

软 X 射线多层膜的光学性质和优化设计

范正修 金 磊 邵建达

(中国科学院上海光机所, 201800)

Optical properties and optimum design of soft X-ray multilayers

Fan Zhengxiu, Jin Lei, Shao Jianda

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai)

Abstract The soft X-ray multilayer is usually composed of alternative materials of high and low atomic number. The optimum design of thickness for periodic quasiperiodic and non-periodic Al/Mo soft X-ray multilayers and the effects of roughness of surface, permeating of interface and thickness error on the reflectance of X-ray multilayer are discussed.

Key words: soft X-ray multilayer, optimum design, thickness of layer, roughness

一、引 言

X 射线多层膜是 X 激光和 X 光学的重要元件。近几年,不论在理论上还是在技术上,都得到了较快发展。

从 X 光晶体衍射角度出发, X 射线多层膜可看作超晶格一维人工晶体。从薄膜光学出发, X 射线多层膜是一类光学薄膜。这种薄膜的膜层很薄,折射率都接近 1,并存在一定的吸收。X 射线多层膜的理论正是在 X 光衍射和薄膜光学结合的基础上发展起来的。

对于 X 射线,薄膜材料的复折射率可表示为

$$\hat{n} = 1 - \delta + i\beta \quad (1)$$

$$\delta = (e^2 \lambda^2 / 8\pi^2 \epsilon_0 m_e c^2) N f_1 \quad (2)$$

$$\beta = (e^2 \lambda^2 / 8\pi^2 \epsilon_0 m_e c) N f_2 \quad (3)$$

这里 e 和 m_e 分别是电子的电量和质量, λ 为 X 射线波长, ϵ_0 为真空介电常数, c 为光速。 f_1 , f_2 为复散射因子的实部和虚部。它们都是原子序数的函数,在远离共振吸收波长的区域

$$f_1 \propto z \quad (4)$$

$$f_2 \propto z^3 \quad (5)$$

这就是说,它们都随着原子序数的增大而增大。

一般的 X 射线多层膜都是由高 Z 和低 Z 两种材料交替组合而成的,两种材料组成一个层对,在薄膜光学中对应一个周期,在晶体衍射中对应一个晶格。设高低 Z 材料的膜厚分别为 d_H 和 d_L , 则周期厚度

$$d = d_H + d_L \quad (6)$$

为了设计优质的 X 射线薄膜,许多作者分别从衍射动力学和薄膜光学出发作了大量工

作^[1~6]。本文从光学薄膜的矩阵理论出发研究了这个问题。就给定的薄膜材料讨论了优化设计的结果,并就实际薄膜的具体偏差研究了实际 X 光多层膜的光学性质。

二、X 射线多层反射膜的优化设计

为了获得高性能的 X 射线多层反射膜,首先必须选择适当的薄膜材料。除了成膜条件、薄膜结构、界面作用、牢固性和稳定性等多种考虑外,单就光学性质,必须遵循以下原则:

1. 为了获得尽可能高的反射率,两种材料的界面反射率应尽量高,薄膜的损耗应尽量小; 2. 为了获得高的界面反射率,两种材料的折射率或消光系数差应尽量大; 3. 为了减少薄膜损耗,除了基板光洁度好薄膜粗糙度低之外,还应尽量利用折射率差大的材料对做薄膜材料; 4. 对于软 X 射线区,材料的折射率都接近 1,除了个别情况外单靠折射率差实现高反射是困难的,必须考虑消光系数差。特别要求利用较少层数取得较高反射率时,必须适当选择两种材料之间光学常数的反差。

为研制 18.2 nm 波段软 X 射线反射膜,借助 D. Windt^[7]给出的各种材料的光学常数,综合以上诸因素,确认选择 Mo, Al 二种材料是合适的。

由于膜层内存在吸收,标准的 $\lambda/4$ 膜系($d_H = d_L = d/2 = \lambda/4$)不可能得到最佳的反射效果。特别是依赖吸收系数差来实现高反射的多层膜,更需求出最佳的厚度匹配。一般说来,在一个周期内,起反射作用的主要是高 Z 材料,而低 Z 材料主要用于位相匹配。膜层厚度的优化是在分析和最优化技术结合的基础上实现的,最优化法主要采用“统计实验法”。优化的评价函数为

$$M(R) = \sum_{n=1}^m [\omega_n (R - R_n)^2]^{1/2} \quad (7)$$

这里 R_n 为目标反射率, R 为设计反射率, ω_n 为权重因子。

我们针对周期膜系、准周期膜系和非周期膜系三种情况进行了优化设计。

2.1 周期膜系的设计

在周期膜系中,单元厚度 d 和 $\gamma = d_H/d$ 都不随周期数变化,故只需对 d 和 γ 进行优化。对反射率求极值,可解得层数很多时的优化解:

