

文章编号: 0253-2239(2005)10-1433-3

X 射线 W/B₄C 宽带多层膜的优化设计和制备

姚志华 金春水 杨 雄 张立超 金伟华 曹健林

(中国科学院长春光学精密机械与物理研究所应用光学国家重点实验室, 长春 130033)

摘要: 介绍了 X 射线宽带多层膜材料 W 和 B₄C 的选定方法, 依据伯宁(BERNING)公式确定出了在 0.154 nm 处 X 射线宽带多层膜的最佳膜对数。引入适当的评价函数, 利用具有全局寻优特性且效率较高的遗传算法, 在波长 0.154 nm 处优化设计出了掠入射角(θ)0.5°~0.9°范围内反射率值达到 40% 的宽角度宽带多层膜。宽带多层膜反射镜采用磁控溅射方法制备, 并用 X 射线衍射仪对样品进行了检测, 结果表明在掠入射角(2θ)1.0°~1.8°之间的相对反射率光谱曲线比较平坦。

关键词: X 射线光学; 宽带多层膜; 评价函数; 遗传算法; 磁控溅射

中图分类号: O484.4 文献标识码: A

Optimized Design and Fabrication of X-Ray W/B₄C Broadband Multilayer Film

Yao Zhihua Jin Chunshui Yang Xiong Zhang Lichao Jin Weihua Cao Jianlin

(State key Laboratory of Applied Optics, Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics, The Chinese Academy of Sciences, Changchun 130033)

Abstract: A method of selecting and confirming materials with W and B₄C for X-ray broadband multilayer film is presented. The minimum bilayers number of X-ray broadband multilayer film has been confirmed by using BERNING formula at the wavelength 0.154 nm. After introducing the suitable merit function, a broad angular broadband W/B₄C multilayer film has been designed successfully by using genetic algorithm. The flat reflectance of broadband multilayer film is 40% in the wavelength 0.154 nm at the grazing incidence angel (θ) of 0.5°~0.9°. The multilayer film has been fabricated on the magnetron sputtering system. A flat relative reflectance spectrum curve has been measured at the grazing incidence angle (2θ) of 1.0°~1.8° by X-ray diffractometer.

Key word: X-ray optics; broadband multilayer; merit function; genetic algorithms; magnetron sputtering

1 引 言

第三代高能同步辐射源为高能 X 射线衍射材料在微型结构的研究(复合材料的界面结构和高压下的材料特性)和医学成像中的应用提供了新的科学机遇。同时,使用宽带多层膜的 X 射线天文望远镜也在太空观测方面有了长足的发展,可以通过布拉格反射来反射大于全反射临界角入射的 X 射线,使天文望远镜小型化^[1]。X 射线宽带多层膜反射镜的衡量指标主要有:1) 反射率曲线在所要求的波段或角度内尽可能的平坦;2) 反射率曲线的积分反射率尽可能高;3) 所用到的膜层数尽可能的少。Mezei 和 Joensen^[2]从中子光学理论出发,推导出各自的基

于幂指数函数的 X 射线宽带多层膜的设计方法。由于该方法没有考虑 X 射线材料的吸收性,反射率存在着剧烈波动。Yamashita^[3]提出了分堆栈法,从膜层厚度分布的角度来看,也可以把它当成是一种近似的幂指数函数设计方法。国内有人提出了用单纯型法优化设计 X 射线宽带多层膜^[4~6],但是不是一种全局性优化算法,用这种方法进行优化设计时,对初始膜系的要求比较严格,否则很容易使优化结果陷入局部最小值的范围内。遗传算法是一种能够满足全局寻优且效率较高的优化方法。本文采用该算法进行 X 射线宽带多层膜的优化设计。

作者简介: 姚志华(1980~),男,浙江上虞人,中国科学院长春光学精密机械与物理研究所硕士研究生,主要从事薄膜技术研究。E-mail: yozhiwa@yahoo.com.cn

收稿日期: 2004-10-29; 收到修改稿日期: 2005-03-01

2 材料的选择和最佳膜层数的确定

Yamamoto^[7]确立了一种比较实用的材料的选择方法。先求出材料相对真空的非涅耳反射率系数,在复平面上用不同的点表示。选择标准是,在复平面内,两种材料相对真空的非涅耳反射率系数应距离实轴尽可能的近,而且相互之间的距离尽可能的远。比较理想的膜层材料对的非涅耳反射率的虚部尽可能

的小而非涅耳系数的差值尽可能的大。图 1 是 X 射线波段一些材料的非涅耳反射率系数分布图。其中图 1(a)是吸收层材料,图 1(b)是间隔层材料。Pt、Au 的价格过于昂贵,Be 有毒性。W/C 和 W/B₄C 是在 0.154 nm 处很理想的多层膜材料对。在相同工艺条件下,W/B₄C 多层膜的界面光滑度比较理想^[8]并且 B₄C 和 W 不容易发生化学反应^[9]。

