

文章编号 1004-924X(2003)01-0049-06

X 射线超反射镜设计

张 众^{1, 2}, 王占山², 王凤丽², 秦树基², 陈玲燕²

(1. 中国科学院长春光学精密机械与物理研究所, 吉林 长春 130022;
2. 同济大学 精密光学工程技术研究所, 上海 200092)

摘要: 阐述了一种新的 X 射线超反射镜的设计方法, 它是基于经验理论公式的解析设计方法和基于计算机的数值优化设计方法相结合的产物。利用前者提供比较好的初始膜系, 再利用后者对该初始膜系进行优化处理, 从而获得比较好的设计结果, 并大大减少了计算时间。讨论了实际制作出的多层膜存在的表面粗糙度及膜层材料间的相互扩散对多层膜反射性能的影响, 并给出了模拟计算的结果。依据上述方法, 在比较大的掠入射角情况下, 设计出了具有较宽反射带宽的 W/C X 射线超反射镜。

关键词: X 射线超反射镜; 梯度多层膜; 单纯形调优

中图分类号: TH703 **文献标识码:** A

1 引言

近年来, 装载在人造卫星上的 X 射线天文望远镜已经成功地在软 X 射线波段获取了 X 射线天文图像; 同时, 硬 X 射线天文望远镜也将于近期应用于天文成像领域^[1]。另外第三代同步辐射光源的出现与发展, 也促进了硬 X 射线衍射的应用, 使其在材料的微结构研究(如: 混合材料的内表面及高压条件下的材料状态)和医用成像领域的应用取得了很大的进步^[2]。历史上, 在很长的一段时间里, 天然晶体一直是 X 射线波段的光学元件。但是, 它过窄的带宽, 严重限制了出射通量, 在很多情况下是不能使用的^[3,4]。由单层金属构成的反射镜在掠入射 X 射线光学系统中得到了一定的应用。但是由于金属材料的全反射临界角限制了反射镜所能反射的 X 射线的最高能量, 例如: 金膜制成的反射镜, 对 8 keV 的 X 射线, 全反射角为 0.55°。一旦掠入射角超过了全反射临界角, X 射线的反射率就会迅速的降低。因此在实际使用中, 反射 X 射线的能量范围被限制在 10 keV 以下^[5]。如果要反射光子能量在 10 keV 以上的 X 射线, 就必须使反射

镜工作于更小的掠入射角, 这样做不仅给光学系统的制备和装调带来了很大的困难, 而且极大地影响了成像质量。为了减小光学系统的尺寸, 降低装调难度, 提高成像质量, 必须采用工作角度在全反射临界角以上, 具有较高反射系数的反射镜元件。近年来, X 射线多层膜在较大掠入射角度的条件下作为 X 射线反射元件显示了很强的竞争性。X 射线周期多层膜在比较大的掠入射角的条件下, 带宽比弯晶大 10 倍, 比平晶大 100 倍。然而在许多多层膜反射镜的应用中, 要求多层膜具有尽可能宽的带宽。例如, 在 X 射线光谱分析仪器的设计中, 可以将一块宽带多层膜和一块窄带多层膜组合使用。使用宽带多层膜还可以使聚焦的光具有合适的形状和入射角, 大大简化了实验过程^[2]。人们将中子光学领域中的超反射镜的概念拓展到了 X 射线波段, 提出了具有不同膜层厚度的非周期多层膜结构——X 射线超反射镜; 这是一种宽带多层膜反射镜, 其在膜系的不同位置具有不同的周期厚度, 可以使不同波长的 X 射线在多层膜结构的不同位置得到反射, 从而可以极大地拓宽反射镜的反射带宽。目前关于宽带多层膜反射镜的设计方法在理论上一般有两种: 一种是基于计算机的全数值计算

收稿日期: 2002-09-17; 修订日期: 2002-11-19.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(No. 60178021)

的方法^[9,10],另一种是基于经验公式的解析方法^[1,9]。全数值计算的方法对膜系设计的经验要求很少;而解析的方法恰恰相反,是根据丰富的设计经验,设计出周期按一定规律变化的非周期膜系,从而得到不同性能的超反射镜。实际上,以上两种方法都不是很好。前者需要大量的优化时间,对于周期数较多的情况,在实际中根本无法实现;而后者不仅需要设计者具有丰富的设计经验,而且所得的设计结果在性能上也无法得到理想的结果,所得到的反射光谱通常有比较大的震荡。本文将这两种方法结合起来,利用解析的方法设计出的膜系作为初始膜系,再用数值优化的方法对这个初始膜系进行优化,不仅可以提高超反射镜的光学性能,而且使优化时间得到极大的减少。

