

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА ОПТИКИ, СПЕКТРОСКОПИИ И ФИЗИКИ НАНОСИСТЕМ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

«АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ НАРУШЕНИЙ ТОПОЛОГИИ ПЛАНАРНЫХ  
СОСТАВНЫХ ПРЕЛОМЛЯЮЩИХ ЛИНЗ НА ФОРМИРОВАНИЕ  
СФОКУСИРОВАННЫХ ПУЧКОВ СИНХРОТРОННОГО  
ИЗЛУЧЕНИЯ»

Выполнил студент  
441 группы  
Александров Александр Витальевич

---

Научные руководители:  
д.ф. м.н., доцент, Стремоухов Сергей Юрьевич

---

к.ф. м.н., в.н.с.  
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Просеков Павел Андреевич

---

Допущена к защите  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_

МОСКВА  
2023

# Оглавление

Введение . . . . .	2
1. Литературный обзор . . . . .	5
1.1. История развития нанофокусирующей преломляющей оптики	5
1.2. Теория фокусировки СИ с помощью планарных СПЛ . . . . .	9
1.3. Теоретическое описание поверхностей с шероховатым профилем	12
2. Основная часть . . . . .	16
2.1. Модификация БПФ . . . . .	16
2.2. Математическое описание шероховатого профиля элемента параболической планарной СПЛ . . . . .	17
2.3. Алгоритм расчета трансмиссионной функции . . . . .	17
2.4. Анализ влияния ШП . . . . .	19
2.5. Эксперимент по фокусировке с использованием планарных СПЛ	24
Заключение . . . . .	26
Список использованных источников . . . . .	28

## ВВЕДЕНИЕ

Фокусировка пучков синхротронного излучения (СИ) в нанометровый поперечный размер – одно из актуальных направлений современной рентгеновской оптики. СИ обладает рядом уникальных свойств: высокая яркость, непрерывный спектр, узконаправленность излучения. Обладая такими свойствами, источник СИ является востребованным инструментом для исследований, ведущих к созданию уникальных современных научных технологий. Благодаря СИ стали возможны ранее нереализуемые исследования в различных областях науки и промышленности: нанотехнологии, биология, медицина и микроэлектроника [1, 2]. Нанофокусировка пучков СИ открывает новые возможности исследования структуры микро- и нанообъектов благодаря повышению интенсивности излучения и локальности проводимых исследований.

Одним из эффективных и перспективных способов реализации нанофокусировки пучков СИ является использование планарных составных преломляющих линз (СПЛ), представляющих собой набор последовательно расположенных рентгеновских преломляющих элементов. Постепенное преломление рентгеновских лучей происходит по мере прохождения через последовательность элементов, расположенных вдоль оптической оси. Усиление преломляющего эффекта обусловлено использованием большого количества преломляющих элементов, близко расположенных друг к другу.

Такая концепция была первоначально реализована в работе [4] для одномерно-фокусирующей линзы, изготовленной в виде набора цилиндрических отверстий в алюминии. СПЛ получили широкое распространение на современных источниках СИ, и в настоящее время

продолжается активное развитие технологий их изготовления. Для микро- и нанофокусировки используются планарные СПЛ, изготовленные с помощью технологий микротекстурирования поверхности кремния. При изготовлении кремниевых СПЛ используется плазменный процесс травления, так называемый «Bosch»-процесс. Технологии такого процесса позволяют изготавливать линзы с апертурой порядка 50 мкм и менее, фокусное расстояние которых составляет несколько миллиметров. Преимуществом использования параболических композиционных преломляющих линз подобного типа является почти полное отсутствие геометрических aberrаций излучения и способность работать в широком диапазоне энергий излучения.

Применение нанофокусировки СИ в России на сегодняшний день находится на стадии развития. Подобные исследования проводятся на Курчатовском источнике СИ. Кроме того, в ближайшее десятилетие намечено создание нескольких установок нового поколения, позволяющих получать пучки СИ с ультрамалым эмиттансом, высокими значениями яркости и когерентности. На таких источниках применение нанофокусирующих СПЛ позволит получить высокоинтенсивный пучок СИ размером 20 нм и менее. Для реализации таких рекордных значений нанофокусировки необходимы: адекватная аналитическая теория фокусировки, развитый математический аппарат для расчета фокусирующих схем и отработанная технология изготовления СПЛ.

В настоящее время в теоретических и численных расчетах фокусировки используются идеальные параметры СПЛ и рассмотрение учета влияния нарушения топологии СПЛ на их фокусирующие свойства в литературе широко не освещено. В частности, открытым остается вопрос о влиянии случайных шероховатостей преломляющих поверхностей СПЛ на распределение интенсивности пучка СИ в окрестности фокуса.

Целью данной работы является исследование с применением численного моделирования влияния нарушения топологии планарных СПЛ на их фокусирующие свойства и проведение эксперимента по фокусировке пучка СИ источника 2-го поколения с помощью планарных СПЛ из кремния.

Для достижения цели работы поставлены следующие задачи:

1. Литературный обзор, в рамках которого проводится описание истории развития нанофокусирующей преломляющей оптики, обзор теории фокусировки СИ с помощью СПЛ, и обзор способа описания дефекта топологии профиля элемента СПЛ.
2. Освоение аналитической теории и основных принципов расчетов в области фокусировки СИ с использованием СПЛ
3. Построение математической модели для анализа влияния дефектов топологии элементов СПЛ на их фокусирующие свойства
4. Проведение численных расчетов формирования сфокусированного пучка СИ с помощью СПЛ с дефектами топологии и анализ полученных результатов расчетов.
5. Проведение эксперимента с помощью кремниевых линз и характеризация параметров сфокусированного пучка

## 1. Литературный обзор

### 1.1. История развития нанофокусирующей преломляющей оптики

Впервые СПЛ были изготовлены группой ученых в середине 90-х и использованы на практике для СИ [4]. СПЛ представляла собой ряд из 30 цилиндрических отверстий (радиусом 0,3 мм), параллельно просверленных в блоке из алюминия. (рис. 1а).

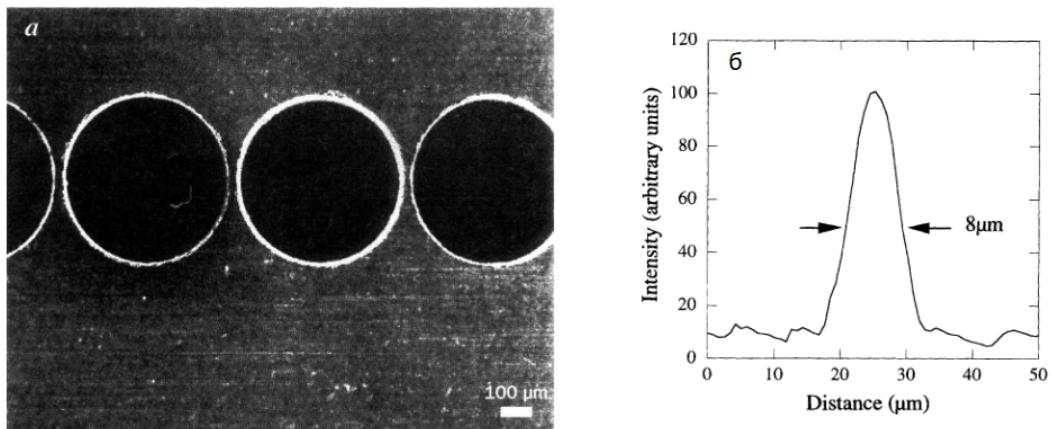


Рисунок 1 - (а) СЭМ-изображение СПЛ и (б) распределение интенсивности в фокусе [4]

Такая конструкция (рис. 2) с двояковогнутыми элементами СПЛ позволила собрать пучок в фокусе размером 8 мкм (рис. 1б).

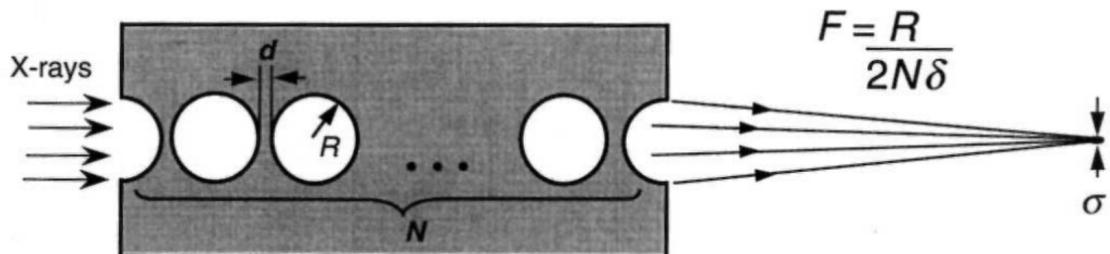


Рисунок 2 - Оптическая схема, демонстрирующая фокусировку рентгеновского излучения с использованием СПЛ [4]

Работа положила начало для развития технологий изготовления и использования СПЛ для фокусировки СИ. В скором времени после открытия была опубликована работа [8], в которой была представлена планарная линза с параболической поверхностью (рис. 3), линзы такой формы обладают преимуществом благодаря почти полному отсутствию геометрической aberrации.

