

金属超晶格薄膜对软 X 射线和 远紫外光的反射效应*

何燕平 冯伟国
(同济大学物理系)

吴 翔

(中国高等科学技术中心理论物理分中心 中国科学院国际材料物理中心)
同济大学波耳固体物理研究室

提 要

本文在流体动力学模型基础上,用转移矩阵方法讨论了 TE 波在金属超晶格薄膜上的反射行为,给出了 $\omega > \omega_p$ 时反射率的解析表达式。并通过对 AB 型金属超晶格和 ACBC 型金属超晶格的数值计算,得到了关于软 X 射线反射光谱行为的许多有意义的结果。

关键词: 软 X 射线, 金属超晶格, 反射率。

一、引 言

等离子体波对于金属-金属、金属-半导体和金属-绝缘体超晶格光学性质上的效应已引起人们广泛兴趣^[1~7], 发现频率处于禁带中的软 X 射线和远紫外光必然被金属超晶格所反射。薛登平和蔡建华在文献 [1, 5, 7] 研究的基础上, 用流体动力学模型讨论了金属 AB 型超晶格对大于金属等离子体频率的电磁波的反射性质, 建立了确定反射率的方程组进行了数值计算。由于计算方法停留在直接数值求解方程组上, 虽然给出了反射率的粗略的计算结果, 却不能给出反射峰的宽度和高度。

本文把薛、蔡提出的金属超晶格反射率理论方法, 由通常的 AB 型超晶格体系推广到一般的情况, 即由 N 种不同材料的金属层交替组成的层状体系。该体系不仅可退化到 AB 型金属超晶格体系。而且可以适用于描述准周期超晶格体系。同时对于这样的理想超晶格体系, TE 波的反射率具有简洁的解析表达式; 本文第二部分为 TE 波在一般金属超晶格的反射率理论; 第三部分给出两种特殊情况, AB 型超晶格和 ACBC 型金属超晶格的反射率的计算结果, 并进行了讨论。

二、TE 波在一般金属超晶格上的反射理论

考虑由 N 种不同金属材料所组成的一般的广义超晶格, 如图 1 所示, 其中电子的密度

和层厚分别为 n_j 和 d_j , 令 $D=d_1+d_2+\dots+d_N$ 为调制周期的厚度, L 为调制周期数, 系统的

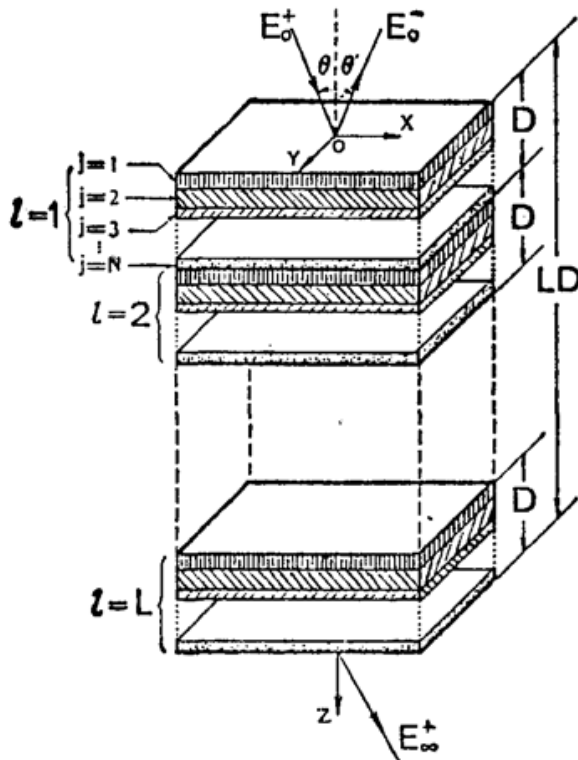


Fig. 1 The structure of a generalized metallic superlattice

总厚度为 DL 。为了简单起见, 假定在 $z < 0$ 和 $z > LD$ 的区域是真空区, 而入射的软 X 射线或远紫外光是 TE 波。波矢处在 X-Z 平面内, q 为 X 方向的波矢分量, $\pm k_0$ 为 z 方向分量, 满足关系式

$$k_0^2 = (\omega/c)^2 - q^2, \quad (1)$$

式中 c 为真空中的光速, 由于 TE 波入射来自于 $z < 0$ 处, 且仅有 y 分量 $E_{0y}(q, \omega, z)$

$$E_{0y}(q, \omega, z) = E_{0y}^+(q, \omega) \exp(i k_0 z) + E_{0y}^-(q, \omega) \exp(-i k_0 z), \quad (z < 0) \quad (2)$$

