На правах рукописи

Колесников Алексей Олегович

Разработка и исследование оптических элементов и спектральных приборов на их основе для вакуумной ультрафиолетовой области спектра

Специальность 1.3.6 – оптика

Диссертация на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент Рагозин Евгений Николаевич

Научный консультант: кандидат физико-математических наук Вишняков Евгений Александрович

Москва – 2021 г.

Оглавление	<u>,</u>
------------	----------

Введение	3
Глава 1. Решение "обратной" задачи интерференционной литографии для	
изготовления VLS-решеток	22
1.1 Аналитическое обращение "прямой" задачи – начальное приближение	25
1.2 Поиск точного решения – численная трассировка лучей и оптимизация	28
1.3 Пример решения "обратной" задачи – сферическая VLS-решетка для	
спектрографа скользящего падения с плоским полем	32
1.4 Основные результаты главы 1	34
Глава 2. Спектрограф скользящего падения с плоским полем для мягкого	
рентгеновского диапазона	
2.1 Фокусирующие свойства сферических VLS-решеток	
2.2 Расчет оптической схемы спектрографа с плоским полем и	
коэффициентов VLS-решеток	
2.3 Результаты расчета оптической схемы спектрографа	
2.4 Испытание прибора в эксперименте	
2.5 Основные результаты главы 2	
Глава 3. Широкополосный изображающий спектрограф нормального падения для	
вакуумной ультрафиолетовой области спектра	
3.1 Сферическая решетка в схеме нормального падения	
3.2 Способы компенсации астигматизма в широком спектральном	
диапазоне и достижимые при этом изображающие характеристики	
3.3 Примеры оптических схем и сравнение их характеристик	79
3.4 Основные результаты главы 3	
Глава 4. Расчет и применение многослойных апериодических Мо/Ве-зеркал	
в области длин волн $\lambda > 111$ Å	
4.1 Оптимизация многослойных зеркал нормального падения на	
максимальное равномерное отражение в широком диапазоне длин волн	
4.2 Применение широкополосного зеркала в схеме изображающего	
дифракционного спектрографа с пропускающей решеткой	106
4.3 Основные результаты главы 4	114
Заключение	115
Список цитируемой литературы	118
Приложение 1. Метод измерения частоты штрихов решетки и оценки глубины	
профиля штриха по дифракции излучения Не-Ne лазера	126

Введение

Актуальность темы

Вакуумная ультрафиолетовая (ВУФ) область спектра лежит в диапазоне длин волн короче 2000 Å и включает в себя Шумановский ВУФ ($\lambda < 2000$ Å), далекий ВУФ ($\lambda < 1000$ Å) и мягкий рентген ($\lambda < 300$ Å) [1]. В этом диапазоне находятся спектры большого количества лабораторных и астрофизических источников излучения, таких как лазерная плазма [2], солнечная атмосфера [3], электрические разряды, а также высокие гармоники лазерного излучения [4 – 8]. Поэтому данный диапазон востребован в задачах астрономии, диагностики плазмы, нелинейной оптики.

Для исследования источника излучения часто необходимо построить его спектральное изображение. В некоторых случаях необходимы высокие как спектральное, так и пространственное разрешения, например при исследовании генерации высоких гармоник в струе гелия под действием мультитераваттного фемтосекундного лазера [8] и отражения излучения лазера от релятивистской плазменной волны – релятивистское "летящее зеркало" [9]. Однако, большинство материалов (в том числе и воздух) для излучения вакуумного диапазона не являются прозрачными, что вынуждает прибегать к работе с вакуумными камерами и отказаться от использования преломляющей фокусирующей оптики. Поэтому для построения изображения необходимо пользоваться отражательной (вогнутые зеркала) и дифракционной фокусирующей оптикой. В мягком рентгеновском диапазоне (длины волн короче 300 Å) большинство материалов обладает низкими коэффициентами отражения при нормальном падении, из-за чего приходиться прибегать к скользящему падению, что приводит к уменьшению приемного телесного угла, либо пользоваться многослойными отражающими покрытиями. Многослойные покрытия при нормальном падении могут обладать высоким коэффициентом отражения (~70%), но узкой шириной спектра отражения, либо широким спектром отражения (до октавы), но коэффициентом отражения на уровне, не превышающем 15%. Отсюда следует, что чем меньше в схеме прибора оптических элементов, тем меньшими потерями полезного сигнала эта схема обладает. Поэтому в вакуумном диапазоне рационально и выгодно совмещать фокусирующие свойства вогнутого зеркала и дисперсию дифракционной решетки в одном оптическом элементе.

Впервые такой элемент был создан Г. Роуландом в 1882 г. [10] еще до открытия В. Шуманом вакуумного диапазона [11] – сферическая отражательная дифракционная решетка. Сферическая решетка обладает следующим свойством – если на окружность, диаметр которой равен радиусу сферы, и которая проходит через центр апертуры решетки и центр сферы, поместить точечный источник, то спектр источника будет отображен на этой же окружности. Окружность получила название круга Роуланда, а схема, основанная на размещении щели и детектора на нем – схемой Роуланда. Схема Роуланда была проще, компактнее и дешевле по сравнению с призменными схемами того времени и обладала при этом большей разрешающей способностью. Первое применение сферической дифракционной решетки в ВУФ связано с Т. Лайманом [12]. Благодаря отсутствию пропускающей оптики в спектрографе Т. Лайман продвинулся до ~ 900 Å и в 1914 г. открыл коротковолновую серию атома водорода, которая была названа в его честь [13]. С тех пор схема Роуланда часто применялась в спектроскопии вакуумного диапазона вплоть до недавнего времени [14 – 22].

Однако геометрооптические свойства многих изготовленных в конце XIX века решеток отличались от идеальных – расположение фокуса могло не совпадать с кругом Роуланда. Этот вопрос был исследован М. Корню. Он пришел к выводу, что у таких решеток шаг штриха монотонно изменялся по апертуре. В своей статье 1893 г. [23] он показал, что это приводит к изменению кривизны волнового фронта дифрагированных пучков, а значит – к изменению формы поверхности, на которую фокусируется излучение. Также он продемонстрировал, что плоская решетка с монотонно меняющимся шагом в ряде случаев способна фокусировать дифрагированный свет. Но переменный шаг в те времена рассматривался как нежелательный артефакт при изготовлении решеток, и в течение столетия усилия изготовителей были направлены на поддержание эквидистантности штрихов.

Схема Роуланда обладает астигматизмом – изображение любой точки входной щели будет отображаться в виде отрезка конечной длины, что ограничивает пространственное разрешение. Например, в схеме нормального падения с классической решеткой метрового радиуса и частотой штрихов 600 мм⁻¹ астигматическая разность составляет 10 - 20 мм на длине волны ~ 1000 Å. При высоте решетки 5 см это дает астигматическое размытие 0.5 - 1 мм. Однако в схемах нормального падения при малых углах дифракции от нормали астигматизм можно в значительной степени скомпенсировать за счет правильного подбора расстояния между источником и входной щелью. Сиркс в 1894 г. проделал следующий эксперимент [24]: он провел к кругу Роуланда касательную, проходящую через центр кривизны решетки, и вдоль этой касательной между источником и входной щелью (расположенной на круге Роуланда) натянул тонкую проволочку. Вблизи точки касания (возле угла дифракции 0° от нормали) на спектральных линиях он увидел теневое изображение этой проволочки с резкими границами. Эту касательной будет отображена решеткой на эту же касательную в виде тонкого горизонтального отрезка независимо от длины волны и порядка дифракции. Поместив на

4

касательную источник, а на круг Роуланда – щель, можно вблизи точки касания получить спектр источника с пространственным разрешением.

В 1970 г. произошло знаменательное событие – первое целенаправленное изготовление сферической решетки с переменным шагом и ее применение для компенсации астигматизма в схеме нормального падения. Связано оно с работой Герасимова и др. [25]. В схеме, предложенной Герасимовым для видимого диапазона, одновременно совместились идеи Роуланда (горизонтальная фокусировка за счет формы поверхности), Сиркса (вертикальная фокусировка за счет формы поверхности), Сиркса (вертикальная фокусировка за счет формы поверхности) и Корню (фокусировка за счет переменного шага). Спектральная фокальная кривая не совпадала с кругом Роуланда и пересекала касательную к нему в двух точках. В одной из таких точек располагалась входная щель, а в окрестности второй наблюдался спектр с пространственным разрешением.

Параллельно работы над технологией изготовления решеток с переменным шагом и их применением в спектральных приборах вел Т. Харада. В 1980 г. он сообщил о создании программируемого гравировального станка, способного нарезать плоские и вогнутые решетки в широком диапазоне параметров [26]. В этой же работе [2] он впервые рассчитал спектрограф скользящего падения с плоским полем. Этот прибор обладал по сравнению со схемой Роуланда следующим преимуществом – спектр фокусировался на плоскости, и дифрагированный свет падал на эту плоскость под небольшим углом к ее нормали, благодаря чему этот прибор оказался востребованным в мягкой рентгеновской области спектра при работе с современным матричным ПЗС-детектором. В 1983 г. прибор был изготовлен и испытан при регистрации спектров лазерной плазмы [27], после чего он получил широкое распространение в мире и сейчас называется спектрографом Харады. В 1998 г. Т. Харада усовершенствовал схему Герасимова изображающего спектрографа нормального падения – теперь входная щель располагалась на построении Сиркса, не попадая в одну из двух стигматических точек (то есть точек пересечения построения Сиркса с модифицированной переменным шагом решетки спектральной фокальной кривой), таким образом, позволяя использовать всю область между ними для детектирования [28], что расширяет рабочий спектральный диапазон. Прибор на основе такой схемы рассматривался в качестве кандидата для японского спутника Solar-В/Hinode. Схема была рассчитана для работы в диапазоне 250 – 290 Å и по сравнению со стигматической схемой на основе тороидальной решетки она обладала лучшими изображающими характеристиками. Однако из-за технологических трудностей изготовления решетки с переменным шагом и многослойным отражающим покрытием предпочтение было отдано схеме с тороидальной решеткой.

5

В настоящее время решетки с переменным шагом являются основой большого количества спектральных приборов для ВУФ и мягкой рентгеновской областей спектра. В англоязычной литературе они получили название "varied line-space gratings" или, сокращенно, – VLS-решетки. В частности, плоские VLS-решетки используются в качестве главного элемента монохроматора на синхротронных измерительных каналах (схема Хеттрика-Андервуда [29, 30] или схемы с более сложной кинематикой [31, 32]). Три плоские решетки также применялись в качестве ключевых элементов стигматического спектрометра космической обсерватории внесолнечных объектов Extreme Ultraviolet Explorer (EUVE) [33].

Вогнутые VLS-решетки применяются в схемах спектрографа скользящего падения с плоским полем. Относительно недавно спектрограф Харады использовался при регистрации спектров высоких гармоник в релятивистской лазерной плазме гелия, генерируемых под действием излучения мультитераваттного фемтосекундного лазера [8]. Перед входной щелью прибора было размещено тороидальное зеркало скользящего падения, которое фокусировало излучение источника в горизонтальном направлении на входную щель, а в вертикальном - на детектор. Для оценки углового распределения интенсивности гармоник в лаборатории Резерфорда-Эплтона использовался бесщелевой спектрограф Харады, в котором излучение под тремя различными углами перехватывалось тремя скрещенными по отношению к решетке зеркалами, имеющими форму эллиптических цилиндров и располагающимися перед вогнутой VLS-решеткой [34]. Эти зеркала фокусировали излучение на детектор в вертикальном направлении, что позволяло избежать наложения спектральных изображений, соответствующих трем разным направлениям, друг на друга. При использовании дополнительных зеркал спектрограф Харады можно использовать и для изображающей солнечной спектроскопии [35]. Но для каждой задачи требуется прибор, обладающий своими особыми характеристиками габаритами, разрешающей способностью, рабочим спектральным диапазоном. Поэтому разработка новых приборов такого типа ведется и в настоящее время. Примерами таких специализированных приборов могут служить два спектрографа в LLNL, предназначенных для регистрации спектров многозарядных ионов в электронно-пучковой ловушке (electron beam ion trap) [36] и лазерной плазме [37]. Оба прибора обладали габаритами около 3 м, первый прибор позволил получить разрешающую способность ~ 600 на длине волны 16 Å, второй - ~ 1000 на 19 Å. Примером применения на синхротронной измерительной линии спектрографа с плоским полем на основе сферической VLS-решетки может служить Super-Advanced X-ray Emission Spectrometer (SAXES), предназначенный для рентгеновской эмиссионной спектроскопии и рентгеновского неупругого резонансного рассеяния [38]. Прибор обладает габаритами ~5 м и разрешающей способностью ~ 7500 на длине волны 31 Å. Из тенденций последнего времени

хорошо заметны два направления. Первое – увеличение разрешающей способности в уже освоенных областях длин волн, а второе – освоение более коротковолновых диапазонов. В частности в работе [39] объявлено о расчете крупногабаритного (длина ~ 60 м) спектрографа скользящего падения с плоским полем на основе комбинации выпуклого цилиндрического зеркала и вогнутой цилиндрической VLS-решетки. Согласно расчету, прибор обладает разрешающей способностью 100 000 – 200 000 в области водяного окна 20 - 50 Å и может быть применен для диагностики излучения лазера на свободных электронах, в частности – режима самоусиливающегося спонтанного излучения. Недавно с помощью сферической решетки с многослойным покрытием Ni/C удалось продвинуться в область "нежного рентгена" ("tender X-ray"), которая считалась областью применения оптики на основе кристаллов: в работе [40] сообщается о создании компактного (с габаритами ~ 0.5 м) спектрографа скользящего падения с плоским полем, работающего в области 3.8 - 13.8 Å и обладающего достаточно хорошей для своего диапазона и своих габаритов разрешающей способностью ~ 100 – 300.

Из-за низких коэффициентов отражения в мягкой рентгеновской области спектра, сферические зеркала и решетки используются в схемах скользящего падения. Такие схемы обладают малым приемным углом и сильным астигматизмом, который можно устранить лишь с помощью дополнительной скрещенной оптики. Как следствие, светосила таких схем невелика. Если сферическое зеркало заменить на тороидальное, то для устранения аберраций приходится значительно уменьшать его апертуру, что опять-таки, отрицательно повлияет на светосилу [41 – 42]. Низкой светосилой обладает и схема Киркпатрика-Баеза [43]. Поэтому, чтобы получить высокое разрешение в схеме скользящего падения необходимо использовать более сложную оптику. Например, телескоп космической обсерватории АХАГ по схеме Вольтера первого типа с системой вложенных зеркал для повышения светосилы [44]. В то же время, обычные сферические зеркала в схемах нормального падения способны давать хорошее качество изображения при большой светосиле: при освещении всей апертуры зеркала из аберраций присутствует лишь небольшой астигматизм, при роуландовской установке зеркала меридиональная кома полностью отсутствует, а сферическая аберрация невелика. Но для использования этих преимуществ оптики нормального падения в мягком рентгеновском диапазоне необходимо поднять коэффициенты отражения. Сделать это можно, если нанести на зеркало многослойную структуру. От структуры зависит спектр отражения зеркала, а значит – и рабочий диапазон прибора в целом.

Периодические структуры дают высокий пиковый коэффициент отражения, но узкую ширину его спектра, имеющего резонансный вид. Такие зеркала применяются там, где необходимо максимально уменьшить светопотери. Примером может служить литография в

7

экстремальном ультрафиолете [45 – 49]. Фокусирующее зеркало, у которого период меняется вдоль поверхности, может быть использовано в изображающем спектрографе – если поместить зеркало после дифракционной решетки так, чтобы период структуры в точке соответствовал максимуму отражения для излучения с той длиной волны, которая соответствует приходящему в эту точку излучению от решетки, то такая схема будет обладать максимальной светосилой [41]. Если эту схему немного изменить – убрать входную щель и поместить детектор в фокус зеркала, то схема будет работать как изображающий спектрогелиограф.

Однако, для задач спектроскопии удобнее, когда коэффициент отражения зеркала не меняется в широком спектральном диапазоне. Такой спектр отражения зеркала можно получить, используя апериодическую многослойную структуру. Впервые апериодическая структура была рассчитана в 1987 г. и была предназначена для рентгеновской астрономии [50]. При расчете применялся оптимизационный подход, в котором каждый слой рассматривался как независимая переменная. Этот подход оказался применим для расчета многослойных зеркал с максимальным равномерным отражением на фиксированном угле падения в широком диапазоне длин волн, зеркал с максимальным интегральным коэффициентом отражения, а также зеркал с максимальным равномерным отражением на фиксированной длине волны в широком диапазоне углов падения [51–52].

В ФИАН к 2000 г. был разработан алгоритм численного решения этих и некоторых других оптимизационных задач [53-54]. По расчетам, произведенным в ФИАН, на сферических подложках радиуса 1 м в 2001 г. в Харьковском политехническом институте были синтезированы апериодические многослойные зеркала с равномерным отражением ~ 14% в спектральной области 125 – 250 Å [55]. В расчетах был произведен учет образования переходных слоев MoSi₂ – Мо-на-Si толщиной 12 Å и Si-на-Мо толщиной 6 Å [56]. Эти зеркала использовались в большом количестве экспериментов с регистрацией спектров лазерной плазмы с пространственным разрешением [57]: лазерная плазма в импульсной струе ксенона [58-59], перезарядка многозарядных ионов на атомах инертного газа [60-61], отражения излучения лазера от релятивистской плазменной волны – релятивистское "летящее зеркало" [9], гармоник в струе гелия генерации высоких под действием мультитераваттного фемтосекундного лазера [62]. На основе такого зеркала в ФИАН был недавно создан широкополосный стигматический спектрограф высокого разрешения – применение зеркала нормального падения в сочетании с плоской VLS-решеткой позволяет получить стигматизм в диапазоне 100 – 300 Å, однако область работы прибора была ограничена спектром отражения Mo/Si зеркала –125 – 250 Å [63 – 64].

Область применения кремнийсодержащих многослойных структур ограничена снизу длиной волны 125 Å – в ее окрестности у кремния расположен L-край поглощения. Для того, чтобы продвинуться в более коротковолновый диапазон, необходимо кремний заменить на другой элемент. Одним из перспективных элементов является бериллий – согласно проведенным оценочным расчетам апериодическая структура на основе Мо/Ве может давать равномерное отражение ~ 20% в спектральном диапазоне 111 – 135 Å [65]. В 2014 г. в Институте физики микроструктур (ИФМ) РАН была открыта лаборатория синтеза бериллийсодержащих зеркал, и с тех пор в ИФМ РАН был накоплен значительный опыт синтеза периодических многослойных зеркал на основе Ве, разработаны методы восстановления структуры с одновременным использованием нескольких методов диагностики: рефлектометрия в жестком и мягком рентгеновском диапазонах [66 – 67], электронной микроскопии [68] и масс-спектрометрии [69].

При решении задач оптимизации многослойных структур плотность материалов задается табличным значением. Но на практике плотность зависит от толщины напыляемого слоя. В частности, для молибдена плотность принимает значения 75% и 97% от табличного значения при толщинах 15 Å и 55 Å соответственно. Это приводит к нелинейной зависимости толщины слоя от времени напыления, которое и контролируется в процессе синтеза структуры. Это приводит к тому, что толщины слоев в синтезированной структуре отличаются от таковых в расчетной, внося искажения в спектр отражения получившегося зеркала. Но если толщины слоев из одного и того же материала будут отличаться незначительно, то и плотность в этих слоях будет примерно одинакова и ее зависимостью от толщины можно пренебречь. Кожевников и др. на примере структур с максимальным равномерным отражением в диапазоне углов падения показали, что если модифицировать функционал оптимизации так, чтобы минимизировалась сумма квадратов разности толщин соседних слоев из одного и того же материала, то можно получить структуры с малым разбросом толщин слоев ценой незначительного уменьшения среднего коэффициента отражения и несколько большим отклонением от него [70]. Подобные структуры будут проще для синтеза, чем просто апериодические структуры. Из-за нелинейного характера роста толщины слоя с течением времени, необходимо перед напылением структуры проводить калибровку под каждую из имеющихся в апериодической структуре толщин слоев. В обычной апериодической структуре разных толщин слоев обычно столько же, сколько и всего слоев в структуре [71], что делает процедуру проведения калибровки очень длительной, и поэтому – бессмысленной – за время ее проведения параметры установки магнетронного напыления (такие как давление, температура) могут отклониться и предыдущие результаты калибровки перестанут соответствовать

9

действительности. Если же почти все слои в структуре имеют близкую толщину за исключением, быть может, нескольких (как правило, нижний и верхний слои структуры), то достаточно провести несколько (порядка пяти) калибровок по диапазону толщин большинства слоев и по одной на каждый не входящий в этот диапазон толщин слой. В этом случае для напыления большинства слоев будет достаточно пользоваться интерполяцией.

Есть также и иной подход к созданию широкополосных многослойных зеркал, который был предложен Кульманом, Юлиным и др. [72]. Он заключается в напылении нескольких периодических структур одна поверх другой. Подобные структуры характеризуются меньшим числом различных толщин слоев, благодаря чему их проще и быстрее синтезировать. Поскольку такие структуры являются частным случаем апериодических, то предельный коэффициент отражения таких структур будет ниже, и они будут обладать чуть меньшей равномерностью отражения по спектру.

Развиваются VLS-решеток И совершенствуются технологии изготовления И многослойных зеркал. ИФМ РАН занимает одну из лидирующих позиций в области синтеза многослойных отражающих структур в мире [73]. Изготовление VLS-решеток в нашей стране началось с работы Герасимова в 1970 г. [25], но малозначительно сдвинулось с тех пор. Гравировальный станок, созданный Герасимовым, позволяет получать незначительную вариацию шага по апертуре решетки (на уровне нескольких процентов) в то время как во многих случаях (например, спектрограф скользящего падения с плоским полем) требуется величина вариации порядка полутора и более десятков процентов. Первый программируемый гравировальный станок, способный нарезать решетки с большими и малыми вариациями шага, с различной кривизной штриха, на плоской или вогнутой (в том числе эллипсоидальной) поверхности, был создан в фирме Hitachi в Японии в 1975 г. [74]. Но после ухода из фирмы Т. Харады Hitachi изготавливает только реплики с изготовленных ранее решеток-матриц. В 2009 г. сообщалось об изготовлении плоской VLS-решетки в Германии (фирма Calr Zeiss Optronics Gmbh) на программируемом гравировальном станке GTM6 [75]. Сейчас станок принадлежит Берлинскому центру материалов и энергии им. Гельмгольца.

VLS-решетки можно изготовить с помощью электроннолучевой литографии. Подложка решетки покрывается слоем металла, а затем резистом, на котором электронным лучом прорисовываются штрихи. Далее в процессе плазмохимического травления рисунок переносится с резиста на металл, и, если есть необходимость, – на подложку. Качество изготовления решетки напрямую зависит от литографа – от точности позиционирования луча и точности позиционирования подложки, а также оптимизации литографа под конкретную

подложку. Основная трудность заключается в том, что для изготовления решеток литограф чаще всего приходится дорабатывать – подложка решетки имеет слишком большие размеры. Поэтому часто на литографах делают только маску на тонкой подложке или форму для наноимпринтинга [76], а далее используют эту маску для изготовления решеток другим методом – например, проекционной (при малой частоте штрихов) или интерференционной [77] (при очень большой частоте штрихов) литографией.

Другой способ изготовления VLS-решеток – интерференционная литография. Метод заключается в следующем: на подложку решетки наносится слой фоторезиста, собирается схема записи, которая формирует два когерентных монохроматических источника, волны которых создают на фоторезисте интерференционную картину. В процессе проявления фоторезиста на нем формируется рельеф. Далее этот рельеф либо переносится на материал подложки с помощью травления, а затем покрывается отражающим покрытием (например, золотом), либо, в самом простом случае, просто покрывается отражающим покрытием. Способ требует решения "обратной" задачи интерференционной литографии – довольно сложного записи. способной реализовать требуемое распределение расчета схемы частоты интерференционных полос на апертуре будущей VLS-решетки. В отличие от метода механического нарезания на гравировальном станке и электроннолучевой литографии, интерференционная литография не позволяет строго задать положение каждого штриха решетки – получившееся распределение частоты штрихов по апертуре будет не совпадать с требуемым, а аппроксимировать его. Из преимуществ метода можно отметить время изготовления VLS-решетки – процесс занимает значительно меньше времени, чем в случаях механической гравировки и электроннолучевой литографии. Также, решетки, изготовленные методом интерференционной литографии, обладают меньшим рассеянием и не дают линии духов. В мире существуют две лидирующие организации, изготавливающие VLS-решетки этим способом – Horiba-Jobin Yvon [38] и Shimadzu Corporation [78 – 79].

В России на сегодняшний день нет программируемых гравировальных станков. Из доступных В нашей стране методов остаются электроннолучевая литография И интерференционная литография. Первая отечественная VLS-решетка со значительной вариацией шага по апертуре была изготовлена методом электроннолучевой литографии в ЦКП МФТИ [80]. Электронный луч литографа может прорисовывать штрихи с высокой точностью в области ~ 600 мкм, после чего столик с заготовкой решетки необходимо сдвигать. Этот сдвиг производился со случайной ошибкой ~ 0.5 мкм, из-за которой разрешающая способность спектрометра была ограничена сверху значением ~ 500. Устранение ошибки сдвига столика требует доработки процесса изготовления решетки (например, нанесение меток и выравнивание

11

по ним), что приведет к большим затратам времени и следовательно – гораздо более высокой стоимости изготовления.

Вторая отечественная VLS-решетка со значительной вариацией шага по апертуре была изготовлена методом интерференционной литографии В Научно-производственном объединении Государственный институт прикладной оптики (НПО ГИПО, г. Казань). Основная трудность метода заключается в расчете схемы записи – от того, насколько хорошо совпадут требуемая пространственная частота штрихов и пространственная частота интерференционных полос, формируемых схемой записи, зависят аберрации решетки в схеме спектрального прибора, а следовательно – его разрешение. Схема записи, рассчитанная в ГИПО, давала отличающееся распределение частоты штрихов от расчетного, что было скомпенсировано модификацией схемы спектрометра. Итоговая разрешающая способность прибора с интерференционно-литографической решеткой достигла практического предела, ограниченного размером ячейки детектора, и составила ~ 800 [63]. Но нужно понимать, что подобное изменение оптической схемы под изготовленную решетку не всегда возможно без потери разрешения, поэтому для более точного изготовления VLS-решеток необходимо владеть методом расчета схемы записи.

Таким образом, в настоящее время VLS-решетки и многослойные отражающие покрытия активно используются в спектральных приборах в вакуумной области спектра для широкого класса фундаментальных и прикладных задач: спектроскопия и диагностика лазерной и электроразрядной плазмы, рентгеновская эмиссионная спектроскопия, исследование структуры твердого тела методом рентгеновского неупругого резонансного рассеяния, исследование отражения излучения от релятивистской плазменнной волны (релятивистское "летящее зеркало"), исследование генерации высоких гармоник лазерного излучения в плазме Не под действием излучения фемтосекундного мультитераваттного лазера, исследование "теплого плотного вещества" (warm dense matter) – результат взаимодействия с веществом излучения импульсного рентгеновского лазера на свободных электронах; солнечная и внесолнечная астрономия, а также рефлектометрия и метрология. Достижение более высокого спектрального и пространственного разрешения, а также освоение новых диапазонов длин волн позволят получать новую информацию об объектах исследования. Но для этого необходимо развивать методы расчета оптических схем приборов на основе таких элементов и технологию изготовления этих элементов.

Цели и задачи

Настоящая работа посвящена разработке новых оптических элементов (сферических VLS-решеток и многослойных рентгеновских зеркал нормального падения) для вакуумной ультрафиолетовой и мягкой рентгеновской области спектра, технологии изготовления этих элементов, а также созданию спектральных приборов на их основе для исследования лабораторной плазмы.

Основными задачами работы являлись:

1. Разработка методов решения обратной задачи интерференционной литографии – расчета схемы записи, реализующей требуемое распределение частоты интерференционных полос по апертуре заготовки сферической или плоской VLS-решетки. Создание отечественных VLS-решеток и их применение в спектральных приборах для мягкого рентгеновского диапазона.

2. Исследование влияния параметров сферической VLS-решетки на положение горизонтального и вертикального фокусов дифрагированного пучка при изображении точечного источника и компенсацию меридиональной комы и сферической аберрации.

3. Создание первого отечественного спектрографа скользящего падения с плоским полем для мягкого рентгеновского диапазона (50 – 275 Å) и его демонстрация в эксперименте с лазерной плазмой.

4. Анализ возможностей компенсации астигматизма в широком диапазоне длин волн с помощью сферической VLS-решетки в схемах нормального падения, а также с помощью периодической решетки с криволинейными штрихами. Расчет схем широкополосных изображающих спектрографов нормального падения для ВУФ области длин волн 800 – 1600 Å.

5. Модификация метода расчета широкополосных рентгеновских зеркал на основе апериодических многослойных структур для уменьшения разброса толщин слоев в структуре. Исследование влияния сглаживания толщин слоев на уровень плато и равномерность отражения. Оптимизация многослойных апериодических структур на основе Мо/Ве на максимальное равномерное отражение в диапазонах 111 - 138 Å, 111 - 150 Å, 111 - 200 Å и 111 - 222 Å. Создание широкополосных зеркал на основе Мо/Ве структур для диапазона 111 - 138 Å.

6. Испытание широкополосных зеркал нормального падения на основе стековой многослойной структуры Мо/Ве в схеме изображающего спектрографа с пропускающей

решеткой. Получение спектра отражения зеркал в эксперименте с вольфрамовой лазерной плазмой. Оценка толщины мертвого слоя Si матричного ПЗС-детектора. Получение стигматического спектра LiF лазерной плазмы. Оценка пространственного профиля интенсивности спектральной линии FVII 135 Å.

Научная новизна

Впервые найден общий метод решения обратной задачи интерференционной литографии для схемы записи с одним вспомогательным сферическим зеркалом наклонного падения.

Создана первая отечественная сферическая VLS-решетка методом интерференционной литографии с совпадением зависимости частоты штрихов от координаты с расчетной.

Рассчитан, создан и испытан в эксперименте первый отечественный спектрограф высокого разрешения скользящего падения с плоским полем на основе сферической VLSрешетки.

Впервые произведен исчерпывающий анализ схем широкополосных изображающих спектрографов нормального падения на основе сферической VLS-решетки или на основе периодической сферической решетки с криволинейными штрихами. Составлены карты изображающих характеристик приборов данного класса, описывающие все возможные их схемы.

Впервые произведен расчет широкополосных рентгеновских зеркал нормального падения на основе многослойных структур Мо/Ве с применением сглаживания толщин соседних слоев. Исследовано влияние параметров сглаживания толщин соседних слоев на структуру и ее спектр отражения.

Испытаны в эксперименте первые широкополосные рентгеновские зеркала нормального падения на основе многослойной структуры Мо/Ве.

Теоретическая и практическая значимость работы

Разработан метод решения обратной задачи интерференционной литографии для схемы записи с одним вспомогательным зеркалом, позволяющий изготавливать VLS-решетки с высокой точностью. Метод успешно испытан при изготовлении в НПО ГИПО сферической VLS-решетки для спектрографа скользящего падения с плоским полем и в будущем может быть применен для создания VLS-решеток специализированных спектральных приборов.

Разработан метод расчета спектрографов скользящего падения с плоским полем на основе сферической VLS-решетки, состоящий из аналитического расчета и построения спектральных изображений точечного монохроматического источника методом численной трассировки лучей.

Разработан алгоритм численной трассировки лучей, позволяющий строить изображения источника в схемах, включающих в себя VLS-решетку с криволинейными штрихами. Алгоритм способен моделировать решетки, изготовленные методом интерференционной литографии с применением схемы записи с одним вспомогательным зеркалом.

Был создан и испытан в эксперименте первый отечественный спектрограф скользящего падения с плоским полем. Методы расчета оптической схемы прибора и схемы записи формируют мощный инструмент проектирования приборов такого класса под различные задачи спектроскопии мягкого рентгеновского диапазона. В цикл разработки включены все этапы – расчет схемы прибора, расчет схемы записи для изготовления решетки, сборка и испытание, также учтены возможные обратные связи.