2 解析法设计初始膜系

多层膜设计的第一步,就是选择构成多层膜的材料对,根据在 X 射线波段不同材料的性质、成膜工艺、以及实验室的实际条件,许多人都提出了相似的选择材料的标准,在硬 X 射线波段, W/C 是比较常用的材料对^[6,7]。本文所选用的膜层材料就是 W 和 C。

多层膜结构反射 X 射线的基本原理是 X 射线在周期多层膜的内部界面反射,然后相干叠加来实现整体反射的。对于具有固定周期的多层膜,其峰值反射率随周期数(N)的增大而增加。但是由于材料的吸收作用,随着 N 值的增加,峰值反射率将趋向饱和(图 1)。可以将具有不同周期数的膜堆叠加起来,使不同波长的 X 射线都可以得到反射,从而达到拓宽反射带宽的目的。K. Yamashita 等人^[1]提出了一种非周期的多层膜结构设计方法。将整个膜系分成三个膜堆,分别具有不同的周期数。另外,为了进一步减小吸收作用,将最外面膜堆的周期设计为按线性减小,第二和第三个膜堆的周期是固定的。由于材料对硬 X 射线的吸收作用是随着波长的减小而减小的,而且对应于长波长的膜堆的周期厚度会比较大,吸收作用也将更为明显。所以,将膜系设计为:从入射介质开始,最外面的膜堆为 6 个膜对,周期厚度为 4.35 nm 的周期膜系,反射率峰值在 18 keV 处;第二和第三个膜堆分别为 9 和 13 个膜对,周期厚度是 3.65 nm 和 3.30 nm 的周期膜,反射率

峰值分别在 20.3 keV 和 22.3 keV 处。由图 1 可以看出,由坐标原点引出的直线与图中各条峰值反射率随膜系周期数变化的曲线相切。在切点处附近,反射率峰值与膜对数(N)之间最接近线性变化关系,可以取此处的 N 值作为各个膜堆的膜对数;其计算的结果如图 2 中的曲线 A。如果要进一步拓宽反射带宽,只需要在第三个膜堆后再加一个膜堆,即在以上三个膜堆的外部再增加了一个周期为 2.95 nm 膜对数为 15 的膜堆,反射率峰值在 25 keV 处,如图 2 中的曲线 B。由图 2 可以看出,这种梯度膜系虽然可以在掠入射角为 0.5° 的条件下,在 [16 keV, 25 keV] 的能量范围内取得大约 30% 的反射率,但是光谱曲线的震荡是很大的,这就需要进一步改善设计方法。

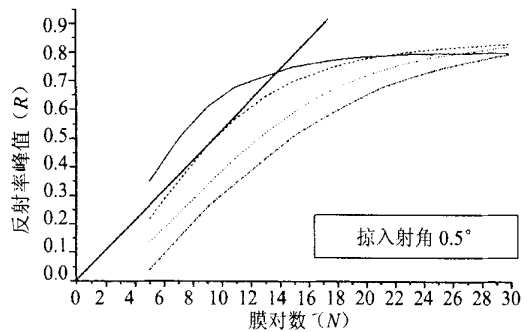


图 1 掠入射角为 0.5° 时不同周期 (d) 的 W/C 多层膜反射率统计曲线。实线对应 $d = 4.65$ nm 的膜系,虚线对应 $d = 3.65$ nm 的膜系,点曲线对应 $d = 3.30$ nm 的膜系,点划线对应 $d = 2.95$ nm 的膜系,它们对应的 X 射线的能量分别为 18.0 keV、20.3 keV、22.3 keV 和 25 keV。

Fig. 1 Calculated peak reflectivity of W/C multilayers for different period thickness (d) and a grazing incident angle of 0.5°, with solid corresponding to $d = 4.65$ nm; dash, $d = 3.65$ nm; dot, $d = 3.30$ nm; dot_dash, $d = 2.95$ nm, and representing X-ray energy of 18, 20.3, 22.3, 25 keV, respectively.