而出射波为

$$E_{\infty y}(q, \omega, z) = E_{\infty y}(q, \omega) \exp(i k_0 z), \quad (z > LD) \quad (3)$$

对于金属超晶格, 把金属层中的电子看作理想流体, 并用流体动力学模型来描述电子的运动, 在忽略阻尼和空间色散的情况下, 对于 TE 波可得到方程^[5,7]

$$\frac{d^2 E_y}{dz^2} + [(\omega/c)^2 - (\omega_p/c)^2 - q^2] E_y = 0, \quad (4)$$

在调制周期中的第 j 层金属, 定义等离子体频率为

$$\omega_{pj} = \sqrt{(4\pi n_j e^2)/m_e}, \quad (j=1, 2, \dots, N) \quad (5)$$

式中 n_j 为第 j 层金属的电子密度。在多层金属 ($0 < z < LD$) 中, 方程的一般解为

$$\left. \begin{aligned} E_{jl}(q, \omega, z) &= E_{jl}^+ \exp[i k_j(z - z_{jl})] + E_{jl}^- \exp[-i k_j(z - z_{jl})], \\ z_{jl} &= (l-1)D + (d_1 + d_2 + \dots + d_j), \\ k_j^2 &= k_0^2 - (\omega_{pj}/c)^2, \quad \left. \begin{aligned} (j=1, 2, \dots, N) \\ (l=1, 2, \dots, L) \end{aligned} \right\} \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

式中的 E_{jl}^+ 和 E_{jl}^- 在各层内由于不计吸收均与 z 无关。对软 X 射线和远紫外光频率区域的入射波可满足如下条件

$$(\omega/\omega_{PH}) \geq \sec \theta, \quad \omega_{PH} = \max\{\omega_{pj} | j=1, 2, \dots, N\}, \quad (7)$$

而在此条件下的 k_j 均为实数。令

$$\left. \begin{aligned} Y &= (E_{0y}^-/E_{0y}^+), \\ U_{jl} &= \begin{pmatrix} u_{jl} \\ v_{jl} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{jl}^+/E_{0y}^+ \\ E_{jl}^-/E_{0y}^+ \end{pmatrix}, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

$$\rho_j = \exp(i k_j d_j), \quad (j=1, 2, \dots, N), \quad (9)$$

在各界面上用 E_y 和 (dE_y/dz) 的连续条件, 可得到

$$\left. \begin{aligned} \begin{pmatrix} \rho_1^{-1} & \rho_1 \\ \rho_1^{-1} & -\rho \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} \\ v_{11} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1+Y \\ (1-Y)k_0/k_1 \end{pmatrix}, & (z=0) \\ (k_0 - k_N)u_{NL} + (k_0 + k_N)v_{NL} &= 0, & (z=LD) \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

$$\left. \begin{aligned} X_j U_{jl} &= \tilde{X}_{j+1} U_{j+1, l}, & z = z_{jl}, & j = 1, 2, \dots, N, & l = 1, 2, \dots, L-1 \\ X_N U_{NL} &= \tilde{X}_1 U_{1, l+1}, & z = lD, & l = 1, 2, \dots, L-1 \\ X_j &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ik_j & -ik_j \end{pmatrix}, & \tilde{X}_j &= \begin{pmatrix} \rho_j^{-1} & \rho_j \\ ik_j \rho_j^{-1} & -ik_j \rho_j \end{pmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

