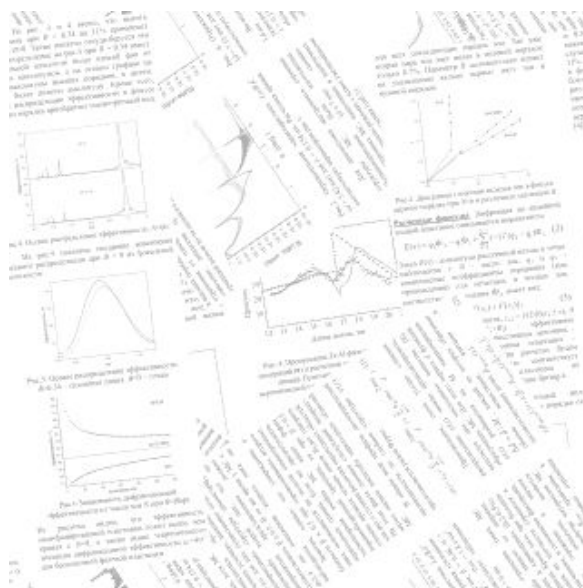


# Рентгеновская оптика – 2014



**Доклады конференции  
г. Черноголовка, 6-9 октября 2014**

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов  
Российской академии наук**

**2014**

## Диагностика дефектов рентгеновской преломляющей линзы и фазовая проблема

В. Г. Кон

Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт», Москва, Россия

e-mail: [kohnvict@yandex.ru](mailto:kohnvict@yandex.ru)

Начиная с 1996-го года [1] рентгеновские преломляющие линзы (РПЛ) широко используются для фокусировки пучков на источниках синхротронного излучения третьего поколения, которые отличаются малыми поперечными размерами и высокой степенью пространственной когерентности. Хотя эффективная апертура РПЛ имеет размер менее одного миллиметра, она вполне соизмерима с размерами пучков на таких источниках, а также на новых источниках – рентгеновских лазерах на свободных электронах.

С самого начала развития рентгеновской преломляющей оптики, и особенно в последние годы, важное значение имеет проблема диагностики дефектов изготовления таких линз. За прошедшие годы было предложено много вариантов преломляющих линз [2], однако наиболее перспективными являются бериллиевые линзы с круглой апертурой и планарные линзы на поверхности пластины из кремния [3].

Дефекты РПЛ приводят к двум следствиям: (1) увеличивается размер пучка в фокальной плоскости по сравнению с дифракционным пределом; (2) за пределами фокуса возникает дополнительное излучение малой интенсивности, что нежелательно, например, при использовании линз для изучения малоуглового рассеяния в образце. Интуитивно ясно, что за первое следствие отвечают длинноволновые отклонения профиля линзы от идеальной параболической формы, а за второе следствие – коротковолновые отклонения.

Наиболее привлекательным методом диагностики дефектов является такой метод, который дает возможность автоматического определения отклонений от параболического профиля на всей апертуре линзы из одного эксперимента. Максимальное отклонение толщины материала в почти совершенной линзе может быть невелико. В этом случае на дополнительной толщине поглощением рентгеновского излучения можно пренебречь, и проблема сводится к определению профиля сдвига фазы, то есть к разновидности фазовой проблемы.

Она состоит в том, что фаза не регистрируется детектором и должна вычисляться из распределения интенсивности. Известно, что РПЛ делает преобразование Фурье волновой функции излучения в фокальной плоскости. Экспериментально можно измерить интенсивность излучения сразу за линзой и в фокальной плоскости, то есть определить модули волновой функции и ее преобразования Фурье.

Имея такой набор данных, для вычисления фазы можно применить итерационный метод Герчберга-Сэкстона (МГС) [4]. Однако, такой подход сложно реализовать экспериментально. Дело в том, что распределение интенсивности в фокальной плоскости имеет характерную длину изменений (ХДИ) меньше микрона, и такое распределение невозможно зафиксировать современными детекторами, разрешение которых по факту не лучше, чем один микрон.

Можно увеличить ХДИ переходя к условиям, при которых РПЛ имеет большое фокусное расстояние. Но при этом увеличивается проекция поперечного размера источника в фокальной плоскости, и распределение интенсивности искажается вследствие неполной когерентности излучения. Для короткофокусных систем МГС был использован как раз для вычисления распределения интенсивности в фокальной плоскости [5], поскольку его невозможно измерить экспериментально.

