

应用量子散射理论研究 X射线 Bragg-Fresnel 元件*

乐孜纯 曹健林

(中国科学院长春光机所应用光学国家重点实验室 长春 130022)

提要 提出用量子散射理论研究 X 射线波段的新颖元件——Bragg-Fresnel 元件, 并对该元件的设计原理作了详细推导。用矩形函数表述了线性 Bragg-Fresnel 元件的衍射图形模式并编制了数值化计算机程序系统对其进行设计。最后给出线性 Bragg-Fresnel 元件的整体设计结果。

关键词 量子散射理论, 散射波幅, 衍射图形

1 引言

1986年, V. V. Aristov^[1] 提出可在理想晶体或多层膜结构上刻蚀类似于 Fresnel 波带片的衍射图形模式来构成一种 X 射线波段的新颖光学元件。在此后的近十年里, 俄、法、美、日等国家都开展了该元件的研制工作并获得了一些令人满意的测试结果^[2,3]。然而直至今日, 尚无一种成熟的理论可描述该元件的物理行为。人们曾尝试采用 Born 近似^[4]、衍射动力学^[5,6]和电磁理论中的抛物波方程(PWE)^[7]等方法对该元件进行设计和性能模拟。本文从量子散射理论出发, 引入类似于量子散射问题的三维散射势垒, 求解出严格的散射波幅表达式。并考虑电极化率在横向分量和纵深分量可分离的情况, 忽略镜面反射方向以外的其它弱反射波, 最终得出经简化的散射波幅(只要使用波长远小于衍射图形中心波带的宽度, 这种近似足够精确)。用矩形函数表述线性 Bragg-Fresnel 元件的衍射图形模式, 然后推导了该元件的衍射效率和散射能量密度表达式。

根据我们提出并推导的设计原理, 作者编制了数值化计算机程序系统对多种使用条件(使用波长、入射角及焦距要求等)下的衍射图形进行了计算, 其结果与国外报道^[4~6]的结果吻合。此外利用本课题组前期工作中发展起的一套多层膜膜系设计方法对多组材料对及多种使用条件时的多层膜膜系进行了设计, 设计结果也与国外报道^[4~6]的结果大致吻合。该设计理论较之文献^[4]中 Born 近似理论更为精确, 因而当采用相同的衍射图形模式及膜系时, 该理论所描述的 X 射线传播的物理行为也更精确。在本文的最后给出了波长 18 nm、入射角 5°、焦距 160 mm 条件下的 Bragg-Fresnel 元件的整体设计结果。

* 国家自然科学基金和 863 项目资助课题。

收稿日期: 1996—07—11; 收到修改稿日期: 1996—10—24

2 Bragg-Fresnel 元件的量子散射理论

2.1 散射波幅的理论推导

粒子被散射势垒 $V(\vec{R})$ 的散射^[9], 归结为求解 Schrödinger 方程

$$(\nabla^2 + k^2)\varphi(\vec{R}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\vec{R})\varphi(\vec{R}) \quad (1)$$

其中 $2\mu/\hbar^2$ 是一个与粒子能量相关的常量, 不影响散射波幅的求解。对光子而言, 此项为零, 因此(1)式转化为一个齐次方程。在(1)式中与体系能量相关的 k^2 项是一个复数量, 由虚、实两部分组成。其中虚数部分代表光子与介质的相互作用, 用散射势垒 $V(\vec{R})$ 表示。将该项移至方程式右侧, 得到的仍是一个与(1)式相似的非齐次微分方程。它的解由与其对应的齐次方程的通解 $\varphi^{(0)}(\vec{R})$ 和非齐次方程的一个特解共同构成, 表示为

$$\varphi(\vec{R}) = \varphi^{(0)}(\vec{R}) + \int d\vec{R}' G(\vec{R}, \vec{R}') V(\vec{R}') \varphi(\vec{R}') \quad (2)$$

其中 $G(\vec{R}, \vec{R}')$ 是 Green 函数, 被定义为

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{R}, \vec{R}') = \delta(\vec{R} - \vec{R}') \quad (3)$$

引入 Fourier 变换并经过一系列数学推导得出

$$G(\vec{r}) = -\frac{1}{i(2\pi)^2 \vec{r}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{q \cdot \exp[iq\vec{r}]}{q^2 - k^2} \quad (4)$$