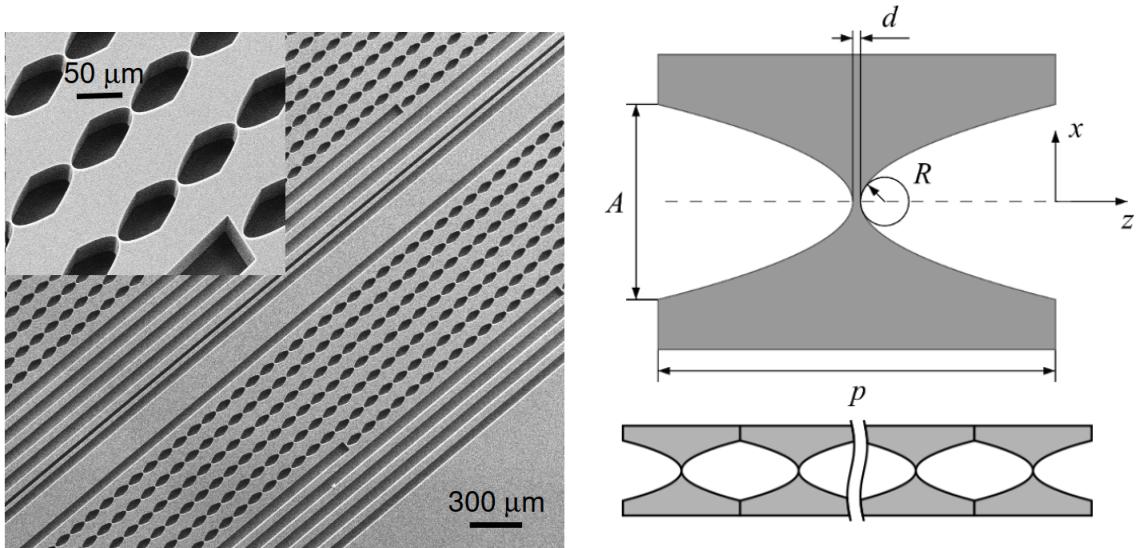


Рисунок 3 - Планарные параболические СПЛ на поверхности кремния и схематичное изображение элемента СПЛ [12]

В работе [9] представлено более подробное рассмотрение фокусирующих свойств таких линз и приведены результаты их экспериментального применения. Было выявлено согласование экспериментальных и теоретических данных. Также установлено, что планарные СПЛ с параболической поверхностью идеально подходят для фокусировки излучения СИ в широком диапазоне энергий. В работе [5] продемонстрирована возможность получения пучка полушириной 0.48 мкм на синхротроне 3-го поколения с помощью параболической двумерно-фокусирующей СПЛ (рис. 4), состоящей из двухсот последовательно расположенных алюминиевых элементов с апертурой 209 мкм.

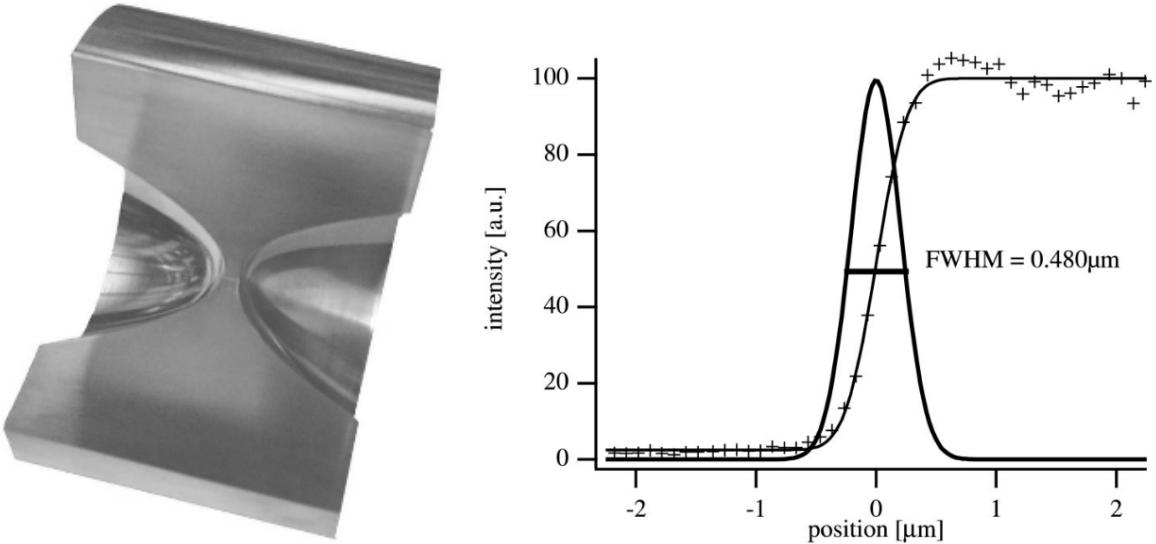


Рисунок 4 - Модель алюминиевой трехмерной СПЛ (один квадрант удален, чтобы показать профиль линзы) и распределение интенсивности в фокусе, измеренное методом ножевого сканирования [5]

Стоит отметить, что для описания распространения излучения через элемент СПЛ применима теория фазового контраста изображения [11]. Также существует другой способ в виде аналитического описания фокусировки СПЛ - в работе [6] получено точное решение для пропагатора, описывающего распространение рентгеновских лучей через преломляющую параболическую среду, и год спустя [7] была разработана теория формирования изображения с помощью рентгеновской линзы, состоящей из большого количества элементов. Получено точное выражение для пропагатора непрерывно преломляющей линзы, описывающее перенос излучения через преломляющую параболическую среду. В 2005-м году опубликована работа [10], в которой предлагается адиабатическая линза, способная фокусировать излучение размером порядка нм, однако, такие линзы в настоящее время не получили широкого распространения, так как их изготовление связано с рядом технологических трудностей. Сравнительно недавно учёные физического факультета МГУ продемонстрировали результаты работы [13] по созданию полимерных линз и исследованию их свойств для фокусировки рентгеновского излучения в лабораторных условиях.

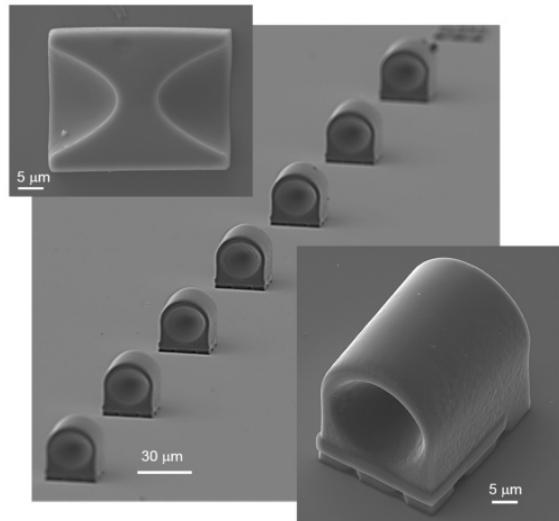


Рисунок 5 - СЭМ-изображение полимерной СПЛ [13]

Данные линзы представляют собой двояковогнутые параболоиды вращения с малым радиусом кривизны 5 мкм. СПЛ, состоящая из 7 одиночных элементов способна сфокусировать пучок размером 5 мкм. В 2021-м опубликована работа [3] в рамках которой установлено, что для СПЛ с относительно большой апертурой эффективность фокусировки ограничивается поглощением излучения материалом линзы. Для повышения эффективности фокусировки требуется использование жесткого рентгена и уменьшение апертуры элементов СПЛ. Также результаты работы уточняют и дополняют широко распространенное мнение о том, что материалы, состоящие из легких атомов (например: бериллий, алмаз, алюминий) являются преимущественными для СПЛ. На самом деле такие материалы эффективны только для мягкого рентгеновского излучения, однако, для жесткого рентгена перспективны материалы, состоящие из тяжелых атомов (например: никель, кремний).

В рамках настоящей работы рассматриваются планарные СПЛ из кремния, так как использование таких СПЛ позволяют фокусировать пучок СИ до нанометрового размера.