Заметим, что МГС используется также в методах когерентного дифракционного изображения объектов очень малых размеров (наномикроскоп) [6] и птайкографии [7], как разновидности этого метода для объектов с более крупными размерами. Последний метод требует больших экспериментальных и вычислительных затрат, что снижает его привлекательность.

В данной работе для решения задачи определения дефектной структуры РПЛ из одного эксперимента итерационным методом предлагается использовать распределение интенсивности не в фокальной плоскости линзы, а на более близких расстояниях. Это необходимо по двум причинам. Во-первых, на близких расстояниях пучок слабо сжимается и ХДИ больше, чем разрешение детектора. Во-вторых, на малых расстояниях проекция размера источника мала и излучение можно считать полностью когерентным.

Наиболее интересным является анализ возможностей метода для одномерной РПЛ типа планарной кремниевой линзы. Для круглых линз одномерный подход можно использовать, если ограничить апертуру линзы узкой щелью, проходящей через ее центр, что повышает локальность определения дефектов. Важно также, что в одномерном случае точность численных расчетов намного выше за счет использования метода быстрого преобразования Фурье (FFT) с большим числом точек.

Математическая формулировка задачи состоит в следующем. Волновая функция падающего

на РПЛ монохроматического излучения, нормированная на единицу в максимуме, имеет вид  $(\lambda z_0)^{1/2} P(x, z_0)$ , где  $\lambda$  – длина волны излучения,  $x$  – координата вдоль оси, перпендикулярной направлению пучка,  $P(x, z) = (i\lambda z)^{-1/2} \exp(i\pi x^2/\lambda z)$  – пропагатор Френеля [8], и  $z_0$  – расстояние от точечного источника до РПЛ.

В приближении тонкой линзы РПЛ модифицирует излучение таким образом, что волновая функция умножается на множитель, называемый трансмиссионной функцией. В результате эта функция сразу за линзой имеет вид

$$\psi_0(x) = \psi_{0i}(x) \exp(-i\varphi(x)), \quad (1)$$

$$\psi_{0i}(x) = (\lambda z_0)^{1/2} P(x, z_0) T(x) \quad (2)$$

$$T(x) = \exp(-i\pi(x^2/\lambda f)(1 - i\gamma)), \quad (3)$$

где  $\varphi(x) = K\delta t(x)$ ,  $f = R/2\delta$  – фокусное расстояние линзы в параксиальном приближении,  $R$  – радиус кривизны параболического профиля линзы у его вершины,  $\gamma = \beta/\delta$ , параметры  $\delta$  и  $\beta$  определяют комплексный коэффициент преломления материала линзы как  $n = 1 - \delta + i\beta$ ,  $K = 2\pi/\lambda$  и  $t(x)$  – профиль отклонений толщины материала РПЛ от параболической формы.

Функция  $t(x)$  является неизвестной функцией, которую требуется определить из экспериментальных данных. Формула (3) для  $T(x)$  справедлива в пределах геометрической апертуры линзы, то есть в области  $|x| < x_0 = A/2$ , где  $A$  – размер апертуры РПЛ. За пределами апертуры переменную  $x$  в функции  $T(x)$  надо заменить на  $x_0$ , а  $\varphi(x) = 0$ .

На расстоянии  $z_1$  от РПЛ волновая функция излучения  $\psi_1(x)$  равна свертке пропагатора Френеля  $P(x, z_1)$  и функции  $\psi_0(x)$ . Обозначим символом  $*$  интегрирование по дважды повторяющейся переменной. Тогда формулу для пропагирования вперед (ФПВ) на расстояние от РПЛ до детектора можно записать в виде  $\psi_1(x) = P(x - x_i, z_1) * \psi_0(x_i)$ .

Детектор измеряет кривую  $I(x) = |\psi_1(x)|^2$ . Вычисляя квадратный корень можно получить модуль функции  $\psi_1(x)$ . С другой стороны, зная параметры экспериментальной схемы и параметры РПЛ можно вычислить функцию  $\psi_{0i}(x)$  вместе с ее фазой. Заметим, что справедлива также формула для пропагирования назад (ФПН) от детектора до РПЛ в обратном направлении  $\psi_0(x) = P(x - x_i, -z_1) * \psi_1(x_i)$ .

