



晶体X射线劳厄衍射分束特性研究

赵昌哲 司尚禹 张海鹏 薛莲 李中亮 肖体乔

Beam splitting characteristics of crystal X-ray Laue diffraction

Zhao Chang-Zhe Si Shang-Yu Zhang Hai-Peng Xue Lian Li Zhong-Liang Xiao Ti-Qiao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 046101 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211674

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211674>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

多晶体光路配置的X射线衍射特性及在表征同步辐射光束线带宽上的应用

Characteristics of multi-crystals monfiguration X-ray diffraction and application in characterizing synchrotron beamline bandwidth

物理学报. 2020, 69(10): 104101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200165>

上海光源硬X射线相干衍射成像实验方法初探

Preliminary exploration of hard X-ray coherent diffraction imaging method at SSRF

物理学报. 2020, 69(3): 034102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191586>

共振X射线衍射研究高温超导 $\text{Sr}_2\text{CuO}_{3.4}$ 晶体中的调制结构

Resonant X-ray diffraction studies on modulation structures of high temperature superconducting sample $\text{Sr}_2\text{CuO}_{3.4}$

物理学报. 2019, 68(18): 187401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190494>

一种点光源的自适应束斑X射线衍射仪的研制

A type of X-ray diffractometer with adaptive X-ray spot sizes

物理学报. 2021, 70(1): 010701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201228>

利用X射线衍射技术对压电材料本征与非本征起源探究的研究进展

Research progress of the investigation of intrinsic and extrinsic origin of piezoelectric materials by X-ray diffraction

物理学报. 2020, 69(12): 127711 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200301>

高压高应变率加载下多晶相变的原位X射线衍射

In situ observation of phase transition in polycrystalline under high-pressure high-strain-rate shock compression by X-ray diffraction

物理学报. 2020, 69(24): 246201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200929>

晶体 X 射线劳厄衍射分束特性研究*

赵昌哲¹⁾²⁾ 司尚禹^{1)2)3)†} 张海鹏¹⁾²⁾ 薛莲¹⁾³⁾ 李中亮¹⁾³⁾ 肖体乔^{1)2)3)‡}

1) (中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)

2) (中国科学院大学, 北京 100049)

3) (中国科学院上海高等研究院上海光源中心, 上海 201204)

(2021 年 9 月 8 日收到; 2021 年 10 月 28 日收到修改稿)

本文基于 X 射线衍射动力学分析了劳厄晶体的分束特性, 模拟了晶体吸收和入射光角发散对于透射光和衍射光摇摆曲线的影响, 定量给出晶体衍射面内角调节范围和晶体加工厚度对于劳厄衍射分束比的调制. 在实验中, 采用分析晶体和分束晶体的消色散配置限制入射光角发散的影响, 实现 300 μm 厚 Si(220) 晶体面内角调节劳厄衍射分束的精确测量, 并得到 300 μm , 400 μm 和 500 μm 厚度 Si 晶体分束比的调节范围, 实现了透射光和衍射光强度的定量调制.

关键词: X 射线衍射动力学, 劳厄衍射, 晶体分束器, 同步辐射**PACS:** 61.05.cp, 41.50.+h, 41.85.-p, 41.60.Ap**DOI:** 10.7498/aps.71.20211674

1 引言

分束器 (beam splitter) 是将一束光分成两束或多束的光学装置, 它是许多光学实验的重要组件. 相比可见光, X 射线具有波长短、穿透能力强的特点, 可见光波段下的光学元件难以适用, 因而需要发展适用于 X 射线调控的光学元件. 完美晶体的原子层间距与 X 射线波长的尺度为同一个量级, 可以利用晶体的衍射效应来实现对 X 射线束的调控^[1]. 同步辐射是高品质的 X 射线源, 具有高准直、高亮度、低发散度、波长连续可调等优点, 有力地推动了晶体 X 射线衍射领域的发展^[2].

同步辐射提供的高准直和高亮度的 X 射线是进行无损、高分辨成像的理想光源^[3,4]. 随着光源品质的不断提高和晶体学的发展, X 射线成像实验需

要同时实现多组数据的采集, 如 X 射线鬼成像 (X-ray ghost imaging, XGI)^[5,6], 单脉冲多角度成像 (X-ray multi-projection imaging, XMPI)^[7,8]. 其中 XGI, 又名关联成像, 通过一束光路经分束后两束光路的关联运算来重构图像, 对于分束后两束光路的关联性质有极高的要求, 关联性越好, 成像效率也就越高, 也就越接近 XGI 低剂量高分辨成像的目标; XMPI 是利用晶体的多光束衍射效应将入射光分为不同出射角的多束衍射光, 这样可以同时获取样品的不同角度的投影信息, 为超快过程中样品三维状态的捕捉提供了有力支持. 因此, 实现 X 射线的定量分束成为科学实验的关键技术.

X 射线分束技术通常利用完美晶体的衍射效应, 将 X 光束分为衍射光束和透射光束. 根据几何光学结构的不同, X 射线衍射分束技术可以分为两类, 即劳厄 (Laue) 衍射分束和布拉格 (Bragg) 衍

* 中国科学院青年促进会项目 (批准号: 2018297) 和国家重点研发计划项目 (批准号: 2017YFA0206004, 2017YFA0403801) 资助的项目.

