

УДК 535.42; 535-32; 519.633

О КОНЦЕНТРАЦИИ МЯГКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КОНИЧЕСКИМИ ПОРАМИ В ТРЕКОВЫХ МЕМБРАНАХ

А. В. Митрофанов, Р. М. Фещенко

В работе изучается прохождение мягкого рентгеновского излучения через сквозные конические поры нано- и микропоры полимерных трековых мембран. Определяются распределение амплитуды поля и коэффициент пропускания конических структур. Задача представляет интерес по двум причинам. Во-первых, коническая форма пор в трековых мембранах – это норма, а не исключение из правила. Она определяется конечным отношением скоростей травления неповрежденного полимера и материала мембраны в области трека. Во-вторых, концентрация мягкого рентгеновского излучения на выходе конических пор образца мало изучена. Расчёты проводятся для пористых мембран из полиэтилентерефталата на длинах волн 13.3 и 30.4 нм при нормальном падении излучения на торец поры и различных углах конуса поры. Даны примеры расчётов для наклонного падения излучения на образец и обсуждается влияние нарушенного слоя стенок пор на результаты расчётов.

Ключевые слова: рентгеновская оптика, параболическое уравнение, концентрация излучения, трековые мембраны.

Введение. В экспериментах в мягкой рентгеновской и экстремальной ультрафиолетовой областях спектра ($1 < \lambda < 100$ нм) для защиты детектора излучения от интенсивной фоновой засветки ультрафиолетовым (УФ), видимым или инфракрасным (ИК) излучением (напр., Солнца), а также от аппаратных бликов могут использоваться тонкие полимерные трековые мембраны со сквозными порами микронных или субмикронных диаметров [1, 2]. Такие мембраны изготавливаются путём химического травления

ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: rusl@sci.lebedev.ru.

сплошных полимерных плёнок (напр., полиэтилентерефталатных – ПЭТФ), предварительно облучённых потоком высокоэнергетичных тяжёлых ионов, вдоль треков которых в плёнках в химическом растворе происходит травление [3–5] и формирование цилиндрических или конических каналов (пор). Фильтры на основе полимерных трековых мембран имеют улучшенные оптические, механические и тепловые характеристики, что позволяет использовать их в условиях космического вакуума в ходе орбитального полёта [2]. Например, рентгеновские фильтры на основе трековых мембран использовались в солнечном телескопе проекта КОРОНАС-Ф [1]. Одним из интересных применений пористых трековых мембран может быть концентрация мягкого рентгеновского излучения в пятно малого размера. Это может быть достигнуто, например, если диаметр пор в мембране непостоянен, а имеет форму конуса, сходящегося от входной поверхности мембраны в глубь образца (см. рис. 1). Такая форма пор получается естественным образом при одностороннем химическом травлении облученных плёнок [5]. Для выбранного материала мембраны параметры конуса зависят от условий пострадиационной обработки образца.