方程(11)可以合并写成

$$U_{11} = X_1^{-1} \left[\left(\prod_{j=2}^N \tilde{X}_j X_j^{-1} \right) \tilde{X}_1 X_1^{-1} \right]^{L-1} \left(\prod_{j=2}^{N-1} \tilde{X}_j X_j^{-1} \right) \tilde{X}_N U_{NL0} \quad (12)$$

在每一调制周期中的第 j 层金属, 定义转移矩阵为

$$M_j = \tilde{X}_j X_j^{-1}, \quad (13)$$

容易发现, M_j 总是实矩阵

$$M_j = \begin{cases} \begin{pmatrix} \cos(k_j d_j) & -\sin(k_j d_j)/k_j \\ k_j \sin(k_j d_j) & \cos(k_j d_j) \end{pmatrix}, & k_j^2 > 0 \\ \begin{pmatrix} \text{ch}(\tilde{k}_j d_j) & -\text{sh}(k_j d_j)/\tilde{k}_j \\ -\tilde{k}_j \text{sh}(\tilde{k}_j d_j) & \text{ch}(\tilde{k}_j d_j) \end{pmatrix}, & k_j^2 < 0 \end{cases} \quad (14)$$

式中 $\tilde{k}_j = ik_j$, 其中 $j = 1, 2, \dots, N$ (15)

$$T = \left[\left(\prod_{j=2}^N M_j \right) M_1 \right]^{L-1} \left(\prod_{j=2}^{N-1} M_j \right) = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix}, \quad (16)$$

方程(10)和(12)可以确定 $u_{11}, v_{11}, u_{NL}, v_{NL}$ 和 Y , 而反射率 R 定义为

$$R = |Y|^2, \quad (17)$$

由于在 AB 型金属超晶格上, 大于金属等离子体频率的 TM 波将完全被反射, 所以只需考虑 TE 波的反射行为, 通过冗长的数学计算, 可从(10)式和(12)式解出反射率 R 具有如下表达式*

$$R = \frac{\mathcal{X}_1^2 + \mathcal{Y}_1^2}{\mathcal{X}_2^2 + \mathcal{Y}_2^2}. \quad (18)$$

式中 \mathcal{X} 和 \mathcal{Y} 均为实数, 并都与参量 t, k, d 有关。(18)式满足(7)式的条件, 然而这能容易地推广到一般情况。

三、数值结果和讨论

作为上述理论的应用, 我们对一般金属超晶格的两种特殊情况进行了数值计算, 并讨论了多层金属薄膜的反射率性质。

1. AB 型超晶格

(1)式中取 $N=2$, 就退化为通常的 AB 型超晶格结构。令 $d_A = d_B = (D/2)$, 并取 A 层为金属镁, 电子密度 $n_A = 8.63 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$; B 层为铝, 电子密度 $n_B = 18.1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 。图 2(a), 图 3(a) 和图 4(a) 表示垂直入射, 调制周期数 $L=50$, 层厚分别为 1500 \AA 、 1000 \AA 和 392 \AA 时的反射率曲线。由计算结果发现 AB 型金属超晶格体系的一些重要的反射特性:

(1) 在 $\omega > \omega_{PH}$ 区域中存在若干个明显主极大, 每二个主极大之间存在 $(L-2)$ 个次极大, 这一现象类似于光栅和多层薄膜光学反射器, 相邻两个主极大之间的频率间隔一般可写

* 附录 A.