† 通信作者. E-mail: sishangyu@zjlab.org.cn

‡ 通信作者. E-mail: xiaotiqiao@zjlab.org.cn

射分束. 劳厄衍射透射光与衍射光位于晶体的同侧, 衍射面与晶面垂直; 布拉格衍射透射光与衍射光位于晶体的异侧, 衍射面与晶面平行. 对于布拉格衍射而言, 衍射光受晶体表面制作工艺的影响, 晶格间应力产生成像的畸变; 相反, 劳厄衍射面处于晶体内部, 晶格排列相对整齐, 受晶体加工影响较小. 理论上, 对称劳厄衍射且无吸收时, “薄”晶体可实现 1:1 分束的作用^[9].

硅单晶劳厄衍射分束的研究可追溯至 X 射线干涉仪的研制^[10], 干涉仪利用 Si(220) 来分出衍射光束和透射光束. 单晶硅劳厄分束器^[5,6,11,12]的分束效果, 受到晶体结构、应力、空间匹配等因素的影响, 实现理想的定量分束较为困难, 需要对晶体劳厄分束的特性进行系统研究. 本文从 X 射线衍射动力学出发, 利用相同指数面的分析晶体调制出与分束晶体带宽相匹配的光束, 在与该分析晶体消色的空间配置下, 系统研究各因素对晶体分束特性的影响并在国内首次实现了透射光和衍射光分束比的定量调控.

2 X 射线衍射动力学理论分析

2.1 X 射线衍射运动学

1912 年劳厄提出晶体 X 射线的劳厄衍射理论, 随后布拉格给出了 X 射线衍射方向和衍射光斑实际位置的数学说明. 当一束平行 X 射线入射到理想晶体上时, 衍射光束满足布拉格衍射方程:

$$2d_{hkl}\sin\theta_B = n\lambda, \quad (1)$$

其中, d_{hkl} 为晶体 (hkl) 衍射面的晶格面间距, θ_B 为衍射的布拉格角, λ 为 X 射线波长, n 是衍射级次. 其衍射强度正比于 $|F|^2$, 其中 F 为结构因子. 对于 Si 单晶而言:

$$F_{hkl} = \begin{cases} 8f_{\text{Si}}, & \text{all even and } h+k+l=4n, \\ 0, & \text{all even and } h+k+l=4n+2, \\ (4+4i)f_{\text{Si}}, & \text{all odd and } h+k+l=4n+1, \\ (4-4i)f_{\text{Si}}, & \text{all odd and } h+k+l=4n+3, \\ 0, & \text{other.} \end{cases} \quad (2)$$

即当衍射指数面 (hkl) 奇偶混合或全偶且 $h+k+l=4n+2$ 时出现消光, 其中 f_{Si} 为硅原子散射因子, 与电子分布函数互为傅里叶变换. 对于无吸收薄晶体, X 射线衍射运动学只能给出衍射光的近似出射

方向, 无法给出衍射光和透射光分束比以及摇摆曲线带宽的定量分析.

2.2 X 射线衍射动力学

X 射线衍射动力学理论考虑波场之间的交互作用, X 射线由麦克斯韦方程组描述, 晶体视为周期性分布的介质, 电子分布函数由薛定谔方程给出, 晶体内波场是同时满足布拉格反射定律和边界条件的解^[13]. 在平面波双光束且无吸收近似下, 在晶体内部, 随着 X 射线的不断传播, 入射波和衍射波之间相互交换能量. 这也就表明, 随着晶体厚度的改变, 入射波光强与衍射波光强的比值会发生变化, 这对晶体分束器是至为重要的一点. 根据完美晶体 X 射线衍射动力学理论 (平面波近似)^[14-16], 考虑无吸收情况, 可得透射系数 T 和反射系数 R

$$T(\eta) = \frac{I_t}{I_0} = \frac{1}{1+\eta^2} \left(\eta^2 + \cos^2 A \sqrt{1+\eta^2} \right), \quad (3)$$

$$R(\eta) = \frac{I_r}{I_0} = \frac{\sin^2 A \sqrt{1+\eta^2}}{1+\eta^2}, \quad (4)$$

式中, I_t , I_r 和 I_0 分别表示透射束强度、衍射束强度和入射束强度; η 是偏离因子, 是 $\Delta\theta$ (入射束对布拉格角的偏移) 的函数, 可表示为 $\eta(\Delta\theta)$; A 是厚度因子, $A \propto t$, 其中 t 表示厚度.

根据 (3) 和 (4) 式, 可以得出对称劳厄 Si(220)@15 keV 处透射率与反射率随偏移角 $\Delta\theta$ 的变化曲线, 其中晶体厚度 300 μm . 如图 1 所示, 红色曲线代表透射束归一化强度, 蓝色曲线代表衍射束归一化强度. 在无吸收的情况下, 随着偏移角 $\Delta\theta$ 的变化, 始终 $T(\eta) + R(\eta) = 1$, 符合能量守恒定律. 其中, 透射波峰对应衍射波谷, 反之亦然, 透射束与衍射束发生了能量交换, 称为摆动效应. 这就意味着, 入射光束偏离布拉格角会造成透射光束与衍射

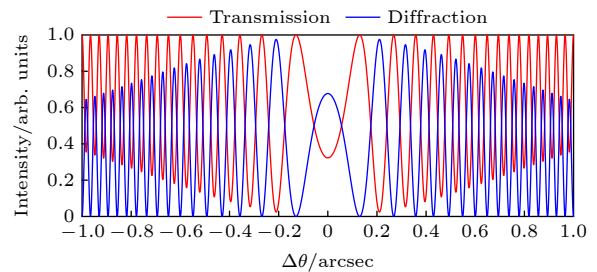


图 1 透射率与反射率随偏移角 $\Delta\theta$ 的变化曲线 (1 arcsec = 1/3600 degrees)

Fig. 1. Transmittance and reflectance curve with offset angle $\Delta\theta$ (1 arcsec = 1/3600 degrees).

