

F7030 Rentgenový rozptyl na tenkých vrstvách

O. Caha
PřF MU

Prezentace k přednášce
Numerické simulace
Příklady experimentů
Vybrané vztahy

Syllabus

1. Experimentální technika: zdroje, vznik rtg záření, goniometry, optické prvky (monochromátory, kolimátory, zrcadla, fokusační optika), detektory. Základní experimenty: polykrystalové a monokrystalové metody, mapování reciprokého prostoru
2. Kinematická teorie rozptylu: úvod do teorie rozptylu, rozptyl na elektronu, izolovaném atomu, krystal, strukturní a geometrický faktor, omezená velikost krystalu
3. Difrakce na polykrystalech I: strukturní faktor, velikost krystalitu (Scherrerova formule), vliv deformace na polohy a šířky difrakčních maxim, zbytková napětí, kvantifikace fázového složení (vnitřní normál)
4. Polykrystaly II: Full profile fitting; Texture, ODF (orientation distribution function); Debyeův vztah, PDF (pair distribution function).
5. SAXS: teoretický popis, řídké roztoky – Guinierův a Porodův vztah, uspořádané částice – long range a short-range order
6. Dokonalé, téměř dokonalé krystaly, epitaxní vrstvy: Kinematická teorie na monokrystalu a epitaxní vrstvě – polohy difrakcí, truncation rod, deformace v epitaxní vrstvě, relaxace. Mozaikový krystal
7. Dynamická teorie rtg reflexe: Jednovlnná aproximace – hloubka vniku, reflexe na hladkém rozhraní, multivrstvy (formalismus přenosové matice), TRXRF
8. Dynamická teorie rtg difrakce: Dvojevlnná aproximace: případ Bragg a Laue, Borrmannův jev, stojatá vlna, GID, epitaxní vrstvy
9. Semikinematická teorie I: DWBA, Rozptyl na drsných rozhraních – popis drsného rozhraní, příklady: fraktálové rozhraní, dvouúrovňové, vicinální, spekulární odraz a nespekulární rozptyl, drsné multivrstvy
10. Semikinematická teorie II: GISAXS na částicích na povrchu a uvnitř vzorku, Difuzní rozptyl na defektech v krystalu v okolí difrakce
11. Experimentální rozlišení Experimentální rozlišení v reciprokém prostoru: analyzer streak, detector streak, monochromator streak, DuMondovy grafy, disperzní a nedisperzní uspořádání, koherenční šířka a délka
12. Další rentgenové metody: Fluorescenční spektroskopie, absorpční spektroskopie – XAFS, XMCD.

Obečná teorie rozptylu

$$|\mathbf{K}_i| = |\mathbf{K}| = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \equiv K$$

$$\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_i e^{-i(\omega t - \mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r})}$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int d\Omega \mathbf{E}(\Omega) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2 \mathbf{K}_{\parallel}}{K K_z} \mathbf{E}(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}$$

$$(\Delta + K^2)E(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{V}}(\mathbf{r})E(\mathbf{r})$$

$$\hat{\mathbf{V}}(\mathbf{r}) = \text{graddiv} - K^2 \chi(\mathbf{r})$$

$$E(\mathbf{r}) = E_i(\mathbf{r}) + \int d^3 \mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\mathbf{V}}(\mathbf{r}') E(\mathbf{r}')$$

$$(\Delta + K^2)E_i(\mathbf{r}) = 0$$

$$(\Delta + K^2)G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iK|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -\frac{i}{8\pi^2} \int \frac{d^2 \mathbf{K}_{\parallel}}{K_z} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

$$E(\mathbf{r}) = E_i(\mathbf{r}) + \int d^3 \mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{r}') E_i(\mathbf{r}')$$

$$\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{V}} + \hat{\mathbf{V}} \hat{\mathbf{G}}_0 \hat{\mathbf{V}} + \hat{\mathbf{V}} \hat{\mathbf{G}}_0 \hat{\mathbf{V}} \hat{\mathbf{G}}_0 \hat{\mathbf{V}} + \dots$$

Obečná teorie rozptylu

$$E_s(\mathbf{r}) = -\frac{i}{8\pi^2} E_i \int \frac{d^2 \mathbf{K}_{\parallel}}{K_z} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \int d^3 \mathbf{r}' \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{K} - \mathbf{K}_i) \cdot \mathbf{r}'}$$

$$\equiv -\frac{i}{8\pi^2} E_i \int \frac{d^2 \mathbf{K}_{\parallel}}{K_z} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \langle \mathbf{K} | \hat{\mathbf{T}} | \mathbf{K}_i \rangle,$$

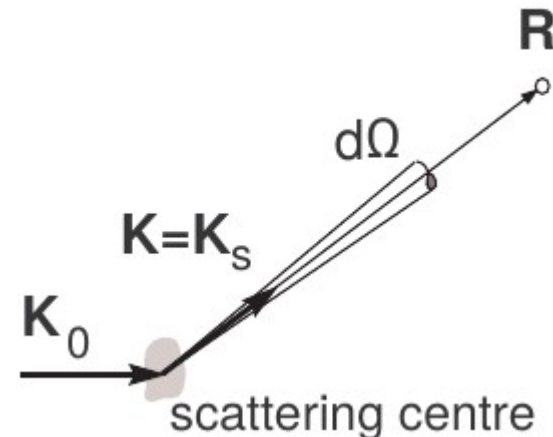
Frahoferova aproximace

$$K|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx Kr - \mathbf{K}_s \cdot \mathbf{r}'$$