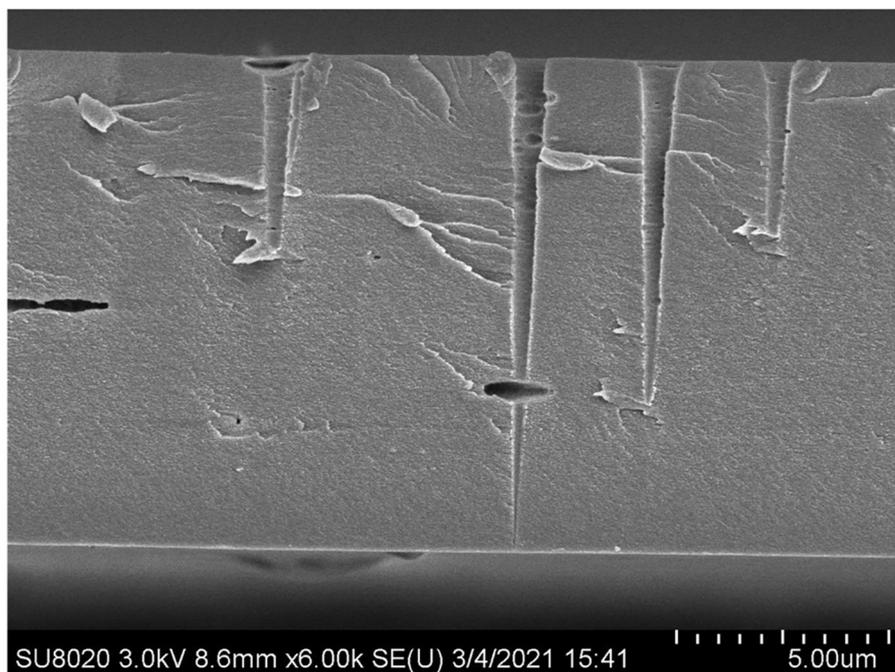


Рис. 1: Микрофотография скола трековой мембраны с коническими порами, полученная с помощью сканирующего электронного микроскопа. Снимок любезно предоставлен П. Ю. Апелем, г. Дубна.

Необходимо отметить, что концентрация рентгеновского излучения в сужающихся волноводных структурах ранее уже была предметом изучения. Например, сужающиеся стеклянные капилляры в поликапиллярных линзах исследовались в течение нескольких десятилетий [6] и нашли применения в рентгеновских оптических приборах. Интенсивность рентгеновского излучения на выходе в них может увеличиваться в десятки раз. Для моделирования распространения рентгеновского излучения в капиллярных линзах успешно применяются методы лучевой оптики, различные приближённые (полуволновые) методы [6], а также точная полуволновая теория. Аналогом конических пор в трековых мембранах могут также служить сужающиеся кремниевые планарные рентгеновские нановолноводы, используемые для концентрации жёсткого рентгеновского излучения и создания компактных источников когерентного рентгеновского излучения с размерами в десятки нанометров и меньше [7], для моделирования которых используются уже исключительно волновые методы [7, 8], включая численное решение 2D параболического уравнения методом конечно-разностных схем.

Цель данной работы – это исследование с помощью численных экспериментов с использованием 3D параболического уравнения поведения мягкого рентгеновского излучения в сужающихся конических порах в ПЭТФ трековых мембранах и определение степени концентрации излучения в таких порах на выходе в зависимости от размера и формы поры, угла падения излучения, длины волны рентгеновского излучения (с учётом дисперсии среды) и толщины нарушенного слоя на стенках поры [9]. Применение миниатюрных конических наноконцентраторов рентгеновского излучения в схемах с использованием рентгеновских лазеров [10] и источников синхротронного излучения с узкой диаграммой направленности может представлять интерес для решения некоторых экспериментальных задач, например, при изготовлении реплик трековых мембран.

Численное моделирование конической поры. Рентгеновское излучение в среде в условиях нашей задачи испытывает дифракцию и рефракцию на малые углы (порядка угла полного внешнего отражения $\theta_t \approx \sqrt{2\delta}$ или меньше, где $\delta \ll 1$). Поэтому его распространение в неоднородной среде может моделироваться с использованием трёхмерного скалярного параболического волнового уравнения вида [11]:

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

где $u(x, y, z)$ – амплитуда поля, (x, y, z) – декартовы координаты, $\varepsilon(x, y, z, k) = n^2 \approx 1 - 2\delta + 2i\beta$ – диэлектрическая проницаемость, $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число и λ – длина волны. Электрическое поле волны выражается через амплитуду как $E = e^{-i\omega t + ikz}u$.

В настоящей работе рассматриваются две длины волны: $\lambda = 30.4$ нм – длина волны $Ly - \alpha$ линии ионизированного гелия (вторая по интенсивности эмиссионная линия в спектре Солнца) и $\lambda = 13.3$ нм – длина волны, близкая к используемой в экстремальной ультрафиолетовой литографии (EUVL). Оптические константы полимера δ и β могут быть взяты, например, из обзора [12], и для рассматриваемых здесь длин волн они были: $\lambda = 13.3$ нм – $\delta = 2.59 \cdot 10^{-2}$ и $\beta = 6.48 \cdot 10^{-3}$, $\lambda = 30.4$ нм – $\delta = 0.114$ и $\beta = 6.97 \cdot 10^{-2}$. Рассмотрение мягкого рентгеновского излучения, которое полностью поглощается на толщине мембраны, позволяет использовать функцию пропускания для анализа формы самих пор без учёта вклада излучения, прошедшего вне области поры.