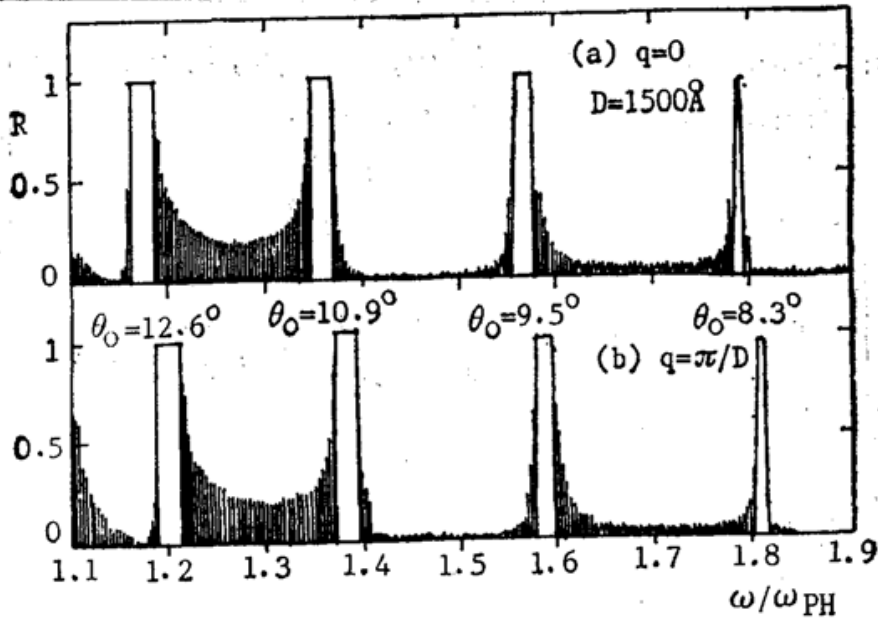


Fig. 2 Reflectivity versus frequency ω for a metallic AB structure superlattice with 50 Mg-Al periods

$\omega_{PH} = \omega_{PB} = 2.47 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$ is for Al, and $\omega_{PL} = \omega_{PA} = 1.63 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$ for Mg. $d_A = d_B = D/2$

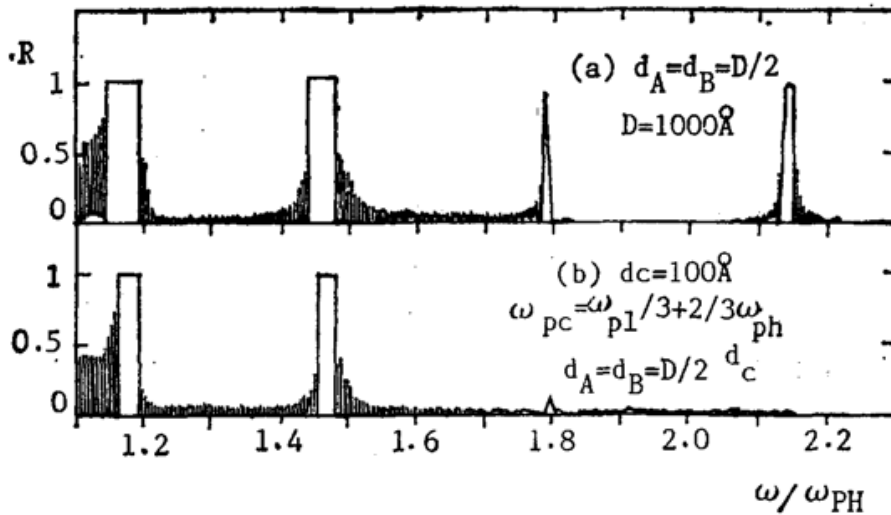


Fig. 3 Reflectivity for normal incidence on metallic superlattices with 50 periods.

Fig. (b) is for the Mg-Metal-Al-metal multilayer and Fig. (a) is for the Mg-Al superlattice same as Fig. 2(a)

