

О численном моделировании трековых мембран, используемых в качестве коллиматоров рентгеновского излучения

© А.В. Митрофанов, Р.М. Феценко

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,
119991 Москва, Россия
e-mail: rusl@sci.lebedev.ru

Поступило в Редакцию 25 марта 2023 г.

В окончательной редакции 25 марта 2023 г.

Принято к публикации 25 марта 2023 г.

Представлены результаты численного моделирования распределения амплитуды поля мягкого рентгеновского излучения в сквозных цилиндрических порах микронных размеров в полимерных трековых мембранах в диапазоне длин волн 13.5–30.4 nm. Вычисления проведены путем решения 3D-параболического волнового уравнения методом конечных разностей с точным прозрачным граничным условием. Рассчитаны зависимости коэффициента пропускания рентгеновского излучения через пору как функции угла падения излучения, а также диаметра поры. Для мембран с определенными толщинами и диаметрами пор результаты расчетов угловых характеристик пропускания сравниваются с известными по литературе результатами экспериментальных измерений. Показано, что согласие расчетов с экспериментальными измерениями может быть обеспечено введением переходного слоя на внутренней поверхности стенок пор, учитывающего конечную шероховатость этой поверхности.

Ключевые слова: рентгеновская оптика, солнечная астрономия, фильтры, параболическое уравнение.

Введение

Полимерные трековые мембраны со сквозными порами микронных или субмикронных размеров [1,2] либо микроструктурированные неоднородные тонкопленочные объекты на их основе активно используются в качестве элементов оптики мягкого рентгеновского и вакуумного ультрафиолетового диапазона (длины волн от 1 до 100 nm) [3–7]. В частности, они могут выполнять роль дифракционных фильтров солнечных рентгеновских радиометров [3], фильтров в изображающей оптике мягкого рентгеновского диапазона, высокопрочных опорных подложек для тонкопленочных рентгеновских фильтров, миниатюрных радиаторов для сброса тепла в вакууме, коллиматоров и т.д. [4–7]. Основная функция таких фильтров — это защита детектора излучения от интенсивной прямой и боковой фоновой засветки, как правило, от длинноволнового излучения изучаемого объекта, например, Солнца или от аппаратных бликов в ультрафиолетовом, видимом и инфракрасном диапазонах спектра. Однако известно, что оптические характеристики трековых мембран сильно зависят от угла падения излучения на образец, что делает необходимым использование сложных методов расчета их характеристик.

Целью настоящей работы является численное моделирование прохождения мягкого рентгеновского излучения через цилиндрические микропоры в полимерных пленках и сравнение результатов расчетов с измеренными угловыми характеристиками пропускания образцов трековых мембран в мягкой рентгеновской области спектра на некоторых из рабочих длин волн рентгеновского солнечного телескопа [7]. Следует отметить, что кол-

лимирующие свойства трековых мембран из полиэтилентерефталата (ПЭТФ) в ультрафиолетовом диапазоне 100–200 nm рассматривались ранее в работах [8,9].

Диапазон длин волн мягкого рентгеновского излучения, который рассматривается в настоящей работе, перекрывает рабочие спектральные линии аппаратуры солнечных телескопов, предназначенных для исследований корональной плазмы в линиях Fe IX–Fe XI и линии He II 30.4 nm [7].

1. Численное моделирование цилиндрического волновода

Прохождение мягкого рентгеновского излучения с длинами волн 13.5, 17.06 и 30.4 nm через цилиндрическую сквозную пору в мембране из ПЭТФ изучалось с использованием трехмерного параболического волнового уравнения вида

$$2ik \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - k^2(\varepsilon(x, y) - 1)u, \quad (1)$$

где u — амплитуда поля, x, y, z — декартовы координаты, $\varepsilon(x, y) = n^2 = 1 - 2\delta + 2i\beta$ — комплексная диэлектрическая проницаемость ПЭТФ, $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число, λ — длина волны, n — показатель преломления. Электрическое поле волны при этом может быть выражено как $E = e^{-i\omega t + ikz} u$. Оптические константы ПЭТФ δ и β взяты из работы [10].