$$R_{opt} = a^2 (1+t) / \{a^4 t + [1 + \sqrt{(1-a^2)(1+a^2 t)}]\}^2 \quad (8)$$

$$d_{opt} = \frac{\lambda}{2} \left[\delta_H + \Delta\delta \left(\gamma - \frac{\sin 2\pi\gamma}{2\pi\gamma} \right) \right]^{-1/2}$$

$$\text{tg}(\pi\gamma_{opt}) = \pi(\gamma_{opt} + \beta_H/\Delta\beta)$$

这里

$$\Delta\delta = \delta_H - \delta_L; \quad \Delta\beta = \beta_H - \beta_L; \quad a = \cos \pi\gamma; \quad t = \Delta\delta/\Delta\beta.$$

对有限周期数,可以用计算机优化求解,图 1 给出 γ_{opt} 和 R_{opt} 随周期数的变化曲线。薄膜材料为 Mo($n=0.876$, $\beta=0.0282$); Al($n=1.04$, $\beta=0.0159$)。由图可见,随着 N 增加,最佳 γ 值逐渐减少,优化反射率逐渐增加,二者都在足够大的层数时达到一饱和值。

2.2 准周期膜系的优化设计

准周期膜系保持 d 不随周期数变化,但每一周期内的 γ 却不一样。表 1 给出 Mo/Al 多层膜 γ 值的优化结果。从空气向基底,膜层的 γ 值逐渐增大。这是由 X 光的膜层内的场分布决定的,越近表面场越强,高 Z 值膜层薄,有利于减少膜层吸收。优化的准周期膜系,反射性能优

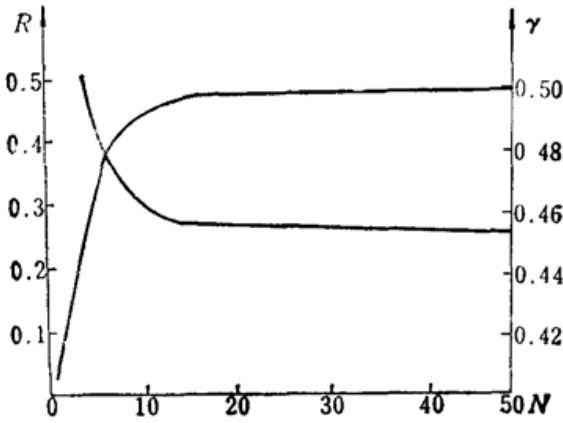


Table 10 Optimum results γ for the quasi-periodic X-ray multilayers

Period-number	1	2	3	4	5
$\gamma(dMo/d)$	0.485	0.491	0.501	0.513	0.535

Fig. 1 Reflectance R and parameter γ vs period number N for the optimized periodic X-ray multilayers Al/Mo

于周期膜,图 2 给出二种优化膜系的反射性能比较。

2.3 非周期膜系的优化设计

在非周期膜系中,不仅 γ 值随周期数变化, d 值也随周期数变化。很显然,这是一种更有效的优化设计,一般来说,可获得最佳反射效果。图 3 给出非周期膜系与周期膜系优化反射率的光谱曲线。

值得提出的是,当膜层数足够多时,不论是哪种膜系结构,其最大反射率趋于一致。

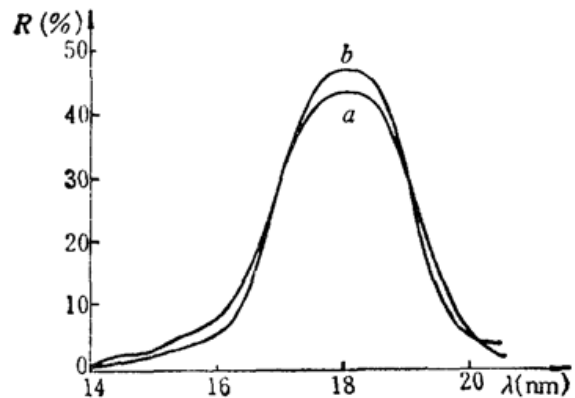
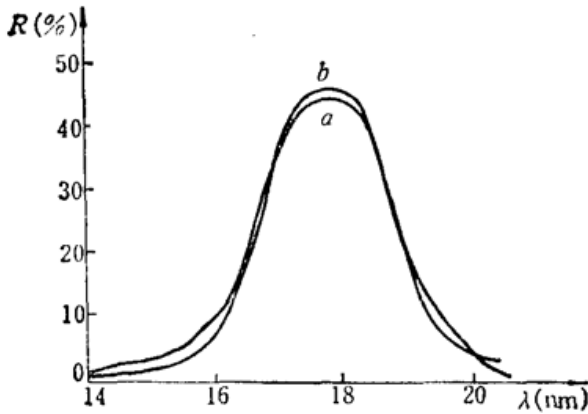