Проанализированы схемы широкополосных изображающих спектрографов нормального падения на основе сферической VLS-решетки или сферической периодической решетки с криволинейными штрихами, в которых детектор размещается на построении Сиркса или круге Роуланда, соответственно. Разработан метод расчета приборов таких классов, основанный на анализе карт изображающих характеристик. Рассчитаны спектрографы таких классов с высоким разрешением в диапазоне шириной около октавы с центром на длине волны ~ 1200 Å.

Добавлено сглаживание толщин соседних слоев в программу расчета многослойных структур, что делает расчетные апериодические структуры удобнее для синтеза. Рассчитаны апериодические широкополосные многослойные Мо/Ве-зеркала с равномерным отражением 15.8%, 12.6%, 10.7% и 10.3% в диапазонах 111 – 138, 111 – 150, 111 – 200 и 111 – 222 Å.

Синтезированные в ИФМ РАН первые широкополосные сферические Мо/Ве-зеркала нормального падения с равномерным отражением ~14% в диапазоне 111–138 Å были испытаны при регистрации стигматических спектров лазерной плазмы. Зеркала могут быть применены в изображающих спектральных приборах высокого разрешения для получения пространственной информации об источнике.

Методы исследования

Расчеты оптических схем основывались на методах геометрической оптики и построении функции оптической длины пути. Для построения изображений методом численной трассировки лучей использовались следующие программы: X-ray Oriented Programs (XOP) v. 2.3 с расширением SHADOWVUI (находится на сайте ESRF в свободном доступе [81]), программа BEAM FOUR (Release 199) [82] (дифракция на сферической решетке в схеме нормального падения и на решетке с криволинейными штрихами) и программный код собственной разработки (трассировка лучей в схеме записи для вычисления распределения частоты штрихов по апертуре, расчет изображения точечного монохроматического источника после дифракции на такой решетке).

Для предварительной оценки изготовленной методом интерференционной литографии VLS-решетки производилось измерение частоты штрихов в нескольких точках ее апертуры по дифракции излучения He-Ne лазера, что позволяет сравнить получившуюся зависимость частоты штрихов от координаты с требуемой. Оценка глубины профиля штрихов производилась по отношению интенсивностей первого и нулевого порядков дифракции He-Ne лазера в модели синусоидального профиля.

Экспериментальная часть исследования проводилась в вакуумной камере ИКАР (длина 3.8 м, диаметр 0.9 м) [83]. Откачка производилась при помощи форвакуумного насоса ABP-150 до давления ~ 70 мТорр, а затем безмасляным турбомолекулярным насосом Turbo-V 3K-T фирмы VARIAN с сопровождающим безмасляным спиральным насосом ISP-500 ANEST-IWATA. Плазма образовывалась при фокусировке импульса Nd:YAG лазера Quantel YG980 (длительность импульса 9 нс, энергия 0.5 Дж, частота следования импульсов 10 Гц). Спектры регистрировались с помощью ПЗС-матрицы Teledyne e2v с обратной засветкой. Матрица имеет 2048×1024 квадратные ячейки со стороной 13 мкм. Размер матрицы 26.6×13.3 мм. Для окончательной точной юстировки спектрографа во время регистрации спектров оптические элементы устанавливались на моторизированные позиционеры фирмы Standa в вакуумном исполнении, управляемые с компьютера.

Личный вклад автора

Автору принадлежит идея метода решения обратной задачи интерференционной литографии, а также метода измерения частоты штрихов у VLS-решетки. Автором установлено, что построение Сиркса совпадает с осью симметрии сферической VLS-решетки с прямолинейными штрихами. Автором предложен метод анализа изображающих характеристик схемы широкополосного изображающего спектрографа нормального падения на основе сферической VLS-решетки. Расчеты всех интерференционно-литографических схем записи и схем спектрографов были проведены лично автором. Автором был разработан программный код, позволяющий проводить численную трассировку лучей с учетом дифракции на решетках с переменным шагом и криволинейным штрихом, что необходимо для оценки пригодности рассчитанной схемы записи.

Автором произведена модификация программы расчета многослойных структур – добавлено сглаживание толщин соседних слоев и выполнен расчет широкополосных зеркал на основе апериодических структур Мо/Ве.

Автор лично принимал участие во всех экспериментах, приведенных в настоящей работе: в измерении частоты штрихов изготовленных решеток, сборке, юстировке оптических схем, работе с вакуумной камерой и лазером, регистрации спектров и обработке полученных результатов.

Положения, выносимые на защиту

1. Предложенный метод решения обратной задачи интерференционной литографии, основанный на аналитическом обращении прямой задачи с последующей численной оптимизацией, позволяет рассчитывать схему записи, состоящую из двух точечных когерентных источников и одного вспомогательного зеркала-аберратора, для изготовления плоской или сферической VLS-решетки. При этом достигается высокая (отклонение ~ 0.1%) точность аппроксимации частоты штрихов частотой интерференционных полос, контролируется ширина и высота решетки, а также радиус кривизны ее штрихов.

2. Рассчитанный и созданный спектрограф скользящего падения с плоским полем в диапазоне 50 – 275 Å на основе сферической VLS-решетки, интерференционная схема записи которой получена предложенным методом, обладает высоким спектральным разрешением, ограниченным двумя ячейками детектора (2×13 мкм).

3. Схема широкополосного изображающего ВУФ спектрографа нормального падения на основе сферической VLS-решетки или сферической периодической решетки с криволинейными штрихами, а также все изображающие характеристики схемы определяются двумя параметрами – β₁ и β₂ – углами дифракции, на которых строго скомпенсирован астигматизм.

Широкополосное зеркало нормального падения на основе апериодической многослойной структуры Мо/Ве способно обеспечить равномерное отражение на уровне 10% в октаве длин волн 111 – 222 Å.

Степень достоверности

Правильность расчетов схем спектральных приборов подтверждается результатами численной трассировки лучей, проведенной с использованием различных программ, а также результатами эксперимента. Правильность найденных схем записи проверена измерением зависимости пространственной частоты штрихов изготовленных VLS-решеток на апертуре по дифракции излучения He-Ne лазера. Корректность расчета зеркал на основе апериодических структур Мо/Ве подтверждается хорошим совпадением спектров отражения найденных структур, рассчитанных в программах Mirror II и IMD.

Апробация результатов

Результаты настоящей работы были доложены на научных семинарах ФИАН, а также на семи всероссийских и международных конференциях, в том числе и лично автором:

A1. <u>Kolesnikov A.O.</u> Compact flat-field grazing incidence spectrograph in the 90 - 250 Å wavelength range. // Moscow: The third international workshop MIPT (Moscow, Russia) – UEC (Tokyo, Japan): Atomic, molecular and optical physics –20-23 October 2015.

А2. Вишняков Е. А., <u>Колесников А. О.</u>, Рагозин Е. Н., Шатохин А. Н. Спектрографы на основе VLS-решёток. // Черноголовка: Конференция «Рентгеновская оптика – 2016» – 26–29 сентября 2016 г. – С. 34-36 (2016).

А3. Вишняков Е. А., <u>Колесников А. О.</u>, Рагозин Е. Н., Шатохин А. Н. Расчёт схемы записи для изготовления VLS-решётки методом интерференционной литографии. // Нижний Новгород: Труды XXI Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника» – 13–16 марта 2017 г. – Т 1. – С. 375-376.

А4. Вишняков Е.А., <u>Колесников А.О.</u>, Рагозин Е.Н., Шатохин А. Н. Широкополосные стигматические VLS-спектрометры для ВУФ диапазона. // Нижний Новгород: Труды XXII Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника» – 12-15 марта 2018 г. – Т. 1. – С. 420-421.

A5. Vishnyakov E.A., Shatokhin A.N., <u>Kolesnikov A.O.</u>, Ragozin E.N.. Imaging VLS grating spectrographs. // Strasbourg, France: SPIE Photonics Europe. Unconventional Optical Imaging – 22-26 April 2018.

А6. Вишняков Е. А., <u>Колесников А. О.</u>, Рагозин Е. Н., Шатохин А. Н. Спектрографы на основе сферической VLS-решётки. // Черноголовка: Конференция Рентгеновская оптика – 2018 – 24–27 сентября 2018 г., – С. 119-123.

А7. <u>Колесников А.О.</u>, Вишняков Е.А., Рагозин Е.Н., Шатохин А.Н. VLS-спектрограф с плоским полем для области длин волн 50 − 275 Å. // Нижний Новгород: Труды XXIV Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника» – 10–13 марта 2020 г. – С. 877–878.

Результаты работы были опубликованы в шести статьях в рецензируемых журналах, учитываемых базой данных Web of Science:

Б1. Вишняков Е.А., Колесников А.О., Рагозин Е.Н., Шатохин А.Н. VLS-спектрографы с плоским полем для мягкого рентгеновского излучения. // Квантовая электроника. – 2016. Т 46. – №10. – С. 953–960.

Vishnyakov E.A., Kolesnikov A.O., Ragozin E.N., Shatokhin A.N. Soft X-ray flat-field VLS spectrographs. // Quant. Electron. – 2016. – T. 46 – №10. – C. 953–960.

Б2. Е.А. Вишняков, А.О. Колесников, Е.Н. Рагозин, А.Н. Шатохин. «Изображающий спектрограф нормального падения на основе апериодической сферической решетки для вакуумной области спектра». // Оптика и спектроскопия.– 2018. – Т. 125. – №5. – С 687 – 698.

Vishnyakov E.A., Kolesnikov A.O., Ragozin E.N., Shatokhin A.N. Normal-Incidence Imaging Spectrograph Based on an Aperiodic Spherical Grating for the Vacuum Spectral Region. // Optics and Spectroscopy. – 2018. – T. 125. – C. 783–794.

53. Vishnyakov E.A., Kolesnikov A.O., Shatokhin A.N., Ragozin E.N. Imaging VLS grating spectrographs. // Proceedings of SPIE. – 2018. – T. 10677. – C. 106770E; doi: 10.1117/12.2305918.

Б4. Колесников А.О., Вишняков Е.А., Шатохин А.Н., Рагозин Е.Н. VLS-спектрометр с плоским полем на область длин волн 50–275 Å. // Квантовая электроника. – 2019 – Т. 49. – №11. – С. 1054–1058.

Kolesnikov A.O., Vishnyakov E.A., Shatokhin A.N., Ragozin E.N. Flat-field VLS spectrometer for a wavelength range of 50 – 275 Å. // Quantum Electronics. – 2019 – T. 49. – №11. – C. 1054–1058.

E5. Ragozin E.N., Kolesnikov A.O., Pirozhkov A.S., Sasorov P.V., Shatokhin A.N., Vishnyakov
E.A. High Spectral and Spatial Resolution Soft X-ray/XUV VLS Spectrographs. // Kozlová M., Nejdl
J. X-Ray Lasers 2018. ICXRL 2018. Springer Proceedings in Physics T. 241. – C. 169–174.

Б6. Колесников А.О., Вишняков Е.А., Рагозин Е.Н., Шатохин А.Н. Изображающий широкополосный спектрограф для мягкого рентгеновского диапазона (λ > 111 Å) с пропускающей дифракционной решеткой. // Квантовая электроника. – 2020. – Т. 50. – №10. – С. 967 –975.

Kolesnikov A.O., Vishnyakov E.A., Ragozin E.N., Shatokhin A.N. Imaging broadband soft X-ray transmission-grating spectrograph for a wavelength range $\lambda > 111$ Å. // Quantum Electronics.– 2020. – T. 50. – No10. – C. 967–975.

Результаты данной работы содержатся в монографии:

В1. Рагозин. Е. Н., Вишняков Е. А., Колесников А. О., Пирожков А. С., Шатохин А. Н. Апериодические элементы в оптике мягкого рентгеновского диапазона. // Москва: ФИЗМАТЛИТ – 2018. Глава 7, Глава 10 раздел 10.3.

Работа была выполнена при поддержке гранта РНФ: проект №14-1200506 (2014 – 2016 гг.) и №14-12-00506-п (2017 – 2018 гг.).

На основе результатов этой работы был получен патент:

Г1. Пат. 2659875 РФ, МКИ G 02 В 5/18.

Глава 1. Решение "обратной" задачи интерференционной литографии для изготовления VLS-решеток

При изготовлении решетки методом интерференционной литографии положение штрихов решетки совпадает с положением интерференционных полос, на поверхности фоторезиста, нанесенного на подложку решетки. Интерференционные полосы формируются при помощи схемы записи, состоящей из двух когерентных монохроматических источника и вспомогательных оптических элементов. У VLS-решетки частота штрихов в каждой точке апертуры подобрана так, чтобы аберрации в заданной оптической схеме в определенных диапазонах длин волн минимизированы. Поскольку аберрации в оптической схеме в мягком рентгеновском диапазоне велики по сравнению с дифракционным пределом, то именно они определяют разрешающую способность прибора. Поэтому для получения требуемого разрешения необходимо подобрать такую схему записи, в которой частота интерференционных полос с наибольшей точностью совпадет с требуемой частотой штрихов в каждой точке апертуры будущей VLS-решетки.

Для изготовления сферических VLS-решеток в Японии (Shimadzu) успешно применялась схема записи с одним вспомогательным сферическим зеркалом наклонного падения [78 – 79]. Такая схема состоит из двух точечных когерентных монохроматических источников С и D, излучение одного из которых перехватывается вогнутым (радиус кривизны R_2) зеркалом M, внося в волновой фронт контролируемые аберрации. Интерференция происходит на заготовке решетки G, имеющей радиус кривизны R.

В схеме фигурируют семь параметров – радиус кривизны вспомогательного зеркала R_2 , три угла – угол у падения центрального луча на подложку, приходящий из первого источника C, угол δ падения центрального луча от второго источника после отражения зеркалом M и угол η падения центрального луча на зеркало, и три расстояния – расстояние r_C " источник C – заготовка", расстояние p_D "источник D – зеркало M" –и расстояние q_D "зеркало M – заготовка G". Расстояния отсчитываются вдоль центральных лучей. Под центральными лучами здесь и далее следует понимать лучи, которые попадают в центр заготовки решетки – точка падения центрального луча на зеркало вовсе не обязательно совпадает с центром апертуры зеркала. Общей вид схемы записи приведен на Рис. 1.

С решеткой связана следующая декартова система координат: начало координат совпадает с центром апертуры решетки, ось *x* направлена вдоль центральной нормали к решетке, ось *z* – касается центрального штриха в начале координат, а ось *y* проходит ортогонально центральной нормали и центральному штриху. В этой системе координат

параметры VLS-решетки задаются зависимостью частоты штрихов от координаты у, которую обычно выражают следующим полиномом:

$$p(y) = p_0 + p_1 y + p_2 y^2 + p_3 y^3 + \dots$$
(1)

Таким образом, главных выходных параметра у схемы записи четыре. К ним нужно добавить радиус кривизны штрихов R_g , который в большинстве случаев требуется сделать как можно больше, поскольку штрихи у VLS-решетки обычно прямолинейны.



Рис. 1. Схема записи с одним вспомогательным сферическим зеркалом наклонного падения. С и D – точечные монохроматические источники, M – сферическое зеркало (радиус кривизны R_2), G – подложка решетки (радиус кривизны R) с нанесенным слоем фоторезиста, γ и δ – углы падения центральных лучей на заготовку решетки, η – угол падения центрального луча на зеркало, $r_{\rm C}$ – расстояние от точки C до заготовки, $q_{\rm D}$ – расстояние "зеркало – заготовка", p_D – расстояние от точки D до зеркала.

"Прямая" задача интерференционной литографии возникает, если все семь параметров схемы записи известны, и нужно найти коэффициенты полинома (1). Ее решение можно получить аналитически на основе теории, изложенной в работе [84] для сильно обобщенной схемы записи с двумя эллиптическими зеркалами и эллиптической подложкой решетки. В этой работе вводится координатная система, связанная с зеркалом, координаты точки падения луча на зеркало задаются как двумерные полиномы от координат точки падения луча на решетку. Номер штриха вычисляется исходя из разности длин оптического пути лучей, приходящих в

одну и ту же точку апертуры заготовки. В силу громоздкости получающихся выражений, берется степень полиномов не выше квадрата, в связи с чем, данная теория дает лишь приблизительные значения коэффициенты полинома (1). Сведя теорию к случаю одного сферического зеркала и сферической решетки, получаем:

$$p_0 = \frac{n_{10}}{\lambda}, \ p_1 = \frac{n_{20}}{\lambda}, \ p_2 = \frac{3}{2} \frac{n_{30}}{\lambda}, \ p_3 = \frac{1}{2} \frac{n_{40}}{\lambda},$$
(2)

где коэффициенты n_{ij} выражают номер штриха решетки N как функцию координат y и z (x также является функцией координат y и z, определяемой из уравнения поверхности решетки, поэтому на номер штриха не влияет):

$$N(y,z) = \frac{1}{\lambda} \left[n_{10}y + \frac{1}{2} \left(n_{20}y^2 + n_{02}z^2 + n_{30}y^3 + n_{12}yz^2 \right) + \frac{1}{8} \left(n_{40}y^4 + \dots \right) + \dots \right]$$
(3)

и определяются выражениями:

$$n_{10} = \sin \delta - \sin \gamma ; \tag{4}$$

$$n_{20} = T_C - T_D, T_C = \frac{\cos^2 \gamma}{r_C} - \frac{\cos \gamma}{R}, T_D = \frac{\cos^2 \delta}{r_D} - \frac{\cos \delta}{R}, r_D = q_D + \left(\frac{1}{p_D} - \frac{2}{R_2 \cos \eta}\right)^{-1}; \quad (5)$$

$$n_{30} = \frac{T_c \sin \gamma}{r_c} - \frac{T_D \sin \delta}{r_D} + \frac{2(A_{10D})^2}{R_2} K_D \sin \eta,$$

$$A_{10D} = \frac{(q_D - r_D) \cos \delta}{r_D \cos \eta}, \quad K_D = \frac{\cos \delta}{r_D} - \frac{A_{10D}}{R_2};$$
(6)

$$n_{40} = \frac{T_{c}}{r_{c}} \left(\frac{4\sin^{2}\gamma}{r_{c}} - T_{c} \right) - \frac{T_{D}}{r_{D}} \left(\frac{4\sin^{2}\delta}{r_{D}} - T_{D} \right) + \frac{S_{c} - S_{D}}{R^{2}} - \frac{2(A_{10D})^{2}}{R_{2}} K_{D} E_{40D} \cos \eta - \frac{2(A_{10D})^{3}}{R_{2}} \left(\frac{\cos\delta}{r_{D}} \cos\eta - \frac{A_{10D}\cos\eta}{R_{2}} \right),$$

$$S_{c} = \frac{1}{r_{c}}, S_{D} = \frac{1}{r_{D}} - \frac{\cos\delta}{R_{2}}, K_{D} = \frac{\cos\delta}{r_{D}} - \frac{A_{10D}}{R_{2}},$$

$$E_{40D} = \frac{6}{R} \operatorname{tg} \eta \operatorname{tg} \delta - \frac{\cos\delta}{r_{D}} \left[1 + \operatorname{tg} \eta \left(7\operatorname{tg} \eta + 12\operatorname{tg} \delta \right) \right] + 3K_{D} \operatorname{tg}^{2} \eta \left(1 + \frac{6A_{10D}q_{D}}{R_{2}} \right);$$
(7)

$$n_{02} = \frac{1}{r_C} - \frac{1}{r_{Dv}} - \frac{\cos \gamma - \cos \delta}{R}.$$
 (8)

Следует заметить, что r_D в (5) – это расстояние от горизонтального фокуса зеркала до подложки, а коэффициент A_{10D} в (6) – коэффициент, связывающий у-координату зеркала (в собственной системе координат зеркала) с у-координатой решетки в линейном приближении. Умножив этот коэффициент на апертуру решетки можно получить требуемую апертуру зеркала, и наоборот, поделив на него апертуру зеркала, получить максимально возможную в данной схеме апертуру решетки. Радиус кривизны штрихов решетки можно приближенно оценить из следующих соображений:

$$n(y,z) = \frac{1}{\lambda} \left[n_{10}y + \frac{1}{2} \left(n_{20}y^2 + n_{02}z^2 + \dots \right) + \dots \right] \approx \frac{n_{10}}{\lambda} \left(y - \frac{z^2}{2R_g} \right) \Longrightarrow - \frac{z^2}{2R_g} \approx \frac{1}{2} \frac{n_{02}z^2}{n_{10}}$$

поэтому

$$R_{g} \approx -\frac{n_{10}}{n_{02}} = -\frac{\sin \delta - \sin \gamma}{\frac{1}{r_{c}} - \frac{1}{r_{Dv}} - \frac{\cos \gamma - \cos \delta}{R}}, r_{Dv} = q_{D} + \left(\frac{1}{p_{D}} - \frac{2\cos \eta}{R_{2}}\right)^{-1}.$$
(9)

где r_{Dv} – расстояние от вертикального фокуса отраженного от зеркала М пучка до подложки будущей решетки. Формулы (2), (4) – (9) дают аналитическое решение "прямой" задачи интерференционной литографии. Формулы для плоской VLS-решетки можно получить из формул (4) – (9), положив радиус кривизны решетки *R* бесконечно большим.

1.1 Аналитическое обращение "прямой" задачи – начальное приближение

В случае, когда коэффициенты полинома частоты штрихов решетки (1) и нужный радиус кривизны штриха R_g (как правило, бесконечно большой по модулю) известны, и нужно подобрать схему записи для изготовления такой решетки, возникает "обратная" задача интерференционной литографии. Выразив из (2) и (9) n_{ij} , формулы (4) – (8) превращаются в систему переплетенных нелинейных алгебраических уравнений. Как и в других обратных задачах, количество неизвестных (R_2 , r_C , p_D , q_D , γ , δ , η) превышает количество уравнений. Это означает, что решение неоднозначно и, как правило, неточно – нужно найти несколько решений и из них выбрать наилучшее. Для нахождения одного такого решения был разработан следующий метод.

 Длина волны записывающего лазера λ зависит от изготовителя и поэтому является известной величиной. Радиус кривизны вспомогательного зеркала может принимать дискретные значения, поэтому на начальном этапе расчета тоже фиксируется.

2) Фиксируется угол у. Из (4) получается, что

$$\delta = \arcsin\left(n_{10} + \sin\gamma\right). \tag{10}$$

3) Фиксируется r_C и из (5) вычисляются T_C и T_D , выражается r_D :

$$T_C = \frac{\cos^2 \gamma}{r_C} - \frac{\cos \gamma}{R}, T_D = T_C - n_{20}, r_D = \frac{\cos^2 \delta}{T_D + \frac{\cos \delta}{R}}.$$
(11)

С этого момента r_D – известная величина. С другой стороны из последнего соотношения в (5) (из физического смысла r_D – расстояния от центра заготовки до горизонтального фокуса пучка, отраженного от зеркала М), получается уравнение:

$$r_{D} = q_{D} + \left(\frac{1}{p_{D}} - \frac{2}{R_{2}\cos\eta}\right)^{-1},$$
(12)

которое надо рассматривать в системе с (6). Остаются три неизвестных параметра схемы записи – p_D , q_D и η .

4) Фиксируется p_D . Для упрощения вида (12) p_D выражается через R_2 :

$$p_D = \alpha R_2, \Rightarrow \alpha = \frac{p_D}{R_2}, \ r_D = q_D + R_2 \left(\frac{1}{\alpha} - \frac{2}{\cos\eta}\right)^{-1} \Rightarrow q_D - r_D = R_2 \left(\frac{2}{\cos\eta} - \frac{1}{\alpha}\right)^{-1}.$$
 (13)

Получившуюся разность нужно подставить в A_{10D} выражения (6):

$$A_{10D} = \frac{\left(q_D - r_D\right)\cos\delta}{r_D\cos\eta} = \frac{R_2\cos\delta}{r_D\cos\eta\left(\frac{2}{\cos\eta} - \frac{1}{\alpha}\right)} = \frac{\alpha R_2\cos\delta}{r_D\left(2a - \cos\eta\right)}.$$
(14)

Далее $\cos \eta$ выражается через A_{10D} , через него выражается $\sin \eta$

$$\cos \eta = 2\alpha - \frac{\alpha R_2 \cos \delta}{r_D A_{10D}}, \sin \eta = \sqrt{1 - \alpha^2 \left(2 - \frac{R_2 \cos \delta}{r_D A_{10D}}\right)^2}$$
(15)

и подставляется в первое выражение (6), которое принимает следующий вид:

$$n_{30} - \frac{T_C \sin \gamma}{r_C} + \frac{T_D \sin \delta}{r_D} = \frac{2A_{10D}}{R_2} \left(\frac{\cos \delta}{r_D} - \frac{A_{10D}}{R_2}\right) \sqrt{\left(A_{10D}\right)^2 - \alpha^2 \left(2A_{10D} - \frac{R_2 \cos \delta}{r_D}\right)^2} .$$
(16)

Выражение (16) можно свести к полиномиальному алгебраическому уравнению шестой степени относительно *A*_{10D}. Оно может иметь от нуля до шести действительных решений. Если они есть,

то согласно проверке только одно из них удовлетворяет правильным значениям коэффициентов p_0 , p_1 и p_2 полинома (1).

5) Найдя значение A_{10D} из уравнения (16), через него выражаются угол η из (15) и расстояние q_D из (13):

$$\eta = \arcsin \sqrt{1 - \alpha^2 \left(2 - \frac{R_2 \cos \delta}{r_D A_{10D}}\right)^2}, \quad q_D = r_D - \frac{\alpha R_2 \cos \eta}{\left(\cos \eta - 2\alpha\right)}.$$
(17)

6) Нужно выполнить проверку найденных параметров – подставить их в (4) - (6) и убедиться, что n_{10} , n_{20} и n_{30} соответствуют правильным. Если нет, то нужно брать следующее найденное решение A_{10D} уравнения (16), подставить его в (17) и еще раз проверить решение.

7) Коэффициент p_3 и радиус кривизны штрихов R_g при этом получаются произвольными. Чтобы приблизиться к правильному коэффициенту p_3 , нужно проделать шаги 1) – 6), оставив постоянными γ и p_D , но варьируя r_C .

Исходя из физического смысла A_{10D} , наиболее ценными являются решения с малым его значением – для получения большой ширины решетки не потребуется слишком большая апертура вспомогательного зеркала. Большая кривизна штрихов (малый R_g) свидетельствует о том, что расстояние r_{Dv} слишком мало (формула (9), вертикальный фокус пучка находится слишком близко к поверхности будущей решетки, r_C задается в разумных пределах и слишком малым оказаться не может), а значит, высота решетки будет мала. Поэтому

8) Чтобы найти наилучшее решение, нужно перебрать всю допустимую область двумерного пространства параметров γ и p_D , проделывая шаги 1) – 7). Если наилучшее решение дает сильно отличающийся от нужного коэффициент p_3 , то необходимо изменить радиус R_2 вспомогательного зеркала М.

Если получившееся решение удовлетворительно (p_i совпадают, радиус кривизны штриха достаточно большой, ширина и высота решетки не меньше требуемой), то его следует проверить с помощью лучевого приближения. В силу того, что теория, изложенная в [84], имеет приближенный характер, точные коэффициенты полинома (1), вычисленные с применением лучевого приближения, могут значительно отличаться от тех, что получаются из (2), (4) – (7). Радиус кривизны штрихов в лучевом приближении и в выражении (9), как правило, с высокой точностью совпадают. В случае, когда лучевое приближение дает сильное отличие p_i от требуемых, необходимо искать точное решение с помощью оптимизации схемы записи.

1.2 Поиск точного решения – численная трассировка лучей и оптимизация

Для проведения численной трассировки лучей производится моделирование схемы записи. По найденным параметрам схемы записи рассчитываются координаты точек С и D, точки пересечения центрального луча с поверхностью зеркала М и положения центра кривизны этого зеркала. Начало отсчета системы координат совпадает с центром апертуры решетки, ось x проходит по центральной нормали к решетке, ось z касается центрального штриха, ось y направлена ортогонально x и z. Если решетка сферическая, то задается радиус-вектор ее центра кривизны.

Сначала рассчитывается оптический путь для лучей, исходящих из точки D. Из расстояния p_D угла падения η и апертуры зеркала вычисляются минимальный и максимальный углы φ и θ (вводится сферическая система координат r, φ , θ , и в ней задается направляющий вектор луча). Между крайними положениями лучей создается равномерная по углам φ и θ сетка (~ 100 по горизонтали и ~ 25 по вертикали). Для каждого луча вычисляется точка пересечения луча с поверхностью зеркала, рассчитывается направление отражения и решается задача о пересечении отраженного луча с поверхностью заготовки решетки. Вычисляется сумма длин путей "точка D – зеркало M" и "зеркало M – заготовка". Точка падения луча на заготовку соединяется с точкой C, вычисляется расстояние между этими точками, которое равно длине пути для луча, исходящего из точки C и падающего в ту же точку заготовки. Это расстояние вычитается из суммы длин, давая в результате разность хода лучей. Разность хода, деленная на длину волны, равна номеру интерференционной полосы – а следовательно, с точностью до прибавления константы, номеру штриха будущей решетки. Номер штриха решетки аппроксимируется следующим двумерным полиномом в координатах *у, z*:

$$N(y,z) = \begin{pmatrix} 1 & y^{1} & y^{2} & y^{3} & y^{4} & y^{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{00} & N_{02} & N_{04} \\ N_{10} & N_{12} & N_{14} \\ N_{20} & N_{22} & N_{24} \\ N_{30} & N_{32} & N_{34} \\ N_{40} & N_{42} & N_{44} \\ N_{50} & N_{52} & N_{54} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ z^{2} \\ z^{4} \end{pmatrix},$$
(18)

где элементы *N_{ij}* матрицы вычисляются с помощью метода наименьших квадратов. Частота штрихов – это производная номера штриха по координатам, поэтому полином (1) – вычисляется из (18) следующим образом:

$$p(y) = \frac{\partial N(y, z = 0)}{\partial y} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2y & 3y^2 & 4y^3 & 5y^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{00} & N_{02} & N_{04} \\ N_{10} & N_{12} & N_{14} \\ N_{20} & N_{22} & N_{24} \\ N_{30} & N_{32} & N_{34} \\ N_{40} & N_{42} & N_{44} \\ N_{50} & N_{52} & N_{54} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0^2 \\ 0^4 \end{pmatrix} =$$

$$= N_{10} + 2N_{20}y + 3N_{30}y^{2} + 4N_{40}y^{3} + 5N_{50}y^{4} = p_{0} + p_{1}y + p_{2}y^{2} + p_{3}y^{3} + p_{4}y^{4},$$
(19)

а радиус кривизны штрихов – следующим:

$$N(y,z) = N_{00} + N_{10}y + N_{02}z^{2} + ... \approx \text{const} + N_{10}\left(y - \frac{z^{2}}{2R_{g}}\right) \Longrightarrow R_{g} \approx -\frac{N_{10}}{2N_{02}}.$$
 (20)

Для проведения окончательной проверки получившейся схемы записи необходимо проверить решетку в схеме прибора, для которого будет изготавливаться решетка. Для точного моделирования этой решетки и ее аберраций при проведении трассировке лучей целесообразно пользоваться всей матрицей *N*_{*ij*}.

Однако вычисление коэффициентов этой матрицы – времязатратный процесс, поэтому данную процедуру следует проводить лишь после оптимизации схемы записи. Во время проведения оптимизации достаточно проводить трассировку лучей в схеме записи лишь в плоскости z = 0 (в которой лежат точечные источники, центры элементов, центральные лучи и центры кривизны зеркала и решетки). Радиус кривизны штрихов при этом нужно оценивать аналитически по формуле (9). Из всех коэффициентов матрицы нужно будет вычислять лишь первый ее столбец N_{i0} . Производить оптимизацию методом градиентного спуска не представляется возможным, так как вычисление градиента с помощь трассировки лучей будет слишком медленным.

