

X 射线背散射三维 DuMond 图的理论与实验研究

柯万真¹⁾³⁾ 司尚禹²⁾ 薛莲²⁾ 李中亮^{1)2)3)†}

1) (中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)

2) (中国科学院上海高等研究院上海光源中心, 上海 201204)

3) (中国科学院大学, 北京 100049)

摘要

在晶体 X 射线衍射角趋近 90° 极限条件下, 传统二维 DuMond 图难以完整表征其衍射特性。本文基于 X 射线晶体衍射动力学理论, 通过引入修正的偏差参数, 构建出描述光子能量与二维角度耦合关系的三维 DuMond 图。理论模拟与实验研究结果表明, 该三维 DuMond 图在纵向截面 $(\Delta E, \theta)$ 的投影呈抛物线形; 在横向截面 (θ, ϕ) 上, 随着入射能量偏离背散射能量, 相空间投影由圆斑逐渐变为扩张的圆环结构。本研究精确表征了背散射相空间的几何形态, 直观揭示了极限背散射条件下能量与角度的耦合关系, 为背散射的测量与应用提供了清晰的物理图像与理论支撑。

关键词: X 射线背散射, 三维 DuMond 图, 衍射动力学, 相空间

PACS: 41.50.+h, 61.05.cp, 41.60.Ap

***基金:**国家自然科学基金面上项目(批准号: 12475332), 上海市东方英才计划青年项目(QNZH2024034)

† 通信作者. E-mail: lizhongliang@sari.ac.cn

第一作者. E-mail: kewanzhen@sinap.ac.cn

录用稿件, 非最终出版稿

1 引言

随着 X 射线自由电子激光 (XFEL) 及第四代同步辐射光源技术的发展, 前沿科学研究对 X 射线光学系统的性能提出了更高要求。在此背景下, 晶体衍射角趋近于 90° 的背散射技术, 凭借其兼具毫电子伏特 (meV) 量级的超窄带宽和毫弧度 (mrad) 量级的宽角度接受度的独特优势, 成为光学系统性能突破瓶颈的关键技术之一, 也为 X 射线自由电子激光振荡器 (XFEL) 谐振腔及高分辨非弹性散射谱仪的研制奠定了重要基础^[1-3]。然而, 为实现此类精密光学系统的精确设计与有效操控, 需要深入探究光子能量与晶体衍射角度间的复杂耦合关系。

针对背散射这一极端衍射条件, 学术界已开展了广泛的理论与实验研究。20 世纪 70 年代, Kohra、Matsushita 及 Brümmer 等学者明确指出传统双光束近似在布拉格角接近 90° 时将失效, 并针对性地提出修正理论模型^[4-6]。此后, Caticha 和 Caticha-Ellis 通过系列研究进一步完善了背散射动力学理论^[6-8]。实验与应用方面, Shvyd'ko 等人实现了背散射现象的高精度实验观测, 直接验证了其超高能量分辨率特性^[1,9], Nikulin 等人则初步探讨了背散射的三维衍射现象^[10]。然而, 现有研究仍存在明显的局限性: 其一, 背散射的研究多集中于一维摇摆曲线 (Rocking Curve) 的强度分布, 难以全面反映极端条件下能量与角度间的复杂耦合关系; 其二, 既有 DuMond 图的相关研究与应用多局限于常规衍射^[11-13], 其线性近似的二维形式在背散射条件下已不再适用。尽管 Hsu 等人提出了适用于多晶系统的三维 DuMond 图概念^[14], 但目前尚缺乏可完整描述背散射在三维相空间中几何形态及演化规律的直观物理图像, 这在一定程度上制约了对背散射光学系统性能的深入理解与精确调控。

本文为突破传统一维摇摆曲线及二维 DuMond 图的表征局限, 综合运用 X 射线动力学衍射理论与高精度实验测量方法, 构建并解析了背散射条件下的三维 DuMond 图。以 Si(800) 晶体为研究载体, 系统构建并深入解析背散射条件下的三维 DuMond 图。具体研究工作如下: 首先, 从色散面物理图像出发, 推导适用背散射的修正偏差函数, 并据此建立背散射条件下的三维 DuMond 图; 其次, 利用高精度二维扫描, 对该三维相空间分布的横向及纵向投影进行实验测量, 实验结果清晰呈现背散射截面的形态特征及演化规律, 并与理论预测高度吻合。本研究构建的三维 DuMond 图模型, 从三维相空间视角完善了背散射动力学衍射的物理图像, 为相关实验测量方案设计与技术应用提供了可靠的理论支撑。

2 三维 DuMond 图的理论构建

2.1 色散面到相空间

X 射线在完美晶体中的传播特性可由衍射动力学理论描述。在双光束近似条件下, 晶体内部允许存在的透射波矢量 \mathbf{K}_0 和衍射波矢量 \mathbf{K}_H 通过倒易晶格矢量 \mathbf{H} 关联 ($\mathbf{K}_H = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$), 且必须满足如下色散面基本方程:

$$(K_0^2 - k^2)(K_H^2 - k^2) = K^4 \chi_H^2 C^2 / 4 \quad (1)$$

式中, $k = K(1 + \chi_0/2)$ 为经平均折射率修正后的晶体内平均波数, K 为真空波数, χ_H 为晶体极化率的傅里叶分量, C 为偏振因子。该方程在倒易空间定义了一个双叶旋转双曲柱面结构, 该曲面即为色散面^[1,15]。

