

硬 X 射线光子筛波导效应研究^{*}

谢常青[†] 朱效立 贾 佳

(中国科学院微电子研究所, 北京 100029)

(2009 年 2 月 16 日收到 2009 年 3 月 5 日收到修改稿)

基于快速傅里叶变换光束传播法,研究了硬 X 射线光子筛中高宽比金属结构的波导效应,确定了硬 X 射线光子筛的物理边界条件,采用角谱法计算了硬 X 射线光子筛的点扩展函数,并分析了吸收体厚度对聚焦性能的影响. 研究结果表明波导效应一定程度上有利于抑制光子筛高级衍射的产生,提高聚焦性能. 在同样的特征尺寸下,硬 X 射线光子筛的空间分辨率优于菲涅尔波带片,其缺点是衍射效率的下降. 吸收体厚度的提高有利于提高光子筛的聚焦性能和衍射效率,但是相应的纳米加工工艺难度会增加.

关键词: 菲涅尔波带片, 硬 X 射线光子筛, 光束传播法, 角谱法

PACC: 8170J, 4280B, 0760

1. 引 言

各种材料在 X 射线波段的折射率实部非常接近 1, 而虚部非常小, 常规的折射光学元件难于获得应用, 基于衍射原理的 X 射线菲涅尔波带片 (Fresnel zone plates, FZP) 是一种理想的聚焦元件, 其结构是在低原子序数的自支撑薄膜上形成深亚微米、纳米尺度高高宽比的高原子序数金属结构, 广泛应用于惯性约束聚变空间诊断^[1,2]、同步辐射 X 射线微探针和显微技术^[3]等领域.

软 X 射线波段 FZP 已经成为一种主流的 X 射线聚焦成像光学元件, 其最外环宽度已经达到 15 nm (对应金吸收体厚度为 80 nm, 高高宽比超过 5:1)^[4]. 受制于当前的纳米尺度高高宽比金属结构加工水平, 当前国际水平的硬 X 射线 FZP 的最外环宽度为 100 nm (对应金吸收体厚度为 1 μm , 高高宽比 10:1)^[5], 空间分辨率较软 X 射线 FZP 差, 但是由于硬 X 射线的穿透能力强于软 X 射线, 可实现三维成像, 能提供更丰富的材料内部结构信息并降低 X 射线对组织的潜在损伤^[6], 特别是近年来第三代同步辐射光源的技术成熟, 对硬 X 射线微纳聚焦技术提出了需求, 比如上海光源硬 X 射线微聚焦及应用光束线站采用基于硬 X 射线波带片进行聚焦, 北京同

步辐射装置生物和医学线站、国家同步辐射实验室的高空间分辨 X 射线成像站均基于硬 X 射线波带片进行成像.

FZP 的空间分辨率与其最外环宽有关, 理论上 FZP 的瑞利分辨率为最外环宽的 1.22 倍. 为了突破 FZP 的空间分辨率限制, 2001 年 Kipp 等人提出了一种全新衍射光学元件概念——软 X 射线光子筛 (photon sieves PS)^[7], 其原理是用一组正确排列的小孔来代替菲涅尔波带片的圆环, 从而有效地抑制高级衍射, 并使其聚焦精度优于最小小孔的直径, 并利用可见光实验表征了这个新概念的可行性. 近年来许多研究者对可见光波段 PS 的理论模型和实验表征进行了大量报道^[8-10]. 类似于集成光学光波导中电磁波的全反射使光波局限在波导及其周围有限的区域内传播的现象, 硬 X 射线光子筛的结构中真空和纳米尺度高高宽比的高原子序数金属材料之间微弱的折射率差会引导入射的硬 X 射线光波^[11], 同时由于硬 X 射线的高穿透性, 纳米尺度金属结构的厚度通常要求大于 600 nm (实际上即使这样大的厚度也无法完全吸收入射的硬 X 射线), 而入射的硬 X 射线波长远小于该厚度, 因此硬 X 射线在这些高高宽比金属结构中传输过程的波导效应必须予以考虑, 实际上, 极紫外和 X 射线衍射光学元件的波导效应已经为实验所证实^[12], 但是关于光子筛的波导

^{*} 国家重点基础研究发展计划 (批准号 2007CB935302) 和国家自然科学基金 (批准号 20676008) 资助的课题.

