УДК 535.42

## СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ РАСЧЕТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЧЕРЕЗ ДОЭ В ПАРАКСИАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ

© 2010 А.Г. Налимов, С.Н. Хонина

#### Институт систем обработки изображений РАН, г. Самара

Поступила в редакцию 02.03.2010

В статье приведены результаты различных вариантов моделирования распространения света после прохождения через зонную пластинку из меди и кремния для рентгеновского излучения. Моделирование проводилось с помощью расчета одномерного преобразования Френеля, одномерного непараксиального распространения (через угловой спектр), двумерного интеграла Релея-Зоммерфельда, RSoft BeamProp из пакета FullWave, производитель RSoft Design Group, США. Показано, что первые три метода дают очень близкие результаты. Результат, полученный с помощью программы BeamProp, отличается приблизительно на 10%.

Ключевые слова: зонная пластинка, рентгеновское излучение, гамма, BeamProp, FullWave, преобразование Френеля, интеграл Релея-Зоммерфельда, угловой спектр.

#### **ВВЕДЕНИЕ**

Использование мягкого и жесткого рентгеновского излучения в оптических системах позволяет получать высокое разрешение в задачах микроскопии и высокоразрешающей оптики [1]. Короткая длина волны рентгеновского излучения по сравнению с видимым светом накладывает более жесткие условия на расчет и изготовление оптики – линз Френеля, зонных пластинок, дифракционных решеток [2-4].

Зонные пластинки являются одним из самых простых элементов для фокусирования когерентного рентгеновского излучения [5-8]. Теория их расчета известна давно [9], однако интерес представляет так же и моделирование распространения света через рассчитанную зонную пластинку. Основной проблемой для расчета дифракции рентгеновского излучения на зонной пластинке является выбор необходимого метода расчета, а так же время моделирования. В статьях [1-9] не были рассмотрены различные методы расчета дифракции излучения.

В данной статье приводятся результаты моделирования дифракционной решетки, находящейся на одномерной зонной пластинке, различными способами. Как показало моделирование, результаты расчета эффективности фокусирования излучения программным пакетом BeamPROP близки к результатам моделирования распространения излучения через зонную пластинку с помощью остальных методов. Однако ширина мак-

Налимов Антон Геннадьевич, кандидат физико-мамематических наук, научный сотрудник. Email: anton@smr.ru. Хонина Светлана Николаевна, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник. E-mail: khonina@smr.ru симума интенсивности, рассчитанная с помощью BeamPROP, оказалась меньше, чем рассчитанная другими способами, и составила 0,85 мкм для длины волны 0,229 нм.

#### 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Длина волны при моделировании была принята л=0,229 нм, в связи с возможностью использовать рентгеновскую трубку с анодом из хрома. На рис. 1 представлена схема рассматриваемой задачи.

Линза представляет собой цилиндрическую дифракционную решетку с переменным периодом, фокусирующую свет в первом порядке (зонная пластинка).

Микрорельеф выполнен следующим образом. В кремниевой пластине протравлена цилиндрическая дифракционная решетка, затем канавки в решетки заполняются медью. Показатель



Рис. 1. Схема рассматриваемой задачи.

преломления меди для выбранной длины волны составляет  $n = 1 - 1,56 \cdot 10^{-5} + 2,5 \cdot 10^{-6} i$ , показатель преломления в кремнии составляет  $n = 1 - 1,7 \cdot 10^{-5} + 8,5 \cdot 10^{-7} i$ . Таким образом, оптимальная высота решетки равна 2.9 мкм. При радиусе R=50 мкм фокусное расстояние составляет F=0.45 м. Медь относительно прозрачна для данной длины волны, затухание света в два раза происходит на расстоянии 10 мкм, поэтому тонкий слой меди в дифракционной решетке можно использовать в качестве оптического элемента, работающего на пропускание.