Методы расчета, использованные в настоящей работе, являются дальнейшим развитием результатов работы [11], в которой для моделирования прохождения

излучения через цилиндрические поры при нормальном падении рентгеновского излучения на пленку применялось 2D-параболическое уравнение. Переход к 3D-параболическому уравнению (1) позволяет описать как прохождение через цилиндрические поры излучения, падающего под ненулевым углом к нормали к поверхности мембраны, так и прохождение излучения через цилиндрически несимметричные поры. Также как и в [11], параболическое уравнение (1) решалось с использованием безусловно стабильной конечно-разностной схемы Кранка–Николсона, но уже в прямоугольной вычислительной области. В качестве граничного условия при этом использовалось так называемое точное прозрачное граничное условие для прямоугольной вычислительной области [9,12]. Для ускорения вычислений использовался метод расщепления двумерного оператора Лапласа в правой части уравнения (1) с последующим использованием 1D-конечно-разностных схем. Все вычисления проводились с помощью специально созданных для этой цели программных кодов в среде Matlab.

Для моделирования распространения излучения через собственно пору выбиралась прямоугольная вычислительная область размером на 20% большим, чем диаметр поры. Например, при диаметре поры 1500 nm этот размер был 1800×1800 nm. При этом шаги по поперечным координатам (x, y), отсчитываемым от оси поры, и продольной координате z были во всех случаях равны 4 и 10 nm соответственно. Образец с порой освещался плоской волной, падающей под углом θ в плоскости (y, z). Коэффициент прохождения T через пору рассчитывался как отношение полного потока излучения, прошедшего через всю квадратную вычислительную область на последнем шаге моделирования, к потоку излучения, падающему на входное отверстие поры.

Для улучшения соответствия с экспериментальными данными границы стенок поры с вакуумом считались не резкими, а имеющими некоторое размытие, описываемое следующей функцией:

$$\varepsilon(r) = \frac{\varepsilon_1}{2} \mu \left(2 - \operatorname{erfc} \left(\left(\frac{d^2}{4} - r^2 \right) \frac{1}{Dd} \right) \right) + \frac{\varepsilon_1}{2} (1 - \mu) \left(1 + \theta \left(\frac{d^2}{4} - r^2 \right) \right), \quad (2)$$

которая представляет собой сумму ступеньки (с весовой долей $0 < \mu < 1$) и размытого слоя с толщиной перехода d , где функция ошибок выражается как

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt,$$

а ε_1 — это диэлектрическая проницаемость твердого ПЭТФ. Такое представление поведения диэлектрической проницаемости вблизи стенки поры позволяет, в частности, феноменологически описать влияние шероховатости поверхности стенок на коэффициент прохождения

излучения через пору. Выбор конкретных значений h был сделан с помощью простого перебора различных значений толщины размытия. Надо заметить, что влияние переходных слоев на характеристики волновода рассматривалось в работе [13].

После прохождения поры дальнейшее распространение излучения в свободном пространстве моделировалось с помощью конечно-разностной схемы для 3D-параболического уравнения (1), в котором $\varepsilon = 1$. Размер вычислительной области при этом брался в четыре раза больше диаметра поры. Поперечный шаг был 12 nm, а продольный — 96 nm.

Рассчитанные квадраты амплитуды поля в трех ортогональных плоскостях при прохождении излучения с длиной волны 30.4 nm через пору с диаметром $D = 1500$ nm и длиной $L = 8600$ nm, при угле падения $\theta = 0.06$ rad и толщине переходного слоя $d = 42$ nm, параметре $\mu = 1$ в (2) показаны на рис. 1, *a-c*. Частичное каналирование и фокусировка излучения в пору, а также отражение от стенок и интерференция падающей и отраженных волн особенно заметны на рис. 1, *a*. На рис. 1, *b* видна сложная структура поля в горизонтальной плоскости. Распределение излучения на выходе из поры, показанное на рис. 1, *c*, имеет сложную ассиметричную структуру. Рис. 1, *d* показывает квадрат амплитуды поля в свободном пространстве после выхода из поры, изображенной на рис. 1, *a-c*.