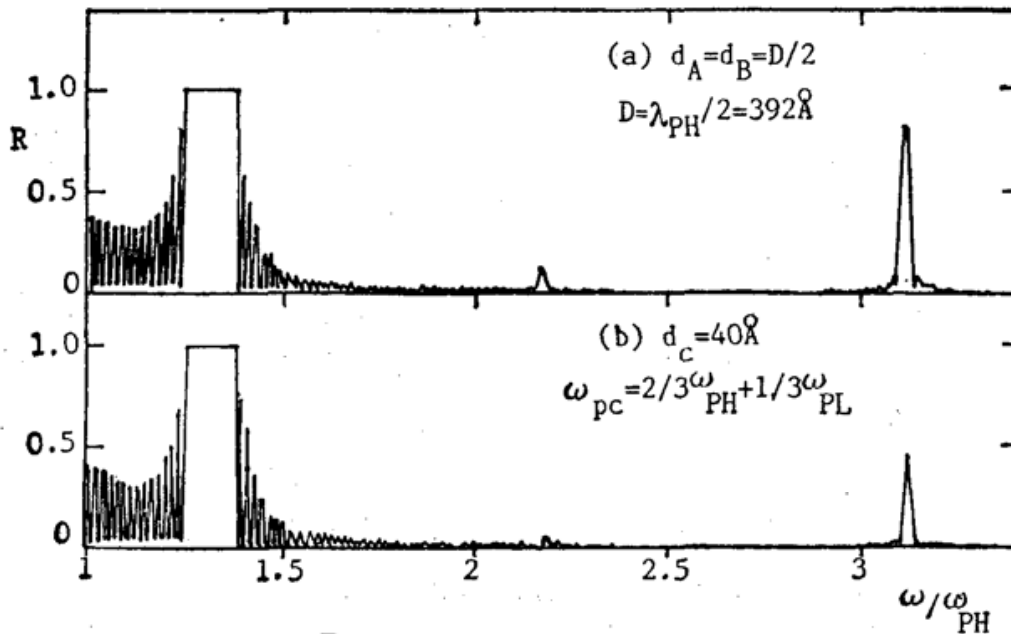


Fig. 4 The same as Fig. 5

成

$$\Delta\Omega = K(\omega)2\pi c/D, \quad (19)$$

式中 $K(\omega)$ 是与 ω 有关的单调增加函数, 当 $\omega \gg \omega_{PH}$, 它将趋近于准周期形式 (如图 5 所示)。

$$\overline{\Delta\Omega} = (2\pi c/D), \quad (20)$$

对于次极大, 邻级间隔近似有

$$\frac{\overline{\Delta\Omega}}{L} = \frac{2\pi c}{D}, \quad (21)$$

(2) 若以一组序数来表示主极大, $m=1, 2, \dots$, 当 $\omega > \omega_{PH}$, 随着 m 的增加, 主极大的高度和宽度将以振荡的方式明显地减小。从图 6 可以看到, 当 D 取等离子体波长时, 主极大的宽度变得最大。由此可见, 用增加周期数 L 或调节周期厚度 D 来提高很短波长的反射率是有限的。

(3) 以其它金属取代镁和铝来提高 ω_{PH} 与 ω_{PL} 的比值, 则反射率峰的宽度将呈对数形式增长, 如图 7 所示。由于现有金属的电子密度处在 $0.9 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3} \leq n \leq 20.0 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, 所以提高电子密度比值以增加宽度的方法也受到了限制。

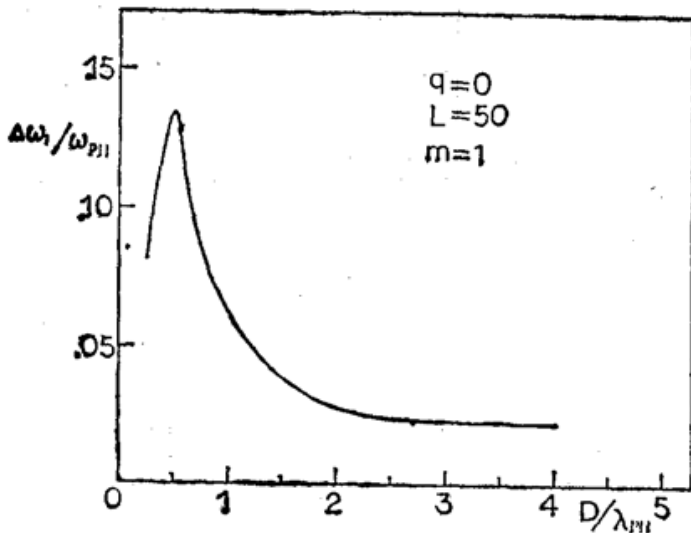


Fig. 6 The frequency breadth of the first order of reflecting maximum on a Mg-Al multilayer versus D

