное программное обеспечение позволяет также моделировать дифракционные свойства оптических элементов, принимая во внимание реальные размеры источников излучения.

Данное программное обеспечение также может быть использовано в комбинации с программным обеспечением Nanomaker (Interface Ltd) для подготовки численных параметров, используемых при обработке поверхностей и их коррекции посредством ионного или электронного пучка.

Технологическое оборудование.

Технологические процессы при изготовлении дифракционных элементов с характерными размерами в десятки нанометров приходится разрабатывать индивидуально для каждого нового типа дифракционного элемента. Существующее (доступное) оборудование в

большинстве случаев не способствует выполнению задачи. В первую очередь это относится к оборудованию для плазмохимического травления.

Изготовление любого дифракционного элемента начинается с расчёта топологии. Далее эта топология дифракционного элемента должна быть создана в некой промежуточной среде. Как правило это фоточувствительные или электронночувствительные резисты. Разнообразие предлагаемых резистов огромно, и надо выбрать резист подходящий для дальнейших технологических шагов. Собственно топология может быть создана фотолитографией, электронной литографией, прямой лазерной литографией. (Рис. 5-6)



Рисунок 5. Photolithography System MA6



Рисунок 6. High voltage electronbeam lithography system EBPG5000Plus.

Однако необходимо не только создать топологию дифракционного элемента в некой промежуточной среде, но перенести её в “рабочую” среду. Если это элементы на просвет, то “рабочая” среда это кремний, германий, золото, никель. Если это элементы работающие на отражение, то это как правило кремний, золото, нитрид бора, алмазоподобные плёнки. Глубина профиля дифракционных структур, работающих на отражение, варьруются приблизительно от 5 до 50 нанометров, и должна быть выполнена с точностью не хуже 0.5 нанометра. Для элементов на просвет очень

важно разработать технологии, позволяющие получать максимальные аспектные отношения в “рабочем” материале.

Поэтому правильный выбор оборудования при выполнении конкретного проекта оказывается очень важным первым шагом для достижения цели. Для создания дифракционных элементов работающих на отражение одним из ключевых моментов является плазмохимическое травление кремния. Требуется воспроизводимость и точность порядка 0.5 нанометра при размере элемента в одном направлении до 800 нм. При этом толщина подложки варьируется от 10 мм 60 мм, а этом глубина профиля вдоль структуры должна быть переменной.

Проект по созданию такой плазмохимической установки был поддержан Европейским Фондом Мари Кюри. Сам проект направлен на решение конкретных научных задач исследования с временным разрешением менее 100 фемтосекунд.

Вся цепочка оборудования и условия работы должны быть выполнены правильно.

Заключение.

Новейшие источники излучения, современные физические эксперименты требуют применения и новых дифракционных элементов. Такие дифракционные элементы необходимы для реализации экспериментов с временным разрешением с использованием источников синхротронного излучения (СИ) или генераторов гармоник высокого порядка (ННГ). Например, исследование в режиме реального времени эволюции валентных состояний или диссоциации молекул. Новейшие, с точки зрения понимания природы физических явлений, направления исследования материи требуют реализацию временного разрешения в фемто- (10^{-15}) и даже ато- (10^{-18}) секунды. Дифракционные оптические элементы на полном внешнем отражении благодаря своей высокой радиационной и термической стабильности являются единственными оптическими элементами, могущими быть использованными для фокусирования такого высокоинтенсивного излучения.

Литература.

1. Yu. A. Basov, D. V. Roshchupkin, I. A. Schelokov, A. E. Yakshin Optics Communications, 114, 1-2, (1995), 9-12
2. Yu.A. Agafonov, B.A. Bryunetkin, A.I. Erko, A.R. Mingaleev, S.A. Pikuz, V.T. Romanova, et al., Quantum Electron. **23**, 172 (1993).
3. A. Erko, A. Firsov, K. Holldack, AIP Conf. Proc. 1234, 177-180 (2010).

4. A. Erko, A. Firsov, D. Roshchoupin, I. Schelokov, “Volume Modulated Diffraction X-Ray Optics”, Modern Developments in X-Ray and Neutron Optics, edited by A. Erko, M. Idir, T. Krist and A.G. Michette, pp 471-500, (Springer Series in Optical Sciences, Springer Berlin / Heidelberg, Vol. 137, 2008.

5. A. Erko, A. Firsov, F. Senf, Novel parallel vacuum ultra-violet/X-ray fluorescence spectrometer, Spectrochimica Acta Part B 67 (2012) 57–63

Абсорбционные многослойные фильтры в космических проектах по изучению солнечной короны

С.Ю. Зуев¹, М.Н. Дроздов¹, С.В. Кузин², А.Я. Лопатин¹, В.И. Лучин¹, Н.Н. Салашенко¹,
Н.Н. Цыбин¹, С.В.Шестов²

¹Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

e-mail: tsybinikola@yahoo.com

Абсорбционные тонкоплёночные фильтры на поддерживающей сетке используются в космических исследованиях Солнца в экстремальном ультрафиолетовом (ЭУФ) диапазоне. Фильтры предназначены для блокировки интенсивного, по сравнению с ЭУФ-диапазоном, излучения Солнца в видимой, ультрафиолетовой и инфракрасной областях спектра. Чаще всего в составе космических телескопов абсорбционные фильтры используются совместно с рентгеновскими зеркалами нормального падения. Многослойные рентгеновские зеркала выделяют узкую спектральную полосу в районе интересующей длины волны ЭУФ-диапазона (эмиссионные линии многозарядных ионов в спектре солнечной короны), а абсорбционные фильтры, пропуская излучение на рабочей длине волны и подавляя длинноволновое фоновое излучение, защищают чувствительный детектор от длинноволновой паразитной засветки.

Состав тонкоплёночного фильтра выбирается из требования высокого пропускания на рабочей длине волны. Так как абсорбционные фильтры имеют относительно широкую полосу пропускания, то один и тот же фильтр может использоваться на разных длинах волн, расположенных в этой полосе. Для длин волн более 171 Å (L-край поглощения Al) традиционно используются фильтры на основе Al [1]. На длине волны около 132 Å хорошо зарекомендовали себя Zr/Si многослойные фильтры [2].

Один из основных недостатков тонкоплёночных фильтров – их низкая механическая прочность. При выведении спутника с аппаратурой на орбиту фильтры должны выдержать вибрации и акустические шумы при старте ракеты. Для придания дополнительной прочности фильтрам тонкие пленки обычно приклеиваются к жесткой опорной металлической сетке. Сетку стремятся сделать как можно более прозрачной, уменьшая толщину перемычек и увеличивая размер ячеек. При этом уменьшается прочность всей конструкции “плёнка+сетка”, поэтому для данного состава фильтра, подбирая толщину плёнки и параметры опорной сетки, находят компромисс между требованиями высокой суммарной прозрачности фильтра и его прочности, характеризуемой в испытаниях готовой конструкции на стойкость к вибрациям и акустическим шумам. Имеется ограничение и на

минимальный размер ячеек сетки. Слишком мелкая ячейка сетки вследствие дифракции света может существенно влиять на разрешение получаемого изображения. В принципе, на основе расчётов можно учесть влияние дифракции на сетке и восстанавливать истинную картину изображения. Однако этот путь требует разработки специальных вычислительных алгоритмов и не всегда позволяет полностью восстановить истинное изображение.

Для применения в длиннофокусных телескопах с высоким пространственным разрешением и большим углом зрения требуются более прозрачные фильтры большой апертуры. Увеличение прозрачности фильтра можно достичь, помимо увеличения геометрической прозрачности поддерживающей сетки, за счёт уменьшения толщины плёнки или за счёт использования более прозрачного материала. Ограничения на уменьшение толщины плёнки связаны либо с требованием высоких блокирующих свойств фильтра, либо с уменьшением механической прочности фильтра. В последнем случае не удастся изготовить свободновисящий фильтр требуемой площади.

Некоторого увеличения прозрачности плёнки можно добиться снижением концентрации примеси в структуре. Дальнейшее увеличение пропускания фильтра возможно только за счёт использования более прозрачных материалов. Так на длинах волн более 250 Å (L3-край поглощения Mg) теоретически более предпочтительным является Mg вместо Al (см. рис. 1). На длинах волн более 520 Å большее пропускание при той же толщине демонстрирует Sn.

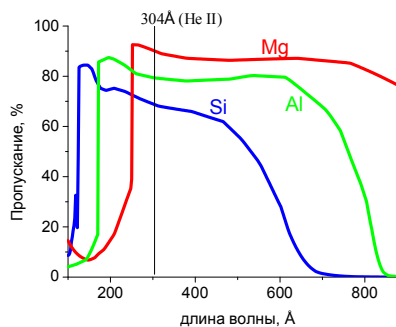


Рис. 1. Расчётные кривые пропускания слоёв материалов толщиной 1000 Å.

Фильтры на основе многослойной пленки со структурой $\{(Al-32\text{\AA}/Si-14\text{\AA})^*65\}$ (толщина слоя Al в периоде – 32 \AA , Si – 14 \AA , количество периодов 65), приклеенной на опорную сетку из нержавеющей стали с размером ячейки 1.8 мм и толщиной перемычек 0.18 мм, применялись в составе орбитального комплекса ТЕСИС проекта Коронас-Фотон [3]. Входной фильтр телескопа был составлен из прямоугольных элементов с размером 33×38 мм. Полоса пропускания фильтров позволяет использовать их для двух спектральных диапазонов: 171 \AA и 304 \AA . Толщина фильтра достаточна, чтобы обеспечить блокировку видимого света лучше, чем 10^{-6} . Пропускание фильтра без сетки на длине волны 304 \AA составило $27.5 \pm 0.5\%$, а с учётом геометрического пропускания сетки (81%) – около 20%. Фильтры изготавливались с применением технологии магнетронного напыления. Использовалась установка, содержащая в вакуумной камере четыре магнетрона с различными мишенями, что позволяет в одном цикле формировать на кремниевой пластине многослойную структуру из двух материалов, подслоя, требуемый для отделения структуры от подложки, а при необходимости и ряд дополнительных слоев. Для получения свободновисящей структуры после растворения подслоя в процессе жидкостного травления тонкая пленка переносится на оправу требуемых размеров. На следующем этапе плёнка натягивается по контуру оправы и приклеивается к жесткой опорной сетке. Обычно для изготовления фильтров используется металлический подслей. Алюминий при длительном контакте с селективным травителем начинает растворяться, поэтому, чтобы избежать протравливания плёнки, Al прославился Si, не взаимодействующим с селективным травителем.

В настоящей работе с использованием этой методики нами были изготовлены $\{Si-20.5\text{\AA}, (Al-28.5\text{\AA}/Si-20.5\text{\AA})^*55\}$ фильтры значительно большей апертуры (диаметр 70 мм) на сетках с размером ячейки 5 мм при толщине перемычек 0.2 мм (рис. 2).

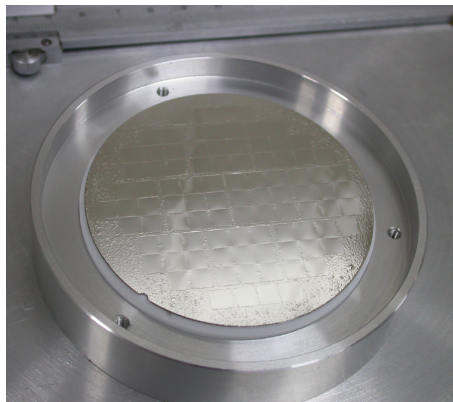


Рис. 2. Фотография Al/Si фильтра на сетке (диаметр 70 мм, размер ячейки 5 мм).

Результаты измерений пропускания фильтра на сетке на длинах волн 171 \AA и 304 \AA , проведенные с использованием рефлектометра-монохроматора РСМ-500, представлены на рис. 3 и 4 соответственно. Провалы в пропускании через каждые 15 мм связаны с более широкими перемычками (0.9 мм), укрепляющими сетку через каждые 3 ряда ячеек.

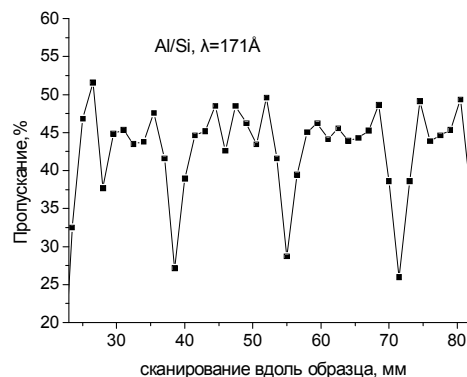


Рис. 3. Измерение пропускания Al/Si фильтра на сетке на длине волны 171 \AA .

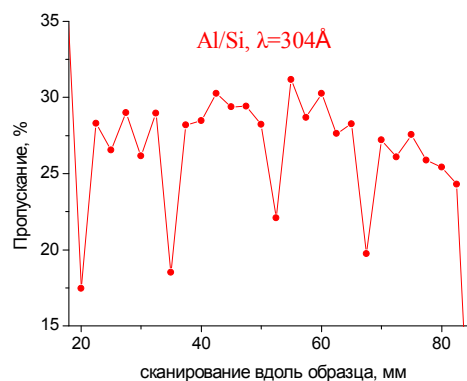


Рис. 4. Измерение пропускания Al/Si фильтра на сетке на длине волны 304 \AA .

Таким образом, по сравнению с использовавшимися в проекте КОРОНАС-ФОТОН Al/Si фильтрами удалось повысить пропускание фильтров со среднего значения 20% до 27% ($\lambda = 304$ \AA). Такие фильтры предполагается использовать в телескопах сверхвысокого разрешения (проект “Арка”) [4].

Интерес к структурам на основе Mg появился в связи с задачей разделение первого и второго порядка резонансного отражения от многослойных зеркал, оптимизированных на длину волны 304 \AA . Необходимо было подавить излучение в районе 170 \AA , чтобы минимизировать вклад интенсивных эмиссионных линий излучения короны Солнца вблизи 170 \AA , отражающихся от многослойного зеркала во втором порядке дифракции. Добиться этого можно используя Al/Mg -фильтр, так как оба

материала относительно прозрачны на длине волны 304 Å, а Mg не прозрачен в диапазоне 170–250 Å. Расчёт даёт, что при толщине Mg около 3000 Å пропускание на 171 Å будет в 500 раз меньше чем на 304 Å.