光束强度比值的变化. 从 (3) 式中也可以看出, 随着晶体厚度的变化, 透射率和反射率周期性改变, 也就是说晶体厚度的改变也会造成透射光束与衍射光束强度比值的变化.

在实验中, 完全平行的单色光束是不存在的, 上海同步辐射光源 (Shanghai Synchrotron Radiation Facility, SSRF)^[17] BL09B 光学测试线的能量带宽为 5 eV@10 keV^[18], 因此实际测得的摇摆曲线是带宽内光强的平均值.

2.3 晶体衍射追迹

XOP(X-ray oriented programs) 是一款适用于同步辐射光径迹追踪的图形化用户交互程序, 广泛应用于同步辐射光束线设计中^[19], 其中的 XCRYSTAL 模块利用衍射动力学理论来描述完美晶体的衍射效应^[20,21]. 一般来说, 具有与 X 射线波长相近的周期性晶格结构便可以发生衍射, 具有该结构的光学元件可用来做 X 射线波段的分束器, 实验中完美的硅单晶是分束器的理想选择. 如前所述, 对于布拉格衍射, 其相对晶面的入射角较小, 衍射效率高, 透射光束相对于衍射光束较弱, 同时实现衍射光与透射光的探测需要更薄的晶体, 超薄晶体对单晶硅的制作工艺提出了极高要求; 并且布拉格衍射发生于晶体表面, 易受晶体表面应力和晶格缺陷的影响, 衍射光斑的不均匀特性不利于成像实验的开展. 因此, 本文在模拟及后续实验中选取完美 Si 晶体的劳厄衍射进行分束, 选取 Si(220)@15 keV 晶面作为衍射面, 从而保证衍射光具有较高的光子通量.

在模拟中, 考虑光电效应所引起的吸收项, 温度因子设为 1. 在折射校正后的布拉格角附近对称扫描, 角度扫描范围为 $-5''$ 到 $+5''$ ($''$ 为 arcsec), 扫描精度设为每角秒 100 步. 根据 2.2 节 X 射线衍射动力学的计算结果, 改变晶体厚度会引起衍射光束和透射光束强度的变化, 是一个此消彼长的过程. 结合现有单晶硅片制作工艺, 在晶体厚度较小改变 (0.5 μm) 和晶体厚度较大改变 (100 μm) 的情况下, 模拟了晶体衍射光束和透射光束的相对强度变化, 以及两光束强度比值的变化, 模拟结果如图 2 和图 3 所示.

图 2 中横坐标是扫描角度相对布拉格角的偏移, 单位为 arcsec, 纵坐标是衍射束和透射束的归一化强度, 红色曲线是透射束的强度分布, 蓝色曲线是衍射束的强度分布. 理论计算表明, Si(220)@15 keV 的消光距离 (即两个极大值对应的晶体厚度差) 为 29.8 μm . 在布拉格角附近, 当晶体厚度的变化小于消光距离时, 随着扫描角度的改变, 衍射波与透射波强度呈线性变化. 因此, 实验中可以通过转动晶体的面内角来实现厚度的微调, 从而实现衍射波与透射波强度的调制. 绿色窗口部分的带宽为 $2.6''$, 这是 Si(220) 在能量 15 keV 下的本征达尔文宽度, 这也是实验上所探测到的窗口大小.

从图 3 可以看出, 在晶体厚度间隔较大的情况下, 由于晶体吸收的影响, 光强整体呈下降趋势, 同时衍射束与透射束的强度比会出现较为明显的波动, 在晶体厚度为 400 μm 时, 两光束比值更为接近 1:1. 对比 3(d)—(f) 与图 3(a)—(c), 可以看出晶体的吸收会引起透射光曲线的非对称和峰位偏

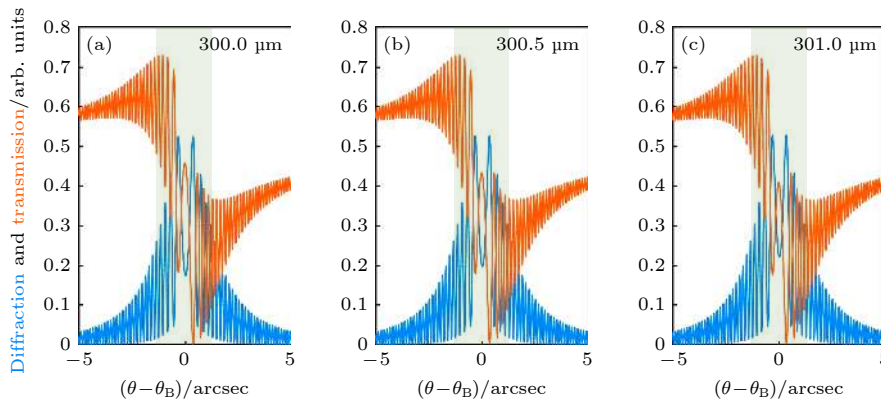


图 2 XOP 模拟出的不同厚度 Si 单晶的摇摆曲线 Si 单晶厚度分别为 300 μm (a), 300.5 μm (b), 301 μm (c) 的衍射和透射强度分布曲线, 没有经过强度平均的处理

Fig. 2. The rocking curves of Si crystal with different thicknesses simulated by XOP: Diffraction and transmission intensity distribution curves of Si crystal with thickness of 300 μm (a), 300.5 μm (b), 301 μm (c), without intensity averaging.