Введем обозначения: p(y) – требуемая зависимость частоты штрихов от координаты *y*, W – требуемая ширина решетки, H – требуемая высота решетки, $p^*(y)$ – полученная с помощью трассировки лучей зависимость частоты штрихов от *y*, y_{\min} – наименьшая *y*-координата точки падения луча на заготовку, y_{\max} – наибольшая *y*-координата точки падения луча на заготовку, Δz – высота решетки, получающаяся в текущей схеме записи. Δz оценивается по формуле:

$$\Delta z \approx H_{\rm M} \, \frac{R_{Dv}}{R_{Dv} - q_D},\tag{21}$$

где *H*_M – высота зеркала М. Оптимизация основана на минимизации следующего функционала:

$$F = \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \left(p\left(y\right) - p^{*}\left(y\right) \right)^{2} \exp\left(-\frac{y^{2}}{2\sigma_{y}^{2}}\right) dy + C_{curve} \exp\left(-\frac{|R_{g}|}{r}\right) + \left\{ \begin{array}{l} 0, \ y_{\max} - y_{\min} > W, \\ C_{W} \left[\exp\left(\frac{W - \left(y_{\max} - y_{\min}\right)}{W}\right) - 1 \right], \ y_{\max} - y_{\min} < W; \\ + \left\{ \begin{array}{l} 0, \ z_{\max} - z_{\min} > H, \\ C_{H} \left[\exp\left(\frac{H - \Delta z}{h}\right) - 1 \right], \Delta z < H; \end{array} \right\} \text{ min }.$$

$$(22)$$

Первое слагаемое отвечает за точность аппроксимации требуемой частоты штрихов частотой интерференционных полос. Гауссов весовой фактор усиливает вклад центральной части апертуры решетки и ослабляет вклад в функционал от ее краев. Второе слагаемое отвечает за спрямление штрихов, увеличивая радиус кривизны R_g , а третье и четвертое призваны увеличивать ширину и высоту решетки в тех случаях, когда апертура решетки согласно трассировке лучей (ширина $y_{max} - y_{min}$ и высота Δz) меньше, чем требуемая апертура (ширина W и высота H). Коэффициенты σ_y , C_{curve} , r, C_W и C_H – параметры оптимизации. σ_y задается порядка W, $r \sim 1000$ мм, C_{curve} в пределах 500 – 2000, C_W и $C_H \sim 1$, w и $h \sim 1$ мм.

Оптимизацию можно проводить методами, не требующими вычисления градиента, например, симплекс-методом или методом покоординатного спуска. При этом нужно иметь в виду, что γ и δ – не являются независимыми переменными, а жестко связанные условием δ = arcsin (n_{10} + sin γ), поскольку разность их синусов определяет частоту штрихов в центре апертуры решетки, что дает основной вклад в функционал (22) и из-за чего их раздельное изменение в процессе оптимизации невозможно.

По аналогии с разрешающей способностью λ/δλ вводится величина, характеризующая качество решетки *р*/Δ*p*, которая вычисляется следующим образом:

$$\frac{p}{\Delta p} = \min_{y} \left(\frac{p(y)}{\left| p(y) - p^*(y) \right|} \right).$$
(23)

Для решеток, используемых в схемах высокого разрешения, $p/\Delta p$ должна быть не меньше расчетной разрешающей способности прибора. Но окончательно определить насколько подходящей является найденная схема записи для изготовления конкретной VLS-решетки можно только с помощью моделирования схемы прибора в лучевом приближении, при котором положение штрихов решетки задается с помощью матрицы N_{ij} .

Следует заметить, что одной и той же интерференционно-литографической решетке можно сопоставить любую из следующих четырех матриц *N*_{*ij*}:

$$\begin{pmatrix} \operatorname{const} & N_{02} & N_{04} \\ N_{10} & N_{12} & N_{14} \\ N_{20} & N_{22} & N_{24} \\ N_{30} & N_{32} & N_{34} \\ N_{40} & N_{42} & N_{44} \\ N_{50} & N_{52} & N_{54} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \operatorname{const} & -N_{02} & -N_{04} \\ -N_{10} & -N_{12} & -N_{14} \\ -N_{20} & -N_{22} & -N_{24} \\ -N_{30} & -N_{32} & -N_{34} \\ -N_{40} & -N_{42} & -N_{44} \\ -N_{50} & -N_{52} & -N_{54} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \operatorname{const} & -N_{02} & -N_{04} \\ -N_{30} & -N_{32} & -N_{34} \\ -N_{40} & -N_{42} & -N_{44} \\ -N_{50} & -N_{52} & -N_{54} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \operatorname{const} & -N_{02} & -N_{04} \\ N_{10} & N_{12} & N_{14} \\ -N_{20} & -N_{22} & -N_{24} \\ N_{30} & N_{32} & N_{34} \\ -N_{40} & -N_{42} & -N_{24} \\ N_{30} & N_{32} & N_{34} \\ -N_{40} & -N_{42} & -N_{44} \\ N_{50} & N_{52} & N_{54} \end{pmatrix}.$$

$$(24)$$

Первые две матрицы отличаются только нумерацией штрихов (номер штриха возрастает не слева направо, а справа налево): N(y,z) меняется на – N(y,z) + const, само положение штрихов при этом остается таким же. Третья матрица описывает ту же самую решетку, повернутую на угол 180° вокруг ее центральной нормали, а четвертая эквивалентна третьей с изменением направления нумерации штрихов. Это значит, что следующие четыре полинома зависимости частоты штрихов от координаты у тоже описывают одну и ту же VLS-решетку:

$$p_{0} + p_{1}y + p_{2}y^{2} + p_{3}y^{3} + \dots, \quad -p_{0} - p_{1}y - p_{2}y^{2} - p_{3}y^{3} - \dots,$$

$$p_{0} - p_{1}y + p_{2}y^{2} - p_{3}y^{3} + \dots, -p_{0} + p_{1}y - p_{2}y^{2} + p_{3}y^{3} - \dots$$
(25)

Поэтому при нахождении схемы записи можно задавать коэффициенты полинома (1) четырьмя разными способами.

1.3 Пример решения "обратной" задачи – сферическая VLS-решетка для спектрографа скользящего падения с плоским полем

В процессе расчета оптической схемы спектрографа высокого разрешения скользящего падения с плоским полем для мягкой рентгеновской области спектра были найдены параметры сферической VLS-решетки: радиус решетки R = 6 м и следующие коэффициенты полинома (1):

$$p_0 = 1200 \text{ mm}^{-1}, p_1 = 8 \text{ mm}^{-2}, p_2 = 0.044 \text{ mm}^{-3}, p_3 = 2.28 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^{-4}.$$

Ширина решетки 50 мм (у от -25 мм до 25 мм), высота 18 мм. Изготавливать решетку предполагалось в НПО ГИПО (г. Казань), где для записи интерференционной картины используется вторая гармоника неодимового лазера $\lambda = 532$ нм. Из четырех способов задания коэффициентов полинома (1) для расчета схемы записи был выбран вариант с чередованием знаков: $p_0 = 1200 \text{ мm}^{-1}$, $p_1 = -8 \text{ мm}^{-2}$, $p_2 = 0.044 \text{ мm}^{-3}$, $p_3 = -2.28 \cdot 10^{-4} \text{ мm}^{-4}$.

Исходя из нескольких предварительных расчетов и ограничений по размерам голографического стола в ГИПО (схема записи не должна занимать расстояние больше 1 м) был выбран радиус кривизны зеркала М $R_2 = 0.5$ м. С помощью аналитического обращения "прямой" задачи была найдена начальная схема: $\gamma = -39.675^{\circ}$, $\delta = 0^{\circ}$, $r_C = 334$ мм, $p_D = 754$ мм, $q_D = 447.7$ мм, $\eta = 34.64^{\circ}$. Главным недостатком этой схемы являлась большая кривизна штрихов – $R_g = 33$ мм. После оптимизации методом покоординатного спуска кривизна штрихов уменьшилась почти в 20 раз – итоговый R_g составил 543 мм. Сравнение формы штрихов решетки до и после оптимизации схемы записи приведено на Рис. 2.



Рис. 2. Сравнение формы интерференционных полос (формы штрихов будущей VLSрешетки) в схеме записи до оптимизации (слева) и после оптимизации (справа). Кривизна штрихов значительно уменьшилась – R_g увеличился от ~ 32 мм до ~ 500 мм. Зависимость частоты штрихов от координаты $p^*(y)$ по-прежнему с высокой точностью соответствует требуемой p(y).

С помощью этой схемы записи в НПО ГИПО методом интерференционной литографии на длине волны 532 нм были изготовлены три сферические VLS-решетки на подложках диаметром 60 мм из плавленого кварца КУ-1. На получившийся в результате проявления фоторезиста рельеф было нанесено отражающее золотое покрытие. В ФИАНе частота штрихов этих решеток была измерена по дифракции излучения Не-Ne лазера ($\lambda = 632.8$ нм) в различных точках ее апертуры. Результаты измерения показывают, что для всех трех VLS-решеток получившаяся зависимость частоты штрихов от координаты у практически идеально совпадает с требуемой (Рис. 4).



Рис. 3. Схема записи, примененная для изготовления сферической (R = 6 м) VLSрешетки для спектрографа скользящего падения с плоским полем методом интерференционной литографии (длина волны 532 нм). С и D – точечные монохроматические источники, M – вспомогательное сферическое ($R_2 = 0.5$ м) зеркало G – подложка решетки с нанесенным слоем фоторезитса.



Рис. 4. Результаты измерения частоты штрихов одной из изготовленных в НПО ГИПО сферических VLS-решеток. а) – требуемая и измеренная частота штрихов. Оранжевая кривая – требуемая зависимость p(y), синие астериски – измеренное значение частоты в данной точке апертуры, красные астериски – границы погрешности измерения. б) – разность требуемой и измеренной частоты штрихов решетки.

1.4 Основные результаты главы 1.

В этой главе был описан метод расчета схемы записи с одним вспомогательным сферическим зеркалом, с помощью которой методом интерференционной литографии можно изготавливать сферические и плоские VLS-решетки с заданной зависимостью частоты штрихов от координаты p(y). Метод состоит из двух основных этапов – аналитического обращения "прямой" задачи интерференционной литографии, которое позволяет найти начальное приближение, и оптимизации, целевая функция для которой рассчитывается с помощью численной трассировки лучей.

С помощью данного метода нами была рассчитана схема записи для изготовления сферической VLS-решетки мягкого рентгеновского спектрографа с плоским полем. Схема была собрана в НПО ГИПО, где методом интерференционной литографии были изготовлены сферические VLS-решетки. Согласно результатам измерения, зависимости частоты штрихов от координаты p(y) изготовленных решеток совпадает с требуемой, что подтверждает правильность расчета схемы записи и применимость данного метода. Таким образом, была создана первая отечественная VLS-решетка с высокой точностью совпадения зависимости частоты штрихов от координаты с расчетной, что выводит отечественную технологию изготовления VLS-решеток на качественно новый уровень.

Основные результаты этой главы были доложены на конференциях [A3, A6, A7] и опубликованы в работе [Б4] и разделе 10.3 главы 10 монографии [В1] из списка публикаций автора, на которых основана данная работа. На основе метода решения обратной задачи был запатентован способ изготовления решетки [Г1].

Глава 2. Спектрограф скользящего падения с плоским полем для мягкого рентгеновского диапазона

Спектрограф скользящего падения на основе схемы Роуланда для мягкой рентгеновской области спектра не совместим с современным матричным ПЗС-детектором. Вследствие малых длин волн и малого скользящего угла падения φ излучение дифрагирует на решетке под малым скользящим углом ψ и под этим же углом ψ попадает на круг Роуланда. Если поместить детектор касательно к кругу Роуланда, то вследствие увеличенной в 1/sin ψ раз длины пути в мертвом слое детектора значительная часть излучения в нем поглотится, что приведет к потере сигнала (Рис. 5а). Если детектор ориентирован по нормали к падающему излучению, то спектральная область, в которой достижимо высокое разрешение, ограничится малой окрестностью длины волны, на которой дифрагированные лучи попадают в точку пересечения круга Роуланда с плоскостью детектора (Рис. 56).



Рис. 5. Варианты расположения матричного ПЗС-детектора на круге Роуланда в мягком рентгеновском диапазоне. S – входная щель, G – сферическая решетка, D – детектор, φ – скользящий угол падения на решетку, ψ – скользящий угол дифракции. a) – детектор расположен по касательной к кругу Роуланда, из-за чего после дифракции падает на детектор под скользящим углом ψ , проходя в мертвом слое детектора толщины *d* путь *d*/sin ψ . б) – детектор ориентирован по нормали к падающему на него излучению. Хорошая фокусировка и высокое разрешение наблюдаются лишь на длине волны λ_0 , а по мере удаления от нее расфокусировка быстро нарастает, ограничивая рабочий спектральный диапазон малой окрестностью λ_0 .

Если требуется широкий спектральный диапазон, но высокое разрешение необязательно, то можно, оставив классическую сферическую решетку с эквидистантными штрихами, поместить входную щель вовнутрь круга Роуланда, получая прямолинейный участок спектральной фокальной кривой, ориентированной почти по нормали к падающему на него излучению [85]. Но если требуется и высокое спектральное разрешение, и широкий диапазон, то необходимо не только изменить форму спектральной фокальной кривой, но еще и
минимизировать аберрации, что достигается заменой классической решетки на VLS-решетку. В этом и заключается концепция спектрографа скользящего падения с плоским полем. Впервые такой прибор был предложен Т. Харадой [26]. Приборы такого класса нашли широкое применение при решении большого количества задач спектроскопии мягкого рентгеновского диапазона. В настоящее время используется как сам спектрограф Харады, так и специализированные спектрографы скользящего падения с плоским полем, созданные для решения конкретных задач. В каждом случае требуется прибор со своими характеристиками – диапазоном, габаритами, разрешающей способностью, поэтому задача создания новых приборов этого класса по-прежнему является актуальной. Для ее решения необходимо владеть методами расчета оптической схемы спектрографа, параметров VLS-решетки и технологией изготовления VLS-решеток.

2.1 Фокусирующие свойства сферических VLS-решеток

Фокусирующие свойства вогнутой сферической (радиуса *R*) дифракционной решетки можно установить, воспользовавшись принципом Ферма. Пусть с решеткой связана следующая система координат: начало координат лежит в центре апертуры решетки, ось *z* сонаправлена с центральной нормалью решетки, ось *z* касается центрального штриха решетки в начале координат поперек центрального штриха. Плоскость *z* = 0 будем называть главной плоскостью. Пусть в главной плоскости расположен точечный источник A, и решетка строит его изображение на длине волны λ в порядке дифракции *m* в точке B (Рис. 6). Введем обозначения: расстояние AO равно *r*, расстояние OB равно *r'*, скользящий угол падения центрального луча равен φ , скользящий угол дифракции равен ψ . Пусть штрихи решетки в направлении *y*. Пусть точка P с координатами *x*, *y*, *z* лежит на штрихе решетки с номером $N_P = N(y,z)$. Координаты *y* и *z* являются независимыми переменными, а координата *x* однозначно определяется из уравнения поверхности решетки:

$$x(y,z) = R - \sqrt{R^2 - y^2 - z^2} .$$
(26)



Рис. 6. Сферическая дифракционная решетка, система координат и положение источника A и его изображения B на главной плоскости. Точка O – начало координат, точка P(x,y,z) лежит на штрихе с номером N_P . Расстояние AO = r, расстояние OB = r', φ и ψ – скользящие углы падения и дифракции, соответственно.

Оптический путь, проходящий через точку Р, имеет длину

$$F = AP + PB.$$
⁽²⁷⁾

Для того, чтобы точка В была изображением точки А на длине волны λ в порядке дифракции *m*, необходимо, чтобы при перемещении точки Р со штриха с номером $N_{\rm P}$ на штрих с номером $N_{\rm P}$ + 1 оптический путь *F* изменился бы ровно на *m* λ . Это условие эквивалентно выполнению следующих равенств:

$$\frac{\partial F}{\partial y} = m\lambda \frac{\partial N}{\partial y}, \quad \frac{\partial F}{\partial z} = m\lambda \frac{\partial N}{\partial z}.$$
(28)

В правой части равенств (28) стоят производные номера штриха по координате. Они измеряются в количестве штрихов решетки, приходящихся на единицу длины, и называются пространственной частотой штрихов.

Штрихи классической сферической решетки находятся на пересечении сферы с набором параллельных эквидистантных плоскостей. Эти плоскости ортогональны оси y, и расстояние между ними равно периоду решетки. Это значит, что каждый штрих решетки лежит в плоскости, параллельной плоскости y = 0, а значит, номер штриха N зависит только от координаты y – при перемещении точки P вдоль оси z номер штриха не меняется. В случае VLS-решетки плоскости по-прежнему параллельны, но расстояние между ними является функцией от координаты y. Понятие периода неприменимо к VLS-решетке и вместо него используется шаг решетки и обратная шагу величина – пространственная частота штрихов, которая зависит от y. Эту зависимость принято задавать в виде полинома (1). Принимая во

внимание эти рассуждения, можно записать равенства (28) для сферической VLS-решетки, которые примут следующий вид:

$$\frac{\partial F}{\partial y} = m\lambda \left(p_0 + p_1 y + p_2 y^2 + p_3 y^3 + \ldots \right), \tag{29}$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} = 0. \tag{30}$$

Оптический путь F = AP + PB выражается через r, r', φ, ψ, y и z:

$$AP = \sqrt{(r\cos\varphi + y)^{2} + z^{2} + (r\sin\varphi - x(y, z))^{2}},$$
(31)

$$PB = \sqrt{(r'\cos\psi - y)^2 + z^2 + (r'\sin\psi - x(y, z))^2}.$$
(32)

АР и РВ раскладываются в ряд Тейлора по степеням *y*, и *z* и подставляются в (29) и (30). Воспользовавшись разложением из работы Намиоки [86] и приведя подобные по *y* слагаемые в (29), получаем следующие равенства (предварительно приравняв *z* к нулю). При нулевой степени *y* получается уравнение дифракционной решетки:

$$\cos\varphi - \cos\psi = m\lambda p_0. \tag{33}$$

Отсюда следует, что коэффициент p_0 отвечает за дисперсию. При первой степени y – уравнение, связывающее угол падения, угол дифракции, расстояние r и расстояние r':

$$\frac{\sin^2 \varphi}{r} + \frac{\sin^2 \psi}{r'_h} - \frac{\sin \varphi + \sin \psi}{R} = m\lambda p_1.$$
(34)

В это уравнение входит коэффициент p_1 , поэтому он отвечает за расстояние до фокуса дифрагированного пучка при фиксированных r, λ , m, φ и ψ . Нижний индекс h у r' означает, что пучок будет сфокусирован лишь в горизонтальном направлении. Положение вертикального фокуса r'_v следует из (30) и почти всегда не совпадает с r'_h . Равенство при квадратичной степени у

$$-\frac{3}{2}\left[\frac{\cos\varphi}{r}\left(\frac{\sin^2\varphi}{r}-\frac{\sin\varphi}{R}\right)-\frac{\cos\psi}{r'_h}\left(\frac{\sin^2\psi}{r'_h}-\frac{\sin\psi}{R}\right)\right]=m\lambda p_2$$
(35)

задает условие компенсации меридиональной комы. В него входит коэффициент *p*₂. При кубической степени у из (29) следует равенство

$$2\left[\left(\frac{\cos\varphi}{r}\right)^{2}\left(\frac{\sin^{2}\varphi}{r}-\frac{\sin\varphi}{R}\right)+\left(\frac{\cos\psi}{r'_{h}}\right)^{2}\left(\frac{\sin^{2}\psi}{r'_{h}}-\frac{\sin\psi}{R}\right)\right]-\frac{1}{2r}\left(\frac{\sin^{2}\varphi}{r}-\frac{\sin\varphi}{R}\right)^{2}-\frac{1}{2r'_{h}}\left(\frac{\sin^{2}\psi}{r'_{h}}-\frac{\sin\psi}{R}\right)^{2}+\frac{1}{2R^{2}}\left(\frac{1}{r}+\frac{1}{r'_{h}}-\frac{\sin\varphi+\sin\psi}{R}\right)=m\lambda p_{3},$$
(36)

задающее условие компенсации сферической аберрации, в которое входит коэффициент рз.

Аналогичным образом из (30) при первой степени *z* получается уравнение, задающее положение вертикального фокуса:

$$\frac{1}{r} + \frac{1}{r_{v}'} - \frac{\sin \varphi + \sin \psi}{R} = 0.$$
(37)

Из уравнения (37) следует, что в схеме скользящего падения сферическая решетка не будет фокусировать дифрагированные пучки в вертикальном направлении ($r'_v < 0$, что соответствует мнимому фокусу, то есть расходящемуся пучку).

Система из уравнений (33) и (34) будет задавать положение точки В при заданном положении точки А, длине волны λ и порядке дифракции *m*. Если зафиксировать точку А, и меняя произведение $m\lambda$, отслеживать ее спектральное изображение – точку В, то точка В прочертит на главной плоскости кривую, которая называется спектральной (горизонтальной) фокальной кривой. Аналогичным образом из системы уравнений (33) и (37) получается пространственная (вертикальная) фокальная кривая.

Исходя из вида уравнений (33) – (36) можно сделать несколько выводов. Во-первых, видно, что VLS-коэффициенты p_0 , p_1 , p_2 , p_3 подбираются под оптическую схему с заданными r, φ , r', R и заданным диапазоном длин волн. По этой причине VLS-решетка в отличие от классической решетки является узкоспециализированной. Во-первых, меридиональная кома и сферическая аберрация могут быть строго скомпенсированы лишь на одной длине волны. По мере удаления от нее эти аберрации будут постепенно нарастать. В-третьих, в левой части этих формул фигурируют функции от геометрических параметров оптической схемы, а в правой – произведение $m\lambda p_i$. Отсюда следует, что если увеличить все коэффициенты в n раз и одновременно уменьшить в n раз длину волны, то положение фокуса, а также степень скомпенсированности меридиональной комы и сферической аберрации не изменится – сохранится вид спектрального изображения и его положение относительно решетки, но поменяется длина волны, ему соответствующая. Этот факт открывает возможность использовать одну и ту же геометрию оптической схемы спектрального прибора для работы в других диапазонах длин волн – для этого нужна решетка с кратно увеличенными или уменьшенными VLS-коэффициентами p_i . Но такой подход не всегда возможен и не всегда оптимален – для продвижения в более коротковолновые диапазоны нужно уменьшать скользящий угол падения φ для поддержания коэффициента отражения материала решетки на достаточном уровне. А для более длинноволновых диапазонов лучше будет схема с большим скользящим углом φ .

При нулевых значениях коэффициентов p_1 , p_2 , и p_3 формулы (33) – (37) описывают классическую сферическую дифракционную решетку. Если сгруппировать слагаемые в (34), содержащие φ и *r* в скобку и аналогичным образом сгруппировать слагаемые, содержащие ψ и r'_h , а после потребовать, чтобы каждая скобка равнялась нулю, то есть:

$$\left(\frac{\sin^2\varphi}{r} - \frac{\sin\varphi}{R}\right) + \left(\frac{\sin^2\psi}{r'_h} - \frac{\sin\psi}{R}\right) = 0, \quad \frac{\sin^2\varphi}{r} - \frac{\sin\varphi}{R} = 0, \quad \frac{\sin^2\psi}{r'_h} - \frac{\sin\psi}{R} = 0$$

$$\Rightarrow r = R\sin\varphi, \quad r'_h = R\sin\psi.$$
(38)

Последние равенства (38) описывают положение точек A и B на круге Роуланда. Если подставить их в (34), то легко убедиться, что меридиональная кома при $p_2 = 0$ полностью скомпенсирована. В выражении (36) все скобки, кроме последней, также зануляются, что означает, что сферическая аберрация на круге Роуланда для классической решетки невелика. Таким образом, с точки зрения компенсации аберраций, круг Роуланда является конфигурацией применения классической дифракционной решетки.

Также следует отметить, что формулы (33) – (37) будут справедливы для плоской VLSрешетки, если *R* в них устремить к бесконечности. Если положить $p_i = 0$ (*i* от 0 до 3), то из (34) следует, что $\varphi = \psi$ – формулы (33) – (37) будут описывать сферическое зеркало.

Удачно рассчитанную схему можно в случае необходимости привести к другому масштабу – все линейные размеры (r, r'_h, r'_v, R) в схеме кратно друг другу изменятся, а все углы останутся прежними. К примеру, нужно увеличить все расстояния в оптической схеме прибора в два раза. Из уравнения дифракционной решетки следует, что при фиксированном угле падения угол дифракции зависит только от частоты штрихов в точке падения. Пусть в исходной схеме точка падения имела координату y, в измененной схеме она будет иметь координату 2 y. Но угол дифракции в соответствующей точке должен сохраниться, это значит, что частота штрихов в точке 2 y в новой схеме. Но для этого необходимо, чтобы коэффициенты полинома изменились следующим образом: p_0 остался прежним, p_1 уменьшился в 2 раза, p_2 уменьшился в $2^2 = 4$ раза, $p_3 - в 2^3 = 8$ раз. Спектральное

изображение на фиксированной длине волны при этом увеличит свои линейные размеры в те же самые два раза.

2.2 Расчет оптической схемы спектрографа с плоским полем и коэффициентов VLSрешетки

Спектрограф скользящего падения с плоским полем – это спектральный прибор, в котором спектр фокусируется на плоскости, на которую излучение падает под малым углом (не более 20°) от нормали. Схема прибора включает в себя входную щель, сферическую VLSрешетку и детектор, в качестве которого часто применяется ПЗС-матрица (Рис. 7). Поскольку сферическая решетка при скользящем падении не фокусирует дифрагированный пучок в вертикальном направлении, то без дополнительных скрещенных элементов спектральные изображения, построенные схемой, будут астигматическими.



Рис. 7. Оптическая схема спектрографа скользящего падения с плоским полем и ее параметры. S – входная щель, G – сферическая VLS-решетка, D – детектор. φ – скользящий угол падения, r – расстояние от щели до центра решетки вдоль центрального луча, L – расстояние от центра решетки до точки пересечения плоскости детектора с осью y, δ – угол наклона плоскости детектора относительно плоскости y = L. λ_{min} и λ_{max} соответствуют границам расчетного спектрального диапазона, λ_0 – длина волны, на которой скомпенсированы меридиональная кома и сферическая аберрация.

Для расчета параметров оптической схемы прибора был разработан алгоритм, состоящий из двух частей. В первой части приближенно задаются расчетный спектральный диапазон, радиус решетки *R*, влияющий на габариты прибора, и требуемое разрешение. Отсюда, исходя из

коротковолновой границы диапазона, находится скользящий угол падения φ , а из диапазона и разрешающей способности – коэффициент p_0 . Далее выбирается расстояние r от входной щели до центра решетки, которое обычно приближенно равно половине длины прибора. Когда r, φ , R и p_0 заданы, с помощью системы уравнений (33) и (34) производится построение спектральной фокальной кривой $r'_h(\psi)$. При этом подбирается такой коэффициент p_1 , при котором на спектральной фокальной кривой появляется прямолинейный участок, ориентированный почти нормально к приходящим на него от решетки лучам (Рис. 8). Положение этого участка можно менять, согласованно варьируя r и p_1 .



Рис. 8. Характерное поведение спектральной фокальной кривой сферической VLS-решетки при вариации VLS-коэффициента p_1 . Решетка расположена в начале координат, R = 2 м, r = 130 мм, $\varphi = 4^{\circ}$, $p_0 = 1200$ мм⁻¹. Лучи с подписанными значениями $m\lambda$ соответствуют направлениям дифракции излучения с таким значением $m\lambda$. Чем больше p_1 , тем ближе фокальная кривая к центру решетки. При определенном значении p_1 на кривой появляется прямолинейный участок, ориентированный почти ортогонально дифрагированным лучам – при данных параметрах схемы при $p_1 \sim 16.5$ мм⁻² для диапазона 90 – 250 Å в первом порядке дифракции.

Если спектральный диапазон, соответствующий этому участку не совпадает с требуемым, то нужно пропорционально друг другу варьировать коэффициенты p_0 и p_1 таким образом, чтобы весь предполагаемый диапазон длин волн или (если отношение

предполагаемых границ диапазона $\lambda_{max}/\lambda_{min}$ очень велико) хотя бы значительная его часть соответствовала этому прямолинейному участку. При такой вариации форма спектральной фокальной кривой и ее положение в пространстве не изменятся. Получив прямолинейный участок в интересующем диапазоне длин волн, вычисляется наилучшее положение детектора, соответствующее этому участку (с помощью метода наименьших квадратов или минимизацией наибольшего отклонения между спектральной фокальной кривой и сечением плоскости детектора главной плоскостью решетки). После этого становятся известными параметры δ и *L* (см. Рис. 7). Из центра спектрального диапазона выбирается длина волны λ_0 , на которой компенсируются меридиональная кома и сферическая аберрация с помощью коэффициентов p_2 и p_3 , вычисленных из формул (35) и (36). Результаты будут лучше, если в качестве r'_h в этих формулах подставлять не расстояние от решетки до горизонтального фокуса пучка на длине волны λ_0 , а расстояние от центра решетки до пересечения центрального луча данной длины волны с плоскостью детектора. Кроме λ_0 целесообразно выбрать еще несколько длин волн, на которых с помощью численной трассировки лучей можно проверить оптимизацию прибора во всем расчетном диапазоне. Лучше всего в качестве "контрольных" длин волн выбрать:

1) Точки пересечения спектральной фокальной кривой с плоскостью детектора – длины волн фокусировки λ_{f1} , λ_{f2} и λ_{f3} . Иногда λ_{f2} совпадает с λ_0 .

2) Длины волн с наибольшим расстоянием от горизонтального фокуса до плоскости детектора – длины волн расфокусировки λ_{d1} и λ_{d2} .

 Длины волн, соответствующие границам спектрального диапазона λ_{min} и λ_{max}. Как правило, они являются длинами волн расфокусировки и на них наблюдается наименьшая степень скомпенсированности аберраций.

Пример расположения спектральной фокальной кривой, плоскости детектора и выбора "контрольных" длин волн представлен на Рис. 9. На выборе "контрольных" длин волн первая часть метода завершается.

Вторая часть метода требует расчета спектральных изображений центральной точки входной щели с помощью численной трассировки лучей. Сначала на длине волны λ_0 проверяются найденные аналитически p_2 и p_3 , которые при необходимости варьируются. Если ширина изображения укладывается в две ячейки детектора, то далее следует проверить спектральные изображения на других "контрольных" длинах волн. Конечная цель – уменьшить спектральное изображение до размера двух ячеек ПЗС-детектора на всех длинах волн, кроме, может быть, краев диапазона. В этом случае спектральное разрешение достигнет своего практического предела, определяемого произведением обратной линейной дисперсии и удвоенного размера ячейки детектора.



Рис. 9. Пример расположения спектральной фокальной кривой (пунктирная линия) и плоскости детектора (оранжевая вертикальная прямая), а также связанный с ними выбор "контрольных" длин волн. Цифрами обозначены длины волн в ангстремах, соответствующие красным точкам. Контрольные длины волн: фокусировки – $\lambda_{f1} = 64$ Å, $\lambda_{f2} = 152$ Å, $\lambda_{f3} = 251$ Å; длины волн расфокусировки – $\lambda_{d1} = 90$ Å, $\lambda_{d2} = 201$ Å; границы диапазона – $\lambda_{min} = 50$ Å и $\lambda_{max} = 275$ Å. Масштаб по оси у значительно подробнее масштаба по оси *x*. Параметры схемы: R = 6 м, r = 252 мм, $\varphi = 3^{\circ}$, $p_0 = 1200$ мм⁻¹, $p_1 = 8$ мм⁻².

2.3 Результаты расчета оптической схемы спектрографа

С помощью приведенного в разделе 2.2 метода были рассчитаны следующие варианты спектрографа скользящего падения с плоским полем. Первый прибор – компактный, обладает длиной ~ 25 см и работает в диапазоне 90 – 250 Å. Второй вариант близок к первоначальному спектрографу Харады [26] и обладает длиной ~ 0.5 м. Изначальный расчетный диапазон составлял 50 – 200 Å, но построение спектральной фокальной кривой и трассировка лучей показали, что прибор может работать в более широком диапазоне 50 – 275 Å без потери разрешающей способности. Третий вариант – коротковолновый длиннофокусный прибор –

имеет габариты ~ 1.5 м и работает в диапазоне 20 – 110 Å. Расчетная разрешающая способность приборов, вычисленная исходя из удвоенного размера ячейки детектора, составляет ~ 390, ~ 850 и ~ 2400 соответственно. Параметры оптической схемы приборов приведены в Табл. 1.