Однако изготовить фильтр на основе Mg тем же способом, что и Al/Si, не возможно вследствие сравнимой активности магния и металлов, использующихся в качестве подслоя. В качестве подслоя для Mg-содержащих фильтров был предложен полистирол, раствор которого в толуоле наносился методом центрифугирования на кремниевые пластины. После напыления структуры подложкой растворялся в толуоле. Измеренные значения пропускания Al/Mg фильтров на длине 304 Å оказались существенно меньше расчётных. Попытка защитить структуру от окисления на воздухе путем нанесения защитных покрытий из MoSi₂ или Si не привела к существенному уменьшению расхождение с расчётными характеристиками (см. табл. 1).

Структура, Å	T _{измерение} , %	T _{расчет} , %
Si-34, (Al-30, Mg-38)*80, Si-34	16	39.2
MoSi ₂ -25, (Al-14, Mg-47)*50, MoSi ₂ -25	22.6	44.5
(Al-14, Mg-47)*42	24.8	70.3

Таблица 1. Сравнение измеренных величин пропускания Al/Mg фильтров на длине волны 304 Å с расчётными.

Ещё одной причиной несоответствия может быть внедрение материала фильтра в подслою во время напыления и неполное растворение полистирола при травлении. Было проведено сравнение пропускания тестовой свободновисящей многослойной структуры {Si-20.5Å, (Al-28.5Å/Si-20.5Å)*55}, полученной с использованием полистирольного или металлического подслоев. Структура, снятая с металлического подслоя, имела прозрачность 48.5% на длине 171 Å и 29.5% на длине волны 304 Å. Структура, снятая с подслоя из полистирола, имела пропускание 46.5% на длине 171 Å и 19.1% на длине волны 304 Å. Низкая прозрачность во втором случае может быть связана с неполным удалением полистирола при отделении плёнки от подложки. Проверить предположение о внедрении материала фильтра в подслою во время напыления и неполном растворении полистирола при травлении можно будет с помощью послыонного ВИМС-анализа образца. В случае подтверждения этой версии будут рассматриваться возможности удаления слоя, а также поиск нового материала подслоя для изготовления Mg-содержащих фильтров.

Все современные космические обсерватории находятся на околоземных орбитах. Повысить

разрешение изображения космических телескопов можно используя уже существующую аппаратуру если приблизить обсерваторию к Солнцу. Так в разрабатываемом Роскосмосом проекте “Интергелиозонд” планируется проводить съёмки солнечной короны с расстояния 30–40 солнечных радиусов. Но при этом возникают проблемы связанные с нагревом инструментов обсерватории излучением Солнца: ожидаемая температура входных фильтров 500°C.

Для изучения влияния вакуумного нагрева на свойства Al/Si фильтров, образцы структуры {Si-18Å, (Al-34.5Å/Si-18Å)*55.5} отжигались в вакууме при температурах 100–400°C. В вакуумном объёме, откачиваемом форвакуумным насосом до давления 10⁻²–10⁻³ мм рт. ст., на поверхность печи со встроенной термопарой помещались образцы фильтров. После отжига при температуре 100–150°C в течение 6 часов пропускание фильтра на длине волны 171Å упала с 49% до 36±1%, пропускание на λ = 633 нм осталась при этом менее 10⁻⁶, после отжига же при 400°C в течение 4.5 часов пропускание на λ = 171Å уменьшилось с 49% до 26%, при этом пропускание на 633 нм выросло до 0.55%. Проведённый ВИМС-анализ последней структуры указывает на перемешивание слоёв и проникновение кислорода и углерода внутрь структуры (см. рис.5, 6).

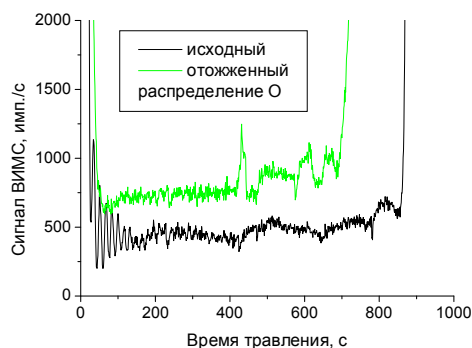


Рис. 5. Распределение кислорода по глубине до и после отжига в Al/Si фильтре по данным ВИМС.

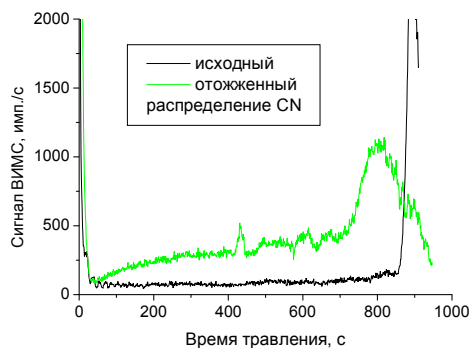


Рис. 6. Распределение CN по глубине до и после отжига в Al/Si фильтре по данным ВИМС.

Эти предварительные результаты указывают на высокую скорость деградации оптических свойств Al/Si фильтров при нагреве в условиях низкого вакуума. В ближайшее время предполагается провести испытания образцов в более высоком вакууме, а также изучить влияние тонких MoSi₂-защитных покрытий на термостойкость Al/Si фильтров.

[1] Mitrofanov A.V., Pudonin F.A., Starodubzev N. Zhitnik I.A., Proc. SPIE, Vol. 3406, p. 35 (1998).

[2] Кузин С.В., Богачев С.А., Житник И.А. и др., Известия РАН. Серия физическая, Т. 74, № 1. С. 39 (2010).

[3] Зуев С.Ю., Кузин С.В., Лопатин А.Я. и др. Материалы симпозиума “Нанофизика и наноэлектроника”, г. Нижний Новгород, т.1, с. 62 (2009).

[4] Кузин С.В., Богачев С.А., Перцов А.А. и др., Известия РАН. Серия физическая, Т. 75, № 1. С. 91 (2011).

Алгебраический метод реконструкции в решении томографических задач

М.В. Чукалина^{1,2}, А.В. Бузмаков², В.Е. Прун^{2,4}, Д.П. Николаев³, В.Е. Асадчиков²

¹Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

²Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия

³Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича, Москва, Россия

⁴Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

e-mail: chukalinamarina@mail.ru

Томографические методы, позволяющие восстанавливать пространственное распределение характеристик объекта по набору регистрируемых от объекта сигналов, сегодня используются во многих областях жизни для создания, диагностики и модификации как живых так и неживых объектов. В медицине - это методы компьютерной, магнито-резонансной, протонной или, к примеру, ультразвуковой томографии; акустическая томография применяется для исследования океана; сейсмическая томография - для изучения внутреннего строения земли, и пр.

С 90-х годов томография стала объектом, как минимум, двух областей математики. Геометрическая томография определена Гарднером [1] как область математики, связанная с восстановлением информации о геометрическом объекте по данным о его сечениях/деталях, по его проекциям или по двум этим источникам данных, если они одновременно доступны. Задача дискретной томографии, согласно [2], есть восстановление (возможно частичное, возможно только приближенное) неизвестной функции из некоторого числа взвешенных сумм по областям, принадлежащим области определения функции в дискретном случае и по некоторому числу интегралов по подпространствам области определения в непрерывном случае.

Восстановление пространственного распределения характеристик объекта по набору регистрируемых от объекта сигналов подпадает под оба определения и остается только выбрать в терминах какой из областей вести математическое описание. Математическая модель формирования проекции описывает связь характеристик объекта с величиной регистрируемого сигнала (точки на томографической проекции) для определенного томографического метода и определенной в рамках него измерительной схемы. Для большинства томографических методов эта связь может быть описана преобразованием Радона при некоторых допущениях. Задача восстановления распределения характеристик объекта из набора известных проекций известна как обратная задача. Метод ее решения, как правило, определяется моделью формирования сигнала. Созданы интегральные методы, которые позволяют обратить

преобразование Радона, предложены статистические и алгебраические методы.

В данной работе проанализированы преимущества алгебраического подхода, проведен анализ основных алгебраических методов реконструкции. Для метода компьютерной томографии авторами на C++ создана эффективная численная реализация быстрого алгоритма, основанного на использовании преобразования Хафа, строго доказана корректность его применения [3]. Асимптотика работы алгоритма подтверждена анализом времени работы на модельных изображениях разных размеров. В докладе будут представлены результаты исследования влияния регулирующих фильтров на сходимость. Сравнение результатов работы данной версии алгоритма с результатами работы нескольких альтернативных алгоритмов обсуждаются в докладе.

Говоря о преимуществах алгебраического подхода, следует начать с того, что в некоторых томографических методах, например трансмиссионно-эмиссионных и использующих эхо-зондирование, быстрые интегральные методы часто не могут быть использованы по причине отсутствия обратного оператора. Для таких методов необходимость развития алгебраического подхода очевидна. Однако, даже в случае компьютерной томографии, наиболее простом методе с точки зрения математической модели, низкий контраст, малое число ракурсов, неравномерность проекционных углов (углов вращения) или доступность углов из ограниченного сектора, ослабляют аргументы в пользу применения быстрых интегральных методов реконструкции или вовсе не позволяют их использовать. Низкий контраст может быть обусловлен одной из перечисленных ниже причин или их комбинацией. Причины таковы - объект (в худшем случае отдельные его части) слабо реагирует на зондирующее воздействие, по какой-то причине должна быть ограничена дозовая нагрузка или наблюдается нестабильность объекта во времени, что лимитирует период измерения.

Для описания алгебраического подхода к реконструкции введем некоторые определения, описав модель формирования проекции в компьютерной томографии. Для простоты

рассмотрим случай 2D измерений. Параллельная схема эксперимента такова. Объект в течении некоторого времени измерения проекции просвечивается параллельным плоским широким рентгеновским пучком. Пучок настолько широк, что весь объект (в данном случае подразумевается 2D сечение объекта) оказывается засвеченным. За объектом помещается позиционно-чувствительный детектор - линейка. Пространственное разрешение в направлении, перпендикулярном направлению пучка, определяется размером ячейки детектора. По истечению времени измерения проекции объект поворачивается на некоторый проекционный угол, засвечивается и следующая проекция регистрируется. Проекция – кривая, каждая точка на которой есть показание ячейки позиционно-чувствительного детектора. Номер проекции соответствует номеру проекционного угла. Результат измерения – полный набор проекций – изображение размером [число проекционных углов; число ячеек детектора]. Каждая точка на изображении суть показание ячейки детектора при некотором проекционном угле. Требуется восстановить изображение размером [число ячеек детектора; число ячеек детектора], которое описывает распределение коэффициента ослабления рентгеновского излучения. Т.е. каждая точка на восстановленном изображении суть коэффициент ослабления. Восстановленное сечение объекта есть дискретное представление сечения реального объекта.

В алгебраических методах функция распределения коэффициента ослабления рентгеновского излучения аппроксимируется функцией, кусочно-постоянной на равномерной сетке. Интегралы вдоль направлений заменяются лучевыми суммами, и задача обращения преобразования Радона становится задачей решения системы алгебраических уравнений в условиях наличия шума. Для ее решения применяются итерационные методы. Для корректного подсчета лучевой суммы вдоль направления вводятся весовые коэффициенты, которые показывают вклад каждого пиксела в лучевую сумму. Способы вычисления коэффициентов могут быть различны. Коэффициенты могут принимать значение 1 или 0 в зависимости от того пересек или не пересек луч рассматриваемый пиксел; могут принимать значение в зависимости от длины отрезка (пересечение бесконечно-тонкого луча с пикселом) или принимать значение в зависимости от площади пиксела, покрытой лучом некоторой толщины.

Рассмотрим подробнее три наиболее часто используемых алгебраических метода реконструкции.

1. Алгебраический метод реконструкции - Algebraic Reconstruction Technique (ART):

Шаг 1 - задается начальное приближение – 2D кусочно-постоянная функция, которая описывает распределение коэффициента ослабления.

Шаг 2 - рассчитывается одна лучевая сумма вдоль одного из направлений.

Шаг 3 - отличие значения величины точки на проекции от рассчитанной величины лучевой суммы распределяется с учетом весовых коэффициентов между всеми пикселями, определившими направление, формируя добавку.

Шаг 4 – добавка, взвешенная релаксационным параметром [4], суммируется с текущим значением 2D кусочно-постоянной функции.

Шаги 2-4 повторяются для следующего выбранного направления.

Итерация считается законченной, когда операция выполнена для всех направлений (проекционных углов).

Новая итерация повторяет шаги 2-4. Итерационная процедура останавливается согласно выбранному критерию останова. Схема перебора точек на проекциях может быть различной [5].

2. Синхронный итерационный метод реконструкции - Simultaneous Iterative Reconstruction Technique (SIRT):

Шаг 1 - задается начальное приближение – 2D кусочно-постоянная функция, которая описывает распределение коэффициента ослабления, и контейнер для хранения добавок - кусочно-постоянная функция размера первой.

Шаг 2 - рассчитывается лучевая сумма вдоль одного из направлений.

Шаг 3 - отличие измеренного значения от рассчитанной величины лучевой суммы распределяется между всеми пикселями, определившими направление, согласно весовым коэффициентам, формируя добавку для каждого пиксела.

Шаг 4 - добавка суммируется с величиной, хранимой в контейнере.

Шаги 2-4 повторяются для следующего выбранного направления (проекционного угла).

Когда все направления обойдены выполняется шаг 5.

Шаг 5 – величина контейнера для хранения, деленная на число направлений, суммируется с текущим значением 2D кусочно-постоянной функции.

Новая итерация повторяет шаги 2-5.

Итерационная процедура останавливается согласно выбранному критерию останова.

3. Совместный алгебраический метод реконструкции - Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique (SART):

Шаг 1 - задается начальное приближение – 2D кусочно-постоянная функция, которая описывает распределение коэффициента ослабления.

Шаг 2 – рассчитываются все лучевые суммы вдоль одного из направлений.

Шаг 3 - отличие значения величины точки на проекции от рассчитанной величины лучевой суммы распределяется между всеми пикселями,

определившими направление, формируя добавку. Процедура выполняется для всех точек проекции.

Шаг 4 – добавка, взвешенная релаксационным параметром, суммируется с текущим значением 2D кусочно-постоянной функции.

Шаги 2-4 повторяются для следующего выбранного направления.

Итерация считается законченной, когда операция выполнена для всех направлений.

Новая итерация повторяет шаги 2-4. Итерационная процедура останавливается согласно выбранному критерию останова.

Существенное отличие SART от ART состоит в возможности использования билинейной (дробно-линейной) модели пиксела при работе с изображением, что позволяет эффективно встраивать регуляризирующие операторы.