В нашей работе для расчётов используется 3D параболическое уравнение, поскольку оно позволяет описать случай наклонного падения излучения [13, 14]. Уравнение решается с помощью метода конечно-разностных схем с точным прозрачным граничным условием на боковой границе прямоугольной вычислительной области. Наличие нарушенного слова на внутренней стенке поры учитывается путём введения переходного слоя толщиной d , в котором диэлектрическая проницаемость плавно меняется, как описано в [14]. Все вычисления проводятся с помощью специально созданных для этой цели программных кодов в среде Matlab.

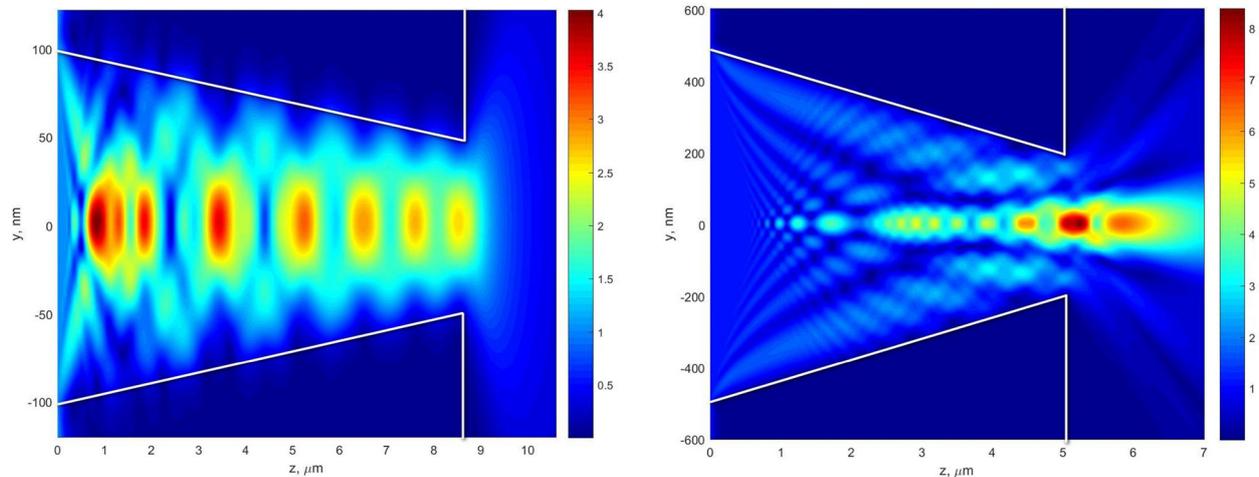


Рис. 2: Модули амплитуды поля для длин волн 13.3 нм (слева) и 30.5 нм (справа) в конической поре (белые линии) с гладкими однородными стенками при нормальном падении на мембрану. Параметры пор: угол конуса 0.006 радиан (слева) и 0.06 радиана (справа), длина поры 8.6 мкм (слева) и 5 мкм (справа), диаметр поры 200 нм (слева) и 1000 нм (справа). Показаны распределения модуля амплитуды поля $|u|$ в плоскости (y, z) в линейном масштабе. Цветовая шкала находится справа от рисунков.

Для моделирования распространения излучения через одиночную пору выбирается прямоугольная вычислительная область (по координатам (y, x)) поперечным размером на 20% большим, чем максимальный входной диаметр конической поры. Длина шага сетки по продольной координате z равна 10–20 нм. Образец с порой освещается плоской волной, падающей под углом θ в плоскости (y, z) на левый (большой) торец сужающейся конической поры.

Коэффициент прохождения T рентгеновского излучения через пору рассчитывается как отношение полного потока, выходящего через правую поверхность мембраны, к потоку, падающему на входное (левое) отверстие поры. Для вычисления относительной плотности (коэффициента усиления) выходящего потока Y рентгеновского излучения коэффициент прохождения умножается на отношение площадей входного (S_{in}) и выходного (S_{out}) отверстий поры.

