

О моделировании задач когерентной оптики скользящего падения

И.А.Артюков, А.В.Виноградов, Н.Л.Попов, В.Н.Селезнёв

Предлагается метод моделирования оптических изображений предметов наклонными или скользящими когерентными пучками. Теоретический подход основан на решении параболического уравнения, обобщающем интеграл Френеля. Численные результаты приведены для экспериментальных условий, близких к условиям, реализуемым при использовании современных лазеров мягкого рентгеновского диапазона. Разработанная методика может также применяться для моделирования рентгеновских изображающих систем, создаваемых на пучках излучения синхротронов и лазеров на свободных электронах.

Ключевые слова: рентгеновская оптика, скользящее падение, формирование изображений, параболическое уравнение.

1. Введение

Развитие и доступность как лабораторных, так и крупных рентгеновских лазеров [1, 2] вызвали в последнее время повышенный интерес к когерентным методам получения и анализа рентгеновских изображений. Важными преимуществами использования когерентных пучков в микроскопии и микроанализе являются возможность восстановления волнового поля на объекте без применения оптики и возможность измерений фазы поля в плоскости изображения [3, 4].

В настоящее время наиболее освоенный для рентгеновских лазеров диапазон длин волн составляет 10–40 нм*. Пропускание всех материалов в этой области спектра чрезвычайно мало, толщины слоев не могут превышать десятков нанометров. Как следствие, особое внимание привлекают методы исследования объектов в отраженном пучке (рис.1). При уменьшении длины волны для получения достаточно большого коэффициента отражения должен уменьшаться угол скольжения θ .

При освещении когерентным пучком наличие оптической системы между объектом и детектором не является обязательным. Однако полное восстановление волновых полей (включая фазы) на объекте (u_0) и на детекторе (u) должно опираться на алгоритмы, устанавливающие взаимосвязь u_0 и u . При облучении объекта вдоль нормали к его поверхности ($\theta = \pi/2$, рис.1) для анализа прошедшего либо отраженного пучка необходимы соотношения определяются интегралом Френеля. При наклонном па-

дении излучения на образец, особенно при малых углах θ , представляющих интерес для исследований в рентгеновском диапазоне, применимость интеграла Френеля не обоснована.

В настоящей работе рассматриваются некоторые свойства когерентного пучка, распространяющегося при наклонном отражении от объекта, необходимые для определения полей на детекторе и для решения задач, связанных с восстановлением фазы поля в плоскости изображения.

2. Функция источника для прямого и наклонного падения излучения на объект

Основным инструментом моделирования в когерентной оптике является интеграл Френеля. Он определяет волновое поле $u(x, z)$ по его значению $u_0(s)$ на плоскости S (рис.1):

$$u(x, z) = \sqrt{\frac{k}{2\pi iz}} \int_{-\infty}^{\infty} u_0(s) ds \exp\left[i \frac{k(x-s)^2}{2z}\right] = \int_{-\infty}^{\infty} K_0(x, z, s) u_0(s) ds, \quad (1)$$

$$K_0(x, z, s) = \sqrt{\frac{k}{2\pi iz}} \exp\left[i \frac{k(x-s)^2}{2z}\right],$$

где $K_0(x, z, s)$ – функция источника, представляющая собой поле, создаваемое распределением $u_0(s, s') = \delta(s - s')$. В целях сокращения записи мы ограничились случаем двух из-

* В области длин волн $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ работает источник LCLS [5]. Еще несколько установок, работающих в этой и более мягкой области спектра, находятся на стадии сооружения или проектирования [6, 7].

И.А.Артюков, А.В.Виноградов, Н.Л.Попов. Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Россия, 119991 Москва, Ленинский просп., 53; e-mail: vinograd@sci.lebedev.ru

В.Н.Селезнёв. Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия, 115409 Москва, Каширское ш., 31

Поступила в редакцию 26 октября 2011 г., после доработки – 10 января 2012 г.

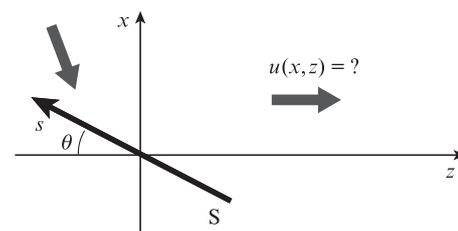


Рис.1. Общая схема формирования изображения объекта в наклонном пучке.