2. Исследование прохождения через пору в зависимости от различных параметров

Рассчитанные для длин волн 17.06 и 30.4 nm и экспериментально измеренные (для тех же длин волн плюс для сравнения для длины волны 58 nm) коэффициенты прохождения T через пору показаны на рис. 2 как функции угла падения θ . Также приводятся результаты расчета по формуле

$$T = \frac{1}{\pi} \left[2 \sin^{-1} \sqrt{1 - \left(\frac{L}{D} \tan \theta \right)^2} - \frac{2L}{D} |\tan \theta| \sqrt{1 - \left(\frac{L}{D} \tan \theta \right)^2} \right], \quad (3)$$

описывающей прохождение излучения через пору с неотражающими стенками в геометрическом приближении. Экспериментальные графики на рис. 2 были нормированы на 1 при $\theta = 0$.

Из рис. 2 видно, что согласно расчетам, пора с идеальными стенками должна обладать значительным пропусканием излучения при больших углах падения вплоть до критических углов для соответствующих длин волн. Измеренные же значения коэффициентов пропускания трековых мембран хорошо описываются простой геометрической формулой (3). Также видно, что на длине волн 17.06 nm наблюдается хорошее соответствие между

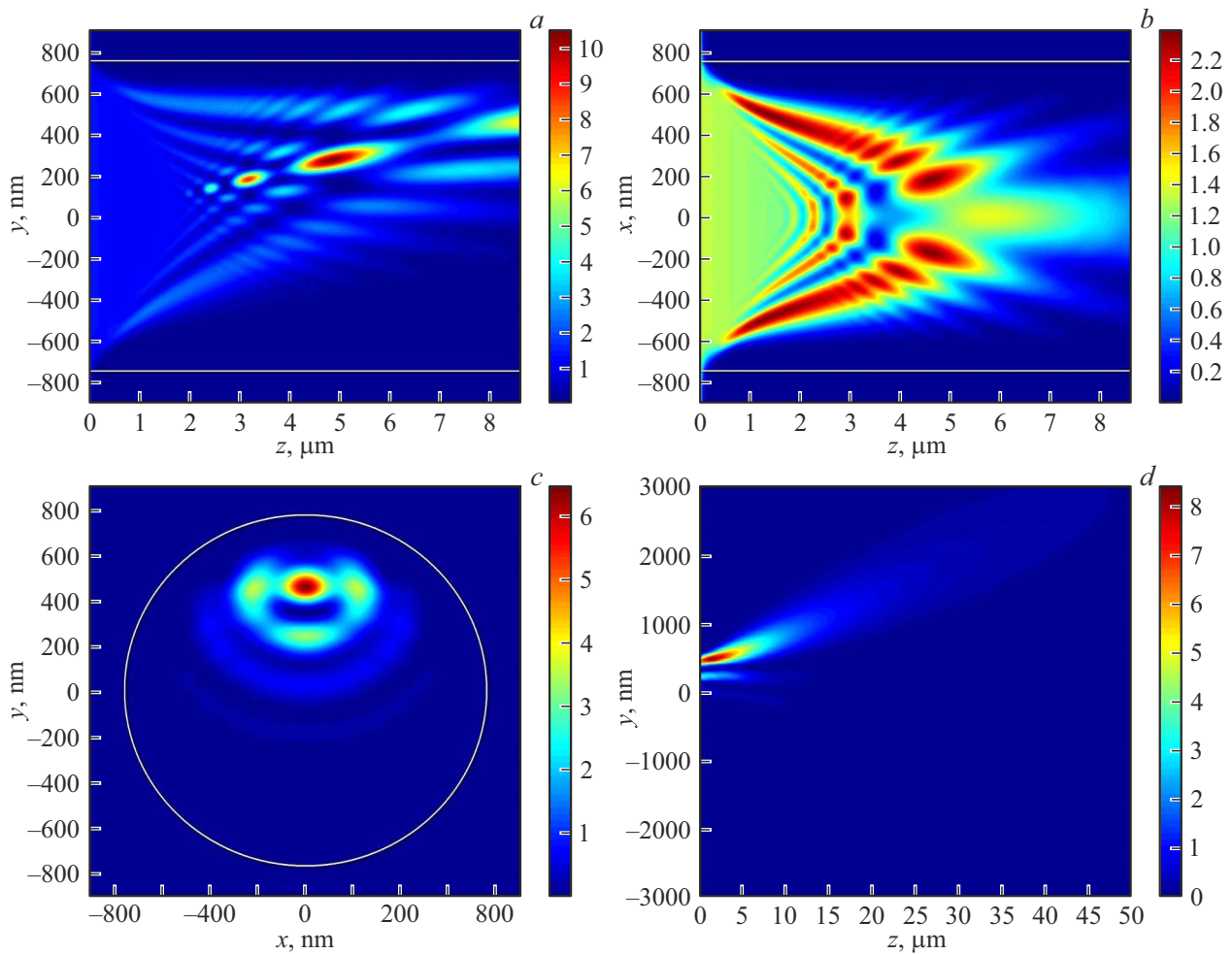


Рис. 1. Результаты моделирования распространения рентгеновского излучения с длиной волны 30.4 nm в поре со сглаженными (функцией (2) при $\mu = 1$) стенками и угле падения 0.06 rad. Показаны распределения квадрата модуля амплитуды поля $|u|^2$ в линейном масштабе в трех ортогональных плоскостях (*a-c*), а также в свободном пространстве в вертикальной плоскости (*d*). Цветовая шкала показана справа от рисунков. Белые горизонтальные линии — это границы стенок поры диаметром 1500 nm.