Итерационные схемы являются сильно ресурсозатратными. Если точек на синограмме (изображении полного набора проекций) $n \times O(n)$, где n – число ячеек детектора, а $O(n)$ – число проекционных углов, а для учета одной точки синограммы следует провести $O(n)$ сложений, то общая сложность итерации составляет $O(n^3)$. Авторами было показано [3], как улучшить асимптотику одной итерации с $O(n^3)$ до $O(n^2 \log(n))$, используя быстрое преобразование Хафа [6]. На рисунке 1 представлены зависимость времени вычисления 30 итераций алгоритма от размера изображения (пунктирная линия) и подгоночная кривая $O(n^2 \log(n))$ (сплошная линия). Зависимость была снята для набора $4n-3$ проекций. Единицы времени – условные.

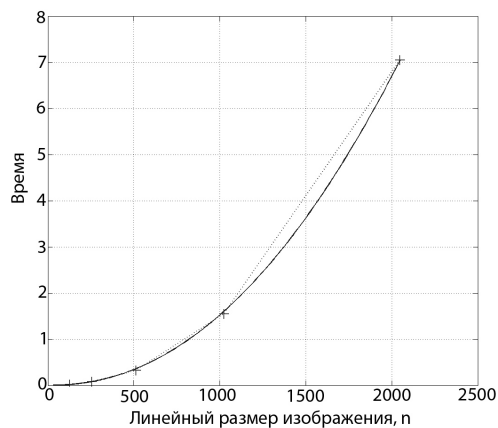


Рис. 1. Рисунок.

После каждой итерации для смещения текущего изображения ближе к оптимальному в качестве регуляризирующих операторов были использованы медианный и билатеральный фильтры. Динамика сходимости при использовании медианного бокс-фильтра, при сглаживании с Гауссовским ядром и при применении билатерального фильтра для фантомных изображений будет

проанализирована в докладе. Результаты работы программного комплекса regART в реальных условиях с разработанным модулем алгоритмически быстрого расчета итерации будут представлены в докладе.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке рффи 12-01-31037-мол-а.

[1] Gardner, R.J., Geometric Tomography, 2nd edition, Cambridge University Press, New York, NY (2006).

[2] Gabor T. Herman and Atilla Kuba. Editors, Advances in Discrete Tomography and its applications, Birkhauser. Boston, Basel, Berlin (2000).

[3] В.Е Прун, Вычислительно эффективный регуляризирующий алгебраический метод восстановления компьютерной томографии, Диплом. Бакалавриат. МФТИ, ФИВТ, каф. когнитивных технологий (2012).

[4] Y. Censor, P. B. Eggermont, D. Gordon, Numerische Mathematik, 41(1), 83 (1983).

[5] Guan H., Gordon R. Yu. Zhu, Phys. Med. Biol. 41, 2413 (1998).

[6] D. Nikolaev, S. Karpenko, I. Nikolaev, P. Nikolayev, Hough Transform: Underestimated Tool in the Computer Vision Field, Proceedings of 22th European Conference on Modelling and Simulation, 238 (2008).

Развитие интерферометрии с дифракционной волной сравнения для аттестации сверхточной оптики

Д.Г. Волгунов, Н.Н. Салашенко, М.Н. Торопов, Н.И. Чхало, А.В. Щербаков
Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия
e-mail: chkhalo@ipm.sci-nnov.ru

Благодаря прогрессу последних лет в технологии напыления высокотражающих многослойных зеркал нормального падения для диапазона длин волн 3-60 нм, появилась реальная возможность достижения нанометрового пространственного разрешения с использованием классических проекционных схем. Необходимым условием достижения дифракционного качества изображений, когда пространственное разрешение определяется только длиной волны света λ и числовой апертурой проекционной системы, является то, что среднеквадратическая aberrация объектива не должна превышать $\lambda/14$. В указанном диапазоне это соответствует точностям 0,2-4 нм. Для изготовления оптики такого уровня необходима метрология, как минимум в 3-4 раза лучше. В коротковолновом диапазоне это уже соответствует суб-ангстремным точностям! Близкими точностями измерений обладают только интерферометры с дифракционной волной сравнения (ИДВС). В ИДВС эталонная сферическая волна (СВ) формируется в результате дифракции света на отверстии с диаметром порядка длины волны.

Исследование реальных возможностей ИДВС выявило ряд серьезных ограничений по точности измерений и рабочей апертуре, и проблемы их эксплуатации [1-3]. Среди наиболее значимых недостатков можно выделить:

1. aberrацию СВ, возрастающую с увеличением угла наблюдения по отношению к волновому вектору падающей на отверстие волны, связанную с эффектами взаимодействия вторичных волн с материалом экрана в области краев отверстия [1];
2. aberrацию СВ, возрастающую с увеличением диаметра отверстия, связанную с aberrациями объектива с помощью которого лазерный луч фокусируется на отверстие и с разбьютировкой осей отверстия и лазерного пучка [2];
3. ошибки при определении координат интерференционных минимумов (максимумов), вызванные неоднородностью интенсивности СВ (фазовый фронт дифрагированной волны остается сферическим, однако его интенсивность в пределах дифракционного пика шириной $\pm\lambda/d$ изменяется от единицы до нуля) [3].

Все это привело к тому, что данный тип интерферометра используется в единичных экземплярах в нескольких ведущих высокотехнологических лабораториях и компаниях, при этом рабочие числовые апертуры, в которых

точность измерений составляет на уровне 0,1 нм, не превышают $NA \approx 0,1$.

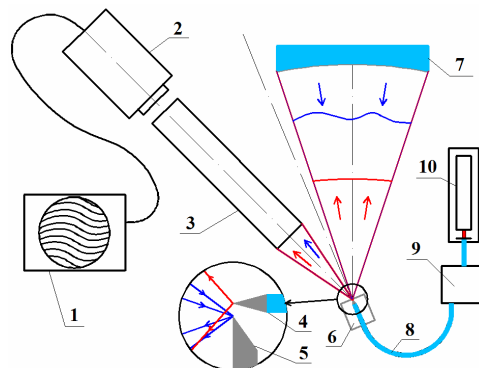


Рис. 1. Оптическая схема интерферометра. 1 – РС, 2 – CCD камера, 3 – наблюдательная система, 4 – источник СВ, 5 – плоское зеркало, 6 – 3D стол, 7 - исследуемая поверхность, 8 – одномодовое оптическое волокно, 9 – поляризационный контроллер, 10 – лазер.

Заметным шагом, существенно упростившим эксплуатацию и уменьшившим до рекордных значений aberrацию СВ, является применение источника СВ на основе одномодового волокна с субволновой выходной апертурой [4]. На баз этого источника в ИФМ РАН был разработан вакуумный ИДВС. Тем не менее, и этот интерферометр имеет ряд недостатков и ограничений, главными из которых являются:

1. в интерферометре, рис. 1, исследуемая деталь и регистрирующая система облучаются боковыми, наиболее aberrированными, частями волнового фронта, что, как минимум в 2 раза, уменьшает рабочую апертуру прибора;
2. для отражения рабочего фронта используется специально изготовленное зеркало с острой кромкой (рис. 1, поз.5), качество поверхности которого отрицательно влияет на точность измерений. Более того, так как зеркало должно подводиться к источнику на расстояние порядка 10 мкм, то часто происходит поломка дорогостоящего источника СВ.
3. Так как рабочий фронт испытывает 2 отражения, то амплитуды интерферирующих волн сильно различаются, что понижает контраст интерференционной картины, что так же снижает точность измерений.

Общая для всех ИДВС проблема вытекает из того, что в этом типе интерферометра в качестве эталонной используется расходящаяся СВ. Это означает, что, строго говоря, ИДВС позволяют изучать только вогнутые сферические поверхности или объективы. Для изучения других типов оптики: выпуклые детали, асферические поверхности, приборы использующие (формирующие) не сферические фронты приходится разрабатывать специальные оптические схемы и корректоры волновых фронтов, преобразующие расходящийся сферический фронт в требуемый в каждой конкретной задаче. В [3,5] приводятся и подробно анализируются оптические схемы для изучения объективов, выпуклых сферических, выпуклых и вогнутых асферических деталей с помощью ИДВС.

В данной работе решается несколько перечисленных выше проблем ИДВС. Для увеличения рабочей апертуры, а так же выравнивания интенсивностей эталонного и рабочего фронтов был разработан интерферометр с двумя источниками СВ, предложенный впервые в [6], использующий низкокогерентный свет. Схема интерферометра и фотография приведены на рис. 2 и 3.

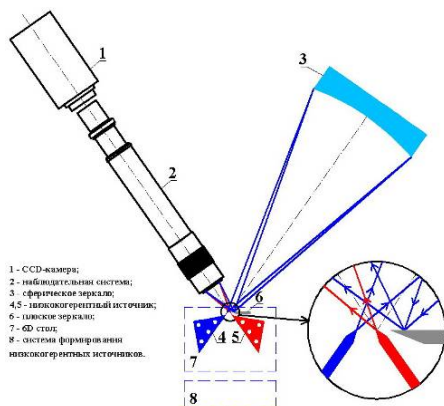


Рис. 2. Схема низкокогерентного интерферометра с двумя источниками СВ.

Принцип работы прибора заключается в том, что оси источников СВ совпадают с осями исследуемой детали и наблюдательной системы (детектора), тем самым в интерферометре работают центральные, наименее aberrированные части фронтов. Для избегания паразитной интерференции, которая может образоваться в результате прямого взаимодействия сферических фронтов источников, а также при взаимодействии части эталонного фронта, отраженного от исследуемой поверхности, с этим же фронтом, используется низкокогерентный свет. В качестве источника света применяется суперлюминисцентный диод с

центральной длиной волны 680 нм и длиной когерентности по паспорту 20 мкм.

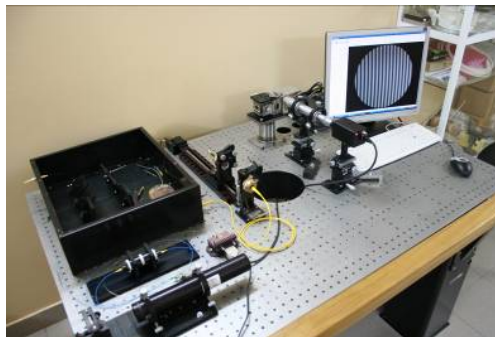


Рис. 3. Фотография интерферометра.

Для выравнивания длин плеч интерферометра используется двухстадийная линия задержки, включающая отрезки оптоволокон, позволяющих изменять задержку между фронтами дискретно вплоть до десятков метров, и оптико-механическую систему, изменяющую длину оптического пути с шагом 1 мкм в диапазоне 300 мм. В обоих каналах устанавливаются поляризационные контроллеры, с помощью которых формируется линейная поляризация света для получения максимального контраста интерференционной картины. Модуляция фазы СВ производится за счет растяжения части оптоволокон, намотанного на пьезокерамический цилиндр.

Для оценки точности измерений интерферометра был проведен эксперимент, аналог опыта Юнга, по измерению aberrаций волновых фронтов от двух источников [4]. На рис. 4 приведена типичная интерферограмма, наблюдаемая экспериментально. Сравнение результатов измерений с использованием высококогерентного He-Ne лазера и суперлюминисцентного диода подтвердили работоспособность и ожидаемые технические характеристики интерферометра. В частности было показано, что суммарные aberrации двух волновых фронтов составили 1,1 нм в числовой апертуре $NA=0,6$, что превышает мировой уровень более чем в 2 раза. Измеренная длина когерентности света на полувысоте модуляционной передаточной функции составила 100 мкм, что существенно превышает паспортные данные, тем не менее не влияет на работоспособность прибора.

Для решения проблемы отражателя рабочего фронта был разработан интегрированный источник СВ, схема которого приведена на рис. 5. Идея источника заключается в использовании в качестве плоского зеркала кремниевой пластины с отверстием, изготовленным методом анизотропного химического травления, внутрь которого, с помощью прецизионного стола, устанавливается

источник СВ. После юстировки положения относительно оси отверстия источник с помощью эпоксидного клея приклеивается к корпусу. После затвердевания клея стол убирается и источник готов к установке в интерферометр.

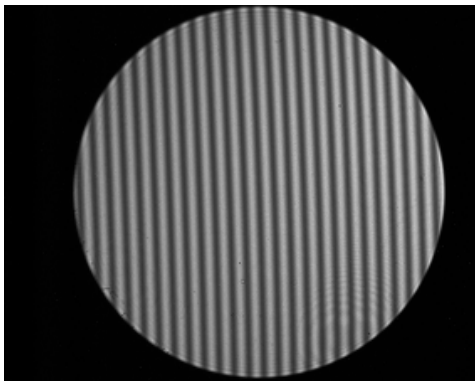


Рис. 4. Типичная интерферограмма, наблюдаемая в опыте Юнга.

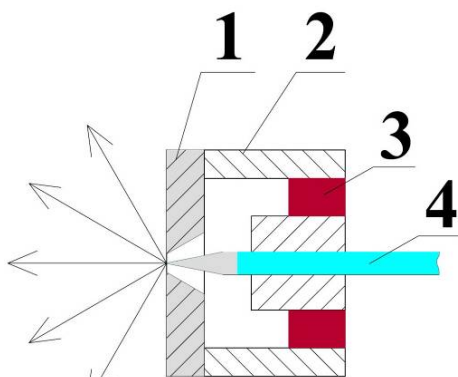


Рис. 5. Схема интегрированного источника СВ. 1 – кремниевая пластина с отражающим покрытием, 2 – металлический корпус, 3 – беззудачный эпоксидный клей, 4 – оптоволоконный источник СВ.

В связи с программами изучения Солнца методом высокоразрешающей изображающей спектроскопии в ИФМ РАН создается асферическая оптика дифракционного качества для области длин волн 13-30 нм. Для финальной аттестации волновых aberrаций телескопа была предложена схема с плоским эталонным зеркалом. Схемы аттестации телескопа и плоского зеркала приведены на рис. 6. Перед аттестацией телескопа поверхности плоского и сферического эталонов будут скорректированы до субнанометровой точности с помощью ионно-пучкового травления по методикам, изложенным в [7].

