第 21 卷 第 8 期
2001 年 8 月
光 学 学 报
ACTA OPTICA SINICA
Vol.21, No.8
August, 2001

文章编号:0253-2239(2001)08-1004-04

软 X 射线多层膜光栅的衍射特性*

崔宏滨 刘文汉
(中国科学技术大学结构分析开放实验室 物理系,合肥 230026)

摘要: 用 X 射线运动学理论对软 X 射线多层膜光栅的衍射特性进行了研究。发现其衍射规律与多层膜的布拉格衍射和普通光栅衍射有本质的区别,可将衍射能量集中于某一衍射级上,同时它又保持了多层膜的高反射率和光栅的高分辨本领等优良特性。

关键词: 多层膜;多层膜光栅;软 X 射线
中图分类号:O434 文献标识码:A

1 引 言

由于软 X 射线的折射率接近于 1,除掠入射外,在界面处的反射率极低,而材料的吸收率又很高,寻找适合在该波段使用的光学元件比较困难。然而,由于其在许多领域的广泛应用前景,使得软 X 射线光学元件的研制越来越成为人们关注的焦点[1]。1984 年 Jark 等报道了镀 Ir-Si 膜的正弦光栅在波长为 30.4 nm 处的光栅效率为原来的三倍。后来的实验表明,具有周期性结构的多层膜能获得高的反射率,多层膜光栅及多层膜波带片等软 X 射线光学元件开始出现[2]。随后 Barbee 等对多层膜光栅的软 X 射线衍射特性进行了探讨[3],证明这是一种很有应用前景的新型光学元件。Sammar 等提出了关于多层膜光栅衍射效率的积分计算方法[4],用数值计算给出了 Mo/C、Mo/Si 多层膜光栅的一些结果。多层膜光栅可以认为是一种二维人造周期晶体,周期性多层膜具有高反射率,而光栅具有高分辨率,多层膜光栅结合了两者的优良特性,使得软 X 射线在高角度入射时,可以得到强度很强和单色性很好的衍射光。本文运用 X 射线衍射的运动学理论,即从电子对 X 射线的散射(不考虑多重散射与吸收)出发,研究多层膜光栅的软 X 射线衍射特性。

2 多层膜光栅的衍射强度

2.1 多层膜光栅的物理模型

多层膜光栅是一种具有特殊结构的光栅,一方面具有普通光栅的周期结构,另一方面,在与上述光栅平面垂直的方向,又同时具有由不同材料交替形成的周期性多层膜结构。如图 1 所示。图中,水平方向上,光栅周期为 d,反射面宽度为 a;竖直方向上,多层膜周期为 D,包括 A、B 组分各一层,层厚分别为 D_1,D_2;A、B 组分是电子密度相差较大的材料,电子密度分别为 ρ_1、ρ_2。

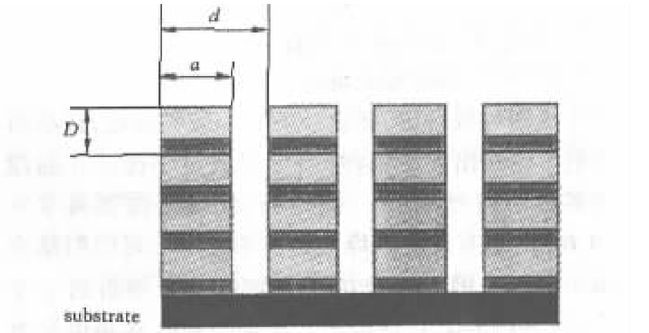

Fig. 1 Scheme of a multilayer-grating's structure

多层膜光栅可看作一个电子密度二维周期分布的体系。可运用 X 射线衍射运动学理论,研究它的软 X 射线衍射特性。

2.2 一个单元的散射波

膜内每一个由 A、B 组分构成的周期为一个散射单元,如图 2 所示。

设入射的 X 射线为单色平面波,掠入射角为 θ_0,散射角为 θ。根据电动力学理论,一个电子受入射平面波激发而产生的散射波振幅为

$$E_e = \frac{e^2 E_0}{4\pi\varepsilon_0 mc^2 r}\left(\frac{1+\cos^2\varphi}{2}\right)^{1/2} = \frac{r_e}{r}E_0\left(\frac{1+\cos^2\varphi}{2}\right)^{1/2},$$