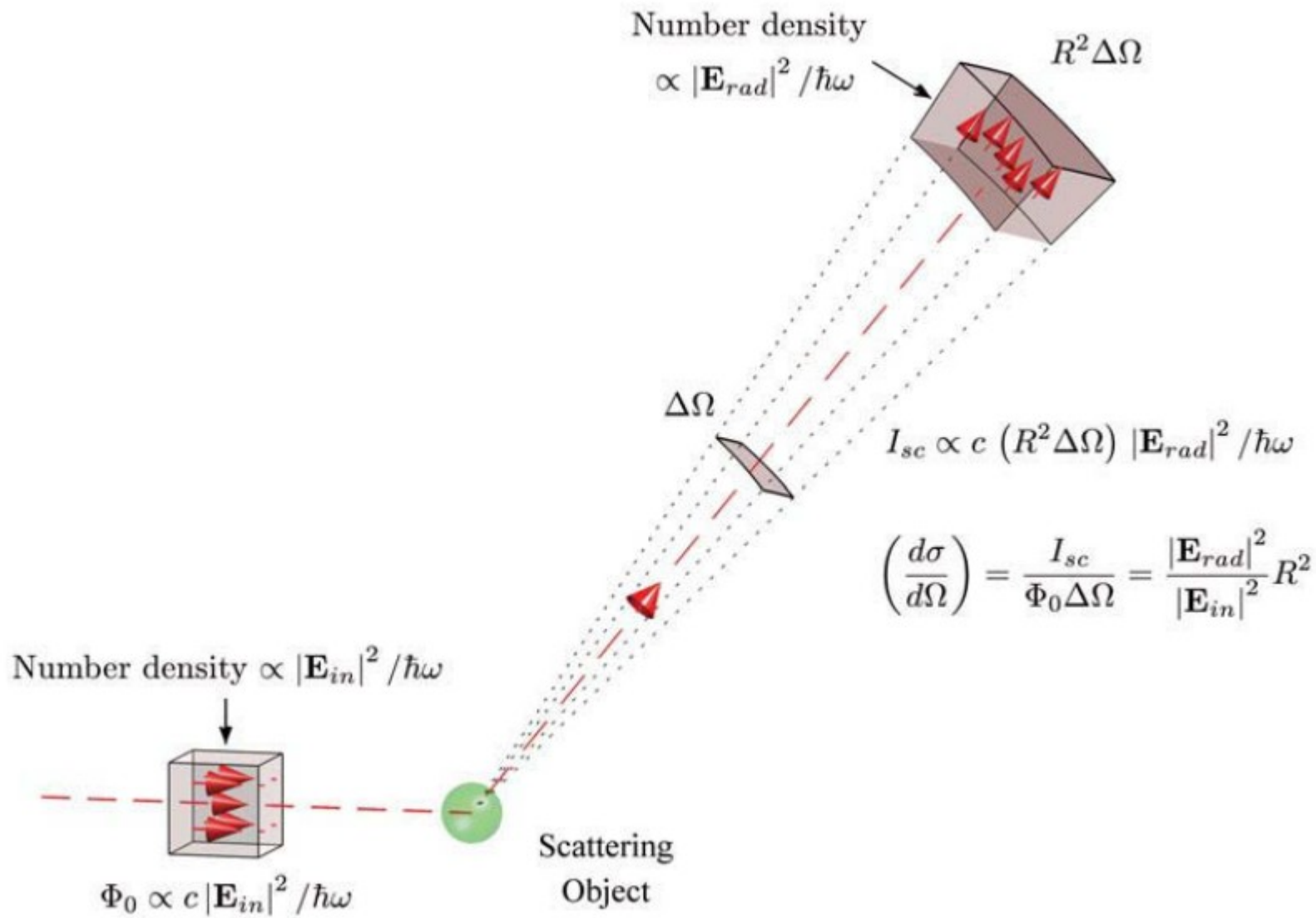
$$E_s(\mathbf{r}) \approx -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iKr}}{r} \int d^3 \mathbf{r}' \hat{\mathbf{T}}(\mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{K}_s - \mathbf{K}_i) \cdot \mathbf{r}'} \equiv -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iKr}}{r} \langle \mathbf{K}_s | \hat{\mathbf{T}} | \mathbf{K}_i \rangle$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{K}_s - \mathbf{K}_i$$

$$d\sigma = \frac{1}{16\pi^2} \left| \langle \mathbf{K}_s | \hat{\mathbf{T}} | \mathbf{K}_i \rangle \right|^2 d\Omega$$