мерений. Условием применимости (1) является перпендикулярность предметной плоскости S, в которой задано поле $u_0(s)$, направлению распространения пучка, которое будем считать горизонтальным. Если это не так, т. е. плоскость S образует с осью z угол $\theta \neq \pi/2$, то, как показано в работе [8], вместо $K_0(x, z, s)$ в (1) следует использовать функцию источника

$$K(x, z, s, \theta) = \left(\frac{x - s'}{z'} \cos \theta + \sin \theta \right) K_0(x, z', s'), \quad x > -z \tan \theta, \quad (2)$$

$$K(x, z, s, \theta) = 0, \quad x < -z \tan \theta,$$

где $z' = z + s \cos \theta$; $s' = s \sin \theta$.

Выражения (1) и (2) являются решениями параболического волнового уравнения

$$2ik \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (3)$$

описывающими поля, распространяющиеся от плоского объекта, освещенного под углом $\theta \leq \pi/2$ когерентным пучком. Таким образом, для произвольного θ аналог интеграла (1) имеет вид

$$u(x, z) = \sqrt{\frac{k}{2\pi i}} (x \cos \theta + z \sin \theta) \times \int_{-z/\cos \theta}^{\infty} \frac{u_0(s) ds}{(z + s \cos \theta)^{3/2}} \exp \left[i \frac{k(x - s \sin \theta)^2}{2(z + s \cos \theta)} \right], \quad (4)$$

$x > -z \tan \theta.$

Будем считать, что объект ограничен, правый край его находится при $s = 0$, а оптические элементы размещены в области $z > 0$, где поле согласно (4) определяется интегралом

$$u(x, z) = \sqrt{\frac{k}{2\pi i}} (x \cos \theta + z \sin \theta) \times \int_0^{\infty} \frac{u_0(s) ds}{(z + s \cos \theta)^{3/2}} \exp \left[i \frac{k(x - s \sin \theta)^2}{2(z + s \cos \theta)} \right], \quad (5)$$

$x > -z \tan \theta, \quad z > 0,$

$$u_0(s) = 0 \text{ при } s < 0. \quad (6)$$

Формулы (5) и (6) можно применять для моделирования формирования изображений наклоненных объектов конечных размеров. Однако они обладают очевидным недостатком. Поле (5) определено лишь внутри некоторого угла, причем на его стороне $x = -z \tan \theta$ (т. е. в плоскости предмета) при $s < 0$ оно равно нулю. На самом деле поле определяется дифракцией, сопровождающей распространение пучка от объекта в область $z > 0$.

Более естественным и физически оправданным представляется следующий подход. Точное решение (4) используем для определения поля в вертикальной плоскости $z = 0$, проходящей через правый край объекта. В области $x > 0$ это трудностей не вызывает. В то же время при $x < 0$ согласно (4) поле не определено. В отсутствие каких-либо дополнительных указаний, связанных с условиями эксперимента, положим его равным нулю. Таким образом, при $z = 0$ имеем

$$u(x, z = 0) = \sqrt{\frac{k}{2\pi i \cos \theta}} x \times \int_0^{\infty} \frac{u_0(s) ds}{s^{3/2}} \exp \left[i \frac{k(x - s \sin \theta)^2}{2s \cos \theta} \right], \quad x > 0, \quad (7)$$

$$u(x, z = 0) = 0, \quad x < 0.$$

Далее для расчета поля в правом полупространстве $z > 0$ используем интеграл Френеля (1) с начальным распределением, заданным (7). Выполняя интегрирование (см. напр., [9]), получаем

$$u(x, z) = \frac{1}{2\pi} \frac{\exp[ikx^2/(2z)]}{\sqrt{z \cos \theta}} \times \int_0^{\infty} \frac{u_0(s) ds}{s^{3/2} A} \exp \left(ik \frac{s \sin^2 \theta}{2 \cos \theta} + \zeta^2 \right) F(\zeta), \quad (8)$$

$$A = \frac{1}{s \cos \theta} + \frac{1}{z}, \quad \zeta = B \sqrt{\frac{k}{2iA}}, \quad B = \tan \theta + \frac{x}{z},$$

$$F(\zeta) = \exp(-\zeta^2) + \sqrt{\pi} \zeta [1 + \Phi(\zeta)],$$

$$\Phi(\zeta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\zeta} \exp(-t^2) dt. \quad (9)$$

Таким образом, имеются два подхода к расчету полей на объектах, освещаемых наклонными когерентными пучками. Они представлены формулами (5), (6) и (8), (9) соответственно. Первый определяет поле только внутри угла (5), в то время как второй позволяет найти волновое поле в полупространстве $z > 0$. По существу использование формул (8), (9) вместо (5), (6) означает более точный учет дифракции на краю объекта.