其中 $\vec{r} = \vec{R} - \vec{R}'$, q 代表自变量的频谱表象。

由(4)式可知, $q = \pm k$ 是被积函数的一级极点。我们感兴趣的是出射波, 因此积分回路选取如图 1 所示。用残数定理算得积分值为

$$G(\vec{R} - \vec{R}') = -\frac{\exp[ik|\vec{R} - \vec{R}'|]}{4\pi|\vec{R} - \vec{R}'|} \quad (5)$$

将(5)式代入(2)式, 考虑有限程作用条件下 $\varphi^{(0)}$ 可用平面波 $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ 来描述, 于是得到

$$\varphi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{R} \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{R}|)}{|\vec{r} - \vec{R}|} V(\vec{R}) \varphi(\vec{R}) \quad (6)$$

引入 $S(E)$ 算子并重写(6)式得

$$\varphi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{R} \frac{\exp(ik|\vec{r} - \vec{R}|)}{|\vec{r} - \vec{R}|} S(E) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \quad (7)$$

其中 $S(E)$ 满足下列自调和方程

$$S(E) = V + VG(E)S(E) \quad (8)$$

而 $G(E)$ 定义为

$$G(E)[\psi] = \int d\vec{R} G(\vec{R}, \vec{R}', E) \psi(\vec{R}) \quad (9)$$

将(7)式中 $|\vec{r} - \vec{R}|$ 对 R/r 展开, 由于我们关心的是 Fresnel 衍射, 因此略去展开式中高于 R^2 的那些项, 并引入

$$\hat{k} = \left(\frac{k}{r}\right) \cdot \vec{r} \quad (10)$$

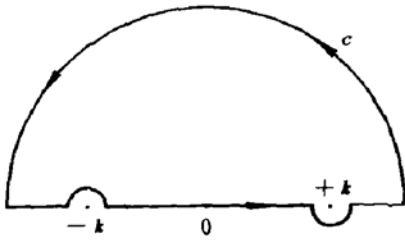


图 1 积分回路图

Fig. 1 Schematic of the integral contour

$$k' = \frac{1}{kR^2} (|\vec{k}' \times \vec{R}|)^2 \tag{11}$$

得到

$$\varphi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ikr)}{r} \int d\vec{R} \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{R}) \exp\left(\frac{ik'R^2}{2r}\right) S(E) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}) \tag{12}$$

利用 Dirac 符号规则和 $\int d\vec{R} |\vec{R}\rangle \langle \vec{R}| = 1$ 得到

$$\varphi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ikr)}{r} \langle \vec{k}' | S'(E) | \vec{k} \rangle \tag{13}$$

其中 $S'(E)$ 是由对(8)式作递归运算, 并利用

$$V'(\vec{R}, r) = \exp[ik'(R^2/2r)] V(\vec{R}) \tag{14}$$

获得的, 可表述为

$$S'(E) = V' + VG(E)V' + VG(E)VG(E)V' + \dots \tag{15}$$

从物理意义而言, 式(13)中的相关量即为散射波幅 $f(\vec{k}', \vec{k}, r)$, 重写(13)式得到

$$\varphi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \frac{\exp(ikr)}{r} f(\vec{k}', \vec{k}, r) \tag{16}$$

则散射波幅为

$$f(\vec{k}', \vec{k}, r) = -\frac{1}{4\pi} \langle \vec{k}' | S'(E) | \vec{k} \rangle \tag{17}$$

由(15)式和(17)式, $f(\vec{k}', \vec{k}, r)$ 可被表示为

$$f(\vec{k}', \vec{k}, r) = \sum_{j=1}^{\infty} f_j(\vec{k}', \vec{k}, r) = -\frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^{\infty} \langle \vec{k}' | [VG(E)]^{j-1} V' | \vec{k} \rangle \tag{18}$$

在 q (频谱) 表象中插入关系式 $\int d\vec{q} |\vec{q}\rangle \langle \vec{q}| = 1$ 和频谱表象中的 Green 函数表达式, 得出

$$f_j(\vec{k}', \vec{k}, r) = \frac{1}{(2\pi)^D} \int d\vec{q} \frac{\tilde{V}(\vec{k}' - \vec{q})}{q^2 - k^2} \tilde{f}_{j-1}(\vec{q}, \vec{k}, r) \tag{19}$$