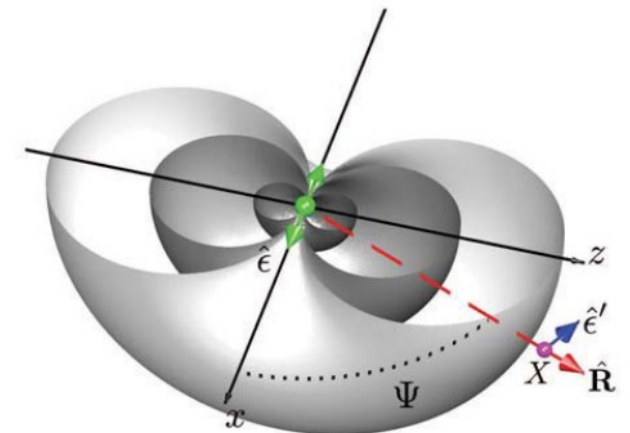
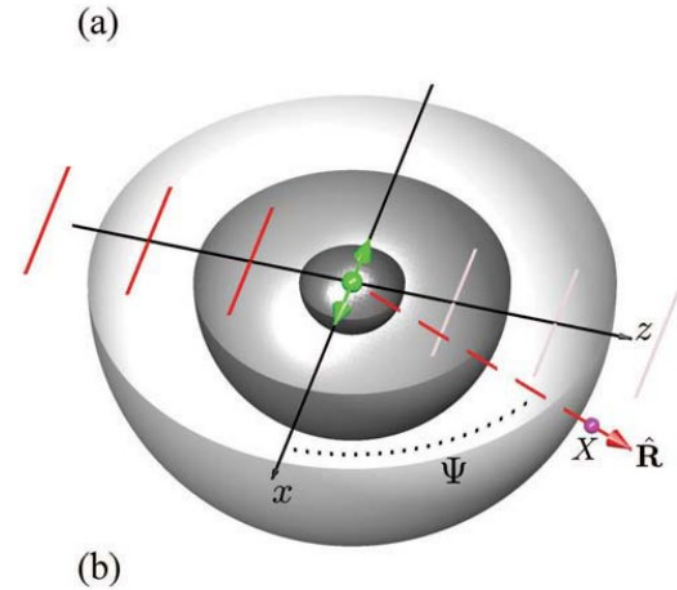
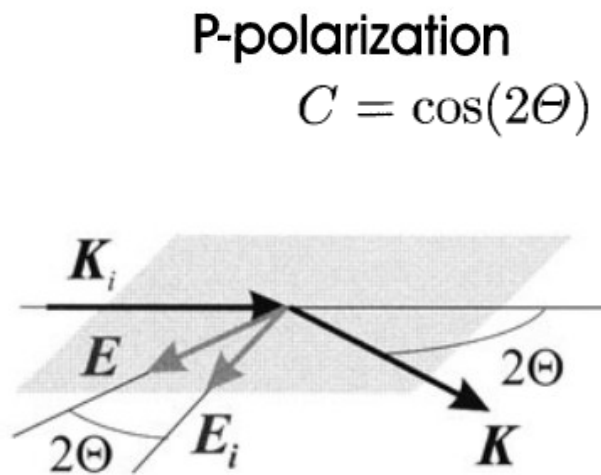
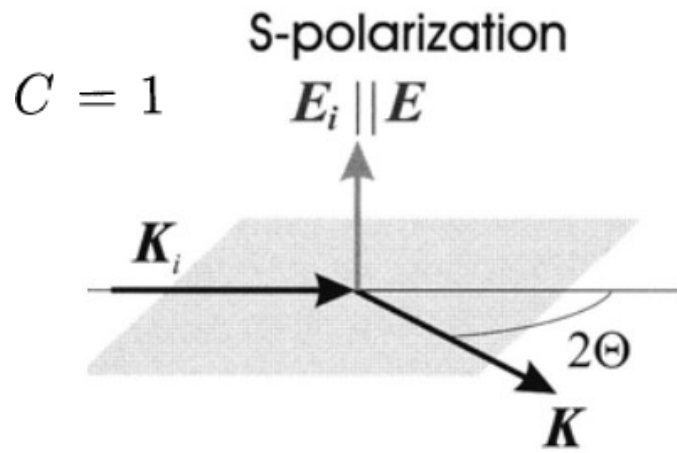
Obečná teorie rozptylu



Interakce rtg a elektronu

$$\chi(\mathbf{r}) = -\frac{\lambda^2}{\pi} r_{\text{el}} C \rho(\mathbf{r})$$

$$r_{\text{el}} = e^2 / (4\pi\epsilon_0 m_0 c^2) \approx 2.82 \times 10^{-15} \text{ m}$$



Rtg oblast

Dielektrická funkce (Drude):