## 1.2. Теория фокусировки СИ с помощью планарных СПЛ

Элементы с вогнутым профилем фокусируют рентгеновские лучи, это связано с тем, что вакуум для РИ является оптически более плотной средой, чем вещество из которого изготовлены преломляющие элементы. Показатель преломления для рентгеновских лучей выражается в виде:

$$n = 1 - \delta + i\beta, \quad (1)$$

где  $\delta$  – декремент показателя преломления, а  $\beta$  – коэффициент поглощения. Коэффициенты  $\delta$  и  $\beta$  определяются длиной волны источника  $\lambda$  и свойствами материала преломляющего элемента: плотность, зарядовое и атомное число. Для рентгеновского излучения коэффициенты составляют порядка  $\delta \sim 10^{-6}$  и  $\beta \sim 10^{-8}$ , следовательно, рентгеновские лучи преломляются достаточно слабо. Ввиду слабого преломления РИ, с высокой точностью может быть использовано параксиальное приближение, в рамках которого рассматриваются только лучи, идущие под малыми углами к главной оптической оси  $z$ . Также стоит отметить, что параксиальное приближение существенно упрощает теоретические расчеты.

Распространение лучей в СПЛ может быть описано в рамках геометрической оптики. Пусть  $x$  координатная ось, расположенная в плоскости линзы и перпендикулярная оптической оси  $z$ , тогда планарные линзы фокусируют излучение в плоскости  $(x, z)$ .

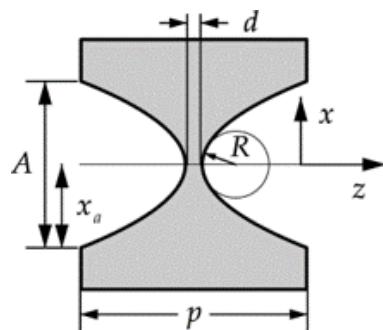


Рисунок 6 - Схематичное изображение элемента параболической планарной СПЛ с указанием параметров

В этом случае волновой фронт излучения с фазой  $\varphi$  распространяется по направлению близкой к главной оптической оси  $z$ . Угол  $\theta$  между лучом и осью  $z$  может быть описан простой формулой [3]:

$$\theta = k^{-1} \frac{d\varphi}{dx}, \text{ где } k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (2)$$

Для линзы с постоянной плотностью материала зависимость сдвига фазы внутри линзы при заданном  $x$  равна  $\Delta\varphi = -k\delta\Delta z$ , где  $\Delta z$  - путь луча внутри материала линзы [3]. Таким образом, несложно рассчитать изменение угла на границах воздух-материал и материал-воздух. Такой подход позволяет провести оценку фокусного расстояния СПЛ, однако для точного описания распространения излучения через СПЛ необходимо использовать теоретические подходы волновой оптики.

Известно, что СИ в значительной степени поляризовано и, кроме того, поляризация не влияет на фокусирующие свойства, поэтому в теории фокусировки пучка СИ с помощью СПЛ рассматривается скалярная волновая функция (ВФ)  $E(x, z)$  точечного источника монохроматического излучения [14]. В соответствии с параксиальным приближением ось  $z$  соответствует большим расстояниям от миллиметра до нескольких метров, а для оси  $x$  характерный масштаб изменения ВФ в этих направлениях составляет десятки микрон, то есть  $z \gg x$ . Излучение точечного источника в вакууме описывается пропагатором Френеля:

$$P(x, z) = \frac{1}{\sqrt{i\lambda z}} \exp(i\pi \frac{x^2}{\lambda z}). \quad (3)$$

В настоящей работе для описания распространения ВФ в оптической схеме с СПЛ используется способ, который называется проекционным приближением, в рамках которого отдельный элемент СПЛ описывается с помощью широко известной теории фазово-контрастной визуализации [11, 16]. Благодаря слабому преломлению рентгеновского излучения, одиночный элемент СПЛ может быть представлен в виде фазового объекта размеры которого вдоль оси  $z$  пренебрежительно малы и приравниваются к нулю. Однако, при распространении ВФ через фазовый объект происходит сдвиг комплексной фазы излучения локально в каждой точке, включая и

ее мнимую часть, связанную с поглощением. Такое изменение описывается умножением ВФ излучения на трансмиссионную функцию объекта:

$$E(x, z + z_0) = T(x) \cdot E(x, z). \quad (4)$$

Трансмиссионная функция объекта не зависит от ВФ излучения и описывает фазовый объект по формуле (5).

$$T(x) = \exp\{-ik[\delta - i\beta]t(x)\}, \quad (5)$$

где  $t(x)$  – функция выражающая зависимость толщины элемента вдоль оси  $z$  в зависимости от  $x$ . В случае идеальной параболической линзы толщина элемента СПЛ складывается из двух парабол, описывающих профиль поверхности идеального элемента, и толщины перемычки между ними:

$$t(x) = 2 \cdot \frac{x^2}{2R} + d. \quad (6)$$

Согласно принципу Гюйгенса-Френеля, изменение ВФ при переносе излучения на расстояние  $z$  описывается ее сверткой с пропагатором Френеля:

$$E(x, z) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 E(x_1, 0) P(x - x_1, z) = E(x, 0) \circledast P(x, z). \quad (7)$$

Вычисление свертки (7) производится по теореме о свертке, согласно которой свертка двух функций равна обратному Fourier-преобразованию произведения их Fourier образов:

$$E(x, 0) \circledast P(x, z) \equiv \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}(E(x, 0)) \cdot \mathcal{F}(P(x, z))]. \quad (8)$$

Эффективным методом численного расчета преобразования Fourier является алгоритм быстрого преобразования Fourier (БПФ). Вычисление прямого и обратного БПФ по алгоритму Кули-Тьюки [15] происходит по

следующим формулам соответственно:

$$\begin{cases} F_m = \sum_{k=1}^{n-1} F'_k \exp\left\{-2\pi i \frac{mk}{n}\right\}, \\ F'_k = \frac{1}{n} \sum_{m=1}^{n-1} F_m \exp\left\{-2\pi i \frac{mk}{n}\right\}. \end{cases} \quad (9)$$

Распределение интенсивности излучения по оси  $x$  на заданном расстоянии  $z$  определяется с точностью до постоянного множителя по известной формуле:

$$I(x) = |E(x)|^2. \quad (10)$$

В аналитической теории формирования изображения для рентгеновской линзы, состоящей из большого количества элементов [6, 7], СПЛ представляет собой среду с постоянной плотностью вдоль оси  $z$  при заданном значении координаты  $x$ . Впервые теория была описана для получения аналитического решения с использованием уравнений Максвелла, которое использовалось для оценки параметров сфокусированного пучка, что упрощало проведение экспериментов. В статье [3] продемонстрировано, что аналитическая теория и проекционное приближение обладают достаточно высокой степенью точности, особенно для высоких энергий фотонов. В настоящей работе с помощью этой аналитической теории проводится оценка фокусного расстояния и теоретического размера пучка в фокусе для идеальной СПЛ.

### 1.3. Теоретическое описание поверхностей с шероховатым профилем

Изготовление планарных СПЛ представляет собой процесс глубокого травления кремния с переменными циклами травления и пассивации, так называемый «Bosch»-процесс [21]. Такой процесс активно применяется для травления кремниевых микроструктур. В основе процесса лежит следующий механизм: газы пассивации и травления подаются отдельно и попаременно в технологическую камеру и подложка травится в плазме высокой плотности, в ходе циклов пассивации и травления. На стадии травления пассивирующий слой удаляется со дна канавок

быстрее, чем со стенок, что в итоге позволяет получить анизотропность процесса травления. В результате исследования [22], в которой отчасти исследуется поверхность СПЛ, изготовленной с помощью «Bosch»-процесса, профиль элемента СПЛ рассматривается как поверхность с шероховатостями (рис. 7). Поэтому в качестве нарушения топологии СПЛ в рамках настоящей работы рассматривается шероховатость преломляющей поверхности отдельных фокусирующих элементов СПЛ.