其中 D 是散射势垒的维度数, $\tilde{V}(\vec{q})$ 和 $\tilde{V}'(\vec{q}, r)$ 分别代表 $V(\vec{R})$ 和 $V'(\vec{R}, r)$ 的 Fourier 变换

$$\tilde{V}(\vec{q}) = \int d\vec{R} V(\vec{R}) \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{R}) \tag{20}$$

$$\tilde{V}'(\vec{q}, r) = \int d\vec{R} V'(\vec{R}, r) \exp(-i\vec{q} \cdot \vec{R}) \tag{21}$$

图 2 表示 Bragg-Fresnel 元件的立体简图。考虑电极化率横向分量和纵深分量可被分离的情况, 并在横向分量上采用线性衍射图形模式。如图所示, 复介电常数在 y 轴方向没有变化, 电极化率的空间函数关系可被写为

$$\chi(x, z) = M(x)\chi(z) \tag{22}$$

与此对应的散射势垒 $V(\vec{R})$ 可写为

$$V(\vec{R}) = V_r(x)V_z(z) \tag{23}$$

假定散射势垒 $V(\vec{R})$ 的 Fourier 变换的横向分量呈 δ 分布, 则 $V(\vec{R})$ 的 Fourier 变换可简化为

$$\tilde{V}(\vec{q}) = 2\pi\alpha\delta(q_x)\tilde{V}_z(q_z) \tag{24}$$

其中 \vec{q} 为 (q_x, q_z) , α 为一系数。

对(18)式右侧求和符号中的每一项进行求解,

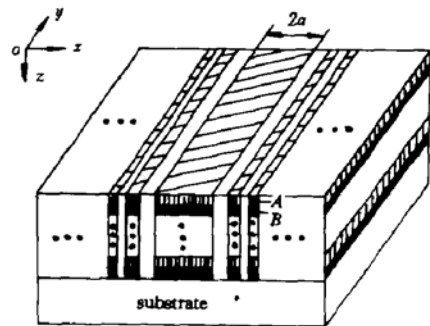


图 2 Bragg-Fresnel 元件的立体简图

Fig. 2 Geometric schematic of the Bragg-Fresnel multilayer lens

A: material A; B: material B

第一项可由(14), (17) 和(21) 式得出

$$\tilde{f}_1(\hat{q}, \hat{k}, r) = -\frac{1}{4\pi} \tilde{V}'(q - k, r) \quad (25)$$

并依据(24) 式将 $\tilde{f}_1(\hat{q}, \hat{k}, r)$ 重写为

$$\tilde{f}_1(\hat{q}, \hat{k}, r) = -\frac{1}{4\pi} \left[\frac{\tilde{V}'_z(q_z - k_z, r)}{2\pi\alpha} \right] [2\pi\alpha \tilde{V}'_z(q_z - k_z, r)] \quad (26)$$

只要辐射穿透深度与波长为同一量级, $\tilde{V}'_z(q_z - k_z, r)$ 就可由 $\tilde{V}(q_z - k_z)$ 代替。从(19) 式和(24) 式可推出第二项

$$\tilde{f}_2(\hat{q}, \hat{k}, r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\tilde{V}'_z(q_z - k_z, r)}{\alpha} \int \frac{dq'_z}{2\pi} \cdot \frac{\alpha \tilde{V}'_z(q_z - q'_z)}{(q'_z)^2 - (q_z)^2} \alpha \tilde{V}'_z(q'_z - k_z) \quad (27)$$

即

$$\tilde{f}_2(\hat{q}, \hat{k}, r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\tilde{V}'_z(q_z - k_z, r)}{\alpha} \tilde{f}_3(q_z, k_z) \quad (28)$$

其中

$$\tilde{f}_3(q_z, k_z) = \alpha^2 \int \frac{dq'_z}{2\pi} \cdot \frac{\tilde{V}'_z(q_z - q'_z)}{(q'_z)^2 - (q_z)^2} \tilde{V}'_z(q'_z - k_z) \quad (29)$$

(29) 式右侧的积分项只与 z 坐标有关, 很明显它代表未经刻蚀的多层膜结构的散射波幅, 用 $\tilde{f}_{3, \text{UE}}(q_z, k_z)$ 表示。依此类推可得

$$\tilde{f}_j(q_z, k_z) = \alpha^j \tilde{f}_{j, \text{UE}}(q_z, k_z) \quad (30)$$

$$\tilde{f}_j(\hat{q}, \hat{k}, r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\tilde{V}'_z(q_z - k_z, r)}{\alpha} \tilde{f}_j(q_z, k_z) \quad (31)$$