3 数值计算的优化方法

近年来,随着电子计算机的发展和普遍应用,为应用最优化数值方法进行最优设计提供了有力的工具;而由于实际中不断提出的各种要求,促使最优化数值方法获得了进一步发展,并成为可实

际运用的有力工具。数值优化的实质就是对某个能反映光学性能的评价函数的最小化。对于宽带超反射镜的设计, 使用的是比较常用的宽带平坦型评价函数^[8]:

$$F = \left(\sum_{\lambda} (R[\lambda] - R_0)^2 \right)^{1/2}, \quad (1)$$

其中: $R[\lambda]$ 为各波点处的反射率值, R_0 为目标反射率。

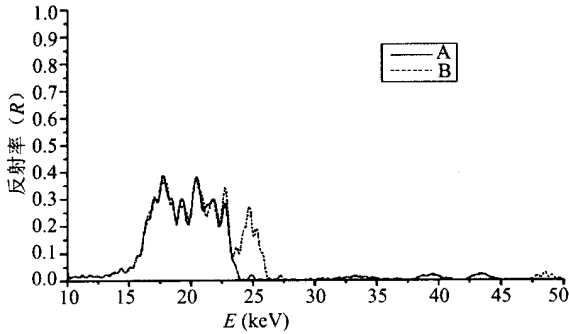


图 2 具有 3 个(实线)和 4 个(虚线)膜堆的梯度膜系在掠入射角为 0.5° 时的反射率曲线。

Fig. 2 Calculated reflectivity for 3 blocks (Curve A) and 4 blocks (Curve B) at a grazing incident angle of 0.5°

所有的膜层都是一个独立的变量, 通过对搜索问题的解决来找到一系列的膜层厚度, 使其形成的膜系具有最小的评价函数。注意到, 在搜索过程中, 变量的数目是十分巨大的, 因此优化效率问题就成为一个主要的问题。对于早期的一些求梯度的优化方法是不适用的。有人采用随机搜索的方法, 在宽角度 X 射线超反射镜的设计中得到了一些结果^[9], 但是在宽的超反射镜的设计中, 由于膜层数的增加, 这种方法在实际设计中无法得到可用结果。所使用的单纯型调优法^[8,11]是一种十分有效的数值优化方法。它在迭代过程中成功地避免了求解巨大的线性方程组的问题, 因此可以对变量维数较多的评价函数进行有效的优化, 并能大量节省时间, 同时得到比较好的结果。关于利用单纯型调优法设计宽角度 X 射线超反射镜的问题, 在作者其他的文章中有详细的介绍。但是, 在设计高能宽带 X 射线超反射镜的过程中, 由于膜层数成倍地增加, 变量的维数过大, 评价函数的峰值数目大大地增加, 仅仅依靠单纯型调优的方法很容易陷入局部极值的陷阱中, 得不到好的结果, 而且算法的收敛速度也非常慢。

将梯度膜系的设计与单纯型调优法结合起来, 利用单纯型调优法对以梯度结构为初始值的膜系进行优化, 得到了比较好的结果。

图 3 中的结果就是使用单纯型调优法, 对图 2 中的曲线 A(29 膜对)和虚线 B(44 膜对)所对应的 W/C 梯度多层膜进行优化, 并分别在 $[16, 22 \text{ keV}]$ 和 $[14, 26 \text{ keV}]$ 的能量范围内获得的 X 射线反射率曲线(各曲线的参数详见表 1), 并与具有 60 个周期, 周期厚度为 4.0 nm 的周期多层膜相比较。从中可以清楚地看出, 利用这种方法, 可以在较少膜对数(为周期膜系所用膜对数的 $50\% - 75\%$)的条件下, 获得比周期多层膜宽 4-6 倍的带宽, 当然反射率的峰值略有下降。由图 3 还可以看到, 对于周期膜系, 在 37 keV 处, 有一个很明显的二级反射峰, 而对于超反射镜, 由于膜系是非周期的结构, 所以, 没有明显的二级反射峰。