$$\varepsilon(\omega) = 1 - ne^2 / [\varepsilon_0 m \omega (\omega + i/\tau)]$$

Limita vysokých frekvencí

$$\varepsilon(\omega) \approx 1 - ne^2 / [\varepsilon_0 m_e \omega^2]$$

$$\varepsilon(\omega) \approx 1 - NZr_e \lambda^2 / \pi < 1$$

$$r_e = e^2 / [4\pi\varepsilon_0 m_e c^2] = 2.8179 \cdot 10^{-15} \text{ m}$$

$$n = 1 - \delta + i\beta = 1 - (\delta_0 - i\beta_0) \rho_{\text{rel}}$$

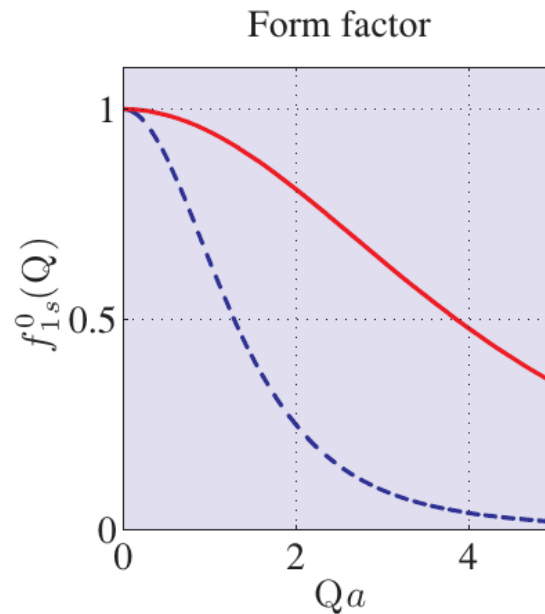
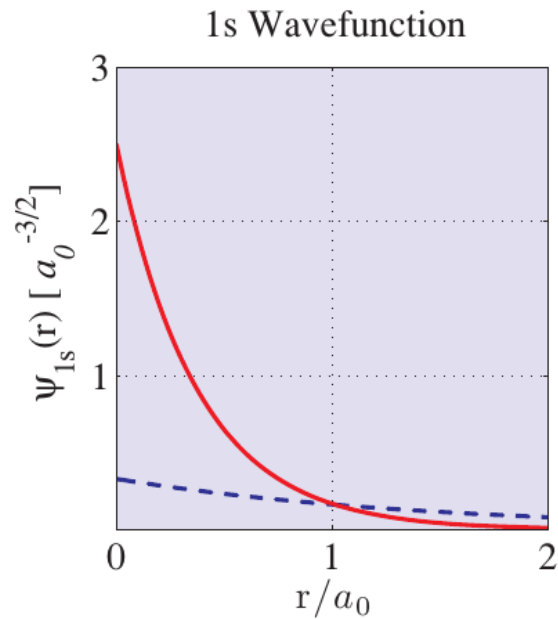
$$\delta \approx -NZr_e \lambda^2 / \pi$$

Interakce rtg a atomu

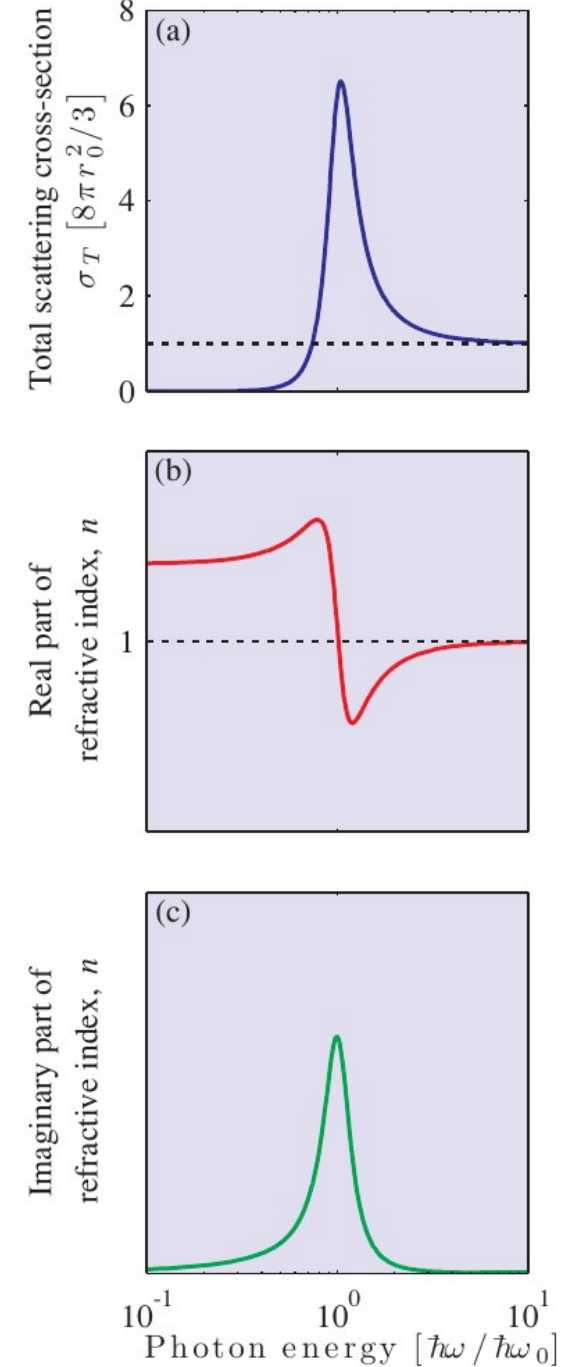
$$f^0(\mathbf{Q}) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \begin{cases} Z & \text{for } \mathbf{Q} \rightarrow 0 \\ 0 & \text{for } \mathbf{Q} \rightarrow \infty \end{cases}$$

Standardní aproximace pro rtg:

$$f(\mathbf{Q}, \hbar\omega) = f^0(\mathbf{Q}) + f'(\hbar\omega) + if''(\hbar\omega)$$



