

Прохождение рентгеновского пучка через двумерный фотонный кристалл и эффект Тальбота

В. Г. Кон

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

Фотонный кристалл является одним из наиболее перспективных материалов для многих применений, использующих видимый свет [1]. Существуют одномерные, двумерные и трехмерные фотонные кристаллы. Период изменения плотности материала в таком кристалле находится в интервале от десятых долей микрона до микрона. Так как длина волны жестких рентгеновских лучей в 10000 раз меньше микрона, то возможна только очень малоугловая дифракция на больших расстояниях.

При прохождении плоской рентгеновской волны через такой кристалл как интенсивность излучения, так и фаза становятся периодическими с периодом фотонного кристалла в поперечном направлении. Это периодическое распределение интенсивности удалось зафиксировать с помощью нового метода высокоразрешающей рентгеновской микроскопии [2] в трехмерном фотонном кристалле. В теоретических работах [3,4] было показано, что распределение интенсивности после фотонного кристалла изменяется очень быстро, то есть на расстояниях много меньших, чем период Тальбота $z_T = 2p^2/\lambda$, где p – период кристалла, λ – длина волны излучения. Например, $z_T = 5$ мм для $p = 0.5$ мкм и $\lambda = 0.1$ нм.

Трехмерные фотонные кристаллы содержат много дефектов структуры. Более совершенные двумерные фотонные кристаллы можно изготовить методами литографии на поверхности кремния. При этом возможна структура, показанная на рисунке 1. То есть материал в форме цилиндров образует квадратную решетку с двумя цилиндрами в элементарной ячейке. При определенном направлении пучка рентгеновского излучения плотность материала, усредненная вдоль пучка образует минимумы в форме квадратного корня, то есть очень резкие. При этом, очевидно, возможно каналирование излучения по таким минимумам.

Эффект каналирования рентгеновского излучения через двумерный фотонный кристалл такого типа был теоретически изучен в работе [5]. В данном докладе представлены результаты этой работы. Начиная с 1995 года, после публикации работы [6] широко используется метод рентгеновского фазового контраста для изображения слабопоглощающих объектов с неоднородной плотностью. Если усредненная вдоль пучка плотность изменяется медленно в поперечном направлении, то можно пренебречь изменением траектории рентгеновских лучей в образце и учитывать только набег фазы и слабое поглощение. При этом толщина кристалла учитывается только в множителе, а сам объект считается тонким.

Дальнейшее изменение интенсивности излучения происходит на большом расстоянии после образца.

Кривизна поверхности постоянной фазы приводит к эффектам локальной фокусировки или дефокусировки излучения. Такой метод можно применять и к фотонному кристаллу малой толщины. Однако, при большой толщине фотонного кристалла необходимо реально учитывать изменение излучения в самом образце, а не только набег фазы и поглощение вдоль неизменной траектории.

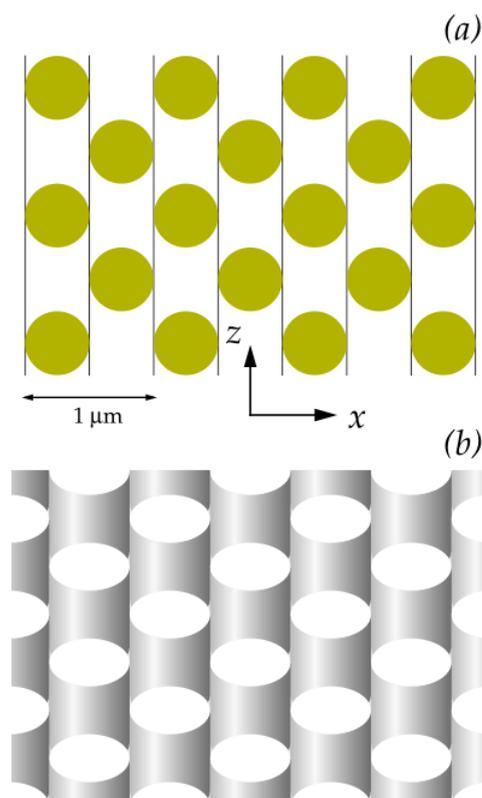


Рисунок 1. Структура двумерного фотонного кристалла в форме цилиндров на поверхности кремния. (a) вид сверху и оси координат, (b) вид сбоку.

В данной работе как раз рассматривается толстый фотонный кристалл и нужен другой метод расчета. Таким методом является итерационный метод, близкий к многослойному методу электронной микроскопии [7], но с дополнительными приемами. Он состоит в том, что методом фазового контраста вычисляется не весь кристалл, а только один или два слоя цилиндров. Сначала волновое поле изменяется на фазовый множитель, соответствующий полному набегу фазы и поглощения в слое. Затем учитывается расстояние до следующего слоя так как будто измененная функция движется по пустому пространству.

