

文章编号 1004-924X(2005)06-0643-07

振幅矢量叠加法分析 X 射线波带片 加工误差对效率的影响

肖 凯, 刘 颖, 付绍军

(中国科学技术大学 国家同步辐射实验室, 安徽 合肥 230026)

摘要:使用振幅矢量叠加法,通过叠加 X 射线波带片每一对环带对焦点的贡献,计算和分析了随机环带位置误差、宽度误差、扩散和粗糙度对波带片的效率的影响。用 Strehl 比来量化和衡量与理想波带片有偏差的波带片的性能,对两个波带片实例分别用 Strehl 极限确定了能容许的 4 种误差的最大值。计算了 Ni 软 X 射线波带片的随机环带位置误差及宽度误差对主焦点效率的影响;计算了 SiO_2/Ni 硬 X 射线溅射切片波带片的两种材料的相互扩散和粗糙度对衍射效率的影响。结果表明:4 种误差越大,主焦点效率越小,对 Ni 软 X 射线波带片,随机环带位置误差均方根和宽度误差均方根小于最外环宽度的 20% 左右时,对 SiO_2/Ni 硬 X 射线溅射切片波带片,扩散区宽度和粗糙度均方根分别小于最外环宽度的 90% 和 60% 左右时,得到的 Strehl 比在 Strehl 极限之上。

关键词:X 射线波带片;环带位置误差;环带宽度误差;扩散;粗糙度

中图分类号:O436.1 **文献标识码:**A

Analysis of the influence of fabrication errors on the efficiency of X-ray zone plates by summing up the wavelets

XIAO Kai, LIU Ying, FU Shao-jun

(National Synchrotron Radiation Laboratory,
University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: The influence of random zone position error, width error, interdiffusion and roughness on the efficiency of X-ray zone plates (ZP) was analyzed by summing up the wavelets of every pair of rings. Strehl ratio was used to quantify and evaluate the performance of the zone plates deviating from perfect ones. The tolerances of the 4 errors mentioned above were gained by using Strehl limit in two examples. The influence of random zone position and width error on the efficiencies of a Ni soft X-ray zone plate was calculated, and the influence of interdiffusion and roughness on the efficiencies of a SiO_2/Ni hard X-ray sputtered sliced zone plate was analyzed. It is showed that the efficiency of the main focus decrease with increasing the four errors. The root-mean-square of random zone position and width error of the first zone plate need to be less than about 20% of the outmost zone width to generate a Strehl ratio higher than Strehl limit; the width of random interdiffusion region and the root-mean-square roughness of the second zone plate need to be less than about 90% and 60% of the

outmost zone width to generate a Strehl ratio higher than Strehl limit respectively.

Key words: X-ray zone plate; zone position error; zone width error; interdiffusion; roughness

1 引言

X 射线波带片是利用光波的衍射实现 X 射线聚焦、色散和成像的重要元件^[1-2]。实际制作出的波带片与理想波带片的各种偏差都会导致波带片性能的下降。电子束直写是产生软 X 射线微波带片图形的常见方法^[3]。在用电子束直写软 X 射线波带片图形时,波带片的每个环带都会有随机位置和宽度误差,实际制作中要求宽度误差小于位置误差。硬 X 射线溅射切片波带片,是由在旋转的细丝上交替沉积对 X 射线透明和不透明的两种材料制成的,这种方法的工艺特点决定了两种材料之间的相互扩散和随着交替沉积传递的沿径向的粗糙度两种误差。定量地评价这些误差对 X 射线波带片性能的影响是 X 射线光学的一个重要的问题。