当衍射的相互作用可忽略 ($\chi_H = 0$) 时, 色散面由以倒易原点 O 与倒易格点 H 为球心的两个球面 (即埃瓦德球) 构成。当衍射的相互作用存在 ($\chi_H \neq 0$) 时, 两个球面在相交区域分裂为两个不相交的双曲面。衍射效应的激发具有严格的波矢选择性, 仅当入射波矢量落入色散面的特定区域时, 衍射才能发生。该衍射区域的截面形态依赖于衍射几何条件: 当 $\theta_B < 90^\circ$ 时, 截面为圆环; 当 $\theta_B \cong 90^\circ$ 时, 截面为圆盘 [见图 1]。在此物理图像下, 三维 DuMond 图可直观理解为色散面在相空间的投影: 随着入射能量 E 的连续变化, 上述截面在相空间中连续扫过的包络轨迹构成了最终的三维实体。

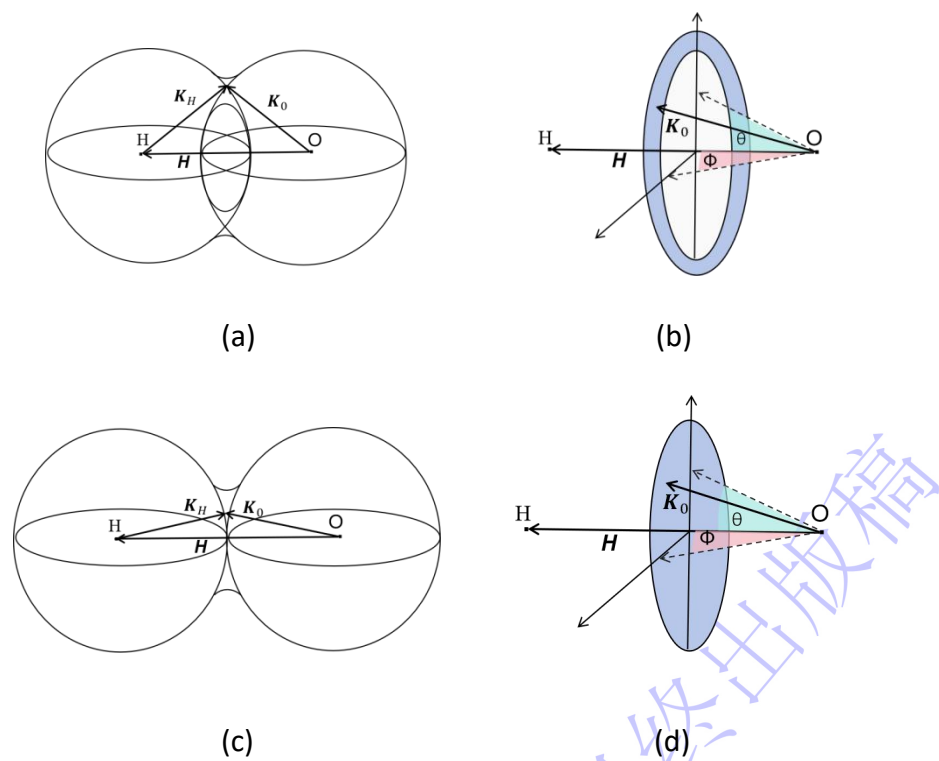


图1 三维色散面及其截面的局部放大示意图(a),(b) $\theta_B < 90^\circ$; (c),(d) $\theta_B \cong 90^\circ$ 。

Fig. 1. Three-dimensional dispersion surfaces and enlarged views of their cross-sections for (a),(b) $\theta_B < 90^\circ$ and (c), (d) $\theta_B \cong 90^\circ$.

2.2 三维DuMond图的动力学理论构建

为构建三维DuMond图的精确理论模型, 本文引入动力学衍射理论中的偏差参数。该参数定量表征了入射波矢量相对于严格布拉格条件的偏离程度^[1,7], 其定义为:

$$\alpha = (2\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{H} + H^2) / K^2 \quad (2)$$

建立如图 1(b)、(d)所示的三维坐标系，入射波矢 \mathbf{K}_0 在该坐标系中可表示为：

$$\mathbf{K}_0 = (K \sin \theta \cos \phi, K \sin \theta \sin \phi, K \cos \theta) \quad (3)$$

其中， θ 和 ϕ 为如图中定义的角度变量，倒易晶格矢量 $\mathbf{H} = (0,1,0)$ ，因此可以推导得到：

$$\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{H} = HK \sin \theta \sin \phi \quad (4)$$

对于背散射情形，有 $\theta = \pi/2 - \Theta$ ，以及 $\Phi = \pi/2 - \phi$ ，所以

$$\sin \theta = \sin(\pi/2 - \Theta) \approx 1 - \Theta^2/2 + O(\Theta^4) \quad (5)$$