Моделирование проводилось с помощью расчета одномерного преобразования Френеля, одномерного непараксиального распространения (через угловой спектр), двумерного интеграла Релея-Зоммерфельда, RSoft BeamProp из пакета FullWave, производитель RSoft Design Group, США.

Расчет одномерного преобразования Френеля производился по формуле:

$$E(u,z) = \frac{k}{iz} \exp(ikz) \int_{-R}^{R} \tau(x) \exp\left(\frac{ik(x-u)^2}{2z}\right) dx, \quad (1)$$

где  $\tau(x)$  — комплексная функция пропускания оптического элемента, микрорельеф которого показан на рис. 1 (при плоском ограниченном апертурой плоском освещающем пучке), z — расстояние от поверхности оптического элемента вдоль оптической оси. Расчет с помощью одномерного непараксиального распространения производился по формуле:

$$E(u,z) = -\frac{i}{\lambda} \int_{-R}^{R} \tau(x) \left\{ \int_{-1}^{1} \exp\left(ikz\sqrt{1-\xi^2}\right) \times \exp\left(ik\left[\xi(u-x)\right]\right) d\xi \right\} dx$$
(2)

Расчет с помощью двумерного интеграла Рэлея-Зоммерфельда первого типа производился по формуле:

$$E(u,v,z) = -\frac{z}{2\pi} \iint_{\Sigma} \tau(x,y) \frac{e^{ik\ell}}{\ell^2} \left( ik - \frac{1}{\ell} \right) dxdy, \quad (3)$$

где  $\tau(x, y)$  – цилиндрическая комплексная функция пропускания оптического элемента, полученная из одномерной функции  $\tau(x)$ ,  $\ell = \sqrt{(u-x)^2 + (v-y)^2 + z^2}$ ,  $\Sigma : 2R \times 2R$  – область входной апертуры.

#### 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ

## 2.1. Расчет с помощью одномерного преобразования Френеля

На рис. 2 представлены результаты моделирования распространения света после прохождения через зонную пластинку с помощью одномерного преобразования Френеля.



**Рис. 2.** Моделирование с помощью одномерного преобразования Френеля: а) общая картина распределения амплитуды *z* ∈ [10*mm*, 500*mm*], *x* ∈ [-100 µm, 100 µm]; б) интенсивность на оптической оси; в) интенсивность в фокальной плоскости (*F*=450 мм)

Как видно из рис. 2а фоновый шум в фокальной плоскости в основном концентрируется на отрезке  $x \in [-100 \, \mu m, 100 \, \mu m]$  89% энергии.

На рис. 26 видно, что присутствуют дополнительные фокусы, интенсивность в которых примерно в 4 раза ниже, чем в основном.

Ширина интенсивности пучка в фокусе (рис. 2c) по полуспаду: FWHM=0,936 мкм; ширина между первыми нулями 2,14 мкм, эффективность 39,5%. Под расстоянием между первыми нулями  $L_0$  понимается расстояние между ближайшими минимумами интенсивности с обеих сторон от основного пика интенсивности в фокусе (рис. 3).

## 2.2 Расчет с помощью одномерного непараксиального распространения (через угловой спектр)

На рис. 4 показаны результаты моделирования прохождения света через зонную пластинку с помощью одномерного непараксиального оператора распространения.



между первыми нулями  $L_0$ 

В дальней зоне дифракции результаты, полученные в разделе 1 и 2, полностью совпадают. Кроме того, как видно по рис. 46, использование непараксиального оператора распростра-



Рис. 4. Моделирование с помощью одномерного непараксиального оператора распространения (распределение интенсивности):
а) на оптической оси в диапазоне от 140 мм до 500 мм;
б) на оптической оси в диапазоне от 10 мм до 160 мм;
в) в фокальной плоскости (450 мм)

нения (2) в отличие от (1) позволяет получить верную картину в ближней зоне дифракции.

Ширина интенсивности пучка в фокусе (рис. 4c) по полуспаду: FWHM=0,927 мкм; ширина между первыми нулями 2,12 мкм, эффективность 39,8%.