经求和运算并对横向分量因式分解, 最终得到

$$f(\hat{k}', \hat{k}, r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\tilde{V}'_z(q'_z - k_z, r)}{\alpha} \tilde{f}_{\text{tot, UE}}(q'_z, k_z) \quad (32)$$

其中 q'_z 和 q_z 分别相应于 k'_z 和 k_z 在频谱域中的表象。

由以上推导可知, (32) 式表述了 $\tilde{f}_1(\hat{q}, \hat{k}, r), \tilde{f}_2(\hat{q}, \hat{k}, r), \dots, \tilde{f}_j(\hat{q}, \hat{k}, r)$ 所有项之和, 因而所得结果比较精确。而文献[4] 所描述的 Born 近似方法中对散射波幅作了一级(只考虑 $\tilde{f}_1(\hat{q}, \hat{k}, r)$) 和二级(只考虑 $\tilde{f}_1(\hat{q}, \hat{k}, r)$ 和 $\tilde{f}_2(\hat{q}, \hat{k}, r)$ 两项)近似。当散射介质厚度增大时, Born 近似理论的偏差也会随之增大而影响其精确性。

2.2 衍射图形的获取和散射势垒的变换

为了计算(32)式所示的散射波幅, 首先需要得出 $\tilde{f}_{\text{tot, UE}}(q'_z, k_z)$ 和 $\tilde{V}'_z(q'_z - k_z, r)$ 两项的表达式。其中 $\tilde{f}_{\text{tot, UE}}(q'_z, k_z)$ 是未经刻蚀的多层膜结构的散射波幅, 该项可由计算多层膜结构的镜面反射率得到。对此前人已作了许多研究^[9], 本文不再赘述。从 $\tilde{V}'_z(q'_z - k_z, r)$ 项的形式来看, 它与散射势垒的 Fourier 变换有关。下面首先给出衍射图形模式, 进而确定散射势垒, 最终得出 $\tilde{V}'_z(q'_z - k_z, r)$ 。

2.2.1 线性 Bragg-Fresnel 元件的衍射图形模式

考虑直边的波带模式且在 y 轴方向为无界的理想情况。如图 2 所示, α 表示衍射图形中心波带的半宽度; j 为正整数, 在 $[0, N]$ 范围内取值, N 表示波带数。根据矩形函数, 对衍射图形模式描述如下

$$I = \text{rect}\left(\frac{x}{\alpha\sqrt{2j+1}}\right) - \text{rect}\left(\frac{x}{\alpha\sqrt{2j}}\right) \quad (33)$$

其中标准矩形函数定义如下:

$$\text{rect}\left(\frac{x}{b}\right) = \begin{cases} 1 & |x| < b \\ 0 & |x| \geq b \end{cases} \quad (34)$$

可见线性 Bragg-Fresnel 元件的衍射图形的几何参数由其特征参数 (a) 来决定。具有这种图形模式的元件将入射辐射会聚到距离 r ($r \approx a^2/r$) 处。

2.2.2 线性 Bragg-Fresnel 元件的散射势垒的 Fourier 变换

散射势垒的 Fourier 变换可表示为如下两式

$$\tilde{V}(\vec{q}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dz V(x, z) \exp[i(q_x \cdot x + q_z \cdot z)] \quad (35)$$

$$\tilde{V}'(\vec{q}, r) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp\left[i \frac{k'(x^2 + z^2)}{2r}\right] V(x, z) \exp[i(q_x \cdot x + q_z \cdot z)] \quad (36)$$

由于散射势垒可被分离, 对于前面所述的衍射图形模式, 有

$$V_x(x) = \sum_{j=0}^N \left[\text{rect}\left(\frac{x}{a\sqrt{2j+1}}\right) - \text{rect}\left(\frac{x}{a\sqrt{2j}}\right) \right] \quad (37)$$

从(35)式和(36)式可以看出, 若散射势垒可被分离, 则散射势垒的 Fourier 变换也可被分离

$$\tilde{V}(\vec{q}) = \tilde{V}_x(q_x) \tilde{V}_z(q_z) \quad (38)$$

$$\tilde{V}'(\vec{q}, r) = \tilde{V}'_x(q_x, r) \tilde{V}'_z(q_z, r) \quad (39)$$