Z=1 (dashed lines) and Z=3 (solid lines)



Interakce rtg záření s atomem

Photoelectric cross section

$$I = I_0 e^{-\mu \rho d}$$

$$\mu = \frac{N_A}{A} \sigma_a$$

$$n = 1 - \delta - i\beta = 1 - \frac{r_e}{2\pi} \lambda^2 \sum_i n_i f_i(0)$$

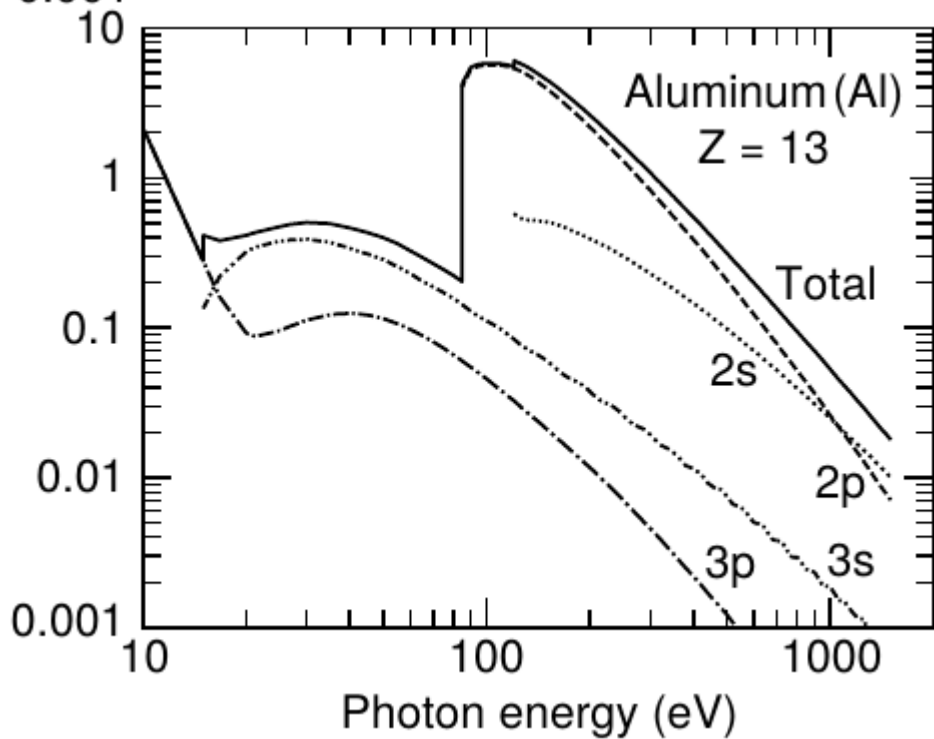
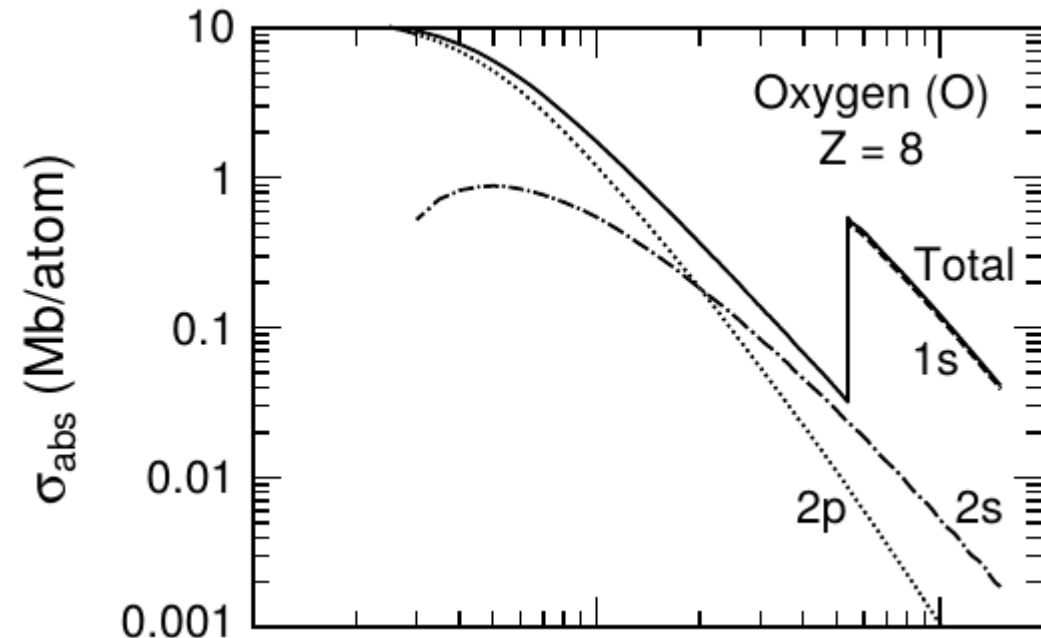
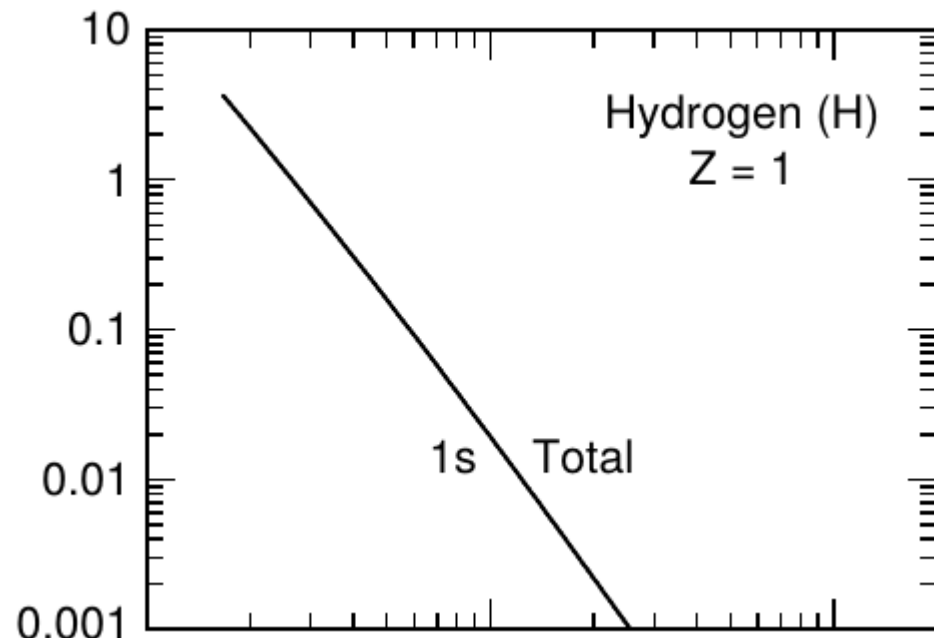
$$f_2 = \frac{\sigma_a}{2r_e \lambda}$$

