

# 周期性梯度折射率多层膜的软 X 射线反射率\*

秦俊岭<sup>1,2</sup> 易 葵<sup>1</sup> 邵建达<sup>1</sup> 范正修<sup>1</sup>

(1 中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

(2 中国科学院研究生院, 北京 100039)

**摘 要** 由于界面互扩散的存在, 实际的超薄多层膜很难具有清晰的界面结构. 假设超薄多层膜为具有周期性梯度折射率的多层膜结构, 用直线模型和余弦模型模拟了周期性梯度折射率多层膜的软 X 射线反射率. 结果证明, 折射率余弦渐变的多层膜虽然不具有清晰的界面, 但它同样具有很高的反射率.

**关键词** 余弦模型; 梯度折射率; 多层膜; 软 X 射线反射率

**中图分类号** O484.5 **文献标识码** A

## 0 引言

为了满足软 X 射线显微术<sup>[1~3]</sup>、X 射线天文望远镜<sup>[4]</sup>和 X 射线激光高温等离子体诊断<sup>[5,6]</sup>等技术的发展需要, 软 X 射线多层膜的研究正向更短波长发展. 较短波长的软 X 射线多层膜, 不仅要求膜层超薄, 一般仅几个纳米, 而且要求界面光滑清晰, 粗糙度控制在零点几个纳米. 目前, 人们在高准确度膜厚控制上已经基本达到了制备的要求, 但是界面的扩散问题仍待解决. 由于界面扩散, 构成多层膜的间隔层材料和吸收层材料会相互混合, 甚至发生化学反应生成化合物, 破坏了多层膜清晰的界面, 降低了多层膜的反射率. 正是因为上述原因, 很多理论上具有较高软 X 射线反射率的超薄多层膜, 在制备上难以实现. 然而, 是否不具有清晰界面的多层膜就一定没有较高的反射率呢? 本文基于实际多层膜与理想多层膜结构上的差别, 提出了两种不具有清晰界面的周期性梯度折射率多层膜模型, 模拟了多层膜的反射率, 并与具有清晰界面的理想多层膜的反射率模拟结果进行了对比.

## 1 模型

理想的多层膜界面光滑, 没有界面扩散, 构成多层膜的每个膜层折射率均匀. 而在膜层超薄时, 实际多层膜不具有清晰的界面. 假设界面处两种材料相互扩散并形成这样一种理想结构, 即在一个周期长度内, 材料的折射率按某一种梯度关系由  $n_2$  渐变为  $n_1$ , 再由  $n_1$  渐变为  $n_2$ . 这种结构的多层膜称为周期性梯度折射率多层膜. 本文假设这种折射率梯度变化的关系是直线型和余弦型, 如图 1.

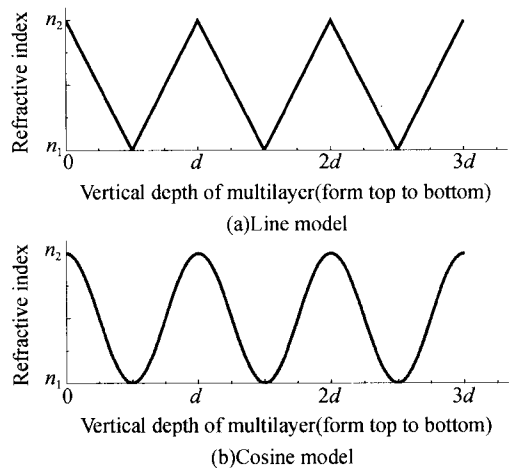


图 1 周期性梯度折射率多层膜模型  
Fig. 1 Models of periodic graded-index multilayers

图 1(a)代表折射率直线变化的模型(简称直线模型), 在一个周期  $d$  内折射率的变化服从以下关系

$$\begin{cases} y = (n_1 - n_2) \frac{2x}{d} + n_2 & (0 \leq x \leq \frac{d}{2}) \\ y = (n_1 - n_2) \frac{2(d-x)}{d} + n_2 & (\frac{d}{2} \leq x \leq d) \end{cases} \quad (1)$$