其中

$$\tilde{V}'_z(q_z, r) = \exp\left(-i \frac{r}{2k'} q_z^2\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[\frac{ik'}{2r} \left(x + \frac{r}{k'} q_z\right)^2\right] V_x(x) dx \quad (40)$$

将(37)式代入(40)式并利用标准 Fresnel 积分公式(用 Fr 表示)

$$\begin{cases} C_f = \int \cos\left(\frac{\pi}{2} t^2\right) dt \\ S_f = \int \sin\left(\frac{\pi}{2} t^2\right) dt \end{cases} \quad (41)$$

$$\begin{cases} C_f = \int \cos\left(\frac{\pi}{2} t^2\right) dt \\ S_f = \int \sin\left(\frac{\pi}{2} t^2\right) dt \end{cases} \quad (42)$$

最终得到

$$\tilde{V}'_x(q_x, r) = i \sqrt{\frac{\pi r}{k'}} \exp\left(-i \frac{r}{2k'} q_x^2\right) \sum_j (-1)^{j+1} \left\{ \text{Fr}\left[\left(a\sqrt{j} + \frac{r q_x}{k'}\right) \sqrt{\frac{k'}{\pi r}}\right] + \text{Fr}\left[\left(a\sqrt{j} - \frac{r q_x}{k'}\right) \sqrt{\frac{k'}{\pi r}}\right] \right\} \quad (43)$$

其中求和范围为 $[0, 2N + 1]$, 由于需要对衍射图形的每一波带作 Fresnel 积分的和计算, 当波带数很大时, 计算极繁杂且耗时。

3 散射能量密度及衍射效率的计算

在处理散射问题时, 我们所关心的不是能量本征值, 而是散射粒子的角分布及散射过程中粒子各种性质的变化。对于本文研究的情况, 观察点的位置 $r \gg \lambda$ (λ 为入射粒子的波长), 因此可以认为角分布依赖波函数在 $r \rightarrow \infty$ 的渐进行为, 它与入射粒子的能量及入射粒子与散射势垒的相互作用有关。由(16)式可知, 其中第一项为入射波, 第二项为出射的散射球面波。在此情况下, 如入射粒子流密度表示为 J_i , 则出射散射粒子流密度 J_s 为^[9]

$$J_s = J_s |f(\hat{k}^s, \hat{k}, r)|^2 / r^2 \tag{44}$$

因此,我们将散射能量密度表述为

$$\frac{dW(\hat{k}^s, \hat{k}, r)}{ds} = c |f(\hat{k}^s, \hat{k}, r)|^2 / r^2 \tag{45}$$

其中 c 为一常数。对于理想的衍射图形模式,取 $a = 1/2$,得到

$$f(\hat{k}^s, \hat{k}, r) = -\frac{1}{2\pi} \tilde{V}_s(q_z^s - k_z, r) \tilde{f}_{diff,VE}^s(q_z^s, k_z) \tag{46}$$

根据(24)式,对于镜面反射方向上的实焦点,其能量密度可表示为

$$\frac{dW(\hat{k}^s, \hat{k}, r)}{ds} = c' |B_s|^2 |\tilde{f}_{diff,VE}^s(q_z^s, k_z)|^2 \delta(k_z^s, k_z) \tag{47}$$

其中 B_s 为一系数,与(43)式相关。与光栅衍射理论类比,可将理想衍射图形模式时焦点的效能写为

$$\eta_s = c' |B_s|^2 \frac{|\tilde{f}_{diff,VE}^s(-k_z, k_z)|^2}{(2\pi)^2} \tag{48}$$

利用式

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{(2m+1)^2} = \frac{\pi^2}{4} \tag{49}$$

可推导出所有焦点的总体效能为

$$\eta = |\tilde{f}_{diff,VE}^s(-k_z, k_z)|^2 \tag{50}$$

4 数值化计算机程序系统的设计

在 Bragg-Fresnel 元件的整体设计中,衍射图形模式设计是关键,由于其计算量很大,作者编制了数值化计算机程序系统对其进行设计。此方法简捷可靠、使用方便,运算前只需输入与使用条件相关的初始参数,就可得出衍射图形的数值结果及图形结果。图 3 为程序设计的简要框图。

