

文章编号: 0258-7025(2002)11-1027-04

# 多层膜周期厚度的精确计算

冯仕猛<sup>1</sup>, 赵海鹰<sup>1</sup>, 窦晓鸣<sup>1</sup>, 范正修<sup>2</sup>, 邵建达<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> 上海交通大学应用物理系, 上海 200240; <sup>2</sup> 中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

**提要** 布拉格修正公式可以用于计算基底是平面的软 X 射线多层膜周期厚度, 但对于基底是曲面的多层膜, 小角 X 射线衍射峰角度常常发生漂移, 用该公式计算的周期厚度就与实际周期厚度不一致。分析了衍射峰角度位置漂移现象, 对以布拉格公式为基础的多层膜周期厚度计算公式进行了修正, 实验结果显示, 利用修正公式获得的多层膜周期厚度比较接近多层膜实际周期厚度。

**关键词** 多层膜, X 射线衍射角度, 周期厚度

中图分类号 O 434 文献标识码 A

## Precise Calculation of the Periodic-thickness for Multilayer

FENG Shi-meng<sup>1</sup>, ZHAO Hai-ying<sup>1</sup>, DOU Xiao-ming<sup>1</sup>, FAN Zheng-xiu<sup>2</sup>, SHAO Jian-da<sup>2</sup>

(<sup>1</sup> Department of Applied Physics, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240  
<sup>2</sup> Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)

**Abstract** The amendatory Bragg formula may be used for calculating the periodic thickness of multilayers deposited on the plane substrate by small X-ray diffraction spectrum. However, the diffraction peak angle of multilayer deposited on the curved substrate will be different from that of multilayer fabricated on the plane substrates though they have the same periodic thickness. Thus, the calculated periodic thickness of the above multilayer with the Bragg formula is not well agreement with the real value of the multilayer. This paper gives an analysis of phenomenon of diffraction peak excursion, and gives a revised formula derived from the amendatory Bragg formula for accurately calculating the periodic thickness of multilayer deposited on any substrates. The experimental results show that the periodic thickness calculated with the formula is consistent with the practical periodic thickness.

**Key words** multilayer, X-ray diffraction angle, periodic thickness

## 1 引 言

多层膜周期厚度是软 X 射线反射元件研究中一个非常重要的参数。特别对于波长比较短的软 X 射线多层膜, 对多层膜周期厚度精度要求非常高, 因此准确确定其多层膜的周期厚度, 对于正确评估多层膜的性能是非常重要的。在多层膜周期厚度的计算中, 先测量多层膜的小角 X 射线衍射谱, 然后用修正的布拉格公式进行计算<sup>[1, 2]</sup>

$$2d \sin \theta_m (1 - \delta / \sin^2 \theta_m) = m\lambda \quad (1)$$

这里  $\delta = \gamma \delta_1 + (1 - \gamma) \delta_2$ ,  $\delta_1$  和  $\delta_2$  是周期结构中两

种材料的修正因子<sup>[3]</sup>。由上式作  $m\lambda / 2\sin \theta_m$  与  $\csc^2 \theta_m$  的最小二乘法直线, 其在  $Y$  上的截距就是周期厚度。这个公式适应的基本前提是样品基底是平面, 在做 X 射线衍射时, 样品安装位置正确, 多层膜样品的小角度 X 射线衍射谱衍射峰角度才与真实的角度相符合, 由此才能获得准确的周期厚度。但是实际上多层膜在制备过程中, 因为一些特殊的需要, 样品基底是曲面, 或者其他方面的原因有可能导致多层膜的小角 X 射线衍射谱谱峰发生漂移, 从而导致用公式 (1) 计算的周期厚度明显与多层膜实际周期厚度不相符。

收稿日期 2001-08-23; 收到修改稿日期 2001-11-14

作者简介 冯仕猛 (1966—) 男, 上海交通大学物理系, 博士, 主要从事光电子薄膜研究。E-mail: feng-shimeng@163.net

本文在公式(1)的基础上进行扩展而得到一个计算多层膜周期厚度的公式。在表面是曲面和平面两种基底上制备多层膜,分别测量它们的小角度X射线衍射谱,用本文公式和公式(1)计算它们的周期厚度,通过测量多层膜反射率计算多层膜实际周期厚度,结果表明,本文公式计算的周期厚度比较接近于多层膜的实际周期厚度。

