

Алгоритм для вычисления оптимальных параметров многослойных аперiodических зеркал, предназначенных для мягкого рентгеновского диапазона

Д.С.Буренков, Ю.А.Успенский, И.А.Артюков, А.В.Виноградов

Предложен новый алгоритм для оптимизации толщин слоев многослойных аперiodических зеркал. Существенной его особенностью является выделение явной зависимости коэффициента отражения от толщины одного слоя. Благодаря этому удается снизить объем вычислений, необходимых для оптимизации зеркала, в N раз (N – число слоев зеркала). Алгоритм позволяет проводить различные виды оптимизации: получение максимального коэффициента отражения на одной частоте, максимума интегрального коэффициента отражения в заданном интервале частот, постоянного коэффициента отражения в рабочем интервале частот или углов и т. д. Приведены примеры практического применения данного алгоритма, которые показывают его эффективность и универсальность.

Ключевые слова: многослойные аперiodические зеркала, алгоритм оптимизации параметров, мягкий рентгеновский диапазон.

1. Введение

Многослойные рентгеновские зеркала широко используются в качестве отражающих и фокусирующих элементов рентгенооптических систем, а также для управления пучком мягкого рентгеновского излучения [1–3]. В мягком рентгеновском диапазоне длин волн комплексный коэффициент преломления $n = 1 - \delta + i\beta$ всех материалов близок к единице, что определяет слабое отражение излучения от одной поверхности. Для увеличения коэффициента отражения используется интерференция волн, отраженных от нескольких границ раздела. Типичное многослойное покрытие имеет десятки, а то и сотни чередующихся слоев двух материалов, что позволяет достичь коэффициента отражения в несколько десятков процентов [1, 2].

Для многих практических применений требуются зеркала, имеющие не только высокий коэффициент отражения на одной длине волны, но и максимальный интегральный коэффициент отражения в широкой области длин волн. Такие зеркала могут быть созданы на основе аперiodических многослойных покрытий, в которых толщины слоев меняются с глубиной. Эти толщины обычно выбираются из условия минимизации некоторой оценочной функции. Однако большое число переменных, а также изрезанность рельефа функции делают решение данной задачи с помощью стандартных математических методов крайне трудоемким.

Ранее предпринимались неоднократные попытки пре-

одоления этих трудностей и построения эффективных алгоритмов оптимизации. В работе [4] для этой цели были использованы методы, хорошо зарекомендовавшие себя при проектировании зеркал для потока нейтронов, а в [5] – генетический алгоритм. Алгоритм, предложенный в [6], основан на однопроходной оптимизации слоев зеркала. В работе [7] при конструировании чирпированных зеркал применялось последовательное добавление очень тонких (игольчатых) слоев, а в [8, 9] при проектировании рентгеновских зеркал – явная формула для вычисления производных и метод градиентного спуска для поиска максимума. В работе [10] с помощью квазиклассического приближения были получены аналитические выражения для коэффициента отражения, которые использовались при конструировании оптимальных многослойных зеркал. В [11] был выполнен углубленный анализ зависимости коэффициента отражения от толщин слоев. Это позволило получить относительно простую формулу для начального приближения и тем самым значительно увеличило скорость оптимизации слоев зеркала.

Нами разработан новый метод, позволяющий выделить явную зависимость коэффициента отражения от толщины одного слоя. Это дает возможность существенно уменьшить объем вычислений, расширить область поиска экстремума и выполнить в рамках единого подхода оптимизацию толщин слоев для большого числа задач оптики мягкого рентгеновского диапазона.