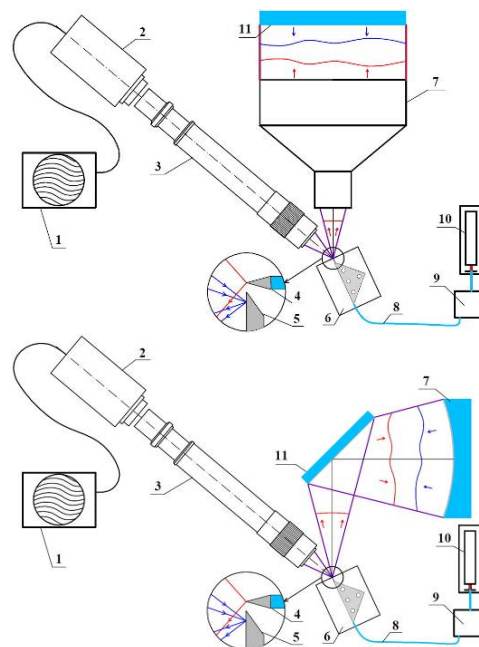


Рис. 6. Схемы измерений aberrаций телескопа (вверху) и плоского эталона (внизу): 1 - РС, 2 – CCD камера, 3 – наблюдательная система, 4 – источник СВ, 5 - зеркало, 6 - 3D стол, 7 – телескоп (вверху) и эталонное сферическое зеркало (внизу), 8 - оптоволоконно, 9 – поляризационный контроллер, 10 - лазер, 11 – плоский эталон.

Таким образом, данная работа стала продолжением исследований по развитию метода интерферометрии с дифракционной волновой сравнения и ее применений для аттестации сверхточной оптики.

Работа поддержана грантами РФФИ 09-02-00912, 10-02-00957, 11-02-00597, 11-02-00589, 11-02-00961, 11-02-97109 и ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы”.

- [1] N.I.Chkhalo et al. Proc. SPIE, 7025, 702507 (2008).
- [2] K. Otaki, et al., J. Vac. Sci. Technol B, 20, no.6, 2449 (2002).
- [3] N.I. Chkhalo et al. in Lithography, Michael Wang (Ed.), ISBN: 978-953-307-064-3, INTECH, <http://sciyo.com/articles/show/title/manufacturing-and-investigating-objective-lens-for-ultrahigh-resolution-lithography-facilities>.
- [4] N.I.Chkhalo et al. Rev. Sci. Instrum, 79, 033107 (2008).
- [5] Е.Б. Клоенков и др. Российские нанотехнологии, 3, №9-10, 116 (2008).
- [6] Е.Б. Клоенков и др., Известия РАН. Серия физическая, 72, №2, 205 (2008).
- [7] Ю.А. Вайнер и др. Известия РАН. Серия физическая, 75, №, 65 (2011).

К вопросу о функции генерации в методе наведенного рентгеновским пучком тока

Я. Л. Шабельникова, Е. Б. Якимов

Институт проблем технологии микроэлектроники
и особо чистых материалов РАН, Черноголовка, Россия
e-mail: janeshabeln@yandex.ru

Метод наведенного рентгеновским пучком тока, реализованный как на синхротронах [1], так и на лабораторных источниках рентгеновского излучения [2], является перспективным методом локальной диагностики полупроводников. Этот метод позволяет исследовать отдельные протяженные дефекты (дислокации, границы зерен) с большей чувствительностью [3], чем метод наведенного электронным пучком тока (ЕВИС).

Важным аспектом развития метода является создание моделей формирования сигнала. Расчет профилей наведенного тока с помощью таких моделей и сравнение рассчитанных профилей с экспериментально измеренными позволяет определять характеристики полупроводникового материала образца (диффузионную длину, время жизни неосновных носителей заряда) и рекомбинационную силу электрически активных дефектов в нем.

Модели формирования наведенного рентгеновским пучком тока для случая присутствия в образце протяженных дефектов были предложены в [3,4] и для преципитатов в [5]. В этих моделях транспорт и регистрация генерируемых пучком неравновесных носителей заряда описывались аналогично случаю ЕВИС метода, а функция генерации предполагалась пропорциональной интенсивности рентгеновского зонда. Рассчитанные в таком приближении профили наведенного тока от границы зерна находятся в соответствии с измеряемыми профилями [3] для рентгеновских зондов шириной более $\sim 10 \mu\text{m}$. Для более тонких рентгеновских пучков уточненную функцию генерации нужно предложить, основываясь на модели взаимодействия рентгеновского излучения с образцом.

Функция генерации электрон-дырочных пар рассматривается в рамках следующей модели взаимодействия рентгеновского пучка с материалом образца. Считается, что рентгеновские кванты выбивают фотоэлектроны из атомов полупроводникового кристалла-образца. Энергия фотоэлектронов того же порядка, что и энергия рентгеновских квантов ($\sim 10\text{-}20\text{keV}$) и намного превышает энергию, необходимую для генерации одной e-h пары (для кремния 3.5eV). Далее фотоэлектрон при многократных столкновениях с кристаллической решеткой теряет энергию и генерирует электрон-дырочные пары.

Считается, что точки поворота фотоэлектрона (то есть места, где он сталкивается с решеткой и

выбивает e-h пары) подчиняются распределению Гаусса с центром на расстоянии l , равном транспортной длине фотоэлектрона от точки его вылета, и шириной σ_e . Такая модель взаимодействия электрона с кристаллической решеткой была предложена в [6], где методом Монте-Карло моделировался сигнал обратно рассеянных электронов, и с его помощью решалась задача реконструкции рельефа поверхности образца. В [6] для электрона энергии $\sim 10\text{keV}$ в кремнии были получены оценки транспортной длины $l \approx 0.38R$ и $\sigma_e \approx 0.3R$, где $R = 0.0171(E)^{1.75}$ глубина проникновения электрона.

Поясняет используемую модель и демонстрирует систему координат рисунок 1. Интенсивность рентгеновского пучка, который направлен в точку с координатами (x_1, y_1) , распределена по Гауссу в плоскости, перпендикулярной поверхности образца, и экспоненциально убывает с глубиной:

$$I_{x\text{-ray}}(x, y, z) = \frac{I_0}{2\pi\sigma^2} \exp(-\mu z) \exp\left[-\frac{(x-x_1)^2 + (y-y_1)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (1)$$

где I_0 величина интенсивности, μ коэффициент поглощения рентгеновских лучей, σ ширина пучка.

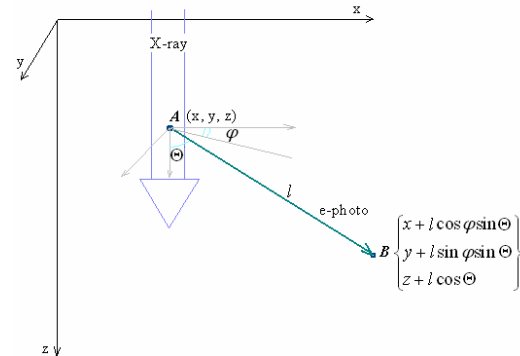


Рис. 1. Поясняющая схема к выводу функции генерации.

Интенсивность фотоэлектронов, выбиваемых рентгеновскими квантами в точке (x, y, z) пропорциональна интенсивности рентгеновского пучка:

$$I_{e\text{-photo}}(x, y, z, \Theta) = c I_{x\text{-ray}}(x, y, z) \sin^2 \Theta. \quad (2)$$

Для фотоэлектрона, выбитого в точке $A(x,y,z)$, и летящем в направлении, характеризуемом углами (φ, Θ) , распределение сгенерированных им электрон-дырочных пар максимально в точке B с координатами $(x+l \cos \varphi \sin \Theta, y+l \sin \varphi \sin \Theta, z+l \cos \Theta)$ (см. рис. 1). При удалении от точки B распределение спадает по гауссовому закону. То есть, количество сгенерированных им в точке (x_0, y_0, z_0) электрон-дырочных пар:

$$\rho = \rho(x_0, y_0, z_0, x, y, z, \Theta, \varphi) = \frac{1}{(2\pi\sigma_e^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(x+l \cos \sin \Theta - x_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) * \exp\left(-\frac{(y+l \sin \sin \Theta - y_0)^2 + (z+l \cos \Theta - z_0)^2}{2\sigma_e^2}\right) \quad (3)$$

Чтобы получить величину функции генерации в точке (x_0, y_0, z_0) , нужно проинтегрировать распределения e-h пар по всем фотоэлектронам, вылетающим из точек с координатами (x, y, z) , и по всем элементам телесного угла $d\Omega = \sin \Theta d\Theta d\varphi$, куда может вылететь фотоэлектрон

$$G(x_0, y_0, z_0) = \int dx dy dz \int d\Omega I_{e-photo}(x, y, z, \Theta) \rho(x_0, y_0, z_0, x, y, z, \Theta, \varphi)$$

В результате подстановки в это выражение интенсивности фотоэлектронов (2), рентгеновского пучка (1), распределения e-h пар (3), а также интегрирования по пространственным переменным и углу φ получается:

$$G(r, z_0) = A \exp(-\mu z_0) \exp\left(-\frac{r^2}{2(\sigma^2 + \sigma_e^2)}\right) \int_0^\pi d\Theta \sin^3 \Theta \exp(\mu l \cos \Theta) * \Phi_c \left(\frac{l \cos \Theta + \mu \sigma_e^2 - z_0}{\sqrt{2\sigma_e^2}} \right) I_0 \left(\frac{r l \sin \Theta}{\sigma^2 + \sigma_e^2} \right) \exp\left(-\frac{l^2 \sin^2 \Theta}{2(\sigma^2 + \sigma_e^2)}\right) \quad (4)$$

где I_0 функция Бесселя мнимого аргумента нулевого порядка, Φ_c дополнительная функция ошибок, постоянная $A = 0.5c I_0(\sigma^2 + \sigma_e^2)^{-1} \exp(\mu^2 \sigma_e^2 / 2)$ и радиальная переменная $r = \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2}$.

Можно отметить, что для бесконечно тонкого рентгеновского пучка (интенсивность которого описывается дельта-функцией в плоскости xu и экспоненциально затухает с глубиной) выкладки в рамках рассматриваемой модели приводят к выражению для функции генерации, которое можно получить из (4) формальной подстановкой $\sigma=0$.

Результат расчета функции генерации электрон-дырочных пар бесконечно тонким рентгеновским пучком представлен на рис. 2. При расчетах использовались значения, соответствующие энергии рентгеновского зонда $E=17.4keV$. То есть, глубина проникновения $R = 0.0171(E)^{1.75} = 2.5 \mu m$, проекционная длина $l \approx 0.38R = 0.96 \mu m$, $\sigma_e \approx 0.3R = 0.76 \mu m$, а также $\mu = 15.6 * 10^{-4} \mu m^{-1}$ и $cI_0=1$.

Функция генерации экспоненциально, как функция $\exp(-\mu z)$, убывает при больших z , а возрастание ее при маленьких z описывается

функцией ошибок $\Phi_e[(l-z)/(\sqrt{2}\sigma_e)]$. Причем участок, на котором $G(x=0, z)$ возрастает примерно равен $\sqrt{2}\sigma_e$.

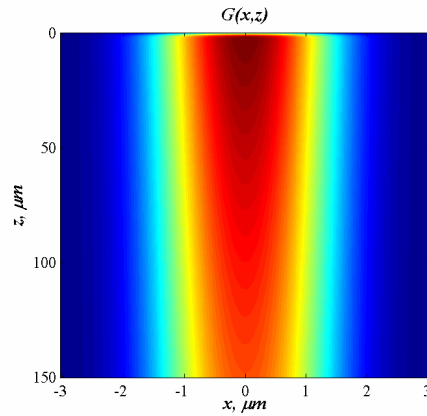


Рис. 2. Функция генерации электрон-дырочных пар бесконечно тонким рентгеновским пучком энергии 17.4keV.

Поведение функции генерации при постоянном z демонстрирует рис. 3, где показаны профили при $z=10 \mu m$ функции генерации для случая бесконечно тонкого пучка (синяя кривая) и пучка ширины $2 \mu m$ (красная кривая), которые нормированы таким образом, чтобы их максимумы были равны единице. Эти профили на рис. 3 сравниваются с функциями $\exp\left(-\frac{x^2}{2(\sigma_e^2 + (0.8l)^2)}\right)$ и $\exp\left(-\frac{x^2}{2(\sigma^2 + \sigma_e^2 + (0.8l)^2)}\right)$ для $\sigma=2 \mu m$ (зеленая и бирюзовая кривая соответственно). Из этого сравнения можно заключить, что профиль функции генерации на некоторой глубине z можно аппроксимировать функцией Гаусса с дисперсией $(\sigma^2 + \sigma_e^2 + (0.8l)^2)^{1/2}$.

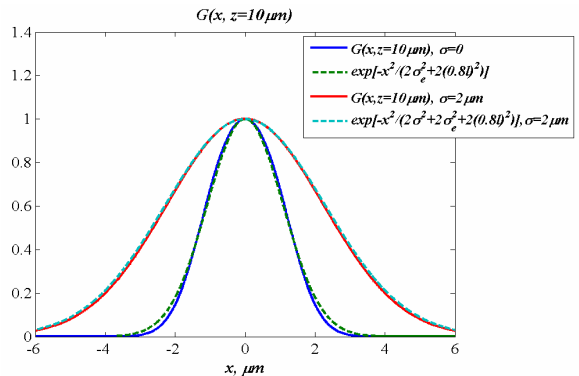


Рис. 3. Профили при $z=10 \mu m$ функции генерации бесконечно тонким рентгеновским пучком и пучком ширины $\sigma=2 \mu m$.

Таким образом, можно сделать вывод, что при большой ширине рентгеновского зонда

$\sigma \gg \sigma_e, l$ зависимость функции генерации от пространственных координат будет близка к $\exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}\right)\exp(-\mu z)$ то есть, пропорциональна интенсивности рентгеновского пучка.

- [1] Vyvenko O.F., Buonassisi T., and Istratov A.A., J. Appl. Phys., 91, 3614 (2002).
- [2] Fahrtdinov R.R., Feklisova O.V., Grigoriev M.V., Irzhak D.V., Roshchupkin D.V., and Yakimov E.B., Rev. Sci. Instr., 82, 093702 (2011).
- [3] Я.Л. Шабельникова, Е.Б. Якимов, М.В. Григорьев, Р.Р. Фахртдинов, В.А. Бушуев, Письма в ЖТФ (2012) (принята к печати).
- [4] Я.Л. Шабельникова, Е.Б. Якимов, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования (2012) (принята к печати).
- [5] Yakimov E.B., Solid State Phenomena, 156-158, 247 (2010).
- [6] Firsova A.A., Reimer L., Ushakov N.G., Zaitsev S.I., Scanning, 13, 363 (1991).