#### 2.3. Моделирование с помощью 2D интеграла Релея-Зоммерфельда

На рис. 5 представлены результаты моделирования прохождения света через зонную пластинку с помощью интеграла Рэлея-Зоммерфельда.

Как видно из рис. 5, Ширина интенсивности пучка в фокусе (рис. 5с) по полуспаду: FWHM=0,927 мкм; ширина между первыми нулями 2,2 мкм, эффективность 40,86%.

# 2.4. Моделирование с помощью программного пакета BeamPROP

При помощи программного пакета Beam Prop производился расчет распространения света через линзу и далее до фокусной плоскости. Для уменьшения времени вычисления сетка бралась с шагом по поперечной к направлению распространения оси Х: 20л, вдоль оптической оси Ү: 20000л. Такие шаги сеток были выбраны как оптимальные. Уменьшение шагов дискретизации сетки вдвое изменяет результат вычислений менее чем на 5%. Ширина области расчета была равна апертуре зонных пластинок.

На рис. 6 представлено распределение интенсивности рентгеновского излучения в фокальной плоскости после прохождения через зонную пластинку.

В фокальной плоскости содержится 66% энергии, излученной источником и прошедшей через зонную пластинку.

Как видно из рис. 6, ширина пика интенсивности по полуспаду составляет 0,85 мкм, энергетическая эффективность составляет 54,7%. Энергетическая эффективность в пересчете к полной прошедшей энергии через зонную пластинку составляет 28,9%.

Как видно из табл. 1, первые три метода дают очень близкие результаты (различие на несколь-



Релея-Зоммерфельда (распределение интенсивности): а – на оптической оси в диапазоне от 140 мм до 500 мм; b – на оптической оси в диапазоне от 10 мм до 160 мм; с – в фокальной плоскости (450 мм)



Рис. 6. Распределение интенсивности рентгеновского излучения в фокальной плоскости

	FWHM	Полная ширина между	Эффективность	Время
		нулями		расчета
1D преобразование	0,936 мкм	2,14 мкм	39,5%	1 сек.
Френеля				
1D непараксиальное	0,927 мкм	2,12 мкм	39,8%	1:56 мин
распространение (через				
угловой спектр)				
2D интеграл Рэлея-	0,927 мкм	2,2 мкм	40,86%	28 мин.
Зоммерфельда				
RSoft BeamProp из	0,85 мкм	2,26 мкм	54,7%	16 мин.
пакета FullWave				

Таблица 1. Сводные параметры для второго варианта

ко процентов), что вполне ожидаемо для дальней зоны, в которой проводятся исследования. Разумеется, использование выражения (3), как и выражения (2) в данной области избыточно по точности и затратно по ресурсам, но непараксиальные модели были применены для корректного сравнения полученных результатов.

Упомянутые выше методы применялись в приближении тонкого оптического элемента, не учитывающего поглощение и отражение на элементе.

В пакете FullWave учитывается поглощение, поэтому результаты отличаются примерно на 10%.

### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе приводятся результаты моделирования цилиндрической зонной пластинки различными способами: одномерное преобразование Френеля, одномерное непараксиальное распространение (через угловой спектр), двумерный интеграл Рэлея-Зоммерфельда и с помощью коммерческого программного пакета Beam PROP.

Первые три метода дают очень близкие результаты (различие на несколько процентов) – в среднем ширина центрального пика по полуспаду от максимума интенсивности составила 0,93 мкм, а полная ширина между нулевыми значениями – около 2 мкм, средняя эффективность – 40%. Непараксиальные методы, избыточные по точности затратные по ресурсам были применены для корректного сравнения полученных результатов. Данные методы использовались в приближении тонкого оптического элемента, не учитывающего поглощение и отражение на элементе.

В пакете FullWave учитывается поглощение, поэтому результаты отличаются примерно на 10% от полученных вышеупомянутыми методами: ширина центрального пика по полуспаду от максимума интенсивности составила 0,85 мкм, полная ширина между нулевыми значениями – 2,26 мкм, эффективность – 55%.