同理

$$\sin \phi = \sin(\pi/2 - \Phi) \approx 1 - \Phi^2/2 + O(\Phi^4) \quad (6)$$

将表达式(5)、(6)代入式(3)并且取到二阶近似，得到

$$\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{H} = HK \left(1 - \frac{\Theta^2 + \Phi^2}{2}\right) \quad (7)$$

在 $\Theta \leq 1^\circ$ 的范围内，四阶项的贡献占比不足 2.5×10^{-5} ，因此保留至二阶的近似处理已具有足够的计算精度。

同时，在背散射时， $H = 2K(1 + \varepsilon)$ ，式中 $\varepsilon = (E - E_B)/E_B = \Delta E/E_B$ ， E_B 为由布拉格方程所定义的特征能量， E 为入射光的能量^[8]。将式(7)以及 $H = 2K(1 + \varepsilon)$ 代入式(2)，得到背散射附近的偏差参数 α 的表达式为：

$$\alpha = 2(\Theta^2 + \Phi^2 - 2\varepsilon) \quad (8)$$

上述包含二维角度变量 Θ, Φ 及相对能量偏差 $\Delta E/E_B$ 的解析表达式，构成了描述背散射相空间的完备理论。在衍射动力学理论中，晶体的反射率 R 可以表示为偏差参数 α 的函数，即 $R = R(\alpha)$ ^[1,16]。基于该函数关系，我们不仅能够解析特定条件下的衍射强度，还可以通过数值计算遍历全相空间，进而构建出完整的衍射强度分布图。

为直观展示理论预测的背散射三维相空间分布特性，本文选取 Si(800)晶体进行数值模拟。在角度 Θ, Φ 的范围为 $\pm 0.25^\circ$ ，入射光能量 E 相对于布拉格能量 E_B 的偏离 ΔE 范围为 40meV-100meV(由于折射率修正，实际发生衍射的能量为 $E_B + \omega$)

的条件下，绘制得到衍射强度在 $(\Delta E, \theta, \phi)$ 三维相空间中的分布（图 2），其呈倒置旋转抛物面，此即在背散射条件下的三维 DuMond 图。

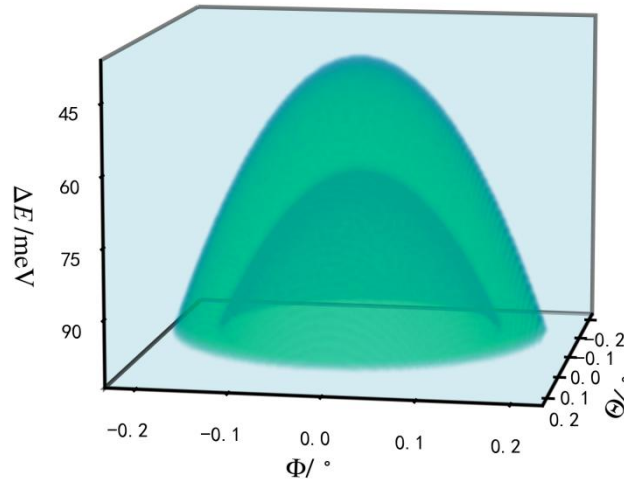


图2 Si(800)背散射的三维DuMond图

Fig.2.The three-demensional DuMond diagram of Si(800) backscattering.

3 实验配置

实验依托上海同步辐射光源（SSRF）X 光学测试线（BL09B）开展^[17]。该束线配备 Si(111)/Si(311) 双晶单色器（DCM），可调制输出 4–30keV 能量区间的单色 X 射线。针对弯铁光源的水平角发散远大于垂直角发散的特点，为满足二维角度扫描的测量需求，本实验引入水平放置的切槽晶体（Channel-cut Crystal），其在压缩能量带宽的同时，可有效抑制水平角发散，使水平与垂直角发散对于测量结果的影响趋于一致。

经过二次衍射调制的 X 射线穿过特制的针孔光电二极管探测器（Pinhole PD detector）中心通光孔（孔径 $R=1\text{mm}$ ），垂直入射至 Si(800) 单晶样品表面，对应光斑尺寸约为 $0.7\text{mm}\times 0.7\text{mm}$ 。满足背散射条件的 X 射线反向衍射后，由置于样品上游的光电二极管探测器接收。Si(800) 晶体样品被安装于高精度转台，该转台具备绕 θ （俯仰）与 ϕ （方位）轴的旋转调节功能。实验中，通过精确调节样品与探测器之间的距离，可实现对探测接受角、中心盲区与信噪比的综合优化。

由于 Si(800) 背散射几何对应极窄的本征能量带宽，且光束线能量存在漂移与标定偏差，直接调制出背散射信号存在较大困难。针对此问题，本文基于立方晶体的几何对称性及多光束衍射特性，设计了能量标定方案。理论研究表明，当入射能量满足 Si(800) 背散射条件（ $E_B=9.13\text{keV}, \theta_B=90^\circ$ ）时，与 (800) 晶面呈 45° 夹角的 {440} 族晶面同时满足布拉格衍射条件（ $\theta_B=45^\circ$ ）^[18]。基于该特性，在 Si(800) 晶体上专门加工出 (440) 与 $(\bar{4}\bar{4}0)$ 晶面的斜面，作为能量校准晶体（Energy-calibration crystal）（见图 3 虚线框）。具体的标定流程如下：首先，调整晶体姿态，使入射光满足 (440) 晶面的衍射条件（衍射光束经由上方预留的缺口出射）；在此基础上，进一步调制出 $(\bar{4}\bar{4}0)$ 晶面的二次衍射。当二次衍射强度