Параметры		Вариант 1	Вариант 2	Вариант 3	
Длина, мм		250	502	1500	
	$\lambda_{ m min}$	90	50	20	
"Контрольные" λ_0		143 125		48	
длины волн, Å	$\lambda_{f1}, \lambda_{f2}, \lambda_{f3}$	95, 143, 221	64, 152, 251	25, 48, 99	
	$\lambda_{d1}, \lambda_{d2}$	111, 180	90, 200	33, 73	
	λ_{\max}	250	275	110	
Скользящий угол па,	дения φ , °	4	3	2	
Угол наклона плоскости детектора δ , °		4.7	0.0	0.0	
Скользящий угол дифракции $\psi_{\min} - \psi_{\max}$, °		9.3 – 14.6	7.0 – 12.9	6.0 - 13.3	
Угол падения излучения на детектор (от нормали), $\psi + \delta$, °		14.0 - 19.3	7.0 – 12.9	6.0 - 13.3	
<i>r</i> , MM		130.0	252.0	750.0	
<i>L</i> , мм		112.5	250.0	750.0	
Радиус решетки <i>R</i> , м	[2	6	30	
<i>p</i> ₀ , MM ⁻¹		1200	1200	2400	
p_1, MM^{-2}		16.55	8.00	5.63	
<i>р</i> ₂ , мм ⁻³		0.204	0.044	0.011	
$p_{3}, \times 10^{-4}$ мм $^{-4}$		25.00	2.28	0.19	
Апертура решетки, ширина ×		30×10	50×18	60×18	
высота, мм					
Средняя обратная линейная		14.14	5.58	0.90	
дисперсия, Å/мм					
Спектральное разрешение $\delta \lambda$, Å		0.37	0.15	0.02	
Разрешающая способность λ/δλ		390	850	2400	

Табл. 1	I. Па	раметры	оптической	схемы	спектрог	pad	bов
---------	--------------	---------	------------	-------	----------	-----	-----

Каждая из этих схем была рассчитана в двух вариантах – в астигматическом и изображающем. В случае изображающего прибора (Табл. 2, варианты 1a, 2a и 3a) перед решеткой помещалось скрещенное сферическое зеркало радиуса *R* (Рис. 10). Зеркало

отображало на детектор источник излучения, вынесенный за входную щель. Для минимизации аберраций, вносимых зеркалом в падающий на решетку пучок, оно располагалось так, чтобы источник находился на связанном с этим зеркалом круге Роуланда и таким образом, чтобы вертикальное изображение источника оказывалось на расстоянии ~ r'_h (то есть, от решетки до области "плоского фокального поля") от центра решетки.



Рис. 10. Изображающий вариант спектрографа скользящего падения с плоским полем. Длина оптического пути от источника до скрещенного сферического (радиуса *R*) зеркала M равна длине пути от зеркала M до детектора D (с точностью до нескольких миллиметров). Сумма длин путей от щели S до зеркала M и от зеркала M до VLS-решетки G равна *r*. Плоскость детектора наклонена на угол $\delta < 0$ от плоскости y = L. Источник находится на связанном с зеркалом круге Роуланда.

После дифракции положение вертикального фокуса изменяется (согласно формуле (37) вследствие сферической формы решетки) лишь незначительно – отличие этого расстояния от расстояния до вертикального фокуса падающего на решетку пучка не превышает 3 мм, что может быть скомпенсировано небольшой вариацией расстояния "источник – щель". Это означает, что форма вертикальной фокальной кривой почти совпадает с описанной вокруг центра решетки окружностью радиуса расстояния от центра решетки до вертикального фокуса падающего на нее пучка. По этой причине для изображающего варианта спектрографа выбирался на ~10% больший p_1 и рассматривался участок фокальной кривой, соответствующий тому же диапазону длин волн, но лежащий во втором порядке дифракции. Он имеет форму, близкую к дуге окружности, описанной вокруг центра решетки (Рис. 8 – фиолетовая кривая при $m\lambda$ от 18 до 50 нм). Чем больше расстояние от источника до щели, тем меньшей светосилой будет обладать прибор, и тем дальше друг от друга будут располагаться скрещенное зеркало и решетка. Поэтому целесообразно расположить их как можно ближе друг к другу. Минимально допустимое расстояние между ними составляет полусумму апертур зеркала и решетки плюс поправка на размер их крепления – 2 – 4 см. Путь центрального луча делится зеркалом на две равные части, откуда вычислялось расстояние "источник – щель". Скользящий угол падения на зеркало вычислялся из условия нахождения источника на связанном с зеркалом круге Роуланда (формула (38), предпоследнее равенство). Как показывает практика, мнимое изображение входной щели, создаваемое зеркалом, оказывается расстоянии, равном длине пути от щели до решетки (отличие от него заметно меньше 1 мм).

Метод расчета изображающих схем остается почти таким же. Сначала рассматривается схема без зеркала. Точечный источник располагается так, чтобы расстояние от него до решетки было равно *r*, а скользящий угол падения на решетку – φ . Строятся спектральные фокальные кривые, и с помощью подбора p_1 придается спектральной фокальной кривой форма дуги окружности. Рассчитывается наилучшее положение плоскости детектора, и выбираются "контрольные" длины волн. Количество этих длин волн отличается от количества, характерного для прямолинейного участка спектральной фокальной кривой. К этим длинам волн относятся $\lambda_{\min}, \lambda_{f1}, \lambda_0, \lambda_{f2}, \lambda_{max}$ (Рис. 11).

Далее выполняется численная трассировка лучей на длине волны λ_0 , компенсируются меридиональная кома и сферическая аберрация, подбирается оптимальная апертура решетки. Из-за более высоких значений VLS-коэффициентов, она, как правило, оказывается меньше, чем для прямолинейного участка спектральной фокальной кривой. Далее численная трассировка лучей на остальных "контрольных" длинах волн проверяет ширины спектральных изображений точечного источника во всем расчетном диапазоне. Здесь может потребоваться корректировка p_2 и p_3 , а если это не приводит к размеру изображения не более двух ячеек детектора, то уменьшается ширина решетки. Затем рассчитывается положение скрещенного зеркала и моделируется полная схема изображающего прибора в лучевом приближении – производится численная трассировка лучей на всех "контрольных" длинах волн. Для совпадения вертикального фокуса источника с горизонтальным фокусом входной щели варьируется расстояние от щели до источника. Параметры всех трех вариантов схем изображающих спектрографов с плоским полем приведены в Табл. 2.

Результаты численной трассировки лучей, полученные с помощью расширения ShadowVUI для XOP v 2.3, для варианта 1а приведены на Рис. 12 и Рис. 13. На рис. 12 показаны пространственные характеристики всех "контрольных" длин волн, а на Рис. 13 приведена линия $\lambda_0 = 170$ Å.

Параметры		Вариант 1а	Вариант 2а	Вариант За	
Длина, мм		234	456	1391	
	$\lambda_{ m min}$	90	50	20	
"Контрольные"	λ_0	170	162	73	
длины волн, А	$\lambda_{f1}, \lambda_{f2}$	116, 227	92, 239	33, 105	
	λ_{\max}	250	275	125	
Скользящий угол пад	дения φ , °	4	3	2	
Угол наклона	плоскости	-10.4	-14.5	-12.3	
детектора δ , °					
Скользящий угол	дифракции	12.6 - 20.4	9.4 - 21.2	7.0 - 12.9	
$\psi_{\min} - \psi_{\max}$, °					
Угол падения излучения на		2.2 - 9.0	-5.1 - 6.7	-5.3 - 0.6	
детектор (от нормали	и), $\psi + \delta$, °				
<i>г</i> , ММ		130.0	252.0	750.0	
<i>L</i> , мм		104.2	212.3	664.8	
Радиус решетки <i>R</i> , м		2	6	30	
<i>p</i> ₀ , MM ⁻¹		1200	1200	2400	
<i>p</i> ₁ , MM ⁻²		19.857	10.400	6.761	
$p_2, \text{ MM}^{-3}$		0.2751	0.0710	0.0149	
<i>р</i> ₃ , ×10 ⁻⁴ мм ⁻⁴		36.20	5.00	0.29	
Апертура решетки, ширина ×		30×10	10×18	10×18	
высота, мм					
Средняя обратная линейная		10.00	5.32	0.78	
дисперсия, Å/мм					
Спектральное разрешение $\delta \lambda$, Å		0.26	0.14	0.02	
Разрешающая способ	бность $\lambda/\delta\lambda$	650	1160	3600	

Табл. 2. Параметры изображающих модификаций спектрографов с плоским полем.



Рис. 11. Взаимное расположение спектральной фокальной кривой (синяя линия), вертикальной фокальной кривой (оранжевая линия), детектора (черная линия). Вертикальная фокальная кривая близка по форме к окружности радиуса ~ 103 мм (зеленая линия), расстояние от центра решетки до вертикального фокуса падающего на нее пучка – 105 мм. Красные лучи соответствуют направлениям дифракции с указанными "контрольными" длинами волн. Параметры схемы: R = 2 м, r = 130 мм, $\varphi = 3^\circ$, $p_0 = 1200$ мм⁻¹, $p_1 = 19.9$ мм⁻². Масштаб по оси *у* подробнее, чем по оси *х*.



Рис. 12. Изображения источника, помещенного на расчетном расстоянии от входной щели, на "контрольных" длинах волн (вариант 1а). Размер изображения в пространственном направлении не превосходит 26 мкм, что соответствует удвоенному размеру ячейки детектора.



Рис. 13. Изображения источника, помещенного на расчетном расстоянии от входной щели, на длине волны $\lambda_0 = 160$ Å (вариант 1а). Размер изображения как в спектральном, так и в пространственном направлении не превосходит 13 мкм – размера ячейки детектора.

Ширины изображения спектральных изображений для всех шести расчетных вариантов спектрографов, полученных методом численной трассировки лучей, собраны в Табл. 3. Для изображающих приборов в скобках указана ширина изображения в пространственном направлении. Ширины изображений указаны по основанию. Вклад дифракционной расходимости в ширину изображения мал по сравнению с аберрациями и составляет ~ 0.4 мкм.

"Контрольная" длина волны	Ширина изображения, мкм						
	Вариант 1	Вариант 2	Вариант 3	Вариант 1а	Вариант 2а	Вариант За	
$\lambda_{ m min}$	8	47	19	20 (9)	49 (10)	20 (16)	
λ_{f1}	6	18	4	10 (6)	33 (8)	11 (16)	
λ_{d1}	3	7	6	_	_	_	
λο	2	4	0.5				
λ_{f2}	2	10	0.5	28 (16)	20 (18)	5 (19)	
λ_{d2}	2	15	13	_	_	_	
λ_{f3}	10	6	3	_	_	_	
$\lambda_{ m max}$	19	16	19	47 (20)	32 (22)	21 (20)	

Табл. 3. Ширины спектральных изображений по основанию, полученные при моделировании оптических схем спектрографов (варианты 1 – 3 и 1а – 3а) в лучевом приближении.

Для экспериментальной реализации был выбран астигматический полуметровый вариант спектрографа с плоским полем (вариант 2). Он обладает относительно небольшими габаритами, высоким спектральным разрешением и рабочим спектральным диапазоном 50 – 275 Å. В этом диапазоне находятся линии ионов Li III, F V, F VI и F VII, которые относительно легко возбуждаются в лазерной плазме.

2.4 Испытание прибора в эксперименте

Ключевым элементом оптической схемы спектрографа с плоским полем (вариант 2) является сферическая VLS-решетка со следующими параметрами: R = 6 м, $p_0 = 1200$ мм⁻¹, $p_1 = 8$ мм⁻², $p_2 = 0.044$ мм⁻³ и $p_3 = 2.28 \times 10^{-4}$ мм⁻⁴. Апертура решетки: ширина у от – 25 до 25 мм, высота z от –9 до 9 мм. Для изготовления решетки методом интерференционной литографии была решена "обратная" задача интерференционной литографии – была рассчитана схема записи, формирующая в каждой точке апертуры такую частоту интерференционных полос, которая аппроксимирует требуемую частоту штрихов решетки в этой точке. Метод решения "обратной" задачи, а также схема записи и ее параметры приведены в Главе 1 настоящей работы.

Итоговая оценка схемы записи была произведена с помощью оценки работы интерференционной VLS-решетки в схеме прибора методом численной трассировки лучей. Поскольку ShadowVUI для XOP v. 2.3 не позволяет учесть влияние кривизны штриха, для трассировки лучей был разработан собственный программный код. Матрица N для литографической решетки имеет следующие элементы N_{ij} (выраженные в мм^{*i*+*j*}, *i* – целое число от 0 до 5, *j* – четное число от 0 до 5, *j* – четное число от 0 до 4):

$$N = \begin{pmatrix} 0 & -1.104 & 4.730 \times 10^{-6} \\ 1200.0 & -1.129 \times 10^{-2} & -5.060 \times 10^{-7} \\ 3.976 & -7.761 \times 10^{-5} & 3.249 \times 10^{-8} \\ 1.478 \times 10^{-2} & -8.438 \times 10^{-7} & 4.236 \times 10^{-9} \\ 8.633 \times 10^{-5} & -2.146 \times 10^{-10} & -6.643 \times 10^{-11} \\ 5.826 \times 10^{-7} & 3.808 \times 10^{-10} & -5.830 \times 10^{-12} \end{pmatrix}$$

В главной плоскости частота штрихов описывается полиномом (1), коэффициенты которого можно вычислить из матрицы *N* следующим образом:

$$p_i = (i+1)N_{i+1,0}.$$
(39)

Таким образом, решетка похожа на VLS-решетку со следующими коэффициентами: $p_0 = 1200.0 \text{ Mm}^{-1}$, $p_1 = 7.951 \text{ Mm}^{-2}$, $p_2 = 4.416 \times 10^{-2} \text{ Mm}^{-3}$, $p_3 = 34.532 \times 10^{-5} \text{ Mm}^{-4}$, что весьма близко к требуемым значениям. Разность требуемой частоты штрихов и получаемой в схеме записи частоты интерференционных полос не превышает 1.6 Mm^{-1} на апертуре у от -25 до + 25 Mm. Результаты трассировки лучей на "контрольных" длинах волн приведены на Рис. 14 - 21. Цвет точки зависит от *y*-координаты точки падения луча на решетку, что позволяет определить, вклад в изображение каждой части апертуры решетки. Из Рис. 16 - 21 следует, что если перекрыть часть апертуры решетки y > 20 Mm (убрать точки с цветом от оранжевого до красного), то ширина изображения составит порядка двух ячеек детектора – 26 Mkm. На левой части Рис. 16 - 21 для сравнения приведены результаты трассировки лучей, проведенные для исходной расчетной VLS-решетки. Видно, что радиус кривизны штрихов ~ 500 мм (см. выражение (20) Главы 1 раздела 1.3) приводит к уменьшению кривизны спектральных линий. Результаты трассировки лучей характеризуют найденную схему записи как подходящую. Она была собрана в НПО ГИПО (г. Казань).



Рис. 14. Спектральные изображения центральной точки входной щели, $\lambda = \lambda_{\min} = 50$ Å. a) – расчетная VLS-решетка, б) – литографическая решетка.



Рис. 15. Спектральные изображения центральной точки входной щели, $\lambda = \lambda_{f1} = 64$ Å. a) – расчетная VLS-решетка, б) – литографическая решетка.



Рис. 16. Спектральные изображения центральной точки входной щели, $\lambda = \lambda_{d1} = 90$ Å. a) – расчетная VLS-решетка, б) – литографическая решетка.



Рис. 17. Спектральные изображения центральной точки входной щели, $\lambda = \lambda_0 = 125$ Å. a) – расчетная VLS-решетка, б) – литографическая решетка.



Рис. 18. Спектральные изображения центральной точки входной щели, $\lambda = \lambda_{f2} = 152$ Å. a) – расчетная VLS-решетка, б) – литографическая решетка.



Рис. 19. Спектральные изображения центральной точки входной щели, $\lambda = \lambda_{d2} = 200$ Å. a) – расчетная VLS-решетка, б) – литографическая решетка.



Рис. 20. Спектральные изображения центральной точки входной щели, $\lambda = \lambda_{f3} = 251$ Å. a) – расчетная VLS-решетка, б) – литографическая решетка.



Рис. 21. Спектральные изображения центральной точки входной щели, $\lambda = \lambda_{max} = 275$ Å. a) – расчетная VLS-решетка, б) – литографическая решетка.

VLS-решетки были изготовлены на сферических (R = 6 м) подложках из плавленого кварца КУ-1 методом интерференционной литографии на длине волны 532 нм в НПО ГИПО. В

качестве отражающего покрытия на решетки был нанесен слой золота. Апертура решеток совпадает со всей площадью подложек и имеет диаметр 60 мм. Частота штрихов решеток была измерена в различных точках апертуры решеток по дифракции излучения Не-Ne лазера ($\lambda = 632.8$ нм). Результаты измерения показали идеальное совпадение полученной частоты штрихов с требуемой (см. Рис. 4) для всех трех решеток. Три решетки отличались глубиной профиля, которая была оценена, исходя из отношения интенсивностей первого и нулевого порядков дифракции излучения Не-Ne лазера. Глубина профиля составила ~ 23.7, ~ 19.3 и ~ 18.7 нм. Метод измерения частоты штрихов и глубины профиля по дифракции излучения в видимом диапазоне описан в Приложении 1. Для эксперимента была выбрана решетка с наибольшей глубиной профиля.

Элементы спектрографа были размещены на дюралюминиевой оптической плите длиной ~ 60 см (Рис. 22). Лазерная мишень расположена на вращающейся металлической платформе, расположенной в блоке мишени на расстоянии ~ 5 см от входной щели. Перед решеткой расположена апертурная диафрагма, отсекающая излучение, исходящее из щели и не попадающее на решетку. Решетка помещена на моторизованный поворотный столик, а детектор - на моторизованный линейный транслятор. Моторизованные высокоточные позиционеры фирмы Standa (Vicon) в вакуумном исполнении позволяют произвести окончательную юстировку прибора непосредственно при регистрации спектров лазерной плазмы. Предварительная юстировка спектрографа осуществлялась с использованием Не-Ne лазера. На Рис. 23 приведена фотография спектрографа, помещенного в вакуумную камеру ИКАР. Дополнительно между входной щелью и решеткой была размещена скрещенная щель, что позволяет получить невысокое пространственное разрешение лазерной плазмы. Скрещенная щель располагалась так, что отношение расстояний от нее до источника и до детектора соответствовало ~ 1/3. Также была добавлена светоизоляция детектора, а блок мишени закрыт металлической крышкой для устранения влияния электромагнитного импульса, возникающего в момент образования лазерной плазмы, на процесс считывания отсчетов ПЗС-матрицы.

В первом эксперименте был зарегистрирован спектр лазерной плазмы LiF. Спектр был получен за одиночный импульс Nd:YAG-лазера ($\lambda = 1064$ нм) с длительностью ~ 30 нс и полной энергией на мишени ~ 0.5 Дж. Ширина входной щели составляла 30 мкм, что при отображении решеткой дает одну ячейку детектора. Полученный спектр приведен на Рис. 24. На спектре видны линии ионов Li III, F V, F VI и F VII. Скрещенная щель не превращает спектрограф в изображающий прибор, но позволяет получить пространственную информацию об источнике.



Рис. 22. Размещение элементов спектрографа на оптической плите.



Рис. 23. Спектрограф скользящего падения с плоским полем, помещенный в вакуумную камеру ИКАР.



Рис. 24. Спектр лазерной плазмы LiF, полученный за один импульс Nd:YAG лазера (30 нс, 0.5 Дж, *λ* =1064 нм). Астериском обозначены неразрешенные группы линий. Плазма разлетается вверх. Уровень мишени соответствует наиболее ярким участкам спектральных линий. Вертикальной скобкой указан пространственный масштаб.

Разрешающую способность можно оценить с помощью критерия Релея – для этого нужно найти пару близких, но разрешающихся спектральных линий. Такие линии есть у иона F VII – 134.703 и 134.882 Å. Однако в эксперименте с мишенью LiF они перекрылись с расположенными рядом с ними линиями иона Li III, и их не удалось разрешить. В следующем эксперименте в качестве мишени был использован тефлон ($-C_2F_4-$)_n. В получившемся спектре линии разрешающей способности по этим линиям показывает, что она не менее 750, что согласуется с теоретической оценкой разрешающей способности, вычисленной из произведения обратной линейной дисперсии и удвоенного размера ячейки детектора (2×13 мкм), которая равна 870. Оцифровка участка спектра, полученная суммированием отсчетов детектора по десяти ячейкам вдоль спектральной линии, приведена на Рис. 25. Также разрешается пара линий иона F V 165.983 Å и 166.177 Å. Таким образом, прибор обладает высоким разрешением.



Рис. 26. Оцифровка участка спектра 133 – 138 Å, полученная суммированием отсчетов детектора вдоль спектральной линии. Видны разрешающиеся линии F VII 134.703 Å и 134.882 Å, расстояние меду которыми соответствует двум ячейкам детектора. Линия F VI имеет ширину на полувысоте около двух ячеек детектора. Значение разрешающей способности согласуется с теоретическим расчетным и составляет около 880.

2.5 Основные результаты главы 2

Разработан метод расчета оптической схемы спектрографа скользящего падения с плоским полем, основанный на сочетании аналитического подхода и численной трассировки лучей. Накоплен опыт расчета оптических схем приборов этого класса.

Создан и испытан в эксперименте первый отечественный спектрограф скользящего падения с плоским полем. Прибор обладает относительно компактными габаритами (~ 0.5 м) высоким спектральным разрешением и приемным углом ~ 0.6°, что обеспечивает высокий уровень сигнала. Рабочий диапазон прибора 50 – 275 Å, разрешающая способность ~ 800.

Объединение метода расчета оптической схемы прибора, метода решения "обратной" задачи интерференционной литографии и накопленного опыта позволило составить полный цикл разработки приборов такого класса. Блок-схема цикла разработки приведена на Рис. 27.



Рис. 27. Блок-схема цикла разработки спектрографов скользящего падения с плоским полем.

В цикл разработки включены все этапы – от расчета оптической схемы прибора до его испытания. Также учтены возможные обратные связи. Например, если схема записи была собрана изготовителем неточно, и зависимость частоты штрихов от координаты не совпадает с расчетной, то не всегда обязательно изготавливать новую решетку – часто можно изменить схему спектрографа под получившуюся решетку без существенного ухудшения спектрального разрешения. Таким образом, создан и испытан на практике мощный инструмент проектирования спектральных приборов этого класса.

Основные результаты текущей главы доложены на конференциях [A1 – A3, A5 – A7], опубликованы в работах [Б1, Б3, Б4, Б5], а также в главе 7 (раздел 7.2) монографии В1 из списка публикаций автора, на которых основана настоящая работа.

Глава 3. Широкополосный изображающий спектрограф нормального падения для вакуумной ультрафиолетовой области спектра

В более длинноволновых диапазонах ($\lambda > 300$ Å) коэффициенты отражения большинства материалов при нормальном падении становятся больше, открывая возможность применять сферическую дифракционную решетку в схеме нормального падения. Схемы нормального падения обладают рядом преимуществ перед схемами скользящего падения. Во-первых, оптический элемент при нормальном падении захватывает больший телесный угол. Во-вторых, аберрации, которые вносятся в пучок из-за сферической формы поверхности оптического элемента, невелики, что позволяет использовать полную его апертуру, которая, как правило, меньше оптимальной. Отсюда следует, что оптимальное значение VLS-коэффициентов *p*₂ и *p*₃ почти не отличается от нуля. В-третьих, величина астигматизма при нормальном падении тоже невелика. Из этого следует, что на основе сферической дифракционной решетки при нормальном падении излучения на нее, можно строить спектральные изображения источника с высоким пространственным разрешением, не включая в оптическую схему других оптических элементов. В данной главе будут рассматриваться схемы спектрографов на основе одной сферической VLS-решетки сферической или одной решетки с эквидистантными криволинейными штрихами, которые отображают точку входной щели в точку на поверхности детектора и обладают широким рабочим спектральным диапазоном.

3.1 Сферическая решетка в схеме нормального падения

Рассмотрим сферическую VLS-решетку. Перейдем от скользящих углов падения и дифракции *φ* и *ψ* к нормальным углам *α* и *β*:

$$\alpha = 90^{\circ} - \varphi, \ \beta = \psi - 90^{\circ} \implies \cos \varphi = \sin \alpha, \ \cos \psi = -\sin \beta,$$

$$\sin \varphi = \cos \alpha, \ \sin \psi = \cos \beta.$$
(40)

Тогда уравнение дифракционной решетки (33), уравнение на горизонтальный фокус (34) и уравнение на вертикальный фокус (37) примут вид:

$$\sin\alpha + \sin\beta = m\lambda p_0,\tag{41}$$

$$\frac{\cos^2 \alpha}{r} + \frac{\cos^2 \beta}{r'_h} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta}{R} = m\lambda p_1, \tag{42}$$

$$\frac{1}{r} + \frac{1}{r_v'} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta}{R} = 0.$$
 (43)

Перепишем (43) следующим образом:

$$\left(\frac{1}{r} - \frac{\cos\alpha}{R}\right) + \left(\frac{1}{r_v'} - \frac{\cos\beta}{R}\right) = 0$$
(44)

и приравняем к нулю каждую из этих скобок. Отсюда следует:

$$r = \frac{R}{\cos \alpha}, \quad r_{\nu}' = \frac{R}{\cos \beta}.$$
(45)

Равенства (45) описывают ситуацию, когда и точечный источник A, и его спектральное изображение B лежат на прямой, касающейся круга Роуланда в центре кривизны поверхности решетки, иначе говоря, на построении Сиркса. Такое расположение источника и его вертикального изображения уникально. Если мысленно дополнить поверхность решетки до полной сферы, то несложно убедиться, что

1) штрихи сферической решетки являются параллелями данной сферы (поскольку штрихи дифракционной решетки находятся на пересечении поверхности решетки с набором параллельных плоскостей);

2) построение Сиркса проходит через оба ее полюса;

3) поворот решетки на произвольный угол вокруг построения Сиркса не меняет положения штрихов решетки, следовательно – не меняет и направление дифракции луча, исходящего из точки построения Сиркса;

4) угол между падающим из точки построения Сиркса лучом и касательной прямой к штриху решетки в точке падения всегда равен 90°. При дифракции этот угол остается неизменным, поэтому равным 90°. Это значит, что падающий и дифрагированный луч всегда лежат в одной плоскости, ортогональной касательной к штриху прямой. Но плоскость, ортогональная касательной к сфере прямой всегда проходит через ее центр. Это значит, что в этой плоскости лежат центр сферы и точка А, находящаяся на построении Сиркса. Построение Сиркса проходит через обе этих точки, поэтому лежит в данной плоскости. Поэтому дифрагированный луч обречен пересечь построение Сиркса.

Все это означает, что построение Сиркса совпадает с осью симметрии сферической дифракционной решетки. Любой луч, выходящий из точки на оси симметрии, после дифракции обязательно на нее вернется. Значит, в лучевом приближении изображением точки А, лежащей на оси симметрии, будет бесконечно тонкий отрезок, лежащий на этой оси. Его толщина не зависит от высоты решетки, что говорит о полном отсутствии аберраций. На самом деле толщина этого отрезка будет определяться дифракционной расходимостью, которая тем меньше, чем большая высота решетки была задействована. Таким образом, вертикальное изображение точки А, лежащее на оси симметрии, обладает дифракционным качеством. Это замечательное свойство сферической решетки с прямолинейными штрихами можно использовать для построения спектральных изображений входной щели с высоким пространственным разрешением. Для этого нужно с помощью коэффициента p₁ изменить форму спектральной фокальной кривой так, чтобы она пересекала ось симметрии в двух точках. Чем ближе точки будут находиться друг к другу, тем большим спектральным разрешением будет обладать прибор, но тем меньшей будет ширина рабочего спектрального диапазона. Таким образом, при расчете оптической схемы нужно искать компромисс между шириной диапазона и разрешающей способностью. Впервые такой подход применил Т. Харада в 1998 г. [28]. Одной из целей данной работы является охват всех возможных вариантов оптической схемы и расчет спектрографа для диапазона шириной около октавы с центральной длиной волны *λ*₀ ~ 1200 Å.

Существует альтернативная возможность добиться компенсации. Она заключается в использовании эквидистантной решетки с криволинейными штрихами в схеме Роуланда. Частный случай, в котором можно добиться компенсации в окрестности одной длины волны описан в работе Герасимова [87], более общий случай предполагает компенсацию астигматизма в широком спектральном диапазоне [88]. В этом случае положение точки А (центра входной щели) и ее изображения В задается выражениями:

$$r = R\cos\alpha, \ r'_h = R\cos\beta, \tag{46}$$

а форма вертикальной фокальной кривой изменяется с помощью кривизны штрихов. Для получения уравнения вертикальной фокальной кривой нужно вернуться ко второму равенству (28):

$$\frac{dF}{dz} = m\lambda \frac{dN}{dz} \,. \tag{47}$$

Пусть проекции эквидистантных штрихов решетки на плоскость x = 0 имеют форму окружностей радиуса R_{g_2} тогда номер штриха N(y,z) можно представить в следующем виде:

$$N(y,z) \approx p_0 \left(y - \frac{z^2}{2R_g} \right). \tag{48}$$

Тогда (47) примет вид:

$$\frac{dF}{dz} = -m\lambda p_0 \frac{z}{R_g}.$$
(49)

Уравнение вертикальной фокальной кривой, возникающее при первой степени *z* из разложения (49) в ряд Тейлора, в левой части содержит прежнее выражение, а правая часть изменится, то есть:

$$\frac{1}{r} + \frac{1}{r_v'} - \frac{\cos\alpha + \cos\beta}{R} = -\frac{m\lambda p_0}{R_g}.$$
(50)

Для получения формы вертикальной фокальной кривой, уравнение (50) нужно, как и ранее, рассматривать в системе с уравнением дифракционной решетки (41).