Fig. 2 Reflectance profiles of the optimized periodic (a) and quasi-periodic (b) X-ray multilayers

Fig. 3 Reflectance profiles of the optimized periodic (a) and non-periodic (b) X-ray multilayers

三、实际X射线多层膜的光学性质

上面我们讨论了理想 X 光膜的 optical 特性,这种膜层的表面是光滑的,膜层的界面是尖锐的,膜层的厚度是精确的。实际膜层并非如此。

3.1 薄膜表面和界面粗糙度对薄膜性能的影响

实际膜层的表面和界面是粗糙的。这种情况主要由以下几种因素引起的:基底本身的粗糙度;薄膜生长过程中形成的附加粗糙度;表面的吸附和污染造成的散射中心。这些因素形成总的薄膜表面和界面粗糙度,用均方根粗糙度来表示。在这种条件下,薄膜的界面反射系数

将会降低, 设 γ_0 表示理想界面的反射系数, 则实际反射系数

$$\gamma = \gamma_0 \exp[-(4\pi\sigma \sin \theta_i / \lambda)^2] \quad (9)$$

这里 σ 为界面均方根粗糙度, θ_i 为掠入射角。由于 X 波长甚短, 粗糙度对反射率的影响很大。对多层膜来说, 情况要复杂得多, 不仅要考虑某一界面的漫散射特性, 还要考虑界面粗糙度间的相关性, 最简单的是考虑完全相关的情况。这时, 总的反射率仍是各周期内反射系数的干涉叠加, 而每一周期具有相同的粗糙度和粗糙度分布。图 4 给出不同粗糙度对薄膜反射率的影响, 可以看出, 随着均方根粗糙度的增加, 反射率迅速下降。当粗糙度大于 1 nm 时, 反射率已下降到最大反射率的一半, 随着 X 光波长变短, 这种现象将更加严重。

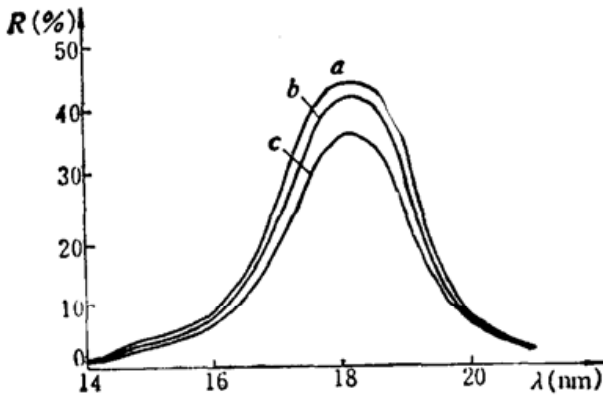


Fig. 4 Effect of interface on the permeation reflectance of the X-ray multilayers
a— $d_{tr}=0$; b— $d_{tr}=10$; c— $d_{tr}=17$; $N=10$

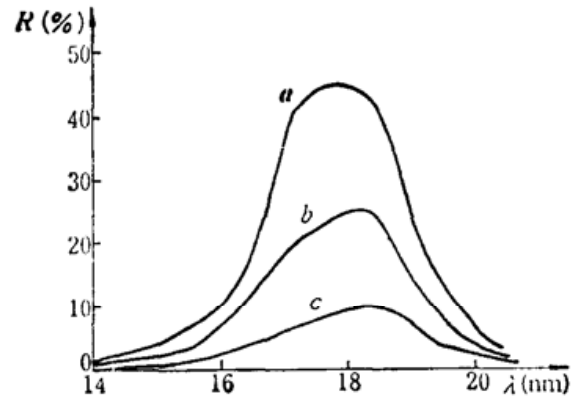


Fig. 5 Effects of the surface roughness on the reflectance
a— $\sigma=0$; b— $\sigma=1$ nm; c— $\sigma=1.7$ nm, $N=10$