Легко убедиться в том, что не только в ближней, но и в дальней зоне формулы (5), (6) и (8), (9) приводят к различным распределениям полей. В частности, для функции источника в дальней зоне в первом случае имеем [10]

$$K(x, z, s, \theta) = \sqrt{\frac{k}{2\pi i z}} \left(\frac{x}{z} \cos \theta + \sin \theta \right) \times \exp \left[i \frac{kx^2}{2z} - i \frac{kx}{z} \left(\frac{x}{z} \cos \theta + \sin \theta \right) s \right]. \quad (10)$$

При $\theta = \pi/2$ это выражение естественно переходит в функцию источника, соответствующую фраунгоферовскому пределу интеграла Френеля (1).

Как было отмечено выше, учет конечности объекта требует более точного учета дифракции за его краем (в области $z > 0$). Это означает, что вместо (5), (6) следует использовать выражения (8), (9). Полагая $x, z \gg s$, получаем

$$K(x, z, s, \theta) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{x}{z} \cos \theta + \sin \theta \right) \sqrt{\frac{\cos \theta}{zs}} \times \exp \left[i \frac{kx^2}{2z} - i \frac{kx}{z} \left(\frac{x}{z} \cos \theta + \sin \theta \right) s \right] F(\zeta), \quad (11)$$

$$\zeta = \left(\tan \theta + \frac{x}{z} \right) \sqrt{\frac{ks \cos \theta}{2i}}.$$

Видно, что в случае $\zeta \gg 1$ выражение (11) переходит в (10). Однако при $\zeta \ll 1$, т.е. при освещении под малыми углами, небольших апертурах и размерах объектов, различие между формулами (11) и (10) может быть существенным, и эффекты, связанные с конечностью объекта, при наклонном освещении необходимо учитывать.

Итак, рассмотрены два подхода к моделированию когерентных изображений наклоненных объектов конечных размеров. Они представлены формулами (5), (6) и (8), (9). В вычислительном отношении первый подход проще, однако он менее точно учитывает дифракцию на краю объекта.

3. Результаты расчетов

Подход, описываемый формулами (8), (9), был реализован в виде программ, моделирующих формирование оптическими системами когерентных изображений наклонно освещаемых объектов. Приведем результаты в случае, когда оптическая система является идеальной линзой с конечной числовой апертурой $NA = \sin \varphi$ (рис.2). В уравнениях для поля линза описывается тонким фазовым экраном

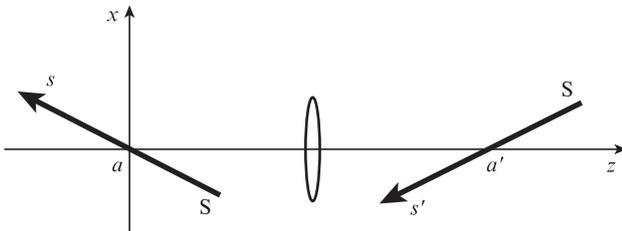


Рис.2. Построение изображения с помощью идеальной тонкой линзы. Предмет находится в плоскости S, изображение – в плоскости S'.