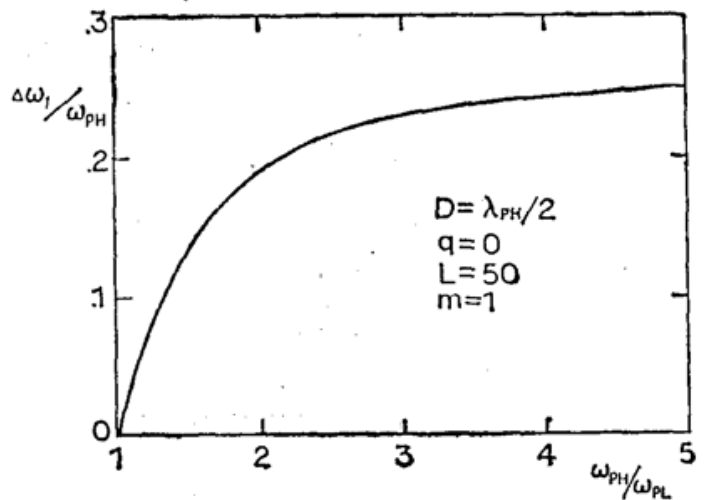


Fig. 7 The frequency band length of the first order of reflecting peak versus ω_{PH}/ω_{PL} of a Metal-Al multilayers

(4) 图 2(b) 是斜入射 ($q = \pi/D$) 的反射率曲线, 与图 2(a) 比较, 两种图线具有相似的形状, 而斜入射时主极大的位置明显地向高频方向移动; 且频率的移动与入射角的余弦成反比。说明采用大入射角入射可以得到更高频率的强反射, 这点经常被实验室采用^[9]。图 8 是 Mg-Al 超晶格, $|\lambda| = 60 \text{ \AA}$, $m=3$ 主极大的反射率峰 $R=0.99$, 宽度 $\Delta\lambda=0.4 \text{ \AA}$ 。

值得指出的是上述结果在薛、蔡的工作^[5]中是没有的。他们仅仅指出 $\omega > \omega_{PL}$ 时, 有反射峰存在, 而我们则给出了这些峰的定量结果。

2. ACBC 型金属超晶格

AB 型金属超晶格是一种理想的情况。在制作 X 射线反射镜的过程中, 可以使周期厚度保持一相当精度的常数, 但由于 AB 两层金属电子密度不同和结构不同, 不可避免地在 AB 两层金属的界面处产生一过渡区域, 由此必将影响体系的反射性能。为了考虑这一影响, 假设在 AB 两金属层间存在电子密度为 n_0 的金属层 C, $n_L < n_0 < n_H$ 。图 9 为一典型的 ACBC 型三明治金属超晶格结构。

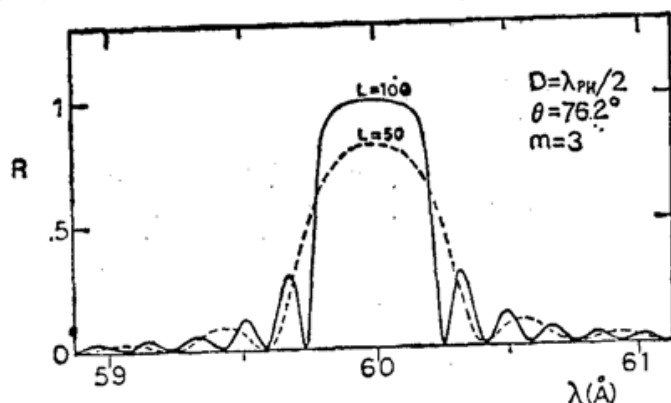


Fig. 8 Calculated reflectivities at incident angle 76.2° for a periodic Mg-Al superlattice