Рентгеновский телескоп СОРЕНТО для миссии Интергелио-Зонд

С. В. Кузин¹, С. В. Шестов¹, С. А. Богачев¹, И. В. Зимовец², А. А. Перцов¹,
А. С. Кириченко¹, А. С. Ульянов¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН), Москва, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт космических исследований Российской академии наук (ИКИ РАН), Москва, Россия
e-mail: sshestov@gmail.com

СОРЕНТО – это телескоп-спектрометр, который входит в состав научной аппаратуры российской космической миссии Интергелиозонд [1]. СОРЕНТО предназначен для построения высокоточных изображений и спектров Солнца в рентгеновском диапазоне от 5 до 100 кэВ. Как известно, основное излучение солнечной короны лежит в области относительно низких энергий – преимущественно в крайнем УФ диапазоне. Излучение с более высокими энергиями, от 5 кэВ и выше, возникает, в основном, во время вспышек и складывается из тормозного излучения ускоренных во вспышке электронов и из теплового излучения вспышечной плазмы, нагретой до температур от 5 до 100 млн. К [2]. Возникновение в короне Солнца источников интенсивного рентгеновского излучения, таким образом, является индикатором происходящих здесь активных процессов, а также позволяет получить о них количественную информацию – измерить темп высвобождения тепловой и нетепловой энергии, определить количество ускоренных электронов, измерить их спектр.

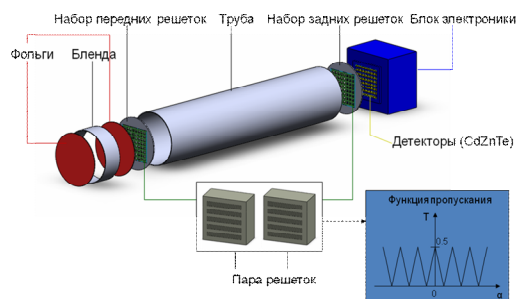


Рис. 1. Общая схема телескопа СОРЕНТО.

Принцип действия телескопа СОРЕНТО (общая схема приведена на рис. 1) основан на модуляции интенсивности рентгеновского излучения, идущего под разными углами, системой решеток с последующей регистрацией интенсивности прошедшего излучения. Система решеток (рис. 2.) представляет собой наборы передних и задних решеток, каждой передней решетке соответствует задняя решетка, каждая пара имеет свой шаг – от 20 мкм до 2 мм (6 размеров), а направления пар меняются с шагом

30°. Каждой паре решеток соответствует свой CdZnTe-детектор, регистрирующий прошедший рентгеновский поток. Изображение восстанавливается по одновременным измерениям всех детекторов методом, аналогичным обратному преобразованию Фурье.

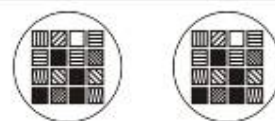


Рис. 2. Схематическое изображение передних и задних решеток.

Установка аппаратуры СОРЕНТО на космическом аппарате Интергелиозонд позволит существенно улучшить временное и пространственное разрешение наблюдений Солнца в рентгеновском диапазоне по сравнению с данными, получаемыми аппаратурой той же конструкции с расстояния 1 а.е. Рентгеновский телескоп СОРЕНТО будет одним из приборов целого комплекса изображающей аппаратуры, разрабатываемой ФИАН для миссии Интергелиозонд [3]. Совместные наблюдения, выполненные в оптическом, вакуумном УФ и рентгеновском диапазонах, позволят существенно расширить информативность регистрируемых изображений. Также, в рамках эксперимента, планируется также реализовать первую в мире программу стереоскопических наблюдений Солнца в диапазоне 5–100 кэВ совместно телескопами СОРЕНТО на спутнике Интергелиозонд и STIX на европейском спутнике Solar Orbiter.

В настоящем докладе приводятся данные о техническом облике СОРЕНТО, его задачах, а также о планируемых программах научных наблюдений.

[1] В. Д. Кузнецов, Труды рабочего по проекту Интергелиозонд, Таруса, 11-13 мая, 2011 г., С. 5-14

[2] Aschwanden M. J., Chichester, UK: Praxis Publishing Ltd, 2009

[3] С. В. Кузин, С. А. Богачев, С. В. Шестов и др., Труды рабочего по проекту Интергелиозонд, Таруса, 11-13 мая, 2011 г., С. 27-35

Рентгеновская экспресс топография с использованием бесщелевого коллиматора

Е.В Шулаков,¹ И.А. Смирнова²

¹ Институт проблем технологии микроэлектроники РАН, Черноголовка, Россия

² Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

shulakov@iptm.ru

Аннотация. Проведено теоретическое и экспериментальное исследование особенностей формирования изображения в оптической схеме секционной топографии на лабораторном источнике излучения с применением рентгеновского бесщелевого коллиматора. Предложена модернизированная схема съемки секционных топограмм. Показано, что рентгеновские снимки получаются при значительно меньшем времени экспозиции без ухудшения линейного разрешения изображения.

Введение. В последние годы большое внимание уделяется развитию оптической элементной базы для жесткого рентгеновского излучения как для синхротронов, так и лабораторных источников излучения. В этом направлении достигнуты определенные успехи. Современные фокусирующие элементы имеют рабочую апертуру до 1 мм и функцию размытия точки менее 1 мкм. В то же время применение рентгеновских оптических элементов в рентгеновской топографии практически отсутствует. Основные приложения, в основном, касаются использования этих элементов в качестве микронзондов в задачах, касающихся вторичных процессов при рассеянии излучения.

В этом плане представляется интересным рассмотреть возможности их применения в экспериментальных схемах рентгеновской топографии на лабораторных источниках излучения. Следует отметить, что этот вопрос не является тривиальным. Дело в том, что кристаллы высокого совершенства предъявляют высокие требования к источнику излучения. При съемке топограмм важны не только размеры и уровень освещенности локальной области образца, но и такие параметры как расходимость первичного пучка и его спектральный состав. Приведем пример. С помощью рентгеновской линзы можно получить яркий вторичный источник малых размеров. Однако и первое, и второе достигается за счет значительного увеличения расходимости рабочего пучка. И единственным результатом работы такого источника будет существенное увеличение уровня фона от рассеяния на кристалле сплошного спектра.

Совершенные кристаллы взаимодействуют с монохроматической волной только в узком угловом спектре нескольких угловых секунд или менее.

В начале 80-х годов Лейкин В.Н. с соавторами предложили использовать в качестве вторичного источника для схем экспериментальной топографии рентгеновский бесщелевой коллиматор (РБК), в котором первичный пучок проходит по границе раздела двух плоских полированных поверхностей, плотно прижатых друг к другу [1-3]. Авторы отмечали, что получаются качественные секционные топограммы кремния при существенном сокращении времени экспозиции [4]. Дать оценку разрешения этих топограмм сложно. Тем более, на приведенном ими снимке отсутствовали интерференционные полосы.

Настоящая работа посвящена исследованию возможностей применения бесщелевого коллиматора в рентгеновской секционной топографии.

РБК и схема эксперимента. Рефлекторы РБК изготавливались из плоских полированных кварцевых стекол размером 100x40x3 мм³. Шероховатость их поверхностей соответствовала классу чистоты 14б (размеры микро неоднородностей < 5 нм, макро неоднородностей < 30 нм). Ширина зазора между рефлекторами d определялась методом спектрометрии белого пучка света [5]. от ртутной лампы, отраженного от щели РБК под углом η (рис.1).

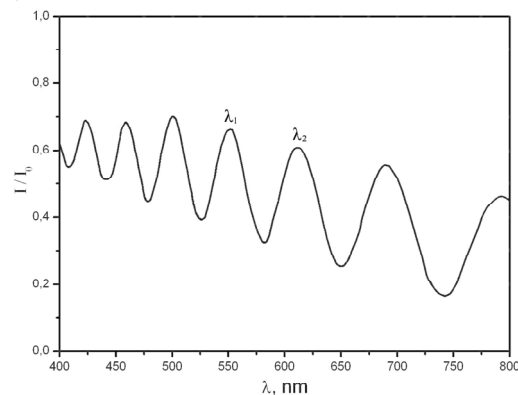


Рис. 1. Интерференция белого пучка света в зазоре РБК.

Порядок интерференции излучения в зазоре и величина зазора d определялись по двум соседним максимумам на распределении интенсивности и вычислялись из системы уравнений:

$$\begin{aligned} 2d \sin \eta &= n \lambda_1 \\ 2d \sin \eta &= (n-1) \lambda_2 \end{aligned} \quad (1)$$

Спектры снимались с двух участков образца размером порядка 0.5 мм. Толщина зазора между пластинами около 5.3 мкм в первом измерении и 5.1 мкм во втором.

Схема рентгеновской экспериментальной установки представлена на рис.2.

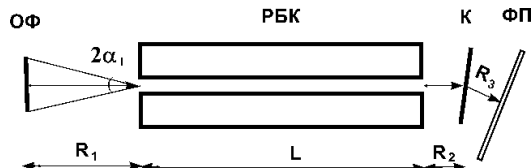


Рис. 2. Схема эксперимента. ОФ – оптический фокус трубки, К-кристалл, ФП - фотопластинка.

Источником излучения являлся рентгеновский генератор D-4С японской фирмы “Rigaku” с острофокусной трубкой с молибденовым анодом. Оптический размер фокуса f имел величину 28 мкм. РБК устанавливался вплотную к окну трубки. Расстояние R_1 от фокуса трубки до входной поверхности коллиматора составляло 55 мм. Коллиматор юстировался так, чтобы через него мог пройти прямой пучок без рассеяния (см. рис.2). Структура волновых полей на выходе из коллиматора при отклонении от точной юстировки исследована в [6]. Длина РБК $L = 100$ мм. Расстояния вдоль оптической оси системы R_2 и R_3 от выходной поверхности коллиматора до кристалла и фотопластинки варьировались в широких пределах. Излучение, рассеянное кристаллом, регистрировалось на пластинки типа МР с разрешением 4 мкм и сцинтилляционным детектором.

Угол полного внешнего отражения θ_c для кварца составляет 6.54 угловых минут. Угловой размер фокуса $2\alpha_1$ от входного торца РБК определяется отношением размера оптического фокуса f к расстоянию R_1 . В нашем случае $\alpha_1 = 52,5''$, что почти на порядок меньше угла θ_c . Выходной угол $2\alpha_2 \approx 2\alpha_1$.

В качестве образцов для секционной топографии использовались совершенные кристаллы кремния с ориентацией поверхности [001] и толщиной 1050 мкм. Излучение $\text{MoK}_{\alpha 1}$ ($\lambda = 0,07093$ нм), рефлекс (400), $\theta_B = 15,142$.

При съемке секционных топограмм мы использовали стандартную реализацию метода: камера Ланга А4 и входная щель $S = 10$ мкм. В нашем случае $R_1 = 35$ см, $R_2 + R_3 = 7$ см и угол $2\gamma = 16''$. Ширина спектральной линии $\text{MoK}_{\alpha 1}$ $\Delta\lambda/\lambda$ составляет $3 \cdot 10^{-4}$. Этой ширине

соответствует расходимость $\Delta\theta_B = 16,5''$. Это означает, что входная щель режет спектр линии $\text{MoK}_{\alpha 1}$ на половине ее высоты.

Теоретические оценки. Проанализируем оптические свойства РБК важные для эксперимента. Начнем с условий освещения. Обычно полагают, что интенсивность в волновом канале определяется излучением непосредственно попадающим в щель d . С этой целью оценим размеры критического фокуса f_c трубки, излучение которого попадает в коллиматор только через щель d . Он равен $2\theta_c R_1$ или 209 мкм. При больших размерах фокуса в диапазоне углов падения от θ_c до $2\theta_c$ имеется накачка волнового канала через материал рефлекторов. Этот случай легко реализуется на трубках с прострельным анодом. Установим РБК на расстоянии 1 мм от фокуса трубки и тогда f_c уменьшится до размера 3.8 мкм.

Оценим теперь коэффициент пропускания коллиматора для излучения $\text{MoK}_{\alpha 1}$ в зависимости от угла скольжения θ для щели $d = 5.2$ мкм. Размеры микро неоднородностей с большим запасом удовлетворяют критерию Рэлея на когерентность и можно считать внутренние поверхности зазора гладкими. Расчеты проводилась методом последовательных отражений от поверхностей рефлекторов. Коэффициент растет при уменьшении угла α_1 и увеличении ширины зазора d , так как в этих случаях уменьшается количество отражений. Средняя величина пропускания канала составляет 0.998. Высокий коэффициент пропускания определяется слабым поглощением излучения Мо в кварце ($\mu = 8.82 \text{ см}^{-1}$) и большим расстоянием между двумя последовательными отражениями. Так для угла скольжения $\theta = 50''$ шаг составляет 2 см и количество отражений в канале РБК равно 5, а для $\theta < 10''$ шаг превышает длину коллиматора, что соответствует максимум одному отражению.

Коллиматор с широким зазором выгодно отличается по транспорту излучения.

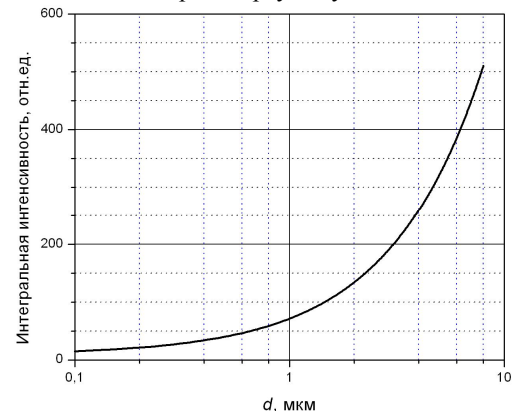


Рис. 3. Интегральная интенсивность на выходном торце РБК зависимости от величины зазора d .

Видно, что интегральная интенсивность при $d = 5$ мкм в десятки больше, чем при $d = 0,1$ мкм.

Теперь рассчитаем линейное разрешение LR на топограммах. Эта величина зависит от ширины входной щели S , разрешения эмульсии фотопластинки F и расходимости пучка в плоскости регистрации γ :

$$LR = S + F + \gamma(R_2 + R_3) \quad (2)$$

В случае, если входная щель существенно меньше размера оптического фокуса, она играет роль протяженного некогерентного источника [7]. Каждая точка этого источника излучает в угловом интервале 2γ , где 2γ определяется отношением размера оптического фокуса f к расстоянию до входной щели R_1 . Согласно критерию Рэля для разрешения двух спектральных линий мы уменьшаем третий член формуле (2) в 2 раза.