波带片的效率可以用振幅矢量叠加法^[4],标量衍射理论^[5-7],局域线性光栅模型^[8-10],有限时域差分^[11]等方法来分析。标量衍射理论通过直接对波带片透过率函数作衍射积分或通过叠加波带片所有圆环的衍射场来分析波带片。最近 Q. Cao 对透明圆环的瑞利-索莫菲衍射积分的近似解析表达式的推导^[6]已使对非理想的波带片的分析更加方便。局域线性光栅模型法是通过把波带片划分成许多局域,每个局域都近似为同一周期的一维线性光栅,然后对每个局域线性光栅用严格电磁场方法如耦合波方法(CWM)进行分析,最后在各焦点处叠加所有局域线性光栅的贡献,得到强度后换算为效率。G. Schneider 用耦合波方法分析了扩散和粗糙度对某个单一周期处的局域线性光栅衍射效率的影响^[8],但由于局域线性光栅模型建立在把波带近似划分成许多局域线性光栅的基础上,所以不能用来分析各个环带随机位置和宽度误差对效率的影响。有限时域差分法分析波带片可以得到全场的信息^[11],但是编程复杂,单个波带片个体计算时间消耗非常大,甚至需要计算机并行计算。振幅矢量叠加法通过叠加光波经过波带片后的复振幅,可以得到各个焦点处的效率,实验发现这种方法可以方便有效地用来

分析以上 4 种误差对波带片效率的影响。

本文以一个工作在 2.4 nm 的软 X 射线 Ni 波带片为例,用振幅矢量叠加法分析了随机环带位置和宽度误差对衍射效率的影响;计算了扩散和粗糙度对一个工作在 0.3 nm 的 SiO₂/Ni 硬 X 射线波带片效率的影响。对这 4 种误差分别通过作出的误差均方根-效率图,用 Strehl 极限确定了最大均方根误差值。为了证明振幅矢量叠加法对第二个例子的适用性,与用耦合波方法计算的占空比为 1:1 的波带片结果进行了比较。

2 误差分析方法

X 射线波段物质的折射率为:

$$n = 1 - \delta - \beta i, \quad (1)$$

δ 和 β 都是很小的常数。

波带片总环带对数设为 N ,以 c 为振幅的平面波垂直入射,经过每个环带到到达第 m 级焦点的复振幅可以写为^[4]:

$$A_{m,j} = \frac{c}{2\pi} \int_0^{2\pi} T_j(\theta) e^{i(m\theta - \varphi_j(\theta))} d\theta, \quad (2)$$

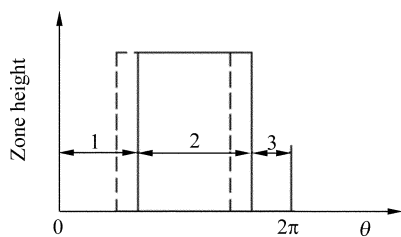
$$T_j(\theta) = e^{-2\pi\delta_j(\theta)t/\lambda}, \quad (3)$$

$$\varphi_j(\theta) = k_0 t \delta_j(\theta). \quad (4)$$

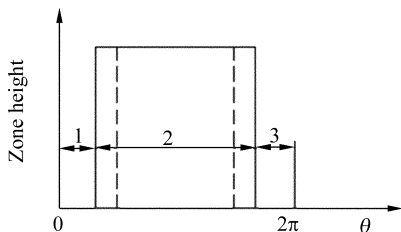
其中 θ 为从环带对中不同位置到焦点的光线的位置, $j=1, 2, 3, \dots, N$ 。归一化后第 m 级焦点的效率为:

$$\eta_m = \frac{\left| \sum_{j=1}^N A_{m,j} \right|^2}{Nc^2}, \quad (5)$$

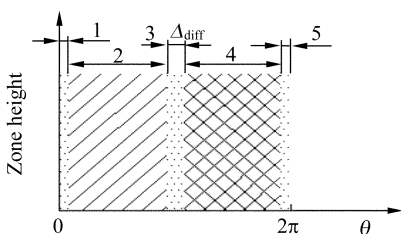
其中 λ 为入射光波长, t 为波带片的厚度, k_0 为波数,本文分析的主焦点 m 为 1。对于理想波带片,只需要分为一个透光和一个完全不透光或部分透光的两个区域,这两个区域里 δ 和 β 为常数,不随 θ 变化而变化。将两个区域分别积分后相加,每个区域的式(2)都可以写成简单的解析形式。对于一个理想波带片,只需要分析一对环带即可。但对于与理想波带片有偏差的波带片,需根据制作工艺误差的不同,相应地分成若干不同区域(如图 1 所示),同时,必须按式(5)对所有的环带对的贡献进行叠加。