[†] E-mail: xiechangqing@ime.ac.cn

效应数值模型还没有见到相关报道. 本文对硬 X 射线光子筛进行了设计, 利用基于快速傅里叶的光束传播法对硬 X 射线光子筛吸收体中光波导效应进行了研究分析, 在此基础上采用角谱法计算了硬 X 射线光子筛的点扩展函数, 基于当前实际纳米加工能力, 分析了吸收体厚度对聚焦性能的影响.

2. 硬 X 射线光子筛设计

菲涅尔波带片实际上是一种特殊的变间距光栅, 圆环半径满足如下关系:

$$r_n^2 = n\lambda f + \frac{n^2 \lambda^2}{4} \quad (n = 1, 2, 3, \dots, N), \quad (1)$$

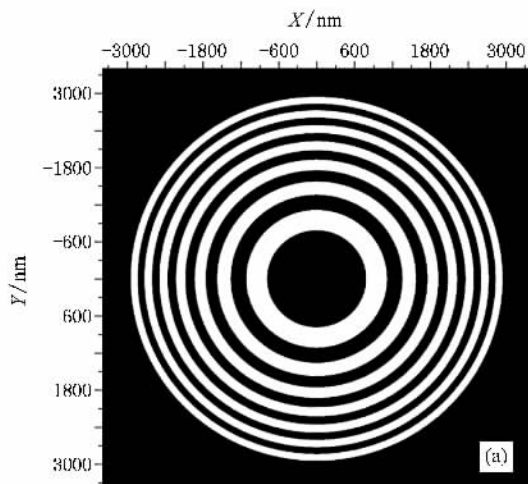
λ 为入射波长, f 为波带片焦距, r_n 为第 n 个环带的半径, (1) 式中右边第二项代表球面像差, 在硬 X 射线波段其数值远小于第一项, 可以忽略.

根据瑞利判据, X 射线波带片的分辨率 Δr_{Rayl} 和焦深 DOF 可以表示为

$$\Delta r_{\text{Rayl}} \cong 1.22 \Delta r_N, \quad (2)$$

$$\text{DOF} \cong \pm \frac{2\Delta r_N}{\lambda}. \quad (3)$$

类似于传统原理 FZP, 硬 X 射线光子筛中正确排列的小孔必须满足相干涉的条件, 也就是说, 即硬 X 射线通过各微孔中心到达焦点的距离与通过光轴到达焦点的距离之差(即光程差)为波长的整数倍, 即满足如下关系:



$$\sqrt{r_n^2 + f^2} - f = n\lambda, \quad (4)$$

r_n 为对应的波带片第 n 环带上微孔中心与光轴的距离, 另外满足(4)式前提下随机生成的微孔还需要满足不得交叉重叠的要求. 第 n 个微孔在焦点处的衍射场值 $U_n(0,0)$ 可以通过振荡方程给出^[8]:

$$U_n(0,0) = \frac{d}{w} J_1\left(\frac{\pi d}{2w}\right), \quad (5)$$

J_1 是一阶贝塞尔函数, d 是微孔直径, w 是该微孔所对应的波带片环宽. $U_n(0,0) > 0$ 表示光波通过该微孔到达焦点时满足干涉加强条件, $U_n(0,0)$ 在 $d/w \approx 1.5, 3.5, 5.5, 7.5, \dots$ 时取最大值. 本文中 $d/w = 1.5$.

在数字信号处理系统的有限脉冲响应滤波器(finite impulse response filter, FIR)设计中, 正确选择窗函数可以提高设计 FIR 滤波器的性能, 或者在满足设计要求的情况下, 减小 FIR 滤波器的阶次. 类似于 FIR 滤波器窗函数法设计思想, 光子筛的设计中通常也会引入窗函数来对径向的微孔密度进行平滑处理. 本文中硬 X 射线的能量 $E = 20 \text{ keV}$, 加工的特征线宽即微孔的最小直径为 100 nm , 焦距 $f = 10 \text{ mm}$, 图 1(a) 是对应的 FZP 设计图形, FZP 的透过率为 50% , 图 1(b) 表示引入余弦窗(cosine window)函数后光子筛的设计图形, 其中没有引入窗函数前的微孔数目是 2780 个, 引入余弦窗函数后微孔数目是 816 个, 透过率为 27.2% .