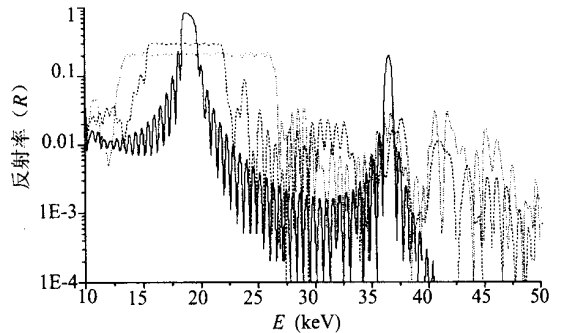


图 3 掠入射角为 0.5° 的条件下, 具有 60 个膜对的周期膜系(实线)、具有 29 个膜对(虚线)和 44 个膜对(点线)的非周期膜系的计算反射率曲线

Fig. 3 Calculated reflectivities for non-period multilayers with 60 layer pairs (solid), 29 layer pairs (dash) and 44 layer pairs (dot) at a grazing incident angle of 0.5°

4 非理想多层膜的模拟计算

图 3 所得的结果是在假设多层膜在理想状态的条件得到的, 即: 材料纯净, 膜层均匀, 膜层内同性, 界面层分明、平滑^[12,13]; 而实际制备出的多层膜结构存在许多缺陷, 特别是表(界)面粗糙度和界面混合层的存在, 使得实际测量出的多层膜反射率与理论计算值差别很大。若要准确地估计 X 射线多层膜元件的反射特性, 就必须在模拟计算中将这些因素考虑进去。

Streams^[13]详细地讨论了 X 射线在非理想多层膜中的散射情况,提出了基于界面轮廓函数对 Fresnel 反射系数进行修正的方法。当界面函数选取误差函数时,就得到了大家非常熟悉的 Debye-Waller 因子^[6, 7, 9, 14],即假设膜层界面的位置并不受粗糙度的影响,而是在第 j 个界面上的振幅反射系数被这样一个因子所减少:

$$D_j = \exp\left[-\frac{1}{2}(q\sigma)^2\right], \quad (2)$$

其中:动量传递系数 $q = \frac{4\pi}{\lambda}N \sin \theta$, N 和 θ 为第 j 个界面上膜层的复折射率和掠入射角。在上式中,假设了动量传递系数 q 在通过膜层界面时是个不变的常数,但是在实际的情况下,尤其在掠入射条件下, q 的值是由上一层材料的值 q_1 变为下一层材料的值 q_2 。用 $q_1 \times q_2$ 来代替 q^2 , 这就是 Nevot-Croce 模型。Spiller^[6]在此模型的基础上提出了更为精确的模拟因子:

$$D_j = \exp\left[-\frac{1}{2}\left[\frac{4\pi\sigma}{\lambda}\right]^2 \sin \theta_{j-1} \sin \theta_j\right], \quad (3)$$

其中: $N_0 \cos \theta_0 = N_j \cos \theta_j$ 。在这里, σ 是界面有效粗糙度的均方根值; θ_j 和 θ_{j-1} 分别为第 j 个界面的下层和上层的膜层中的掠入射角度。

图 4 中的实线是具有 29 个膜对的理想 W/C 多层膜的优化反射率曲线,虚线是相同结构的多层膜在表界面粗糙度(σ)为 0.5 nm 时的计算反射率曲线,图 4 中的点线为 $\sigma = 0.5$ nm 时,经优化后的曲线,曲线参数详见表 1。从中可以清楚地看出,增加了内表(界)面粗糙度的模拟因子以后,多层膜的反射率有了明显的降低,粗糙的表界面对 X 射线的散射作用,削弱了多层膜总体的反射率,这与理论分析是一致的。同时还可以看出,通过进一步调整膜系结构,可以部分抵消这种散射的影响,从而得到比较好的结果。

5 结 论

由以上计算结果可以看出,利用梯度膜系提

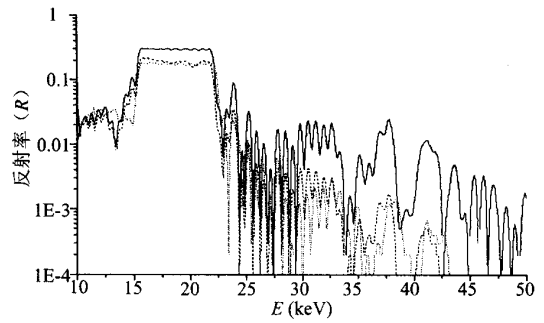


图 4 具有 29 个膜对的多层膜反射率的计算曲线,实线为理想多膜层的反射率曲线,虚线是界面粗糙度(σ)为 0.5 nm 时,相同结构的反射率曲线;点线为 $\sigma = 0.5$ nm 时,优化后的反射率曲线。