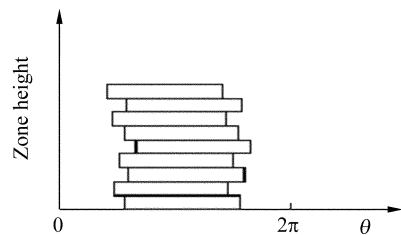
(a) 环带位置误差
(a) Zone position error



(b) 环带宽度误差
(b) Zone width error



(c) 扩散
(c) Interdiffusion



(d) 粗糙度
(d) Roughness

图 1 4 种误差在波带片一个周期内的示意图

Fig. 1 Schematic picture of four kinds of errors in one period of a ZP

图 1 是 4 种误差在波带片一个周期内的示意图。如图 1(a)(b) 所示, 对于有随机环带位置误差, 宽度误差的波带片, 需要将每对环带分为 3 个区域分别处理后求和, 每个区域的折射率为常

数, 图中理想环带为虚线, 实际环带为实线。从图 1(c) 可以看出, 对于有材料扩散的硬 X 射线波带片, 需要将每对环带分为 5 个区域分别处理后求和, 扩散区宽度为 Δ_{diff} 。而对于有粗糙度的硬 X 射线波带片如图 1(d), 需要划分为更多的区域来逼近积分求和。

用 Strehl 比 (Strehl Ratio)^[7,12] 来衡量一个有加工误差的光学元件的性能, 对于波带片, 它是有加工误差的波带片的焦点强度与理想波带片焦点强度的比值。通常认为有误差的光学元件的 Strehl 比大于 Strehl 极限 (Strehl Limit) 就可以接受, Strehl 极限的值为 0.8。

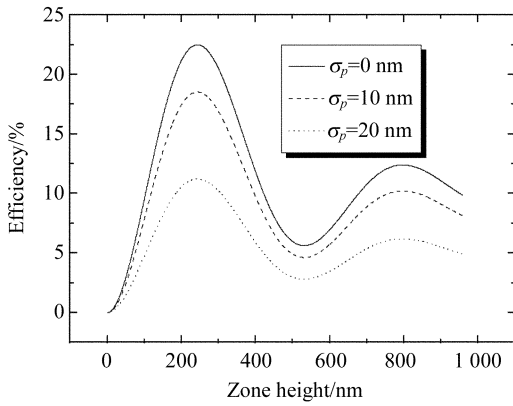
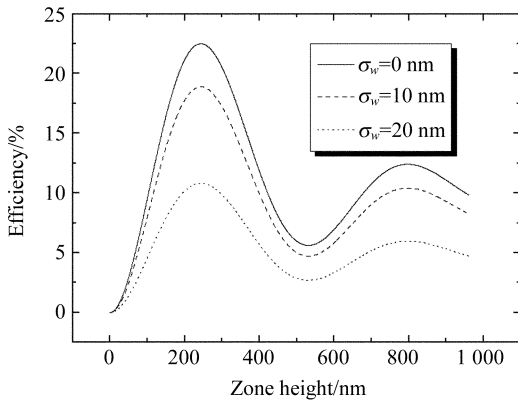
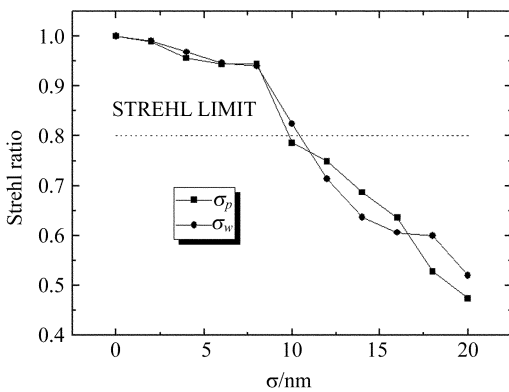
2.1 环带位置误差和宽度误差对效率影响