И так, при съемке секционных топограмм стандартным методом: $S = 10$ мкм, $\gamma = 8''$. В схеме с РБК: $S = 5,2$ мкм, $\gamma = 52,5''$. Выходной пучок коллиматора в схеме рис. 1 имеет почти в 7 раз большую расходимость. Из выражения (2) видна стратегия для выбора экспериментальной схемы с коллиматором для получения высокого разрешения. Расстояние $R_2 + R_3$ должно быть минимальным.

Эксперимент и обсуждение результатов.

Для съемки топограмм в схеме с РБК использовались камера А-4 и расстояния $R_2 = R_1 = 1$ см. На рис.4 представлены фрагменты секционных топограмм Si(400). Топограмма на рис.4а получена в стандартной схеме, рис.4б соответствует схеме с РБК.

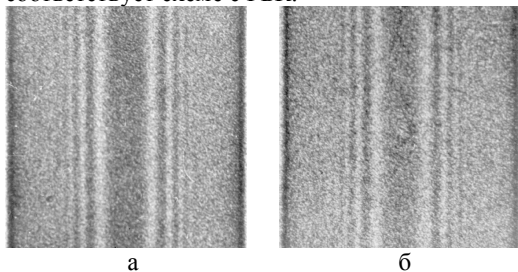


Рис.4. Секционные топограммы Si(400), MoK $_{\alpha 1}$. 4а – стандартная схема, экспозиция 21 час; 4б – схема с РБК, экспозиция 3 часа.

На топограммах видны интерференционные маятниковые полосы. Картина этих полос хорошо описывается теорией, можно рассчитать их положение и период полос [8]. Указанная картина являются естественным тест – объектом для определения линейного разрешения на топограмме: достаточно сравнить ее с теоретическим изображением.

Оценим разрешение на топограммах согласно формуле (2). На топограмме 4а: $LR = 10 + 4 + 5,4 = 19,4$ мкм, 4б: $LR = 5,2 + 4 + 10,2 = 19,4$ мкм. На топограммах отчетливо видны

первых три минимума интерференционных полос. Следующий период равен 20,7 мкм. В целом, топограммы на рис. 4а и 4б, практически, одинаковые.

Сделаем оценку выигрыша по интенсивности за счет использования коллиматора: $G = 1 + L/(R_1 + R_2 + R_3)$. Он равен 2.3. Остальная часть выигрыша в экспозиции связана с существенным уменьшением расстояния источник – плоскость регистрации.

Закключение. В работе исследованы вопросы о возможности использования рентгеновского бесщелевого коллиматора в качестве острофокусного источника излучения для секционной топографии. Определены оптические свойства РБК, важные для топографического эксперимента. Оценен коэффициент транспорта излучения в РБК. Определены основные принципы геометрии экспериментальной схемы с рентгеновским бесщелевым коллиматором. Установлены физические причины, непосредственно влияющие на формирование топографического изображения. Получены секционные топограммы совершенных кристаллов кремния при времени экспозиции в 9 раз меньшем, чем в стандартной схеме, при высоком линейном разрешении. Длина коллиматора L , по-видимому, не принципиальна. Уменьшение L сделает экспериментальную схему более компактной, что позитивно отразится на времени экспозиции.

Рекомендация всем исследователям, связанным с секционной топографией сократить до минимума расстояния от входной щели до образца и от образца до плоскости регистрации. Этим достигается уменьшение времени экспозиции и улучшение линейного разрешения..

Авторы благодарят В.К. Егорова за предоставление для экспериментов самодельного РБК, а также за полезные научные дискуссии. А также В.К. Долганова за измерение зазора РБК.

1. Лейкин В.Н., Мингазин Т.А., Зеленов В.И. // ПТЭ. 1981. Т.1. С. 229.
2. Лейкин В.Н., Мингазин Т.А., Зеленов В.И. // ПТЭ. 1981. Т.3. С. 208.
3. Мингазин Т.А., Лейкин В.Н., Зеленов В.И. // Авт. Свид. СССР. Бюл. ОИПОТЗ. 1980. Т.44, С. 175.
4. Лейкин В.Н., Мингазин Т.А., Зеленов В.И. // ПТЭ. 1984. Т.6. С. 33.
5. Н. Харрик. Спектроскопия внутреннего отражения, М. Мир, 1970, 335 стр.
6. Е.В. Шулаков, И.А. Смирнова, М.С. Мартиросян. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2005, № 5, с. 25-31.
7. Aristov V.V., Kohn V.G., Polovinkina V.I., Snigirev A.A. Phys.Stat.Sol.(a). 1982. V.72. P.483.
8. Пинскер З.Г. // Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982. 392 С.

Разработка 30-линзового рентгеновского интерферометра

В. А. Юнкин¹, В. Г. Кон², С. М. Кузнецов¹, М. В. Григорьев¹,
И. И. Снигирева³, А. А. Снигирев³

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия

³Европейский центр синхротронного излучения, Гренобль, Франция

e-mail: yunkin@iptm.ru

Рентгеновская интерферометрия на основе составных преломляющих планарных фокусирующих линз является новым разделом рентгеновской оптики, развитие которой только начинается [1]. Она стала возможной благодаря тому, что планарные кремниевые технологии, развиваемые в ИПТМ РАН, позволяют с высокой точностью изготавливать линзы с малым радиусом кривизны и малой апертурой.

Малая апертура линз дает возможность плотно разместить массив линз таким образом, что они создают периодическую цепочку вторичных источников излучения поперек пучка с малым периодом и с большой угловой расходимостью. Такие пучки начинают перекрываться на определенном расстоянии вдоль оптической оси создавая интерференционную картину.

Заметим, что создать интерференционную картину с аналогичными параметрами, используя щели, как в опыте Юнга, невозможно, так как размер щелей должен быть меньше микрона и они будут представлять собой скорее волноводы, чем щели из-за своей толщины.

Первый интерферометр был создан в виде билинзы, то есть состоял из двух составных линз, между которыми была перемычка. Наличие перемычки приводит к искажению периодической структуры интерференционных полос [2], что, с одной стороны, представляет собой новый оптический эффект, а с другой – является нежелательным артефактом.

Для исправления ситуации была предложена новая технология размещения линз без зазора, что открыло возможность увеличить число линз и перейти к созданию многолинзовых интерферометров. Первый такой интерферометр имел 6 составных линз с апертурой 30 мкм и разным числом элементарных линз в составной линзе [3], что необходимо, чтобы использовать линзы в широком диапазоне энергий излучения, поскольку коэффициент преломления кремния сильно зависит от энергии рентгеновского излучения.

В данной работе представлен новый тип интерферометра, состоящий из 30 составных линз с апертурой 30 мкм. Такой интерферометр способен создавать уникальную периодическую интерференционную картину с очень узкими пиками, разделенными большими интервалами, в которых излучение отсутствует. Упрощенный

вариант оптической схемы для наблюдения интерференционной структуры, создаваемой интерферометром, показан на Рис. 1.

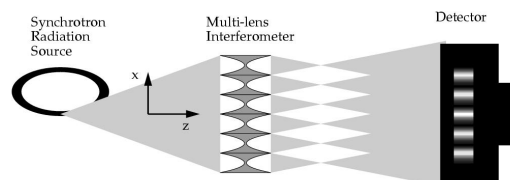


Рис. 1. Упрощенная схема эксперимента

Как следует из теории, описанная выше структура возникает только на определенных резонансных расстояниях от положения фокусов линз вдоль оптической оси, которые в случае падения плоской волны на интерферометр описываются формулой

$$z_m = A^2/(\lambda m),$$

где $m = 1, 2, \dots$ указывает номер резонанса, A – апертура линз (период расположения фокусов в цепочке), λ – длина волны излучения.

В такой интерференционной структуре пики интенсивности излучения на поперечной оси возникают между фокусами. При четном числе линз, расположенных симметрично относительно оптической оси, центральный пик будет находиться на оптической оси.

Многолинзовый интерферометр способен также показывать уширенное воспроизведение фокусов линз на расстояниях

$$Z_m = 2mA^2/\lambda,$$

где $m = 1, 2, \dots$ Этот эффект известен как эффект Тальбо в оптике, согласно которому периодическая структура поля излучения полностью воспроизводится на указанных расстояниях. В нашем случае структура не полностью периодическая, что приводит к уширению фокусов, но чем больше линз в интерферометре, тем меньше это уширение.

Однако, если принять во внимание, что для рентгеновских лучей длина волны излучения очень мала, расстояния для наблюдения эффекта Тальбо оказываются очень большими. То же самое относится и к наблюдению первых резонансов. Так,

например, для энергии фотонов 20 кэВ приемлемое расстояние получается только для 10 резонанса и равно $z_{10} = 147$ см.

Мы разработали компьютерную программу для численного моделирования оптических свойств многолинзового интерферометра с возможностью расчета распределения интенсивности на любом расстоянии от интерферометра. Предварительные результаты работы программы представлены в докладе [4]. Кроме того, получены аналитические формулы для идеализированного случая периодической системы конечного числа точечных источников, которые в целом дают правильное представление об основных параметрах интерференционной структуры поля излучения.

Главной проблемой для экспериментального исследования адекватной интерференционной структуры является необходимость очень высокой поперечной когерентности используемого пучка излучения. В частности, длина поперечной когерентности излучения на интерферометре должна быть больше его суммарного поперечного размера 900 мкм. Для стандартных условий эксперимента на ESRF (расстояние 50 м и размер источника 50 мкм) длина поперечной когерентности равна всего лишь 60 мкм, то есть в 15 раз меньше.

По этой причине необходимо принимать дополнительные меры для повышения степени когерентности пучка. В частности, можно использовать вторичный источник, создаваемый одной линзой с апертурой меньше 60 мкм. При этом необходимо использовать относительно большие расстояния до интерферометра для того, чтобы пучок засветил весь интерферометр.

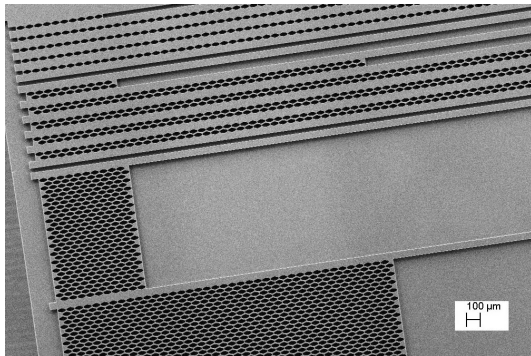


Рис. 2. РЭМ фото наборов линз, билинз и интерферометров на кремниевом чипе.

Нами разработана оригинальная технология микроstructuring кремния, с помощью которой изготовлены кремниевые чипы с 30-линзовыми интерферометрами, билинзами и составными линзами, представляющие собой интегральные линзовые системы (ИЛС) [5]. На Рис. 2 показано изображение наборов ИЛС, полученное в растровом электронном

микроскопе (РЭМ). Идея ИЛС в виде сформированных на кремниевых пластинах чипов была предложена для удобства и простоты использования планарных преломляющих составных линз в качестве различных оптических элементов в экспериментах с использованием разных энергий излучения. Конструктивной особенностью ИЛС является размещение составных преломляющих линз в плоскости чипа параллельно их оптическим осям. Фрагмент типичного примера таких ИЛС, содержащий 30-линзовые интерферометры, показан на Рис. 3.

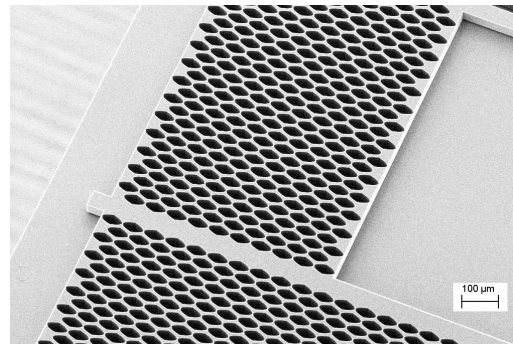


Рис. 3. РЭМ фото 30-линзовых интерферометров.

Таким образом, удается получать оптические элементы в виде наборов составных линз с одинаковым фокусным расстоянием для разных энергий излучения, или, наоборот, наборы линз с разными фокусными расстояниями без изменения энергии излучения. Для выбора желаемой энергии или фокусного расстояния достаточно сменить один оптический элемент (составную линзу или интерферометр) на другой путем параллельного перемещения чипа.

Расчет преломляющих профилей единичных планарных параболических линз был проведен с использованием специализированного программного обеспечения, разработанного в ИПТМ РАН, а для проектирования их топологий применялся коммерческий программный продукт - AutoCAD.

Технология изготовления кремниевых чипов основана на современных технологиях микроэлектроники и микросистем, основными из которых являются электронно-лучевая литография и глубокое анизотропное плазменное травление. Для минимизации погрешностей формирования преломляющих профилей линз при травлении на глубину около 40 мкм был разработан и использован ряд новых технологических решений.

Изготовленные 30-линзовые интерферометры представляли собой два типа ИЛС. В первом типе ИЛС размещены четыре интерферометра, состоящие из линз, рассчитанных на фокусное расстояние 2 см для фиксированных значений

энергии из диапазона от 10 кэВ до 40 кэВ с шагом 10 кэВ. Во втором типе ИЛС находится пять интерферометров на основе линз, рассчитанных на фокусное расстояние 4 см для фиксированных значений энергии из диапазона от 10 кэВ до 50 кэВ с шагом 10 кэВ.

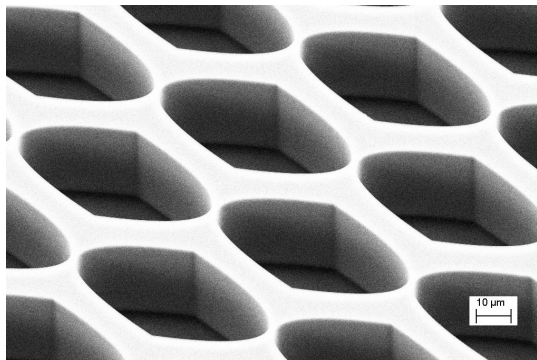


Рис. 4. РЭМ фото фрагмента интерферометра.

Для получения фиксированного фокусного расстояния при каждой энергии излучения линзы имели разное число единичных оптических элементов. Необходимое число таких элементов вычислялось на основе теоретической оценки преломляющих свойств единичных линз.

