

# 软 X 射线布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜 的近似理论设计\*

乐孜纯 曹健林

(中国科学院长春光学精密机械研究所, 应用光学国家重点实验室, 长春 130022)

**摘 要** 从动力学原理出发对 X 射线布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜的近似设计理论作了推导, 给出了近似方程并对近似理论作了误差分析。同时给出了作者编制的数值化计算机程序系统的设计框图及其设计结果, 也给出了多层膜膜系设计结果。

**关键词** 布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜, 衍射图形模式, 衍射动力学。

## 1 引 言

在 X 射线波段, 成像元件一直局限于全反射式的光学元件、多层膜反射镜及利用衍射效应的透射式菲涅耳波带片。近年来, 由于超薄膜制备技术及微电子工业中微细图形刻蚀技术的发展, 使得在 X 射线波段研制一种新型成像元件的设想成为可能。1986 年 Aristov<sup>[1]</sup>首次提出可在理想晶体或多层膜结构上刻蚀一定的衍射图形来达到 X 射线的成像或色散目的后, 许多国家都开展了这方面的研究工作<sup>[2-4]</sup>。本文所述的软 X 射线布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜(LBFML)正是这样一种新型元件, 它集中了软 X 射线多层膜反射镜及衍射元件的优点。它可用平面光学元件实现 X 射线的会聚成像; 具有较高的空间及光谱分辨率; 同时具有极好的机械强度和热稳定性。可望在高分辨的 X 射线显微镜、X 射线扫描微探针、元素微区分析及激光等离子体 X 射线诊断等领域得到应用。

本文作者对布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜设计的近似理论作了推导, 提出了一种足够精确的近似方法。编制了衍射图形的数值化计算机程序设计系统并给出了设计结果, 同时对多层膜膜系进行了设计, 并分析和计算了近似理论的误差值。

## 2 近似理论

一维聚焦的布拉格-菲涅耳镜是一种用于 X 射线波段的反射式平面聚焦元件, 它的制备方法是在多层膜上刻蚀衍射图形模式<sup>[5]</sup>。当这种元件用于 X 射线光学系统时, 由于入射的 X 射线束在该元件中的各种散射及衍射效应, 使其聚焦性能受到影响。可用元件中每点的电磁

\* 国家自然科学基金资助课题。

收稿日期: 1996 年 3 月 21 日; 收到修改稿日期: 1996 年 6 月 31 日

场来表征。作者设计的布拉格-菲涅耳一维聚焦镜采用线状波带图形。这种衍射图形是非周期式的, 因此元件结构中各点电磁场的计算非常复杂。为此采用一种近似的方法来计算平面单色波入射到元件上时元件结构中每点的电磁场, 并以此来描述 X 射线束在该元件中的物理行为。

## 2.1 近似方法的获得

如图 1 所示, 设平面单色波以  $\theta$  角入射到线状波带图形表面, 入射平面垂直于线状波带。图中  $d$  表示每一波带边界到光轴  $pp'$  的距离,  $d$  的选择应使光程差  $\Delta_n - \Delta_{n-1} = \lambda/2$  ( $\lambda$  为入射波长)。设  $S_B(d)$  为布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜元件的光程函数, 并考虑空气的折射率为 1, 则

$$S_B(d) = \sqrt{(d \cos \theta)^2 + z^2} + \sqrt{(d \cos \theta)^2 + (z')^2} - (z + z') \quad (1)$$

对 (1) 式作幂函数展开并利用

$$\frac{1}{f} = \frac{1}{z} + \frac{1}{z'} \quad (2)$$

其中  $z$  和  $z'$  分别为物距和像距, 当线状波带数大于 100 时此式成立。于是得到

$$S_B(d) \approx \frac{d^2 \cos^2 \theta}{2f} \quad (3)$$

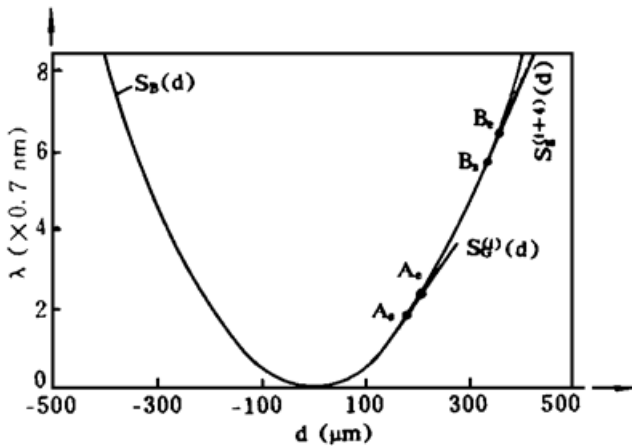


Fig. 2 Diagram of optical path function for LBFML [  $S_B(d)$  ] and grating [  $S_B^{(i)}(d)$  and  $S_B^{(i+4)}(d)$  ]