达到峰值时，表明入射光能量已精确匹配 Si(800)的背散射能量，从而完成了对入射光能量的精确标定^[19]。

完成能量标定后，理论上可以通过对各能量切片进行二维角度扫描，实现三维 DuMond 图的完整重构。为提升检测效率，本文只针对特征截面实施测量，重点获取三维 DuMond 图在 $(\Delta E, \theta)$ 平面的投影，以及特定能量切片下其在 (θ, ϕ) 平面的投影。上述特征截面足以反映背散射的三维 DuMond 图空间形态以及衍射特性。

布拉格能量 E_B 由布拉格方程给出，但是存在折射率修正项 ω ，导致实际发生衍射的能量为 $E_B + \omega$ 。此外，在本实验中，调制后的入射光带宽经计算约为 450meV，由于远大于研究对象的本征带宽，所以实际测量的摇摆曲线并非本征摇摆曲线，而是带宽的卷积结果。在对 $(\Delta E, \theta)$ 平面的投影进行测量时，受限于线站单色器步长控制，能量扫描步长为 0.1eV。在对 (θ, ϕ) 平面的投影进行测量时，分别选取了三个具有代表性的能量进行了进行二维角度扫描。实验所涉及的相关参数汇总于表 1。

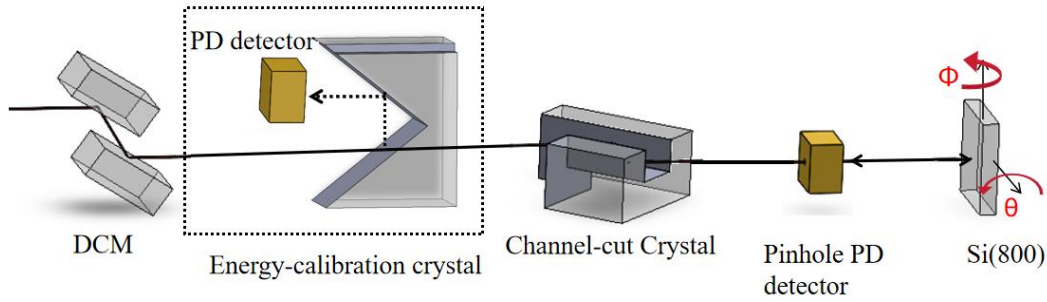


图 3 实验及能量校准系统光路示意图

Fig. 3. Schematic of the experimental setup and the energy calibration system.

表 1 实验条件与物理参数说明

Tabel 1 Experimental Conditions & Physical Parameters

物理参数	数值
布拉格能量 E_B	9.13keV
折射率修正 ω	45meV
入射光能量带宽	450meV
本征带宽	28.47meV
能量扫描步长	0.1eV
入射能量 E 相对于 $E_B + \omega$ 的偏差 δE	400/0/-200meV
角度 θ 步长	0.72arcsec
角度 ϕ 步长	220.32arcsec
探测器死角	0.1392°

4 结果讨论

4.1 背散射三维 DuMond 图在 $(\Delta E, \Theta)$ 平面的投影

为解析光子能量 E 与角度 θ 的耦合关系，首先观察三维 DuMond 在纵向相空间平面 $(\Delta E, \Theta)$ 上的投影特征。图 4 给出了实验测量与理论模拟的对比结果，其中横坐标为入射光子能量 E 相对于布拉格能量 E_B 的偏离 ΔE ，纵坐标为偏离背散射方向的角度偏差 $\Theta=90^\circ-\theta$ 。

实验数据采用“能量-角度”扫描法获取：以 0.1 eV 为步长调节入射光能量，并记录各能量点对应的摇摆曲线，经拼接处理重构出完整的二维相空间图谱，图 4(a)中心出现的空白区域对应于探测器的探测死角。实验入射光束的能量带宽约为 450 meV，显著高于 Si(800)晶体背散射下的本征带宽 (28.47 meV)，导致实测摇摆曲线较本征摇摆曲线发生了明显的展宽。鉴于方程 (5) 仅描述理想单色光的衍射响应，本文在理论模拟中引入了带宽为 450 meV 的能量均匀分布的入射光束模型进行修正，以实现真实入射光束条件的精准模拟。

尽管存在上述的探测死角，图 4(a)仍清晰表征了背散射动力学的核心特征：其衍射强度的相空间分布呈抛物线形态，与常规衍射的 DuMond 图的线性条带特征截然不同。当入射光能量逐渐降低并穿越背散射能量点（即沿抛物线两翼向上延伸），满足布拉格条件的角度偏差 Θ 随能量减小呈非线性降低，其能量相对改变量 $\Delta E/E$ 与角度偏差的平方 Θ^2 成正比，其直观反映了背散射几何所特有的兼具“极窄能量带宽”与“超宽角度接受度”的内禀性质^[1,9]。