Fig. 4 Calculated reflectivity for multilayer with 29 layer pairs, with solid corresponding to reflectivity of perfect multilayer, dash reflectivity of the same multilayer with a roughness factor (σ) of 0.5 nm, and dot reflectivity of optimized multilayer with a roughness factor of 0.5 nm

表 1 图 3 和图 4 中的曲线参数

Table 1 Parameters of the curves in Fig. 3 and Fig. 4

曲线	反射率均值 (%)	误差的均方根值	表界面粗糙度(σ)
图 4 实线	29.34	0.006	0
图 4 虚线	18.80	0.0152	0.5 nm
图 4 点线	17.44	0.0043	0.5 nm
图 3 虚线	与图 4 的实线相同		
图 3 点线	20.80	0.0067	0

供好的初始值,再使用经典的局部寻优的数值优化算法进行优化,可以成功的进行 X 射线超反射镜的设计,所得结果比文献[1]中的设计结果有明显的提高,完全适合硬 X 射线波段天文望远镜的使用要求以及其他应用的需要,在超反射镜中,实际制作出的多层膜表界面粗糙度和界面扩散对超反射镜性能有很大的影响,在设计过程中必须考虑这一效应。

参考文献:

- [1] YAMASHITA K, SERLEMITSOS P J, TUELLER J, *et al*. Supermirror hard_x_ray telescope[J]. *Appl Opt*, 1998, 37(34): 8067_8073.
- [2] KOZHEVNIKOV I V, BUKREEVA I N, ZIEGLER E. Design of X_ray supermirrors[J]. *Nuclear Institutes and Methods in Physics Research*, 2001, A 460: 424_443.
- [3] JIMENEZ_GARATE M A, Hailey W W, Christensen F E. Fabrication, performance, and figure metrology of epoxy_replicated aluminum foils for hard X_ray focusing multilayer_coated segmented conical optics[J]. *Opt Eng*, 2000, 11: 2982_2994.
- [4] PROTOPOPOV V V, KALNOV V A. X_ray multilayer mirrors with a extended angular range[J]. *Optics Communications*, 1998, 158: 127_140.
- [5] YAMASHITA K, AKIYAMA K, HAGA K. *et al*. Fabrication and characterization of multilayer supermirrors for hard X_ray optics[J]. *Journal of Synchrotron Radiation*, 1998, ISSN: 0909_0495.
- [6] EBERHARD S. *Soft X_ray optics* [M]. SPIE, The International Society for optical Engineering: Bellingham, Washington USA: 1994, 108_115, 173_174.
- [7] 张俊平, 曹健林, 马月英, 等. 软 X 射线激光用多层膜反射镜的设计与性能模拟计算[J]. 光学学报 1995, 15(8): 1088_1093.
ZHANG J P, CAO J L, MA Y Y, *et al*. The design and performance simulation of multilayered mirrors for soft X_ray laser[J]. *ACTA Optica Sinica*, 1995, 15(8): 1088_1093. (in Chinese)
- [8] 唐晋发, 郑权. 应用薄膜光学[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1984.
TANG J F, ZHENG Q. *Applied thin film optics* [M]. Shanghai: Shanghai Science and Technology Publishing Company, 1984. (in Chinese)
- [9] WANG ZH SH, CAO J L, MICHETTE A G. Depth_graded multilayer X_ray optics with broad angular response[J]. *Optics Communications*, 2000, 177: 25_32.
- [10] 柯常军, 王占山, 郑咏梅, 等. 宽带平坦型软 X 射线多层反射膜的设计[J]. 光学 精密工程, 1999, 7(3): 19_22.
KE CH J, ZHANG Y M, ZHANG T Q. The design of soft X_ray broadband and flat multilayer[J]. *Optic and Precision Engineering*, 1999, 7(3): 19_22. (in Chinese)
- [11] 雷欧 S S. 工程最优化原理与应用[M]. 北京: 北京理工大学出版社, 1990. 213_219.
RAO S S. *Optimization theory and application* [M]. Beijing: Institute of Technology Publishing Company, 1990. 213_219. (in Chinese)
- [12] PETFORD LONG A K, STEARNS M B, CHANG C H, *et al*. High resolution electron microscopy study of x_ray multilayer structures[J]. *J Appl Phys*, 1987, 61(8): 1422_1428.
- [13] 金春水, 王占山, 曹健林, 等. 软 X 射线投影刻原理装置的设计[J]. 光学 精密工程, 2000, 8(1): 66_70.
JIN CH SH, WANG ZH SH, CAO J L, *et al*. Development of elementary arrangement for soft X_ray projection lithography[J]. *Optics and Precision Engineering*, 2000, 8(1): 66_70. (in Chinese)
- [14] STREARNS D G. The scattering of X_rays from nonideal multilayer structures[J]. *J Appl Phys*, 1989, 65(2): 13_18.
- [15] 柯常军, 王占山, 张铁强, 等. 软 X 射线多层膜的一种新型设计方法[J]. 光学 精密工程, 1997, 7(4): 17_20.
KE CH J, WANG ZH SH, ZHANG T Q, *et al*. The design of multilayered mirrors as reflector for soft X_ray random number[J]. *Optic and Precision Engineering*, 1999, 7(4): 17_20. (in Chinese)