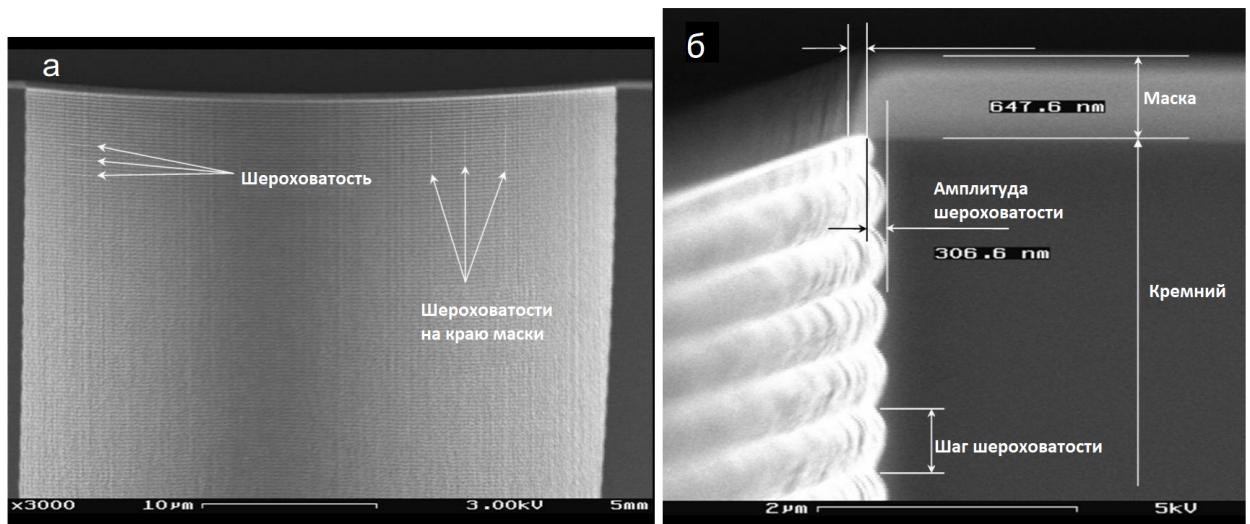
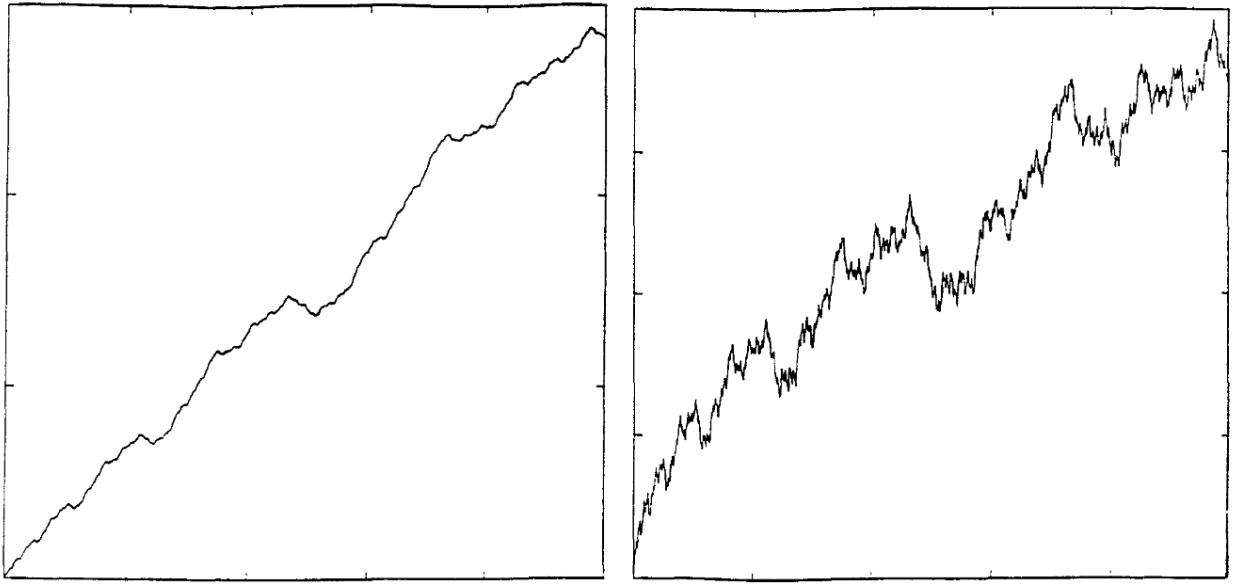


Рисунок 7 - СЭМ-изображения поверхностей протравленных линз, демонстрирующие недостатки изготовления (шероховатость) [22]

Широкое использование для моделирования профилей шероховатых поверхностей (ШП) получила фрактальная геометрия. Для описания профиля ШП элементов СПЛ была выбрана фрактальная функция Вейерштрасса-Мандельброта (ВМ) [17].

$$f(t^*) = G^{D-1} \sum_{n=n_{min}}^{n_{max}} \frac{\cos(2\pi\gamma^n t^* + \phi)}{\gamma^{(2-D)n}}; \quad 1 < D < 2; \quad \gamma > 1, \quad (11)$$

где  $\gamma$  - параметр масштабирования,  $\phi$  - случайная фаза,  $D$  - фрактальная размерность,  $G$  - постоянная масштабирования. Стоит отметить, что параметр масштабирования равен  $\gamma = 1.5$  для описания броуновской поверхности [17].



(а)  $D = 1.1$

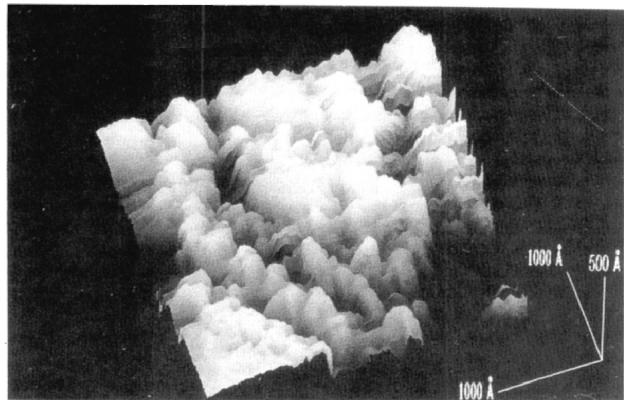
(б)  $D = 1.5$

Рисунок 8 - Функция Вейерштрасса-Мандельброта с фрактальной размерностью  $D$  [20]

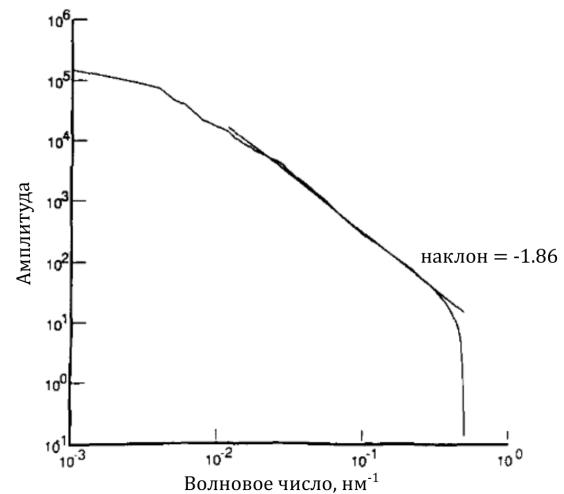
Фрактальная размерность характеризует частоту шероховатости (рис. 8), границы этих частот  $w_{min}$  и  $w_{max}$  определяются через  $n_{min}$  и  $n_{max}$ , которые определяются характерным масштабом поверхности и частотой дискретизации расчетной сетки, соответственно. Параметр  $G$  может быть аналитически выражен через среднеквадратичное отклонение высот шероховатости  $\sigma$  профиля ШП [18]:

$$G = \left[ \left( \frac{2(4 - 2D) \ln \gamma}{\frac{1}{w_{min}^{4-2D}} - \frac{1}{w_{max}^{4-2D}}} \right)^{\frac{1}{2}} |\sigma| \right]^{\frac{1}{D-1}} \quad (12)$$

Таким образом, согласно уравнениям (12-13), для описания ШП используются два независимых параметра - фрактальная размерность  $D$  и амплитуда ШП  $\sigma$ . Применение такой модели для масштабов микронного и субмикронного размера рассмотрена в ряде работ [18–20]. Например, в работе [18] проводилось исследование влияния ШП в микроканалах на свойства ламинарного течения. Применимость функции ВМ для описания ШП подтверждается с помощью фурье-преобразования изображения сканирующей тунNELьной микроскопии для кремния и ряда других материалов [20].



(а)



(б)

Рисунок 9 - (а) поверхность излома кремния и (б) спектральная плотность мощности поверхности кремния в логарифмическом масштабе [20]

На рисунке 9а представлено изображение сканирующей туннельной микроскопии для поверхности излома кремния, а на рисунке 9б представлен график зависимости амплитуды ШП от частоты или спектральная плотность мощности. Характерная особенность такой зависимости заключается в экспоненциальном падении амплитуды при увеличении частоты шероховатости.

## 2. Основная часть

В рамках основной части проводится построение математической модели для анализа влияния дефектов топологии элементов СПЛ на их фокусирующие свойства.