进一步分析表明，入射能量向背散射能量逼近过程中，抛物线逐渐收拢且角宽度逐步增大；在背散射能量 ($E_B + \omega$) 附近达到抛物线顶点，对应最大角宽度。能量偏离背散射能量后，衍射表现为残余效应，其角宽度减小，强度衰减至完全消失。从色散面视角来看，该演化过程对应埃瓦德球半径随能量变化时，两球面由相交转为相切并最终分离的动态过程。图 4(c)展示了理论模拟结果与实验测量结果之间轮廓的对比，可以看出轮廓高度吻合，则表明实验与理论模拟结果高度一致，验证了背散射三维 DuMond 图在 $(\Delta E, \Theta)$ 相空间的投影特征，以及其中蕴含的能量与角度二次方耦合关系。

基于上述对背散射三维 DuMond 图在 $(\Delta E, \Theta)$ 平面投影特征的分析可得，背散射摇摆曲线的展宽以入射光束的能量带宽为主导。首先，得益于背散射的超大角接受度 (mrad 量级)，所以光束发散角对于背散射摇摆曲线宽度的影响极小，其次，背散射本征能量带宽极窄 (meV 量级)，其对于摇摆曲线展宽的贡献可忽略。因此，利用背散射的摇摆曲线可直接反演入射光能量带宽，实现对入射光束能量带宽的高精度测量^[20]。

录用稿件

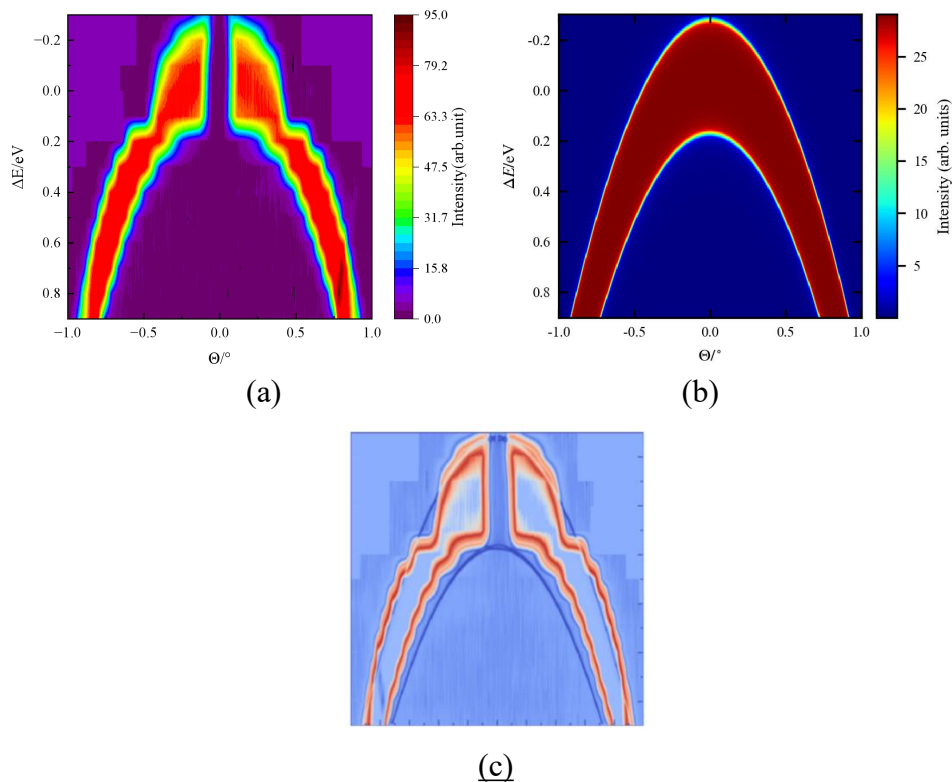
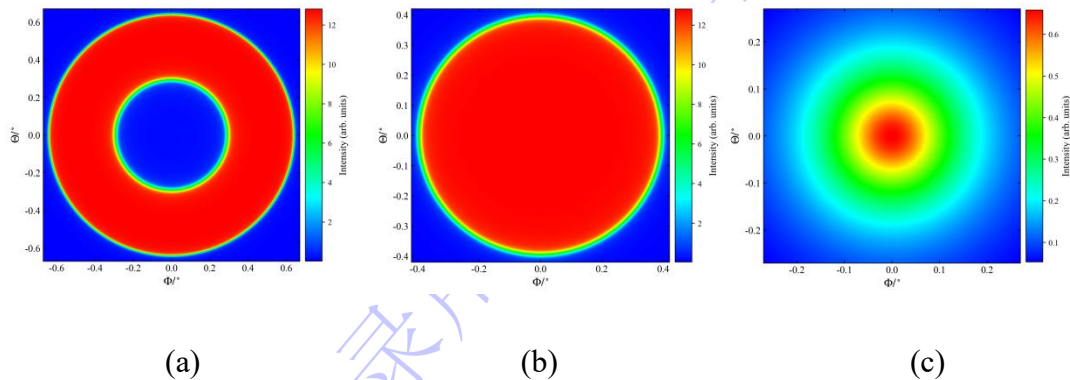


图4 入射光带宽为 450 meV 时在 $(\Delta E, \Theta)$ 平面上的投影。(a) 实验测量结果；(b) 理论模拟结果；(c) 实验与理论结果轮廓对比。

Fig. 4. Projections onto the $(\Delta E, \Theta)$ plane with an incident bandwidth of 450 meV. (a) Experimental measurements; (b) Theoretical simulations; (c) Comparison of Experimental and Theoretical Contour Profiles.