其中,E_0 为入射波的振幅,φ 为散射波的偏转角,

---
* 国家自然科学基金(19574044)资助课题,中日科技合作项目 j9821。
收稿日期:2000-03-06;收到修改稿日期:2000-06-02

$\varphi = \theta_0 + \theta$，$r_e$ 为电子经典半径。

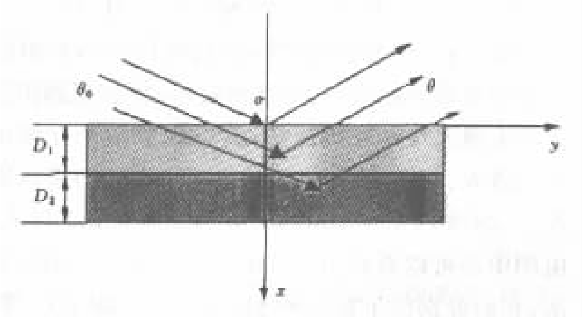

Fig. 2　Scattering waves from one unit

以散射单元上表面中心为原点，取定直角坐标系。在空间任一点 P，处于 $\boldsymbol{r}(x,y)$ 的电子的散射光与原点电子的散射光的相位差为

$$\delta = (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r} = -kx(\sin\theta_0 + \sin\theta) - ky(\cos\theta_0 - \cos\theta),$$

其中 $\boldsymbol{k}_0$、$\boldsymbol{k}$ 分别为入射光和散射光的波矢。可得到整个单元发出的次波在 P 点的复振幅为

$$E_P = \int_{-a/2}^{a/2} E_e e^{iky(\cos\theta_0 - \cos\theta)}\,dy\left[\int_0^{D_1}\rho_1 e^{ikx(\sin\theta_0+\sin\theta)}\,dx + \int_{D_1}^{D}\rho_2 e^{ikx(\sin\theta_0+\sin\theta)}\,dx\right] = aDE_e\omega\frac{\sin u}{u}, \quad (1)$$

式中，

$$u = (ka/2)(\cos\theta_0 - \cos\theta),$$
$$\beta = (kD/2)(\sin\theta_0 + \sin\theta),$$
$$\eta_1 = D_1/D, \qquad \eta_2 = D_2/D,$$
$$\omega = e^{i\eta_1\beta}\frac{\rho_1\sin\eta_1\beta + \rho_2 e^{i\beta}\sin\eta_2\beta}{\beta}.$$

2.3　多层膜光栅的衍射

对各个散射单元编号，以 (l,p) 表示，l 为列序数，p 为行序数，从左上角开始，起始为 (0,0)。

(0,0) 单元的散射波在 P 点的复振幅为 $E_{00} = E_P = aDE_e\omega(\sin u/u)$，$(l,p)$ 单元的散射波复振幅为 $E_{lp} = \exp(-i\delta_{lp})E_{00}$，而 $\delta_{lp} = -kld(\cos\theta_0 + \cos\theta) - kpD(\sin\theta_0 - \sin\theta)$ 为 (l,p) 单元的散射波与 (0,0) 单元散射波的相位差。

各个单元的散射波叠加，即可得到入射光多层膜光栅衍射后的复振幅为

$$E = \sum_{l=0}^{N-1}\sum_{p=0}^{M-1}E_{lp} = \sum_{lp}E_{00}e^{-i\delta_{lp}} = aDE_0 e^{-i[(N-1)\alpha+(M-1)\beta]}\frac{r_e}{r}\left[\frac{1+\cos^2(\theta_0+\theta)}{2}\right]^{1/2}\times \omega\frac{\sin u}{u}\frac{\sin N\alpha}{\sin\alpha}\frac{\sin M\beta}{\sin\beta}, \quad (2)$$

式中，$\alpha = (kd/2)(\cos\theta_0 - \cos\theta)$，$N$、$M$ 分别为光栅和多层膜的有效周期数。

衍射光强度分布为

$$I = I_0P(\theta)\omega^2\left(\frac{\sin u}{u}\right)^2\left(\frac{\sin N\alpha}{\sin\alpha}\right)^2\left(\frac{\sin M\beta}{\sin\beta}\right)^2 = I_0P(\theta)\omega^2U^2(\theta)N^2(\theta)M^2(\theta), \quad (3)$$