### 2.1. Модификация БПФ

Для корректного вычисления интеграла свертки в формуле 8 необходимо модифицировать формулы БПФ, умножив на амплитудный  $A$  и фазовый  $C_k$  коэффициенты.

$$\begin{cases} A = \exp\left\{-i\pi\left[\frac{N}{2} + 1 - \frac{1}{2n}\right]\right\}, \\ C_k = \exp\left\{i\pi k\left[1 - \frac{1}{n}\right]\right\}. \end{cases} \quad (13)$$

Необходимость модификации связано с тем, что при использовании БПФ для корректного расчета требуется точное значение ВФ в точке  $x = 0$ , но при моделировании используется расчетная сетка, не удовлетворяющая этому требованию. Расчетная сетка симметрична относительно нуля, число точек и шаг расчетной сетки составляли  $N_x = 2^{15}$  и  $dx = 5$  нм соответственно. Вычисление прямого и обратного фурье-преобразования по модернизированному алгоритму происходит по следующим формулам соответственно:

$$\begin{cases} F_m = AC_m dx \sum_{k=0}^{n-1} \exp\left\{-2\pi i \frac{mk}{n}\right\} F'_k C_k, \\ F'_k = \frac{A^* C_k^*}{ndx} \sum_{m=0}^{n-1} \exp\left\{-2\pi i \frac{mk}{n}\right\} F_m C_m^*. \end{cases} \quad (14)$$

## 2.2. Математическое описание шероховатого профиля элемента параболической планарной СПЛ

Для описания шероховатости вдоль поверхности параболической формы был использован подход с преобразованием координат, в результате которого, шероховатый профиль поверхности элемента СПЛ (в декартовых координатах), рассчитывается с помощью параметрически заданной кривой:

$$\begin{cases} x(t) = t - \frac{2atf(t^*)}{\sqrt{1 + (2at)^2}}, \\ z(t) = at^2 + \frac{f(t^*)}{\sqrt{1 + (2at)^2}}, \end{cases}, t^* = \frac{t}{2} + t\sqrt{a^2t^2 + \frac{1}{4}}, \quad (15)$$

где  $f(t^*)$  - функция, моделирующая отклонение поверхности, в криволинейных координатах  $(\vec{\tau}, \vec{n})$ , где  $\vec{\tau}$  и  $\vec{n}$  касательная и нормаль к параболе  $z = ax^2$  (рис. 10).

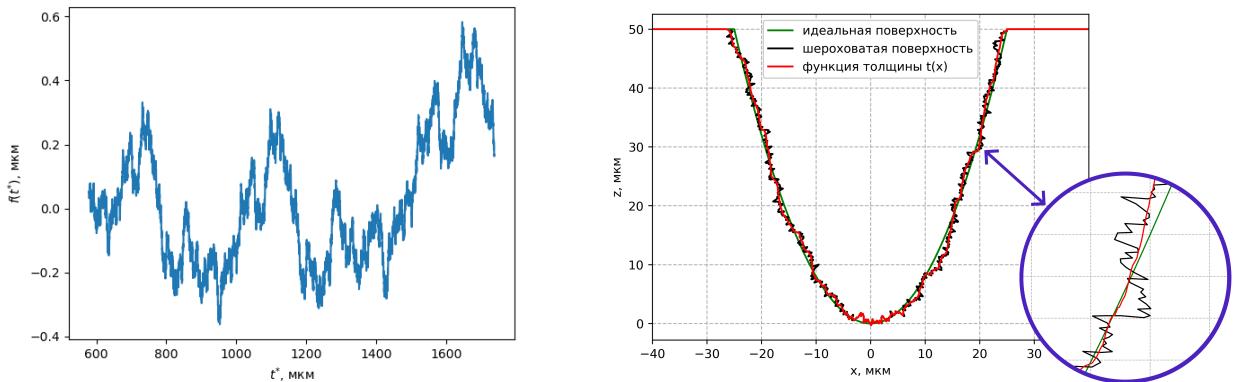


Рисунок 10 - Функция моделирующая ШП и профиль поверхности линзы

В нашем случае  $f(t^*)$  является функцией ВМ. Например, в случае  $f(t^*) = 0$  мы получим профиль идеальной параболы, то есть отсутствие отклонения вдоль профиля параболической формы.

## 2.3. Алгоритм расчета трансмиссионной функции

Для вычисления трансмиссионной функции  $T(x)$  по формуле (5) требуется определить функцию толщины элемента СПЛ  $t(x)$ . На рисунке 11 представлена иллюстрация к разработанному алгоритму поиска толщины элемента. Алгоритм представляет собой интерполяционный

поиск точек пересечения кривой описывающей поверхность с заданными прямыми (изображены пунктирумыми линиями) параллельными оси  $z$ . Точки пересечения являются границами раздела сред (вакуума и материала СПЛ), и по ним находится суммарная толщина элемента СПЛ вдоль заданной прямой.

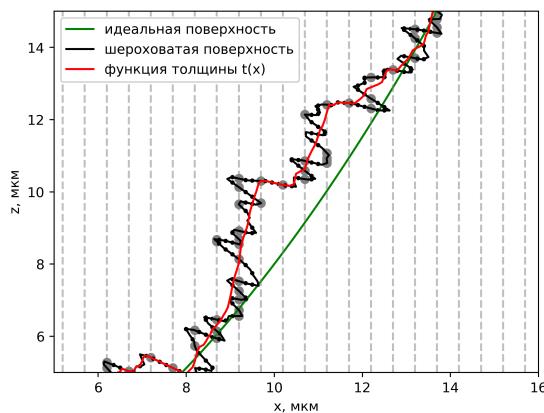


Рисунок 11 - Иллюстрация к алгоритму поиска границ раздела сред (вакуум и материал СПЛ)

Так происходит вычисление трансмиссионной функции элемента с шероховатым параболическим профилем. Стоит отметить, что алгоритм интерполяционного поиска толщины элемента является вычислительно-трудоемкой задачей, однако, за счет применения параллельного программирования и использования вычислительной видеокарты удалось существенно уменьшить время вычисления одного элемента СПЛ (от нескольких минут до нескольких секунд).

Моделирование проводилось с использованием объектно-ориентированного подхода на интерпретируемом языке программирования Python. Для моделирования оптических рентгеновских схем была создана и использована программная библиотека «opticaldevicelib» [24]. Также в проекте использовались программные библиотеки: «numpy», «numba», «pandas», «scipy» и «matplotlib».

## 2.4. Анализ влияния ШП

Для исследования влияния ШП были проведены расчеты для оптической схемы, в которой источник СИ рассматривается как бесконечно удаленный точечный источник (плоская волна). Излучение фокусируется с помощью СПЛ, состоящей из  $N$  элементов (рис. 12).

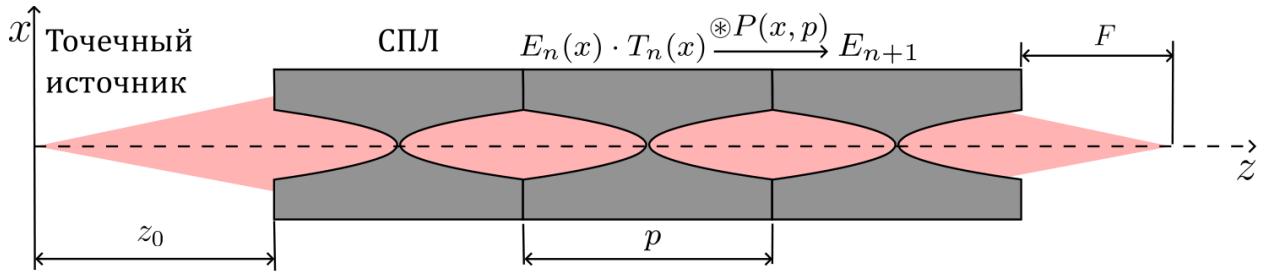


Рисунок 12 - Оптическая схема для описания алгоритма численного решения

В расчетах использовались планарные СПЛ из кремния с параметрами элементов  $A = 50$  мкм,  $R = 6.25$  мкм,  $d = 2$  мкм (рис. 6). Число элементов в схеме  $N = 100$  и энергия излучения  $E = 10$  кэВ ( $\lambda = 0.12$  нм). Расчеты были проведены для двух моделей нарушения топологии: случайная ШП, систематическая ШП.

В случайном варианте каждый элемент СПЛ имеет случайно заданный профиль ШП, следовательно трансмиссионная функция каждого элемента является уникальной:

$$T_1(x) \neq T_2(x) \neq \dots \neq T_N(x). \quad (16)$$

Уникальность трансмиссионной функции каждого элемента обусловливается его случайной фазой  $\varphi$ , принимающей значения от 0 до  $2\pi$  (см. формулу 11).