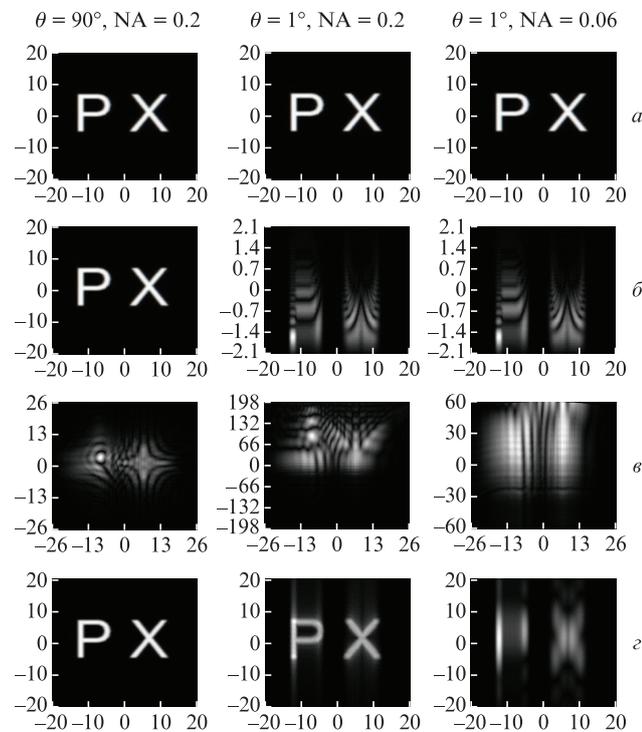


Рис.3. Пространственные распределения амплитуды поля: исходный объект (а), в промежуточной плоскости (б), на линзе (в), конечное изображение (г). Шкалы по осям даны в микрометрах.

$$T(x) = \exp\left(-\frac{ikx^2}{2f}\right) \quad (12)$$

с диаметром $2f \tan \varphi$, где f – фокусное расстояние. Когерентное и монохроматическое излучение наклонно падает на предмет размером l , расположенный в плоскости S слева от линзы на расстоянии $a = 2f$. Изображение строится в сопряженной плоскости S', пересекающей оптическую ось на расстоянии $a' = 2f$.

На первом этапе, исходя из начального поля $u_0(s)$, рассчитывалось волновое поле в плоскости $z = 0$. В соответствии с подходом, изложенным в разд.2, при $x > 0$ справедлива формула (7), а при $x < 0$ полагаем $u(x) = 0$. Дальнейшие расчеты поля на линзе и в плоскости изображения выполнялись по формуле Френеля (1). Длина волны и другие параметры выбирались соответствующими условиям экспериментов с лабораторными рентгеновскими лазерами [1]: $\lambda = 10$ нм, $l = 40$ мкм, $\theta = 90^\circ$ и 1° , $NA = 0.2$ и 0.06 . Результаты расчетов, приведенные на рис.3, показывают, что подобие изображения и предмета сохраняется вплоть до очень малых углов скольжения ($\theta = 1^\circ$) и начинает нарушаться при уменьшении числовой апертуры от 0.2 до 0.06. Качественно это соответствует оценке дифракционного предела $\delta \approx \lambda / (NA \sin \theta)$.

4. Заключение

Таким образом, разработан и опробован метод моделирования оптических систем, формирующих изображения предметов при их освещении скользящими когерентными пучками. Соответствующие эксперименты представляют интерес для лазеров рентгеновского диапазона. При необходимости обеспечить нормальное падение лазерного пучка на детектор после оптической системы в схему эксперимента могут быть добавлены дифракционная решетка или асимметричный кристалл.

Авторы благодарны И.Н.Букреевой, И.Г.Зубареву, А.В.Крайскому, С.И.Михайлову и А.В.Попову за обсуждение статьи.

Работа поддержана РФФИ (грант № 10-02-00991-а) и Программой ОФН «Фундаментальные проблемы фотоники и физика новых оптических материалов».

1. Lee J., Nam C.H., Janulewicz K.A. (Eds). *Proc. 12th Int. Conf. on X-ray Lasers* (Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 2010).
2. Schmuser P., Dohlus M., Rossbach J. *Ultraviolet and Soft X-Ray Free-Electron Lasers, Series: Springer Tracts in Modern Physics* (Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 2008, vol. 229).
3. Marchesini S., Chapman H., Hau-Riege S., London R., Szoke A., He H., Howells M., Padmore H., Rosen R., Spence J., Weierstall U. *Opt. Express*, **11**, 2344 (2003).
4. Paganin D.M. *Coherent X-ray Optics* (Oxford: Clarendon Press, 2005).
5. https://slacportal.slac.stanford.edu/sites/lcls_public/Pages/Default.aspx.
6. Pile D. *Nat. Photonics*, **5**, 456 (2011).
7. <http://www.elettra.trieste.it/FERMI/>.
8. Artyukov I.A., Popov A.V., Vinogradov A.V. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **7451**, 745114 (2009).
9. Artyukov I.A., Mikhailov S.I., Popov N.L., Vinogradov A.V. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.*, **8140**, 81400V (2011).
10. Artyukov I.A., Mitrofanov A.N., Popov A.V., Popov N.L., Vinogradov A.V. *Proc. 12th Int. Conf. on X-ray Lasers* (Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 2010, pp 329–340).