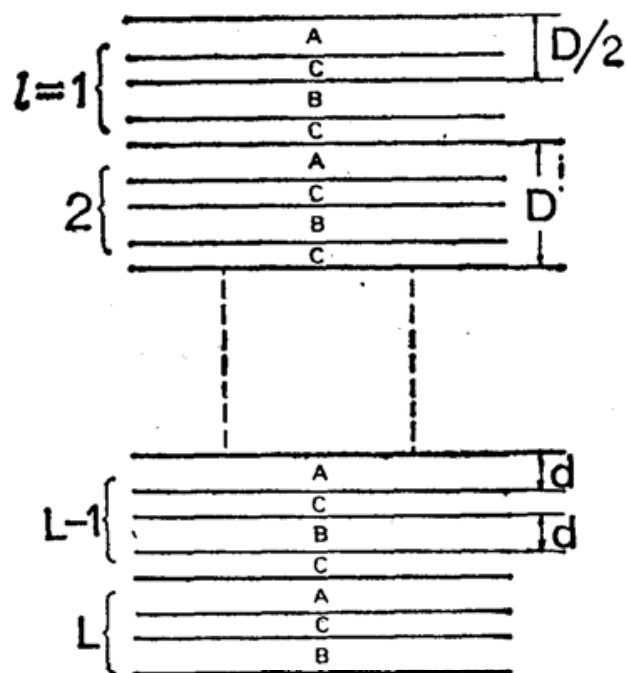


Fig. 9 A sandwich-like superlattice with ACBC structure

设 D 为准周期长度, 在理论计算中令 $d_A = d_B = d$, $d + d_C = (D/2)$ 。图 3(b) 和图 4(b) 分别表示 $d_C = 40 \text{ \AA}$, $D = 392 \text{ \AA}$, 以及 $d_C = 1000 \text{ \AA}$, $D = 1000 \text{ \AA}$ 时的反射率曲线。数值结果表明这种结构有如下特性:

(1) 由于过渡层 C 的存在, 反射率峰的高度和宽度都出现不同程度的减小, 这与文献 [10] 结论一致, 其中高级主极大受到的影响比第一级 $m=1$ 主极大受到的影响大。

(2) 如果 $\omega_{PC} > (\omega_{PL} + \omega_{PH})/2$, 则反射率曲线中的各峰值向高频方向发生不太明显的移动。 $\omega_{PC} < (\omega_{PL} + \omega_{PH})/2$, 反射率峰值略向低频方向移动。当过渡层厚度增加时, 则可以看到反射率峰值将明显减小。

本文在流体动力学模型基础上, 用转移矩阵方法, 建立了计算 TE 波软 X 射线和远紫外光在金属超晶格上的反射率理论。由于本文讨论的对象为广义金属超晶格, 所以该理论不仅适用于 AB 型和 ACBC 型金属超晶格, 还可直接应用到其它类型的金属层状结构, 如准周期系统^[11]、无序系统等。本文中的反射率解析表达式使数值计算过程中节省了大量的计算机用时。从这些详细的数值结果中, 作者首次获得了该模型下的反射率峰的高度和宽度。反射率主峰和次峰的经验分布规律, 以及入射角和峰值的分布规律。

本文的工作还可以推广到 $\omega_{PL} < \omega < \omega_{PH}$ 的情况, 所有这些说明这一理论提供了描写金属超晶格性质的一种简明有效的新方法。它为设计金属超晶格作为软 X 射线和远紫外光反射器件提供了新的途径。

在本文中作者忽略了背景中格点离子的极化效应。当入射波的能量不足以激发离子上的束缚电子时, 这一忽略是容许的。同时, 理论中还忽略了阻尼和空间色散效应。这些都将存在下一步工作中予以考虑。

附 录

由(10)、(12)式可解得

$$R = \frac{\mathcal{X}_1^2 + \mathcal{Y}_1^2}{\mathcal{X}_2^2 + \mathcal{Y}_2^2}, \quad (\text{A1})$$

其中

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{X}_1 &= -(k_1 - k_0)a_1 + (k_1 + k_0)a_3, \\ \mathcal{Y}_1 &= -(k_1 - k_0)a_2 + (k_1 + k_0)a_4, \\ \mathcal{X}_2 &= (k_1 + k_0)a_1 - (k_1 - k_0)a_3, \\ \mathcal{Y}_2 &= (k_1 + k_0)a_2 - (k_1 - k_0)a_4, \end{aligned} \right\} \quad (\text{A2})$$