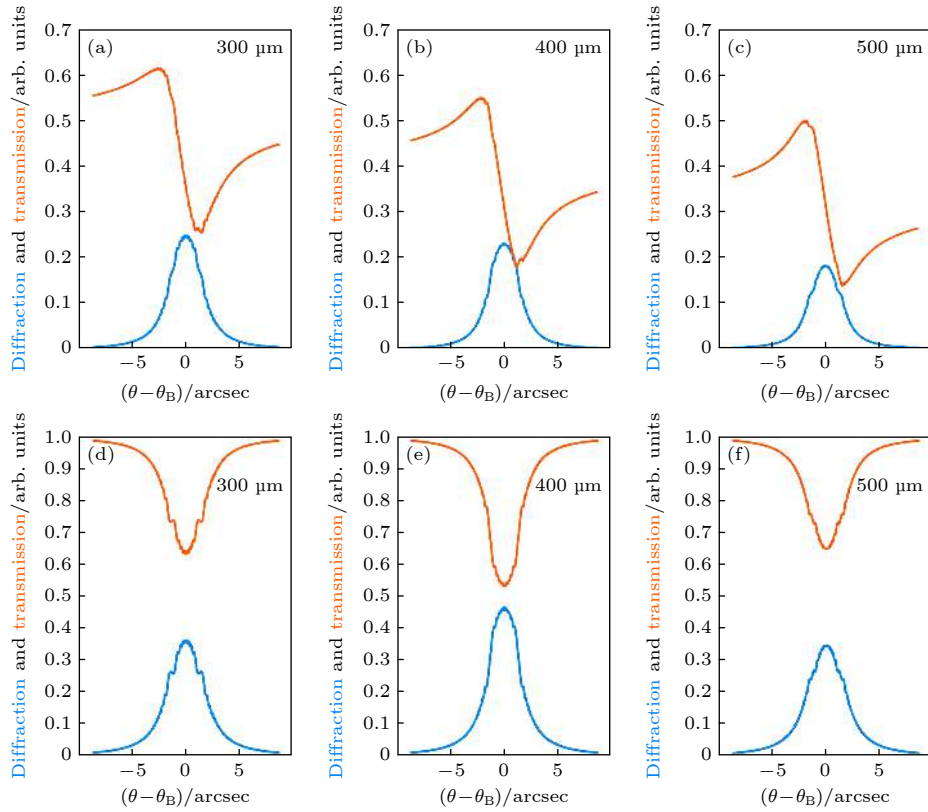


图3 XOP模拟出的不同厚度Si单晶的摇摆曲线 (a)–(c) Si单晶厚度分别为300 μm, 400 μm和500 μm的衍射和透射强度分布曲线, 经过2.6° 角度窗口强度平均的处理; (d)–(f)与(a)–(c)对应, 为无吸收情况下的衍射和透射强度分布曲线, 经过2.6° 角度窗口强度平均的处理

Fig. 3. The rocking curves of Si crystal with different thicknesses simulated by XOP. (a)–(c) Diffraction and transmission intensity distribution curves of Si crystal with thickness of 300 μm, 400 μm and 500 μm, under 2.6° angle window intensity averaging; (d)–(f) correspond to (a)–(c), which are the diffraction and transmission intensity distribution curves without absorption, which are processed by 2.6° angle window intensity averaging.

移. 从XOP模拟的结果看, 不论是晶体面内角造成的晶体厚度的微小变化 (0.5 μm), 还是晶体厚度的较大变化 (100 μm), 均会引起衍射束与透射束强度比值的改变, 尤其是晶体厚度为400 μm时, 两束光强比值接近1:1. 因此, 在实验中通过调节晶体衍射面内角可以“微调”分束比, 而改变晶体厚度可以“粗调”分束比.

2.4 利用分析晶体进行空间配置

实验中需要考虑入射光束角发散的影响. 分束晶体可以看作一个滤波器, 滤波窗口也就是分束晶体的本征达尔文带宽, 探测到的衍射束带宽为入射束角发散和晶体本征带宽的卷积. 要调制出接近本征带宽的衍射光, 滤波器需要与入射束带宽相匹配才可以. 通常用晶体衍射的DuMond图来分析多晶配置的入射光束和衍射光束的能量宽度与角宽度的内在联系^[17]. 图4(a)为完美晶体衍射的DuMond

图, 动力学衍射效应导致光束衍射角展宽 ω_D , 也就是晶体的本征达尔文宽度. 根据布拉格公式 ((1) 式) 的微分形式:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta\theta}{\tan\theta_B}. \quad (5)$$

可以求得其能量带宽 $\Delta\lambda_D$. 图中 ω_D 和 $\Delta\lambda_D$ 框定的蓝色窗口, 即为晶体本征衍射窗口. 从图4可以得出, 平行入射的白光, 其出射光会有一定的能量分布, 具有角发散的单色入射光其出射光会有一定的角度分布. 在图4(b)中, 分析晶体DuMond窗口固定不动, 分束晶体DuMond窗口通过角度扫描逐步靠近, 当两窗口出现交叠时, 探测器上探测到信号, 探测所得结果是两窗口的卷积. 消色散配置下, 在扫描的过程中两DuMond窗口可以完全重合, 这也就意味着衍射束与透射束的角发散达到一致, 衍射晶体的本征特性被表征出来. 相比图4(c)色散型的光路实验配置, 随着蓝色箭头的移动方

向, 得到不同角发散和不同能量带宽的衍射束, 这显然与透射光束带宽有差别. 根据上述分析, 最终实验选择了图 4(b) 所示的消色散型的光路配置.