2. Основные формулы

В настоящей работе рассматриваются покрытия, состоящие из чередующихся плоскопараллельных слоев двух материалов. Для такой структуры расчет комплексного амплитудного коэффициента отражения $r(\lambda, \theta)$ можно провести с помощью рекуррентных соотношений [1]:

Д.С.Буренков, Ю.А.Успенский, И.А.Артюков, А.В.Виноградов. Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Россия, 119991 Москва, Ленинский просп., 53

Поступила в редакцию 24 декабря 2003 г., после доработки – 13 октября 2004 г.

$$r_k = \frac{r_k^F + r_{k+1} e^{2i\beta_{k+1}}}{1 + r_k^F r_{k+1} e^{2i\beta_{k+1}}},$$

$$r(\lambda, \theta) = r_{k=0}, \quad (1)$$

$$r_{N+1} = 0,$$

где $\beta_k = (2\pi/\lambda_0)h_k(n_k^2 - \sin^2\theta)^{1/2}$; N – число слоев зеркала; r_k^F – френелевский амплитудный коэффициент отражения от k -й границы раздела (между k -м и $k+1$ -м слоями); h_k – толщина k -го слоя; n_k – комплексный коэффициент преломления k -го слоя; λ_0 – длина волны излучения, падающего на многослойное покрытие из вакуума под углом θ . Аналогичные соотношения для комплексного амплитудного коэффициента пропускания $t(\lambda, \theta)$ выглядят следующим образом:

$$t_k = \frac{t_{k+1} r_k^F e^{i\beta_k}}{1 + r_k^F r_{k+1} e^{2i\beta_k}},$$

$$t(\lambda, \theta) = t_{k=0}, \quad (2)$$

$$t_{N+1} = 1.$$

Задача оптимизации многослойного отражающего покрытия решается, как правило, путем нахождения экстремума соответствующей целевой функции от $r(\lambda, \theta, \{h\})$ в многомерном пространстве $\{h\}$, определяемом набором толщин слоев данного покрытия. В большинстве численных алгоритмов поиск такого экстремума проводится с помощью последовательных приближений, при этом для каждого приближения (будем в дальнейшем называть такие приближения шагом) обычно требуется итеративный проход по координатам многомерного пространства. Более того, при оптимизации характеристик зеркала в заданном интервале длин волн или углов необходимо рассчитывать коэффициенты $r(\lambda, \theta, \{h\})$ во многих точках на оси λ или θ (конкретное число точек определяется как видом целевой функции, так и числом осцилляций кривой отражения в этом интервале). В случае интегральной целевой функции (например, максимального интегрального коэффициента отражения) влияние быстрых осцилляций невелико и выбор числа точек малосуществен. При этом объем вычислений, проводимых по формуле (1), пропорционален $N^2 I$, где $N \sim 50 - 400$, а I – число шагов, которое зависит от метода поиска экстремума и требуемой точности. В случае, когда необходимо максимально приблизить кривую отражения к заданной зависимости, осцилляции дают существенный вклад в целевую функцию. Для их учета приходится использовать достаточно мелкую сетку интегрирования с числом точек, пропорциональным N . При этом объем вычислений, проводимых по формуле (1), можно оценить как $\sim N^3 I$.

Для уменьшения объема вычислений удобно выделить явную зависимость $r(\lambda, \theta, \{h\})$ от толщины одного слоя. С этой целью разделим многослойное зеркало на три части: многослойная структура между вакуумом и k -м слоем (ей соответствует индекс «а»), сам k -й слой и многослойная структура между k -м слоем и подложкой (индекс «б»). При таком разделении искомым коэффициент отражения может быть представлен в следующем виде [14]:

$$r = r_a + \frac{t_a \tilde{t}_a r_b e^{2i\beta_k}}{1 - r_b \tilde{r}_a e^{2i\beta_k}}, \quad (3)$$

где r_a, r_b и t_a – коэффициенты отражения и пропускания соответствующих структур в прямом направлении, а \tilde{r}_a и \tilde{t}_a – в обратном. Таким образом, мы явно выделили зависимость $r(\lambda, \theta)$ от толщины k -го слоя, и теперь подбор толщины этого слоя в любом численном алгоритме существенно упрощается. Более того, для вычисления зависимости $r(\lambda, \theta)$ от толщины $k+1$ -го слоя нет необходимости заново пересчитывать все коэффициенты отражения, входящие в формулу (3). Они могут быть вычислены с помощью итеративных формул:

$$r_b(k+1) = \frac{r_k^F - r_b(k)}{[r_b(k) r_k^F - 1] e^{2i\beta_k}},$$

$$\tilde{r}_a(k+1) = \frac{r_k^F + \tilde{r}_a(k) e^{2i\beta_k}}{1 - r_k^F \tilde{r}_a(k) e^{2i\beta_k}},$$

$$\tilde{t}_a(k+1) = \frac{\tilde{t}_a(k) t_k^F e^{i\beta_k}}{1 - r_k^F \tilde{r}_a(k) e^{2i\beta_k}}, \quad (4)$$

$$r_a(k+1) = r_a(k) + \frac{t_a(k) \tilde{t}_a(k) r_k^F e^{2i\beta_k}}{1 - r_k^F \tilde{r}_a(k) e^{2i\beta_k}},$$

$$t_a(k+1) = \frac{t_a(k) t_k^F e^{i\beta_k}}{1 - r_k^F \tilde{r}_a(k) e^{2i\beta_k}}.$$

Применение выражений (3), (4) устраняет необходимость расчета $r(\lambda, \theta, \{h\})$ по формуле (1) при итеративном проходе слоев зеркала, а также позволяет за счет явного выделения одной из переменных использовать аналитические формулы для вычисления частных производных любого порядка. Этот подход является универсальным и может применяться в различных методах поиска экстремума функций от $r(\lambda, \theta, \{h\})$.

В формулах (3), (4) границы слоев предполагаются идеально гладкими. В тех случаях, когда шероховатость межслойных границ является существенной, она может быть учтена домножением коэффициента отражения на фактор Дебая–Уоллера. Такое упрощенное описание, которое соответствует полностью скоррелированному поведению параметра шероховатости σ на границах всех слоев, дает возможность сохранить неизменной описанную выше схему оптимизации многослойных структур и при $\sigma \neq 0$.

В целом алгоритм выглядит следующим образом. На первом этапе прямым перебором определяются наилучшие параметры периодического зеркала, толщины слоев которого используются в качестве стартовой точки в методе покоординатного спуска. Далее с помощью данного алгоритма последовательно находят толщины слоев аperiodического зеркала, оптимизирующие целевую функцию. Поскольку в процессе вычислений набор коэффициентов $r_a, r_b, t_a, \tilde{r}_a, \tilde{t}_a$ изменяется, то процедура подбора толщин проходит через слой много раз, вплоть до полного самосогласования (т. е. до того момента, когда толщины слоев перестают меняться).

Метод покоординатного спуска был выбран в настоящей работе по следующим двум причинам. Во-первых, благодаря выделению явной зависимости по каждой координате (см. формулу (3)) мы имеем возможность

сравнивать глубину нескольких экстремумов, что невозможно при использовании локальных методов, таких как метод градиентного спуска. Во-вторых, использование формул (4) позволяет снизить объем вычислений в N раз. Таким образом, несмотря на ряд недостатков метода покоординатного спуска [15, 16], использование его совместно с описанными выше формулами дает возможность построить эффективный алгоритм оптимизации многослойных покрытий.

3. Расчет аперiodических зеркал

Рассмотренный алгоритм был использован нами для поиска оптимальных параметров аперiodических покрытий, удовлетворяющих различным требованиям. Различие в требованиях приводит к различию в выборе целевой функции, экстремум которой нужно найти в данной конкретной задаче. В частности, для получения максимального пикового коэффициента отражения необходимо найти максимум функции $F_0 = R(\lambda)$ (где $R(\lambda)$ – коэффициент отражения зеркала на заданной длине волны λ).