式中，$\omega^2 = (\rho_1^2\sin^2\eta_1\beta + 2\rho_1\rho_2\sin\eta_1\beta\sin\eta_2\beta\cos2\beta + \rho_2^2\sin^2\eta_2\beta)/\beta^2$，为多层膜单元的衍射因子；$P(\theta) = [1+\cos^2(\theta_0+\theta)]/2$，为偏振因子；$U(\theta) = \sin u/u$，为光栅的单元衍射因子；$N(\theta) = \sin(N\alpha)/\sin\alpha$ 为光栅的 N 元干涉因子；$M(\theta) = \sin(M\beta)/\sin\beta$ 为多层膜的 M 元干涉因子；$I_0 = aDE_0(r_e/r)$。

上述几种因素独立起作用，最后得到的振幅是它们的乘积。由于 $MD \ll Nd$，即多层膜因子的频率较低，故可以认为是多层膜的衍射对光栅的衍射起调制作用。

3　多层膜光栅衍射特性

3.1　衍射极大条件

同普通光栅相比，多层膜光栅的衍射还要受到多层膜干涉因子的限制，即只有当光栅因子和多层膜因子同时取得极大值时，才能观察到衍射。取极大值的条件为

$$d(\cos\theta_0 - \cos\theta) = j\lambda, \quad (4)$$
$$D(\sin\theta_0 - \sin\theta) = m\lambda. \quad (5)$$

上两式联立，消去 $\sin\theta$，有

$$D\left\{\sin\theta_0 + \left[1 - \left(\frac{\lambda}{d}j - \cos\theta_0\right)^2\right]^{1/2}\right\} = m\lambda, \quad (6)$$

即在入射角为 θ_0、入射光波长为 λ、多层膜光栅的参数 d、D 满足上式时，则出现 (j,m) 级衍射。(6) 式为多层膜光栅衍射的基本关系方程。

从 (4) 式、(5) 式也可以得出，出现 (j,m) 级衍射要求的入射角为：

$$\theta_0 = \arcsin\left\{\frac{\lambda}{2}\left[\left(\frac{m}{D}\right)^2 + \left(\frac{j}{d}\right)^2\right]^{1/2}\right\} - \arctan\left(\frac{jD}{md}\right). \quad (7)$$

(j,m) 级的衍射角为

$$\theta = \arcsin\left\{\frac{\lambda}{2}\left[\left(\frac{m}{D}\right)^2 + \left(\frac{j}{d}\right)^2\right]^{1/2}\right\} + \arctan\left(\frac{jD}{md}\right). \quad (8)$$

由以上推导可知，多层膜光栅的衍射不同于周期性多层膜。多层膜的布拉格衍射条件为 $2D\sin\theta = m\lambda$，

要求入射角 θ_0 与衍射角 θ 相等,为布拉格角 θ_B。而对于多层膜光栅,由于同时受到光栅衍射和多层膜衍射条件的限制,除 $j=0$ 之外,θ 与 θ_0 都不等于 θ_B。导致这一结果的物理本质是,反射定律只有在反射面是无限大时才严格成立的。但是对于多层膜光栅,由于每一个反射面的完整性被破坏,故布拉格定律不能直接应用。另外,多层膜布拉格衍射的强度与A、B组分电子密度之差($\rho_1-\rho_2$)成正比。在衍射峰位处,多层膜衍射的极大条件满足时(即 $\beta=m\pi$),有 $\omega\propto(\rho_1-\rho_2)$。

多层膜光栅的衍射也不同于普通光栅的衍射,即并不是任一角度的入射光都能出现衍射极大,而是只有入射角满足特定条件时,衍射极大值才出现,而且通常只有一个衍射主极大(j,m)出现,并不象光栅那样可以得到除缺级之外的所有衍射级。其原因在于,光栅衍射中,只有单缝衍射因子 $U(\theta)$ 对缝间干涉因子 $N(\theta)$ 进行调制;而对于多层膜光栅,单缝衍射因子 $U(\theta)$ 和多层膜衍射因子 $M(\theta)$ 同时对 $N(\theta)$ 进行调制,由于 $M(\theta)$ 比 $U(\theta)$ 尖锐得多,所以起主导作用;而且,与 $U(\theta)$ 不同的是,$M(\theta)$ 的中心随波长而改变。