численными расчетами и измерениями, если добавить в модель размытие диэлектрической проницаемости на внутренней поверхности поры, равное по толщине $d = 42$ nm ($\mu = 1$ в формуле (2)). Для длины волны 30.4 nm та же толщина размытия приводит к несколько заниженному значению коэффициента прохождения, и лучшее соответствие измерениям обеспечивает модель с $d = 30$ nm. Что же касается модели с половинным ступенчатым слоем ($\mu = 1/2$ в формуле (2)), то она не приводит к улучшению соответствия с измерениями. Такое поведение рассчитанных коэффициентов отражения может объясняться ограничениями выбранных моделей переходного слоя либо неточными значениями диэлектрической проницаемости на длине волны 30.4 nm.

Далее на рис. 3 приведена зависимость пропускания поры от ее радиуса ($D/2$) для трех длин волн и модели переходного слоя, использованной для расчетов на рис. 2 ($d = 42$ nm и $\mu = 1$). Видно, что при $D/2 < 100$ nm пропускание практически равно нулю, при возрастании

радиуса быстро возрастает по закону характерному для малых пор, а затем постепенно приближается к насыщению.

3. Моделирование отражения от плоской границы

Для прояснения влияния переходного слоя на распространение излучения в поре был проведен расчет коэффициента отражения излучения от плоской границы с переходным слоем, описываемым формулой (2), и без него. Для этого численно решалось одномерное волновое уравнение

$$E''_{zz} + k^2(\varepsilon(z) - \cos^2 \theta)E = 0 \quad (4)$$

для электрического поля волны. Решение осуществлялось сведением (4) к уравнению Риккати с последующим численным интегрированием конечно-разностным методом.