图 1(b)代表折射率余弦变化的模型(简称余弦模型), 在一个周期  $d$  内折射率的变化服从以下关系

$$y = (1 + \cos(\frac{2\pi x}{d})) \frac{(n_2 - n_1)}{2} + n_1 \quad (0 \leq x \leq d) \quad (2)$$

以上两种多层膜反射率的模拟计算采用了一种近似的方法, 用一个均匀膜堆代替一层非均匀膜, 然后按多层均匀膜严格的计算方法来近似地确定非均匀膜的光学特性<sup>[7]</sup>. 将每周期分为 90 层, 每层的折射率由式(1)和式(2)近似算出, 用 Parratt 的回归方法<sup>[8]</sup>计算多层膜的反射率. 理想多层膜的反射率直接由 Parratt 的回归方法计算. 计算中均采用 Henke 光学常量<sup>[9]</sup>.

\* 国家高技术研究发展计划(863-804-7)资助项目  
Tel: 021-69918496 Email: qinjl@mail.siom.ac.cn  
收稿日期: 2005-05-10

## 2 模拟结果与讨论

一般而言,对应的波长越短,多层膜的周期厚度也越薄.为了研究直线和余弦模型对不同周期厚度的适用性,本文分别设计了 Si/Mo 和 C/W 多层膜,两种膜对应的波长差别较大,但周期数均为 30,基底采用硅片.

Si/Mo 多层膜的设计周期为 7 nm,吸收层与周期的比值为 0.5.由本实验室设计的软件计算出 10° 正入射时理想多层膜的波长与反射率关系曲线如图 2.从图上可以看到,中心波长 13.5 nm 时,理想多层膜的最高反射率为 70%.

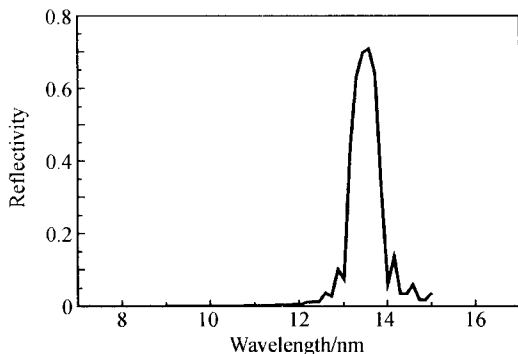


图 2 Si/Mo 多层膜的理论反射率  
Fig. 2 Theoretical reflectivity of Si/Mo Multilayers

为了比较理想多层膜的反射特性与本文所述的直线和余弦模型的差别,图 3 分别模拟了理想多层膜、直线和余弦模型在波长 13.5 nm 时的角度反射率曲线.发现直线和余弦模型的反射方式与理想多层膜的差别很大,理想多层膜的各级衍射峰比直线和余弦模型的要强,而余弦模型的衍射峰又比直线模型的强.另外,与理想多层膜模型相比,各模型衍射峰的峰位也有不同,随着衍射峰级次的增加,余弦和直线模型的峰位依次滞后,直线模型的滞后非常明显.虽然各模型的角度反射率曲线存在较大差异,但在设计角度,即正入射 10°,各模型的反射率均在此角度达到最大值,且余弦模型的反射率接近

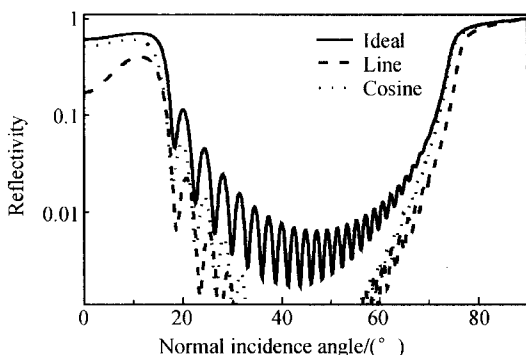


图 3 不同模型 Si/Mo 多层膜的反射率  
Fig. 3 Reflectivity of Si/Mo Multilayers with different models

理想多层膜,是理想多层膜理论值的 85%.