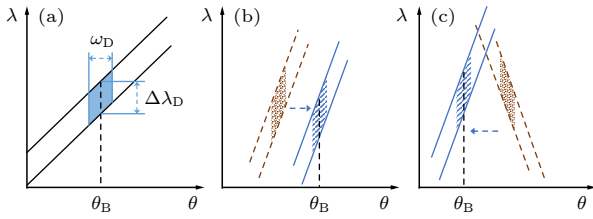


图 4 (a) 完美晶体衍射的 DuMond 图; (b) 消色散 (+n, -n) 配置条件下, 分束晶体扫描分析晶体出射光的 DuMond 图; (c) 色散 (+n, +n) 配置条件下, 分束晶体扫描分析晶体出射光的 DuMond 图. 斜线区域是分析晶体的 DuMond 窗口, 散点区域是分束晶体的 DuMond 窗口

Fig. 4. (a) DuMond diagram for perfect crystal diffraction; (b) DuMond diagrams during scanning the output beam of the analyzer by beam splitter with the non-dispersive (+n, -n) configuration; (c) DuMond diagrams during scanning the output beam of the analyzer by beam splitter with the dispersive (+n, +n) configuration. The oblique line region is the DuMond window of the analyzer and the point region is the DuMond window of the beam splitter.

3 实验配置及内容

在上海光源光学测试线 (BL09B)^[22] 进行了晶体不同面内角和不同厚度的劳厄衍射实验. X 光学测试线是专用于光束线设备和光学元件检测的线站, 配有 Si(111) 双晶单色器 (double crystal monochromator, DCM), 可以提供 5—30 keV 的单色光. 在实验棚屋光学平台上配有 X 射线晶体衍射用的精密转台 (精度 0.01") 和用于改变晶体衍射面内角的旋转平台 (精度 14.4"), 两个光电二极管分别用于探测衍射束和透射束, 电流表用于记录探测到的光电流. 光束线单色器的 Si(111) 晶体与 Si(220) 分束晶体衍射角存在差值, 为了满足分束晶体的精确测量, 需要配置相同指数面的分析晶体

对光束进行调制, 实验光路配置如图 5 所示. 图中 Si(220) 分析晶体布拉格衍射将单色器的出射光束调制成与分束晶体的带宽相匹配, 且分束晶体的晶格面与分析晶体平行, 二者形成的 (+n, -n) 消色散配置可以降低光束角发散的影响, 更加精确的获得分束晶体出射光束特性.

实验时储存环工作在 200 mA 的恒流模式, 双晶单色器工作的 X 射线能量为 15 keV, 按照图 5 搭建消色散配置的实验光路图. 实验分为两部分, 一部分是面内角变化时 (相当于微调晶体厚度) 晶体分束的特性, 另一部分是改变晶体厚度时 (厚度间隔大) 晶体分束的特性. 首先用两个光电二极管同时探测不同面内角 (φ 角) 时分束晶体衍射光和透射光的摇摆曲线. 具体过程如下: 1) 采用厚度 300 μm 的分束晶体, 转动晶体的布拉格角 (θ 角), 两个探测器同时探测晶体的衍射曲线和透射曲线; 2) 以 0.5° 的步长在 -3° 到 +3° 范围内转动面内角 (φ 角), 然后重复 1) 的测量过程. 最后, 换用厚度分别为 300 μm , 400 μm 和 500 μm 的分束晶体, 固定面内角 ($\varphi = 0^\circ$), 转动布拉格角 (θ 角), 同时探测衍射曲线和透射曲线.

4 结果分析及讨论

图 6 是晶体厚度为 300 μm 且 $\varphi = -3^\circ$ 时的透射曲线与衍射曲线, 横坐标代表扫描角度对布拉格角的相对偏移, 纵坐标指的是探测器所探测到的光电流强度. 黑色表示透射曲线, 红色表示衍射曲线, 衍射曲线接近高斯分布, 而透射曲线是非对称分布, 通量波谷值的左侧有明显高于平均强度的“凸起”. 这是由于当分束器为“厚晶体” ($\mu t > 1$, μ 为晶体的线吸收系数) 时, 会产生 Borrmann 异常透射^[23], 在晶体能流三角区内同一个偏振态激发的两个波场中, 有一支波的波腹与晶体的原子面一致, 受到

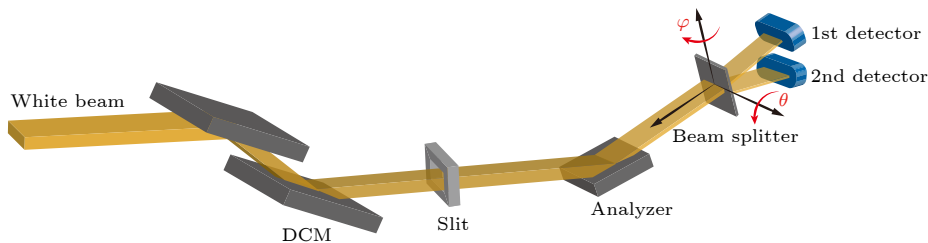


图 5 分析晶体和分束晶体的消色散实验光路图

Fig. 5. Experimental configuration of dispersive consists of analyzer and beam splitter.