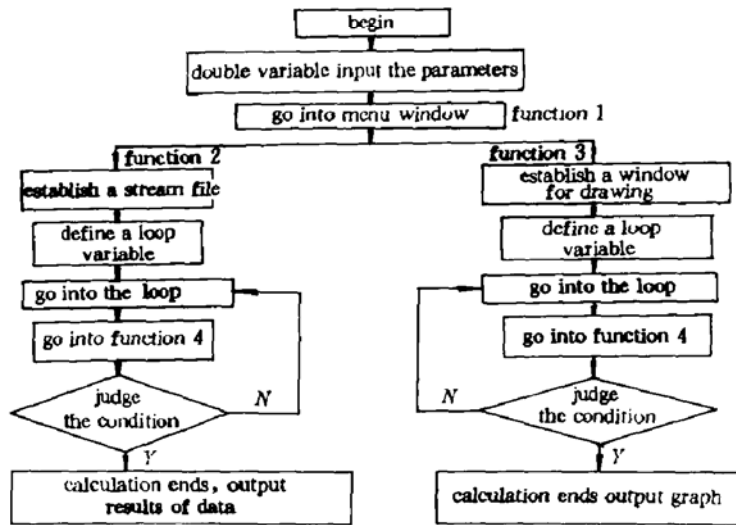


图 3 主程序流程简图

Fig. 3 Flow of the main computer program

图 3 中函数 1 完成建立菜单窗口的功能; 函数 2 和函数 3 分别完成衍射图形数值设计和图形显示的功能; 函数 4 完成衍射图形设计中所有数学计算功能。对函数 1~函数 4 的设计框图不再赘述。

5 整体设计结果及结论

对于使用波长为 18 nm, 入射角 5° , 使用焦距为 160 mm 的情况, Bragg-Fresnel 元件的整体设计结果为: 中心波带半宽度为 $52.5 \mu\text{m}$, 共 799 个波带, 整个图形在 x 轴方向的尺寸为 $2104 \mu\text{m}$ 。多层膜系采用 Mo/Si 材料对, 膜层数为 30 层, 周期为 9.4 nm, 理论反射率约为 40%。

参 考 文 献

- 1 V. V. Aristov, S. V. Gaponov, V. M. Genkin *et al.*. Focusing properties of shaped multilayer X-ray mirrors. *JETP Lett.*, 1986, 44(4): 265
- 2 A. Erko, Yu. Agafonov, L. A. Panchenko *et al.*. Elliptical multilayer Bragg-Fresnel lenses with submicron spatial resolution for X-rays. *Opt. Commun.*, 1994, 108: 146
- 3 U. Kleineberg, H. J. Stock *et al.*. Multilayer reflection type zone plates and blazed gratings for the normal incidence soft X-ray region. *SPIE*, 1995, 2279: 269
- 4 A. Sammar, J. M. Andre. Diffraction of multilayer gratings and zone plates in the X-ray region using the Born approximation. *JOSA*, 1993, A10: 600
- 5 A. Mirone, M. Idir, P. Dhez *et al.*. Dynamical theory for Bragg-Fresnel multilayer lenses for X-UV and X-ray range. *Opt. Commun.*, 1994, 111: 191
- 6 A. Sammar, J. M. Andre. Dynamical theory of stratified Fresnel linear zone plates. *JOSA*, 1993, A10: 2324
- 7 Yu. V. Kopylov, A. V. Popov, A. V. Vinogradov. Application of the parabolic wave equation to X-ray diffraction optics. *Opt. Commun.*, 1995, 118: 619
- 8 曾谨言. 量子力学 I, 量子力学 II. 北京: 科学出版社, 1995: 459~559, 124~188
- 9 B. Pardo, T. Megademini, J. M. Andre. X-UV synthetic interference mirrors; theoretical approach. *Rev. Phys. Appl.*, 1988, 23: 1579

Study of Bragg-Fresnel Optics by Quantum Scattering Theory

Le Zichun Cao Jianlin

(The State Key Lab. of Applied Optics, Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics,
Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022)

Abstract In this paper, a quantum scattering theory is given to calculate the performances of the X-ray multilayer Bragg-Fresnel lens recently developed for X-ray optics. The scattering amplitude, diffraction pattern, diffraction efficiency and scattered power density are derived. A computer program worked out by the authors is introduced and the design of Bragg-Fresnel optics is also given.

Key words quantum scattering theory, scattering amplitude, diffraction pattern