Задача получения максимального интегрального коэффициента отражения в рабочем интервале длин волн или углов решается с помощью поиска максимума целевой функции $F_1 = \int_{x_1}^{x_2} R(x) dx$, где x_1 и x_2 – пределы интегрирования по длине волны или углу. Максимум такого интеграла не гарантирует, однако, того, что зависимость $R(x)$ не будет иметь сильных провалов. Для устранения таких провалов (как правило, нежелательных) можно использовать требование минимума целевой функции $F_2 = \int_{x_1}^{x_2} [R(x) - R_0]^2 dx$, что обеспечивает наименьшее отклонение $R(x)$ от заданного значения R_0 , однако не гарантирует получения большого интегрального коэффициента отражения. Чтобы избежать недостатков двух описанных подходов необходим более общий критерий, включающий в себя комбинацию данных двух требований. Первое требование (максимум интегрального коэффициента отражения) может быть заменено на условие минимума функции $F = -\bar{R}^2$, где $\bar{R} = (x_2 - x_1)^{-1} \times \int_{x_1}^{x_2} R(x) dx$, а второе (минимум отклонения от среднего) – на условие минимума функции $\int_{x_1}^{x_2} [R(x) - \bar{R}]^2 dx$. Объединение этих двух требований приводит к требованию минимума целевой функции

$$F_3 = \int_{x_1}^{x_2} \{[R(x) - \bar{R}]^2 - \alpha \bar{R}^2\} dx, \quad (5)$$

где выбор коэффициента α определяется относительной важностью двух перечисленных условий.

Выбор области поиска экстремума и начального приближения является важным моментом для большинства численных алгоритмов оптимизации функции многих переменных [15]. Остановимся на этом немного подробнее. Основным критерий выбора стартовой точки – близость к глобальному экстремуму (минимуму или максимуму в зависимости от специфики задачи). Такой экстремум в случае отсутствия поглощения для монохромной волны хорошо известен – это периодическое решение. Следовательно, в случае малого поглощения (что хорошо выполняется в области мягкого рентгеновского излучения) и узкого интервала длин волн или углов такое периодическое решение будет хорошим начальным приближением. В проведенных нами расчетах периодическое решение всегда использовалось как стартовое.

Приведем некоторые теоретические соображения, связанные с выбором области поиска экстремума для целевых функций F_1 , F_2 и F_3 , которые позволяют сделать этот выбор наилучшим образом и тем самым повысить эффективность алгоритма. Хорошо известно, что в отсутствие поглощения увеличение толщины слоя на $\lambda/2$ не меняет коэффициента отражения на длине волны λ [17]. Данное утверждение остается качественно верным и для мягкого рентгеновского диапазона, поскольку коэффициент поглощения всех материалов в этой области спектра очень мал. В то же время изменение толщины слоев на $\lambda/2$ оказывает влияние на коэффициент отражения на длинах волн, отличных от λ . Рассмотрим, например, зависимость интегрального коэффициента отражения многослойного покрытия Si/Mo от толщины одного слоя (рис.1). Хорошо видно, что глобальный максимум такой зависимости не соответствует экстремуму при минимальной толщине слоя, а также экстремуму вблизи $\lambda = \lambda_0/4$ (λ_0 – середина интервала интегрирования). На практике рассмотрение нескольких последовательных экстремумов позволяет заметно улучшить результаты в тех случаях, когда оптимизируется поведение коэффициента отражения в широком интервале длин волн или углов.

Ниже рассмотрим несколько примеров оптимизации параметров многослойных зеркал с помощью данного алгоритма. Во всех примерах число слоев многослойной структуры было достаточно большим, так что его небольшие вариации практически не сказывались на результатах оптимизации. Значения оптических констант материалов для расчета коэффициента отражения брались из работы [18]. Для контроля качества полученных решений мы использовали их как стартовые для оптимизации с помощью симплекс-метода. Такая оптимизация не дала улучшения в физически разрешенном пространстве параметров ни для одного из представленных примеров.