Учитывая время моделирования и результаты расчета можно сделать вывод, что для приближенного моделирования распространения света через зонную пластинку для рентгеновского диапазона достаточно одномерного преобразования Френеля. Если необходимо более точное решение, то лучше использовать метод ВРМ – он учитывает поглощение в материале, что для рентгеновского диапазона актуально.

#### БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке российско-американской программы "Фундаментальные исследования и высшее образование" (грант CRDF PG08-014-1), гранта Президента РФ поддержки ведущих научных школ (НШ-3086.2008.9) и гранта РФФИ 08-07-99007.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Attwood D. Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation: principles and applications / D. Attwood // Cambridge University Press, 1999.
- Sub-38 nm resolution tabletop microscopy with 13 nm wavelength laser light /Vaschenko G., Brewer C., Brizuela F., Wang Y. [and oth.] // Opt. Lett. 2006. Vol. 31. Pp. 1214–1216.
- 3. Nano-imaging with a compact extreme ultraviolet laser / Vaschenko G., Brizuela F., Brewer C., Grisham M. [and oth.] // Opt. Lett., 2005. Vol. 30. Pp. 2095–2097.
- 4. High efficiency and low absorption Fresnel compound zone plates for hard X-ray focusing /Kuyumchyan M.,

Isoyan A., Shulakov A., Aristov E., Kondratenkov V., Snigirev M., Snigireva A., Yabashi I. URL: http:// arxiv.org/pdf/cs.OH/0503005 (дата обращения 22.01.2010) (Cornell University, 2005).

- "High efficiency and low absorption Fresnel compound zone plates for hard X-ray focusing/Kuyumchyan M., Isoyan A., Shulakov A., Aristov E., Kondratenkov V., Snigirev M., Snigireva A., Yabashi I. URL: http:// arxiv.org/pdf/cs.OH/0503005 (дата обращения 22.01.2010) (Cornell University, 2005).
- 6. The 8th International Conference on X-ray Microscopy (Institute of Pure and Applied Physics, Tokyo, 2006); and references therein /*Aoki S., Kagoshima Y., Y. Suzuki* [and oth.].
- Soft X-ray microscopy at a spatial resolution better than 15 nm / Chao W.L., Harteneck B.D., Liddle J.A., Anderson E.H. [and oth.] // Nature. 2005. Vol. 435. N. 7046. Pp. 1210–1213.
- Zone-doubling technique to produce ultrahighresolution x-ray optics / Jefimovs K., Vila-Comamala J., Pilvi T., Raabe J., Ritala M. [and oth.]// Phys. Rev. Lett., 2007. Vol. 99. N. 26. Pp. 264801.
- Fresnel zone plate imaging of gamma rays; theory / Barret H.H., Horrigan F.A. // Appl. Opt., 1973. Vol. 12. N. 11. Pp. 2686-2702.

## COMPARING OF METHOD OF X-RADIATION PROPAGATION THROUGH DOE IN PARAXIAL AREA

© 2010 A.G. Nalimov, S.N. Khonina

Image Processing Systems Institute of Russian Academy of Sciences, Samara

A results of modeling of X-radiation propagation through a zone plate by different calculating methods are described. A zone plate made of cuprum and silicon is considered. Modeling was calculated by 1D Fresnel conversion, 1D light non-paraxial distribution, 2D integral Rayleight-Zommerfeld, RSoft BeamProp from FullWave program, designed by RSoft Design Group, USA. It is shown, that first three methods have results very close each other. The result of modeling by BeamProp, differs about 10%.

Keywords: zone plate, X-radiation, BeamProp, FullWave, Fresnel conversion, Integral of Rayleigh-Zommerfeld, angle-spectrum.

Anton Nalimov, Research Fellow. E-mail: anton@smr.ru. Svetlana Khonina, Doctor of Physics and Mathematics, Leading Research Fellow. E-mail: khonina@smr.ru