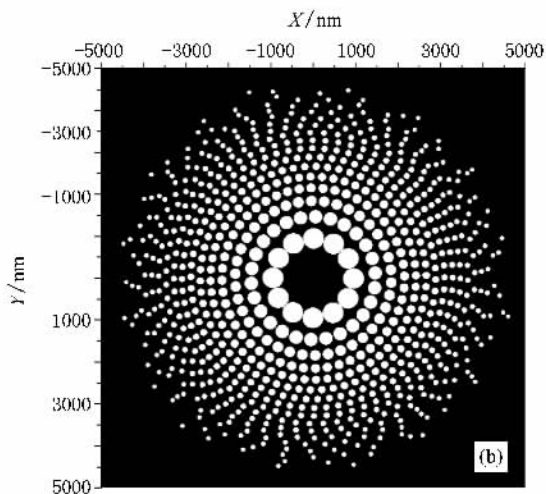


图 1 (a) 最外环宽度为 100 nm 的 FZP; (b) 引入余弦窗函数后光子筛图形

3. 光子筛高高宽比金属结构中波导效应

由于硬 X 射线波长远小于光子筛的特征尺寸,

因此标量理论完全可以适用于硬 X 射线光子筛的特性研究. 光束传播法是处理光波在介质中传播的重要手段之一, 其基本原理是在给定初始场前提下,

一步一步计算出各个传播截面上的光场,算法简单,不受材料和波导形状的限制.本文采用快速傅里叶变换光束传播法(fast fourier transform beam propagation method, FFT-BPM)^[13]来计算入射硬 X 射线在纳米尺度金属结构中的波导传输特性,硬 X 射线在纳米尺度高高宽比金属结构中的传输遵从亥姆霍兹方程

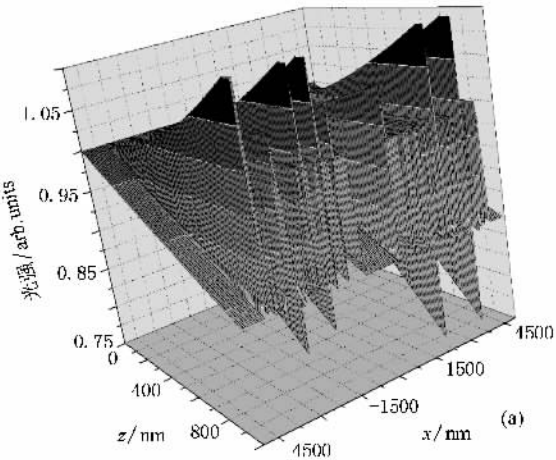
$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + k(x,y,z)^2 E = 0, \tag{6}$$

E 是光场横向分量, $k(x,y,z) = k_0 n(x,y,z)$, $k_0 = 2\pi/\lambda$ 表示自由空间的波矢, $n(x,y,z)$ 是折射率.将光场横向分量 $E(x,y,z)$ 分解为缓慢变化波包函数 $\Phi(x,y,z)$ 以及快速振荡相位项 $\exp(-i\bar{k}z)$ 两部份, $\bar{k}$ 为参考波矢,得到

$$E(x,y,z) = \Phi(x,y,z) \exp(-i\bar{k}z). \tag{7}$$

将(7)式代入(6)式,在旁轴近似下,若光波在 z 轴的 z_0 点前进 Δz 的距离,则

$$\begin{aligned} E(x,y,z_0 + \Delta z) \\ = \exp\left(-i\frac{\Delta z}{4\bar{k}}\nabla_{\perp}^2\right) \exp\left(-i\frac{k^2 - \bar{k}^2}{2\bar{k}}\Delta z\right) \end{aligned}$$



$\times \exp\left(-i\frac{\Delta z}{4\bar{k}}\nabla_{\perp}^2\right) E(x,y,z_0).$ (8)式右边第一项及第三项表示传播过程中衍射现象的产生,可由快速傅里叶变换来获取,第二项则是传输距离内因折射率变化所产生的相位改变.为了减少数值运算的误差, Δz 必须取得够小.

具体计算步骤为 将横向场离散化后,利用 FFT 将实际空间的场分布变换到频谱空间,传输 Δz 距离后,再利用 FFT 逆变换将频谱空间变换到实际空间,加入相位的影响,然后再重复前面的步骤,最终将纳米尺度金属结构中光波导场分布描述出来.