C/W 多层膜的设计周期为 3 nm,吸收层与周期比为 0.5,经计算,正入射时理想多层膜的波长与反射率关系曲线如图 4.从图中可以看到,中心波长 5.95 nm 时,该理想多层膜具有最高正入射反射率为 7.9%.

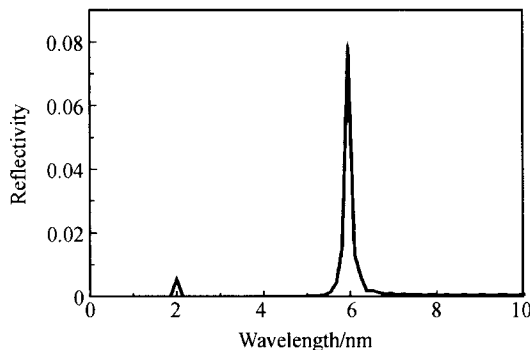


图 4 C/W 多层膜的理论反射率  
Fig. 4 Theoretical reflectivity of C/W Multilayers

图 5 是理想多层膜、直线和余弦模型在波长 5.95nm 时的角度反射率曲线.很明显,余弦模型与理想多层膜的反射率曲线极其相近,而直线模型的角度反射率曲线却在正入射 1~50° 范围内几乎为零.余弦模型的零度正入射反射率是理想多层膜设计反射率的 51%左右.

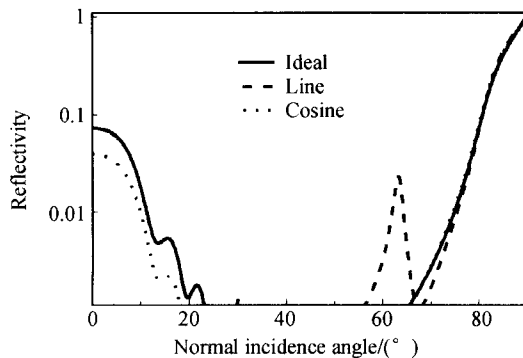


图 5 不同模型 C/W 多层膜的反射率  
Fig. 5 Reflectivity of C/W Multilayers with different models

通过比较以上结果,余弦模型的模拟反射率比直线模型的高.在较短波长,直线模型的角度反射率曲线明显不同于其它两种模型的模拟曲线.

多层膜的周期较厚时,界面容易做得平滑清晰.例如 Mo/Si 多层膜在波长 13 nm 左右已经达到实用化,尽管它的界面还存在着过渡层,但过渡层厚度与周期厚度相比较小,对反射率的影响也较小.目前,一些研究机构研制的 Mo/Si 多层膜的反射率已经非常接近理想多层膜的理论值,一般是理论值的 85%~90%左右,这和余弦模型的模拟结果很近似.

在对应波长较短时,多层膜的周期厚度非常薄,由于材料的扩散,扩散层的厚度几乎等于多层膜的

周期厚度,这完全破坏了理想多层膜的周期结构.在水窗波段,大部分多层膜很难形成理想的尖锐界面,实际反射率一般小于理论值的 50%<sup>[10]</sup>.从对 C/W 多层膜的反射率模拟来看,余弦模型所得的反射率结果恰是理论值的 51%,这暗示着余弦模型更接近实际反射率,更符合实际多层膜的结构,这还有待于进一步试验证明.

另外,余弦模型虽然没有清晰的界面,但是模拟证明:在较短波长范围内,具有余弦型周期性梯度折射率的多层膜对软 X 射线具有较高的反射率,这对软 X 射线多层膜的设计是一种新的观念.对于很难获得理想尖锐界面的水窗波段的多层膜,可以考虑利用材料的相互扩散,由此制备具有余弦模型结构的多层膜,这也许更容易实现些.