$$f_1 = Z^* + \frac{1}{\pi r_e h c} \int_0^\infty \frac{\epsilon^2 \sigma_a(\epsilon)}{E^2 - \epsilon^2} d\epsilon$$

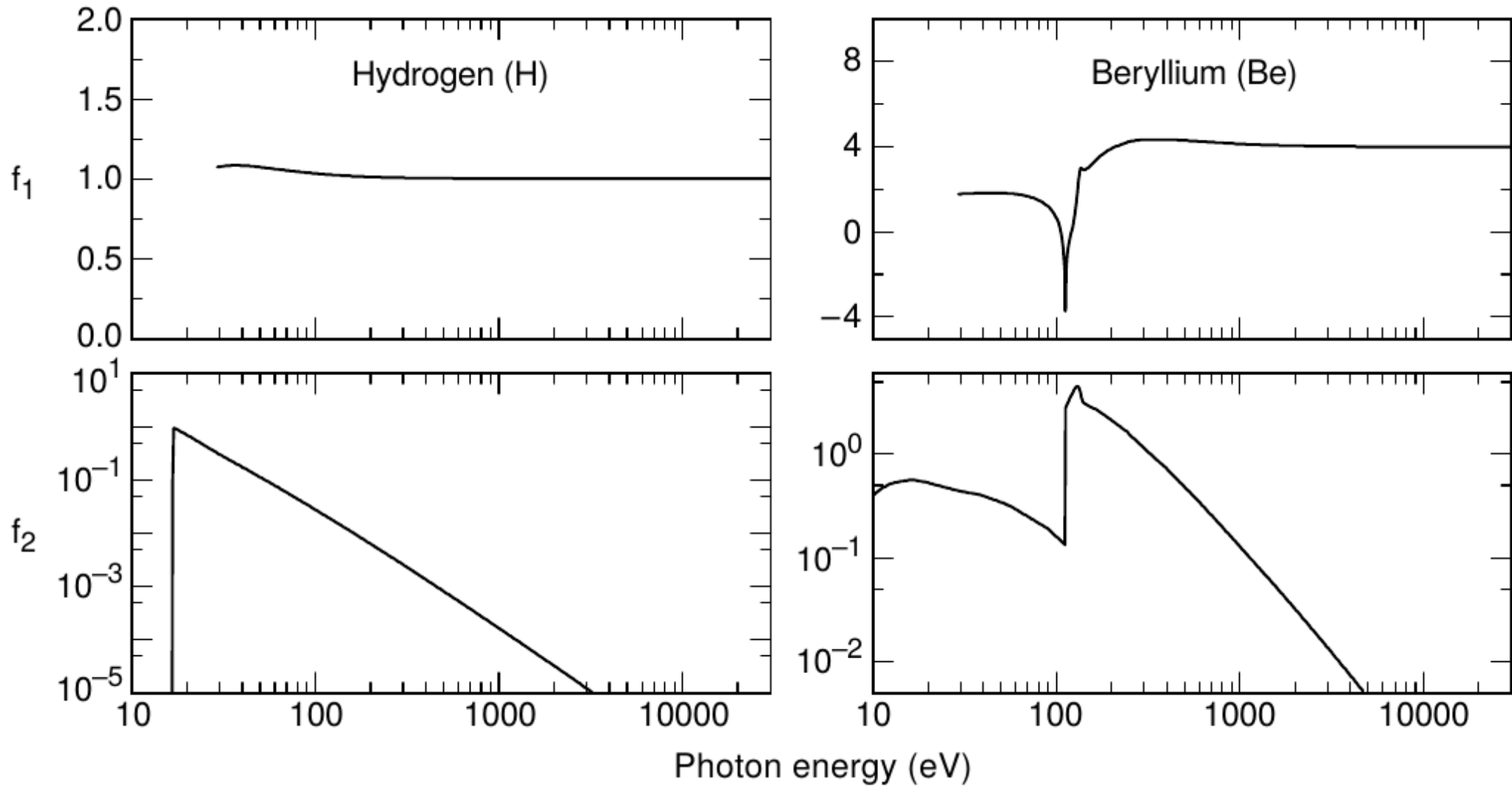
$$Z^* \approx Z - (Z/82.5)^{2.37}$$

Interakce rtg záření s atomem

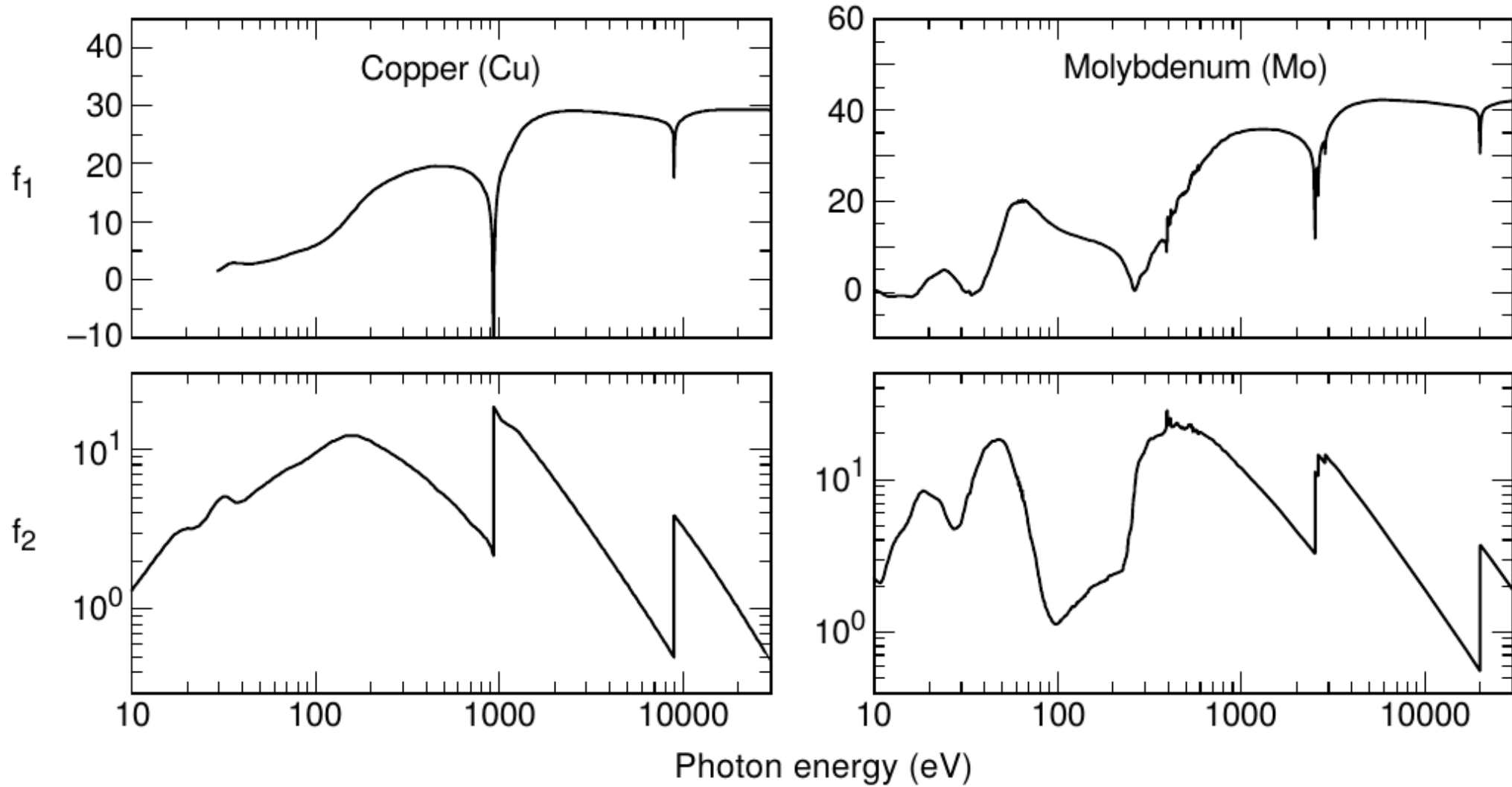
Photoelectric cross section



Interakce rtg záření s atomem



Interakce rtg záření s atomem



Interakce rtg záření s atomem

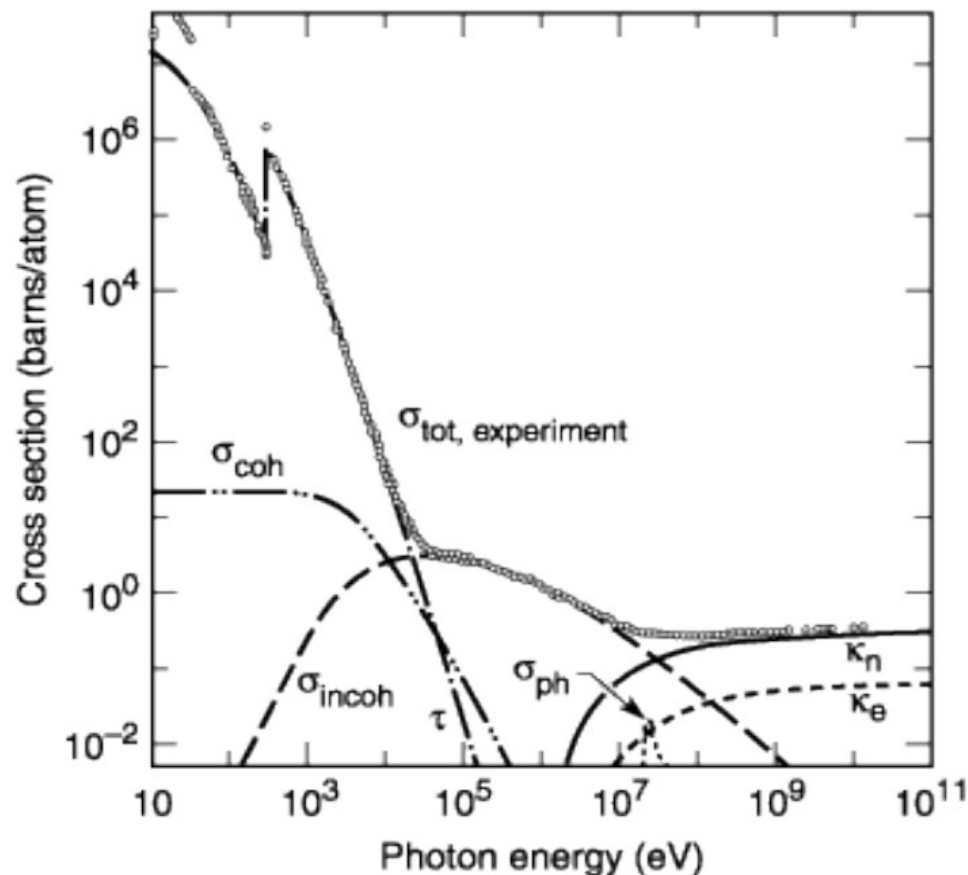


Fig. 3-1. Total photon cross section σ_{tot} in carbon, as a function of energy, showing the contributions of different processes: τ , atomic photo-effect (electron ejection, photon absorption); σ_{coh} , coherent scattering (Rayleigh scattering—atom neither ionized nor excited); σ_{incoh} , incoherent scattering (Compton scattering off an electron); κ_n , pair production, nuclear field; κ_e , pair production, electron field; σ_{ph} , photonuclear absorption (nuclear

Thomson cross section for a free electron:

$$\sigma_e = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \quad (2.45)$$