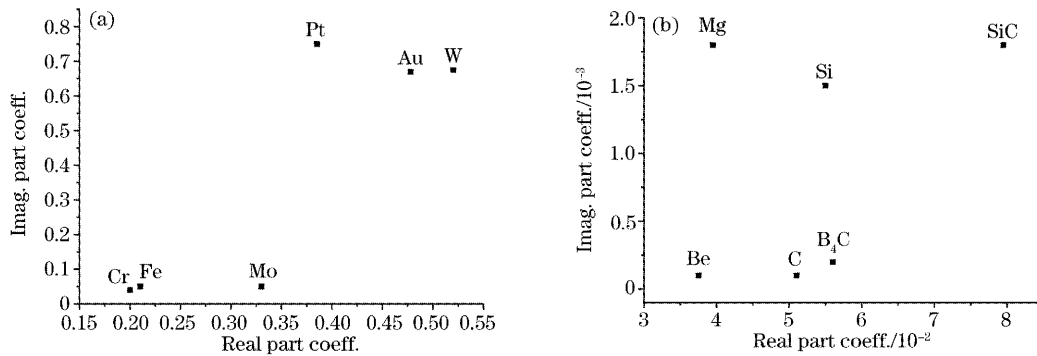


图 1 在 0.154 nm 处的多种材料在真空中的非涅耳反射率系数。(a)吸收材料,(b)间隔层材料

Fig. 1 Fresnel reflective coefficient of several materials at 0.154 nm. (a) Absorber materials, (b) spacer materials

在 X 射线波段,所有材料都具有吸收性,限制了入射光的最深入射深度。当多层膜的膜对数达到一定数量的时候,反射率已经没有明显的提高了,即反射率饱和。而且由于镀膜工艺的限制,也不能无限制地增加多层膜的层数。在设计中,必须确定多层膜的最佳膜对数。由伯宁公式^[7]计算可以发现,波长 0.154 nm 处在掠入射角 0.5°~0.9°之间,X 射线 W/B₄C 周期多层膜反射镜在膜对数达到 16 时,反射率趋向饱和。宽角度 X 射线宽带多层膜优化设计时最佳膜对数可以用周期多层膜的饱和层数做参照来确定^[3],所以最佳膜对数为 16 对。

3 评价函数的确立和遗传算法优化设计

多层膜反射率的计算方法有递推法和矩阵法两种,本文用基于菲涅耳公式的递推法。设计 X 射线波段宽带多层膜时,可以用平坦型函数来进行评价。要求在指定的波段内反射率尽可能地接近期望的理想反射率——目标反射率 R_0 ,评价函数为

$$F = \frac{1}{E_{\max} - E_{\min}} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} (R_0 - R)^2 dE \approx \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (R_0 - R)^2, \quad (1)$$

式中 E_{\max} 和 E_{\min} 分别为所要优化的宽波长宽带多层膜能量的上限和下限, m 为波节点数目。X 射线宽

带多层膜的优化是用遗传算法执行的。为了防止算法的早熟收敛,群体规模取值不能太小。如果群体规模过大又要影响到算法的效率。选择群体规模为 30。选择、交叉、变异分别采用了排序选择、算术交叉和非均匀变异。选择最大终止代数为 25000,并用遗传算法的主命令来调用评价函数。选定入射波长为 0.154 nm,在角度范围 0.5°~0.9°内选择目标反射率 R_0 为 0.4,当优化运算完成的时候,适应度函数的值已经很小(0.001433)。最终得到的反射率曲线如图 2 所示。从图 2 可以看出在掠入射角(θ)0.5°~0.9°之间反射率曲线平坦,符合设计要求。

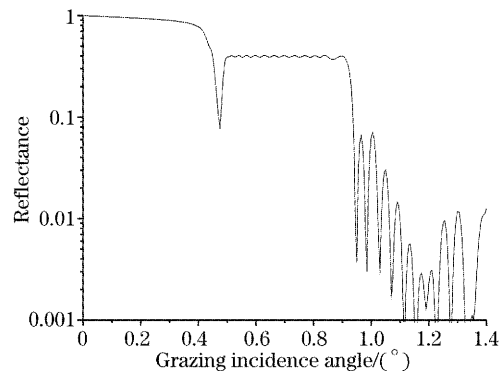


图 2 遗传算法优化得到的宽角度 X 射线宽带多层膜反射率曲线

Fig. 2 Designed broad angular X-ray broadband multilayer film reflectance curve optimized by genetic algorithm