Это расстояние имеет относительно малые размеры, и на нем пропагатор Френеля очень сильно

осциллирует. Свертка с пропагатором Френеля вычисляется методом двойного преобразования Фурье, и шаг сетки точек должен быть довольно мелким. С другой стороны, предполагается, что кристалл имеет бесконечные размеры в поперечном направлении. При численном расчете бесконечные размеры описать невозможно. По этой причине принимается во внимание тот факт, что для бесконечного кристалла периодичность волновой функции сохраняется при движении вперед. По этой причине расчет проводится на конечном интервале, содержащем три периода. Это эквивалентно тому, что перед кристаллом установлена щель.

Известно, что при дифракции на щели на малом расстоянии искажаются только боковые области, близкие к краям щели, а центральная часть изменяется так, как будто щель отсутствует. По этой причине после расчета на каждой итерации, центральный период копируется на боковые периоды, сохраняя тем самым периодичность, присущую бесконечному кристаллу. Такой метод позволяет с относительно высокой точностью вычислять изменение волнового поля излучения для достаточно толстых кристаллов.

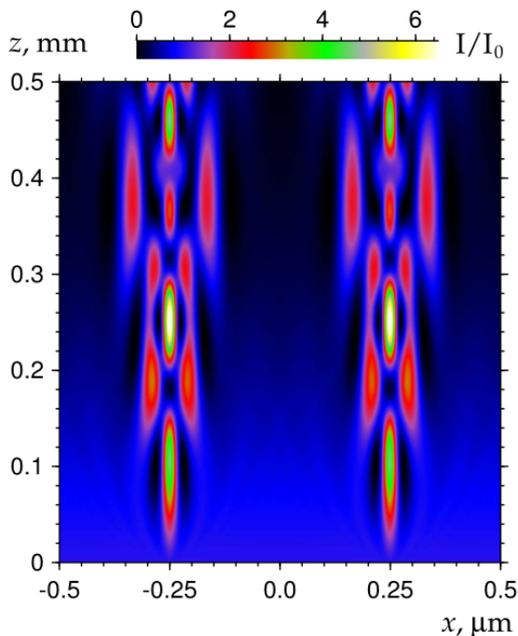


Рисунок 2. Распределение относительной интенсивности на одном поперечном периоде внутри фотонного кристалла в зависимости от его толщины.

Конкретный расчет был выполнен для кристалла кремния, энергии фотонов 12.4 кэВ (длина волны 0.1 нм) и периода квадратной решетки 1 мкм. Предполагалось, что на кристалл падает плоская монохроматическая волна с единичной интенсивностью. Различие в расположении цилиндров в двух соседних слоях очень быстро исчезает и эффективно волновое поле имеет период 0.5 мкм в поперечном направлении. На рисунке 2 показано изменение интенсивности при движении по кристаллу толщиной 0.5 мм. Такой кристалл содержит 1000 слоев цилиндров и вычисляется за 1000 итераций.

На рисунке видно, что интенсивность излучения монотонно уменьшается в тех областях, где материала цилиндров больше всего, то есть на линиях, которые

проходят вблизи центров цилиндров. С другой стороны, на линиях, проходящих вблизи краев цилиндров интенсивность, наоборот, возрастает, но не монотонно, а периодически. При этом увеличение интенсивности сопровождается сжатием пучка, а при уменьшении пучок снова увеличивается в размерах, хотя и неоднородно.

В работе вычислена траектория лучей по законам геометрической оптики, начинающихся в разных точках поперечного сечения кристалла. Оказалось, что они имеют разный период, причем период тем меньше, чем ближе точка к границе цилиндров. Как известно, для параболического профиля изменения плотности все траектории имеют один период и проходят оптическую ось на одном и том же расстоянии. Поэтому в данном случае можно говорить о неполной фокусировке, при которой часть траекторий пересекают оптическую ось на одинаковом расстоянии. Некоторые траектории пересекаются не на оси, а вблизи нее, что и приводит к боковым пикам интенсивности.

На следующем этапе исследовалось распространение волнового поля излучения в пустом пространстве после фотонного кристалла. Очевидно, что сильно модулированное фотонным кристаллом поле остается периодическим на всех расстояниях, если кристалл имеет бесконечное поперечное сечение. В этом случае расчет проводился точно так же, как и в кристалле, но с нулевым сдвигом фазы и поглощением. Кроме того, шаг движения по пространству был больше одного периода кристалла. Однако делать шаг слишком большим было не разумно, так как распределение интенсивности очень сильно изменяется с расстоянием.

В качестве стартового распределения волновой функции был взят результат расчета для толщины кристалла 0.25 мкм, когда пик интенсивности получается наиболее высоким и узким. Результат расчета на интервале расстояний от нуля до 5 мм показан на рисунке 3. Как известно, периодическое волновое поле при движении по пустому пространству полностью воспроизводит себя на некотором расстоянии, а затем все снова повторяется. То есть зависимость от расстояния также является периодической. Этот эффект называется эффектом Тальбота по имени ученого, который впервые описал его в 1836 году [8]. Эффект существует для любого типа излучения, в том числе и в квантовой механике.