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} = 2.82 \times 10^{-13} \text{cm} \quad (2.44)$$

and r_e is the classical electron radius.

Scattering cross section for a bound electron:

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \frac{\omega^4}{(\omega^2 - \omega_s^2)^2 + (\gamma\omega)^4} \quad (2.51)$$

Rayleigh cross section ($\omega^2 \ll \omega_s^2$):

$$\sigma_R = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \left(\frac{\omega}{\omega_s} \right)^4 = \frac{8\pi}{3} r_e^2 \left(\frac{\lambda_s}{\lambda} \right)^4 \quad (2.52)$$

Kinematická teorie difrakce

$$\hat{\mathbf{T}} \approx \hat{\mathbf{V}}$$

$$E_s(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\mathbf{V}}(\mathbf{r}') E_i(\mathbf{r}')$$

$$E(\mathbf{r}) = 4\pi r_{\text{el}} C E_i \int d^3\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{r}'}$$

turbance of the sample structure. A simple (but not always valid) qualitative rule says that the kinematical approximation can be used if at least one of the following conditions is met:

- the length of the trajectory of the x-rays in the sample is sufficiently small
- the layer is highly disturbed
- the angular deviation of the primary x-ray beam from the direction of the diffraction maximum is sufficiently large.

Kinematická teorie

$$\chi(\mathbf{r}) = -r_{\text{el}} \frac{\lambda^2}{\pi} \varrho(\mathbf{r})$$

$$f(Q) = \int d^3\mathbf{r} \varrho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{Q} \int_0^\infty dr \varrho(r) \sin(Qr)$$

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \chi_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\chi_{\mathbf{g}} = \frac{1}{V_{\text{el}}} S_{\text{el}}(\mathbf{g}); \quad S_{\text{el}}(\mathbf{g}) = \int_{V_{\text{el}}} d^3\mathbf{r} \chi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}}$$

$$S_{\text{el}}(\mathbf{g}) = -\frac{4\pi r_{\text{el}}}{K^2} \sum_j f_j(\mathbf{g}) e^{-i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}_j}$$