强烈的吸收而大大减弱;另一支波的波节与晶体的原子面一致,波腹处于两相邻原子面之间,此波只受到微弱的吸收而通过晶体.随着晶体厚度的减小,异常透射现象也随之减弱,如图3(a)–(c)所示.

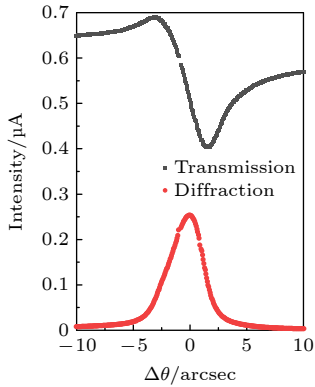


图6 晶体厚度为 300 μm 且 $\varphi = -3^\circ$ 时的透射曲线与衍射曲线

Fig. 6. Transmission and diffraction curves when the crystal thickness is 300 μm and $\varphi = -3^\circ$.

图7 是不同面内角条件下的衍射曲线和透射曲线,横轴指的是精密转台的角度坐标,纵轴是探测器所探测到的光电流强度;不同颜色的曲线代表不同的面内角.实验表明,随着 φ 单调递增或递减,晶体布拉格角的位置也随之单调递增或递减.进一步图8给出了改变 φ 角所带来的动力学效应,包括分束比(透射束强度/衍射束强度)、布拉格峰位和衍射光摇摆曲线半高宽的变化.图8(a)给出了分束比随面内角的变化.面内角改变,晶体厚度微小改变,根据之前的理论分析以及XOP模拟,晶体厚度的微小改变(0.5 μm)会引起分束比局部递增或者递减,拟合的线性曲线恰好印证了这点.图8(b)

展示了布拉格峰位置与 φ 角的关系,表明衍射波布拉格峰位的相对角度变化是线性的,这与 φ 角的线性变化相对应.在图8(c)中,纵坐标是衍射光强度曲线峰值半高宽,红色虚线表示理论的晶体本征达尔文带宽,实验值高于理论值是入射光束宽度与分束晶体带宽卷积的结果,图中显示的各实验值稍有偏差,这是由于测量误差与晶格应力引起的.晶体面内角的实验结果表明,改变面内角可以小范围改变晶体厚度,相应带来小范围分束比变化.

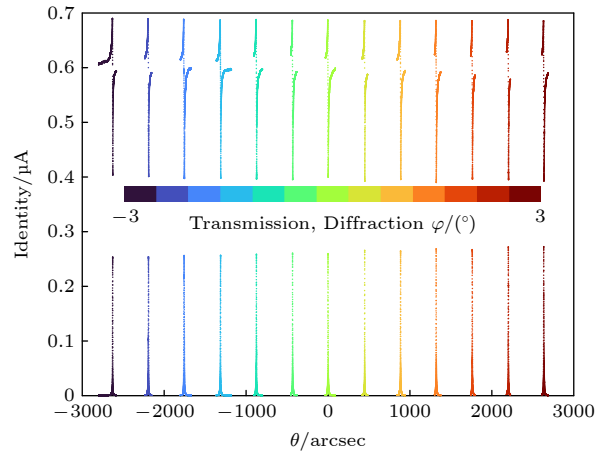


图7 不同 φ 角下的透射曲线和衍射曲线

Fig. 7. Transmission and diffraction curves at different φ .

大范围改变晶体分束比需要更换不同厚度的晶体,实验结果如图9所示,随着晶体厚度的增大,衍射强度和透射强度呈下降趋势,分束比会出现波动.表1是与之对应的晶体分束比、摇摆曲线半高宽测量值的情况.由表1可知,在晶体厚度为 400 μm 时,分束比为 1.15:1,证实了劳厄衍射分束实验的可行性.摇摆曲线半高宽大于分束晶体的本征达尔

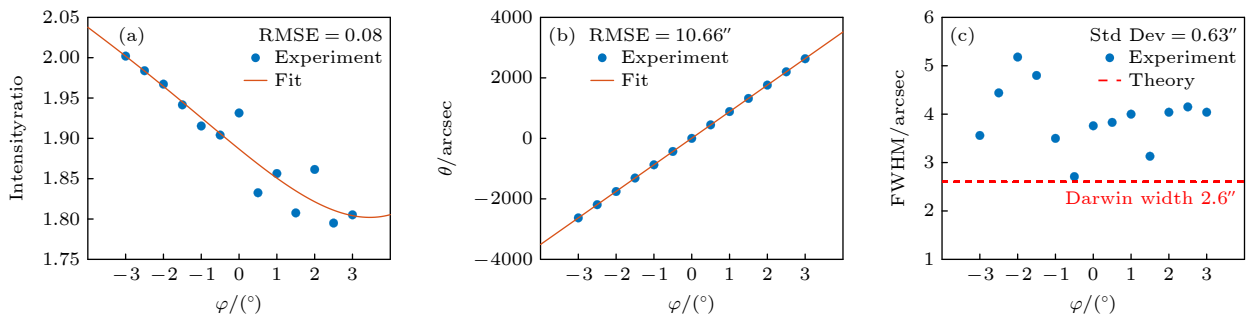


图8 (a) 不同 φ 角下的强度分束比,红线是数值拟合曲线; (b) 不同 φ 角下的布拉格峰位置; (c) 不同 φ 角下的摇摆曲线的峰值半高宽(FWHM),其中红色虚线为晶体本征达尔文宽度