3.2 Способы компенсации астигматизма в широком спектральном диапазоне и достижимые при этом изображающие характеристики

Чтобы скомпенсировать астигматизм в широком спектральном диапазоне, нужно строго скомпенсировать его на двух длинах волн λ_1 и λ_2 . Тогда в спектральном интервале от λ_{\min} до λ_{\max} , содержащем в себе отрезок между этими двумя длинами волн, астигматизм не будет превышать двух ячеек детектора, и таким образом, на практике будет незаметен. Выполнение этого условия будем называть практическим стигматизмом в диапазоне от λ_{\min} до λ_{\max} . Рассмотрим схему, основанную на оси симметрии сферической VLS-решетки (Рис. 28). Условие компенсации стигматизма на двух длинах волн λ_1 и λ_2 означает, что на них расстояния от центра решетки до вертикального и горизонтального фокусов (расстояния r'_h и r'_v) будут равны. Это можно записать в виде системы, в которую войдут уравнения дифракционной решетки (41), уравнений для горизонтального фокусного расстояния (42) и вертикального фокусного расстояния при условии нахождения щели и детектора на оси симметрии (45):



Рис. 28. Схема широкополосного изображающего спектрографа на основе сферической VLSрешетки. S – входная щель, D – детектор, расположенные на оси симметрии решетки. C₁ – центр кривизны решетки, O – центр апертуры решетки. На углах дифракции β_1 и β_2 спектральная фокальная кривая пересекает ось симметрии. Вертикальный фокус находится на оси симметрии решетки, а следовательно – на поверхности детектора. Горизонтальная расфокусировка определяет разрешающую способность прибора и зависит от величины астигматической разности.

$$\begin{cases} \sin \alpha + \sin \beta_{1} = m\lambda_{1}p_{0}, \\ \frac{\cos^{2} \alpha}{r} + \frac{\cos^{2} \beta_{1}}{r_{h1}^{\prime}} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta_{1}}{R} = m\lambda_{1}p_{1}, \\ r = \frac{R}{\cos \alpha}, r_{\nu_{1}}^{\prime} = \frac{R}{\cos \beta_{1}} = r_{h1}^{\prime}, \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sin \alpha + \sin \beta_{2} = m\lambda_{2}p_{0}, \\ \frac{\cos^{2} \alpha}{r} + \frac{\cos^{2} \beta_{2}}{r_{h2}^{\prime}} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta_{2}}{R} = m\lambda_{2}p_{1}, \\ r = \frac{R}{\cos \alpha}, r_{\nu_{2}}^{\prime} = \frac{R}{\cos \beta_{2}} = r_{h2}^{\prime}. \end{cases}$$

$$(51)$$

Выразив $m\lambda$ через сумму синусов из уравнения решетки и подставив r и $r'_h = r'_v$ из третьей и шестой строк во вторую и пятую, систему (51) можно привести к следующему виду:

$$\begin{cases} \frac{\cos^3 \alpha}{R} + \frac{\cos^3 \beta_1}{R} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta_1}{R} = \frac{p_1}{p_0} (\sin \alpha + \sin \beta_1), \\ \frac{\cos^3 \alpha}{R} + \frac{\cos^3 \beta_2}{R} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta_2}{R} = \frac{p_1}{p_0} (\sin \alpha + \sin \beta_2). \end{cases}$$
(52)

После умножения каждого уравнения на R и деления на $\sin \alpha + \sin \beta$, правые части этих уравнений совпадают, что дает возможность записать эту систему в виде одного уравнения:

$$\frac{\cos^3 \alpha - \cos \alpha + \cos^3 \beta_1 - \cos \beta_1}{\sin \alpha + \sin \beta_1} = R \frac{p_1}{p_0} = \frac{\cos^3 \alpha - \cos \alpha + \cos^3 \beta_2 - \cos \beta_2}{\sin \alpha + \sin \beta_2}.$$
(53)

Домножение левой и правой частей уравнения (53) на произведение их знаменателей приводит его к виду:

$$\left(\cos\alpha\sin^2\alpha + \cos\beta_1\sin^2\beta_1\right)\left(\sin\alpha + \sin\beta_2\right) = \left(\cos\alpha\sin^2\alpha + \cos\beta_2\sin^2\beta_2\right)\left(\sin\alpha + \sin\beta_1\right).(54)$$

Видно, что слагаемые, содержащие кубическую степень sin α , сокращаются. Пусть $X = \sin \alpha$. Тогда (54) эквивалентно следующему уравнению:

$$\sqrt{1 - X^2 a X^2 + b X + c} = 0, (55)$$

где

$$a = \sin \beta_2 - \sin \beta_1,$$

$$b = \cos \beta_1 \sin^2 \beta_1 - \cos \beta_2 \sin^2 \beta_2,$$

$$c = \sin \beta_1 \sin \beta_2 (\cos \beta_1 \sin \beta_1 - \cos \beta_2 \sin \beta_2).$$
(56)

Точно решить уравнение (55) не представляется возможным. Однако оно решается приближенно. Поскольку $X = \sin \alpha$, где α – малый нормальный угол падения, то уравнение (55) можно назвать "почти квадратным". Во время первой итерации квадратный корень предполагается равным единице, и ищется решение квадратного уравнения с коэффициентами a, b и c, а во время второй итерации найденный X подставляется в квадратный корень, произведение корня и коэффициента a обозначается за a^* и решается квадратное уравнение с коэффициентами a^* , b и c. Окончательно, приближенное решение имеет вид:

$$\sin \alpha = X = \frac{\sqrt{b^2 - 2c\sqrt{4a^2 - 2b^2 + 4ac + 2b\sqrt{b^2 - 4ac}}} - b}{\sqrt{4a^2 - 2b^2 + 4ac + 2b\sqrt{b^2 - 4ac}}}.$$
(57)

Поскольку *a*, *b* и *c* – это функции углов дифракции β_1 и β_2 , на которых строго скомпенсирован астигматизм, а угол *a* является функцией от *a*, *b* и *c*, то он тоже зависит лишь от β_1 и β_2 . Из (53) следует, что углы *a*, β_1 и β_2 определяют коэффициент *R* p_1/p_0 . Этот коэффициент задает форму спектральной фокальной кривой. Меридиональная кома и сферическая аберрация довольно малы по сравнению с дифракционной расходимостью, поэтому определяющее влияние на разрешающую способность прибора оказывает геометрическая расфокусировка, которая зависит от формы спектральной фокальной кривой. Отсюда следует вывод, что все изображающие характеристики прибора являются функциями двух параметров – углов β_1 и β_2 .

Следует сказать несколько слов о структуре коэффициента $R p_1/p_0$. Он определяет форму спектральной фокальной кривой с точностью до масштаба. Из системы (51) видно, что *r* и *r'* прямо пропорциональны *R*, таким образом, *R* отвечает за габариты оптической схемы. При увеличении *R* и одновременном во столько же раз уменьшении p_1/p_0 спектральная фокальная кривая остается подобна самой себе – пропорционально *R* увеличивается расстояние от центра решетки до каждой ее точки. Это частный случай масштабируемости схем на основе сферических VLS-решеток, описанной в последнем абзаце раздела 2.1 Главы 2 настоящей работы.

Плоскость детектора проходит вдоль оси симметрии, поэтому вертикальное изображение центральной точки входной щели будет всегда сфокусировано. Расфокусировка будет обусловлена величиной астигматической разности – горизонтальный фокус будет строго попадать на детектор лишь на углах дифракции β_1 и β_2 , когда спектральная фокальная кривая пересекает ось симметрии. Во всех остальных случаях расстояние между спектральной фокальной кривой и плоскостью детектора равно астигматической разности. Ширина спектрального изображения в горизонтальном направлении равна астигматической разности, деленной на расстояние от решетки до горизонтального фокуса дифрагированного пучка и умноженной на апертуру решетки. Расстояние от центра решетки до горизонтального фокуса вследствие малости астигматической разности δ_{ast} можно считать равным $R/\cos \beta$, а в силу малого значения угла дифракции от нормали косинус не слишком сильно отличается от единицы, поэтому ширина изображения центральной точки входной щели может быть оценена следующим образом:

$$\Delta_{h} = \frac{\left| r_{h}\left(\beta\right) - r_{v}\left(\beta\right) \right|}{r_{h}\left(\beta\right)} W \approx \frac{\left| \delta_{ast} \right|}{R} W.$$
(58)

Поэтому одна из важных характеристик схемы, отвечающая за разрешающую способность прибора – это максимальная в рабочем спектральном диапазоне астигматическая разность, деленная на радиус решетки. Если обозначить угол дифракции, на котором астигматическая разность максимальна, через β_0 , то

$$\max \frac{\left|\delta_{ast}\right|}{R} = \frac{\cos \beta_0}{\left(\sin \alpha + \sin \beta_0\right) \frac{Rp_1}{p_0} + \cos \alpha \sin^2 \alpha + \cos \beta_0} - \frac{1}{\cos \beta_0}.$$
(59)

Угол β_0 находится посередине между углами дифракции β_1 и β_2 . Поэтому его можно оценить как среднее арифметическое этих углов:

$$\beta_0 \approx \frac{\beta_1 + \beta_2}{2} \,. \tag{60}$$

Второй важной характеристикой схемы спектрографа является относительная ширина спектрального диапазона. На крайних длинах волн λ_{max} к λ_{min} астигматическая разность равна ее величине при угле дифракции β_0 . Практика показывает, что отношение разности λ_{max} и λ_{min} к разности λ_2 и λ_1 близко к полутора. Поэтому относительная ширина диапазона может быть выражена следующим образом:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_{\min}} \approx 1.5 \frac{|\lambda_2 - \lambda_1|}{\lambda_1} = 1.5 \frac{|\sin\alpha + \sin\beta_2 - \sin\alpha - \sin\beta_1|}{\min(\sin\alpha + \sin\beta_1, \sin\alpha + \sin\beta_2)} =$$
$$= 1.5 \frac{|\sin\beta_2 - \sin\beta_1|}{\min(\sin\alpha + \sin\beta_1, \sin\alpha + \sin\beta_2)}.$$
(61)

Когда эта величина больше или равна единице, то ширина спектрального диапазона составляет октаву и более. Третьей важной характеристикой является центральная длина волны λ₀:

$$\lambda_0 = \frac{\sin \alpha + \sin \beta_0}{mp_0}.$$
(62)

Четвертой характеристикой является практическая реализуемость схемы. Поскольку и входная щель, и детектор расположены вдоль оси симметрии и обладают конечными физическими размерами и размерами их креплений, то те схемы, в которых расстояние между ними менее 5 см невозможно собрать на практике. В частности, из-за конкуренции щели и детектора за место на оси симметрии решетки нереализуемыми окажутся все схемы, работающие во внутреннем порядке дифракции m = 1 и обладающие рабочим диапазоном с шириной около
октавы и более. Пусть для определенности $\beta_2 > \beta_1$. Расстояние между щелью и детектором равно расстоянию от щели до точки пересечения центрального луча с наибольшим углом дифракции с осью симметрии:

$$\Delta_{SD} = R(\operatorname{tg} \alpha - \operatorname{tg} \beta_{\max}) \approx R(\operatorname{tg} \alpha - \operatorname{tg} \beta_2).$$
(63)

Поскольку угол падения $\alpha > 0$ мал, то нулевой порядок будет лежать под углом – α от центральной нормали решетки. Из-за близости к нулевому порядку часть спектральной фокальной кривой, лежащая левее угла дифракции $\beta = 0$, практически не зависит от расположения штрихов, и ее невозможно "притянуть" к оси симметрии решетки. Поэтому область, в которой скомпенсирован астигматизм, будет располагаться правее центральной нормали решетки, то есть $\beta > 0$. Условие ширины диапазона, равной октаве или превышающей октаву, означает, что

$$\lambda_{\max} \ge 2\lambda_{\min} \Longrightarrow \sin \alpha + \sin \beta_{\max} \ge 2\sin \alpha + 2\sin \beta_{\min} \Longrightarrow \sin \beta_{\max} - 2\sin \beta_{\min} \ge \sin \alpha , \qquad (64)$$

а условие наличия расстояния между щелью и детектором можно представить в виде неравенства:

$$\alpha > \beta_{\max} \Longrightarrow \sin \alpha > \sin \beta_{\max}. \tag{65}$$

При подстановке (65) в (64) следует, что должно выполняться неравенство

$$\sin\beta_{\rm max} - 2\sin\beta_{\rm min} > \sin\beta_{\rm max},\tag{66}$$

что при положительных углах дифракции невозможно. Это значит, что при ширине спектрального диапазона, превышающей октаву, щель всегда будет находиться в той же самой области, где требуется устанавливать детектор. Поэтому все схемы с широким рабочим спектральным диапазоном в первом внутреннем порядке дифракции будут нереализуемыми на практике.

Все четыре характеристики – астигматическая разность δ_{ast}/R , относительная ширина рабочего спектрального диапазона $\Delta\lambda/\lambda_{min}$, центральная длина волны λ_0 и расстояние между щелью и детектором Δ_{SD} , деленого на R – зависят от двух параметров – углов дифракции β_1 и β_2 , на которых спектральная фокальная кривая пересекает ось симметрии решетки. Удобно, положив $\beta_2 > \beta_1$ перейти к параметрам β_1 и $\Delta\beta = \beta_2 - \beta_1 > 0$. Для анализа свойств всех возможных вариантов схем широкополосных изображающих спектрографов на основе сферической VLS-



решетки достаточно построить карты этих характеристик в координатах β_1 и $\Delta\beta$. Карты приведены на Рис. 29.

Рис. 29. Карты характеристик схемы изображающего спектрографа нормального падения на основе сферической VLS-решетки. а) – отношение астигматической разности и радиуса R решетки, б) – относительная ширина спектрального диапазона, в) отношение расстояния от щели до детектора и радиуса решетки R, г) – длина волны λ_0 , соответствующая центру рабочего диапазона, соответствующая $p_0 = 600^{-1}$. Белым цветом обозначена область, в которой уравнение (55), а, следовательно – и исходная задача, не имеет действительных решений. Правее этой области лежат схемы, работающие во внутреннем порядке дифракции (m = 1), левее – во внешнем порядке (m = -1).

Из Рис. 29 а) видно, что астигматическая разность зависит от $\Delta\beta$ и практически не зависит от β_1 . С ростом $\Delta\beta$ δ_{ast} тоже возрастает. Относительная ширина спектрального

диапазона $\Delta \lambda / \lambda_{min}$ (Рис. 29 б) растет при увеличении $\Delta \beta$ и приближении β_1 к области, в которой уравнение (55) не имеет действительных решений (на Рис. 29 она соответствует белому треугольнику). Линии, на которых $\Delta \lambda / \lambda_{\min}$ принимает постоянные значения, практически совпадают с прямыми, которые веером расходятся из точки $\beta_1 = 0$, $\Delta \beta = 0$. Расстояние "щель – детектор" (Рис. 29 в) зависит от расстояния от ближайшей границы белого треугольника до точки с координатами β_1 и $\Delta\beta$. Чем больше это расстояние, тем больше и расстояние между входной щелью и детектором. В силу того, что границы треугольника ориентированы под малым углом от вертикали, это расстояние мало зависит от $\Delta\beta$ и в основном определяется углом β_1 . Центральная длина волны λ_0 (Рис. 29 г) тоже слабо зависит от $\Delta\beta$. Во внутреннем порядке дифракции (в области правее белого треугольника) она очень быстро растет с ростом β_1 , а во внешнем порядке скорость роста λ_0 с уменьшением β_1 невелика. Центральная длина волны λ_0 на Рис. 29 г) приведена для $p_0 = 600 \text{ мм}^{-1}$. Если взять частоту штрихов в центре решетки (то есть, p_0) в *n* раз больше, то значения цветовой шкалы поделятся на *n*. Таким образом, Рис. 29 а) – г) характеристики вариантов широкополосного описывает всех возможных схемы изображающего спектрографа нормального падения на основе сферической VLS-решетки при размещении входной щели и детектора на оси симметрии решетки.

Похожим образом можно рассмотреть характеристики всех возможных вариантов оптической схемы широкополосного изображающего спектрографа на основе сферической эквидистантной решетки с криволинейными штрихами, в которой для минимизации аберраций, входная щель и детектор устанавливаются на круге Роуланда (Рис. 30). На двух длинах волн составляется система уравнений (42), (46) и (50), и расстояние r'_{ν} приравнивается к расстоянию r'_{h} :

$$\begin{cases} \sin \alpha + \sin \beta_{1} = mp_{0}\lambda_{1}, \\ r = R \cos \alpha, r_{h1}' = R \cos \beta_{1} \\ \frac{1}{r} + \frac{1}{r_{v1}'} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta_{1}}{R} = -\frac{mp_{0}\lambda_{1}}{R_{g}}, \\ r_{v1}' = r_{h1}', \\ \sin \alpha + \sin \beta_{2} = mp_{0}\lambda_{2}, \\ r = R \cos \alpha, r_{h2}' = R \cos \beta_{2} \\ \frac{1}{r} + \frac{1}{r_{v2}'} - \frac{\cos \alpha + \cos \beta_{2}}{R} = -\frac{mp_{0}\lambda_{2}}{R_{g}}, \\ r_{v2}' = r_{h2}'. \end{cases}$$
(67)

В результате подстановки первого, второго и четвертого уравнений в третье в каждой подсистеме, (67) сводится к следующей системе:



Рис. 30. Схема широкополосного изображающего спектрографа на основе периодической решетки с криволинейными штрихами. Входная щель в горизонтальном направлении отображается на круг Роуланда, а в вертикальном – на вертикальную фокальную кривую, близкую по форме с прямой, пересекающей круг Роуланда в двух точках.

$$\begin{cases} \frac{1}{R\cos\alpha} + \frac{1}{R\cos\beta_1} - \frac{\cos\alpha + \cos\beta_1}{R} = -\frac{\sin\alpha + \sin\beta_1}{R_g}, \\ \frac{1}{R\cos\alpha} + \frac{1}{R\cos\beta_2} - \frac{\cos\alpha + \cos\beta_2}{R} = -\frac{\sin\alpha + \sin\beta_2}{R_g}. \end{cases}$$
(68)

После приведения левых частей к общему знаменателю и домножения первого уравнения в (68) на $R/(\sin \alpha + \sin \beta_1)$, а второго – на $R/(\sin \alpha + \sin \beta_2)$, система (68) перепишется в виде одного уравнения:

$$\frac{\cos\alpha\sin^2\beta_1 + \cos\beta_1\sin^2\alpha}{\cos\alpha\cos\beta_1\left(\sin\alpha + \sin\beta_1\right)} = -\frac{R}{R_g} = \frac{\cos\alpha\sin^2\beta_2 + \cos\beta_2\sin^2\alpha}{\cos\alpha\cos\beta_2\left(\sin\alpha + \sin\beta_2\right)}.$$
(69)

Из равенства левой и правой части (69) следует, что

$$\sin^{2} \alpha \cos \beta_{1} \cos \beta_{2} \left(\sin \beta_{2} - \sin \beta_{1} \right) + \sin \alpha \cos \alpha \left(\cos \beta_{2} \sin^{2} \beta_{1} - \cos \beta_{1} \sin^{2} \beta_{2} \right) + + \cos \alpha \sin \beta_{1} \sin \beta_{2} \left(\sin \beta_{1} \cos \beta_{2} - \sin \beta_{2} \cos \beta_{1} \right) = 0.$$
(70)

После деления (70) на $\cos \alpha$ и обозначения $X = \sin \alpha$, это уравнение приводится к "почти квадратному" виду:

$$\frac{a}{\sqrt{1-X^2}} + bX + c = 0, (71)$$

где

$$a = \cos \beta_1 \cos \beta_2 \left(\sin \beta_2 - \sin \beta_1 \right), \qquad b = \cos \beta_2 \sin^2 \beta_1 - \cos \beta_1 \sin^2 \beta_2,$$

$$c = \sin \beta_1 \sin \beta_2 \left(\sin \beta_1 \cos \beta_2 - \sin \beta_2 \cos \beta_1 \right). \qquad (72)$$

Оно приближенно решается аналогично уравнению (55). Решение имеет вид:

$$\sin \alpha = X \approx \frac{\sqrt{b^2 - \frac{8a^2c}{\sqrt{4a^2 - 2b^2 + 4ac + 2b\sqrt{b^2 - 4ac}}}} - b}{\frac{4a^2}{\sqrt{4a^2 - 2b^2 + 4ac + 2b\sqrt{b^2 - 4ac}}}}.$$
(73)

Основные характеристики схемы – астигматическая разность δ_{ast}/R , расстояние "щель – детектор" Δ_{SD}/R , относительная ширина спектрального диапазона $\Delta\lambda/\lambda_{min}$, и центральная длина волны рабочего диапазона λ_0 . Относительная ширина спектрального диапазона и центральная длина волны будут по-прежнему описываться выражениями (61) и (62). Угол дифракции β_0 , связанный с длиной волны λ_0 определяется через полусумму β_1 и β_2 . Расстояние между щелью и детектором рассчитывается по теореме Пифагора:

$$\Delta_{SD} = R \sqrt{\left(\cos^2 \alpha - R \cos^2 \beta_{\max}\right)^2 + \left(\cos \alpha \sin \alpha - \cos \beta_{\max} \sin \beta_{\max}\right)^2} \approx R \sqrt{\left(\cos^2 \alpha - \cos^2 \beta_2\right)^2 + \left(\cos \alpha \sin \alpha - \cos \beta_2 \sin \beta_2\right)^2}.$$
(74)

Если углы β_{max} и α близки, то это расстояние с большой точностью совпадает с длиной дуги круга Роуланда, соединяющей щель и детектор, то есть $\Delta_{SD} \approx R/2$ (2 $\alpha - 2 \beta_{\text{max}}$). Поэтому выводы, получаемые из неравенств (64 – 66), остаются в силе – во внутреннем порядке невозможно добиться диапазона шириной около или более октавы. Астигматическая разность определяется выражением:

$$\max\left(\frac{\left|\delta_{ast}\right|}{R}\right) \approx \cos\beta_{0} - \frac{\cos\alpha}{\left(\cos\alpha\cos\beta_{0} - \sin^{2}\alpha\right) - \frac{R}{R_{g}}\cos\alpha\left(\sin\alpha + \sin\beta_{0}\right)}.$$
(75)

Как и в случае со схемой на основе VLS-решетки, для рассмотрения свойств всех возможных вариантов схемы широкополосного изображающего спектрографа на основе периодической сферической решетки с криволинейными штрихами достаточно построить карты их характеристик в координатах β_1 и $\Delta\beta$. Карты приведены на Рис. 31.



Рис. 31. Карты характеристик схемы изображающего спектрографа нормального падения на основе сферической периодической решетки с криволинейными штрихами. а) – отношение астигматической разности и радиуса R решетки, б) – относительная ширина спектрального диапазона, в) отношение расстояния от щели до детектора и радиуса решетки R, г) – длина волны λ_0 , соответствующая центру рабочего диапазона, если $p_0 = 600 \text{ мм}^{-1}$. Белым цветом обозначена область, в которой уравнение (71) и исходная задача не имеют действительных решений. Правее этой области лежат схемы, работающие во внутреннем порядке дифракции (m = 1), левее – во внешнем порядке (m = -1).

Астигматическая разность (Рис. 31 а) не зависит от β_1 во внешнем порядке дифракции, однако, во внутреннем – сначала быстро убывает с ростом β_1 , а затем еще более быстро возрастает, так что высокого пространственного разрешения при $\beta_1 > 5^\circ$ добиться невозможно. Относительная ширина спектрального диапазона (Рис. 31 б) ведет себя практически так же, как и в случае с VLS-решеткой – наиболее широкий диапазон достигается вблизи границ белого треугольника, линии с постоянным значением $\Delta\lambda/\lambda_{min}$ почти совпадают с прямыми, которые веером расходятся из точки $\beta_1 = 0$, $\Delta\beta = 0$. Поведение расстояния "щель-детектор" (Рис. 31 в) тоже сохранило свой вид – чем больше расстояние от точки с координатами β_1 , $\Delta\beta$ до границы белого треугольника, тем дальше друг от друга расположены входная щель и детектор. Поменялись лишь количественные значения. Зависимость λ_0 от β_1 и $\Delta\beta$ (Рис. 31 г) также похожа на аналогичную зависимость для схемы на основе сферической VLS-решетки – во внешнем порядке длина волны медленно убывает с ростом β_1 , а во внутреннем – быстро растет с ростом β_1 , но количественное значение λ_0 в каждой точке с координатами β_1 , $\Delta\beta$ отличается от случая схемы на основе сферической VLS-решетки.

3.3 Примеры оптических схем и сравнение их характеристик

После построения карт характеристик спектрографа задача расчета оптической схемы сводится к задаче о нахождении оптимальной точки на этих картах. Одной из целей настоящей работы был расчет широкополосного изображающего спектрографа нормального падения с высоким спектральным и пространственным разрешением для спектрального диапазона с шириной около октавы и центральной длиной волны $\lambda_0 \sim 1200$ Å. Согласно картам, данная задача хорошо решается во внешнем порядке дифракции, но не имеет решений во внутреннем. Поэтому требования к схеме во внутреннем порядке были снижены – ширина диапазона может соответствовать значению $\Delta\lambda/\lambda_{min} \sim 0.5$. Выбранная апертура решетки составляет 50 мм × 50 мм.

Рассмотрим схему на основе сферической VLS-решетки. Геометрическая расфокусировка не должна приводить к величине размытия изображения на детекторе более двух ячеек, то есть 26 мкм. Сжимать величину размытия до размера менее 13 мкм не даст выигрыша в разрешении, поэтому оптимальная величина размытия должна быть в пределах 13-26 мкм. В качестве целевого значения была выбрана величина расфокусировки, соответствующая ширине изображения 17 мкм. Деление этой величины на ширину решетки дает значение отношения астигматической разности к радиусу решетки на уровне 3.5×10^{-4} . На карте астигматической разности это соответствует области $\Delta \beta \leq 2.1^{\circ}$. Проведем эту границу на карте астигматической разности и на остальных трех картах (Рис. 32).



Рис. 32. Поиск оптимальной схемы (спектрограф на основе сферической VLS-решетки) с помощью карт характеристик. Черные линии – границы области поиска схемы в первом внешнем порядке дифракции, фиолетовые – границы области поиска схемы в первом внутреннем порядке дифракции. Центры зеленых окружностей отвечают найденным оптимальным парам параметров β_1 и $\Delta\beta$. а) – отношение астигматической разности к радиусу решетки, б) – относительная ширина спектрального диапазона, в) – отношение расстояния "щель – детектор" к радиусу решетки *R*, г) – центральная длина волны.

Рабочая область спектра будет не уже одной октавы в бордовых областях на карте относительной ширины спектрального диапазона. Во внутреннем порядке дифракции эта область очень мала, а во внешнем она находится всюду правее линии, соединяющей точку с координатами $\beta_1 = 0$, $\Delta\beta = 0$ с точкой с координатами $\beta_1 = -10^\circ$, $\Delta\beta = 2.5^\circ$. Проведем эту прямую на этой карте, а также на картах расстояния между щелью и детектором и центральной длины волны.

80

Минимально возможное расстояние между щелью и детектором составляет ~ 5 см. Если зафиксировать радиус решетки на уровне R = 1 м, то 5 см соответствует значению 0.05 на цветовой шкале Рис 32 в. Это значение соответствует наклонной прямой на Рис. 32 в, проходящей через точки $\beta_1 = -2^\circ$, $\Delta\beta = 0$ и $\beta_1 = -5.8^\circ$, $\Delta\beta = 4^\circ$. Три проведенные прямые образуют треугольник, внутри которого и нужно искать решение. Перенесем последнюю границу на карту центральной длины волны (Рис. 32 г). На карте центральной длины волны значение $\lambda_0 = 1200$ Å соответствует области желтого цвета. Этот цвет присутствует в треугольнике только в одной его точке – в левом верхнем углу. Таким образом, указанным требованиям удовлетворяет схема, в которой $\beta_1 = -8.3^\circ$, а $\Delta\beta = 2.1^\circ$.

Во внешнем порядке дифракции из-за малого расстояния между щелью и детектором невозможно построить широкополосную схему, используя решетку с малым радиусом *R*. Поэтому схема будет относительно громоздкой (ее длина равна *R*) с меньшей шириной спектрального диапазона. Из преимуществ такой схемы можно отметить большую линейную дисперсию, следовательно – большую разрешающую способность. Если взять R = 5 м, то расстояние $\Delta_{SD} = 5$ см во внутреннем порядке дифракции будет соответствовать области $\beta_1 \ge 0.6^\circ$ (граница области – вертикальная прямая, обозначенная на Рис. 32 в, г фиолетовым цветом). Чем правее от этой границы, тем уже спектральный диапазон, поэтому выгоднее всего искать решение на самой границе. Длина волны $\lambda_0 = 1200$ Å соответствует значению $\Delta\beta = 1.2^\circ$. Схема, соответствующая найденной точке $\beta_1 = 0.6^\circ$, $\Delta\beta = 1.2^\circ$ будет характеризоваться $\Delta\lambda/\lambda_{min} \sim 0.5$ и максимумом астигматической разности $\delta_{ast}/R \le 10^{-4}$, что в пересчете на ширину спектрального изображения при ширине решетки W = 5 см даст значение 5 мкм. Полученная величина не превышает дифракционный предел $R\lambda/W \sim 12$ мкм, что говорит о дифракционном качестве спектрального изображения и сверхвысоком спектральном разрешении схемы.

После нахождения β_1 и $\Delta\beta$ следует по формуле (57) найти угол падения α , подставить α , β_1 и β_2 в (53) и оттуда вычислить VLS-коэффициент p_1 . Далее производится построение спектральной фокальной кривой и оси симметрии, на которой размещается детектор. Из соображений равенства величины астигматической разности на краях диапазона и ее наибольшего значения в центре определяются границы рабочего спектрального диапазона. После этого все параметры оптической схемы становятся известными.

Схема, работающая в первом внешнем порядке дифракции, обладает следующими параметрами: $\alpha \approx 2.9^{\circ}$, R = 1 м, $p_0 = 600$ мм⁻¹, $p_1 = 0.149$ мм⁻², решетка имеет квадратную апертуру со стороной W = H = 50 мм. Рабочий спектральный диапазон составляет 820 – 1690 Å. Схема, работающая в первом внешнем порядке, обладает параметрами: $\alpha = 3.0^{\circ}$, R = 5 м,

 $p_0 = 600 \text{ мм}^{-1}$, $p_1 = -0.0054 \text{ мм}^{-2}$, решетка имеет квадратную апертуру со стороной W = H = 50 мм. Рабочий спектральный диапазон прибора — 980 – 1520 Å. Положение входной щели, спектральной фокальной кривой и детектора для обеих схем приведено на Рис. 33.



Рис. 33. Спектральная фокальная кривая (синяя линия), ось симметрии сферической VLSрешетки (оранжевая линия), входная щель (S) и детектор (D, расположен на оси симметрии). а) – схема, работающая в первом внешнем порядке дифракции, б) – схема, работающая в первом внутреннем порядке дифракции. Синим астериском обозначен нулевой порядок дифракции, красными астерисками – точки горизонтальной фокусировки дифрагированных пучков с указанными "контрольными" длинами волн, а также положение входной щели.

Исходя из взаимного расположения спектральной фокальной кривой и детектора, выбираются "контрольные" длины волн. К ним относятся края диапазона λ_{\min} и λ_{\max} , длины волн λ_1 и λ_2 , соответствующие углам дифракции β_1 и β_2 , на которых спектральная фокальная кривая пересекает ось симметрии решетки, а также центральная длина волны λ_0 , на которой положение спектрального фокуса максимально удалено от плоскости детектора. Наибольшее расстояние от плоскости детектора до спектрального фокуса дифрагированного пучка совпадает с наибольшей астигматической разностью, вычисленной по формуле (59) – для схемы, работающей в первом внешнем порядке, она равна 3.5 мм = $R \cdot 3.5 \times 10^{-4}$, а для схемы, работающей в первом внутреннем – 0.64 мм $\approx R \cdot 1.3 \times 10^{-4}$.

Для проверки размера изображения была проведена численная трассировка лучей на "контрольных" длинах волн. Если источник находится в плоскости z = 0, то его ширина его изображения в направлении дисперсии находится в хорошем соответствии с формулой $W \delta_{ast}(\lambda) / R$, а в пространственном направлении все лучи сходятся в бесконечно тонкую линию.

Это означает, что на практике в вертикальном направлении размер изображения определяется дифракционной расходимостью и будет равен $R\lambda/H$. В направлении дисперсии ширина будет равна дифракционной ($R\lambda/W$) лишь на длинах волн, лежащих вблизи λ_1 и λ_2 , а на других длинах волн из-за расфокусировки будет превышать ее.

Изображения шести точечных источников, расположенных вдоль входной щели и находящихся на расстоянии 1 мм друг от друга, приведено на Рис. 34 для схемы, работающей во внутреннем порядке дифракции, и на Рис. 35 для схемы, работающей во внешнем порядке дифракции. Цветом обозначена *y*-координата точки падения луча на решетку. Красный цвет соответствует y = -2.5 мм, фиолетовый – y = 2.5 мм, сине-зеленый – y = 0. Когда источником является центральная точка входной щели, то ширина изображения в направлении дисперсии совпадает с оценочным значением $W \max(\delta_{ast}/R)$ (равное 17 мкм для схемы во внешнем порядке и 6.5 для схемы во внутреннем порядке) на длинах волн λ_{min} , λ_0 , λ_{max} и становится очень малой на длинах волн λ_1 и λ_2 . В пространственном направлении на всех длинах волн ширина изображения равна нулю – лучи после дифракции возвращаются на ось симметрии решетки. В тех случаях, когда размер изображения, полученный численной трассировкой лучей, становится меньше дифракционной ширины, реальный размер изображения будет равен дифракционной ширине.

Численная трассировка лучей показывает, что при перемещении источника вдоль входной щели, так, что расстояние от источника до ее центра увеличивается, оба размера изображения (и в направлении дисперсии, и в пространственном направлении) будут расти, причем линейно по этому расстоянию. Линейный рост изображения определяет линейное поле зрения прибора – максимальную освещенную высоту входной щели, которая равна удвоенному максимальному смещению точки вдоль входной щели от ее центра. Максимальное спектральное и пространственное разрешения достигаются, когда размер изображения точечного монохроматического источника не превосходит двух ячеек детектора – 26 мкм. Для схемы, работающей в первом внешнем порядке дифракции, этот рост довольно значительный, а для схемы, работающей в первом внешнем порядке дифракции – практически незаметный, поэтому линейное поле зрения такого прибора будет ограничено лишь полной высотой входной щели. Согласно трассировке лучей, аберрации во второй схеме всегда меньше дифракционной ширины – практическое спектральное и пространственное разрешение будут определяться дифракционной шириной. Вертикальное и горизонтальное увеличение обеих схем очень близко к единице. Линейное поле зрения первой схемы составляет ~ 2.5 мм, у второй схемы теоретически может составлять 97.5 мм. В пересчете на угловое поле зрения, первая схема обладает угловым полем зрения 0.14°, вторая – 1.12°.