以一个工作在软 X 射线波段的 Ni 波带片为例 (称为波带片 I), 波长为 2.4 nm 单位振幅的平面波垂直入射。波带片主焦距 $f=800 \mu\text{m}$, 最内环宽度 $r_1=1385 \text{ nm}$, 共 100 对环带, 最外环周期 98 nm (线宽为 49 nm), r_1 以内的中心为挡住 0 级光的吸收材料, 环带位置误差和宽度误差分别为均方根为 σ_p 和 σ_w 的正态分布。按照上面所描述的方法, 可以得到图 2, (a)、(b) 分别为在不同 σ_p 和 σ_w 的影响下, 主焦点效率随波带片厚度变化的曲线。图 2(c) 为有随机环带位置、宽度误差时, Strehl 比随标准差大小变化曲线, 波带片厚度为 243 nm。

从图 2(a)(b) 可以看出, 对于波带片 I, 随着两种误差 σ_p 和 σ_w 的变大, 主焦点效率越来越低。由图 2(c) 可以看出, σ_p 和 σ_w 在 10 nm 以下时, 对应 Strehl 比在 Strehl 极限之上, 可以认为这种误差引入的效率下降在能够接受的范围之内, 此时的 σ_p 和 σ_w 对应约为最外环宽度的 20%。从图 2(c) 还可以看出当 σ_p 和 σ_w 较小时, 主焦点处效率下降的速度较慢, σ_p 和 σ_w 较大时, 效率会迅速下降。

2.2 材料扩散和粗糙度对效率影响

以 SiO_2/Ni 溅射切片波带片 II 为例, 波带片 II 工作波段为 0.3 nm, 主焦距 $f=5000 \mu\text{m}$, 最内环宽度 $r_1=1225 \text{ nm}$, 共 100 对环带, 最外环周期 86.6 nm, 最外环线宽 43.3 nm, r_1 以内的中心为不透明的金属丝。假设扩散区域折射率按线性分

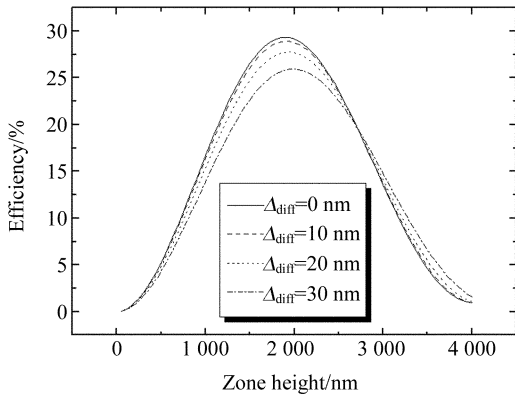
(a)不同 σ_p 下的波带片厚度-效率图(a) Efficiency as a function of zone height under different σ_p (b)不同 σ_w 下的波带片厚度-效率图(b) Efficiency as a function of zone height under different σ_w (c) σ_p 和 σ_w 对 Strehl 比的影响(c) Influence of σ_p and σ_w on Strehl ratio图 2 σ_p 和 σ_w 对效率的影响Fig. 2 Influence of σ_p and σ_w on efficiency

布^[3], 扩散区宽度 Δ_{diff} , 如图 1(c) 所示。假设粗糙度从最内层不变地传递到最外层, 每层的粗糙度分布为均方根为 σ_r 的正态分布, 计算中每层高度取为 10 nm。