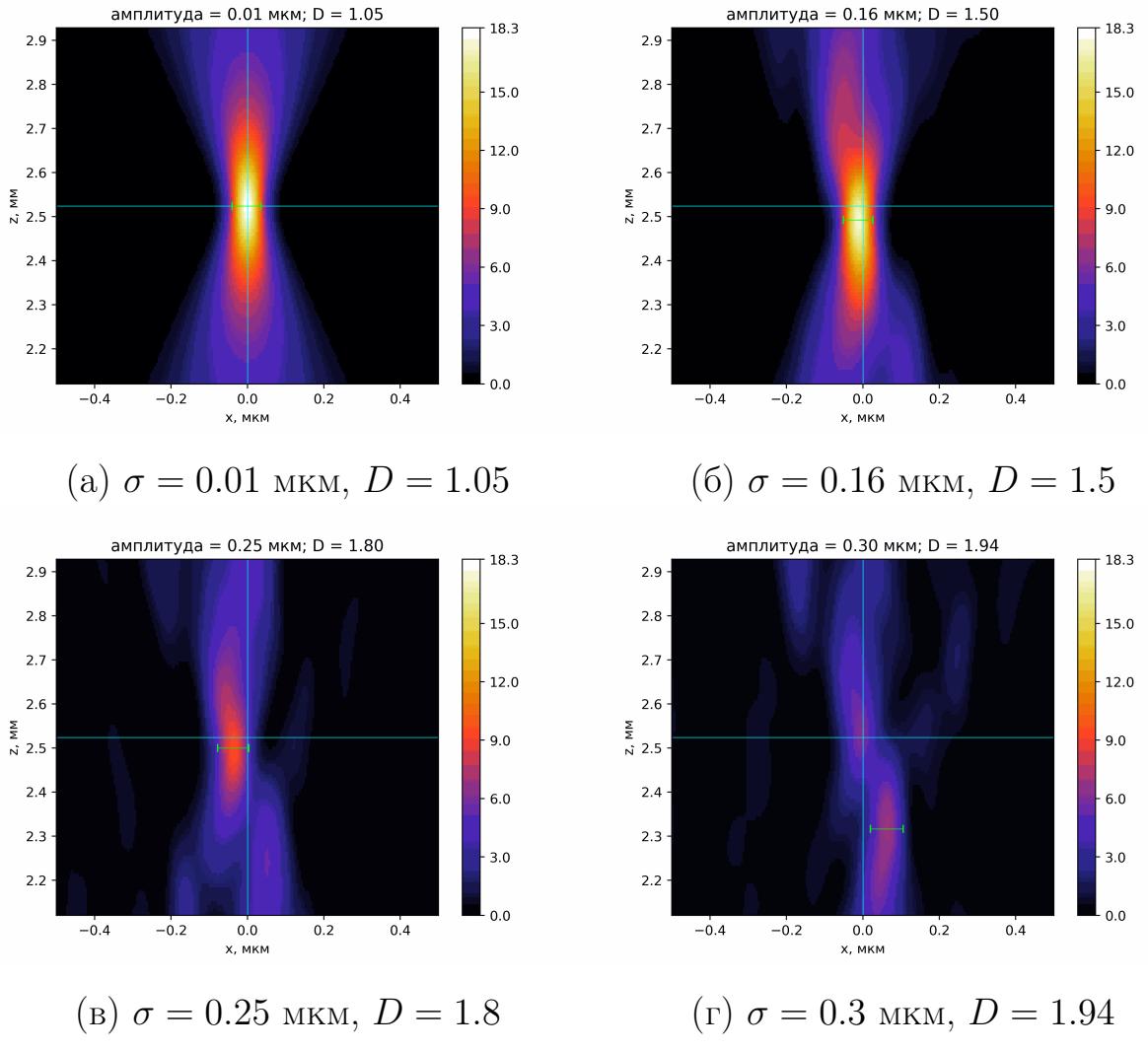


Рисунок 13 - Распределение интенсивности в окрестности фокуса в случайному варианте при постепенном увеличении амплитуды  $\sigma$  и фрактальной размерности  $D$

Рассмотрим фокусирующие свойства ШП в случайному варианте. Для визуализации фокусного пятна в случайному варианте при разных параметрах были построены распределения излучения при постепенном увеличении амплитуды  $\sigma$  и фрактальной размерности  $D$  (рис. 13). Из рисунка видно, что деградация пучка в фокусе выражается в изменении его положения относительно оптической оси, уменьшении пикового значения в точке фокусирования и расщеплении основного пика на несколько пиков в окрестности фокуса.

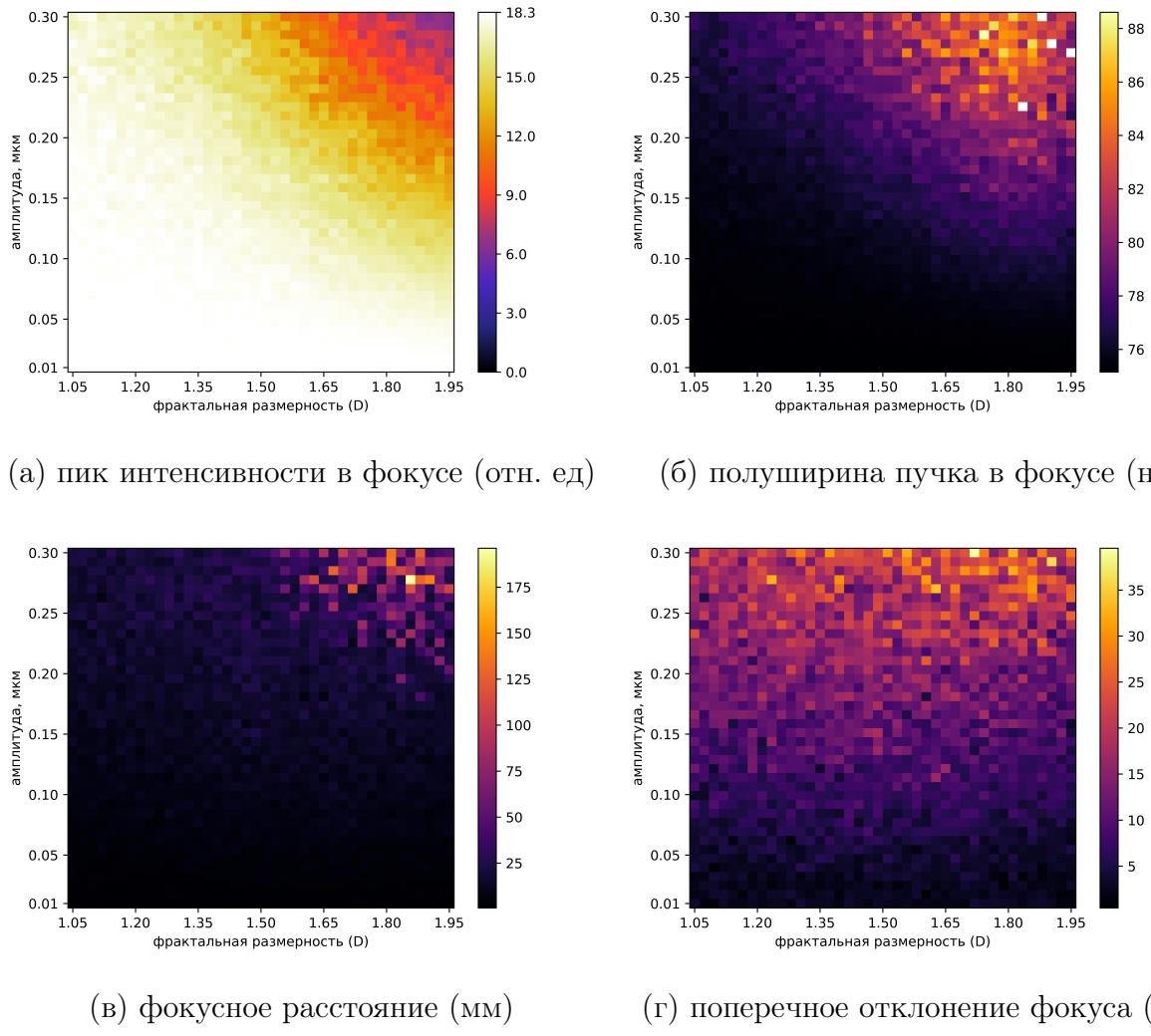


Рисунок 14 - Зависимости параметров фокуса от амплитуды  $\sigma$  и фрактальной размерности  $D$  для случайного варианта на сетке  $(40 \times 40)$  с 11 усредненными значениями

На рисунке 14 представлены зависимости параметров сфокусированного пучка в окрестности фокуса от амплитуды и фрактальной размерности для случайного варианта ШП: максимальное значение интенсивности, фокусное расстояние на котором наблюдается пик интенсивности, модуль смещения фокуса по оси  $x$  и полуширина пучка в фокусе. Зависимости получены при усреднении 11 измерений на равномерной сетке параметров  $(40 \times 40)$  в диапазоне  $\sigma \in [0.01; 0.30]$  мкм,  $D \in [1.05; 1.95]$ . Из представленных зависимостей видно, что на пучок в окрестности фокуса оказывают влияния оба параметра: с увеличением  $\sigma$  и  $D$  наблюдается отклонение фокусного расстояния СПЛ от теоретического значения, уменьшение пиковой интенсивности и увеличение полуширины

сфокусированного пучка СИ. Показано, что при амплитуде  $\sigma < 0.1$  мкм или при  $D < 1.3$  влияние ШП на фокусирующие свойства практически не наблюдается. При значениях параметров  $\sigma > 0.25$  мкм и  $D > 1.65$  наблюдается полная деградация фокусного пятна.