Рис. 34. Результаты трассировки лучей (схема во внешнем порядке дифракции). а), в), д), ж) – центральная длина волна $\lambda_0 = 1256$ Å, б), г), е), з) – длина волны $\lambda_1 = 1558$ Å. а), б) – изображение шести эквидистантных точек входной щели, расстояние между ними – 1 мм, в), г) – изображение центральной точки входной щели, д), е) – изображение точки входной щели, смещенной от ее центра на 2 мм, ж), з) – изображение точки входной щели, смещенной от ее центра на 4 мм. Виден линейный рост размеров изображения в обоих направлениях, пропорциональный расстоянию от светящейся точки входной щели до ее центра.



Рис. 35. Результаты трассировки лучей (схема во внешнем порядке дифракции). а), в), д), ж) – центральная длина волна $\lambda_0 = 1256$ Å, б), г), е), з) – длина волны $\lambda_1 = 1558$ Å. а), б) – изображение шести эквидистантных точек входной щели, расстояние между ними – 1 мм, в), г) – изображение центральной точки входной щели, д), е) – изображение точки входной щели, смещенной от ее центра на 2 мм, ж), з) – изображение точки входной щели, смещенной от ее центра на 2 мм, ж), з) – изображение с дифракционной шириной, соответствующей 100 λ – 12.5 мкм на 1250 Å и 10.6 мкм на 1062 Å.

Разрешающую способность схемы можно оценить по длине прибора, угловой дисперсии, центральной длине волны λ_0 . При размере изображения, равном двум ячейкам детектора с прибавлением конечной ширины входной щели $(2\Delta_D + S)$, разрешающая способность вычисляется по формуле:

$$\frac{\lambda}{\Delta\lambda} \approx \frac{\lambda_0}{\frac{\partial\lambda}{\partial\beta} \frac{2\Delta_D + S}{R}} = \frac{\lambda_0}{\frac{\cos\beta_0}{mp_0} \frac{2\Delta_D + S}{R}} \approx \frac{\lambda_0}{\frac{1}{mp_0} \frac{2\Delta + S}{R}}.$$
(76)

Первая схема обладает разрешающей способностью ~ 2900 при бесконечно тонкой щели. При ширине щели порядка одной ячейки (13 мкм) она составит ~ 1900. Разрешающая способность второй схемы примерно в пять раз больше – предельная составляет ~ 14 500, реальная – 9 500. Пространственное разрешение обеих схем составляет две ячейки детектора – 26 мкм.

Таким образом, схема во внешнем порядке дифракции обладает компактными габаритами, широким спектральным диапазоном и высоким спектральным и пространственным разрешением, но относительно малым полем зрения. Схема во внутреннем порядке, наоборот, обладает большими габаритами, сверхвысоким спектральным разрешением, высоким пространственным разрешением и большим полем зрения, но при этом – меньшей шириной рабочего спектрального диапазона. Из-за больших габаритов второй схемы телесный угол, перехватываемый апертурой решетки, будет меньше, чем для первой схемы, что означает меньшую светосилу.

Таким же способом были рассчитаны две схемы спектрографа на основе периодической сферической решетки с криволинейными штрихами – первая схема работает во внешнем порядке дифракции (m = -1), вторая – во внутреннем (m = 1). Астигматическая разность $\max(\delta_{ast}/R)$ была ограничена сверху значением 3×10^{-4} , что даст величину расфокусировки ≤ 15 мкм при размере решетки 5 см×5 см. Это ограничение соответствует $\Delta\beta = 2^{\circ}$ на карте астигматической разности (Рис. 36 а). Эта граница проведена и на остальных картах на Рис. 36. Диапазон шириной не менее октавы во внешнем порядке дифракции лежит в бордовой области карты $\Delta\lambda/\lambda_{min}$, расположенной правее прямой, соединяющей точки $\beta_1 = 0$, $\Delta\beta = 0$ и $\beta_1 = -10^{\circ}$, $\Delta\beta = 2.5^{\circ}$ (Рис. 36 б). Эта граница проведена и на картах Δ_{SD}/R и λ_0 (Рис. 36 в,г). При R = 1 м расстояние между щелью и детектором не менее 5 см соответствует области на карте Δ_{SD}/R , расположенной проходящей через точки $\beta_1 = -2^{\circ}$, $\Delta\beta = 0$ и $\beta_1 = -5.8$, $\Delta\beta = 4^{\circ}$. Эта граница также проведена и на карте λ_0 (Рис. 36 г). Проведенные границы образуют треугольник, внутри которого следует искать решение. Длина волны $\lambda_0 = 1200$ Å лежит в левом верхнем углу этого треугольника. Выбор схемы был сделан в пользу более широкополосной схемы с



центральной длиной волны $\lambda_0 = 1035$ Å (соответствующей центру зеленой окружности на Рис. 36 г – $\beta_1 = -7^\circ$, $\Delta\beta = 2^\circ$).

Рис. 36. Поиск оптимальной схемы (спектрограф на основе периодической сферической решетки с криволинейными штрихами) с помощью карт характеристик. Черные линии – границы области поиска схемы в первом внешнем порядке дифракции, фиолетовые – границы области поиска схемы в первом внутреннем порядке дифракции. Центры зеленых окружностей отвечают найденным парам параметров β_1 и $\Delta\beta$. а) – отношение астигматической разности к радиусу решетки, б) – относительная ширина спектрального диапазона, в) – отношение расстояния "щель – детектор" к радиусу решетки R, г) – центральная длина волны.

Для расчета схемы, работающей в первом внутреннем порядке дифракции, был выбран радиус решетки R = 5 м. Параметр $\Delta\beta$ был также выбран равным 2°. При R = 5 м расстояние 5 см между щелью и детектором соответствует $\Delta_{SD}/R = 0.01$. Граница, соответствующая этому

значению проведена на Рис. 36 в, г фиолетовым цветом, ограничивая область поиска $\beta_1 \ge 0.4^\circ$. Точка с координатами $\beta_1 = 0.4^\circ$, $\Delta\beta = 2^\circ$ попадает на центральную длину волны $\lambda_0 \approx 1300$ Å, что очень близко к требуемому значению 1200 Å.

Схемы, соответствующие найденным на карте точкам, обладают следующими параметрами. В первом внешнем порядке дифракции R = 1 м, $\beta_1 = -7^\circ$, $\Delta\beta = 2^\circ$, угол падения $\alpha = 2.44^\circ$, найденный по формуле (69) радиус кривизны штрихов $R_g = 4.735$ м. Длины волн, соответствующие β_1 и β_2 равны $\lambda_1 = 1315$ Å и $\lambda_2 = 748$ Å. Полный рабочий спектральный диапазон, полученный с помощью построения спектральной и вертикальной фокальных кривых (Рис. 37 а), составляет 570 – 1500 Å. Во внутреннем порядке дифракции R = 5 м, $\beta_1 = 0.4^\circ$, $\Delta\beta = 2^\circ$, угол падения $\alpha = 3.1^\circ$, радиус кривизны штрихов $R_g = -102.4$ м. Длины волн, соответствующие β_1 и β_2 равны $\lambda_1 = 1022$ Å и $\lambda_2 = 1598$ Å. Полный рабочий диапазон, согласно взаимному расположению спектральной и вертикальной фокальных кривых (Рис. 37 б), составляет 910 – 1640 Å.



Рис. 37. Входная щель S, круг Роуланда (синяя линия) и вертикальная фокальная кривая (оранжевая линия). Детектор установлен на круге Роуланда. Красными астерисками обозначены входная щель и положения горизонтальных фокусов дифрагированных пучков с обозначенными длинами волн, синим астериском – нулевой порядок дифракции. а) – схема, работающая в первом внешнем порядке дифракции, б) – схема, работающая в первом внутреннем порядке дифракции.

При установке детектора на круг Роуланда ширина изображения центральной точки входной щели в направлении дисперсии всегда равна дифракционной в обеих схемах – при использовании решетки с апертурой 50 мм × 50 мм она равна ~ 20λ в первой схеме и ~ 100λ во

второй. Ширина изображения в пространственном направлении определяется отношением астигматической разности и радиуса поверхности решетки. Она становится равна дифракционной ширине в том случае, когда $H \delta_{ast}/R$ меньше $R \lambda/H$. Это условие всюду выполняется во второй схеме, а в первой – лишь в окрестности длин волн λ_1 и λ_2 .

На Рис. 38 приведены результаты численной трассировки лучей схемы, работающей в первом внешнем порядке дифракции, проведенной на "контрольных" длинах волн $\lambda_0 = 1032$ Å и $\lambda_1 = 1322$ Å. В качестве источника взяты шесть эквидистантных точек входной щели, расстояние между которыми равно 1 мм. Видно, что ширина изображения как в направлении дисперсии, так и в пространственном направлении линейно возрастает по мере удаления светящейся точки от центра входной щели (примерно по 8 мкм на 1 мм смещения точки вдоль входной щели от ее центра). Линейный рост ширины изображения приводит к ограничению линейного поля зрения прибора величиной ~ 2×1.25 мм = 2.5 мм (при ограничении ширины изображения двумя ячейками детектора – 26 мкм). Изображение центральной точки входной щели в направлении дисперсии определяется дифракцией – аберрации дают пренебрежимо малую ширину изображения на уровне 1 мкм, что меньше дифракционной ~ 20 λ ~ 2 мкм. В пространственном направлении наибольшая ширина определяется астигматической разностью и на длине волны λ_0 составляет ~ 16 мкм, что согласуется с оценочным значением, даваемым картой астигматической разности ~ 15 мкм. В точках пересечения спектральной и вертикальной фокальных кривых ширина изображения в пространственном направлении в лучевом приближении не устремляется к нулю, в отличие от случая сферической VLS-решетки, но несмотря на это, остаточные аберрации не превосходят дифракционный размер.

Аналогичные результаты представлены на Рис. 39 для схемы, работающей в первом внутреннем порядке дифракции. Численная трассировка лучей показывает, что расфокусировка и остаточные аберрации малы, и размеры изображения будут определяться дифракционной шириной ~ 100 λ . При движении светящейся точки вдоль входной щели от ее центра, аберрации линейно нарастают. Этот рост является разным на разных длинах волн. На длине волны $\lambda_0 = 1032$ Å аберрации в направлении дисперсии линейно возрастают от ~ 0 мкм (центральная точка щели) до 1 мкм (точка щели на расстоянии 3 мм от центра). В пространственном направлении рост аберраций очень слабый – от 15 мкм (точка в центре шели) до 16 мкм (точка щели на расстоянии 4 мм от ее центра). На длине волны $\lambda_1 = 1022$ Å спектральная аберрация нарастает в ~ 1.5 быстрее от ~ 0 мкм (центр шели) до ~ 1 мкм (точка щели в двух мм от ее центра). Пространственная аберрация растет с такой же скоростью. Отсюда получается теоретическая оценка предельного линейного поля зрения прибора, которая дает очень большую величину 2 × 26 мкм/(0.5 мкм/мм) = 104 мм.



Рис. 38. Результаты трассировки лучей (схема на основе периодической сферической (R = 1 м) решетки с криволинейными штрихами, первый внешний порядок дифракции). а), в), д), ж) – длина волны $\lambda_0 = 1032$ Å, б), г), е), з) – длина волны $\lambda_1 = 1315$ Å. а), б) – изображение шести точек входной щели (указано расстояние от светящейся точки до центра щели), в), г) – изображение центральной точки входной щели, д), е) – точка в двух мм от центр щели, ж), з) – источник смещен на 4 мм вдоль щели от ее центра. Черной рамкой обозначены ширины изображения в направлении дисперсии и в пространственном направлении.



Рис. 39. Результаты трассировки лучей (схема на основе периодической сферической (R = 5 м) решетки с криволинейными штрихами, первый внутренний порядок дифракции). а), в), д), ж) – длина волны $\lambda_0 = 1032$ Å, б), г), е), з) – длина волны $\lambda_1 = 1315$ Å. а), б) – изображение шести точек входной щели (указано расстояние от светящейся точки до центра щели), в), г) – изображение центральной точки входной щели, д), е) – точка в двух мм от центр щели, ж), з) – источник смещен на 4 мм вдоль щели от ее центра. Справа от изображения указаны его размеры в пространственном направлении или в пространственном направлении × в направлении дисперсии, если они не слишком малы.

Разрешающая способность схемы можно оценить по формуле (76), исходя из размера двух ячеек детектора. Для схемы, работающей во внешнем порядке дифракции, она составляет ~ 1550 при ширине щели ~ 13 мкм и ~ 2380 при бесконечно узкой щели. Схема во внутреннем порядке дифракции обладает разрешающей способностью ~ 9830 при ширине щели ~ 13 мкм и ~ 15100 при бесконечно узкой щели. Пространственное разрешение определяется двумя ячейками детектора и при оптимальном поле зрения составляет 26 мкм. Характеристики всех четырех схем собраны в Табл. 4.

Параметры		Спектрографы на основе сферической VLS-решетки		Спектрографы на основе сферической периодической решетки с криволинейными штрихами	
Порядок дифракции т		-1	1	-1	1
Радиус поверхности решетки <i>R</i> , м		1	5	1	5
Частота штрихов решетки $p_0, \text{ мм}^{-1}$		600	600	600	600
Градиент частоты штрихов p_1 , мм ⁻²		0.149	- 0.0054	0	0
Радиус кривизны штрихов R_{g} , м		œ	œ	4.735	- 102.4
Нормальный угол падения на решетку α , °		2.9	3.0	2.44	3.1
Углы дифракции стигматических точек β ₁ ; β ₂ , °		- 8.3; - 6.2	0.6; 1.8	-7;-5	0.4; 2.4
"Контрольные" длины волн, Å	$\lambda_{ m min}$	820	920	570	910
	λ_1	1558	1062	1315	1022
	λ_0	1256	1250	1032	1310
	λ_2	952	1438	748	1598
	$\lambda_{ m max}$	1690	1580	1500	1640
Обратная линейная дисперсия, Å/мм		16.67	3.33	16.59	3.33
Разрешающая способность λ/δλ		1900	9500	1550	9830
Пространственное разрешение, мкм		26	26	26	26
Линейное поле зрения, мм		2.5	без ограничений	2.5	без ограничений

Табл. 4. Параметры широкополосных изображающих спектрографов нормального падения.

Сравнение схем широкополосного изображающего спектрографа нормального падения на основе периодической сферической решетки с криволинейными штрихами приводит к следующим выводам. Схемы во внешнем порядке дифракции обладают относительно компактными габаритами, высокой светосилой, высоким спектральным и пространственным разрешением, но относительно небольшим полем зрения, в то время как схемы, работающие во внутреннем порядке дифракции, довольно громоздки, с меньшей шириной спектрального диапазона и меньшей светосилой, но обладают сверхвысоким спектральным и высоким пространственным разрешением, полем зрения, ограниченным лишь размером входной щели. Если сравнивать схему на основе VLS-решетки и схему на основе решетки с криволинейными штрихами, то VLS-решетка дает лучшее предельное пространственное разрешение вследствие использования свойства симметрии решетки, в то время как решетка с криволинейными штрихами позволяет получить лучшее предельное спектральное разрешение вследствие установки щели и детектора на круг Роуланда. Если в схеме на основе решетки с криволинейными штрихами разместить детектор не на круг Роуланда, а на вертикальную фокальную кривую (очень слабо отличающуюся от прямой), то пространственное разрешение возрастет до дифракционного качества (остаточные аберрации хоть и не равны нулю, как в случае установки источника и детектора на ось симметрии, но достаточно малы), а спектральное станет чуть хуже, чем у схем на основе VLS-решетки. При использовании в качестве детектора ПЗС-матрицы с конечным размером ячейки, обе схемы широкополосного изображающего спектрографа нормального падения будут обладать примерно эквивалентными характеристиками. Поэтому, вопрос о выборе вида схемы сводится к вопросу о технологии изготовления решетки: что проще изготовить – VLS-решетку с малым градиентом частоты штрихов p₁ или периодическую решетку с радиусом кривизны штрихов, превышающем в 5 – 20 раз радиус поверхности решетки. Если сравнивать универсальность решеток, то VLSрешетка может работать лишь в той схеме, для которой она была рассчитана, то есть является узкоспециализированной. Периодическая решетка с криволинейными штрихами может работать не только в изображающей схеме, но и в любой астигматической оптической схеме, построенной на круге Роуланда. По этой причине периодическая решетка с криволинейными штрихами является более универсальной.

3.4 Основные результаты Главы 3

Проведен анализ всех возможных вариантов оптической схемы спектрографа высокого спектрального и пространственного разрешения нормального падения с компенсацией астигматизма в широком спектральном диапазоне на основе сферической VLS-решетки и установке входной щели и детектора на оси симметрии. Обнаружено, что все характеристики

93

схемы (ширина спектрального диапазона, центральная длина волны, максимальная величина геометрической расфокусировки) определяются двумя параметрами – углами дифракции, на которых астигматическая разность равна нулю. Показано, что преимуществами схем, работающих во внешнем порядке дифракции, являются широкий диапазон, компактные габариты и высокая светосила, в то время как схемы во внутреннем порядке дифракции обладают лучшими изображающими характеристиками (в том числе сверхвысоким разрешением) и большим полем зрения.

Проанализированы все возможные варианты оптической схемы спектрографа высокого спектрального и пространственного разрешения нормального падения с компенсацией астигматизма в широком спектральном диапазоне на основе сферической периодической решетки с криволинейными штрихами и установке входной щели и детектора на круге Роуланда. Показано, что все характеристики схемы определяются двумя углами дифракции, на которых астигматическая разность равна нулю. Схемы, работающие во внешнем порядке дифракции, обладают широким спектральным диапазоном, высокой светосилой и компактными габаритами, а схемы во внутреннем порядке дают лучшие изображающие характеристики (в том числе сверхвысокое разрешение) и большее поле зрения.

Сравнение схем на основе VLS-решетки и схем на основе периодической решетки с криволинейными штрихами показывает, что существенной разницы между их характеристиками нет.

Рассчитаны четыре схемы спектрографа нормального падения для ВУФ диапазона (центральная длина волны ~ 1200 Å) – две схемы на основе сферической VLS-решетки и две схемы на основе сферической периодической решетки с криволинейными штрихами (по одной схеме во внешнем и одной во внутреннем порядке дифракции). Результаты численной трассировки подтверждают оценочные характеристики схем, полученные с помощью аналитических расчетов. Схемы во внешнем порядке обладают широким (более октавы) спектральным диапазоном, длиной ~ 1 м, высоким спектральным разрешением ($\lambda/\delta\lambda$ от 1500) и относительно небольшим линейным полем зрения (2.5 мм), а схемы во внешнем порядке – сверхвысоким спектральным разрешением ($\lambda/\delta\lambda$ от 9000), длиной ~ 5 м и практически неограниченным линейным полем зрения. Все схемы обладают пространственным разрешением на уровне ~ 26 мкм.

Глава 4. Расчет и применение многослойных апериодических Мо/Ве-зеркал в области длин волн λ > 111 Å

В мягкой рентгеновской области спектра коэффициенты отражения материалов при нормальном падении низки, поэтому для применения оптических элементов нормального падения на них необходимо наносить многослойные отражающие покрытия. Структура покрытия определяет спектр отражения оптического элемента, а, значит, и рабочий диапазон прибора в целом.

Многослойные структуры могут быть периодическими и апериодическими. Периодические структуры обладают высоким пиковым коэффициентом отражения, но узким резонансным спектром. Для задач спектроскопии чаще всего необходимо, чтобы коэффициент отражения структуры в широком диапазоне длин волн оставался постоянным. Чтобы структура обладала таким свойством, нужно подобрать толщину каждого слоя этой структуры, что, как правило, достигается с помощью оптимизационного подхода. Получившаяся структура будет апериодической. Коэффициент равномерного отражения таких структур будет значительно ниже пикового коэффициента отражения периодической структуры, но апериодические структуры обладают большим по сравнению с периодическими интегральным спектром отражения. Существует и другой подход, позволяющий получить равномерное отражение в широком спектральном диапазоне. Он заключается в последовательном нанесении нескольких периодических структур друг на друга. Такие структуры были предложены Кульманом, Юлиным и др. [72] и получили название стековых структур.

Структуры на основе Mo/Si зарекомендовали себя в области $\lambda \ge 125$ Å. В частности, апериодические Mo/Si зеркала, изготовленные по проведенным в ФИАН расчетам в Харьковском политехническом институте [55], неоднократно применялись в экспериментах [9, 48 – 55]. В районе 125 Å у кремния находится L-край поглощения, из-за чего кремнийсодержащие структуры не работают в более коротковолновых диапазонах. Для освоения диапазонов длин волн $\lambda < 125$ Å необходимо вместо кремния использовать другой легкий элемент. Одним из подходящих для этого элементов является бериллий. В настоящее время периодические структуры Мо/Ве активно исследуются в Институте физики микроструктур РАН (ИФМ РАН). На сегодняшний день в ИФМ РАН накоплен значительный опыт синтеза бериллийсодержащих периодических многослойных структур.

Перед синтезом структуры необходимо провести калибровку магнетрона. Количество калибровок равно количеству различных толщин слоев в структуре. По этой причине число

калибровок, необходимых для синтеза апериодической структуры, в общем случае совпадает с числом слоев в структуре, и провести ее не представляется возможным. По этой причине стековые структуры являются более удобными с точки зрения синтеза. Но если сделать толщины слоев апериодической структуры достаточно близкими друг к другу, то количество калибровок можно значительно уменьшить – около трех – пяти калибровок в диапазоне толщин большинства слоев и по одной на сильно отличающиеся слои, а при синтезе самой структуры пользоваться интерполяцией. Сделать это можно с помощью введения сглаживания толщин соседних слоев из одноименных материалов. Целесообразность этого подхода была продемонстрирована в работе Кожевникова и др. [70] для зеркал с равномерным отражением в широком диапазоне углов падения на фиксированной длине волны. Кроме того, такое сглаживание позволит уменьшить разброс толщин слоев в структуре. На практике плотность материала зависит от толщины напыленного слоя. Поскольку диэлектрическая проницаемость материалов в мягком рентгеновском диапазоне слабо отличается от единицы, то эта зависимость практически не сказывается на расчетном спектре отражения структуры, но вносит дополнительные сложности при ее синтезе. При синтезе контролируется не непосредственно толщина слоя, а время напыления и связанная с ним масса напыленного материала, которая изза зависимости плотности от толщины приведет к заметному отличию толщины напыленного слоя от расчетного значения, что обязательно скажется на спектре отражения структуры. Уменьшение разброса толщин слоев сделает плотность слоев из одного и того же материала примерно одинаковой для большинства слоев, что уменьшит влияние этой зависимости на результат синтеза и сделает структуру более предсказуемой.

Одной из целей настоящей работы был расчет апериодических многослойных структур на основе Мо/Ве, оптимизированных на максимальное равномерное отражение в области $\lambda > 111$ Å, а также применение синтезированной в ИФМ РАН широкополосной (111 – 138 Å) Мо/Ве структуры с равномерным отражением в диапазоне в изображающем спектрографе с пропускающей решеткой.

4.1 Оптимизация многослойных зеркал нормального падения на максимальное равномерное отражение в широком диапазоне длин волн

Классически расчет многослойной структуры на максимальное равномерное отражение в широком спектральном диапазоне при фиксированном угле падения сводится к задаче о минимизации функционала следующего вида:

97

$$F(\boldsymbol{d}) = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \left(R(\lambda, \boldsymbol{d}) - R_0 \right)^{2n} d\lambda, \qquad (77)$$

где d – вектор толщин слоев в структуре, R_0 – целевое значение коэффициента отражения, λ_{\min} и λ_{\max} – границы диапазона, n – натуральное число. Обычно выбирают n = 2, а R_0 подбирается итерационно в процессе сравнения нескольких результатов оптимизации – чем выше R_0 , тем, как правило, больше интегральный коэффициент отражения, но больше и неравномерность спектра отражения структуры. Для решения этой и многих других оптимизационных задач, касающихся расчета многослойных структур, в ФИАН была создана программа Mirror II. Коэффициент отражения структуры $R(\lambda, b)$ вычислялся по рекуррентным формулам, для оптимизации чаще всего использовался метод наискорейшего спуска, реже – генетический алгоритм, градиент *F* вычислялся аналитически [53 – 54].

Полученные в процессе минимизации (77) структуры обычно характеризуются большим разбросом толщин слоев для каждого материала. С целью уменьшения разброса толщин и повышения удобства синтеза апериодической многослойной структуры программа Mirror II была модифицирована. Функционал принял вид:

$$F(\boldsymbol{d}) = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \left(R(\lambda, \boldsymbol{d}) - R_0 \right)^{2n} d\lambda + c \sum_{k=\Delta k+1}^{N} \left(d_{k+\Delta k} - d_k \right)^{2n}, \qquad (78)$$

где *с* – коэффициент сглаживания, *N* – количество слоев в структуре, Δk – "период" сглаживания. При *c* = 0 функционал (78) совпадает с классическим (77). При *c* > 0 и Δk = 2, как в работе Кожевникова и др. [70] в процессе оптимизации будут сближаться толщины соседних слоев их одного и того же материала (одноименных слоев), а при *c* > 0 и Δk = 1 – толщины ближайших соседних слоев. При расчетах Мо/Ве структур использовались значения *N* = 82, *n* = 1, Δk = 2 или 1. Материалом нижнего слоя служил молибден, а верхнего – бериллий. Номер слоя *k* возрастает от поверхности структуры к подложке. Коротковолновая граница спектрального диапазона λ_{min} равна 111 Å. Оптимизация проводилась методом наискорейшего спуска. В качестве начального приближения бралась периодическая структура. Угол падения на зеркало был выбран равным 5° от нормали. При расчетах использовались данные оптических констант Мо и Ве, опубликованных в работах [89 – 90] и размещенных на сайте Lawrence Berkeley National Laboratory [91], и учитывались переходные слои Ве-на-Мо σ = 3 Å и Мо-на-Ве σ = 7 Å [68], где σ – половина толщины переходного слоя. Материалом подложки был выбран плавленый кварц, среднеквадратичная шероховатость подложки – 3 Å.

Согласно результатам восстановления Мо/Ве структур, проведенных в ИФМ РАН, верхний слой бериллия окисляется, и на поверхности структуры формируется слой ВеО толщиной 14 Å [71]. Сравнение спектра отражения расчетной стековой структуры, в которой не учтен слой оксида, и спектра отражения синтезированной стековой структуры позволяет сделать вывод, что этот слой не вносит значительных изменений в спектр отражения, и при расчетах его можно не учитывать.

С целью рассмотрения возможностей создания широкополосных зеркал на основе апериодической структуры Мо/Ве была проведена серия расчетов – оптимизация на максимальное равномерное отражение в спектральных диапазонах 111 – 138 Å, 111 – 150 Å, 111 – 200 Å и 111 – 222 Å. При этом коэффициент сглаживания *c* был равен нулю. Среднее значение коэффициента отражения (уровень плато) в первом диапазоне составил 15.8%, во втором – 12.6%, в третьем – 10.7%, а в четвертом – 10.3%. Последняя структура может работать и при больших длинах волн – коэффициент отражения практически линейно уменьшается от ~ 10% при $\lambda = 220$ Å до 5% при $\lambda = 290$ Å. Среднеквадратичное относительное отклонение от уровня плато составило 3.2%, 5.5%, 7.6% и 5.8% для первой, второй, третьей и четвертой структур, соответственно. Спектры отражения структур приведены на Рис. 40. Полученный результат показывает возможность создания зеркала на основе апериодической структуры Мо/Ве, обладающего коэффициентом равномерного отражения ~ 10% в диапазоне шириной не менее октавы.

Другая серия расчетов была проведена для анализа влияния коэффициента сглаживания на спектр отражения зеркала. В ней был зафиксирован диапазон 111 – 138 Å, "период" сглаживания $\Delta k = 2$, а коэффициент *c* менялся от нуля в сторону возрастания. В качестве начального приближения была выбрана одна и та же периодическая структура. На Рис. 41 приведена зависимость характеристик (уровень плато, среднеквадратичное относительное отклонение от уровня плато, разброс толщин слоев Мо и Si) получившихся при оптимизации структур от коэффициента *c*. Уровень плато практически не изменяется с ростом *c*, оставаясь на уровне чуть менее 16%, среднеквадратичная относительная неравномерность коэффициента отражения быстро, но с замедлением возрастает, разброс толщин слоев Мо сначала быстро понижается, а затем выходит на константу $d_{max} / d_{min} \approx 1.12$, а разброс толщин слоев Ве сначала резко увеличивается, а затем медленно понижается от $d_{max} / d_{min} \approx 1.9$ до $d_{max} / d_{min} \approx 1.87$. Оптимум находится там, где разброс толщин слоев Мо уменьшился, и среднеквадратичное отклонение коэффициента отражения от уровня плато минимально. Это соответствует значению коэффициента сглаживания $c = 2 \times 10^{-4} Å^{-1}$. Дальнейшее увеличение *c* не уменьшит разброс толщин слоев, но сделает зависимость толщины слоя *d* от его номера *k* более плавной. При этом большинство слоев структуры будут обладать толщиной, находящейся в некотором небольшом интервале, что может упростить предварительную калибровку установки магнетронного напыления.



Рис. 40. Расчетные спектры отражения апериодических Мо/Ве структур, оптимизированных на максимальное равномерное отражение в широком спектральном диапазоне. a) – 111 – 138 Å; б) – 111 – 150 Å; в) – 111 – 200 Å; г) – 111 – 222 Å.



Рис. 41. Влияние значения коэффициента сглаживания *с* на уровень плато (синяя пунктирная линия), среднеквадратичное относительное отклонение от уровня плато (штриховая зеленая линия), разброс толщин слоев $d_{\text{max}} / d_{\text{min}}$ Мо (красная сплошная линия) и Ве (черная сплошная линия).

Влияние параметров сглаживания на спектр и структуру были рассмотрены для диапазона 111 – 138 Å. Для этого были произведены следующие расчеты: оптимизация при c = 0, при $c = 9.0 \times 10^{-5}$ Å⁻¹ и $\Delta k = 2$ (небольшое сглаживание), при $c = 4.2 \times 10^{-4}$ Å⁻¹ и $\Delta k = 2$ (избыточное сглаживание) и $c = 2.0 \times 10^{-5}$ и $\Delta k = 1$. Спектры отражения этих структур приведены на Рис. 42a, 42b, 42д и 42ж, а зависимость толщины слоя от порядкового номера – на Рис. 426, 42г, 42е и 42з, соответственно. Из сравнения Рис. 42а и 42б с Рис. 42в и 42г видно, что при добавлении слабого сглаживания сначала слегка увеличивается отклонение спектра отражения от уровня плато. Одновременно с этим на графике зависимости толщины слоя от номера кривые становятся более плавными – провалы слегка приподнимаются, а пики – проседают. При дальнейшем увеличении коэффициента c неравномерность спектра отражения нарастает (Рис. 42д), а на графиках толщины слоя от номера, наоборот – помимо сглаживания пиков и провалов происходит еще и уменьшение их количества (Рис. 42е). К удивительно хорошим результатам приводит "период" сглаживания $\Delta k = 1$ – уровень плато по-прежнему превышает



15% (Рис. 42ж), спектр обладает равномерностью не хуже, чем в случае слабого сглаживания при $\Delta k = 2$. Толщины всех слоев при этом описываются плавной общей огибающей (Рис. 423).

Рис. 42. Спектр отражения апериодической многослойной структуры (а, в, д, ж) и зависимость толщины слоя от его порядкового номера (б, г, е, з). а), б) – расчет без сглаживания, в), г) – небольшое сглаживание толщин одноименных слоев, д), е) – сильное сглаживание толщин одноименных слоев, д), е) – сильное сглаживание толщин одноименных слоев. На спектрах оранжевой горизонтальной прямой обозначен уровень плато.

Уровень плато у первых трех структур составляет ~ 15.8%, а среднеквадратичное отклонение от него – порядка 3.4%, 4.0% и 8.9%, соответственно. Четвертая структура характеризуется уровнем плато ~ 15.5%, среднеквадратичным отклонением от уровня плато ~ 4.1% и меньшим разбросом толщин слоев Мо, чем у второй структуры. Поэтому четвертую структуру можно считать оптимальной как с точки зрения спектра отражения, так и с точки зрения удобства ее синтеза. Необычной особенностью всех структур, оптимизированных на максимальное равномерное отражение в диапазоне 111 - 138 Å является возрастание толщины слоя с его порядковым номером (а, значит, с его глубиной в структуре).