图 3 为扩散和随机粗糙度对主焦点效率的影响。从图 3(a)、(b) 中可以看出, 和 σ_p 和 σ_w 两种误差相似, 扩散和粗糙度会导致最大主焦点效率下降, 不同的是如图 3(d)、(f) 所示, 要达到最大效率需要的波带片高度也在随着扩散和随机粗糙度的变大而变大, 这和 G. Schneider 用耦合波方法分析硬 X 射线波带片扩散和粗糙度的结果很相似, 但要注意这里分析的是整个波带片, 而 G. Schneider 分析的仅仅是波带片某个周期处的局域线性光栅^[7]。

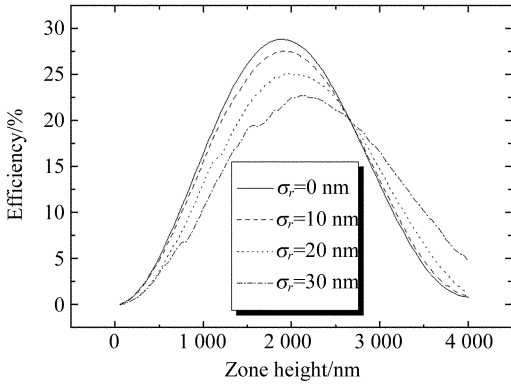
对波带片 II, 从图 3(c) 可以看出, 在 Δ_{diff} 小于 40 nm 时, Strehl 比在 Strehl 极限以上, 对应约为最外环宽度的 90% 左右。从图 3(e) 可以确定, 当 σ_r 大约在 25 nm 以下时, Strehl 比在 Strehl 极限以上, 对应约为最外环宽度的 60%。从图 3(c) 还可以看出在 Δ_{diff} 较小 (0~10 nm) 时, Strehl 比变小速度较慢, 随 Δ_{diff} 的增大, Strehl 比变小的速度逐渐升高, 但对于粗糙度, 这种趋势并不明显。

对于占空比 1 : 1 的 SiO_2/Ni 波带片, 以 0.3 nm 的 X 射线垂直入射, 用耦合波方法和振幅矢量叠加法计算的最大效率及其对应的波带片厚度随波带片周期变化情况如图 4(a)、(b) 所示, 当周期大于 70 nm 时, 虽然波带片图形高宽比已经达到了 40:1, 但振幅矢量叠加法和耦合波方法得到的结果最大效率相差 $< 1\%$, 最大效率对应的波带片厚度相差 $< 2\%$, 区别很小, 证明用振幅矢量叠加法来分析 SiO_2/Ni 波带片周期为 70 nm 以上的区域是可行的。但当波带片周期变得越来越小时, 两种方法得出的最大效率和最大效率对应的波带片厚度相差越来越大, 可以认为振幅矢量叠加法已经失效, 必须用电磁场方法 (如 CWM) 分析。