Design of X_{ray} supermirrors

ZHANG Zhong^{1,2}, WANG Zhan_shan², WANG Feng_li², QIN Shu_ji², CHEN Ling_yan²

(1. *Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics,
Chinese Academy of Sciences, Changchun 130022, China;*

2. *Department of Physics, Institute of Precision Optical Engineering,
Tongji University, Shanghai 200092, China)*

Abstract: A new method of designing X_{ray} supermirrors based semi_empirical formulas and optimization by computer has been proposed to produced an optimized better initial multilayer in dramatically reduced computational time. The saturation effect of interfacial roughness of multilayers actually produced in X_{ray} supermirrors on performance of multilayers is further discussed with simulated results. W/ C X_{ray} supermirrors with wider special band of reflection have been designed using the proposed method for a greater grazing incident angle.

Key words: X_{ray} supermirror; multilayer; simplex optimization

作者简介: 张 众(1977-), 男, 辽宁省朝阳市人, 现在中国科学院长春光学精密机械与物理研究所攻读硕士学位, 主要从事短波光学方面的研究。E_{mail}: zhangzhongcc@163.net Tel: 021- 65984652, 021- 65984321

征订启事

向您推荐《液晶与显示》期刊

《液晶与显示》是中国最早的液晶学科期刊, 也是中国惟一的液晶学科和显示领域中综合性学术期刊。它由中国科学院长春光学精密机械与物理研究所和中国光学光电子行业协会液晶专业分会主办, 科学出版社出版。

《液晶与显示》以研究报告、研究快报、综合评述、信息与动态和产品信息等栏目集中报道国内外液晶学科和显示领域中最新理论研究、科研成果和创新技术, 及时反映国内外本学科领域及产业信息动态。本刊是英国《科学文摘》(SA)、美国《化学文摘》(CA)、俄罗斯《文摘杂志》(PЖ)、美国《剑桥科学文摘》(CSA) 和“中国科学引文数据库”、“中国科技论文统计源期刊”等国内外著名检索刊物和文献数据库来源期刊。

《液晶与显示》以创新性、综合性、实用性为办刊特色, 其内容丰富, 信息量大, 涵盖面广, 可读性强。既是启迪科技人员开拓创新思路的参考期刊, 又是从事液晶和显示技术研究的广大科技人员、大专院校师生及相关领域的科技工作者进行学术交流的良好园地, 也是图书、情报等部门必不可少的信息来源。《液晶与显示》热忱欢迎广大作者、读者广为利用, 踊跃投稿, 将您的科技创新、产品信息、企业风貌通过这一窗口展示出来。同时, 竭诚欢迎社会各界洽谈广告业务、合作组织技术交流与信息发布活动。

《液晶与显示》为双月刊, A4 开本, 80 页, 国内定价 10.00 元, 国内外公开发行。国际标准刊号: ISSN 1007- 2780, 国内统一刊号: CN 22- 1259/04, 国际刊名代码(CODEN): YYXIFY。广告经营许可证号: 200004100137。国内邮发代号: 12- 203; 国外发行代号: 4868Q。同时, 《液晶与显示》编辑部将竭诚为广大读者服务, 随时办理订阅。

欢迎订阅 欢迎投稿 欢迎刊登产品信息

地 址: 吉林省长春市人民大街 140 号	中国科学院长春光学精密机械与物理研究所
《液晶与显示》编辑部	邮 编: 130022
电 话: (0431) 5261594	传 真: (0431) 5682346
E mail: yjxs@ciomp.ac.cn	网 址: www.ciom.ac.cn