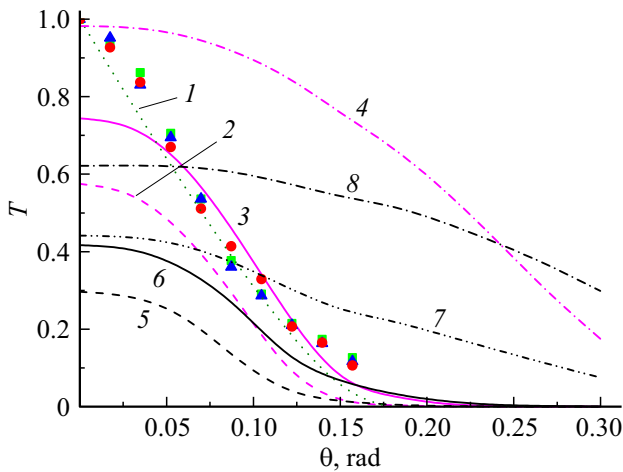


Рис. 2. Рассчитанные и измеренные [6] коэффициенты прохождения через пору в ПЭТФ пленке как функции угла падения излучения для разных длин волн. Символами показаны измерения для длин волн, λ , nm: квадраты — 17.06, треугольники — 58.5, круги — 30.4. Линии соответствуют расчетам по разным моделям с разными параметрами: 1 — формула (3); 2 — $\lambda = 17.06$ nm, $d = 61$ nm; 3 — $\lambda = 17.06$ nm, $d = 42$ nm; 4 — $\lambda = 17.06$ nm, $d = 0$ nm; 5 — $\lambda = 30.4$ nm, $d = 61$ nm; 6 — $\lambda = 30.4$ nm, $d = 42$ nm; 7 — $\lambda = 30.4$ nm, $d = 42$ ($\mu = 1/2$) nm; 8 — $\lambda = 30.4$ nm, $d = 0$ nm (см. формулу (2)).

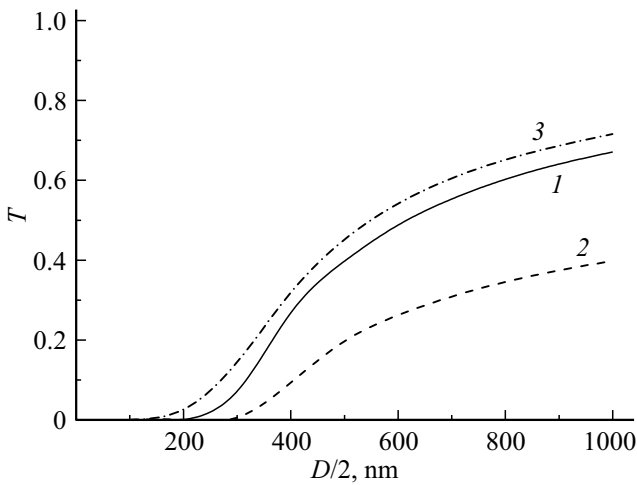


Рис. 3. Рассчитанный коэффициент прохождения через пору в пленке ПЭТФ как функция радиуса поры для длин волн, λ , nm: 1 — 17.06; 2 — 30.4; 3 — 13.31; $d = 42$ nm, $\mu = 1$ (см. формулу (2)).

Результаты расчетов для длины волны 30.4 nm показаны на рис. 4, откуда видно, что коэффициент отражения заметно, но довольно равномерно снижается при введении переходного слоя различной толщины и с разной долей ступенчатого перехода (параметр μ в (2)). Именно такое снижение и приводит к резкому падению пропускания пор при больших углах падения излучения на пленку.

В заключении на рис. 5 показано сравнение коэффициентов отражения от плоских поверхностей, рассчитанных по уравнению (4) и с помощью простой модели шероховатой поверхности на основе фактора Дебая–Уоллера

$$dw = \exp\left(-\left(\frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}\right)^2 \sigma^2\right) \quad (5)$$

со среднеквадратичной шероховатостью σ . Видно, что модель настоящей работы с толщиной переходного