## 2 小角度X射线衍射峰位置飘移的理论分析

在实验过程中,有时候常常因为某种特殊的需要,基底常常是曲面。如果在曲面上制备多层膜,多层膜的小角度X射线衍射峰的位置会发生漂移,漂移的角度和曲面的曲率半径相关。现假定曲面的曲率半径是 $R$ ,如图1所示。

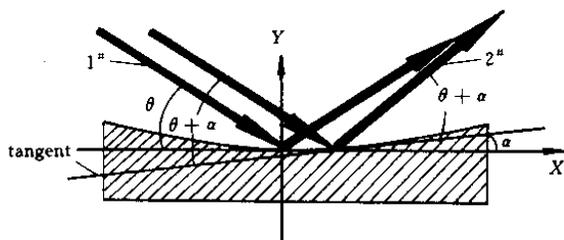


图1 曲面上光反射示意图

Fig.1 Light is reflected on the curve surface

当基片水平放置,只是考虑二维曲线,则曲线方程为

$$x^2 + (y - R)^2 = R^2 \quad (2)$$

在曲线的任意一点处,切线斜率为

$$y' = \pm \frac{x}{\sqrt{R^2 - x^2}} \quad (3)$$

也就是说,不在坐标原点(曲面中心)处切线与水平面的夹角(或者X轴)

$$\tan \alpha = y' \quad (4)$$

如果入射光在曲面的中央反射,掠入射角度为 $\theta$ ,反射角度也为 $\theta$ ,如图1中光束1的反射;但如果光在偏离中心位置反射,则反射点切线和X轴夹角为 $\alpha$ ,则入射光和切线的夹角(掠入射角)为 $\theta + \alpha$ ,反射光和切线的夹角也为 $\theta + \alpha$ ,但对于反射光和X轴的夹角就应该等于 $\theta + 2\alpha$ (见图1中的光束2)。也就是说,在小角度X射线衍射谱中,如果光斑不在多层膜的中心,对于相同周期厚度多层膜同级次

衍射峰,基底是曲面的多层膜衍射峰角度与基底是平面的多层膜同级衍射峰角度相比,前者每一级衍射峰角度都要移动 $2\alpha$ 。

## 3 多层膜周期厚度的精确计算

小角度X射线衍射(SAXD)方法在测量晶体结构和一维超晶格结构分析中是应用得比较早和较多的<sup>[4,5]</sup>。在软X射线出现以后,就被广泛用来测量多层膜周期结构和它的缺陷。但对基片是曲面的多层膜,小角度X射线衍射谱的峰位置常常有明显移动。在这种情况下,多层膜周期厚度的计算公式与(1)式有所不同。本文在(1)式的基础上进一步修正

$$2d \sin \theta_m (1 - \delta / \sin^2 \theta_m) = m\lambda \quad (5)$$

$$2d \sin \theta_{m+1} (1 - \delta / \sin^2 \theta_{m+1}) = (m+1)\lambda \quad (6)$$

这里 $m$ 为衍射峰级次, $d$ 为周期厚度,将上面两个公式相减得

$$2d(\sin \theta_{m+1} - \sin \theta_m) + 2d\delta(-1/\sin \theta_{m+1} + 1/\sin \theta_m) = \lambda \quad (7)$$

式(7)还可以简化为

$$2d(\sin \theta_{m+1} - \sin \theta_m) (1 - \delta / \sin \theta_m \sin \theta_{m+1}) = \lambda \quad (8)$$

利用这个公式和两个衍射峰角度,可以比较精确地计算多层膜周期厚度。

## 4 实验和讨论

用磁控溅射技术在相同的工艺条件和控制参数下同时制备两个 $\text{Mo/Si}$ 多层膜样品。1#样品的基片曲率半径 $R = \infty$ ,2#样品的基片曲率半径 $R = 500 \text{ mm}$ 。多层膜设计周期厚度为 $7.20 \text{ nm}$ 。样品经过X射线衍射实验,获得的小角度X衍射谱如图2和图3。从图2和3中可以看出,虽然它们的衍射峰形状相同,但图3的 $2\theta_i$ 与图2的 $2\theta_i$ 相比,各级衍射峰角度平均移动 $0.17^\circ$ 。这一现象与本文第2节中的分析是一致的。

分别将图2和图3中二、三级或者三、四级衍射峰角度代入公式(8)就可以得出1#样品和2#样品的周期厚度,见表1中的公式(8)列。利用公式(1),分别用图2和图3中的前5个衍射峰作 $m\lambda/2\sin \theta_m$ 与 $\csc^2 \theta_m$ 的最小二乘法直线,在Y上的截距就是样品1#和2#的周期厚度(见表1中公式(1)列给出的数据)。表中结果可以看出,对于基底是平面的多层膜(1#样品),公式(8)获得的周期厚度为 $7.17$