本文没有利用优化方法求解余弦和直线模型的极限反射率.可能余弦模型的极限反射率会更接近理想多层膜的反射率,下一步工作将继续研究.

### 3 结论

余弦型的周期性梯度折射率多层膜具有较高的软 x 射线反射率.对于很难生成清晰界面的超薄多层膜,用这种模型设计是很有意义的.

#### 参考文献

- 1 Kirz J, Jacobsen C, Howells M. Soft x-ray microscopes and their biological applications. *Q Rev Biophys*, 1995, **28** (1):33~130
- 2 谢红兰,陈建文,高鸿奕,等.影响软 X 射线层析成像分辨率的若干因素分析. *光子学报*, 2002, **31**(0Z2):55~60

Xie H L, Chen J W, Gao H Y, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2002, **31**(0Z2):55~60

- 3 刘颖,付绍军.软 X 射线位相型波带片的初步研究. *光子学报*, 2002, **31**(0Z2):332~334  
Liu Y, Fu S J. *Acta Photonica Sinica*, 2002, **31**(0Z2):332~334
- 4 Spiller E, Barbee T W, Golub L, *et al.* Results from the recent flight of the IBM/SAO x-ray telescopes. *Proc of SPIE*, 1993, **2011**:391~401
- 5 Salashchenko N N, Platonov Yu Ya, Zuev S Yu. Multilayer x-ray optics for synchrotron radiation. *Nucl Instrum Methods A*, 1995, **359**(1):114~120
- 6 熊先才,钟先信,段绍光,等.软 X 射线分光晶体 KAP 的反射率特性. *光子学报*, 2004, **33**(1):73~75  
Xiong X C, Zhong X X, Duan S G, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2004, **33**(1):73~75
- 7 唐晋发,郑权.应用薄膜光学.上海:上海科学技术出版社,1984.80~81  
Tang J F, Zheng Q. *Applied Optics of Thin Film*. Shanghai: Shanghai Scientific and Technical Publishers, 1984.80~81
- 8 Parratt L G. Surface studies of solids by total reflection of X-Rays. *Phys Rev*, 1954, **95**(2):359~369
- 9 Henke B L, Gullikson E M, Davis J C. X-Ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at  $E = 50 - 30,000$  eV,  $Z = 1 - 92$ . *At Data Nucl Data Tables*, 1993, **54**(2):181~342
- 10 吕俊霞,马月英,张俊平,等.工作波长短于 10 nm 的软 X 射线多层膜. *光学精密工程*, 1996, **4**(2):19~24  
Lu J X, Ma Y Y, Zhang J P, *et al.* *Optics and Precision Engineering*, 1996, **4**(2):19~24

## Soft X-Ray Reflectivity of Periodic Graded-index Multilayers

Qin Junling<sup>1,2</sup>, Yi Kui<sup>1</sup>, Shao Jianda<sup>1</sup>, Fan Zhengxiu<sup>1</sup>

1 Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, The Chinese Academy of Science, Shanghai 201800

2 Graduate School of The Chinese Academy of Science, Beijing 100039

Received date:2005-05-10

**Abstract** Actual ultra thin multilayers are difficult to have a clear-cut interface due to interface interdiffusion. It is assumed that ultra thin Multilayers have a periodic graded-index multilayer structure. A line model and a cosine model are used to simulate soft X-ray reflectivity of periodic graded-index multilayers. The simulations show that periodic graded-index multilayers with cosine model have a higher reflectivity. it's significative for design of ultra thin Multilayers.

**Keywords** Cosine model; Graded-index; Multilayer; Soft X-ray reflectivity



**Qin Junling** was born in 1978 in Henan Province, China. He received his M. S. degree in 2004 from School of Materials Science and Engineering, East China University of Science and Technology. Now he is a Ph. D. candidate of the Optical Coating Technology R & D Center, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics (SIOM), Chinese Academy of Sciences (CAS). His current research interests is design and preparation of soft X-ray multilayers for short wave.