На рис.2,а показан коэффициент отражения многослойного зеркала Si/Mo, спроектированного для получения максимального интегрального коэффициента отражения в интервале длин волн 130–180 Å. Найденные оптимальные толщины слоев показаны на рис.2,б. Данное аперiodическое зеркало имеет интегральную характеристику отражения, на 51.9 % большую, чем периодическое многослойное покрытие. Следует отметить, что выигрыш в интегральном коэффициенте отражения от использования аперiodической структуры для различных зеркал составляет 10 % – 60 % в зависимости от области

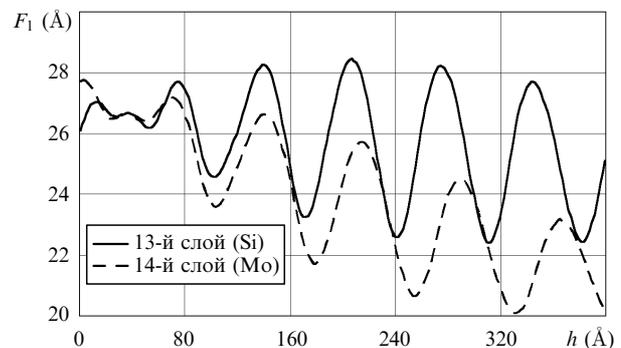


Рис.1. Зависимости интегрального коэффициента отражения F_1 от толщины отдельного слоя h для структуры, состоящей из 45 пар слоев Si/Mo. Интегральный коэффициент определялся в интервале 125–145 Å.

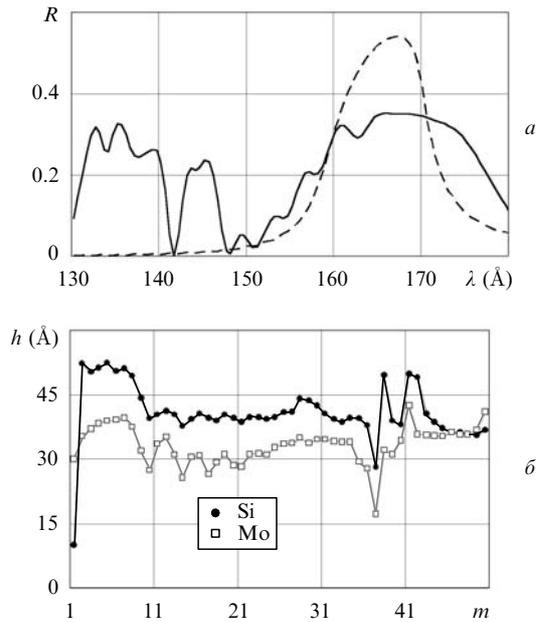


Рис.2. Коэффициенты отражения R периодического (штриховая кривая) и аperiodического (сплошная кривая) зеркал, состоящих из 45 пар слоев Si/Mo и реализующих максимум интегрального коэффициента отражения в интервале 130–180 Å (*a*), а также толщины h слоев аperiodического зеркала (здесь и на рис.3, m – номер пары) (*b*). Выигрыш при переходе к аperiodической структуре составляет 51.9%.

длин волн и материалов. При этом чем шире интервал, тем существеннее выигрыш. Для пикового коэффициента отражения результаты значительно скромнее: рост коэффициента отражения не превышает 1%–3%.

На рис.3,*a* дано сравнение коэффициентов отражения двух структур Si/Mo, полученных соответственно при

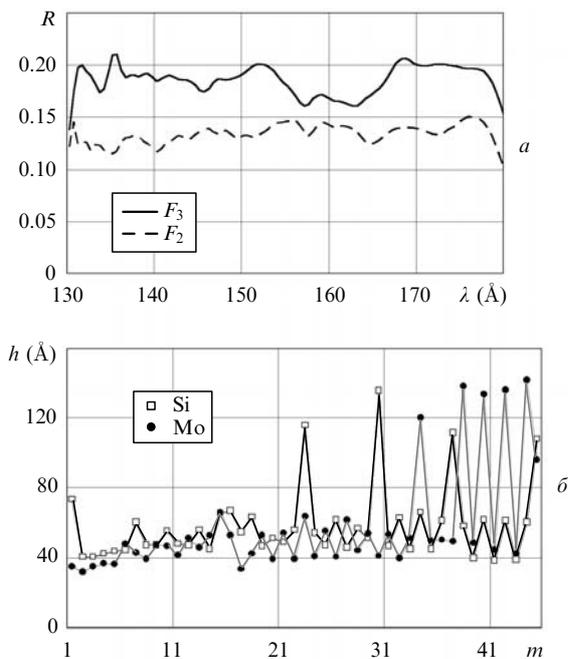


Рис.3. Коэффициенты отражения R аperiodических зеркал, реализующих минимум целевых функций F_2 и F_3 для 45 пар слоев Si/Mo в интервале 135–185 Å (*a*), и толщины h слоев аperiodического зеркала, реализующего минимум F_2 (*b*), при $R_0 = 0.15$, $\alpha = 0.5$.