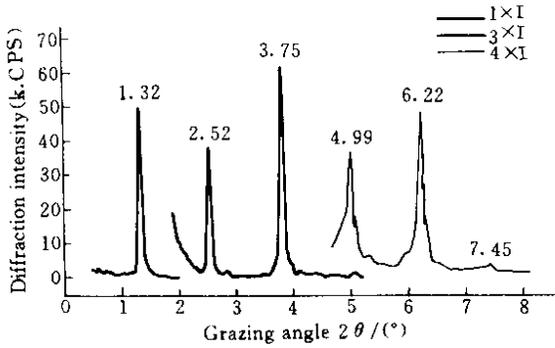


图2 Mo/Si 多层膜的小角 X 射线衍射谱  
吸收层厚度/周期厚度 = 0.4 ,  
基片是曲率半径为  $R = \infty$  的 K9 玻璃

Fig.2 Small angle X-ray diffraction spectrum of Mo/Si multilayers

The absorption/the period is 0.4 , the radius of curve surface of substrate  $R = \infty$  and substrate is K9 glass

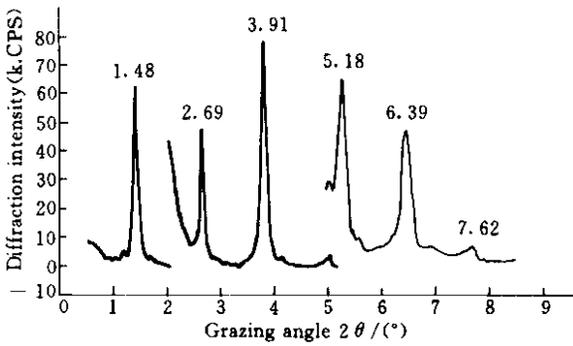


图3 Mo/Si 多层膜的小角 X 射线衍射谱  
吸收层厚度/周期厚度 = 0.4 ,  
基片是曲率半径为  $R = 500$  mm 的 K9 玻璃

Fig.3 Small angle X-ray diffraction spectrum of Mo/Si multilayers

The absorption/the period is 0.4 , the radius of curve surface of substrate  $R = 500$  mm and substrate is K9 glass

nm ,公式(1)计算的周期厚度为 7.15 nm ,其误差仅为 0.02 nm ,所以对于基底是平面的多层膜 ,两种方法计算的周期厚度接近相等 ;但对于基底是曲面的多层膜(2# 样品) ,公式(8)获得的周期厚度是 7.16 nm ,而公式(1)计算的周期厚度 6.93 nm ,两个值相差为 0.23 nm ,两种方法计算的多层膜周期厚度明显不同。

周期厚度不同的多层膜理论反射峰值位置是明显不同的。在入射角度为  $7^\circ$  的情况下 ,周期厚度为 6.93 nm 的 Mo/Si 多层膜理论反射曲线的峰值位置是 93 ~ 94 eV ,如图4 所示曲线 C ;周期厚度为 7.17

nm 多层膜理论反射曲线的峰值位置是 89 eV( 见图4 中的曲线 D ) ,两个峰的位置有明显差别。

表1 用公式(8)和公式(1)计算的多层膜周期厚度

Table 1 Period thickness of multilayers given by Eq.( 8 ) and Eq.( 1 ) , respectively

No.	Eq.( 8 )	Eq.(1)	$\Delta d$
1 #	7.17 nm	7.15 nm	0.02 nm
2 #	7.16 nm	6.93 nm	0.23 nm

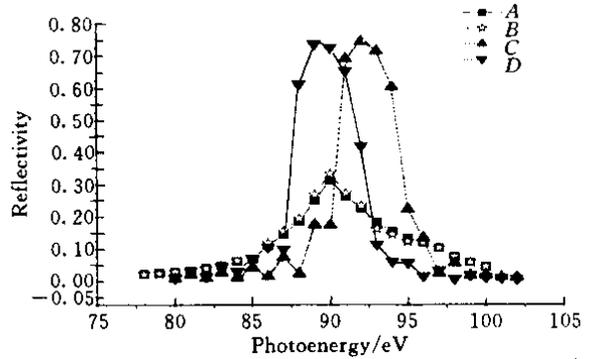


图4 Mo/Si 多层膜的反射率曲线

入射角为  $7^\circ$  ,吸收层厚度/周期厚度 = 0.4。其中曲线 A 为 1# 样品的测量反射曲线 ,曲线 B 为 2# 样品的测量反射曲线 ,曲线 C 为周期厚度为 6.93 nm 多层膜理论反射曲线 ,曲线 D 为周期厚度为 7.17 nm 的多层膜理论反射曲线