图 2(a) 表示的是余弦窗函数平滑处理后光子筛吸收体金属结构中光波导场分布,图 2(b) 表示的是硬 X 射线透过光子筛高高宽比金属结构后光场的分布,其中硬 X 射线吸收体材料选择金,厚度为 $1.0\ \mu\text{m}$,入射波为平面波.

从图 2 可以清楚看到考虑了波导效应后光子筛边界条件与基尔霍夫边界条件有很大差异,主要原因是常规的基尔霍夫边界条件忽略了硬 X 射线在纳米尺度金属边缘引起的衍射场,不能再用做硬 X 射线光子筛后的边界条件.

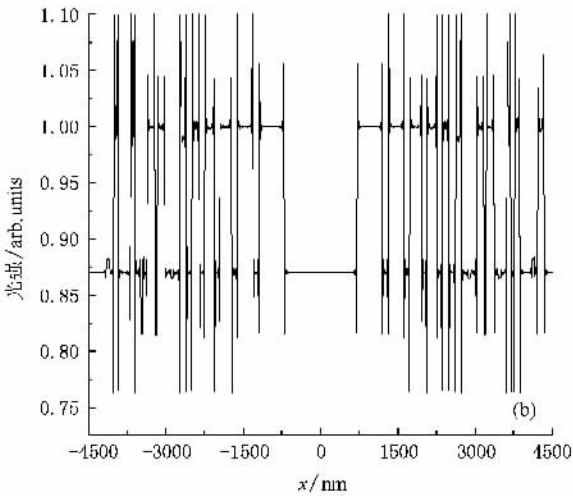


图 2 (a)光子筛的金属结构中光波导场分布;(b)光子筛金属结构后光场分布

4. 点扩展函数计算方法

当硬 X 射线透过光子筛后的光场横向分量 $E(x,y,t)$ (t 是光子筛吸收体金属结构的厚度)确定后,本文采用角谱法^[14]计算光子筛到观测点的电磁场传播.首先对 $E(x,y,t)$ 进行快速傅里叶变换,

得到经过光子筛后透射光的傅里叶变换频谱 $G_0(u,v)$, u,v 分别为 x,y 方向对应的频率.标准传递函数 $H_B(u,v)$ 在频域的表达式为

$$\begin{aligned} H_B(u,v) \\ = \begin{cases} \exp\left(i\frac{2\pi}{\lambda}z\sqrt{1-(\lambda u)^2-(\lambda v)^2}\right), & u^2 + v^2 < \frac{1}{\lambda^2}, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases} \end{aligned} \tag{9}$$

观测点光场分布的傅里叶变换频谱 $G_z(u, v)$ 可以从下式得到：

$$G_z(u, v) = G_0(u, v) H_B(u, v). \quad (10)$$

对 $G_z(u, v)$ 做傅里叶逆变换就可以得到待观测点空域的光场复分布。

5. 结果与讨论

图 3 (a) 表示的是金吸收体厚度为 $1.0\ \mu\text{m}$ 时 FZP 和采用余弦窗函数平滑处理后光子筛在焦点处的聚焦性能,图 3(b)表示的是归一化后 FZP 和光子筛的点扩展函数(采用了对数坐标).其中 FZP 的半

高宽 FWHM (full-width at half-maximum)为 $108\ \text{nm}$,对应的衍射效率为 5.6% ,而光子筛的 FWHM 为 $86\ \text{nm}$,小于其最小微孔的直径,对应的衍射效率为 2.6% ,在同样的 $100\ \text{nm}$ 特征尺寸条件下,余弦窗函数平滑处理后光子筛的空间分辨率得到提高,其原因是正确排列的小孔满足相干干涉的条件,光波通过微孔到达焦点时满足干涉加强条件,但是付出了衍射效率下降的代价.实际上,光子筛图形的透过率本省就小于 FZP 图形的透过率,导致其衍射效率必然下降.考虑了波导效应后,尽管光子筛的 FWHM 不变,但是其高级衍射效应有所降低.