Результаты. Рассчитанный модуль амплитуды поля, распространяющегося в конической поре с диаметром входного отверстия $D = 200$ нм в ПЭТФ мембране толщиной $L = 8.6$ мкм, для длины волны 13.3 нм показан на рис. 2 (слева) для угла конуса поры $\alpha = 0.006$. В численных экспериментах шаг прямоугольной сетки по поперечным координатам (x, y) был равен 2 нм, шаг сетки по координате z был 20 нм, а угол падения излучения θ на входной торец поры равен 0. Стенка поры считалась гладкой и однородной. На рис. 2 (слева) заметна сильная концентрация излучения вблизи оси поры по всей её длине, включая область торца. В том же случае, коэффициент пропускания T (0.5–1) и коэффициент усиления излучения Y (1.5–3) для этих конических пор не сильно отличается от единицы (см. рис. 3).

Модуль амплитуды поля, распространяющегося в конической поре с диаметром входного отверстия $D = 1000$ нм в ПЭТФ мембране толщиной $L = 5$ мкм, для длины волны 30.4 нм показан на рис. 2 (справа) для угла конуса поры $\alpha = 0.06$. В численных экспериментах шаг прямоугольной сетки по поперечным координатам (x, y) был равен 4 нм, шаг сетки по координате z был 10 нм, а угол падения излучения θ на входной торец поры равен 0. Стенка поры считалась гладкой и однородной.

Если угол падения θ излучения на мембрану не равен нулю и не слишком велик, то концентрация излучения в выходном отверстии поры вблизи её оси сохраняется, как видно из рис. 3 (слева) для гладкой и однородной стенки поры и угла падения $\theta = 0.02$ радиан. Заметно, что плотность потока излучения на выходе немного снижается (см. также рис. 4). Для стенки поры с нарушенным поверхностным слоем концентрация излучения может уменьшаться значительно. Это видно на рис. 3 (справа), где

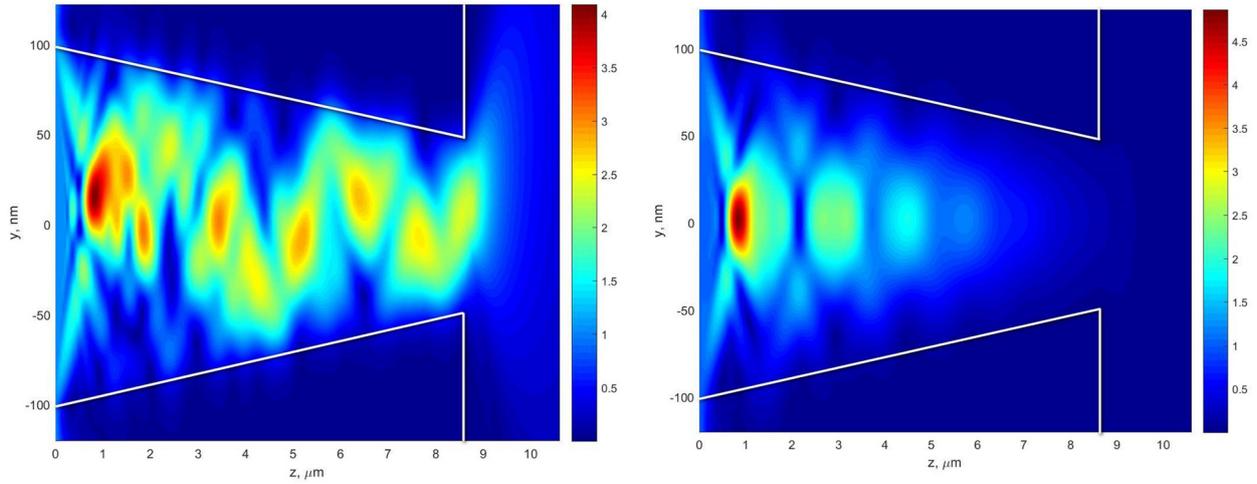


Рис. 3: Модули амплитуды поля для длины волны 13.3 нм в конической поре (белые линии) с углом конуса 0.006 радиан, входным диаметром 200 нм и длиной 8.6 мкм. Изображены распределения модуля амплитуды поля $|u|$ в плоскости (y, z) в линейном масштабе (шкала справа от рисунков). Слева показана пора с гладкими стенками при наклонном падении излучения с углом $\theta = 0.02$ радиан. Справа – пора с нарушенным переходным слоем толщиной 10 нм и угле падения излучения $\theta = 0$ радиан.