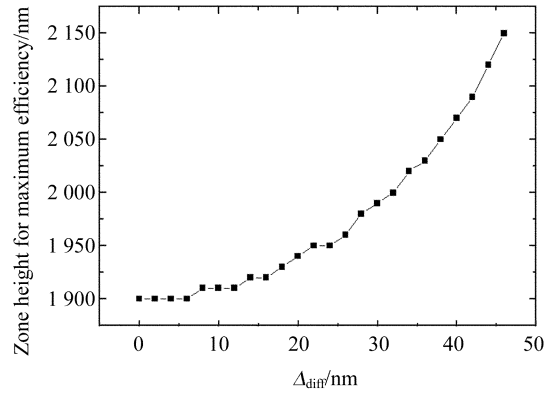
(a)不同 Δ_{diff} 下的波带片厚度-效率图

(a) Efficiency as a function of zone height under different Δ_{diff}



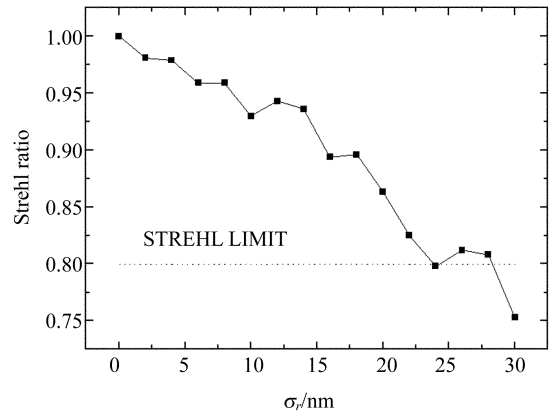
(b)不同 σ_r 下的波带片厚度-效率图

(b) Efficiency as a function of zone height under different σ_r



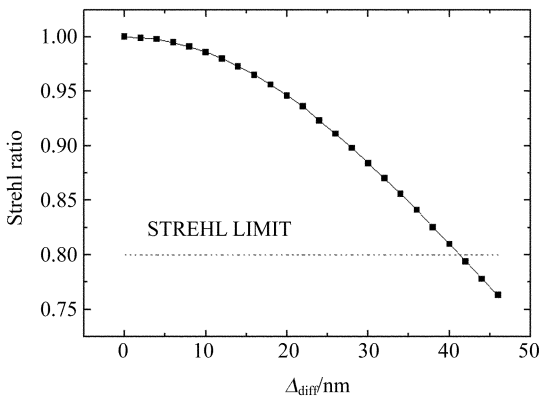
(d)不同 Δ_{diff} 下最大效率对应的厚度

(d) Zone height for maximum efficiency as a function of Δ_{diff}



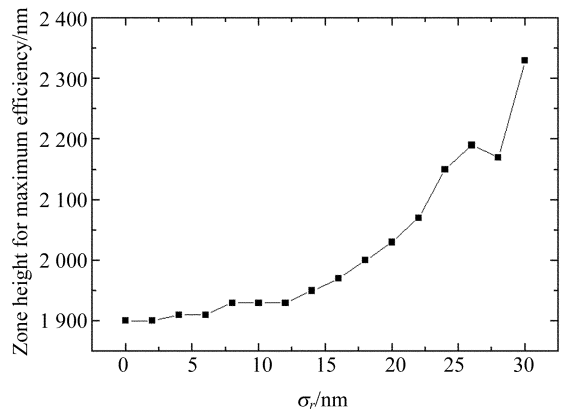
(e) σ_r 对 Strehl 比的影响

(e) Influence of σ_r on Strehl ratio



(c) Δ_{diff} 对 Strehl 比的影响

(c) Influence of Δ_{diff} on Strehl ratio

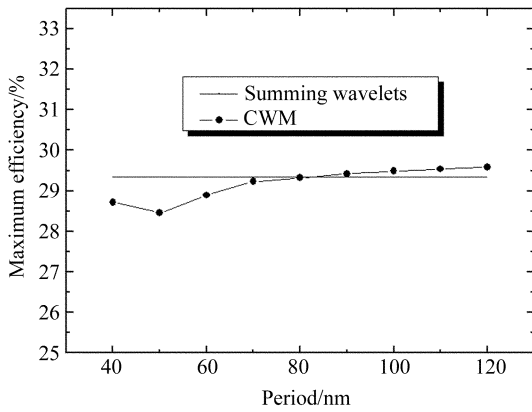


(f)最大效率对应的厚度

(f) Zone height for maximum efficiency as a function of σ_r

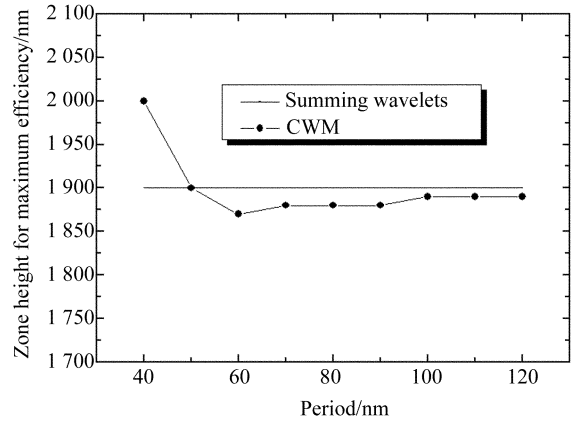
图 3 Δ_{diff} 和 σ_r 对效率的影响

Fig. 3 Influence of Δ_{diff} and σ_r on efficiency



(a)不同周期下 1:1 波带片的最大效率

(a) Maximum efficiency of a 1:1 zone plate as a function of period



(b)不同周期下 1:1 波带片的最大效率对应的厚度

(b) Zone height for maximum efficiency of a 1:1 zone plate as a function of period