3.2 膜层之间的界面扩散对反射率的影响

在实际薄膜中, 由于材料之间的相互扩散, 不可能构成尖锐的界面, 而是存在一定的交叉

区, 在此区域内, 膜层的光学常数是渐变的。假设薄膜的光学常数按余弦函数由一种材料向另一种材料过渡, 这样, 在一个周期内, 除了 H 层和 L 层外, 又增加了介于它们之间的过渡层, 图 5 给出不同过渡区宽度时薄膜反射率的变化。可以看出, 界面渗透也会影响薄膜的反射率。值得注意的是, 薄膜的界面粗糙度往往和界面渗透交叉在一起。当一种材料在另一种材料上生长时, 总是先填充原膜层的不平, 形成实际上的交叉渗透。这种现象在大光斑范围内可以看作是过渡层的一部分。这时界面散射问题可处理成界面渗透问题。

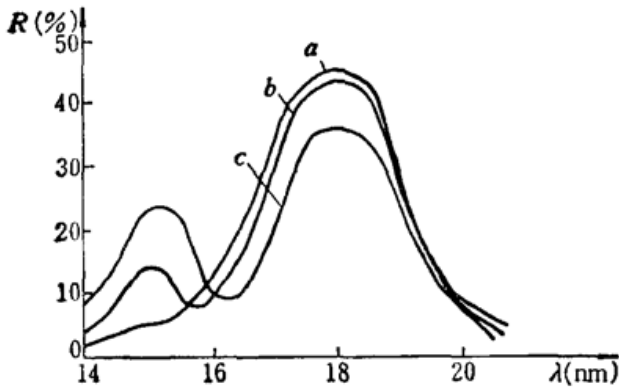


Fig. 6 Effect of the random variance of thickness on the reflectance of X-ray multilayers
a— $\Delta d=0$; b— $\Delta d=0.4$ nm; c— $\Delta d=0.8$ nm; $N=10$

3.3 膜层厚度的随机误差对薄膜反射率的影响

在膜层制备过程中, 其膜层厚度不可能精确地达到设计要求。总有一定的误差。我们认为, 这种误差是随机变化的。变化的峰值与控制技术有关。在膜层厚度中引入随机误差, 计算结果如图 6 所示, 可以看出它对反射率的影响也是很大的。

我们用磁控溅射技术制备了 18 nm 的 10 层对 Mo/Al 多层膜。俄歇和电镜分析估计了膜层厚度和膜层结构。X 光衍射进行了超晶格特性分析和光性测试。结果表明,我们的设计方案和技术方案基本是可行的。

参 考 文 献

- 1 B. L. Henke, *Opt. Eng.*, **25**(8), 937(1986)
- 2 A. M. Saxena, *Acta Cryst.*, **A33**, 807(1977)
- 3 K. P. Lee, *Opt. Commun.*, **37**(3), 39(1981)
- 4 K. P. Lee, *Opt. Commun.*, **42**(3), 195(1982)
- 5 T. W. Barbee, *Appl. Opt.*, **20**(17), 3027(1981)
- 6 P. G. Harper, *Appl. Opt.*, **26**(4), 713(1987)
- 7 D. Windt, *Appl. Opt.*, **27**(2), (1988)

(收稿日期: 1989 年 11 月 22 日)

激光场中慢电子与正电子素碰撞的单光子吸收

田之悦 许宗荣

(华西医科大学药学院, 成都, 610041)

One photon absorption of slow electron colliding with positronium in laser field

Tian Zhiyue, Xu Zongrong

(Huaxi Medical University, Chengdu)

Abstract: The one photon absorption of slow electron colliding with positronium in a laser field has been examined and the accurate variational scattering phase shifts have been used to calculate the free-free absorption cross section.

Key words: laser, positronium, free-free absorption cross section

正电子素(positronium, e^+e^-)在空间物理与辐射化学中具有重大的意义^[1]。最近人们已经在实验室里产生正电子素负离子($e^+e^-e^-$)^[2]它是一个稳定的体系,研究认为,正电子素负离子(p_s^-)可能用来产生可控制能量的正电子素(p_s)束。近年来,对正电子素进行了不少研究,如文献[3]考察了慢电子与正电子素的弹性散射。

本文研究激光场中慢电子与 ps 的单重态与三重态的单光子吸收过程:

$$\begin{aligned} e^- + (e^+e^-)({}^1s_0) + \hbar\omega &\longrightarrow e^- + (e^+e^-)({}^1s_0) \\ e^- + (e^+e^-)({}^3s_1) + \hbar\omega &\longrightarrow e^- + (e^+e^-)({}^3s_1). \end{aligned}$$

当动量为 $\hbar k_i$ 的自由电子经历 ps 产生的势场,从初态 i 跃迁到末态 f 吸收光子的截面可由下式确定:

$$d\sigma_{if} = \frac{4\pi^2 e^2}{\mu \omega c} |\langle \beta | \mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{e}}_\omega | \alpha \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) d\alpha d\beta, \quad (1)$$