показаны результаты расчётов для той же поры, как и на рис. 3 (слева), но с нарушенным поверхностным слоем, моделируемым переходным слоем толщиной $d = 10$ нм. Такой выбор толщины обусловлен результатами работ [13, 14], в которых было показано, что переходный слой двукратной толщины ($d = 21$ нм) удовлетворительно описывает экспериментально измеренные коэффициенты пропускания пор в ПЭТФ мембранах на длине волны 13.3 нм.

На рис. 4 показаны рассчитанные зависимости коэффициента прохождения T и усиления Y мягкого рентгеновского излучения в выходном отверстии конических пор, изображённых на рис. 2–3, а также для ряда других примеров как функции угла конуса поры. Можно отметить, что зависимости коэффициента усиления должны иметь максимум при углах конуса порядка или меньше критического угла θ_c , что действительно наблюдается для обеих длин волн, наклонного падения и неидеальных стенок пор (см. на рис. 4 справа). Для внутренней стенки поры с нарушенным слоем (кривая 7 на рис. 4) для длины волны 13.3 нм наблюдается значительное снижение коэффициента пропускания и плотности потока излучения в выходном отверстии поры. Для наклонного падения излучения с углом, превосходящим отношение радиуса поры к её

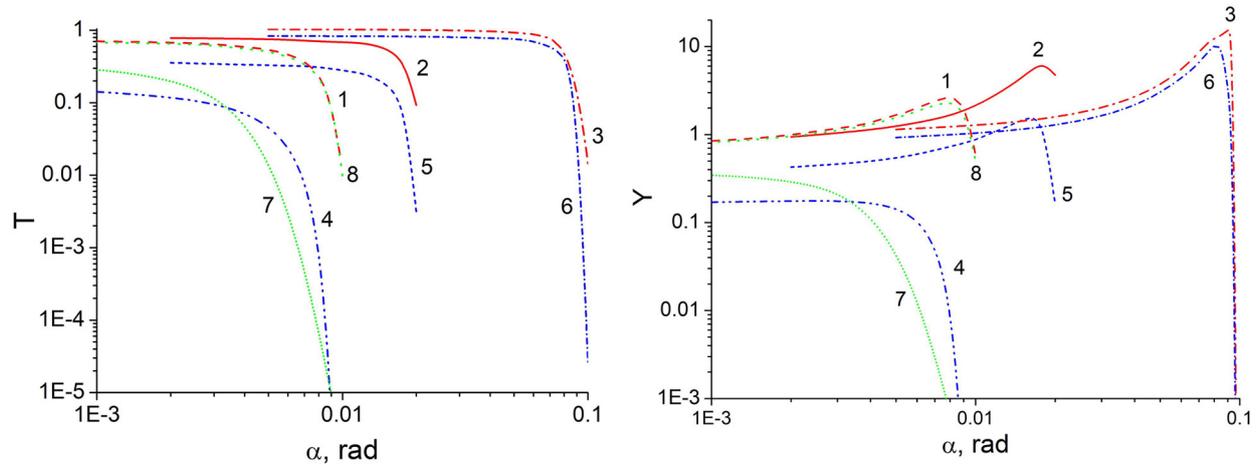


Рис. 4: Коэффициент пропускания T (слева) и коэффициент усиления Y (справа) для двух длин волн и разных входных диаметров D и длин поры L . Пронумерованные графики соответствуют: 1 – $\lambda = 13.3$ нм, $D = 200$ нм, $L = 8.6$ мкм; 2 – $\lambda = 13.3$ нм, $D = 400$ нм, $L = 8.6$ мкм; 3 – $\lambda = 13.3$ нм, $D = 1000$ нм, $L = 5$ мкм; 4 – $\lambda = 30.4$ нм, $D = 200$ нм, $L = 8.6$ мкм; 5 – $\lambda = 30.4$ нм, $D = 400$ нм, $L = 8.6$ мкм; 6 – $\lambda = 30.4$ нм, $D = 1000$ нм, $L = 8.6$ мкм; 7 – $\lambda = 13.3$ нм, $D = 200$ нм, $L = 8.6$ мкм, $d = 10$ нм, $\theta = 0.02$ радиан; 8 – $\lambda = 13.3$ нм, $D = 200$ нм, $L = 8.6$ мкм, $d = 0$ нм, $\theta = 0.02$ радиан. Для кривых 1–6 стенки считались гладкими, а угол падения, равным нулю.