Итерационный метод решения задачи состоит в следующем. Первоначально заменяем неизвестную функцию  $\psi_0(x)$  на известную функцию  $\psi_{0i}(x) = \psi_0^{(n)}(x)$ ,  $n = 0$ . Затем выполняем следующие шаги: (1) Делаем вычисление по ФПВ. (2) В вычисленной функции  $\psi_1^{(n)}(x)$ , заменяем модуль на величину, известную из эксперимента для РПЛ, у которой есть дефекты, а неизвестную фазу оставляем как есть. (3) Делаем вычисление

по ФПН. (4) Вычисленную функцию делим на функцию  $\psi_{0i}(x)$  в каждой точке. В результате получаем комплексную функцию  $C^{(n)}(x)$ , фаза которой  $\varphi^{(n)}(x)$  является  $n$ -м приближением к решению. (5) Заменяем модуль функции  $C^{(n)}(x)$  на единицу и снова умножаем ее на функцию  $\psi_{0i}(x)$  в каждой точке. В результате получаем следующее приближение  $\psi_0^{(n+1)}(x)$ .

Шаги (1) – (5) представляют собой одну итерацию перехода от  $n$ -го к  $(n+1)$ -му приближению для  $\psi_0(x)$ . Для получения решения задачи таким способом необходимо выполнить большое число итераций до тех пор, пока функция  $\varphi^{(n)}(x)$  не перестанет изменяться при выполнении новых итераций. Как показывают численные эксперименты такой момент всегда наступает. Главной проблемой в таком подходе является доказательство утверждения, что полученная функция и есть единственное решение задачи, и что другие решения отсутствуют.

Очевидно, что полученное решение будет удовлетворять экспериментальному профилю  $I(x)$ . Во многих работах по развитию итерационных методов решения обратной задачи используют именно экспериментальные данные и получают какие-то сведения о дефектах в конкретной РПЛ, а вопрос о единственности решения вообще не обсуждается.

Этот вопрос можно исследовать в численном эксперименте, если отказаться от реальных экспериментов и смоделировать заранее заданные дефекты, то есть функцию  $\varphi(x)$ . Тогда появляется возможность сравнить полученное решение с исходным профилем дефектной фазы, и, соответственно, получить представление о единственности решения итерационного процесса при старте с идеальной РПЛ.

Конкретные расчеты были выполнены для энергии фотонов 6 кэВ и составной РПЛ из 15 элементов, каждый из которых представлял собой двояко-вогнутую бериллиевую линзу с  $R = 50$  мкм и  $A = 450$  мкм. Расстояние  $z_0 = 50$  м, а расстояние  $z_1$  выбиралось из оптимальных условий решения задачи. Фокусное расстояние составной РПЛ  $f = 17.7$  см. Вычисление свертки проводилось методом обратного фурье-преобразования произведения фурье-образов исходных функций с использованием процедуры FFT на сетке из 16384 точек с шагом 0.04 мкм.

Очень малая энергия фотонов была выбрана по двум причинам: чтобы иметь малое значение фокусного расстояния  $f$ , и чтобы линза почти полностью поглощала на краях апертуры при относительно небольшом числе элементов. Как известно [9], эффективная апертура линзы равна  $A_e = 0.66(\lambda f/\gamma)^{1/2} = 143$  мкм ( $\gamma = 7.8 \times 10^{-4}$ ), а ширина модуля функции  $\psi_{0i}(x)$  равна 202 мкм.

Функция  $\varphi(x)$ , определяющая дефектность линзы может иметь разные максимальные значения  $\varphi_m$  и зависимость от координаты. Изучить

все многообразие вариантов не представляется возможным, да это и не требуется. Ясно, что если  $\varphi_m \ll 1$ , то линзу можно считать идеальной независимо от профиля дефектов. Если же  $\varphi_m \gg 1$ , то такая линза очень плохая и опять нет смысла ее изучать.

По этой причине рассмотрено значение  $\varphi_m = 1$ . Для моделирования равномерно распределенных искажений в пределах апертуры линзы, функция  $\varphi(x)$  задавалась конечным рядом Фурье на всей апертуре, причем рассматривались лишь такие функции, которые равны нулю на краях апертуры. Все коэффициенты ряда задавались генератором случайных чисел, кроме первого, который определялся из условия равенства нулю интеграла от  $\varphi(x)$ . ХДИ для такой деформации равна отношению апертуры линзы на число членов ряда Фурье такого искажения.