例如,对 $d=0.5\ \mu m$,$D=10\ nm$ 的多层膜光栅,通常取 $m=1$。当入射软X光的波长 $\lambda=10\ nm$ 时,对 $j=1$,可得 $\theta_0=28.86°$,$\theta=31.15°$

由于软X射线的高吸收性,实际参与散射的多层膜的有效周期数(即 M)比较小,故多层膜衍射因子的主极大是一较宽的峰,其中包括几个光栅衍射的主极大,如图3所示。在上述情况下,如果入射角 $\theta_0=28.86°$($\lambda=10\ nm$),除了 $j=1$ 的主极大外,由图中还可以看到 $j=2,0,-1,-2\cdots\cdots$ 的衍射级次,它们分别位于 $\theta_{j=2}=33.30°$,$\theta_j=28.86°$,等等。但与 $j=1$ 级相比,它们的强度弱得多。同时可以看到,相邻衍射级之间有较大的角距离,说明衍射光有良好的空间分辨特性。

由(7)式及(8)式可见,对 $j=0$ 级的衍射,$\theta=\theta_0=\theta_B$,即为多层膜的布拉格衍射;但该级衍射无色散。对 $j=1$ 级,由于 j 较小,θ_0 与 θ 都在 θ_B 附近,这给确定入射和衍射方向带来极大的便利。选用 $j=1$ 级的光栅衍射谱线时,其位置与 $M(\theta)$ 的中央极大位置重合,故其强度比 $j=0$ 和 $j=2$ 至少大一个量级,避免了普通光栅的大部分能量集中在无色散的 $j=0$ 级的缺点,使衍射光能量主要集中在有色散的 $j=1$ 级。

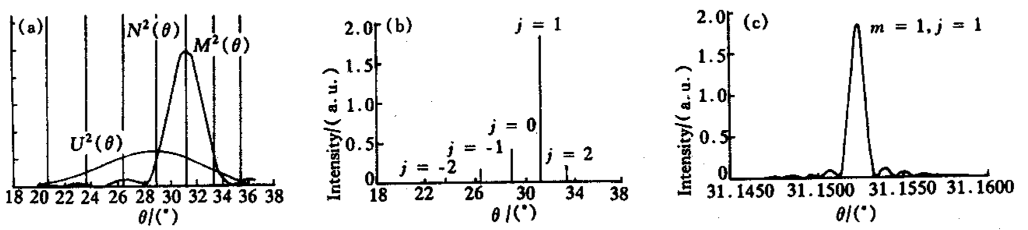

Fig.3 (a) $N(\theta)$ modulated by $M(\theta)$ and $U(\theta)$ (curves was not plotted pro rata, maximun of U, M and N are 1, 400 and 4×10^6 respectively); (b) Intensity of diffraction waves where $a=125$ nm, $d=500$ nm, $D=10$ nm, $\lambda=10$ nm, incident angle $\theta_0=28.86°$, periods of grating and multilayers are 2000 and 20 respectively; (c) Intensity of diffraction wave with order (1,1)

3.2 衍射光谱线的角宽度

光栅衍射角宽度为

$$\Delta\theta_j=\frac{\lambda}{Nd\sin\theta}=\frac{\lambda}{L\sin\theta},$$

多层膜衍射角宽度为

$$\Delta\theta_m=\frac{\lambda}{MD\cos\theta}=\frac{\lambda}{H\cos\theta}.$$

式中 L 为光栅宽度,H 为多层膜厚度。值得注意的是,实验上观察到的是较小的角宽度。由于 $L\gg H$,故多层膜光栅衍射的角宽度实际由光栅的特性决定的,为 $\Delta\theta=\lambda/(L\sin\theta)$,有比多层膜衍射尖锐得多的光谱。