Fig. 8. (a) Intensity splitting ratio (transmission intensity/diffraction intensity) at different φ , the red line is the linear fitting curve; (b) the peak positions of the diffraction curve at different φ ; (c) the full width at half maximum (FWHM) of the rocking curve at different φ , where the red dashed line is the intrinsic Darwin Width of the crystal.

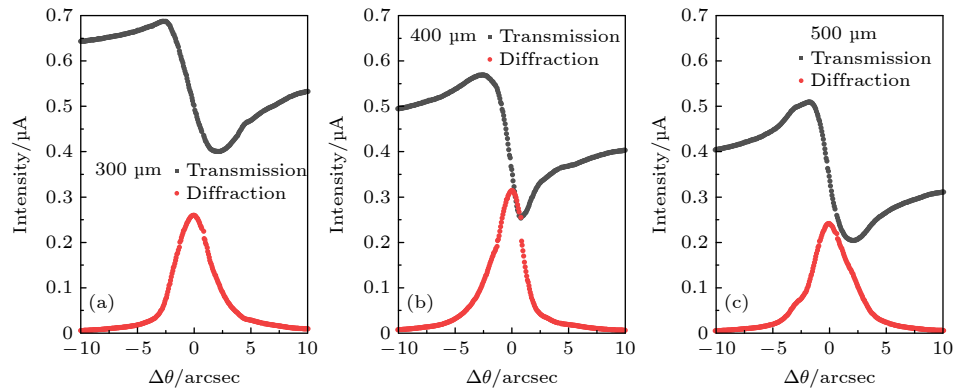


图9 不同晶体厚度条件下的透射曲线和衍射曲线

Fig. 9. Transmission curve and diffraction curve with different crystal thickness.

表1 不同晶体厚度条件下得到的分束比、摇摆曲线半高宽测量值

Table 1. Beam splitting ratio, rocking curve FWHM measurement value obtained with different crystal thickness.

晶体厚度 / μm	分束比 (T/D)	摇摆曲线半高宽测量 值/ arcsec	本征达尔文带宽 / arcsec
300	1.90	3.76	2.60
400	1.15	2.96	
500	1.40	3.89	

文带宽, 是光束带宽与分束晶体本征带宽卷积的结果, 与图3模拟结果基本相符. 衍射光强度的峰值在 400 μm 时最大, 分束比在该条件下接近 1:1, 通过调节晶体厚度可实现分束比的定量调控.

5 结 论

本文从 X 射线衍射动力学出发, 分析了影响晶体分束比的因素并在 X 光学测试线进行了实验验证. 结果表明 X 射线衍射运动学不足以分析晶体的分束特性, 需要考虑晶体内波场之间的交互作用, 用 X 射线衍射动力学中的摆动效应来解释晶体分束强度比的变化. 模拟时考虑了角发散和晶体吸收的影响, 角发散会引起衍射光带宽的展宽, 进而降低衍射光通量; 晶体吸收会引起透射光曲线的非对称和峰位偏移, 并影响衍射光与透射光的分束比. 实验结果表明采用消色散排布可以有效消除入射光束角发散的影响, 面内角转动 0.5° 可以实现分束比 2% 的变化, 换用 300 μm , 400 μm 和 500 μm 厚度的晶体, 可以实现分束比从 1.15 到 1.90 的变化. 改变面内角可以相对小范围精调分束比, 改变晶体厚度可以相对大范围粗调分束比, 实现了透射

光和衍射光强度在不同量级的定量调制.

目前, 国际上晶体分束器应用于 XGI 和 XMPI 研究的成像效果并未达到预期. 通过对分束晶体劳厄衍射成像的动力学过程研究, 考虑晶体多重散射对波前的影响, 可提升分束成像的品质. 因此, 晶体动力学衍射过程对成像质量的影响成为课题研究的方向.

感谢高能物理研究所张小威研究员和杨俊亮博士在实验过程中提供的帮助, 感谢上海光源邓彪研究员提供样品.