4.2 背散射三维 DuMond 图在 (Θ, Φ) 平面的投影

(Θ, Φ) 平面的投影的测量是借助 $\theta - \phi$ 二维扫描法实现的：先固定一个 ϕ 角，再精确扫描 θ 角，获取各 ϕ 角下的一维摇摆曲线；将不同 ϕ 角对应的曲线在二维相空间中进行拼接，即可完整重建出 (Θ, Φ) 平面上的二维相空间图谱，其中横坐标为横向角度上偏离背散射的角度偏差 $\Theta = 90^\circ - \theta$ ，纵坐标为纵向角度上偏离背散射的角度偏差 $\Phi = 90^\circ - \phi$ 。



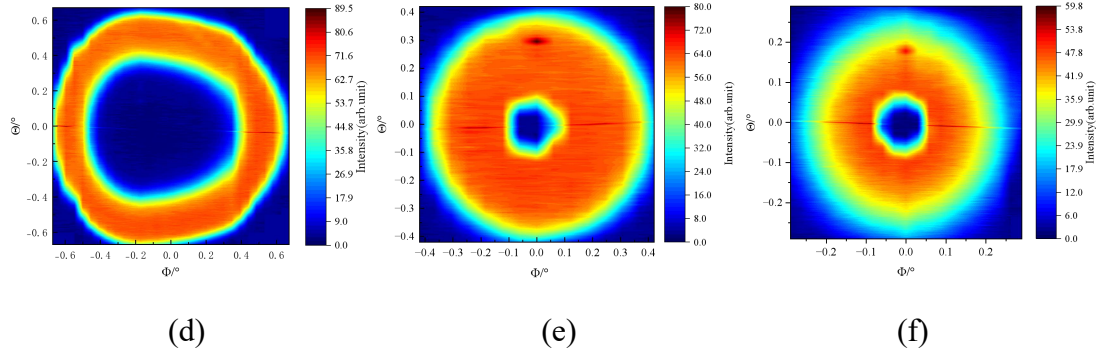


图 5 入射光带宽为 450meV 时，不同能量在 (θ, ϕ) 平面上的投影，(a)-(c) δE 分别为 400、0 和 -200meV 时的理论模拟结果下在 (θ, ϕ) 平面上的投影；(d)-(f) 对应的实验测量结果。

Fig. 5. Theoretically simulative projections onto the (θ, ϕ) plane with an incident bandwidth of 450 meV at (a)–(c) central energies of 400 meV, 45 meV, and -200 meV and (d)–(f) experimental measurements respectively.

表 2 不同能量下， (θ, ϕ) 平面投影的理论实验径向 FWHM 对比。

Table2. Comparison of experimental and theoretical radial FWHM in (θ, ϕ) projections at various energies.

能量偏差 δE	FWHM		偏差	
	理论模拟结果	实验测量结果		
400mV	内径	0.666°	0.778°	16.8%
	外径	1.3327°	1.329°	0.27%
0meV		0.797°	0.804°	0.87%
-200		0.407°	0.526°	29.2%

需要指出的是，图 5 所示的是约 450 meV 带宽下的积分响应，而非理想单色光结果。与既往基于单色光假设所获的相空间分布^[3,21,22]不同，本实验受显著的带宽展宽效应影响，等效于将厚度为 450meV 的能量切片投影至 (θ, ϕ) 平面，致使相空间的投影面积大幅增加。此外，实验图中中心区域出现的圆形空白，系探测器中心开孔导致的探测死角。

在背散射能量下，在倒易空间中，入射波矢量与衍射波矢量对应的两个埃瓦德球面相切，全反射区域在角度空间中最大化并闭合为一个完整的实心圆。当入射能量低于该阈值时，三维 DuMond 图的截面位置沿抛物面轴向向上移动，导

致截面圆的直径迅速收缩，此时为残余衍射。从色散面视角分析，两个埃瓦德球的半径减小并逐渐分离，相切区域缩小直至完全脱离接触。其投影面表现为衍射相空间分布的圆形半径随能量降低而收缩，强度急剧下降，直至完全消失。当入射能量高于 $E_B+45\text{ meV}$ 时，截面位置沿抛物面轴向向下移动，切平面开始切割抛物面的“侧壁”。此时，两个埃瓦德球半径增大并相交，满足衍射条件的区域由中心圆盘转变维外扩的圆环。二维角度分布的拓扑结构由圆盘演变为空心圆环。随着能量进一步升高，截面位置偏离顶点越远，抛物面开口越大，对应的圆环半径也随之扩张。这与实验观测到的圆环扩散现象完全吻合。