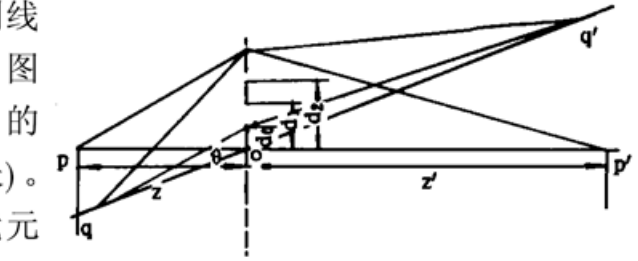


Fig. 1 Calculation diagram of optical path function for Bragg-Fresnel multilayer lens

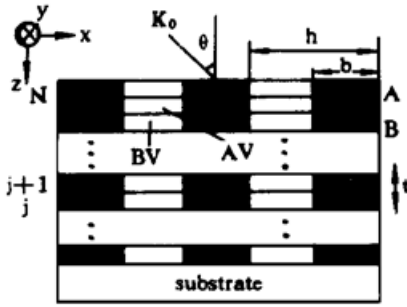
图 2 显示了布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜元件和周期式多层膜光栅的光程函数简图。如图 2 所示, 若用内接于布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜元件的程函数曲线的折线段来代替程函数曲线, 则越是远离坐标原点的曲线段与代替它的折线段越是接近。因此当选取的波带远离中心波带时, 即选取的波带的宽度远远小于中心波带宽度时, 代表那一波带的程函数曲线可用内接于该波带边界两点的直线来代替。该直线即表示了一个具有某一光栅常数的周期式多层膜光栅的程函数曲线, 如  $S_B^{(i)}(d)$  或  $S_B^{(i+4)}(d)$ 。使这种近似成立的条件可由下式表示

$$S_B(d) - S_B^{(i)}(d) \approx \frac{(d_B - d_B^{(i)})^2 \cos^2 \theta}{2f} \ll \frac{\lambda}{2} \quad (4)$$

只要选取的波带使 (4) 式成立, 布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜的每一个波带就可以由与其匹配的光栅来代替, 这样一个布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜就近似成为周期性变化的多层膜光栅 (也可以称为变频光栅)。而其衍射和散射效应可由计算每一条线状波带相应的光栅的衍射和散射效应获得。因此在下面的一节中着重推导<sup>[6]</sup>二元振幅式多层膜光栅的动力学理论<sup>[7]</sup>。

### 2.2 二元振幅式多层膜光栅的动力学理论

图 3 给出了二元振幅式多层膜光栅的几何图示及相应的标记符。多层膜结构由交替的两种材料构成，分别用 A 和 B 表示；光栅的周期为  $h$ ，对于二元式光栅  $b = h/2$ 。每层膜的复介电常数  $\epsilon_j$  在  $x$  轴方向以空间频率  $g = 2\pi/h$  变化。



$$\epsilon_j(x) = \epsilon_j(x + nh), \quad n \text{ 为整数} \quad (5)$$

在一个周期内

$$\epsilon_j(x) = \epsilon_A H(x)H(b - x) + \epsilon_{AV} H(x - b)H(h - x) \quad (6)$$

Fig. 3 Geometric schematic of an amplitude multilayer grating 其中  $\epsilon_A$  和  $\epsilon_{AV}$  分别是材料 A 的介电常数和 A 材料膜层的两个栅条间空间处的介电常数。 $H(x)$  是 Heaviside 函数。对于 B 材料层可以得出相似的公式。