在 X 射线波段,没有一种材料足够薄的时候可

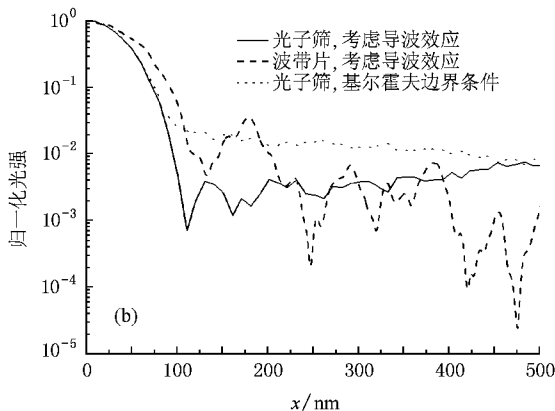
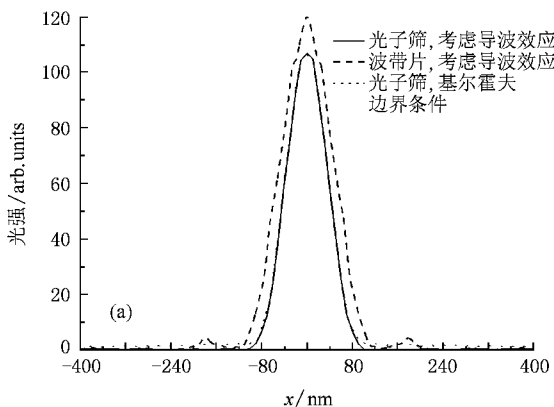


图 3 (a)FZP 和光子筛在焦点处聚焦性能 ;(b)归一化后 FZP 和光子筛的点扩展函数

以完全透过 X 射线,也没有一种材料足够厚的时候可以完全阻挡 X 射线.图 4 表示的是不同的 Au 吸收体厚度对光子筛点扩展函数的影响,尽管吸收体厚度对 FWHM 基本没有影响,但是随着吸收体厚度的增加,光子筛的高级衍射效应会得到抑制,衍射效率会增加.按照傅里叶光学理论,当吸收体 Au 的厚度 $t = \lambda/2(\text{Re}(n) - 1)$ 时(其中 $\text{Re}(n)$ 表示的是 Au 吸收体材料折射率实部),硬 X 射线光子筛表现为位相型,聚焦性能将达到最佳. $E = 20\ \text{keV}$ 时位相型硬 X 射线光子筛对应的 Au 吸收体厚度为 $4\ \mu\text{m}$,从图 4 可以看到,其聚焦性能最好,衍射效率也高达 14.1% , $t = 500\ \text{nm}, 750\ \text{nm}, 1000\ \text{nm}$ 时光子筛对应衍射效率分别为 $0.71\%, 1.49\%$ 和 2.52% ,而 $t = 500\ \text{nm}, 750\ \text{nm}, 1000\ \text{nm}, 4000\ \text{nm}$ 时同等特征尺寸 FZP 对应的衍射效率分别为 $1.5\%, 3.28\%, 5.6\%$ 和 31.3% .如上所述,当前的纳米加工水平所能加工出的 $100\ \text{nm}$ 金属结构最大厚度为 $1\ \mu\text{m}$,对应的衍射效率为 2.52% ,随着纳米尺度高高宽比金属结构加工水平的提高、X 射线光源亮度的增加和探测器灵敏

度的提高,硬 X 射线光子筛将表现出更好的

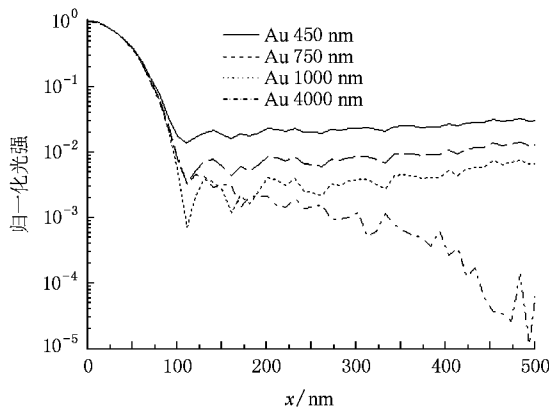


图 4 不同的 Au 吸收体厚度对硬 X 射线光子筛点扩展函数影响

6. 结 论

在硬 X 射线光子筛的高高宽比金属结构中,真

空和金属材料之间微弱的折射率差会引导入射的硬 X 射线光波,常规的基尔霍夫边界条件由于忽略了硬 X 射线在纳米尺度金属边缘引起的衍射场,不能再用做硬 X 射线光子筛的边界条件.本文采用 FFT-BPM 方法来计算入射硬 X 射线在纳米尺度金属结构中的传输特性,得到光子筛后光场的边界条件,随后基于角谱法计算光子筛到观测点的电磁场传播.