3.3 色散关系及色分辨率

在可见光领域,色散通常指一束平行复色光经介质折射或光栅衍射后在空间其角度按波长展开;在X射线区域,通常指X射线经晶体布拉格衍射时,其波长随入射角的变化而变化。在软X射线多层膜光栅的衍射中,这两种色散关系都存在。

由于多层膜对软X射线的吸收,多层膜的有效层数 M 限制了衍射光的单色性,通常都有一定的带宽 $\Delta\lambda$,当衍射光的中心波长为 λ 时,(j,m)级衍射极大出现时的入射角由(7)式决定,θ_0 随 λ 变化。由(6)式可得,

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}\theta_0}=\frac{\sin(\theta_0+\theta)}{(m/D)\sin\theta-(j/d)\cos\theta}. \tag{9}$$

上式在 $j=0$ 时，有 $\theta_0=\theta$，即可得到由布拉格定律确定的色散关系 $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}\lambda=m/(2D\cos\theta)$。

当 j 不是很大时，由于 $j(D/\lambda)\ll 1$，(9) 式可简化为

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}\theta_0}=\frac{D\sin(\theta_0+\theta)}{m\sin\theta}, \tag{10}$$

当 $j=1$、2 等不大的值时，θ_0 与 θ 差别不大，故(10)式与多层膜的色散关系较接近。

对一固定的掠入射角 θ_0，如入射光是以 λ 为中心的连续谱，则对 (m,j) 级衍射，中心波长由(6) 式决定，带宽由多层膜决定，其色散关系可以用光栅的色散关系来描述，即

$$\left(\frac{\partial\lambda}{\partial\theta}\right)_{\theta_0}=\frac{d\sin\theta}{j}. \tag{11}$$

由上述讨论可见，多层膜光栅的色散是上述两种色散关系的结合。入射波带的中心波长决定了掠入射角及衍射角，而衍射光束中，θ 将按 λ 展开。

多层膜光栅可分辨最小波长间隔为 $\Delta\lambda=\lambda/(jN)$，分辨本领为 $A=(\lambda/\Delta\lambda)=jN$。

结论　1) 与多层膜和光栅相比，多层膜光栅的衍射有新的特性，除零级衍射由多层膜布拉格衍射决定外，它不服从多层膜的布拉格衍射，而入射角、衍射角都偏离布拉格角 θ_B；它与光栅也不同，其衍射能量可被集中到某一级上(可以是非零级)。

2) 多层膜光栅同时存在两种色散关系，一波带入射到多层膜光栅上时，衍射束中的中心波长随着入射角(及衍射角的中心位置) 的变化而改变，同时衍射角 θ 按波长展开。

3) 多层膜光栅衍射的角宽度和分辨本领由光栅的参数决定。

4) 由于可以将衍射能量集中在某一级上，而且多层膜具有强的反射率，故多层膜光栅的衍射效率很高。

参 考 文 献

[1] 吴自勤. 软 X 射线光学和周期性多层膜. 物理，1991，**20**(11) ：655～659

[2] Dhez P，Erko A，Khzmalian E *et al*.. Kirkpatrick-Baez microscope based on a Bragg-Fresnel X-ray multilayer focusing system. *Appl. Opt.*，1992，**31**(31) ：6622～6667

[3] Barbee T W，Jr.. Combined microstructure X-ray optics (invited). *Rev. Sci. Instrum.*，1989，**60**(7) ：1588～1595

[4] Sammar A，Andre J M. Integral calculation method of efficiencies of laminar stratified gratings. *Opt. Commun.*，1998，**149**(4) ：348～354

Diffraction Properties of Multilayer-Gratings in Soft X-Ray Region

Cui Hongbin　Liu Wenhan

(*Lab of Structure Analysis and Department of Physics*，*University of Science and Technology of China*，*Hefei* 230026)

(Received 6 March 2000；revised 2 June 2000)

Abstract：　The main diffraction properties of a soft X-ray optical component——multilayer-gratings are deduced and discussed in detail on the basis of X-ray kinematics. Results show that main energy of diffraction light can be concentrated in one order and resolving power and reflection of multilayer-grating are higher. There is essential difference between the dispersive properties of multilayer-gratings and multilayers.

Key words：　multilayer；multilayer-grating；soft X-ray