如图 3 所示，一束平面单色波以入射角  $\theta$  入射光栅表面。假设该光栅在  $x$  轴和  $y$  轴方向均为无限大，入射波矢  $k_0$  垂直于  $y$  轴。 $x$ 、 $z$  平面为入射平面。在材料磁导率均为零的情况下，从麦克斯韦方程<sup>[8]</sup>出发，可得出如下公式

$$\left. \begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{E}_j - \nabla(\mathbf{P}_j \cdot \mathbf{E}_j) &= -\epsilon_j(x) k_0^2 \mathbf{E}_j \\ \nabla^2 \mathbf{H}_j - \mathbf{P}_j \times (\nabla \times \mathbf{H}_j) &= -\epsilon_j(x) k_0^2 \mathbf{H}_j \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

其中  $\mathbf{P}_j = \nabla \epsilon_j / \epsilon_j$ 。

对本文所要处理的问题，只需考虑 TE 模和 TM 模的情况就足够了(TE、TM 模分别是电场在垂直入射面和平行入射面振动的情况)。这样可将它简化为标量场问题。下面对 TE 模进行推导，矢量方程(7)式可简化为

$$\nabla^2 U_j(x, z) + \epsilon_j(x) k_0^2 U_j(x, z) = 0 \quad (8)$$

(8) 式的基本解为

$$\exp(\pm ik_{\perp j; n} z) B_{j; n}^{\pm}(x) \quad (9)$$

根据 Floquet 理论，可将函数  $B_j$  写为

$$B_{j; n}(x) = \exp(iKx) b_{j; n}(x) \quad (10)$$

对周期性函数  $b_{j; n}(x)$  作傅里叶展开，得到

$$b_{j; n}(x) = \sum_p b_{j; n, p} \exp(ipgx) \quad (11)$$

由此可见，只要求得  $b_{j; n}(x)$ ，更确切地说，只要求得系数  $b_{j; n, p}$ ，就可以获得整个电磁场的解。下面考虑第  $j$  层的情况，假设第  $j$  层的膜层材料为 A。定义

$$b_{A; n}(x) = \begin{cases} X_{A; n}(x), & 0 < x < b \\ X_{AV; n}(x) & b < x < d \end{cases} \quad (12)$$

对材料为 B 的膜层可作相似的定义。 $X_{A; n}(x)$  和  $X_{AV; n}(x)$  满足下列微分方程

$$\left\{ \begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dx^2}\right) X_{A; n}(x) + 2iK \left(\frac{d}{dx}\right) X_{A; n}(x) + (\epsilon_A k_0^2 - K^2 - k_{\perp A; n}^2) X_{A; n}(x) &= 0 \\ \left(\frac{d^2}{dx^2}\right) X_{AV; n}(x) + 2iK \left(\frac{d}{dx}\right) X_{AV; n}(x) + (\epsilon_{AV} k_0^2 - K^2 - k_{\perp A; n}^2) X_{AV; n}(x) &= 0 \end{aligned} \right. \quad (13)$$

其中  $k_{\perp A; n}$  表示材料为 A 的第  $j$  层波矢的垂直分量。这组微分方程的解可表示为

$$\begin{cases} X_{A; n}(x) = C_{A; n}^+ \exp(k_{A; n}^+ x) + C_{A; n}^- \exp(k_{A; n}^- x) \\ X_{AV; n}(x) = C_{AV; n}^+ \exp(k_{AV; n}^+ x) + C_{AV; n}^- \exp(k_{AV; n}^- x) \end{cases} \quad (14)$$

其中

$$\begin{aligned} k_{A; n}^{\pm} &= -iK \pm (-\epsilon_A k_0^2 + k_{\perp A; n}^2)^{1/2}, \\ k_{AV; n}^{\pm} &= -iK \pm (-\epsilon_{AV} k_0^2 + k_{\perp AV; n}^2)^{1/2}. \end{aligned}$$

由于在  $x = b$  处电磁场的一阶导数是连续的, 并且对于本文所讨论的问题, 电磁场和它的一阶导数都是周期性的, 因此得到:

$$\begin{bmatrix} \exp(k_{A; n}^+ nb) & \exp(k_{A; n}^- nb) & -\exp(k_{AV; n}^+ nb) & -\exp(k_{AV; n}^- nb) \\ k_{A; n}^+ \exp(k_{A; n}^+ nb) & k_{A; n}^- \exp(k_{A; n}^- nb) & -k_{AV; n}^+ \exp(k_{AV; n}^+ nb) & -k_{AV; n}^- \exp(k_{AV; n}^- nb) \\ 1 & 1 & -\exp(k_{AV; n}^+ nh) & -\exp(k_{AV; n}^- nh) \\ k_{A; n}^+ & k_{A; n}^- & -k_{AV; n}^+ \exp(k_{AV; n}^+ nh) & -k_{AV; n}^- \exp(k_{AV; n}^- nh) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{A; n}^+ \\ C_{A; n}^- \\ C_{AV; n}^+ \\ C_{AV; n}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