В систематическом варианте ШП элементы СПЛ имеют идентичные профили ШП, то есть каждый элемент является копией другого. Трансмиссионные функции каждого элемента равны:

$$T_1(x) = T_2(x) = \dots = T_N(x). \quad (17)$$

Для визуализации были построены распределения излучения в окрестности фокуса для  $\sigma = 0.1$  и  $D = 1.8$  при случайному и систематическому вариантах ШП (рис. 15). В модели случайных ШП распределение интенсивности при указанных параметрах практически не изменяет форму и не теряет интенсивность, однако, в систематическом варианте ШП с некоторой вероятностью может произойти расщепление основного пика на несколько пиков в окрестности фокуса (рис. 15в), с меньшей вероятностью основной пик подвергается незначительным изменениям (рис. 15г).

Для количественного сравнения систематической и случайной моделей ШП были проведены 100 независимых испытаний при  $\sigma = 0.1$  и  $D = 1.8$ . По результатам расчетов оценивались параметры фокуса для каждой модели (табл. 1). Из представленных данных видно, что для систематического варианта параметры сфокусированного пучка заметно отличаются от теоретических значений, в отличие от варианта случайных ШП.

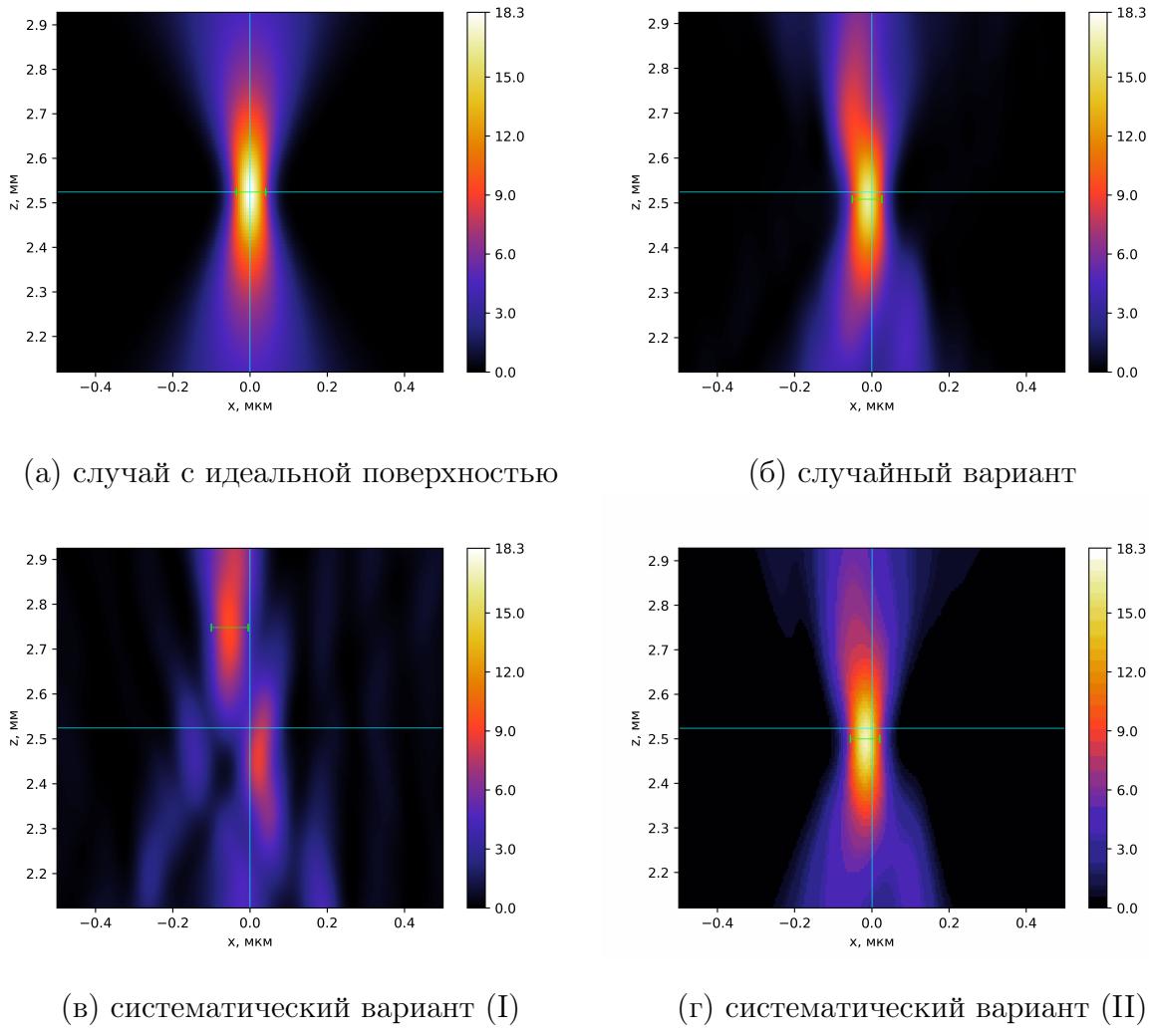


Рисунок 15 - Распределение излучения в окрестности фокуса

при  $D = 1.8$  и  $\sigma = 0.1$  мкм

Таблица 1. Параметры фокуса для каждой модели

Параметр	идеальная поверхность	случайный вариант	систематический вариант
Пик интенсивности (отн. ед.)	18.3	$16.8 \pm 0.6$	$10.9 \pm 4.3$
Фокусное расстояние (мм)	2.524	$2.522 \pm 0.011$	$2.52 \pm 0.18$
Смещение фокуса по оси $x$ (нм)	0	$5.7 \pm 3.8$	$30 \pm 24$
Полуширина (нм)	75.2	$76.4 \pm 0.6$	$82 \pm 8$

## 2.5. Эксперимент по фокусировке с использованием планарных СПЛ

На Курчатовском источнике синхротронного излучения проведен эксперимент по фокусировке пучка СИ с использованием планарных СПЛ из кремния. Эксперимент проведен на станции «Рентгеновская кристаллография и физическое материаловедение». В качестве исследуемых образцов использовались планарные СПЛ из кремния с параметрами элементов  $A = 50$  мкм,  $R = 6.25$  мкм,  $d = 2$  мкм,  $p = 102$  мкм. Набор параллельно расположенных планарных СПЛ был изготовлен на кремниевой пластинке с применением технологии микроструктурирования ее поверхности, включающей в себя процессы электронной литографии и глубокого травления кремния [23]. Для проведения экспериментов использована схема, представленная на рисунке 16.

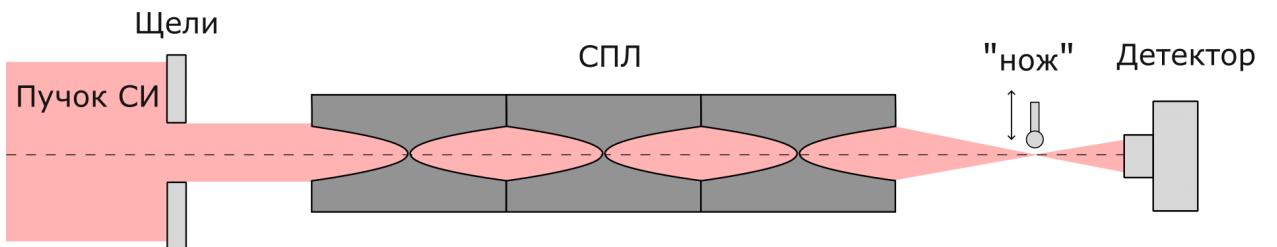
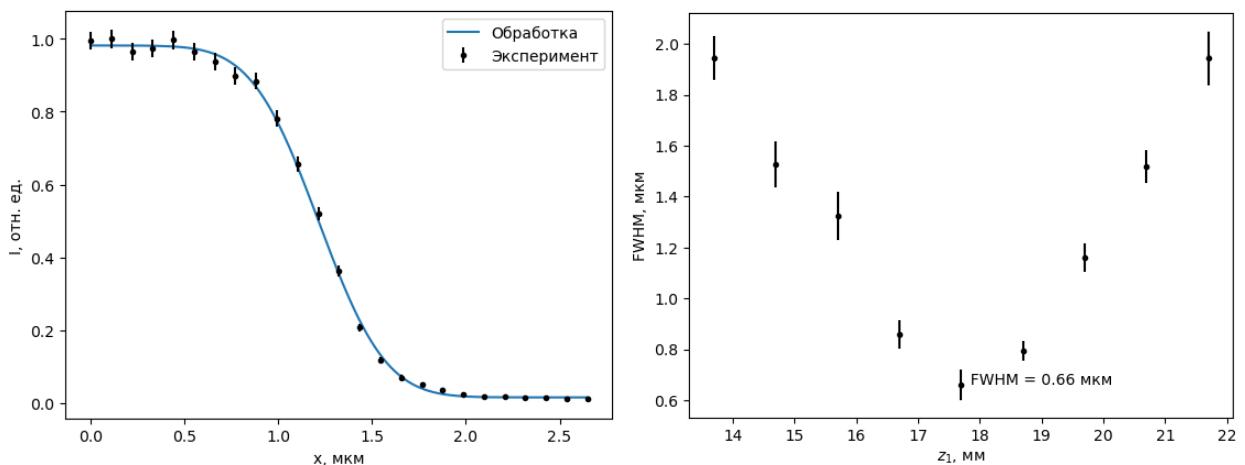


Рисунок 16 - Экспериментальная схема

Предварительно монохроматизированный пучок СИ с энергией  $E = 18$  кэВ ограничивался парой коллимирующих щелей размером  $50 \times 50$  мкм<sup>2</sup> в перпендикулярных плоскостях, что соответствует апертуре использованных СПЛ. Пластина с СПЛ помещалась на столике для образца и в процессе юстировки необходимая линза выводилась на оптическую ось экспериментальной схемы. Для оценки параметров сфокусированного пучка применен метод ножевого сканирования. В качестве «ножа» использовалась золотая микропроволока.