4 W/B₄C 宽带多层膜的制备和检测

宽带多层膜用磁控溅射镀膜制备。镀膜工艺参数为:W 直流溅射,功率为 50W,B₄C 射频溅射,功率为 100 W。工作真空度为 7.8×10^{-2} Pa,氩气流量为 $8.5 \text{ cm}^3/\text{s}$ 。基片选取表面粗糙度为 0.5 nm 的 Si 片。在确定两个靶材和基片的距离后,我们可以通过定标得到镀膜溅射速率: $V_W = 0.076 \text{ nm/s}$, $V_{B_4C} = 0.0266 \text{ nm/s}$ 。

用理学公司的 X 射线小角衍射仪检测性能。在 Cu 的 K α 线处(0.154 nm),在掠入射角(2θ) $0.75^\circ \sim 2.5^\circ$ 之间测得了一条如图 3 所示的相对反射率光谱曲线。其中 CPS 表示每秒计数,从图 3 中可以看出在掠入射角(2θ) $1.0^\circ \sim 1.8^\circ$ 之间相对反射率光谱曲线比较平坦,基本上符合优化设计要求。但是由于膜层间粗糙度的实际值和理论计算值之间存在着一定的差异,因此所测得的相对反射率光谱曲线在所优化的区域内围绕中心值存在微小的波动。要消除这些影响,必须对目前的 X 射线衍射仪系统进行一定的升级改造。

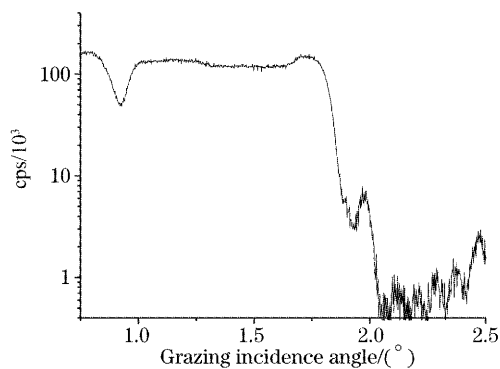


图 3 W/B₄C 宽角度宽带多层膜相对反射率光谱曲线示意图

Fig. 3 W/B₄C Broad angular X-ray broadband multilayer film relative reflectance spectrum curve

5 结 论

由于材料在 X 射线波段存在吸收,所以在选择多层膜材料的时候,必须考虑到反射率的饱和性。用 Yamamoto 设计的方法,可以比较准确地找到最佳的膜对材料。以遗传算法为代表的优化算法,可以避免局部最值出现的干扰,能够很好地用于 X 射线多层膜优化设计中。利用遗传算法设计出的 W/B₄C 宽带多层膜在 0.154 nm 波长处,在掠入射角(θ) $0.5^\circ \sim 0.9^\circ$ 之间不仅反射率达到 40%,而且所测得的相对反射率光谱曲线比较平坦,基本可以满足 X 射线天文望远系统中对于高入射能量的要求。

参 考 文 献

- Igor V. Kozhevnikov, Inna N. Bukreeva, Eric Ziegler. Design of X-ray supermirrors [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2001, **460**(2,3): 424~443
- K. D. Joensen, P. Gorenstein, F. E. Christensen. Multilayer supermirrors: Broadband reflection coatings for the 15 to 100 keV range[C]. *Proc. SPIE*, 1994, **2253**: 299~308
- Koujun Yamashita, Peter J. Serlemitsos, Jack Tueller *et al.*. Supermirror hard X-ray telescope[J]. *Appl. Opt.*, 1998, **37**(34): 8067~8073
- Wang Fengli, Zhang Zhong, Wu Wenjuan *et al.*. Design and fabrication of the X-ray supermirror [J]. *Optical Instruments*, 2004, **26**(2): 136~142 (in Chinese)
王凤丽,张 众,吴文娟 等. X 射线超反射镜的设计与制备[J]. *光学仪器*, 2004, **26**(2): 136~142
- Shen Weidong, Liu Xu, Ye Hui *et al.*. A new method for determination of the optical constants and thickness of thin film [J]. *Acta Optica Sinica*, 2004, **24**(7): 886~889 (in Chinese)
沈伟东,刘 旭,叶 辉 等. 确定薄膜厚度和光学常数的一种新方法[J]. *光学学报*, 2004, **24**(7): 886~889
- Yingbin Liu, Zhigao Huang, Youmei Du. Numerical calculation of Kerr spectra for Co/Pt magnetic multilayered films [J]. *Chin. Opt. Lett.*, 2003, **1**(1): 491~493
- Masaki Yamamoto, Takeshi Namioka. Layer-by-layer design method for soft-X-ray multilayer [J]. *Appl. Opt.*, 1992, **31**(10): 1622~1630
- Eberhard Spiller. *Soft X-Ray Optics* [M]. Washington: Bellingham, SPIE Optical Engineering Press, 1994. 175~179
- A. E. Yakshin, I. I. Khodos, I. M. Zhelezniak *et al.*. Fabrication, structure and reflectivity of W/C and W/B₄C multilayers for hard X-ray [J]. *Opt. Commun.*, 1995, **118**(1,2): 133~142