Единичными оптическими элементами являлись двояко-вогнутые параболические линзы с длиной 60 мкм и физической апертурой 30 мкм, показанные на Рис. 4. При этом общая длина составных линз варьировалась от 0.618 мм (10 единичных линз и 9 двухмикронных зазоров между ними) до более чем 19 мм (311 единичных линз).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 10-02-01021а.

[1] Snigirev A., Snigireva I., Kohn V., et al., Phys. Rev. Lett, 103, 064801 (2009).

[2] Кон В. Г., в кн. "Материалы совещания Рентгеновская Оптика 2010", ИПТМ, Черноголовка, 2010, с.133-135.

[3] Юнкин В. А., Кузнецов С. М., Григорьев М. В. и др. В кн. "Тезисы докладов. РСНЭ-НБИК 2011", ИК РАН, Москва, ноябрь 2011, с. 599.

[4] Кон В. Г. В кн. "Материалы конференции Рентгеновская Оптика 2012", ИПТМ, Черноголовка, 2012.

[5] I. Snigireva, A. Snigirev, V. Yunkin, et al., AIP conference proceedings, 705, 708-712, 2004.

Возможности метода ХВИС для характеристики электрически активных дефектов в полупроводниковых кристаллах, сравнение с методами ЕВИС и ЛВИС

Е. Б. Якимов

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН, Черноголовка, Россия
e-mail: yakimov@iptm.ru

Метод тока, индуцированного сфокусированным рентгеновским пучком (ХВИС), был предложен в [1] для выявления электрически активных протяженных дефектов в рентгеновском микроскопе. Этот метод аналогичен известному методу наведенного электронным пучком тока (НТ) в растровом электронном микроскопе (РЭМ) [2,3]. Ранее ХВИС метод использовался только на синхротронных источниках, но недавно этот метод был реализован и на лабораторном источнике рентгеновского излучения [4,5], что может позволить существенно расширить область его применения. Однако для реалистичной оценки возможностей этого метода было необходимо разработать методы расчета сигнала, получаемого в этом методе, и изменений сигнала вблизи протяженных дефектов. Попытки расчета ХВИС контраста протяженных дефектов были предприняты в [6,7] для квазиточечных дефектов и в [8] для дислокаций и границ зерен. Результаты этих работ позволяют оценить возможности метода ХВИС и сравнить их с возможностями метода НТ и метода тока, индуцированного световым пучком (ЛВИС).

В настоящей работе на основе анализа результатов расчетов и экспериментальных исследований проведено сравнение метода ХВИС с методами НТ и ЛВИС для оценки его преимуществ и недостатков по сравнению с указанными методами.

В методе НТ образец в РЭМ сканируется сфокусированным электронным пучком, который действует как локальный источник неравновесных электронно-дырочных (e-h) пар. Аналогично действует и сфокусированный оптический пучок в методе ЛВИС. В методе ХВИС образец сканируется сфокусированным рентгеновским пучком. В двух последних методах сканирование обычно осуществляется за счет движения столика, что требует больше времени для получения изображения, однако легко позволяет сканировать достаточно большие области. Рентгеновские кванты выбивают фотоэлектроны, которые, в свою очередь, рождают неравновесные e-h пары. Затем эти неравновесные носители заряда, генерируемые электронным, световым либо рентгеновским пучком, диффундируют внутри образца, и часть из них достигает границы области пространственного

заряда (ОПЗ) коллектора (барьера Шоттки или p-n перехода). Электрическое поле внутри ОПЗ разделяет e-h пары, что приводит к появлению тока во внешней цепи. Ток, собираемый коллектором при сканировании исследуемой структуры сфокусированным пучком, является измеряемым сигналом в методах НТ, ЛВИС и ХВИС. Протяженные дефекты повышают скорость рекомбинации неравновесных носителей заряда, что приводит к уменьшению собираемого тока, т.е. к появлению темного контраста.

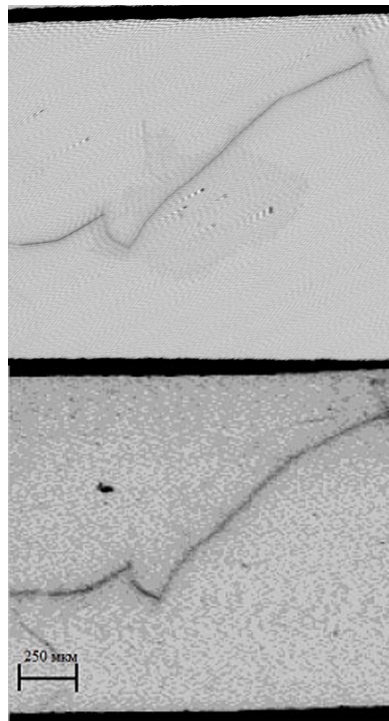


Рис. 1. Изображения границы зерна в мультикристаллическом кремнии, полученные методами ЕВИС (вверху) и ЛВИС (внизу).

На рис. 1 представлены изображения границы зерна в мультикристаллическом кремнии, полученные методами ЕВИС и ЛВИС. А на рис. 2 изображения двух границ зерен, полученные методами ЕВИС и ХВИС. Видно, что все три метода позволяют выявлять рекомбинационно активные протяженные дефекты. Это позволяет проводить сравнительное исследование возможностей этих методов как путем расчетов, так и экспериментально.

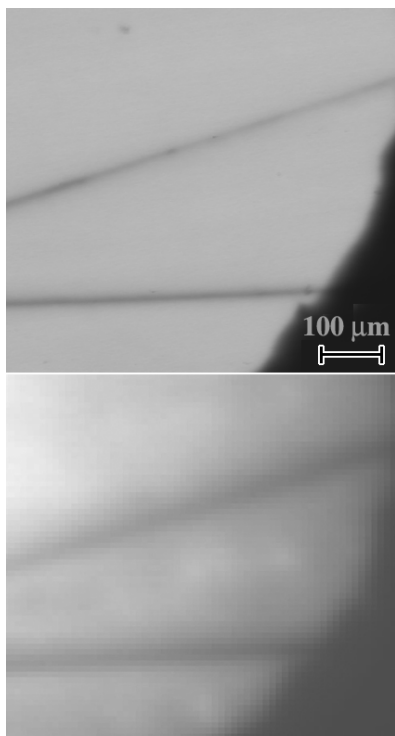


Рис. 2. Изображения двух границ зерен в мультикристаллическом кремнии, полученные методами EBIC (вверху) и XVIC (внизу).

Как показали расчеты [6,7], XVIC контраст маленьких преципитатов сферической формы всегда ниже контраста таких же дефектов в режиме НТ, в большинстве случаев существенно ниже. Однако при малых диффузионных длинах и ширине рентгеновского пучка порядка 1 мкм XVIC контраст может быть сравним с контрастом в режиме НТ, оставаясь, правда, ниже его. Для дислокаций и границ зерен ситуация коренным образом меняется. Как показали расчеты, проведенные в [8], для двумерных дефектов перпендикулярных поверхности, таких, например, как границы зерен, при диффузионной длине порядка 100 мкм XVIC контраст практически всегда выше, чем контраст в режиме НТ. При диффузионной длине 20 мкм XVIC контраст начинает превышать контраст в режиме НТ. измеренный при энергии пучка 35 кэВ, при диаметре рентгеновского пучка меньше 15 мкм. Возможность получать XVIC изображения на лабораторном источнике рентгеновского излучения позволило нам провести экспериментальную проверку результатов расчетов [8]. Так, эксперименты, проведенные с рентгеновским пучком шириной 10 и 30 мкм подтвердили эти результаты и показали, что хорошо коррелируют с расчетными значениями не только соотношение между величинами контраста в методах НТ и XVIC, но и соотношение между значениями контраста при разных диаметрах рентгеновского пучка.

Для дислокаций, перпендикулярных поверхности, ситуация оказалась несколько хуже. Тем не менее, и для дислокаций при диффузионной длине порядка 100 мкм XVIC контраст превышает контраст в режиме НТ при диаметре рентгеновского пучка меньше 20 мкм.

Таким образом, для дислокаций и границ зерен XVIC контраст может превышать контраст в режиме НТ даже при вполне достижимых диаметрах рентгеновского пучка. Следует отметить, что при расчетах функция генерации электронно-дырочных пар описывалась цилиндром с гауссовым распределением интенсивности по радиусу и экспоненциально падающей интенсивностью по глубине и сравнение с экспериментом подтвердило применимость такой модели. В методе LBIC функция генерации в первом приближении может быть описана такой же моделью. Поэтому результаты, полученные для XVIC контраста, могут быть использованы и для описания контраста дефектов в методе LBIC. Таким образом, чувствительность методов XVIC и LBIC при исследовании протяженных дефектов может быть выше, чем в методе НТ.

Кроме того, методы XVIC и LBIC позволяют проводить исследования структур с диэлектрическим покрытием, что в совокупности с более высокой чувствительностью этих методов в материалах с большой диффузионной длиной делает их весьма перспективными для характеристики солнечных элементов на основе кремния. В то же время метод НТ, как правило обладает более высоким пространственным разрешением и более удобен для измерения параметров исследуемого объекта.

- [1] Vyvenko O.F., Buonassisi T., Istratov A.A., Hieslmair H., Thompson A.C., Schindler R., Weber E.R., J. Appl. Phys., 91, 3614 (2002).
- [2] Leamy H.J., J. Appl. Phys., 53, R51 (1982).
- [3] Якимов Е.Б., Зав. Лаб., 68, 63 (2002).
- [4] Fahrtdinov R.R., Feklisova O.V., Grigoriev M.V., Irzhak D.V., Roshchupkin D.V., Yakimov E.B., Solid State Phenomena, 178-179, 226 (2011).
- [5] Fahrtdinov R.R., Feklisova O.V., Grigoriev M.V., Irzhak D.V., Roshchupkin D.V., Yakimov E.B., Rev. Sci. Instr., 82, 093702 (2011).
- [6] Yakimov E.B., Solid State Phenomena, 156-158, 247 (2010).
- [7] Якимов Е.Б., Поверхность, № 9, 10 (2010).
- [8] Шабельникова Я.Л., Якимов Е.Б., Поверхность, № 11 (2012).

Перспективы разработки метода контроля качества вогнутых осесимметричных поверхностей скользящим рентгеновским пучком

И. В. Якимчук¹, А.В. Бузмаков¹, А.В. Андреев², В.Е. Асадчиков¹

¹Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия

²Физический факультет Московского государственного университета
им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

e-mail: yaivan@list.ru

Работа посвящена изучению особенностей нового подхода, предложенного в [1-2], к исследованию качества вогнутых осесимметричных поверхностей рентгеновским пучком. Этот подход основан на эффекте шепчущей галереи, который состоит в том, что акустическая или электромагнитная волна, падающая по касательной на вогнутую поверхность, скользит вдоль неё за счет последовательных отражений. Теоретические и экспериментальные исследования этого эффекта см., например, в [3-9]. В этих работах для упрощения рассматривались лишь цилиндрические поверхности. В [10] детально исследован эффект на вогнутой сферической поверхности. Показано, что с экспериментальной точки зрения работать с вогнутой сферической поверхностью даже проще.

В работах [1-2] описан новый метод диагностики состояния вогнутых сферических поверхностей и продемонстрированы первые экспериментальные изображения поверхности. Принцип этого подхода состоит в следующем. При определенном взаимном расположении поверхности зеркала и источника пучка, распространяющийся в режиме шепчущей галереи, существует лишь в тонком приповерхностном слое, а его проекция на сферическую поверхность представляет собой полосу, проходящую через центр зеркала. В том случае, когда на пути падающего пучка имеется некоторый дефект поверхности, распределение интенсивности отраженного пучка будет иметь соответствующий локальный минимум. Т.о. окончательно отразившись от зеркала, пучок будет «содержать» в себе информацию о качестве той части сферической поверхности, вдоль которой он распространялся. Регистрируя подобно методу томографии последовательность пространственных распределений интенсивности многократно отраженного от вогнутой поверхности пучка, получаемых для различных углов вращения зеркала относительно оси его симметрии, удастся определить пространственное положение и размеры дефектных областей на поверхности зеркала. Отметим, что в роли исследуемых «дефектов» могут быть и нанесенные на поверхность

объекты (например, маска для фотолитографии). В настоящей работе представлены результаты исследований, уточняющих возможности данного метода.

Схема установки, используемой для проведения рассматриваемых исследований, представлена на рис. 1. В качестве источника использовалась рентгеновская трубка с молибденовым анодом и точечным фокусом (0.4x0.4 мм), характеристическая линия не возбуждалась. Детальное описание установки см. в [1].

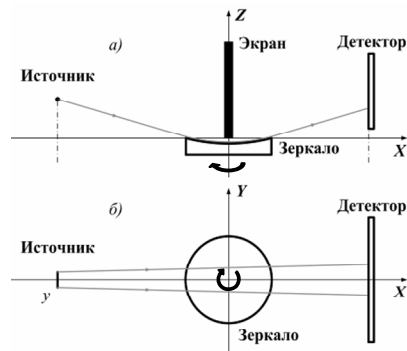


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: (а) вид сбоку, (б) вид сверху.

Сферическое зеркало было изготовлено из плавленого кварца методом глубокой шлифовки и полировки. Его радиус кривизны – 25 см, диаметр – 6 см.

На рис. 2 показана реконструкция отпечатка пальца, сделанного в центре зеркала. На реконструкции отчетливо видны папиллярные линии (рис. 2б). Расстояния между папиллярными линиями, измеренные по результатам реконструкции, находятся в диапазоне от 0.2 до 0.5 мм, что совпадает с прямыми измерениями. Отметим, что дополнительных контрастирующих веществ при создании отпечатка не использовалось, а изображение, по всей видимости, формировалось тонким слоем жира, который имеет линейный коэффициент поглощения от $0,0002 \text{ мкм}^{-1}$ до $0,003 \text{ мкм}^{-1}$ в использованном диапазоне длин волн (от 1.2 \AA до 3 \AA). Ясно, что увидеть такой слабо поглощающий объект за счет абсорбционного контраста в классической радиографии практически невозможно.