其中(15)式存在非平凡解的必要条件是(15)式矩阵的行列式为零, 解行列式等于零的方程求出系数  $k_{\perp A; n}$  和  $k_{\perp AV; n}$ , 然后再利用矩阵方程(15)式求解  $b_{j; n}(x)$ 。对于 B 材料膜层, 可以得到与(15)式相似的结果。

由上面推导的公式体系可精确计算整个光栅的电磁场, 下面讨论边界条件。

假设将  $z$  坐标取在  $z_{j+1, j}$  点, 即  $(j+1)$  膜层和  $j$  膜层的交界面处, 边界条件可表示为

$$\begin{cases} U_j(z_{j+1, j}) = U_{j+1}(z_{j+1, j}) \\ [\partial U_j / \partial z]_{z_{j+1, j}} = [\partial U_{j+1} / \partial z]_{z_{j+1, j}} \end{cases} \quad (16)$$

通过对  $U_j$  进行扩展, 并利用(16)式和(11)式得到

$$\begin{cases} \sum_n (T_j^n b_{j; n, p}^+ + R_j^n b_{j; n, p}^-) = \sum_n (T_{j+1}^n b_{j+1; n, p}^+ + R_{j+1}^n b_{j+1; n, p}^-) \\ \sum_n (T_j^n q_{j; n, p}^+ - R_j^n q_{j; n, p}^-) = \sum_n (T_{j+1}^n q_{j+1; n, p}^+ - R_{j+1}^n q_{j+1; n, p}^-) \end{cases} \quad (17)$$

其中  $q_{j; n, p}^{\pm} = b_{j; n, p}^{\pm} k_{\perp j; n}$ , 对(17)式作矩阵处理得

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{F}}_j \cdot \mathbf{V}_j = \bar{\mathbf{F}}_{j+1} \cdot \mathbf{V}_{j+1} \\ \mathbf{F}_j = \begin{bmatrix} [b_{j; n, p}^+] & [b_{j; n, p}^-] \\ [q_{j; n, p}^+] & [-q_{j; n, p}^-] \end{bmatrix} \\ \mathbf{V}_j = (\mathbf{T}_j, \mathbf{R}_j) \end{cases} \quad (18)$$

在  $z$  轴方向, 每一膜层底部的  $U_j$  值[表示为  $U_j(z_j, j-1)$ ] 与其顶端的  $U_j$  值(表示为  $U_j(z_{j+1, j})$ ) 由传播子  $G_j$  联系着

$$\begin{cases} G_j = \begin{bmatrix} [g_{j; n, p}^+] & [0] \\ [0] & [g_{j; n, p}^-] \end{bmatrix} \\ g_{j; n, p}^{\pm} = \delta_{n, p} \exp(\pm k_{\perp j; n} t_j) \end{cases} \quad (19)$$

其中  $t_j$  表示第  $j$  层膜层的厚度。而在  $x$  轴方向, 多层膜被刻蚀部分的矢量值  $\mathbf{V}_{vac}$  与多层膜未被刻蚀部分的矢量值  $\mathbf{V}_{sub}$  的关系表示如下

$$\begin{cases} \mathbf{V}_{vac} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{V}_{sub} \\ \mathbf{M} = \prod_{j=1}^{N+1} G_j \cdot \mathbf{F}_{j, j-1} \end{cases} \quad (20)$$

其中  $N$  是多层膜的层数。用  $r_p$  和  $t_p$  表示第  $p$  级反射波与透射波, 可以得到

$$\begin{cases} r_p = \sum_n R^n b_{n,p}^- \\ t_p = \sum_n T^n b_{n,p}^+ \end{cases} \quad (21)$$

获得了  $r_p$  和  $t_p$  值, 就可以分别求出反射波与透射波的衍射效能。 $r_p r_p^*$  的值即是反射波的衍射效能, 而透射波的衍射效能由  $t_p t_p^*$  求出。