оптимизации целевых функций F_2 и F_3 в интервале 135–185 Å. Хорошо видно, что функция F_2 обеспечивает более равномерную спектральную характеристику, а функция F_3 позволяет получить более высокий средний коэффициент отражения за счет увеличения отклонения спектральной характеристики от этого среднего значения.

При конструировании рентгенооптических систем, таких как объектив Шварцшильда, часто требуются зеркала с постоянным коэффициентом отражения в заданном интервале углов. Пример расчета такого зеркала с помощью нашего алгоритма для пары C/Co и интервала углов $4.3^\circ - 9^\circ$ приведен на рис.4. На рис.4,*a* дано сравнение коэффициентов отражения данной структуры с периодической, реализующей такое же условие. Видно, что большая равномерность коэффициента отражения достигается за счет уменьшения его абсолютного значения. Оптимальные толщины слоев Co меняются с увеличением номера пары сравнительно мало, тогда как толщины углеродных слоев имеют два характерных значения – 11 и 33 Å (рис.4,*b*).

Хотелось бы сказать несколько слов о единственности решения задачи оптимального проектирования многослойных зеркал рентгеновского диапазона. Теоретические соображения и вычислительная практика показывают, что целевая функция всегда имеет, кроме глобального минимума, значительное число локальных минимумов разной глубины. Некоторые из них очень близки по глубине к абсолютному минимуму, поэтому соответствующие им структуры с практической точки зрения также могут считаться оптимальными. В нашем методе оптимизации используется формула (3), дающая явную зависимость коэффициента отражения от толщины одного слоя, например от h_k . Это позволяет рассмотреть поведение целевой функции в широком интервале изменения h_k и выбрать самый глубокий минимум по этой переменной, отбросив более мелкие. Хотя такая процедура

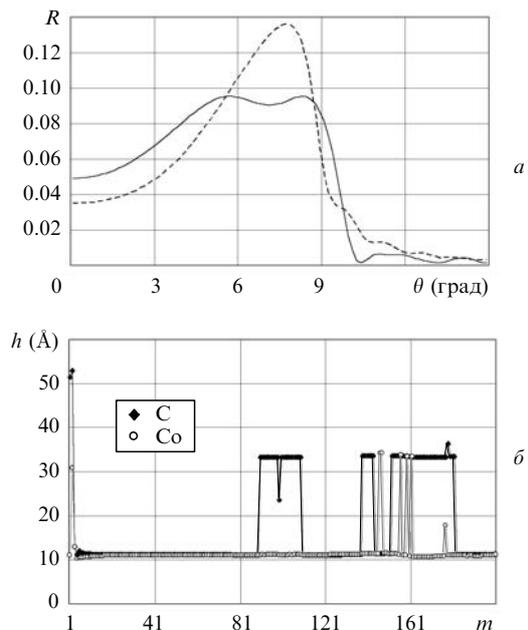


Рис.4. Угловые зависимости коэффициентов отражения R периодического (штриховая кривая) и аperiodического (сплошная кривая) зеркал, реализующих минимум целевой функции F_2 для 200 пар слоев C/Co в интервале углов падения $4.3^\circ - 9^\circ$ для $\lambda = 45$ Å (*a*), и толщины h слоев аperiodического зеркала (*b*) при $R_0 = 0.3$ и параметре шероховатости $\sigma = 4.6$ Å.