Расчеты структур без сглаживания, с оптимальным сглаживанием с "периодом" $\Delta k = 2$ и с оптимальным сглаживанием с "периодом" $\Delta k = 1$ были проделаны и для диапазонов 111 – 150 Å, 111 – 200 Å и 111 – 222 Å. Для 111 – 150 Å без сглаживания структура обладает уровнем плато 12.5%, относительным среднеквадратичным отклонением от уровня плато 5.5% и разбросом толщин слоев Мо от 25 до 35 Å. Оптимальное сглаживание приводит к понижению уровня плато до 12.4% и росту относительного среднеквадратичного отклонения от уровня плато до 6.2% при том же разбросе толщин слоев Мо. Оптимальное сглаживание при $\Delta k = 1$ приводит к уровню плато 12.4% и к 6.0% относительного среднеквадратичного отклонения от него. Разброс толщин слоев Мо составил от 20 до 37 Å. При диапазоне 111 – 200 Å для случаев без сглаживания, с оптимальным сглаживанием с "периодом" $\Delta k = 2$ и оптимального сглаживания с $\Delta k = 1$ получились результаты: уровень плато 10.7%, 10.5% и 10.5%, среднеквадратичное относительное отклонение от уровня плато 7.7%, 9.5% и 8.5%, разброс толщин слоев Мо от 20 до 45 Å и от 20 до 49 Å, соответственно. Отсюда следует, что эффективность сглаживания снижается с увеличением ширины спектрального диапазона равномерного отражения зеркала.

Это происходит вследствие неизбежного роста интервала между минимальной и максимальной толщиной слоя – разброс суммарной толщины двух ближайших слоев пары будет пропорционален ширине спектрального диапазона, и при октаве длин волн отношение максимальной суммарной толщины пары слоев к минимальной будет не меньше двух. Для оценки влияния коэффициента сглаживания *c* на спектр отражения структуры в диапазоне 111 – 222 Å и разброс толщин слоев была проведена серия расчетов с увеличивающимся от 0 коэффициентом сглаживания *c* и $\Delta k = 2$ по аналогии с диапазоном 111 – 138 Å. Результаты серии расчетов приведены на Рис. 43. Уровень плато медленно понижается с ростом *c*, среднеквадратичное относительное отклонение от него быстро, но с замедлением, растет, разброс толщин слоев Ве снижается сначала резко от $d_{\text{max}}/d_{\text{min}} = 3.7$ до ~ 2.1, а затем – плавно до 1.6, а Мо, наоборот, сначала подскакивает от 1.6 до 2.5, а затем – плавно снижается примерно от

2.5 до 2.2. Таким образом, для широких диапазонов длин волн коэффициент сглаживания компенсирует уменьшение разброса толщин слоев одного материала ростом разброса другого, а при его избыточном увеличении главным образом уменьшает количество осцилляций на графике зависимости толщины слоя от его номера и ухудшает равномерность спектра отражения структуры. "Период" сглаживания $\Delta k = 1$ при любом отличном от 0 значении *с* приводит к понижению плато и сильному ухудшению равномерности спектра отражения для широких диапазонов длин волн, не влияя при этом на разброс толщин слоев. Это означает неприменимость единичного "периода" сглаживания при расчете зеркал с равномерным отражение в очень широких спектральных диапазонах. Сглаживание с "периодом" $\Delta k = 2$ тоже теряет в этих случаях свою эффективность. Оптимальное значение коэффициента сглаживания для диапазона 111 – 222 Å очень близко к нулю: $c = 2.7 \times 10^{-6} Å^{-1}$. Сравнение спектров отражения структур, оптимизированных на равномерное максимальное отражение в диапазоне 111 – 222 Å, а так же зависимостей толщины слоев от порядкового номера приведено на Рис. 44.



Рис. 43. Влияние значения коэффициента сглаживания *c* на уровень плато (синяя пунктирная линия), среднеквадратичное относительное отклонение от уровня плато (штриховая зеленая линия), разброс толщин слоев $d_{\text{max}} / d_{\text{min}}$ Мо (красная сплошная линия) и Ве (черная сплошная линия).



Рис. 44. Сравнение спектров отражения (а, в) и зависимости толщины слоя от номера пары (б, г) структур, оптимизированных на равномерное отражение в диапазоне 111 - 222 Å. a), б) – коэффициент сглаживания c=0; в), г) – оптимальный коэффициент сглаживания $c=2.7 \times 10^{-6}$ Å⁻¹.

При оптимизации без сглаживания уровень плато составил 10.3%, среднеквадратичная относительная неоднородность спектра отражения – 5.8%, а при оптимизации с оптимальным сглаживанием уровень плато 10.1% и среднеквадратичное относительное отклонение от него – порядка 6.6%. Снижение уровня плато и увеличение среднеквадратичной неравномерности связаны в основном с уменьшением коэффициента отражения зеркала в длинноволновой части рабочего спектрального диапазона. Разброс толщин слоев Мо почти не изменился, разброс толщин слоев Ве снизился, уменьшилась амплитуда осцилляций на графиках зависимости толщины слоя от номера пары. Для диапазонов 111 – 150 Å, 111 – 200 Å и 111 – 222 Å толщины слоев убывают с глубиной.

Таким образом, показана теоретическая возможность создания широкополосного зеркала нормального падения с равномерным отражением на уровне ~ 10% в диапазоне длин волн

105

 $\lambda > 111$ Å шириной около октавы на основе апериодической многослойной структуры Мо/Ве. Проведенный анализ влияния сглаживания толщин слоев демонстрирует уменьшение разброса толщин слоев для структур, оптимизированных на равномерное отражение в относительно узких спектральных диапазонах, при сохранении уровня плато и хорошей равномерности спектра отражения. С расширением спектрального диапазона эффективность сглаживания снижается, и усиливается его негативное влияние на уровень плато и равномерность спектра отражения структуры.

4.2 Применение широкополосного зеркала в схеме изображающего дифракционного спектрографа с пропускающей решеткой

Первые отечественные широкополосные Мо/Ве зеркала, обладающие равномерным отражением в диапазоне 111 – 138 Å были созданы в ИФМ РАН на сферических (радиуса 1 м) подложках, изготовленных в ФИАН. В основе трех зеркал лежала одна и та же стековая расчетная структура, состоящая из шести периодических структур, нанесенных друг на друга. Оптимизационный расчет стековой структуры был проведен в ИФМ РАН.

Поскольку стековые структуры представляют собой подмножество во множестве апериодических, они обладают чуть меньшим уровнем плато и несколько большей среднеквадратичной неоднородностью. Зависимость коэффициентов отражения зеркал от длины волны, измеренная на рефлектометре [67] в ИФМ РАН, приведена на Рис. 45. Уровень плато и среднеквадратичное относительное отклонение от него для структур составляют 13.8% и 10.7% (Рис. 45а), 12.4% и 10.0% (Рис. 45б), 14.3% и 9.4% (Рис. 45в), соответственно.



Рис. 45. Измеренная на рефлектометре зависимость коэффициента отражения синтезированных стековых многослойных структур от длины волны. Оранжевой горизонтальной линией обозначен уровень плато.

На основе синтезированного в ИФМ РАН зеркала в ФИАН был собран дифракционный спектрограф с пропускающей решеткой. Схема прибора приведена на Рис. 46. Первая серия экспериментов проводилась с вольфрамовой лазерно-плазменной мишенью, дающей квазинепрерывный спектр. При этом на детекторе будет отображен спектр отражения зеркала. Во время первой серии экспериментов расстояние "источник – щель" не соответствовало расстоянию, необходимому для отображения источника на детектор и получения пространственного разрешения. По этой причине в течение всей первой серии экспериментов прибор был астигматичен. Входная щель и детектор размещены на круге Роуланда, связанном с зеркалом. Расстояние "решетка – детектор" было равно ~ 336 мм. Ширина щели ~ 30 мкм.



Рис. 46. Схема спектрографа с пропускающей решеткой. Р – лазерно-плазменный источник, S – входная щель, М – широкополосное многослойное стековое Мо/Ве зеркало, G – пропускающая дифракционная решетка, D – ПЗС-детектор.

Оцифровка отсчетов ПЗС-матрицы с помощью суммирования отсчетов поперек направления дисперсии привела к спектрам, отличающимся от приведенных на Рис. 45. Спектры состояли из двух частей, в каждой из которых коэффициент отражения можно было считать равномерным, но уровни плато отличались примерно в два раза (Рис. 47). Граница между частями проходила в окрестности длины волны $\lambda = 125$ Å, что соответствует L-краю кремния. Поскольку ПЗС-детектор сделан на кремниевой основе, то исходя из сравнения измерения коэффициентов отражения на рефлектометре в ИФМ РАН и спектра отражения, полученного на дифракционном спектрографе в ФИАН, можно определить толщину мертвого слоя детектора. С помощью данных по оптическим константам кремния [91 – 93], была подобрана толщина мертвого слоя детектора. На Рис. 48 приведено сравнение отношения спектра отражения зеркал, полученного на спектрографе, и коэффициента отражения зеркал, измеренного на рефлектометре, с расчетным пропусканием слоя кремния толщино 54 нм. А на Рис. 49 представлено сравнение восстановленного с учетом 54 нм слоя кремния спектра отражения на рефлектометре в ИФМ РАН. Наблюдается хорошее согласие между ними.



Рис. 47. Оцифровка отсчетов ПЗС-детектора, полученная суммированием отсчетов по 34 ячейкам поперек направления дисперсии (синяя гистограмма), и коэффициент отражения зеркала №3, измеренный на рефлектометре в ИФМ РАН (оранжевая линия). На длинах волн больше 125 Å они почти совпадают, а на длинах волн менее 125 Å отличаются почти в два раза.



Рис. 48. Отношение результатов оцифровки исходного спектра зеркала, полученного на спектрографе в ФИАН, к коэффициенту отражения зеркала, измеренному на рефлектометре в ИФМ РАН. Красным, желтым и синим цветами – зеркала №1 – 3. Фиолетовой жирной кривой – результат усреднения отношения по всем трем зеркалам, зеленым цветом – расчет пропускания слоя кремния толщиной 54 нм, черная жирная линия – свертка пропускания 54 нм слоя кремния с аппаратной функцией спектрографа (ширина щели 30 мкм и размер ячейки детектора 13 мкм).


Рис. 49. Восстановленный с учетом 54 нм мертвого слоя Si детектора спектр отражения зеркала (синяя гистограмма). Для сравнения оранжевым цветом приведены результаты измерения коэффициента отражения Мо/Ве зеркала №3 на рефлектометре в ИФМ РАН.

Для оценки дисперсии пропускающей решетки были произведены измерения частоты ее штрихов по дифракции излучения Не-Ne лазера. Помимо частоты рабочих штрихов была оценена их скважность, а также установлен вид и скважность поддерживающей структуры решетки. Решетка обладает частотой штрихов $p = 989 \text{ мm}^{-1}$ со скважностью (отношение просвета между штрихами к периоду) 0.44. Регулярная поддерживающая структура имеет сложный вид. Во-первых – крупная квадратная структура с частотой ~ 1 мм⁻¹, во-вторых – средняя квадратная структура с частотой ~ 5 мм⁻¹ и в-третьих – мелкая структура, ориентированная ортогонально рабочим штрихам, с частотой ~ 49 мм⁻¹ и скважностью ~ 0.55. Рабочие штрихи и поддерживающая структура приведены на Рис. 50. Дифракция на последней при стигматическом варианте спектрографа будет приводить к наложению изображений источника друг на друга в нулевом, первом и минус первом порядках дифракции. Из-за этого для получения пространственного профиля спектральных линий необходимо решать обратную задачу разделения этих порядков.

Следующая серия экспериментов была проведена со стигматическим вариантом спектрографа. Расстояние "источник-щель", необходимое для резкого изображения источника

на детектор в вертикальном направлении, было выставлено с использованием He-Ne юстировочного лазера и составило около 35 мм. В качестве мишеней использовались LiF и Mg, дающие линейчатые спектры, содержащие линии в диапазоне 111 - 138 Å. Ширина входной щели была уменьшена вдвое и составила 15 мкм. Обратная линейная дисперсия равна 30.09 Å/мм. Умножение этой величины на удвоенный размер ячейки детектора приводит к спектральному разрешению 0.78 Å и разрешающей способности ~ 160 в центре рабочего диапазона ($\lambda = 125$ Å).



Рис. 50. Схематическое изображение рабочих штрихов решетки и ее поддерживающей структуры. Слева две крупные квадратные структуры со стороной ~ 1 мм и ~ 0.2 мм (частоты 1 мм^{-1} и ~ 5 мм⁻¹). Справа в подробном масштабе показана элементарная ячейка квадратной структуры со стороной ~ 0.2 мм, где приведена горизонтальная поддерживающая структура с частотой ~ 49 мм⁻¹ (период около 20 мкм) и скважностью ~ 0.55, а также вертикальные рабочие штрихи (период ~ 1 мкм, скважность ~ 0.44).

На Рис. 51 приведен спектр лазерной плазмы LiF, полученный за один импульс Nd:YAG лазера. Наиболее яркие линии отвечают длинам волн 112.9 Å (F VII), 127.7 Å (F VII), ~ 135 Å (Li III, F V, F VI, F VII) и 139.8 Å (F VI). Резкая граница света и тени снизу каждой спектральной линии соответствует уровню мишени. В дальнейшем, при разлете плазмы, интенсивность снижается. Из-за дифракции на поддерживающей структуре каждая спектральная линия отчетливо видна трижды – в нулевом, первом и минус первом порядке дифракции на горизонтальной поддерживающей структуре (заметно по трем границам света и тени), и все три изображения накладываются друг на друга.



Рис. 51. Стигматический спектр лазерной плазмы LiF. Горизонтальное направление соответствует направлению дисперсии, вертикальное – пространственное направление. Белой скобкой указан пространственный масштаб. Наблюдается дифракция на горизонтальной поддерживающей структуре. Резкая граница света и тени, соответствующая уровню мишени, отчетливо видна в первом, нулевом и минус первом порядках дифракции на ней.

Для получения пространственного профиля спектральной линии иона F VII была решена обратная задача. Исходя из скважности горизонтальной поддерживающей структуры, интенсивность первых порядков дифракции будет составлять ~ 30% от нулевого, а вторых порядков – менее 3%, что пренебрежимо мало. Пусть реальное пространственное распределение интенсивности спектральной линии описывается функцией I(z). Пусть Δz расстояние между изображениями на детекторе в нулевом и первом порядками дифракции на поддерживающей структуре: $\Delta z \approx L (\lambda / d_{hs})$, где d_{hs} – период горизонтальной поддерживающей структуры, а $L \sim 336$ мм – расстояние от решетки до детектора. Тогда распределение интенсивности на детекторе I_d будет суммой интенсивностей нулевого, первого и минус первого порядка дифракции на этой поддерживающей структуре:

$$I_{d}(z) \approx I(z) + \alpha_{1} \left(I(z + \Delta z) + I(z - \Delta z) \right), \tag{79}$$

где *α*₁ ~ 0.3 – отношение интенсивности первого и нулевого порядков дифракции на поддерживающей структуре. В переводе на отсчеты детектора, считанные с ячейки с номером *n* (нумерация вдоль спектральной линии), выражение (79) примет вид:

$$I_{n} = I_{n}^{0} + \alpha_{1} \left(I_{n+\Delta n}^{0} + I_{n-\Delta n}^{0} \right),$$
(80)

где I_n – число отсчетов, считанное из ячейки с номером *n*, а I_n^0 – число отсчетов в этой же ячейке детектора в случае, если бы не было дифракции на поддерживающей структуре – это и

есть искомый профиль. Величина Δn – это Δz , выраженное в количестве ячеек: $\Delta z / \Delta n = 13$ мкм. Если рассмотреть I_n^0 как независимые параметры, то для восстановления профиля спектральной линии I_n^0 удобно применить метод градиентного спуска. Пусть в эксперименте в *n*-й ячейке число отсчетов детектора было равно I_n^{exp} , тогда функционал оптимизации принимает вид:

$$F = \sum_{n} \left(I_{n}^{\exp} - I_{n} \right)^{2} = \sum_{n} \left(I_{n}^{\exp} - I_{n}^{0} - \alpha_{1} \left(I_{n+\Delta n}^{0} + I_{n-\Delta n}^{0} \right) \right)^{2}.$$
(81)

Отсюда вычисляется градиент F:

$$\frac{\partial F}{\partial I_n^0} = -2\left(I_n^{\exp} - I_n^0 - \alpha_1\left(I_{n+\Delta n}^0 + I_{n-\Delta n}^0\right)\right) - 2\alpha_1\left(I_{n+\Delta n}^{\exp} - I_{n+\Delta n}^0 - \alpha_1\left(I_{n+2\Delta n}^0 + I_n^0\right)\right) - 2\alpha_1\left(I_{n-\Delta n}^{\exp} - I_{n-\Delta n}^0 - \alpha_1\left(I_n^0 + I_{n-2\Delta n}^0\right)\right) = -2\left(I_n^{\exp} - I_n\right) - 2\alpha_1\left(I_{n+\Delta n}^{\exp} - I_{n+\Delta n}^0 + I_{n-\Delta n}^{\exp} - I_{n-\Delta n}^0\right).$$
(82)

Спуск принимает вид:

$$I_n^0(i+1) = I_n^0(i) - \frac{\partial F}{\partial I_n^0}\tau, \qquad (83)$$

где τ – шаг метода, а *i* – номер итерации. Для подбора наилучших значений α_1 и Δn спуск был проделан несколько раз. Получившийся профиль I_n^0 был аппроксимирован гладкой кривой. Результат решения обратной задачи приведен на Рис. 52. Перед решением обратной задачи было произведено суммирование отсчетов детектора по семи ячейкам в направлении дисперсии. На Рис. 52 видно, что граница света и тени по ширине составляет ~ 50 мкм. Эта величина и соответствует пространственному разрешению спектрографа.

В диапазоне 111 – 138 Å находится большое количество линий ионов Mg III – Mg VI. Спектр лазерной плазмы магниевой мишени, полученный за три импульса лазера, приведен на Рис. 53. Из-за слабого сигнала и усилившейся в три раза инфракрасной засветки ПЗС-матрицы рассеянным в вакуумной камере инфракрасным излучением Nd:YAG лазера, порядки дифракции на горизонтальной поддерживающей структуре после вычитания засветки почти не видны.



Рис. 52. Результат восстановления профиля спектральной линии 127.7 Å F VII. Синим цветом обозначены считанные в эксперименте отсчеты детектора, черным цветом – вклад нулевого, первого и минус первого порядков дифракции в изображение на детекторе – восстановленный пространственный профиль линии, оранжевым цветом – сумма черных линий, находится в хорошем согласии с экспериментальным результатом.



Рис. 53. Стигматический спектр лазерной плазмы Mg, полученный за три импульса Nd:YAG лазера. Астериском указаны неразрешенные группы линий, центральная длина волны которой указана в ангстремах. Группы линий ионов Mg занимают практически весь рабочий диапазон прибора. Вертикальной скобкой обозначен пространственный масштаб.

4.3 Основные результаты главы 4

Обнаружена возможность создания широкополосного зеркала на основе апериодической многослойной структуры Мо/Ве в спектральной области $\lambda > 111$ Å шириной не менее октавы с равномерным отражением на уровне не менее 10%. Проведен анализ влияния сглаживания толщин слоев на спектр отражения зеркал и разброс толщин слоев. Сглаживание толщин слоев уменьшает разброс толщин слоев при относительно узких спектральных диапазонах оптимизации, но его эффективность падает при увеличении ширины диапазона.

Синтезированное в ИФМ РАН зеркало было применено для построения спектральных изображений источника в экспериментах с лазерной плазмой. Благодаря диапазону равномерного отражения зеркала 111 – 138 Å в эксперименте с плазмой вольфрама, дающей квазинепрерывный спектр, была толщина мертвого слоя кремния ПЗС-матрицы с обратной засветкой была оценена величиной 54 нм. В эксперименте с лазерной плазмой LiF, обладающей линейчатым спектром, был восстановлен пространственный профиль распределения интенсивности спектральной линии 127.7 Å F VII.

Основные результаты данной главы были опубликованы в статье [Б6] из списка публикаций автора, на которых основана данная работа.

Заключение

Настоящая работа посвящена разработке и исследованию оптических элементов и спектральных приборов на их основе для вакуумной ультрафиолетовой и мягкой рентгеновской области спектра, а также совершенствованию технологии изготовления этих элементов. Все поставленные в работе цели были достигнуты и привели к следующим основным результатам:

1. Разработан метод решения "обратной" задачи интерференционной литографии, основанный на аналитическом обращении прямой задачи с последующей оптимизацией схемы записи в лучевом приближении. Метод был успешно применен при изготовлении сферической VLS-решетки спектрографа скользящего падения с плоским полем с помощью технологии интерференционной литографии в НПО ГИПО. Совпадение измеренной зависимости частоты штрихов у изготовленной решетки с расчетной (*p*/Δ*p* ~ 1000) подтверждает правильность расчета схемы записи.

2. Разработан метод расчета спектрографа скользящего падения с плоским полем на основе сферической VLS-решетки, опирающийся на аналитические следствия принципа Ферма и последующую численную трассировку лучей. Произведен расчет семейства таких приборов – компактный (длина ~ 25 см) спектрограф для диапазона 90 – 250 Å с разрешающей способностью ~ 400, полуметровый прибор для диапазона 50 – 275 Å с разрешающей способностью ~ 850 и длиннофокусный (длина ~ 1.5 м) коротковолновый прибор с разрешающей способностью ~ 2400. На основе этих расчетов был создан и успешно испытан при регистрации спектров лазерной плазмы первый отечественный прибор такого класса – полуметровый прибор для диапазона 50 – 275 Å с высокой разрешающей способностью ~ 800.

3. Создан мощный инструмент разработки спектрографов скользящего падения с плоским полем. В цикл разработки включены все этапы, начиная от расчета оптической схемы прибора и заканчивая его испытанием в эксперименте. Цикл учитывает возможные обратные связи – например, модификацию схемы спектрографа под изготовленную VLS-решетку в том случае, когда зависимость частоты штрихов от координаты отличается от расчетного закона.

4. В координатах β_1 и $\Delta\beta = \beta_2 - \beta_1$ (β_1 и β_2 – углы дифракции, на которых дифрагированные пучки стигматичны) составлены карты характеристик (астигматической разности, относительной ширины спектрального диапазона, расстояния между щелью и детектором и центральной длины волны) двух классов схем изображающего широкополосного спектрографа нормального падения 1) на основе сферической VLS-решетки с размещением входной щели и детектора на оси симметрии решетки, 2) на основе сферической периодической

решетки с криволинейными штрихами с размещением входной щели и детектора на круге Роуланда. Проведен анализ этих карт.

5. Рассчитаны два широкополосных изображающих ВУФ-спектрографа нормального падения с VLS-решеткой и два спектрографа с периодической решеткой с криволинейными штрихами. Первые два прибора обладают габаритами 1 м и 5 м, диапазоном 820 – 1690 Å и 980 – 1520 Å, разрешающей способностью 1900 и 9500, пространственным разрешением 26 мкм, линейным полем зрения 2.5 мм и полем зрения, ограниченным физическим размером входной щели, работают в первом внешнем и первом внутреннем порядке дифракции, соответственно. Два других прибора имеют следующие характеристики: габариты 1 м и 5 м, диапазон 570 – 1500 Å и 910 – 1640 Å, разрешающая способность 1550 и 9800, пространственное разрешение 26 мкм, линейное поле зрения 2.5 мм и поле зрения, ограниченное физическим размером входной щели, также работают в первом внешнем и первом внешнем и первом внутреннем порядке дифракции, соответственно.

6. Рассмотрена возможность создания широкополосных зеркал нормального падения на основе многослойной апериодической структуры Мо/Ве в диапазоне длин волн $\lambda > 111$ Å. Рассчитаны многослойные апериодические структуры обладающие равномерным отражением в диапазонах 111 – 138, 111 – 150, 111 – 200 и 111 – 222 Å на уровне 15.8%, 12.6%, 10.7% и 10.3%, с относительным среднеквадратичным отклонением коэффициента отражения от среднего 3,2%, 5,5%, 7,6% и 5,8%, соответственно. При расчете структур с относительно небольшой шириной спектра равномерного отражения сглаживание толщин слоев позволяет уменьшить их разброс, практически не понижая уровень плато и не ухудшая равномерность, но упрощая синтез таких структур.

7. Синтезированные в ИФМ РАН сферические широкополосные зеркала нормального падения с равномерным отражением на уровне 14% в диапазоне 111 – 138 Å на основе стековой структуры Мо/Ве были применены в качестве фокусирующего оптического элемента в схеме изображающего дифракционного спектрографа со свободновисящей пропускающей решеткой (1000 мм⁻¹). При испытании спектрографа была оценена толщина мертвого кремниевого слоя ПЗС-матрицы, составившая (54±0.5) нм, получены линейчатые спектры лазерной плазмы LiF и Mg, и восстановлено пространственное распределение интенсивности спектральной линии 127.7 Å иона F VII, искаженное поддерживающей структурой решетки. Спектральная разрешающая способность прибора составила ~ 160, пространственное разрешение ~ 50 мкм.

Благодарности

Работа была выполнена в отделе Спектроскопии отделения Оптики Физического института им. П. Н. Лебедева РАН (ФИАН) и на кафедре Электрофизики физтех-школы физики и исследований им. Ландау МФТИ (ГУ) под руководством в. н. с. ФИАН д. ф.-м. н. Евгения Николаевича Рагозина, которому автор выражает глубокую благодарность.

Автор благодарит Вишнякова Евгения Александровича и Шатохина Алексея Николаевича за теоретические обсуждения и сотрудничество в проведении экспериментов.

Автор выражает благодарность Пирожкову А. С. за помощь в модификации программы оптимизации многослойных структур Mirror II.

Автор благодарит М.М. Барышеву, С.А. Гарахина, В.Н. Полковникова, Р.М. Смертина и М.В. Свечникова за синтез и измерение многослойного Мо/Ве-зеркала.

Автор выражает глубокую благодарность Савинову Сергею Юрьевичу, зам. зав. кафедры Электрофизики Физтех-школы физики и исследований им. Ландау.

Список цитируемой литературы

1. Samson J.A.R., Techniques of vacuum ultraviolet spectroscopy. // New York: Wiley – 1967.

2. Mrowka S., Underwood J.H., Gullikson E.M., Batson P.J. Laser-produced plasma-based reflectometer for EUV metrology. // Proc. SPIE. – 2000. – T. 3997. – C. 819.

3. Phillips K.J.H., Feldman U., Landi E., Ultraviolet and X-ray spectroscopy of the solar atmosphere. // Cambridge: Cambridge University Press – 2008.

4. Boullet J., Zaouter Y., Limpert J., Petit S., Mairesse Y., Fabre B., Higuet J., Mével E., Constant E., Cormier E. High-order harmonic generation at a megahertz-level repetition rate directly driven by an ytterbium-doped-fiber chirped-pulse amplification system. // Opt. Lett. – 2009. – T. 34. – C. 1489.

5. Hädrich S., Rothhardt J., Krebs M., Demmler S., Klenke A., Tünnermann A., Limpert J. Single-pass high harmonic generation at high repetition rate and photon flux. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2016. – T. 49. – C. 172002.

6. Rothhardt J., Hädrich S., Shamir Y., Tschnernajew M., Klas R., Hoffmann A., Tadesse G.K., Klenke A., Gottschall T., Eidam T., Limpert J., Tünnermann A., Boll R., Bomme C., Dachraoui H., Erk B., Di Fraia M., Horke D.A., Kierspel T., Mullins T., Przystawik A., Savelyev E., Wiese J., Laarmann T., Küpper J., Rolles D. High-repetition-rate and high-photon-flux 70 eV high-harmonic source for coincidence ion imaging of gas-phase molecules. // Opt. Express. – 2016. – T. 24. – C. 18133.

7. Heyl C.M., Güdde J., L'Huillier A., Höfer U. High-order harmonic generation with μJ laser pulses at high repetition rates. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2012. – T. 45. – C. 074020.

8. Pirozhkov A.S., Kando M., Esirkepov T.Zh., et al. Soft-x-ray harmonic comb from relativistic electron spikes // Phys. Rev. Lett. – 2012. – T. 108. – № 13. – C. 135004.

9. Kando M. et al. Enhancement of photon number reflected by the relativistic flying mirror //Physical review letters. – 2009. – T. 103. – №23. – C. 235003.

10. Rowland H. A. Preliminary notice of the results accomplished in the manufacture and theory of gratings for optical purposes // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. $-1882. - T. 13. - N_{\odot}. 84. - C. 469-474.$

Schumann V. über die photographie der lichtstrahlen kleinster wellenlänge // Akad. Weiss. Wien. –
 1983. – T. 102. – №2A. – C. 625.

Lyman T. The spectrum of hydrogen in the region of extremely short wave-length // Mem. Am.
 Acad. Arts Sci. – 1906. – T 13. – №3.

13. Lyman T. An extension of the spectrum in the extreme ultra-violet // Nature. – 1914. – T. 93. – C. 241.

14. Osgood T. H. X-ray spectra of long wave-length // Phys. Rev. - 1927. - T. 30. - C. 567.

15. Compton K. T., Boyce J. C. A broad range vacuum spectrograph for the extreme ultraviolet // Rev. Sci. Inst. – 1934. – T. 5. – C. 218.

16. Shenstone A. G. The second spectrum of silicon // Proc. Roy. Soc. – 1961. – T. A261, – C. 153.

17. Wilkinson P. G. A high resolution spectrograph for the vacuum ultraviolet // J. Molecular Spectrosc. -1957. - T. 1. - C. 288.

18. Brix P. A., Herzberg G. Fine structure of the schumann-runge bands near the convergence limit and the dissociation energy of the oxygen molecule // Canad. J. Phys. -1954. - T. 32. - C. 110.

19. Douglas A. E., Potter J. G. A ten-meter grating spectrograph for the vacuum ultraviolet. // J. Appl. Optics. – 1962. – T. 1. – C. 727.

20. Mack J. E., Stehn J. R., Edlen B. On the concave grating spectrograph, especially at large angles of incidence // J. Opt. Soc. Amer. – 1932. – T. 22. – C. 245.

21. Эдлен Б. Измерение длин волн в вакуумной ультрафиолетовой области спектра. // УФН. – 1966. – Т. 89. – № 3. – С. 483.

22. Shevelko A.P., Shmaenok L.A., Churilov S.S., Bastiaensen R. K. F. J., and Bijkerk F. Extreme ultraviolet spectroscopy of a laser plasma source for lithography. // Phys. Scr. – 1998. – T. 57. – C. 276.

23. Cornu M.A. Cornu A. Verifications numeriques relatives aux proprietes focales des reseaux diffringents plans. // Comptes Rendus Acad. Sci. – 1893. – T. 117. – C. 1032.

24. Sirks J.L. On the astigmatism of Rowland's concave gratings. // Astronomy and Astrophys. – 1894. – T 13. – C. 763.

25. Герасимов Ф.М., Яковлев Э.А., Пейсахсон И.В., Кошелев Б.В. Вогнутые дифракционные решетки с переменным шагом. // Опт. и спектр. – 1970. – Т.28. – Вып.4. – С. 790.

26. Harada T., Kita T. Mechanically ruled aberration-corrected concave gratings. // Appl. Opt. – 1980.
- T. 19. – №. 23. – C. 3987.

27. Kita T., Harada T., Nakano N., Kuroda H. Mechanically ruled aberration-corrected concave gratings for a flat-field grazing-incidence spectrograph. // Appl. Opt. – 1983. – T. 22. – №4, C. 512.

28. Harada T. et al. Design of a high-resolution extreme-ultraviolet imaging spectrometer with aberration-corrected concave gratings. //Appl. opt. – 1998. – T. 37. – №. 28. – C. 6803.

29. Hettrick M C, Underwood J H. Varied-space grazing incidence gratings in high resolution scanning spectrometers. // AIP Conf. Proc. – 1986. – T. 147. – C 237.

30. Underwood J H, Gullikson E M, Koike M, Mrowka S. Experimental comparison of mechanically ruled and holographically recorded plane varied-line-spacing gratings. // Proc. SPIE. – 1997. – T. 3150. – C. 40.

31. Wang J-J, Mao Y E, Shi T, Chang R, Qiao S. Design of a high flux VUV beamline for low energy photons. // Chin. Phys. C. – 2015. – T. 39. – №4. – C. 048001.