### 3 设计方法及结果

软 X 射线布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜的设计主要包括衍射图形模式设计和多层膜的膜系设计。

#### 3.1 布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜的衍射图形设计

布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜元件衍射图形的设计是一项计算量很大的工作, 因此

作者使用 C 语言编制了数值化的计算机程序系统对其进行设计。该设计系统方便、可靠, 运行前只要输入布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜元件所应用的光学系统的相应参数(如使用波长、入射角度、使用焦距等)就可以很方便地计算出衍射图形的尺寸, 并可在屏幕上显示出相应的图形模式。下面给出程序设计的简略框图(图 4)。

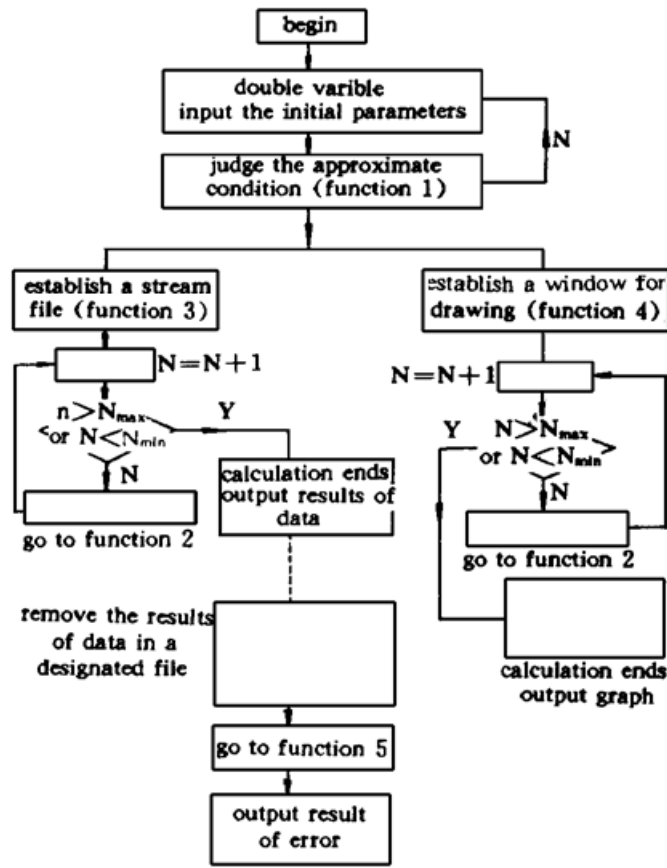


Fig. 4 Flow chart of main computer program

涅耳镜进行了设计, 衍射图形共有 1000 个条带。表 1 列出了前 4 个条带和后 4 个条带的值。图 5 显示了计算机模拟的衍射图形模式。因为衍射图形条带尺寸很小, 因此对其放大处理并截取部分条带示于图 5。

从图 4 中可以看出, 该程序设计系统主要完成两大功能: 一是衍射图形的设计, 二是近似理论的误差分析和误差结果。这两大功能由作者编制的主程序和 5 个子程序(函数 1~ 函数 5)来完成。函数 1 的功能是判断近似理论的使用条件是否成立; 函数 2 的功能是完成衍射图形设计中的各种数学运算; 函数 3 完成衍射图形的数值设计; 函数 4 完成衍射图形的显示功能; 函数 5 的功能是作误差值的计算。

作者对在 1730 eV 条件下使用, 入射角为 84°, 设计焦距为 150 mm 的一维聚焦布拉格-菲

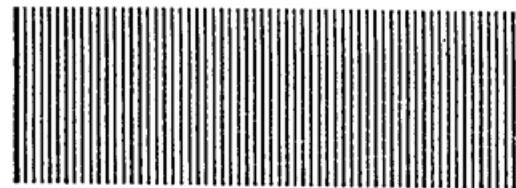


Fig. 5 Computer imitative diagram for diffraction pattern of LBFML

Table 1. The data for diffraction pattern of LBFML

number of zones	width of zones
1	1.551543 $\mu\text{m}$
2	1.549991 $\mu\text{m}$
3	1.548443 $\mu\text{m}$
4	1.546900 $\mu\text{m}$
997	0.896083 $\mu\text{m}$
998	0.895784 $\mu\text{m}$
999	0.895485 $\mu\text{m}$
1000	0.895186 $\mu\text{m}$