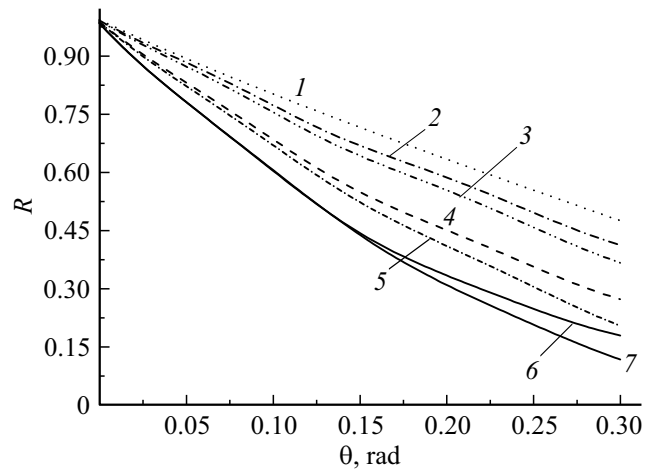


Рис. 4. Коэффициенты отражения от плоских сплошных пленок ПЭТФ на длине волны 30.4 nm как функции угла скольжения для различных модельных параметров переходного слоя в соответствии с формулой (2), а также для френелевского отражения от резкой границы: 1 — френелевский коэффициент, 2 — $d = 10$ nm, $\mu = 1$; 3 — $d = 10$ nm, $\mu = 0.5$; 4 — $d = 21$ nm, $\mu = 1$; 5 — $d = 21$ nm, $\mu = 0.5$; 6 — $d = 30$ nm, $\mu = 1$; 7 — $d = 30$ nm, $\mu = 0.5$.

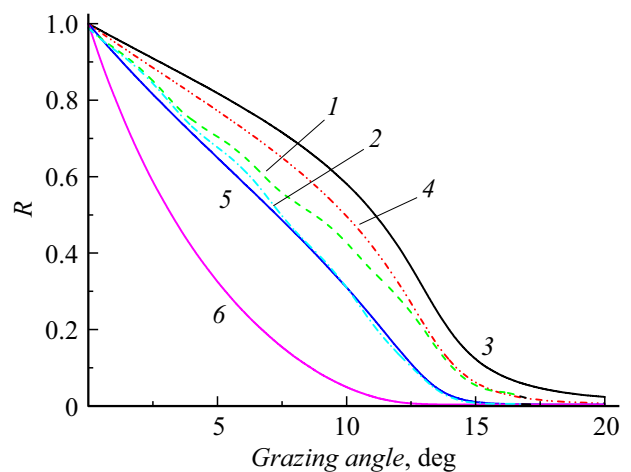


Рис. 5. Коэффициенты отражения от плоских сплошных пленок ПЭТФ на длине волны 13.5 nm как функции угла скольжения для различных модельных параметров переходного слоя в соответствии с формулой (2) (1 — $\mu = 0.5$, $d = 42$ nm; 2 — $\mu = 1$, $d = 42$ nm), а также для дэбаевской модели коэффициента отражения (5) (3 — $\sigma = 0$ nm; 4 — $\sigma = 5$ nm; 5 — $\sigma = 10$ nm; 6 — $\sigma = 20$ nm).

го слоя $d = 42 \text{ nm}$ соответствует модели поверхности $\sigma = 10 \text{ nm}$.

Заключение

В настоящей работе выполнено численное моделирование прохождения мягкого рентгеновского излучения через цилиндрические поры в ПЭТФ-пленке с использованием 3D параболического уравнения, точного прозрачного граничного условия и метода конечно-разностных схем. Рассчитаны зависимости коэффициента пропускания от угла падения излучения, а также от диаметра поры с учетом конечной величины шероховатости внутренней поверхности поры. Выявлено совпадение результатов расчетов пропускания с измерениями при специально подобранной толщине переходного слоя на длине волны 17.06 nm . Расчетами коэффициента отражения от плоской поверхности показано, что это связано со значительным падением коэффициента отражения мягкого рентгеновского излучения от стенки поры при использованных толщинах переходного слоя.

Полученные результаты позволяют надеяться, что решение 3D параболического уравнения с помощью конечно-разностных схем может найти полезные применения для расчетов характеристик тонкопленочных коллиматоров рентгеновского излучения, изготовленных на основе трековых мембран со сквозными порами и разными особенностями микрорельефа стенок пор, включая полимерные образцы из поликарбонатных и полиимидных трековых мембран, имеющих, как известно, поры с гладкими стенками.