图 5 中实验测得的不同能量下衍射相空间分布的拓扑形态及尺寸演化，为定量评估理论模型的准确性，表 2 汇总了各能量点下理论模拟与实验测量的径向 FWHM 数据。其中在 $\delta E=400\text{meV}$ 时相空间分布为圆环状，分布提取内径外径的 FWHM 作为量化指标，在背散射能量附近，实验与理论得到的 FWHM 偏差极小，展现了极高的吻合度，高于和低于背散射能量时的 FWHM 有所增大，但考虑到实验误差，以及不同能量下对于入射光能量带宽的响应存在一定的差别，所以这一结果符合预期。综合而言，实验观测到的拓扑结构与理论模拟呈现出高度的一致性，有力地验证了三维 DuMond 图在描述背散射平面投影特征及其拓扑演化规律上的正确性。

综上所述，尽管 DuMond 图作为分析 X 射线衍射的经典工具已沿用多年，但本研究通过对背散射这一极端条件下的三维相空间的深度拓展，在以下三个维度实现了突破：首先在理论架构上，不同于传统模型仅将衍射动力学视为布拉格方程基础上的宽度修正，本文直接从动力学理论的形式化偏差参数出发，推导了适用于极限背散射条件的修正参数，从而构建了更为严谨的三维 DuMond 模型。其次在物理图景上，本工作将研究视野从常规衍射区域拓展至背散射这一极端条件，首次揭示了该条件下独特的能量与二维角度耦合机制。最后在实验验证上，本研究跨越了以往将 DuMond 图仅作为定性图解工具的局限，通过高精度实验实现了对三维 DuMond 投影的定量测量与比对。这一系列工作不仅在理论上拓展了 DuMond 概念的适用边界，更为高分辨率背散射光学元件的设计与研制提供了坚实的物理依据和分析手段。

5 结 论

本文针对 X 射线背散射极端衍射条件，结合理论推导、数值模拟与实验测量，构建并解析了背散射的三维 DuMond 图。主要结论如下：基于动力学衍射理论，引入适用于背散射的偏差参数，并据此构建了背散射在三维相空间 $(\Delta E, \theta, \phi)$ 中呈倒置旋转抛物面形态的 DuMond 图，该几何模型为光子能量与二维角度的内禀联系提供了精确且统一的理论描述。为验证该模型，本文系统测量了该三维结构在特征截面上的投影。结果表明，实测的投影特征与理论模拟高度一致： $(\Delta E, \theta)$ 平面投影呈现抛物线轨迹，验证了能量-角度的二次色散关系； (θ, ϕ) 平面投影随入射能量偏离背散射点，由实心圆斑演化为空心圆，上述特征构成背散射三维 DuMond 图的直观物理图像。该物理图像的确立，为高精度光束表征提供了关键理论基础。研究证实，利用背散射摇摆曲线的投影展宽机制可高精度反演入射光束能量带宽；其三维几何特征则为能量与角度的精密对准提供直观指引，确保了背散射实验方案的精准实施。

感谢中国科学院高能物理研究所张小威研究员、刁千顺博士、洪振博士以及

中国科学院微系统与信息技术研究所的莫秋祺博士、赵昌哲博士的帮助。

参考文献

- [1] Shvyd'ko Y 2004 *X-Ray Optics: High-Energy-Resolution Applications* (Berlin: Springer) pp10-103.
- [2] Kim K J, Shvyd'ko Y, Reiche S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 244802
- [3] Stetsko Y P, Keister J W, Suvorov A, Coburn D S, Kodituwakku C N, Cunsolo A, Cai Y Q 2011 *Proc. SPIE* **8141** 81410R.
- [4] Kohra K, Matsushita T 1972 *Z. Naturforsch. A* **27** 484
- [5] Brümmer O, Höche H R, Nieber J 1979 *Phys. Stat. Sol.(a)* **53** 565.
- [6] Caticha A, Caticha-Ellis S, 1982 *Phys. Rev. B.* **25** 971.
- [7] Caticha A, Caticha-Ellis S, 1984 *AIP Conference Proceedings* . **118** 220.
- [8] Caticha A, Caticha-Ellis S, 1990 *Phys. Stat. Sol.(a)*, **119** 47.
- [9] Shvyd'ko Y, Gerdau E, Jaschke J, Leupold O, Lucht M, Ruter H D 1998 *Phys. Rev. B.***57** 4968.
- [10] Nikulin A Y, Davis J R, Cookson D J, 1998 *Phys. Stat. Sol.(a)* **169** 3.
- [11] Zhang Y, Li Z L, Si S Y, Xue L, Luo H X,Zhang X W, Hu J 2024 *Nucl. Sci. Tech.* **35** 110
- [12] Zhao C Z, Si S Y, Zhang H P, Xue L, Li Z L, Xiao T Q 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 046101(in Chinese)[赵昌哲, 司尚禹, 张海鹏, 薛莲, 李中亮, 肖体乔 2022 物理学报 **71** 046101]
- [13] Yang J L, Li Z L, Li T, Zhu Y, Song L, Xue L, Zhang X W 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 104101 (in Chinese) [杨俊亮, 李中亮, 李瑋, 朱晔, 宋丽, 薛莲, 张小威 2020 物理学报 **69** 104101]
- [14] Xu S, Li R 1988 *J. Appl. Cryst.* **21** 213
- [15] Mai Z H 2020 *X-ray Diffraction Dynamics: Theory and Applications* (Beijing: Science Press) pp19-26 (in Chinese) [麦振洪 2020 X射线衍射动力学: 理论与应用(北京: 科学出版社) 第19-26页]
- [16] Xu Z C, Guo C L, Zhao Z Y, Xu J Y, Zhou S M, Qi Z M, Fukamachi T, Negishi R, Nakajima T 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 1520 (in Chinese) [徐章程, 郭常霖, 赵宗彦, 徐家跃, 周圣明, 戚泽明, 深町共荣, 根岸利一郎, 中岛哲夫 1998 物理学报 **47** 1520]
- [17] Li Z L, Fan Y C, Xue L, Zhang Z Y, Wang J 2019 *AIP Conference Proceedings* 2054 Taiwan, China, June 10-15, p060040
- [18] Sutter J P, Alp E E, Hu M Y, Lee P L, Sinn H, Sturhahn W, Toellner T S 2001 *Phys. Rev. B.* **63** 094111
- [19] Si S Y, Li Z L, Jia W H, Xue L, Luo H X, Xu J C, Shen B F, Zhang L G, Ji L L,