### 3.2 布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜的多层膜膜系设计

软 X 射线波段多层高反膜膜系设计需要解决的中心问题有两个: 一是选择镀膜材料, 二是在给定材料和使用条件(主要是工作波段和入射角)之后, 决定膜系所能达到的最大反射率 and 与此对应的最佳膜厚值<sup>[9]</sup>。根据上节所述使用条件, 膜系设计结果为: 选用 W/Si 材料对, 膜层数 92 层, 周期为 3.47 nm, 理论反射率约为 36%。

## 4 分析与讨论

对软 X 射线多层膜光栅而言, 运用第 2 节给出的方法, 可以对电磁场精确计算。假设将光栅中任意一个栅条去掉, 这时光栅就不是周期性的了, 在此栅条附近的电磁场的值将发生扰动。与此相似, 对于非周期的布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜, 当把每一条线状波带当作与其相匹配的光栅计算时, 由于它的非周期性, 电磁场值必然会产生扰动。定义一波函数在布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜内部移动的平均侧向位移<sup>[10]</sup>为

$$P = \frac{2t}{\text{ctg } \theta} \quad (22)$$

其中  $t$  表示布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜的厚度, 对厚多层膜来说,  $t$  也可以表示极限刻蚀深度。当  $P \ll \frac{\sqrt{N}}{\cos \theta}$  成立时, 认为在平均侧向位移  $P$  之内, 扰动量不大, 这时近似理论是足够精确的, 其误差  $E$  可表示为:

$$E = \left[ \frac{P \cos \theta}{\sqrt{N}} \right]^2 \quad (23)$$

对照作者设计的参数值(见第 3 节), 可计算出  $P \approx 3.1 \mu\text{m}$ , 误差  $E \approx 0.1\%$ 。可见对于本文作者设计的布拉格-菲涅耳多层膜一维聚焦镜, 近似理论是足够精确的。

### 参 考 文 献

- [1] V. V. Aristov, S. V. Gaponov, V. M. Genkin *et al.*, Focusing properties of profiled X-ray multilayer mirrors. *JETP Lett.*, 1986, **44**(4): 265~ 267
- [2] A. Erko, Yu. Agafonov, L. A. Panchenko *et al.*, Elliptical multilayer Bragg-Fresnel lenses with sub-micron spatial resolution for x-rays. *Opt. Commun.*, 1994, **106**(4): 146~ 150
- [3] P. Dhez, A. Erko, E. Khzmalan *et al.*, Kirkpatrick-Baez microscope base on a Bragg-Fresnel X-ray multilayer focusing system. *Appl. Opt.*, 1992, **31**(31): 6662~ 6667

- [4] 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**(3) : 191~ 198
- [5] C. Khan Malek, T. Moreno, Ph. Guerin *et al.*, Fabrication of multilayer Bragg-Fresnel zone plates for the soft X-ray range. *Proc. SPIE*, 1990, **1343** : 56~ 61
- [6] 数学手册编写组, 数学手册. 第一版, 北京, 人民教育出版社, 1979
- [7] A. Sammar, J. -M. André, Diffraction and scattering by lamellar amplitude multilayer gratings in the X-UV region. *Opt. Commun.*, 1991, **86**(2) : 245~ 254
- [8] M. 玻恩, E. 沃耳夫, 光学原理. 第一版, 北京, 科学出版社, 1978 : 13~ 96
- [9] 曹健林, 软 X 射线波段(60~ 900 eV) 光学常数测定及多层膜反射镜的设计、制备. 中国科学院长春光机所, 博士学位论文, 1989 : 56~ 64
- [10] A. I. Erko, B. Vidal, P. Vincent, Multilayer gratings efficiency: numerical and physical experiments. *Nucl. Instr. and Meth.*, 1993, **A333**(3) : 599~ 606

## Approximate Theory for 1-D Focusing Bragg-Fresnel Multilayer Lens

Le Zichun      Cao Jianlin

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

(Received 21 March 1996; revised 13 June 1996)

**Abstract** This paper introduces an approximate theory and a numerical method used for designing 1-D focusing Bragg-Fresnel multilayer lens (LBFML). The results obtained by using a set of computer program worked out by the author are given, and the error of the approximate theory is analysed.

**Key words** LBFML, diffraction pattern, diffraction dynamics.