(а) Кривая ножевого сканирования  
пучка СИ для СПЛ

(б) Размер пучка СИ в окрестности  
фокуса СПЛ

Рисунок 17 - Измерение размера изображения источника СИ методом  
ножевого сканирования

На рисунке 17а представлен пример экспериментальной кривой ножевого сканирования. Зависимость размера сфокусированного пучка в окрестности фокуса представлена на рисунке 17б. Моделирование измеренных кривых проводилось с использованием функции ошибки  $erf(x)$ , и в результате аппроксимации был получен параметр полуширины пучка в фокусе. Путем проведения нескольких измерений в окрестности фокуса СПЛ было найдено фокусное расстояние и определен поперечный размер сфокусированного пучка. Экспериментально продемонстрирована субмикронная фокусировка пучка СИ: измеренный размер составил 0.66 мкм, данный размер соответствует уменьшенному изображению реального источника СИ. Исходя из известных расстояний от источника СИ до СПЛ, и от СПЛ до точки в фокусе, планарная СПЛ из кремния позволяет оценить размер источника с точностью порядка 70 нм. Проведено уточнение размеров реального источника СИ. Размеры источника составили порядка 150 мкм.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках данной работы проведен литературный обзор, в котором проводится описание истории развития нанофокусирующей преломляющей оптики, обзор теории фокусировки СИ с помощью СПЛ, и обзор способа описания дефекта топологии профиля элемента СПЛ.

Освоена аналитической теория и основные принципы для расчетов в области фокусировки СИ с использованием СПЛ. Проведено построение математической модели для анализа влияния дефектов топологии элементов СПЛ на их фокусирующие свойства. Проведены численные расчеты формирования сфокусированного пучка СИ с помощью СПЛ с дефектами топологии и анализ полученных результатов расчетов.

Разработан новый алгоритм анализа влияния нарушений топологии планарных СПЛ на формирование сфокусированных пучков СИ. Алгоритм заключается в независимой модификации комплексной трансмиссионной функции отдельных элементов СПЛ с учетом отклонения их параметров топологии от теоретических значений.

С применением фрактальной модели описания поверхности рассмотрены два варианта нарушения топологии - случайные и систематические. На основании полученных результатов расчета сделан вывод о том, что при одних и тех же параметрах расчета систематические дефекты топологии приводят к более значительной деградации пятна фокуса в отличие от случайных нарушений. Показано, что при амплитуде шероховатой поверхности  $\sigma < 0.1$  мкм или при  $D < 1.3$  для элемента СПЛ с апертурой 50 мкм влияние ШП на фокусирующие свойства незначительно либо отсутствует. При одновременном выполнении условий:  $\sigma > 0.25$  мкм и  $D > 1.65$  наблюдается полная деградация фокусирующего пятна.

Проведена обработка экспериментальных данных, полученных в ходе экспериментов на Курчатовском источнике синхротронного излучения по фокусировке пучка СИ с использованием кремниевых планарных СПЛ. Проведено моделирование экспериментальных данных, полученных с применением метода «ножевого», и продемонстрирована субмикронная фокусировка пучка СИ. Минимальный размер пучка в фокусе составил 0.66 мкм, размеры источника составили порядка 150 мкм.

Полученные данные позволяют лучше идентифицировать и устранять возможные проблемы, связанные с фокусировкой синхротронного излучения с использованием планарных СПЛ. В будущем планируется дополнение исследования путем подбора более конкретных параметров шероховатости по экспериментальному исследованию профиля поверхности элемента СПЛ.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Ковальчук М. В. Органические наноматериалы, наноструктуры и нанодиагностика //Вестник Российской академии наук. – 2003. – Т. 73. – №. 5. – С. 405-412.
2. Фетисов Г. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. – Litres, 2022.
3. Kohn V. G., Folomeshkin M. S. Feasibility of X-ray beam nanofocusing with compound refractive lenses //Journal of Synchrotron Radiation. – 2021. – Т. 28. – №. 2. – С. 419-428.
4. Snigirev A. et al. A compound refractive lens for focusing high-energy X-rays //Nature. – 1996. – vol. 384. – №. 6604. – p. 49-51.
5. Lengeler B. et al. Parabolic refractive X-ray lenses //Journal of synchrotron radiation. – 2002. – Т. 9. – №. 3. – С. 119-124.
6. Kohn V. G. On the theory of X-ray refractive optics: Exact solution for a parabolic medium //Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters. – 2002. – Т. 76. – С. 600-603.
7. Kohn V. G. An exact theory of imaging with a parabolic continuously refractive x-ray lens //Journal of experimental and theoretical Physics. – 2003. – Т. 97. – С. 204-215.
8. Snigirev A. et al. Focusing high-energy x rays by compound refractive lenses //APPLIED OPTICS. – 1998. – Т. 37. – №. 4.
9. Lengeler B. et al. Imaging by parabolic refractive lenses in the hard X-ray range //Journal of Synchrotron Radiation. – 1999. – Т. 6. – №. 6. – С. 1153-1167.

10. Schroer C. G., Lengeler B. Focusing hard x rays to nanometer dimensions by adiabatically focusing lenses //Physical Review Letters. – 2005. – Т. 94. – №. 5. – С. 054802.
11. Snigirev A. et al. On the possibilities of x-ray phase contrast microimaging by coherent high-energy synchrotron radiation //Review of scientific instruments. – 1995. – Т. 66. – №. 12. – С. 5486-5492
12. Snigirev A. et al. High energy X-ray nanofocusing by silicon planar lenses //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2009. – Т. 186. – №. 1. – С. 012072.
13. Petrov A. K. et al. Polymer X-ray refractive nano-lenses fabricated by additive technology //Optics express. – 2017. – Т. 25. – №. 13. – С. 14173-14181.
14. Kohn V. G. Semianalytical theory of focusing synchrotron radiation by an arbitrary system of parabolic refracting lenses and the problem of nano-focusing //Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2009. – Т. 3. – №. 3. – С. 358-364.
15. Cooley J. W., Tukey J. W. An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series //Mathematics of computation. – 1965. – Т. 19. – №. 90. – С. 297-301.
16. Аргунова Т. С., Кон В. Г. Исследование микропор в монокристаллах методом фазово-контрастного изображения на просвет в синхротронном излучении //Успехи физических наук. – 2019. – Т. 189. – №. 6. – С. 643-658.
17. Majumdar A., Tien C. L. Fractal characterization and simulation of rough surfaces //Wear. – 1990. – Т. 136. – №. 2. – С. 313-327.
18. Chen Y. et al. Role of surface roughness characterized by fractal geometry on laminar flow in microchannels //Physical Review E. – 2009. – Т. 80. – №. 2. – С. 026301.

19. Zhang B., Zhou L. Feature Analysis of Fractal Surface Roughness Based on Three-dimensional WM Function //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2021. – T. 1906. – №. 1. – C. 012020.
20. Mitchell M. W., Bonnell D. A. Quantitative topographic analysis of fractal surfaces by scanning tunneling microscopy //Journal of Materials Research. – 1990. – T. 5. – №. 10. – C. 2244-2254.
21. F. Luarmer and A. Schlip, German Patent No. DE4241045 C1 23 May 1994; US Patent No. 5,501,893 26 May 1996.
22. Snigirev A. A. et al. Silicon planar lenses for high-energy x-ray nanofocusing //Advances in X-Ray/EUV Optics and Components II. – SPIE, 2007. – T. 6705. – C. 39-49.
23. Snigirev A. et al. X-ray multilens interferometer based on Si refractive lenses //Optics express. – 2014. – T. 22. – №. 21. – C. 25842-25852.
24. [github.com/mamichberdey/Optical\\_device](https://github.com/mamichberdey/Optical_device)