而

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= (k_N + k_0)W_1 + (k_N - k_0)W_3, \\ a_2 &= (k_N + k_0)W_2 + (k_N - k_0)W_4, \\ a_3 &= b_1 \cos 2k_1 d_1 + b_2 \sin 2k_1 d_1, \\ a_4 &= -b_2 \cos 2k_1 d_1 + b_1 \sin 2k_1 d_1, \end{aligned} \right\} \quad (\text{A3})$$

这里

$$\left. \begin{aligned} W_1 &= (\alpha + \beta) \cos k_N d_N + (\gamma - \delta) \sin k_N d_N, \\ W_2 &= (\gamma - \delta) \cos k_N d_N - (\alpha - \beta) \sin k_N d_N, \\ W_3 &= (\alpha - \beta) \cos k_N d_N + (\gamma + \delta) \sin k_N d_N, \\ W_4 &= -(\gamma + \delta) \cos k_N d_N + (\alpha - \beta) \sin k_N d_N, \end{aligned} \right\} \quad (\text{A4})$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= (t_{11}/2), & \beta &= (t_{22}k_N/2k_1), \\ \gamma &= (t_{12}k_N/2), & \delta &= (t_{21}/2k_1), \end{aligned} \right\} \quad (\text{A5})$$

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= (k_N - k_0)W_1 + (k_N + k_0)W_3, \\ b_2 &= (k_N - k_0)W_2 + (k_N + k_0)W_4, \end{aligned} \right\} \quad (\text{A6})$$

式中 t_{ij} 由(16)式定义。

参 考 文 献

- [1] Xue Dengping, Cai Jianhua; *Solid State Commun.*, 1985, **56**, No. 8 (Nov), 651~654.
- [2] V. L. Hochan *et al.*; *Phys. Rev. (B)*, 1987, **B35**, No. 3 (Jan), 1088~1098.
- [3] H. Del Castillo-Musot *et al.*; *Phys. Rev. (B)*, 1987, **B36**, No. 3 (Jul), 1779~1781.
- [4] G. Eliasson *et al.*; *Phys. Rev. (B)*, 1986, **B33**, No. 12 (Jan), 1405~1407.
- [5] Xue Dengping, Cai Jianhua; *Commun. in Theory Phys. (China)*, 1988, **9**, No. 3 (Apr), 279.
- [6] F. E. Fernandez, O. H. Faico; *Preprint*.
- [7] Xue Dengping, Cai Jianhua; *Commun. in Theory Phys. (China)*, 1986, **6**, No. 2 (Mar/Apr), 195.
- [8] G. Barton; *Reports on Progress in Phys.*, 1979, **42**, No. 6 (Jun), 963~1016.
- [9] T. V. Barbee *et al.*; *Appl. Opt.*, 1985, **24**, No. 6 (Mar), 883~886.
- [10] E. Spiller, A. E. Rosenbluth; *Proc. SPIE*, 1985, Vol. 563, 221;
E. Spiller, A. E. Rosenbluth; *Opt. Engineering*, 1986, **25**, No. 8 (Aug), 954~963.
- [11] H. Komoto *et al.*; *Phys. Rev. Lett.* 1987, **58**, No. 23 (Jun), 2436~2438.

Reflectance effects of the metallic superlattice on soft X-rays and extreme ultraviolet

HE YANPING AND FENG WEIGUO

(Department of Physics, Tongji University, Shanghai)

WU XIANG

Center of Theoretical Physics, CCAST (World Laboratory)

International Centre for Materials Physics, Academia Sinica

Pohl -Institute of Solid State Physics, Tongji University, Shanghai

(Received 3 April 1989; revised 27 June 1989)

Abstract

Based on the hydrodynamic model the reflectance behavior of the TE waves on the metallic superlattices is discussed by making use of the transfer matrix method, and the analytic formula of the reflectivity is presented in the case of $\omega > \omega_p$. The interesting numerical results is shown for the special model of AB and ACBO structures, which provides an available new ways for studying and making of soft X-rays and extreme ultraviolet reflectors.

Key words: soft X-rays; metallic superlattice; reflectivity.

* This work was supported by the Chinese National Advanced Technology Foundation.