длине, значительного уменьшения коэффициента прохождения и относительной плотности потока в выходном отверстии поры (кривая 8 на рис. 4) не наблюдается. Резкая зависимость коэффициента прохождения и относительной плотности потока от угла конуса поры может использоваться на опыте для определения параметров пор в трековых мембранах.

Заключение. В работе проведено численное моделирование распространения мягкого рентгеновского излучения в узких сквозных конических порах в тонких ПЭТФ мембранах с помощью численного решения 3D параболического уравнения методом конечно-разностных схем с точным прозрачным граничным условием. Полученные распределения амплитуды поля используются для оценки коэффициента прохождения излучения через пору, а также относительной плотности потока излучения в выходном торце поры как функции угла конуса, длины волны, угла падения излучения и толщины нарушенного слоя. Показано, что плотность выходного потока растёт с увеличением входного диаметра поры (несмотря на неидеальное отражение мягкого рентгеновского

излучения от внутренних стенок поры), достигает максимума с последующим снижением до нуля. Показано, что наклонное освещение влияет на плотность потока излучения незначительно при умеренных углах падения, тогда как наличие нарушенного слоя на внутренней стенке поры приводит к значительному снижению пропускания и плотности потока на выходе из поры.

Одним интересным применением трековых мембран с коническими порами может быть их использование в качестве фильтра волнового фронта в задачах получения фазоконтрастных изображений с использованием метода анализа спеклов (X-ray speckle-based imaging – SBI) [15]. Это может осуществляться с помощью некогерентных лабораторных источников рентгеновского излучения, если фильтр волнового фронта является случайным. Трековая мембрана, содержащая произвольно расположенные поры с разными диаметрами и углами конуса, как раз идеально подходит на роль такого фильтра.

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

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] A. V. Mitrofanov, P. Y. Apel, NIM B **245**(1), 332 (2006).
- [2] *Солнечно-земная физика: Результаты экспериментов на спутнике КОРОНАС-Ф*. Под ред. В. Д. Кузнецова (Москва, ФИЗМАТЛИТ, 2009).
- [3] Г. Н. Флёргов, В. С. Барашенков, УФН **114**(2), 351 (1974).
- [4] П. Ю. Апель, С. Н. Дмитриев, Трековые мембраны. В кн. *Мембраны и мембранные технологии*. Ярославцев А. Б. (ред.), с. 117-160 (М., Научный мир, 2013).
- [5] Р. Л. Флейшнер, П. Б. Прайс, Р. М. Уокер, *Треки заряженных частиц в твердых телах. Принципы и приложения. Ч. 1. Методы исследования треков* (М., Энергоиздат, 1981).
- [6] S. B. Dabagov, A. Marcelli, Applied Optics **38**(36), 7494 (1999).
- [7] I. Bukreeva, D. Pelliccia, A. Cedola, et al., Journal of Synchrotron Radiation **17**(1), 61 (2010).
- [8] В. А. Бушуев, А. П. Орешко, Известия Российской академии наук. Серия физическая **68**(4), 550 (2004).
- [9] А. В. Митрофанов, А. В. Попов, Д. В. Прокопович, ЖТФ **90**(11), 1898 (2020).
- [10] П. Д. Гаспарян, Ф. А. Стариков, А. Н. Старостин, УФН **168**, 843 (1998).
- [11] Y. V. Kopylov, A. V. Popov, A. V. Vinogradov, Opt. Comm. **118**(5-6), 619 (1995).
- [12] X-Ray Interactions with Matter, 2010. URL: www.cxro.lbl.gov/optical_constants/.

- [13] А. В. Митрофанов, Р. М. Фещенко, Краткие сообщения по физике ФИАН **49**(6), 29 (2022).
- [14] А. В. Митрофанов, Р. М. Фещенко, ЖТФ **93**(7), 948 (2023).
- [15] S. Zandarco et al., Opt. Expr. **32**(16), 28472 (2024).

Поступила в редакцию 2 апреля 2025 г.

После доработки 15 июня 2025 г.

Принята к публикации 15 июня 2025 г.