参考文献

- [1] Zhang K C 1998 *Fundamentals of Modern Crystallography* (Vol. 2) (Beijing: Science Press) pp2–7 (in Chinese) [张克从 1998 近代晶体学基础(下册)(北京: 科学出版社) 第2—7页]
- [2] Xu C Y 2013 *Synchrotron Radiation Optics and Engineering* (Hefei: Press of University of Science and Technology of China) pp181–254 (in Chinese) [徐朝银 2013 同步辐射光学与工程(合肥: 中国科学技术大学出版社) 第181—254页]
- [3] Xu H J, Zhao Z T 2008 *Nucl. Sci. Tech* **19** 1
- [4] Tai R Z 2021 *Physics* **50** 501 (in Chinese) [邵仁忠 2021 物理 **50** 501]
- [5] Pelliccia D, Olbinado M P, Rack A, Kingston A M, Myers G R, Paganin D M 2018 *IUCrJ* **5** 428
- [6] Kingston A M, Pelliccia D, Rack A, Olbinado M P, Cheng Y, Myers G R, Paganin D M 2018 *Optica* **5** 1516
- [7] Villanueva-Perez P, Pedrini B, Mokso R, Vagovic P, Guzenko V A, Leake S J, Willmott P R, Oberta P, David C, Chapman H N, Stamparoni M 2018 *Optica* **5** 1521
- [8] Schmidt K E, Spence J C H, Weierstall U, Kirian R, Wang X, Starodub D, Chapman H N, Howells M R, Doak R B 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 115507
- [9] Batterman B W, Cole H 1964 *Rev. Modern Phys.* **36** 681
- [10] Bonse U, Hart M 1965 *Appl. Phys. Lett.* **6** 155
- [11] Pelliccia D, Rack A, Scheel M, Cantelli V, Paganin D M 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 113902
- [12] Schori A, Shwartz S 2017 *Opt. Express* **25** 14822
- [13] von Laue M, 1931 *Ergeb. Exakt. Naturwiss* **10** 133
- [14] Kato N, 1960 *Acta Crystallography* **13** 349
- [15] Hirsch P B, 1952 *Acta Crystallography* **5** 176

- [16] Mai Z H 2020 *X-ray Diffraction Dynamics: Theory and Applications* (Beijing: Science Press) pp10–49 (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10—49页]
- [17] Zhao Z T, Xu H J 2004 *Proceedings of European Particle Accelerator Conference Lucerne*, Switzerland, June 5–9, 2004 p2368
- [18] 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, 李塘, 朱晔, 宋丽, 薛莲, 张小威 2020 物理学报 **69** 104101]
- [19] Río M, Dejus R J 2011 *Proc. Spie.* **8141** 259
- [20] Zachariasen, W. H 1967 *Phys. Rev. Lett.* **18** 195
- [21] del Río M S, Perez-Bocanegra N, Shi X B, Honkimaki V, Zhang L 2015 *J. Appl. Crystallogr.* **48** 477
- [22] Li Z L, Fan Y C, Xue L, Zhang Z Y, Wang J 2019 *2019 AIP Conference Proceedings 2054* Taiwan, China, June 10–15, 2019 p060040
- [23] Penning P, Polder D 1961 *Philips Res. Rep.* **16** 419

Beam splitting characteristics of crystal X-ray Laue diffraction*

Zhao Chang-Zhe¹⁾²⁾ Si Shang-Yu^{1)2)3)†} Zhang Hai-Peng¹⁾²⁾ Xue Lian¹⁾³⁾

Li Zhong-Liang¹⁾³⁾ Xiao Ti-Qiao^{1)2)3)‡}

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

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

3) (Shanghai Synchrotron Radiation Facility/Zhangjiang Lab, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China)

(Received 8 September 2021; revised manuscript received 28 October 2021)

Abstract

The beam splitter is an optical element that divides a beam of light into two or more subbeams. It is an essential component in many optical experiments. X-ray has the characteristics of short wavelength and strong penetration ability, making it hard to use the optical elements in the visible-light region. Therefore, it is necessary to develop optical elements suitable for X-rays. The atomic layer spacing of the perfect crystal is of the same order of magnitude as the X-ray wavelength, so the crystal diffraction effect can be used to achieve the X-ray modulation. In this paper, the beam splitting characteristics of Laue crystal are analyzed based on X-ray diffraction dynamics and the influences of crystal absorption and incident light angular divergence on the rocking curves of transmission and diffraction are simulated. The modulation of the crystal diffraction in-plane angle and crystal thickness to Laue diffraction beam-splitting ratio is presented quantitatively. The results show that the kinematical theory of X-ray diffraction is not enough to analyze the beam splitting characteristics of the crystal. It is necessary to consider the interaction between the wave fields in the crystal and use the Pendellösung effect in the dynamical theory of X-ray diffraction to explain the change of the crystal beam-splitting ratio quantitatively. The influence of angular divergence and crystal absorption are considered in the simulation. The angular divergence broadens the bandwidth of the diffraction, thereby reducing diffraction intensity. The crystal absorption results in asymmetry and peak shift of the transmission curve and affects the intensity of diffraction and the intensity of transmission beam. The experimental results show that the non-dispersive (+n, -n) configuration can effectively eliminate the influence of angle divergence. The beam-splitting ratio can be adjusted in a small range ($\pm 2\%$) by changing the in-plane angle and adjusted in a wide range ($\pm 75\%$) by changing the crystal thickness, thereby realizing the quantitative modulation of the intensity of transmission and diffraction beam.

Keywords: dynamical theory of X-ray diffraction, Laue diffraction, crystal beam splitter, synchrotron radiation

PACS: 61.05.cp, 41.50.+h, 41.85.-p, 41.60.Ap

DOI: 10.7498/aps.71.20211674

* Project supported by the Youth Innovation Promotion Association of Chinese Academy of Sciences (Grant No. 2018297) and the National Key R&D Program of China (Grant Nos. 2017YFA0206004, 2017YFA0403801).

† Corresponding author. E-mail: sishangyu@zjlab.org.cn

‡ Corresponding author. E-mail: xiaotiqiao@zjlab.org.cn