Результаты расчетов можно сформулировать следующим образом. Для профилей со средним периодом 12 мкм уже на расстоянии  $z_1 = 6$  см интенсивность заметно отклоняется от таковой для идеальной линзы. За 1000 итераций можно получить решение достаточно близкое к исходному, за 5000 итераций решение можно чуть улучшить, при дальнейшем увеличении числа итераций ничего не происходит. Интересно, что решение получается одинаково точным на всей апертуре линзы.

Однако полученное решение все же не идеально точно совпадает с исходным, хотя и описывает все минимумы и максимумы с точностью, достаточной для получения правильной информации о дефектности линзы. Типичный пример функции  $\varphi(x)$  показан на Рис. 1, где синяя кривая описывает исходный профиль, а красная кривая – полученное решение.

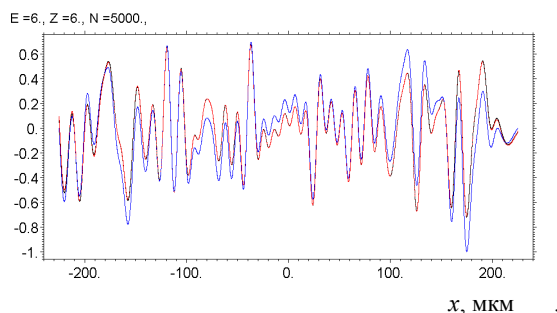


Рис.1. Функция  $\varphi(x)$

Для профилей со средним периодом 25 мкм нужно брать большее расстояние  $z_1 = 8$ , и решение слегка улучшается даже при 10000 итераций. Снова решение не вполне точно совпадает с исходным, но правильно описывает все максимумы и минимумы.

Для профилей со средним периодом 50 мкм интенсивность очень слабо меняется на малых расстояниях от линзы. Решение с разумной точностью можно получить при  $z_1 = 25$  см, то есть дальше фокальной плоскости. Расстояния,

очень близкие к фокусному расстоянию не годятся по причине конечного разрешения детектора.

Полученные результаты можно объяснить следующим образом. Чем плавнее деформация, тем слабее она изменяет интенсивность на малых расстояниях и нужно отходить все дальше. Но вблизи фокуса пучок очень сильно сжимается и работать в этой области нельзя. Для очень плавных деформаций можно работать на расстояниях за фокусом.

Решение получается достаточно близким к исходному, что указывает на его однозначность. Однако получить весьма высокое совпадение не удается по той причине, что распределение интенсивности содержит недостаточно информации, то есть интенсивность нечувствительна к малому изменению деформации.

Интересно также изучить возможность получения локальной деформации. Типичным искажением является перетрав в центральной части линзы, когда там возникает микро-линза с другим радиусом кривизны (обычно меньше, чем основной радиус). Результаты расчетов показали, что для такого дефекта тоже можно получить однозначное решение, причем достаточно точное при разумном выборе расстояния  $z_1$ .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 13-02-00469 и Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 8364

[1] A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, B. Lengeler, 1996, Nature, 384, 49-51.

[2] В. В. Аристов, Л. Г. Шабельников, 2008, УФН, 178, 61-83

[3] B. Lengeler, C. G. Schroer, M. Kuhlmann, B. Benner, T. F. Gunzler, O. Kurapova, F. Zontone, A. Snigirev, I. Snigireva, 2005, J. Phys. D: Appl. Phys., 38, A218-A222

[4] R. W. Gerchberg, W.O.Saxton, 1975, Optik, 35, 237.

[5] H. M. Quiney, A. G. Peele, Z. Cai, D. Paterson, K. A. Nugent, 2006, Nature Physics, 2, 101-104

[6] S. Boutet, I. K. Robinson, 2008, J. Synchr. Rad., 15, 576-583

[7] I. Peterson, B. Abbey, C.T. Putkunz, D.J. Vine, G.A. van Riessen, G.A. Cadenazzi, E. Balaur, R. Ryan, H.M. Quiney, I. McNulty, A.G. Peele, K.A. Nugent, 2012, Opt. Express, 20, 24678-24685

[8] Дж. Каули, Физика дифракции, Мир, Москва, 1979, 431 с.

[9] V. G. Kohn, J. Synchrot. Rad., 2012, 19, 84-92.