В нашем случае период Тальбота равен 5 мм, и как раз такое расстояние является максимальным на рисунке 3. В последующие годы также довольно интенсивно обсуждался вопрос о существовании дробного эффекта Тальбота, который возникает при модуляции излучения с помощью щелей прямоугольной или гауссовой формы в таком варианте, когда модулируется только амплитуда поля, а фаза остается неизменной. Последний случай можно реализовать с помощью системы рентгеновских составных преломляющих линз, когда исходным является поле на расстоянии фокусировки излучения.

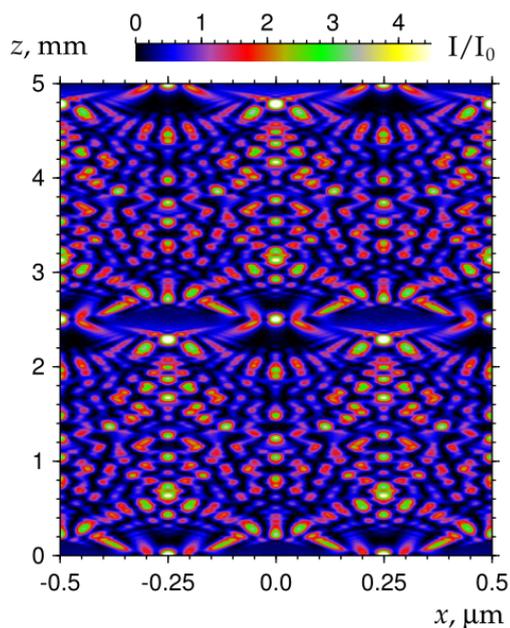


Рисунок 3. Распределение относительной интенсивности на одном поперечном периоде в пустом пространстве после фотонного кристалла толщиной 0.25 мм в зависимости от расстояния.

Как следует из расчета, дробный эффект Тальбота не просматривается, хотя в нашем случае распределение интенсивности имеет высокие и узкие пики. Заметим, что карта цветов на рисунке 3 показывает интервал от 0 до 4.5, хотя максимум относительной интенсивности равен 7. Это сделано для того, чтобы лучше показать распределение в областях с менее высокой интенсивностью.

В связи с этим рассмотрены свойства симметрии распределения интенсивности $I(x, z)$. Эти свойства можно разделить на общие и частные. Вторые выполняются только при отсутствии фазовой модуляции. Общими свойствами являются сам эффект Тальбота

$$I(x, z_T + z) = I(x, z) \quad (1)$$

и периодичность со сдвигом

$$I(x, z_T/2 + z) = I(x - p/2, z) \quad (2)$$

На рисунке 3 оба эти свойства выполняются.

Заметим, что эти свойства следуют из представления волновой функции излучения в виде ряда Фурье. Но численный расчет выполнялся по другой схеме. Поэтому выполнение этих условий можно рассматривать как контроль точности выполненных

расчетов и метода, который лежит в их основе. Другие свойства симметрии, из которых, в частности следует дробный эффект Тальбота требуют постоянной фазы у начальной волновой функции. И они на рисунке 3 не выполняются.

Более того, численные расчеты показывают весьма интересный дополнительный эффект резкой перестройки распределения интенсивности излучения на очень малом расстоянии. Так пик интенсивности в точке $(0, 2.5)$ следует из свойства симметрии (2) и соответствует пику в точке $(-0.25, 0)$. А пик примерно такого типа в точке $(-0.25, 2.3)$ является случайным. При этом такой узкий и высокий пик смещается на полпериода на расстоянии всего 4% от периода Тальбота.

Анализ показал, что этот пик связан с неоднородностью фазы у стартовой волновой функции излучения. Был выполнен расчет, в котором фаза у стартовой волновой функции принудительно обнулялась. Результат показал, что пик в точке $(-0.25, 2.3)$ исчез. Интересно, что такого же типа эффект наблюдался в работе [9], где изучалось как ведет себя интенсивность излучения в пустом пространстве при различной форме стартовой волновой функции. Было показано, что при периодическом изменении фазы определенного типа наблюдаются периодические изменения пиковой интенсивности на расстояниях вблизи половины периода Тальбота.

- [1] Климонский С. О., Абрамова В. В., Синитский А. С., Третьяков Ю. Д. *Успехи химии*, **80**, 1244-1262 (2011)
- [2] Bosak A., Snigireva I., Napolskii K. S., Snigirev A. *Adv. Mater.*, **22**, 3256-3259 (2010)
- [3] Кон В. Г., Цвигун Н. В., *Кристаллография*, **59**, 5-10 (2014)
- [4] Kohn V. G., Snigireva I., Snigirev A., *J. Synchrotron Radiat.*, **21**, 729-735 (2014)
- [5] Kohn V. G., *J. Synchrotron Radiat.*, **25**, 425-431 (2018)
- [6] Snigirev A., Snigireva I., Kohn V., Kuznetsov S., Schelokov I., *Rev. Sci. Instrum.*, **66**, 5486-5492 (1995)
- [7] Goodman P., Moodie A. F., *Acta Cryst. A*, **30**, 280-290 (1974)
- [8] Talbot H. F., *Philos. Mag.*, **9**, 401 (1836)
- [9] Berry M. V., Bodenschatz E., *J. Mod. Opt.*, **46**, 349-365 (1999)