图 4 耦合波方法和振幅矢量叠加法计算占宽比 1:1 波带片的结果比较

Fig. 4 Comparison of calculation of a 1:1 zone plate by CWM and summing up wavelets

3 结 论

用振幅矢量叠加法计算和分析了随机环带位置误差、宽度误差、扩散和粗糙度对 X 射线波带片主焦点效率的影响。计算表明,这 4 种误差都会导致波带片主焦点效率下降,总体来说主焦点效率有当前面 3 种误差较小时下降较慢,误差较大时下降较快的特点,但对粗糙度来说没有

这种明显的变化;扩散和粗糙度不仅导致主焦点效率下降,还会使得达到最大效率所需的波带片厚度增加。

由于这些误差都会导致主焦点效率下降,控制和定量分析以上各种误差对确保制作出能达到设计要求的波带片是十分重要的。振幅矢量叠加法可以有效地模拟这 4 种误差对效率和分辨率的影响,并由绘出的误差(均方根)-效率图确定能承受的最大误差值。

参考文献:

- [1] SCHNEIDER G. X-ray microscopes: methods and perspectives[J]. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2003,376:558-561.
- [2] 乐致纯,王占山,马月英. X 射线成像光学的新进展: Bragg-Fresnel 多层膜元件[J]. *光学 精密工程*, 1996,4(2):1-6.
LE Z C, WANG Z S, MA Y Y. A new opportunity at X-Ray optics; Bragg-Fresnel multilayer elements[J]. *Optics and Precision Engineering*, 1996, 4(2):1-6. (in Chinese)
- [3] SCHMAHL G, RUDOLPH D, SCHNEIDER G, et al. Diffractive optics for X-ray imaging[J]. *Microelectronic Engineering*, 1996,32: 351-367.
- [4] KIRZ J. Phase zone plate for X-rays and the extreme UV[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1974, 64:301-309.
- [5] KEIGO I. 工程光学[M]. 重庆:西南师范大学出版社,1991:83-85.
KEIGO I. *Engineering optics*[M]. Chongqing: The Press of Southwest China Normal University. 1991:83-85. (in Chinese)
- [6] CAO Q, JAHNS J. Comprehensive focusing analysis of various Fresnel zone plates[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2004,21(4):561-571.
- [7] SIMPSON M J, MICHETTE A G. The effects of manufacturing inaccuracies on the imaging properties of Fresnel zone plates[J]. *Optica Acta*, 1983,30:1455-1462.

- [8] SCHNEIDER G. Influence of roughness and interdiffusion in zone plate structures on the diffraction efficiency described by coupled wave theory[J]. *Applied Physics Letters*, 1998,73:599-601.
- [9] SHENG Y L, FENG D, LAROCHELLE S. Analysis and synthesis of circular diffractive lens with local linear grating model and rigorous coupled-wave theory[J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 1997,14:1562-1568.
- [10] MASER J, SCHMAHL G. Coupled wave description of the diffraction by zone plates with high aspect ratios[J]. *Optics Communications*, 1992,89:355-362.
- [11] MIROTZNIK M S, PRATHER D W, MAIT J N, *et al.* Three-dimensional analysis of subwavelength diffractive optical elements with the finite-difference time-domain method[J]. *Applied Optics*, 2000,39 (17):2871-2880.
- [12] WELFORD W T. *Aberrations of the symmetrical optical system*[M]. New York: Academic Press, 1974.

作者简介:肖 凯(1979—),男,重庆巴县人,在读博士研究生,主要研究方向为衍射光学和微细加工技术。