32. Du L, Du X, Wang Q, Zhong J. Design of the new soft X-ray beamline for in situ analysis of energy materials at National Synchrotron Radiation Laboratory. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. – 2018. – T. 877. – C. 65.

33. Hettrick M.C., Bowyer S., Malina R.F., Malina R.F., Martin C., Mrowka S. Extreme ultraviolet explorer spectrometer. // Appl. Opt., – 1985. – T. 24. – №12. – C. 1737.

34. Neely D., Chambers D., Danson C., Norreys P., et al. A multi-channel soft X-ray flat-field spectrometer. // AIP Conf. Proc. – 1998. – T. 426. – C. 479.

35. Frassetto F., Coraggia S., Miotti P., Poletto L. Grazing-incidence spectrometer for soft X-ray solar imaging spectroscopy. // Opt. Express. – 2013 – T. 21. – №15 – C. 18290.

36. Beiersdorfer P., Magee E. W., et al. Flat-field grating spectrometer for high-resolution soft x-ray and extreme ultraviolet measurements on an electron beam ion trap // Review of Scientific Instruments. $-2004. - T. 75. - N \ge 10. - C. 3723.$

37. Dunn J., Magee E. W., Shepherd R., et al. High resolution soft x-ray spectroscopy of low Z K-shell emission from laser-produced plasmas. // Review of Scientific Instruments. – 2008. – T. 79. – C. 10E314.

38. G. Ghiringhelli, A. Piazzalunga et al. SAXES, a high resolution spectrometer for resonant x-ray emission in the 400 – 1600 eV energy range // Review of Scientific Instruments. – 2006. – T. 77. – C. 113108.

39. Li Z., Li, B. Towards an extremely high resolution broad-band flat-field spectrometer in the 'water window. // J. Synchrotron Rad. – 2019. – T. 26. – C. 1058.

40. Imazono T., Ukita R., et al. Performance of a flat-field grating spectrometer for tender x-ray emission spectroscopy. // Appl. Opt. – 2018. – T. 57. – №27. – C. 7770.

41. Ragozin E.N., Andreev S.S., Bijkerk F., et al. Stigmatic broadband spectroscopic instruments below 300 A. // Proc. SPIE. – 1997. – T. 3156. – C. 331.

42. Колачевский Н.Н., Пирожков А.С., Рагозин Е.Н. Широкополосный стигматический спектрограф для мягкого рентгеновского диапазона. // Квант электрон. – 1998. – Т 25. – №9. – С 843.

43. Kirkpatrick P., Baez A.V. Formation of optical images by X-rays. // J. Opt. Soc. Am. – 1948. – T. 38. – C 766.

44. Weisskopf M.C., O'Dell S.L. Calibration of the AXAF observatory: overview. // Proc. SPIE. – 1997. – T 3113. – C. 2.

45. Montcalm C., Bajt S., Mirkarimi P. B., et al. Multilayer reflective coatings for extreme-ultraviolet lithography. // Proc. SPIE. – 1998. – T. 3331. – C. 42.

46. Tsarfati T., van de Kruijs R.W.E., Zoethout E., et al. Reflective multilayer optics for 6.7 nm wavelength radiation sources and next generation lithography. // Thin Solid Films. – 2009. – T. 518. – C. 1365.

47. Platonov Y., Rodriguez J., Kriese M., et al. Multilayers for next generation EUVL at 6.X nm. // Proc. SPIE. – 2001 – T. 8076. – C. 80760N.

48. Chkhalo N.I., Küstner S., Polkovnikov V.N., Salashchenko N.N., Schäfers F., Starikov S.D. High performance la/b4c multilayer mirrors with barrier layers for the next generation lithography. // Appl. Phys. Lett. – 2013. – T. 102. – C. 011602.

49. Salashchenko N.N., Chkhalo N.I., Dyuzhev N.A. Maskless X-ray lithography based on microoptical electromechanical systems and microfocus X-ray tubes. // J. Synch. Investig. – 2018. – T. 12. – C. 944.

50. Meekins J.F., Cruddace R.G., Gursky H. Optimization of layered synthetic microstructures for broadband reflectivity at soft x-ray and EUV wavelengths. // Appl. Opt. – 1987. – T 26. – N $^{\circ}$ 6. – C 990.

51. van Loevezijn P., Schlatmann R., Verhoeven J., et al. Numerical and experimental study of disordered multilayers for broadband x-ray reflection. // Appl. Opt. – 1996 - T. 35. – $N_{2}19$. – C 3614.

52. Wang Z., Michette A.G. Broadband multilayer mirrors for optimum use of soft x-ray source output. // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. -2000. - T 2. - C 452.

53. Колачевский Н.Н., Пирожков А.С., Рагозин Е.Н. Апериодические многослойные зеркала для спектроскопии в мягком рентгеновском диапазоне. // Кратк. Сообщ. Физ. ФИАН. – 1998. – №12. – С 55.

54. Колачевский Н.Н., Пирожков А.С., Рагозин Е.Н. Широкополосные рентгенооптические элементы на основе апериодических многослойных структур. // Квант. электрон. – 2000. – Т 30. – №5. – С. 428.

55. Кондратенко В.В., Левашов В.Е., Першин Ю.П. и др. Апериодические широкополосные многослойные зеркала на область 125 - 250 Å. // Кратк. Сообщ. Физ. ФИАН. – 2001. – №7. – С 32.

56. Зубарев Е.Н., Кондратенко В.В., Польцева О.В. и др. Межфазные перемешанные зоны в сверхрешетках Mo-Si. // Металлофизика и новейшие технологии. – 1997. – Т. 19. – №8. – С. 56.

57. Пирожков А.С., Рагозин Е.Н. Апериодические многослойные структуры в оптике мягкого рентгеновского излучения // УФН. – 2015. – Т. 185. – №11. – С. 1203.

58. Ragozin E.N., Levashov V.E., Mednikov K.N. et al. Interaction of a pulsed gas target with Nd-laser radiation and laser-produced plasma. // Proc. SPIE. – 2002. – T. 4781. C. 17.

59. Ragozin E.N., Kondratenko V.V., Levashov V.E., et al. Broadband normal-incidence aperiodic multilayer mirrors for soft x-ray dispersive spectroscopy: theory and implementation. // Proc. SPIE. – 2002 – T. 4782. – C. 176.

60. Бейгман И.Л., Левашов В.Е., Медников К.Н. и др. Перезарядка многозарядных ионов лазерной плазмы на атомах струи благородного газа. // Квант. электрон. – 2007. – Т. 37. – №11. – С. 1060.

61. Бейгман И.Л., Вишняков Е.А., Лугинин М.С. и др. Перезарядка многозарядных ионов фтора и лития на атомах Ne. // Квант. электрон. – 2010. – Т. 40. – №6. – С. 545.

62. Pirozhkov A.S., Esirkepov T.Zh., Pikuz T.A., et al. Burst intensification by singularity emitting radiation in multi-stream flows. // Scientific Reports. – 2017. – T. 7. – C. 17968.

63. Shatokhin A.N., Kolesnikov A.O., Sasorov P.V., et al. High-resolution stigmatic spectrograph for a wavelength range of 12.5–30 nm. // Opt. Express. – 2018. – T. 26. – №15. – C. 19009.

64. Вишняков Е.А., Колесников А.О., Кузин А.А. и др. Изображающий дифракционный VLSспектрометр для области длин волн λ> 120 Å. // Квант. электрон. – 2017. – Т. 47. – №1. – С. 5.

65. Ragozin E.N., Kondratenko V.V., Levashov V.E., Pershin Yu.P., Pirozhkov A.S. Broadband normal-incidence aperiodic multilayer mirrors for soft x-ray dispersive spectroscopy: theory and implementation. // Proc. SPIE. – 2002. – T. 4782. – C. 176.

66. Svechnikov M., Pariev D., Nechay A., et al. Extended model for the reconstruction of periodic multilayers from extreme ultraviolet and X-ray reflectivity data. // J. Appl. Crystallogr. – 2017. – T. 50. – C. 1428.

67. Гарахин С.А., Забродин И.Г., Зуев С.Ю. и др. Лабораторный рефлектометр для исследования оптических элементов в диапазоне длин волн 5–50 нм: описание и результаты тестирования. // Квант. электрон. – 2017. – Т. 47. – №4. – С. 385.

68. Svechnkov M.V., Chkhalo N.I., Gusev S.A., et al. Influence of barrier interlayers on the performance of Mo/Be multilayer mirrors for next-generation EUV lithography. // Opt. Express. – 2018. – T. 26. – №26. – C. 33718.

69. Nechay A.N., Chkhalo N.I., Drozdov M.N., et al. Study of oxidation processes in Mo/Be multilayers. // AIP Adv. – 2018. – T. 8. – C 075202.

70. Kozhevnikov I.V., Yakshin A.E., Bijkerk F. Wideband multilayer mirrors with minimal layer thicknesses variation. // Opt. Express. $-2015. - T. 23. - N_{2}7. - C. 9276.$

71. Барышева М.М., Гарахин С.А., Зуев С.Ю. и др. Оптимизация состава, синтез и изучение широкополосных многослойных зеркал для ЭУФ диапазона. // ЖТФ. – 2019. – Т. 89. – №11. – С. 1763.

72. Kuhlman T., Yulin S.A., Feigl T., Kaiser N. EUV multilayer mirrors with tailored spectral reflectivity. // Proc. SPIE. – 2002. – T. 4782. – C. 196.

73. Полковников В. Н., Салащенко Н. Н., Свечников М. В. и др. Многослойная рентгеновская оптика на основе бериллия // УФН. – 2020. – Т. 190. – №92. – С. 106.

74. Harada T., Moriyama S., Kita T. Mechanically Ruled Stigmatic Concave Gratings. // Japan. J. Appl. Phys. – 1975. – T. 14. – Suppl. 14-1. – C. 175.

75. Fuchs O., Weinhardt L., Blum M. et al. High-resolution, high-transmission soft x-ray spectrometer for the study of biological samples. // Rev. Sci. Instrum. – 2009. – T. 80. – C. 063103.

76. Voronov D. L., Gullikson E. M., and Padmore H. A. Large area nanoimprint enables ultra-precise x-ray diffraction gratings. // Opt. Express. – 2017. – T. 25. – №19. – C. 23334.

77. Lin D., Liu Zh., Dietrich K., et al. Soft X-ray varied-line-spacing gratings fabricated by near-field holography using an electron beam lithography-written phase mask. // J. Synchrotron Rad. – 2019. – T. 26. – C. 1782.

78. Imazono T., Koike M., Kawachi T., et al. Development of an objective flat-field spectrograph for electron microscopic soft x-ray emission spectrometry in 50 – 4000 eV. // Proc. SPIE. – 2013. – T. 8848. – C. 884812-1.

79. Koike M., Namioka T., Gullikson E., et al. Varied-line-spacing laminar-type holographic grating for the standard soft X-ray flat-field spectrograph. // Proc. SPIE. – 2000. – T. 4146 – C. 163.

80. Вишняков Е. А., Колесников А. О.,. Кузин А. А и др. Изображающий дифракционный VLSспектрометр для области длин волн λ > 120 Å. Квант. электрон. – 2017. – Т. 47. – №1. – С. 54.

81. ESRF Anonymous FTP Server- http://ftp.esrf.fr/pub/scisoft/xop2.3/ - 2019.

82. Stellar Software – https://www.stellarsoftware.com/.

83. Митропольский М. М., Слемзин В. А., Суходрев Н. К. Автоматизированная установка «ИКАР» для исследования рентгеновской оптики и детекторов излучения в области спектра 0.5 – 120 нм. // Москва: Препринт ФИАН – № 186. – 1989.

84. Namioka T., Koike M. Aspheric wave-front recording optics for holographic gratings. // Appl. Opt. – 1995. – T. 34. – №13. – C. 2180.

85. Antsiferov P.S., Dorokhin L.A. and Krainov P.V. Grazing incidence off Rowland spectrometer with shifted slit. // Rev. Sci. Instrum. – 2016. – T. 87. – C. 053106.

86. Namioka T. Theory of the concave grating. I //Josa. – 1959. – T. 49. – №. 5. – C. 446.

87. Gerasimov F.M., Yakovlev E.A., and Koshelev V.U. Mechanically fabricated stigmatic concave gratings on spherical blanks. // Opt. Spectrosc. -1979. - T - 46. - C. 1177.

Старцев Г.П., Дубровин А.Н., Савушкин А.В., Травина В.Г., Файнберг Л.М.
 Усовершенствование фотоэлектрических установок для спектрального анализа. // Всесоюзн.
 Конф. "Приборы и методы спектроскопии", тез. докл., Новосибирск. – 1979. – С. 38.

89. Soufli R. and Gullikson E.M. Absolute photoabsorption measurements of molybdenum in the range 60 to 930 eV for optical constant determination. // - 1998. - Appl. Opt. - T. 37. - C. 1713-19.

90. Soufli R., Bajt S., and Gullikson E.M. Optical constants of beryllium from photoabsorption measurements for x-ray optics applications. // Proc. SPIE. – 1999. – T. 3767. – C. 251 (1999).

91. The Center for X-Ray Optics (LBNL) - http://henke.lbl.gov/optical_constants/

92. Gullikson E.M., Denham P., Mrowka S., and Underwood J.H. Absolute photoabsorption measurements of Mg, Al, and Si in the soft-x-ray region below the L2,3 edges. // Phys. Rev. B. – 1994.
– T. 49. – C. 16283.

93. Soufli R. and Gullikson E.M. Reflectance measurements on clean surfaces for the determination of optical constants of silicon in the extreme ultraviolet–soft-x-ray region. // Appl. Opt. – 1997. – T. 36. – N_{22} . – C. 5499.

Приложение 1. Метод измерения частоты штрихов решетки и оценки глубины профиля штриха по дифракции излучения He-Ne лазера

Метод позволяет измерить частоту штрихов решетки, не прибегая к прямому измерению углов дифракции, поэтому не требует гониометра. Схема измерения частоты штрихов приведена на Рис. 54. Излучение Не-Ne лазера падает на отражательную решетку по нормали. Нулевой порядок возвращается обратно, а пучки первых порядков дифракции расходятся под углами $\pm \beta$ и попадают на экран, расположенный параллельно решетке. Расстояние между световыми пятнами на экране, соответствующими пучкам порядков дифракции $m = \pm 1$, зависит от частоты штрихов и расстояния от решетки до экрана. Для измерения зависимости частоты штрихов от координаты VLS-решетка помещается на столик-транслятор с микрометрическим винтом. Транслирую решетку, можно перемещать вдоль оси у точку падения лазерного пучка, в которой измеряется частота штрихов, и таким образом – промерить зависимость p(y).



Рис. 54. Схема измерения частоты штрихов VLS-решетки. L – He-Ne лазер ($\lambda = 632.8$ нм), D – экран, G – VLS-решетка на столике-трансляторе. Нулевой порядок дифракции возвращается обратно. Непосредственно измеряемая величины – расстояние *l* между центрами световых пятен на экране, соответствующих плюс и минус первым порядкам дифракции, и расстояние *r* от плоскости экрана до центральной касательной плоскости решетки.

При нормальном падении излучения (то есть, при нормальном угле падения *α* = 0) уравнение дифракционной решетки упрощается:

$$\sin\beta = mp(y)\lambda,\tag{84}$$

где *у* – координата апертуры решетки, соответствующая точке падения луча на решетку, а β – отсчитываемый от нормали угол дифракции. Расстояние *l* между точками пересечения дифрагирующих (в порядки *m* = ± 1) лучей с поверхностью экрана будет равно:

$$l = 2r \operatorname{tg} \beta, \tag{85}$$

где r – расстояние между решеткой и экраном. Если решетка сферическая, то r – расстояние между плоскостью экрана и касательной плоскости в центре апертуры решетки.

Реально лазерный пучок имеет диаметр около 1 мм, из-за чего дифрагированные пучки будут, во-первых, не бесконечно тонкими, а во-вторых, – будут испытывать фокусировку и расфокусировку при дифракции на VLS-решетке. При этом один из дифрагирующих в первый порядок пучков будет сходиться в горизонтальном направлении, а другой – наоборот, расходиться. Горизонтальный фокус сходящегося пучка находится между плоскостью решетки (в случае сферической решетки - центральной касательной плоскостью) и плоскостью экрана. При больших расстояниях от решетки до экрана (>1 м) фокус будет находиться ближе к поверхности решетки. Это означает, что оба дифрагированных пучка будут отображаться на экране расфокусированными. У расфокусированных пучков зависимость координаты падения луча на детектор практически линейно зависит от координаты падения луча на решетку. Таким образом, частота штрихов в точке решетки, соответствующей точке падения центрального луча лазерного пучка на решетку, будет соответствовать геометрическому центру светового пятна на экране, и под *l* следует понимать расстояние между центрами световых пятен, образованных дифрагированными в порядки $m = \pm 1$ пучками. В связи с этим возникает погрешность частоты штрихов, связанная с погрешностью определения центра светового пятна. Ее можно оценить как $\delta p \sim p_1 d/2$, где d – диаметр лазерного пучка на решетке, а $p_1 d$ – ширина интервала пространственных частот, соответствующего освещенной части дифракционной решетки. Если решетка периодическая, то дифрагированные пучки будут иметь диаметр ~ 1 мм и эта погрешность будет пренебрежимо мала. Коэффициент p_1 и остальные VLS-коэффициенты вычисляются после измерения частоты штрихов в большом наборе точек на всей апертуре решетки методом наименьших квадратов.

Из (84) и (85) следует, что частота штрихов может быть вычислена следующим образом:

127

$$p(y) = \frac{\sin\beta}{\lambda} = \frac{\sqrt{1-\cos^2\beta}}{\lambda} = \frac{\sqrt{1-\left(1+\operatorname{tg}^2\beta\right)^{-1}}}{\lambda} = \frac{\sqrt{1-\left(1+\operatorname{tg}^2\beta\right)^{-1}}}{\lambda} = \frac{\sqrt{1-\left(1+\operatorname{tg}^2\beta\right)^{-1}}}{\lambda} = \frac{l}{\lambda\sqrt{l^2+4r^2}}.$$
 (86)

Координата у отслеживается по показаниям шкалы микрометрического винта столикатранслятора.

Из (86) можно оценить погрешность метода. Пусть погрешности в измерении r и l равны δr и δl . Тогда

$$\delta p = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial l}\delta l\right)^2 + \left(\frac{\partial p}{\partial r}\delta r\right)^2 + \left(\frac{p_1 d}{2}\right)^2} = \sqrt{\left(\frac{2}{\lambda}\right)^2 \left(\frac{r^2 \delta l}{\left(\sqrt{l^2 + 4r^2}\right)^3}\right)^2 + \left(\frac{2}{\lambda}\right)^2 \left(\frac{r l \delta r}{\left(\sqrt{l^2 + 4r^2}\right)^3}\right)^2 + \left(\frac{p_1 d}{2}\right)^2}.$$
(87)

В погрешность *δl* помимо приборного входят еще несколько факторов. Первый из них – неточная параллельность плоскости экрана и центральной касательной плоскости решетки. Пусть угол между этими плоскостями равен не нулю, а малой величине *γ*, тогда

$$l = r \cos \gamma \Big[\operatorname{tg} (\beta + \gamma) + \operatorname{tg} (\beta - \gamma) \Big] \approx 2r \operatorname{tg} \beta \cos \gamma \Big[1 + \frac{\gamma^2}{\cos^2 \beta} \Big] =$$
$$= l_0 \cos \gamma \Big[1 + \gamma^2 \Big(1 + \frac{l_0^2}{4r^2} \Big) \Big] \approx l_0 + l_0 \gamma^2 + \frac{l_0^3}{4r^2} \gamma^2 - l_0 \frac{\gamma^2}{2} = l_0 + \frac{\gamma^2}{2} \Big(l_0 + \frac{l_0^3}{2r^2} \Big), \tag{88}$$

где l_0 – расстояние l при $\gamma = 0$. Отсюда

$$\delta l_{\gamma} = l - l_0 \approx \frac{\gamma^2}{2} \left(l_0 + \frac{l_0^3}{2r^2} \right).$$
(89)

Из (89) следует, что при расстояниях l_0 и *r* порядка 1 м угол $\gamma = 5^{\circ}$ приведет к увеличению *l* на величину порядка 6 мм, что в пересчете на число штрихов на миллиметр по формуле (87) приводит к $\delta p \sim 2 \text{ мм}^{-1}$, что при $p \sim 700 \text{ мм}^{-1}$ (соответствует величинам *l* и *r* порядка 1 м) не так много. Но с увеличением угла γ добавка к l_0 будет расти квадратично. Это означает, что необходимая точность, с которой должна быть выставлена параллельность центральной

касательной плоскости решетки и плоскости экрана, должна быть не хуже, чем 5°. Требуемую и даже более высокую точность можно получить, направив с помощью световозвращающей призмы излучение лазера на экран и вернув пучок в призму при помощи приложенной к экрану плоскопараллельной пластинки с зеркальной гранью. При этом решетка уже должна быть предварительно выставлена по нормали к падающему на нее лазерному пучку.

Если решетка имеет сферическую форму, то нормаль в каждой точке апертуры решетки будет разной. Из-за этого при трансляции решетки возникает непараллельность касательной плоскости к решетке и плоскости экрана – то есть ненулевой угол γ . Однако этот угол для решетки с радиусом R = 1 м и шириной 5 см не превысит 1.5° , что по формуле (89) внесет погрешность в $\delta l < 1$ мм, что меньше приборной. По этой причине отклонением нормали сферической решетки в точке падения лазерного пучка при ее трансляции вдоль оси у можно пренебречь.

Еще одним фактором, влияющим на δl , является угол θ между падающим лазерным пучком и главной плоскостью. Отличие этого угла от нуля приводит к возникновению конической дифракции, в результате которой увеличивается расстояния *l*. Коническая дифракция описывается более общим уравнением дифракционной решетки:

$$\cos\theta(\sin\alpha + \sin\beta) = m\lambda p \tag{90}$$

При конической дифракции дифрагирующие лучи направлены по образующим конуса, ось которого совпадает с локальным направлением штриха решетки. Угол между осью конуса и лучами (как падающим, так и дифрагированными) равен 90°– θ . При увеличении θ угловая (в терминах угла β) дисперсия увеличивается – из-за этого расстояние *l* между порядками дифракции на экране возрастает. При квазинормальном падении ($\alpha = 0$, а θ малый, но не равный нулю угол) уравнение (90) принимает вид:

$$\sin\beta = m\lambda \frac{p}{\cos\theta} \,. \tag{91}$$

Отсюда следует, что значение частоты штрихов, вычисленное из результатов измерения r и l по формуле (86), даст не реальную частоту штрихов p, а завышенное значение $p^* = p/\cos \theta$. Этот фактор вносит относительную погрешность частоты штрихов:

$$\frac{\delta p}{p} = \frac{p^* - p}{p} \approx 1 + \frac{\theta^2}{2} - 1 = \frac{\theta^2}{2}$$
(92)

При $\theta \sim 8^{\circ}$ эта погрешность составит около 1%. Но при выставлении решетки нормально падающему на нее лазерному пучку этот угол будет значительно меньше и составит два – три градуса (что делается во избежание бликов, которые появляются при строгом возвращении пучка нулевого порядка в апертуру лазера), что меньше 0.2%, а в абсолютных величинах – меньше, чем погрешность δp вследствие неточности измерения r и l. Таким образом, неустранимыми являются только погрешности $p_1 d/2$, δr и δl . Остальные будут малы, если хорошо съюстировать схему измерения.

Глубину профиля штриха можно оценить по отношению интенсивностей первого и нулевого порядка дифракции He-Ne лазера при нормальном падении излучения на решетку. Если решетка имеет прямоугольный профиль (решетка, изготовленная электроннолучевой литографией), то на вершине штриха оптический путь волны будет равен нулю, а в нижней части – удвоенной глубине профиля h (до отражения путь h и после отражения – путь h). Таким образом, нужно разложить в ряд Фурье функцию:

$$E(y) = \begin{cases} E = E_0, |y| > \frac{a}{2}, |y| < \frac{1}{2p}, \\ E = E_0 \exp(2ikh), |y| < \frac{a}{2}. \end{cases}$$
(93)

Поскольку функция четная, то в разложении будут только косинусы. Пределы интегрирования – шаг решетки от -1/2p до 1/2p, где *p* частота штрихов в освещенной лазером точке решетки. Величина *a* – ширина нижней части профиля штриха. Отсюда:

$$E_{m=0} = \frac{E_0 \left(\int_{-a/2}^{a/2} \exp(2ikh) dy + \int_{-1/2p}^{-a/2} dy + \int_{a/2}^{1/2p} dy \right)}{\int_{-1/2p}^{1/2p} 1^2 dy} = E_0 p \left(a \exp(2ikh) + \frac{1}{p} - a \right), \tag{94}$$

$$E_{\pm m} = E_0 \frac{\exp(2ikh) \int_{-a/2}^{a/2} \cos(2\pi mpy) dy + \int_{-1/2p}^{-a/2} \cos(2\pi mpy) dy + \int_{a/2}^{1/2p} \cos(2\pi mpy) dy}{\int_{-1/2p}^{1/2p} \cos^2(2\pi mpy) dy} =$$

$$=\frac{2E_0\sin(\pi mpa)}{\pi m}\left(\exp(2ikh)-1\right).$$
(95)

Функция *E*(*y*) будет описываться рядом:

$$E(y) = E_0 \left(pa \left(\exp(2ikh) - 1 \right) + 1 \right) + 2E_0 \left(\exp(2ikh) - 1 \right) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin(\pi mpa)}{\pi m} \cos(2\pi mpy)$$
(96)

В то же время

$$\cos \alpha = \frac{\exp(i\alpha) + \exp(-i\alpha)}{2},$$
(97)

поэтому комплексная амплитуда поля *E*, соответствующая порядку дифракции *m* выражается следующим образом:

$$E_{\pm m} \cos(2\pi mpy) = 2E_0 \left(\exp(2ikh) - 1 \right) \frac{\sin(\pi mpa)}{\pi m} \frac{\exp(2\pi impy) + \exp(-2\pi impy)}{2} =$$

= $E_0 \left(\exp(2ikh) - 1 \right) \frac{\sin(\pi mpa)}{\pi m} \left(\exp(2\pi impy) + \exp(-2\pi impy) \right) =$
= $E_m \exp(2\pi impy) + E_{-m} \exp(-2\pi impy).$ (98)

Отсюда получается, что

$$E_m = E_0 \left(\exp(2ikh) - 1 \right) \frac{\sin(\pi mpa)}{\pi m}, \tag{99}$$

значит, интенсивность излучения в порядке дифракции *m* равна:

$$I_{m} = E_{m}E_{m}^{*} = 2E_{0}^{2} \frac{\sin^{2}(\pi mpa)}{\pi^{2}m^{2}} \left(1 - \cos(2kh)\right) = 4I_{0} \frac{\sin^{2}(\pi mpa)}{\pi^{2}m^{2}} \sin^{2}\left(\frac{2\pi}{\lambda}h\right), \quad (100)$$

а нулевого порядка:

$$I_{m=0} = E_{m=0} E_{m=0}^* = I_0 \left(1 - 4 pa \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} h \right) (1 - pa) \right).$$
(101)

Если ввести скважность *D* как отношение ширины верхней части штриха к шагу решетки, то есть:

$$D = \frac{1/p - a}{1/p} = 1 - pa$$
, (102)

то (100) и (101) перепишутся в виде:

$$I_{m} = 4I_{0} \frac{\sin^{2}\left(\pi m(1-D)\right)}{\pi^{2}m^{2}} \sin^{2}\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right) = 4I_{0} \frac{\sin^{2}\left(\pi mD\right)}{\pi^{2}m^{2}} \sin^{2}\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right),$$
(103)

$$I_{m=0} = I_0 \left(1 - 4D(1 - D)\sin^2\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right) \right).$$
(104)

Для оценки глубины профиля нужно знать параметр скважности. В частном случае *D* = 0.5 отношение интенсивностей нулевого и первого порядков дифракции определяется выражением:

$$\frac{I_1}{I_{m=0}} = \frac{\frac{4\sin^2\left(\frac{\pi}{2}\right)}{\pi^2}\sin^2\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right)}{1-\sin^2\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right)} = \frac{4\operatorname{tg}^2\left(\frac{2\pi h}{\lambda}\right)}{\pi^2} \approx \frac{16\pi^2 h^2}{\pi^2 \lambda^2} = 16\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2, \quad (105)$$

так как глубина профиля штриха *h* значительно меньше длины волны He-Ne лазера *λ*. Отсюда:

$$h \approx \frac{\lambda}{4} \sqrt{\frac{I_1}{I_{m=0}}}$$
(106)

В случае пропускающей амплитудной решетки поле прошедшей волны будет описываться функцией:

$$E(y) = \begin{cases} E = 0, |y| > \frac{a}{2}, |y| < \frac{1}{2p}, \\ E = E_0, |y| < \frac{a}{2}. \end{cases}$$
(107)

Ее разложение в ряд Фурье дает:

$$E_{m=0} = E_0 \frac{\int_{-a/2}^{a/2} dy}{\int_{-1/2p}^{1/2p} 1^2 dy} = E_0 ap = E_0 D$$
(108)

$$E_{\pm m} = E_0 \frac{\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos(2\pi mpy) dy}{\int_{-\frac{1}{2}p}^{\frac{-a}{2}} \cos^2(2\pi mpy) dy} = 2E_0 \frac{\sin(\pi mpa)}{\pi m} = 2E_0 \frac{\sin(\pi mD)}{\pi m},$$
(109)

где *D* = *pa* – отношение просвета между штрихами к шагу решетки, то есть – скважность. Тогда амплитуда поля в порядке дифракции *m* находится аналогично (98):

$$E_{\pm m} \cos(2\pi mpy) = E_m \exp(2\pi impy) + E_{-m} \exp(-2\pi impy),$$

$$\Rightarrow E_m = \frac{E_{\pm m}}{2} = E_0 \frac{\sin(\pi mD)}{\pi m}.$$
(110)

Из (108) и (110) вычисляется отношение интенсивности первого и нулевого порядков дифракции:

$$\frac{I_1}{I_0} = \frac{E_1^2}{E_{m=0}^2} = \frac{\sin^2(\pi D)}{\pi^2 D^2},$$
(111)

откуда, измерив интенсивности нулевого и первого порядков дифракции, можно найти скважность.

Профиль штриха отражательной решетки, изготовленной методом интерференционной литографии, имеет форму, близкую к синусоидальной. Глубина профиля – удвоенная амплитуда (то есть – размах) синусоиды. Поэтому поле *E* отраженной волны вблизи поверхности решетки будет описываться следующей функцией (излучение He-Ne лазера падает на решетку по нормали):

$$E(y) = E_{0} \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} 2A \cos(2\pi py)\right) = E_{0} \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} 2\frac{h}{2} \cos(2\pi py)\right) =$$

$$= E_{0} \exp\left(\frac{2\pi hi}{\lambda} \cos(2\pi py)\right) \approx E_{0} \left(1 + \frac{2\pi hi}{\lambda} \cos(2\pi py)\right) =$$

$$= E_{0} \left(1 + \frac{\pi hi}{\lambda} \exp(2\pi i py) + \frac{\pi hi}{\lambda} \exp(-2\pi i py)\right) =$$

$$= E_{m=0} + E_{1} \exp(2\pi i py) + E_{-1} \exp(-2\pi i py). \qquad (112)$$

Отсюда отношение интенсивностей первого и нулевого порядков равно:

$$\frac{I_{1}}{I_{m=0}} = \frac{|E_{1}|^{2}}{E_{m=0}^{2}} \approx \left(\frac{\pi h}{\lambda}\right)^{2}.$$
(113)

Отсюда выражается глубина профиля штриха:

$$h \approx \frac{\lambda}{\pi} \sqrt{\frac{I_1}{I_{m=0}}}$$
(114)

Для плоских VLS-решеток, изготовленных методом интерференционной литографии, с частотой штрихов в центре апертуры $p_0 = 600 \text{ мm}^{-1}$ был измерен профиль штриха на атомносиловом микроскопе. Результат вычисления глубины профиля штриха из соотношения интенсивностей первого и нулевого порядков дифракции по формуле (114) оказался в хорошем соответствии с этими измерениями – расхождение найденной с помощью этих методов глубины профиля оказалось на уровне 1 - 2 нм при глубине профиля на уровне 15 - 20 нм.