Благодарности

За полезные обсуждения авторы благодарны П.Ю. Апелю, В.А. Бушуеву и А.В. Попову.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Г.Н. Флеров, В.С. Барашенков. УФН, **114**(2), 351 (1974) [G.N. Flerov, V.S. Barashenkov. Sov. Phys. Usp. **17**(5), 783–793 (1974). DOI: 10.1070/PU1975v017n05ABEH004371]
- [2] П.Ю. Апел, С.Н. Дмитриев. В кн. *Мембраны и мембранные технологии*, под ред. А.Б. Ярославцева (Научный мир, М., 2013), с. 117. [P.Yu. Apel, S.N. Dmitriev. Track In: *Membranes and membrane technology*, ed. by A.B. Yaroslavtsev (Science World, M., 2013), p. 117–160. (in Russian)]
- [3] M. Dominique, A.V. Mitrofanov, J.-F. Hochedez, P.Yu. Apel, U. Schühle, F.A. Pudonin, O.L. Orelovich, S.Yu. Zuev, D. Bolsée, C. Hermans, A. BenMoussa. Appl. Opt., **48**(5), 834 (2009). DOI: 10.1364/AO.48.000834.
- [4] А.В. Митрофанов. Квант. электрон., **48**(2), 105 (2018) [A.V. Mitrofanov. Quant. Electron., **48**(2), 105–110 (2018). DOI: 10.1070/QEL16540]
- [5] A.V. Mitrofanov, P.Yu. Apel. Nucl. Instrum. Meth. B, **245**, 332 (2006). DOI: 10.1070/QEL16540
- [6] А.В. Митрофанов, П.Ю. Апел. Изв. РАН. Сер. физ., **73**(1), 61 (2009). [A.V. Mitrofanov, P.Y. Apel. Bull. Russ. Acad. Sci. Phys., **73**(1), 57 (2009). DOI: 10.3103/S106287380901016X]
- [7] *Солнечно-земная физика: Результаты экспериментов на спутнике КОРОНАС-Ф*, под ред. В.Д. Кузнецова (Физматлит, М., 2009), с. 73. [Solar-Terrestrial Physics: Results of the Experiments of Koronas-F Satellite, ed. by V.D. Kuznetsov (Physmatlit, M., 2009), p. 73 (in Russian)]
- [8] А.В. Митрофанов. ПТЭ, **4**, 159 (1984). [A.V. Mitrofanov. Instrum. Experm. Tech., **27**(4), 966 (1984).]
- [9] А.В. Митрофанов, Р.М. Фещенко. Краткие сообщения по физике Физического института им. П.Н. Лебедева РАН, **49**(6), 29 (2022). [A.V. Mitrofanov, R.M. Feshchenko. Bull. Lebedev Phys. Inst., **49**(6), 169–173 (2022). DOI: 10.3103/S1068335622060057]
- [10] X-Ray Interactions with Matter [Электронный ресурс] Электрон. дан. Center for X-Ray Optics. Lawrence Berkeley National Laboratory, 2010 Режим доступа: www.cxro.lbl.gov/optical_constants, свободный.
- [11] А.В. Митрофанов, А.В. Попов, Д.В. Прокопович. Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии, **12**(2), 173 (2020). [A.V. Mitrofanov, A.V. Popov, D.V. Prokopovich. Radioelectronics. Nanosystems. Information Technologies, **12**(2), 173 (2020). DOI: 10.17725/rensit.2020.12.173 (in Russian)]
- [12] R.M. Feshchenko, A.V. Popov. Phys. Rev. E, **104**(2), 025306 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevE.104.025306
- [13] В.А. Бушуев, О.Д. Рощупкина. Изв. РАН. Сер. физ. **71**(1), 64 (2007). [V.A. Bushuev, O.D. Roshchupkina. Bull. Russ. Acad. Sci. Phys., **71**(1), 59 (2007). DOI: 10.3103/S1062873807010157]