Leng Y X, Tai R Z 2024 *Nucl. Sci. Tech.* **35** 51

[20] Li C, Liu M T, Zhang Z Y, Xue L, Zhang Y, Luo H X, Li J, Li Z L 2020 *Acta Opt. Sin.* **40** 1934001 (in Chinese) [李闯, 刘孟廷, 张增艳, 薛莲, 张艳, 罗红心, 李炯, 李中亮 2020 光学学报 **40** 1934001]

[21] Huang X R, Jia Q, Wiczorek M, Assoufid L 2014 *J. Appl. Cryst.* **47** 1716

[22] Stetsko Y P, Keister J W, Coburn D S, Kodituwakku C N, Cunsolo A, Cai Y Q 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 155503

录用稿件，非最终出版稿

Theory and Experiment Study of the 3D DuMond Diagram in X-ray Backscattering

Ke Wanzhen¹⁾³⁾ Si Shang-Yu²⁾ Xue Lian²⁾ Li Zhong-Liang¹²³⁾ †

1) (Shanghai Institute of Applied Physics, China Academy of Sciences, Shanghai 201800,
China)

2) (Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese
Academy of Sciences, Shanghai 201204, China)

3) (University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract

X-ray backscattering diffraction ($\theta_B \cong 90^\circ$) exhibits an ultra-narrow intrinsic energy bandwidth at the meV scale together with a relatively large angular acceptance on the mrad scale, making it essential for high-resolution X-ray optics such as monochromators and X-ray free-electron laser oscillator (XFEL) cavities. However, conventional descriptions based on one-dimensional rocking curves or two-dimensional DuMond diagrams fail to capture the intrinsic coupling between photon energy and angular variables under this extreme diffraction condition, thus limiting a comprehensive understanding of the diffraction behavior.

In this work, a three-dimensional (3D) DuMond diagram for X-ray backscattering is systematically established and experimentally validated using a Si(800) crystal as a model system. Starting from the geometric representation of dispersion surfaces in reciprocal space, a modified deviation parameter is derived within the framework of dynamical diffraction theory. This formulation explicitly incorporates both two-dimensional angular deviations and photon energy, enabling a unified and quantitative description of the diffraction process in a three-dimensional phase space. Based on this theoretical model, numerical simulations are performed to reconstruct the full diffraction intensity distribution, revealing that the 3D DuMond diagram forms an inverted paraboloid of revolution in the coupled energy-angle phase space.

To verify the validity of the theoretical model, experiments were carried out at the BL09B beamline of the Shanghai Synchrotron Radiation Facility (SSRF). By scanning rocking curves under different conditions, the characteristic projections of the three-dimensional DuMond diagram in both the transverse (θ, ϕ) and longitudinal ($\Delta E, \theta$) phase spaces were reconstructed. The results show that: (i) the longitudinal projection in the energy-angle plane exhibits a clear parabolic profile, directly confirming the quadratic coupling relationship between energy deviation and angular deviation; (ii) the transverse projection in the two-dimensional angular space undergoes a distinct topological evolution, evolving from a filled disk to an expanding annulus as the incident energy increases away from the backscattering energy. The experimentally measured phase-space distributions and their full width at half maximum (FWHM) are in good quantitative agreement with theoretical simulations.

This work provides a three-dimensional phase-space framework for describing X-ray backscattering, revealing the intrinsic energy-angle coupling mechanism and offering a clear physical picture of the diffraction process. It establishes a solid theoretical and experimental foundation for precision metrology and the design of high-resolution backscattering-based X-ray optical systems.

Keywords: X-ray Backscattering, 3D DuMond Diagram, Diffraction Dynamics, Phase Space

* Project was supported by the General Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12475332) and the Youth Project of the Shanghai Oriental Talent Program (No. QNZH2024034)

† Corresponding author. E-mail: lizhongliang@sari.ac.cn
The first author. E-mail: kewanzhen@sinap.ac.cn

录用稿件，非最终出版稿