(как и любая другая из существующих в настоящее время) ввиду большого числа переменных и сложного рельефа целевой функции не может гарантировать достижения абсолютного минимума, с ее помощью удается отыскать достаточно глубокий минимум, что вполне достаточно для проектирования многослойной структуры, удовлетворяющей всем требованиям практики.

Приведем данные, характеризующие быстродействие программы, созданной на основе нашего алгоритма. Программа запускалась на процессоре Pentium 4 с тактовой частотой 1.8 ГГц. При этом время расчета T коэффициента отражения многослойной структуры, имеющей около 100 слоев, составляло 4 мс, а общее время расчета ($\sim TN^2I/100$) – от 3 до 100 с.

4. Заключение

Оптимизация апероидических многослойных отражающих покрытий сводится к нахождению экстремума функции от большого числа переменных, имеющей сложный рельеф. Решение этой задачи стандартными математическими методами требует очень большого объема вычислений. В настоящей работе представлен алгоритм, позволяющий выделить явную зависимость коэффициента отражения от толщины одного слоя. Благодаря этому удалось снизить объем вычислений в N раз и провести расчеты для многослойных структур, имеющих до 400 слоев. Другим достоинством нашего алгоритма является его универсальность, т. е. независимость от конкретной задачи оптимизации. Алгоритм был с успехом использован для поиска максимумов пикового и интегрального коэффициентов отражения, а также для решения обратной задачи – нахождения конфигурации зеркала с заданной спектральной характеристикой. В процессе разработки алгоритма был рассмотрен общий вопрос выбора области поиска экстремума. Расчеты показывают, что в

задачах оптимизации с широким рабочим интервалом длин волн или углов более глубокие минимумы целевой функции получаются при увеличении толщины части слоев в три раза. Есть все основания считать, что использование данного алгоритма будет эффективным для широкого круга задач оптики мягкого рентгеновского диапазона.

Авторы признательны Ю.С.Касьянову за полезные обсуждения. Работа была поддержана грантами РФФИ (№ 03-02-16438а, 04-02-17349), МНТЦ (2297), CRDF (RP2-2326-МО-02) и Программы «Интеграция» (И0859, В0056).

1. Виноградов А.В., Брытов И.А., Грудский А.Я., Коган М.Т., Кожевников И.П., Слемзин В.А. *Зеркальная рентгеновская оптика* (Л.: Машиностроение, 1989).
2. Виноградов А.В. *Квантовая электроника*, **32** (12), 1113 (2002).
3. Kuhlmann T., Yulin S., Feigl T., Kaiser N. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **4782**, 196 (2002).
4. Joensen K.D. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **3113**, 500 (1997).
5. Allred D.D., Turley R.S., Squires M.B. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **3767**, 280 (1999).
6. Yamamoto M., Namioka T. *Appl. Opt.*, **31**, 1622 (1992).
7. Tikhonravov A.V., Trubetskov M.K., Protopopov V.V., Voronov A.V. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **3738**, 248 (1999).
8. Колачевский Н.Н., Пирожков А.С., Рагозин Е.Н. *Квантовая электроника*, **30** (5), 428 (2000).
9. Пирожков А.С. *Канд. дис.* (М., МФТИ, 2002).
10. Vinogradov A.V., Feschenko R.M. *Nucl. Instrum. Res. A*, **448**, 142 (2000).
11. Kozhevnikov I.V., Bukreeva I.N., Ziegler E. *Nucl. Instrum. Res. A*, **460**, 424 (2001).
12. Uspenskii Yu.A., Seely J.F., Popov N.L., Vinogradov A.V., Pershin Yu.P., Kondratenko V.V. *J. Opt. Soc. Am. A*, **21** (2), 298 (2004).
13. Калиткин Н.Н. *Численные методы* (М.: Наука, 1978).
14. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. *Практическая оптимизация* (М.: Мир, 1985).
15. Борн М., Вольф В. *Основы оптики* (М.: Наука 1970).
16. Henke B.L., Gullikson E.M., Davis J. *At. Data Nucl. Data Tables*, **54**, 181 (1993); <http://www-cxro.lbl.gov>.