Fig.4 Measured reflectivity of Mo/Si multilayers

The incidence angle is  $7^\circ$  and the absorption/the period = 0.4. The spectrum A is the measured reflectivity of multilayer 1 # , B is the measured reflectivity of multilayer 2 # , C is the theoretical reflectivity of multilayer with the period of 6.93 nm , D corresponds to the theoretical reflectivity of multilayer with the period of 7.17 nm

在北京同步辐射装置上同时测量样品 1# 和样品 2# 的反射率 ,在入射角度为  $7^\circ$  的情况下 ,其最大反射率都处在光子能量为 89 ~ 90 eV 之间 ,反射率最大值约为 31% 左右 ,而且它们的峰位置相同( 见图4 中的曲线 A 和 B ) ,与周期厚度为 7.17 nm 的 Mo/Si 多层膜理论反射曲线( 曲线 D ) 峰值相对应 ,说明两个样品的实际周期厚度都是 7.17 nm ,就是说用公式(8)计算的两个样品周期厚度都比较符合多层膜的实际周期厚度 ,而公式(1)计算的 1# 样品周期厚度 7.15 nm 与实际周期厚度基本一致 ,但 2# 样品周期厚度 6.93 nm 与实际周期厚度 7.17 nm 相差较大。比较这些结果可以看出 ,用公式(8)计算多层膜周期厚度比较合理。

必须指出的是 ,多层膜测量反射率一般都比理论反射率小得多 ,这主要是由于多层膜的界面粗糙度加大了入射光的散射 ,波长越短的光 ,这种散射越

强;另外一个原因是测量光不是严格单色光,非单色光会导致多层膜的测量反射率比实际反射率小,而且光的能量分辨率越低,多层膜的测量反射率也越低。这两个因素的综合作用导致多层膜的测量峰值反射率比理论反射率小。但是,在入射角确定的情况下,反射曲线最大峰值能量位置是不会变化的,所以由测量反射峰值位置确定多层膜的实际周期厚度是比较精确的。

通过大量的实验表明,用小角度 X 射线衍射峰和公式(8)计算的周期厚度与多层膜的实际周期厚度比较接近,特别是在多层膜的基片是曲面时,该公式获得的周期厚度明显比公式(1)获得的周期厚度更接近多层膜的实际周期厚度。在多层膜结构的研究中,公式(8)获得的数据应该比较精确。

## 5 结 论

1)对于基底是平面的多层膜,可以用布拉格修正公式(1)计算多层膜周期厚度,但对于基底是曲面的多层膜,用该公式计算的多层膜周期厚度误差较

大。

2)无论基底是曲面或者是平面的多层膜,用本文提供的公式(8)计算的多层膜周期厚度更接近于多层膜的实际周期厚度。

## 参 考 文 献

- 1 Ying Gongjie, Shao Jianda, Fan Zhengxiu. The structure parameters of soft X-ray Mo/Si multilayer is precisely measured by the small angle X-ray diffraction [ J ]. *Chinese J. Lasers* ( 中国激光 ), 1993, **20**( 12 ):900 ~ 905 ( in Chinese )
- 2 Zhou Guoliang, Shen Xiaoliang, Shen Yi *et al.*. Study of  $Ge_xSi_{1-x}/Si$  super lattice by small angle X-ray diffraction [ J ]. *Acta Phys. Sin.* ( 物理学报 ), 1991, **40**( 1 ):56 ~ 62 ( in Chinese )
- 3 Michett. *Optical Systems for Soft X-rays* [ M ]. New York : Plenum Press, 1986. 101
- 4 E. J. Puilk, M. J. Vander Wiel, H. Z. Lemaker *et al.*. The effect on the interface roughness and its X-ray reflectance [ J ]. *Rev. Sci. Instrum.*, 1992, **63**:1415 ~ 1419
- 5 C. Montcalm, B. T. Sullivan, M. Ranger *et al.*. Mo/Y multilayer mirrors for the 8 ~ 12 nm wavelength region [ J ]. *Opt. Lett.*, 1994, **19**( 13 ):1173 ~ 1175