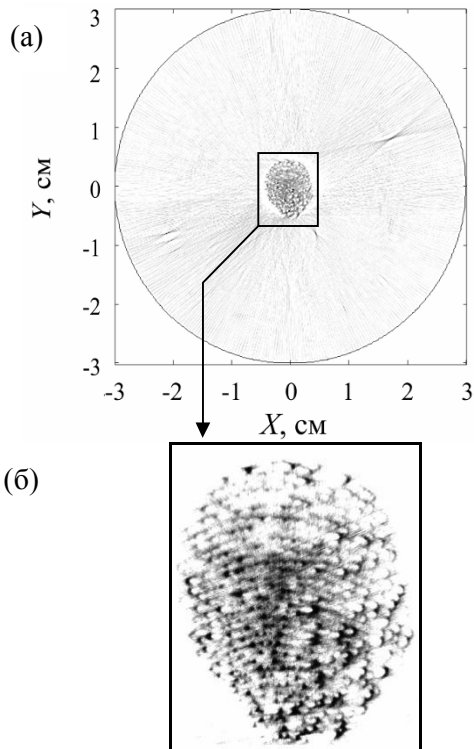


Рис. 2. (а) Реконструкция зеркала с отпечатком пальца; (б) увеличенное изображение отпечатка пальца. Степень почернения пропорциональна ослаблению пучка.

В [11] отмечено ряд особенностей, отличающих данный метод от традиционной томографии. В частности, зондирующий пучок не является ни параллельным, ни коническим. При восстановлении отпечатка пальца мы использовали алгебраический метод реконструкции как в приближении параллельного пучка, так и с учетом истинных траекторий зондирующих лучей. С целью сравнения результатов восстановления на рис. 3 показана разность реконструкций.

Видим, что приближение параллельного пучка привело к пространственным искажениям в поверхностном распределении значений коэффициентов ослабления. Возникшие отклонения в положениях дефектов пренебрежимо малы в центре поверхности (а также отпечатка) и не превосходят 300 мкм во всей области отпечатка пальца, увеличиваясь при удалении от центра к краю до ~ 2 мм. Отметим, что отличия в самих значениях коэффициентов ослабления на дефектах не превышали 10%.

Существенно, что время, затрачиваемое на процедуру реконструкции с учётом реальных траекторий, возросло в ~ 240 раз. Таким образом, с помощью приближения параллельного пучка можно достаточно быстро осуществить процедуру реконструкции, дав качественную оценку состояния

зеркала. Для более точных результатов полезно учитывать реальную геометрию пучка.

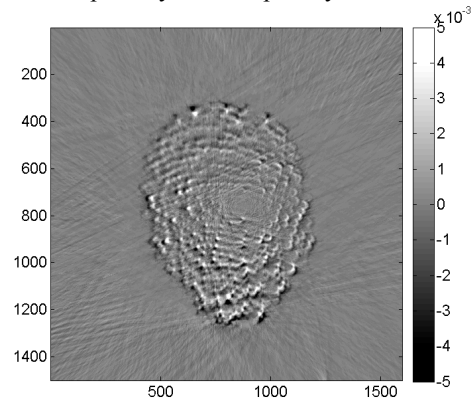


Рис. 3. Разность реконструкций отпечатка пальца, полученных в приближении параллельного пучка и с учётом реальных траекторий. По осям координаты пикселей детектора ($1 \text{ px} = 13 \text{ мкм}$)

Важную роль при формировании пучка, отражающегося от вогнутой поверхности, играет высота $h_{\text{эф}}$ приповерхностного поля зондирующего пучка. Согласно теоретическим оценкам [10] в рассматриваемом случае эта величина составляет $\sim 1.7 \text{ мкм}$.

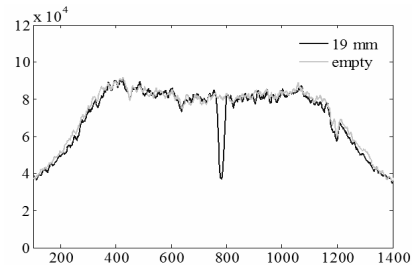


Рис. 4. Распределение интенсивности отраженного пучка при помещении шарика в центр зеркала и без него. По оси абсцисс координаты пикселей детектора ($1 \text{ px} = 13 \text{ мкм}$)

В данной работе оценка $h_{\text{эф}}$ осуществлена экспериментально. С этой целью была проведена серия экспериментов с металлическими шариками разного диаметра (от 1.6 до 23 мм) расположенных в центре зеркала. Ясно, что все они касаются вогнутой поверхности лишь в одной точке. Однако, т.к. скользящий пучок имеет конечную высоту $h_{\text{эф}}$, то на детекторе будут наблюдаться минимумы в распределении интенсивности с конечной шириной (см. рис. 4), зависящей от диаметра шариков:

$$w \approx 2 (h_{\text{эф}} d)^{1/2}$$

Видим, что зависимость $w(d^{1/2})$ является линейной. По угловому коэффициенту экспериментально полученной прямой (рис. 5) можно оценить искомую величину $h_{\text{эф}}$. Отметим, что измеренная зависимость тем больше отличается от линейной, чем тяжелее шарик, что может быть объяснено упругой деформацией поверхности.

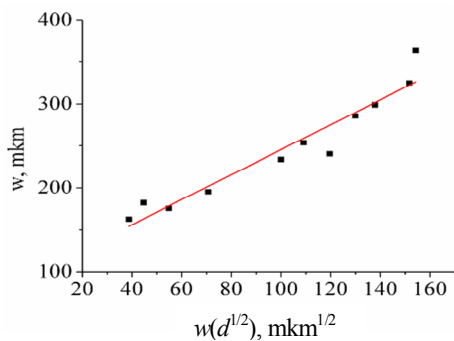
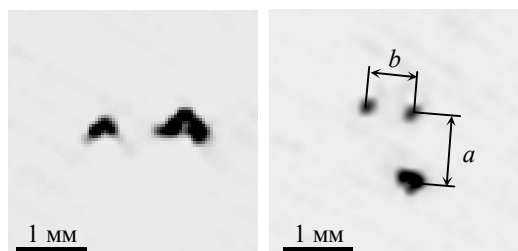


Рис. 5. Зависимость $w(d^{1/2})$, аппроксимированная прямой по МНК

Полученное значение высоты поля составило ~ 2 мкм, что хорошо согласуется со сделанными ранее теоретическими оценками.

Далее нами были изучены вопросы точности восстановления линейных размеров. Для этого вместо шариков на поверхность зеркала помещались винты полукруглой головкой вниз с прямым, либо крестообразным шлицем. В этом случае рассматриваемым методом должны быть обнаружены 2 или 4 точки касания. Расстояния между ними могут быть измерены как на реконструкции (Рек), так и прямым способом (Пр) (например, с помощью штангенциркуля). Увеличенная центральная часть реконструкций винтов представлена на рис. 6.



Величина	Пр	Рек
ширина прямого шлица	1.20 мм	1.22 мм
размер a крест. шлица	0.80 мм	0.85 мм
размер b крест. шлица	1.00 мм	0.97 мм

Рис. 6. Реконструкция областей касания винтов с прямым (слева) и крестообразным (справа) шлицем.

Снизу измеренные размеры шлицев.

Заметим, что касание крестового винта произошло лишь в трех точках, вероятно, вследствие несовершенной формы головки винта. Результаты сравнения измеренных расстояний представлены на рис. 6. Видим, что отклонения в линейных размерах объекта расположенного в центре зеркала не превосходят 50 мкм.

Отдельный интерес представляет исследование возможностей рассматриваемого подхода по обнаружению дефектов с линейными размерами близкими к разрешению детектора (13 мкм). Для решения этой задачи мы использовали человеческий волос, расположенный на поверхности зеркала. Его

толщина, измеренная в оптическом микроскопе, составила ~ 60 мкм. На реконструкции (рис. 7) область касания волосом отчетливо выделяется на фоне остальных дефектов и артефактов реконструкции.

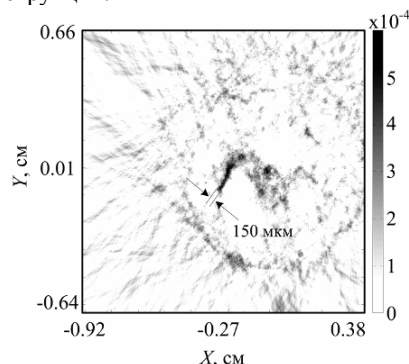


Рис. 7. Реконструкция зеркала с волосом (центральная часть)

Т.о. проведенный анализ свидетельствует о том, что: метод чрезвычайно чувствителен к малейшим изменениям оптической плотности на поверхности; разрешение развиваемого метода в центре поверхности составляет ~ 50 мкм; использование приближения параллельного пучка существенно (в ~ 240 раз) сокращает время реконструкции, превнося незначительные пространственные искажения в распределение локальных коэффициентов ослабления.

- [1]. Якимчук И.В., Бузмаков А.В., Андреев А.В., Асадчиков В.Е. Письма в ЖЭТФ, 94, В.9, 738-741 (2011).
- [2]. Якимчук И.В., Бузмаков А.В., Андреев А.В., Асадчиков В.Е. Кристаллография, 57, №2, 341-344 (2012).
- [3]. Зеркальная рентгеновская оптика. Под ред. А.В.Виноградова. Л.: Машиностроение, 1989, 463 с.
- [4]. Кожевников И.В., Труды ФИАН, 196, 143-167 (1989).
- [5]. Оруджалиев М.Н., Бушуев В.А., ЖТФ, 61, №2, 51-57 (1991).
- [6]. Kaihola L., Appl. Optics, 20, 1269-1270 (1981).
- [7]. Chien L., Golovchenko J.A., Phys.Rev.Lett., 79, 788 (1997).
- [8]. Bukreeva I.N., Kozhevnikov I.V., Physica B, 198, 13-15 (1994).
- [9]. Асадчиков В.Е., Букреева И.Н., Виноградов А.В. и др., Квантовая электроника, 24, 845-850 (1997).
- [10]. Якимчук И.В., Рошин Б.С., Кожевников И.В. и др., Кристаллография, 53, №6, 1111-1117 (2008).
- [11]. Якимчук И.В., Бузмаков А.В., Андреев А.В., Асадчиков В.Е., Современные методы анализа дифракционных данных, Великий Новгород, тезисы докладов, 141-143 (2011).

Агабекян В.Н.	75	Дмитриенко В.Е.	62
Айрапетян К.Т.	70	Домашевская Э. П.	102
Андреев А.В.	150	Дроздов М.Н.	128
Андреева М.А.	7, 102	Егоров А.А.	112
Аристов В.В.	10	Егоров В.К.	49, 51
Артюков И. А.	37	Егоров Е.В.	49, 51
Асадчиков В.Е.	27, 29, 42, 73, 132, 150	Емелин Е.В.	54, 105
Бжеумихова З.	48	Ерко А.	124
Благов А.Е.	27	Забродин И.Г.	89
Богачев С. А.	141	Зимовец И. В.	141
Бржезинская М.	124	Золотов Д.А.	27, 29
Бузанов О.А.	54, 73, 108	Зорина М.В.	118
Бузмаков А.В.	27, 29, 132, 150	Зуев С.Ю.	128
Букреева И.	80	Иржак Д.В.	54, 57, 96, 105, 108
Бусаров А.С.	37	Каськов И.А.	89
Бушуев В. А.	31, 34	Кашкаров В. М.	102
Вайнер Ю.А.	92, 118	Кедало К.А.	62
Виноградов А.В.	37	Кириченко А. С.	141
Вишняков Е. А.	40	Клюенков Е.Б.	92
Волгунов Д.Г.	135	Князев М.А.	65
Волков Ю.О.	42	Кожевников И.В.	42
Воробьев А.А.	73	Кон В. Г.	67, 83, 145
Воронов Д. Л.	40	Кондратенко В. В.	40
Гайкович П. К.	86	Копылец И. А.	40
Геворкян К.М.	75	Кузин С.В.	128, 141
Голованов Д.Г.	95	Кузнецов С. М.	145
Гольденберг Б.Г.	43	Лавров С.Д.	54
Горай Л. И.	45	Лемзяков А.Г.	43
Грибков Б.А.	118	Лопатин А.Я.	128
Григорьев М.В.	108, 145	Лубов М. Н.	45
Григорян П.А.	75	Лугинин М. С.	40
Губжоков Р.	48	Лучин В.И.	128
Гулимова В.И.	27	Маргарян В.В.	70
Гулликсон Э. М.	40	Минеев Е.В.	73
		Мирзоян В.К.	75

Митрофанов А. В.	77	Свинцов А.	124
Монахов И.С.	112	Смирнов И.С.	112
Мухамеджанов Э.Х.	62	Смирнова И.А.	115, 121, 142
Нефедов И.М.	89	Снигирев А. А.	145
Николаев Д.П.	29, 132	Снигирева И. И.	145
Новоселова Е.Г.	112	Стариков С. Д.	86, 92, 118
Норьян С.Н.	70	Старков В.В.	65
Овчинникова Е.Н.	62	Суворов Э.В.	115, 121
Огнев Л.И.	80	Терехов В. А.	102
Орехов А.С.	27	Терещенко Е.Ю.	27
Орлов М. А.	83	Торопов М.Н.	135
Осадчая А.С.	27	Труни К.Г.	75
Парьев Д. Е.	86	Ульянов А. С.	141
Перцов А. А.	141	Фахртдинов Р.Р.	57, 105, 108
Пестов А.Е.	89	Филатова Е.О	42
Плотицына О.А.	108	Фирсов А.	124
Подурец К.М.	27	Фирсов А.	124
Полковников В.Н.	92, 118	Цыбин Н.Н.	118, 128
Попов Н.Л.	37	Чукалина М.В.	27, 29, 132
Прибора В.Н.	95	Чхало Н. И.	86, 89, 135
Прун В.Е.	29, 132	Шабельникова Я. Л.	138
Пунегов В.И.	96, 99	Шарф О.	48
Рагозин Е. Н.	40	Шестов С.В.	128, 141
Резникова Е.Ф.	43	Шишаков А.И.	108
Репченко Ю.Л.	7, 102	Шулаков Е.В.	115, 142
Рощин Б.С.	42	Щербаков А.В.	135
Рощупкин Д.В.	54, 57, 65, 96, 105, 108	Юнкин В. А.	145
Савельев С.В.	27	Якимов Е. Б.	138, 148
Салашенко Н. Н.	86, 89, 92, 118, 128, 135	Якимчук И. В.	150
Самойлова Л.	34	А. Cedola	80
Сахаров С.А.	105	А. Diaz	80
Сенин Р.А.	27, 73	М. Ghannad Dezfouli	75
Серегин А.Ю.	27	Е.Giovine	80
Середин П. А.	102	W. Jark	80
		S. Lagomarsino	80

D.V.Novikov	62
C.Richter	62
F. Scarinci	80
A. Sorrentino	80