研究表明,硬 X 射线光子筛高高宽比金属结构中的波导效应进一步降低了高级衍射的产生.在相同的特征尺寸下,光子筛的空间分辨率得到了提高,同时付出了衍射效率下降的代价,但是随着纳米加工水平的提高、同步辐射光源亮度的增加和探测器灵敏度的提高,X 射线光子筛仍然是一种重要的、可供选择的 X 射线聚焦衍射光学元件.

- [1] Dong J J, Cao L F, Chen M, Xie C Q, Du H B 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3044 (in Chinese) [董建军、曹磊峰、陈 铭、谢常青、杜华冰 2008 *物理学报* **57** 3044]
- [2] Li Y T, Zhang J, Lu X, Jin Z, Pepler D A, Danson C N 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2030 (in Chinese) [李玉同、张 杰、鲁 欣、金展, Pepler D A, C. N. Danson 2005 *物理学报* **54** 2030]
- [3] Xu X D, Zhou H J, Hong Y L, Huo T L, Tao X M, Fu S J 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1043 (in Chinese) [徐向东、周洪军、洪义麟、霍同林、陶晓明、傅绍军 2000 *物理学报* **49** 1043]
- [4] Chao W, Harteneck B D, Liddle J A, Anderson E H, Attwood D T 2005 *Nature* **435** 1210
- [5] Jefimovs K, Bunk O, Pfeiffer F, Grolimund D, van der Veen J F, David C, 2007 *Microelectron Engineering* **84** 1467
- [6] Huang W X, Yuan Q X, Tian Y L, Zhu P P, Jiang X M, Wang J Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 677 (in Chinese) [黄万霞、袁清习、田玉

- 莲、朱佩平、姜晓明、王军越 2005 *物理学报* **54** 677]
- [7] Kipp L, Skibowski M, Johnson R L, Berndt R, Adelung R, Harn S, Seemann R 2001 *Nature* **414** 184
- [8] Cao Q, Jahns J 2003 *J. Opt. Soc. Am. A* **20** 1005
- [9] Zhong Gao, Luo X G, Ma J X, Fu Y Q, Du C L 2008 *Optics & Laser Technology* **40** 614
- [10] Jia J, Xie C Q 2009 *Chin. Phys. B* **18** 183
- [11] Kupka R K, Chen Y, Rousseaux F, Haghiri-Gosnet A M, Launois H 1993 *J. Vac. Sci. Technol. B* **11** 667
- [12] Ceglie N M, Hawryluk A M, Stearns D G, Kuhne M, Muller P 1988 *Optics Letter* **13** 267
- [13] Feit M D, Fleck J A, Jr 1978 *Appl. Opt.* **17** 3990
- [14] Goodman J W 2004 *Introduction to Fourier Optics* (New York: McGraw-Hill) p55

The waveguide effect of hard X-ray photon sieves^{*}

Xie Chang-Qing[†] Zhu Xiao-Li Jia Jia

(Institute of Microelectronics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

(Received 16 February 2009; revised manuscript received 5 March 2009)

Abstract

In this work, the waveguide effect inside the high high-aspect-ratio metal structure of hard X-ray photon sieves is studied based on fast fourier transform beam propagation method (FFT-BPM). After the physical boundary condition immediately downstream of hard X-ray photon sieves is determined by FFT-BPM, the angular spectrum method is used to calculate the point spread function, and the absorber thickness impact on the focusing performance is analyzed. The results show that the waveguide effect can suppress the emergence of the high order diffraction of hard X-ray photon sieves to some extent, thus improve its focusing performance. Under the same feature size conditions, the spatial resolution of hard X-ray photon sieves is better than that of Fresnel zone plates, with the drawback of lower diffraction efficiency. With the absorber thickness increasing, both the focusing performance and diffraction efficiency of photon sieves will improve, but the difficulty of the corresponding nanofabrication process will also increase.

Keywords: Fresnel zone plates, hard X-ray photon sieve, beam propagation method, angular spectrum method

PACC: 8170J, 4280B, 0760

^{*} Project supported by National Basic Research Program of China (Grant No. 2007CB935302) and the National Nature Science Foundation of China (Grant No. 60676008).

[†] E-mail: xiechangqing@ime.ac.cn