

УДК 535.32

АПЕРИОДИЧЕСКИЕ МНОГОСЛОЙНЫЕ ЗЕРКАЛА ДЛЯ СПЕКТРОСКОПИИ В МЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ

Н. Н. Колачевский, А. С. Пирожков, Е. Н. Рагозин

Разработан метод расчета многослойных структур, оптимизированных для получения заданного спектра отражения в мягком рентгеновском диапазоне ($2 \text{ \AA} < \lambda < 300 \text{ \AA}$). Установлено, что среди множества реализаций нерегулярной (апериодической) многослойной структуры существуют такие, которые превосходят регулярную по ширине рабочего диапазона, интегральному коэффициенту отражения и т.п. Найдены структуры с постоянным коэффициентом отражения в интервалах $130 - 190 \text{ \AA}$ (24%) и $130 - 300 \text{ \AA}$ (15%) при нормальном падении излучения, а также структуры с постоянным коэффициентом отражения при углах падения $\theta \approx 41^\circ$ и высокой поляризующей способностью во всем рабочем интервале. Рассчитаны структуры с несколькими изолированными максимумами отражения.

Более 20 лет назад было высказано предложение использовать многослойные структуры для отражения мягкого рентгеновского (МР) излучения ($\lambda \leq 300 \text{ \AA}$) [1, 2]. За это время разработана технология изготовления эффективно отражающих многослойных зеркал (МЗ) (используются магнетронное распыление, электронно-лучевое и импульсное лазерное напыление), а сами МЗ стали неотъемлемой частью лабораторного и астрофизического эксперимента. В диапазоне $30 - 300 \text{ \AA}$ используются МЗ при нормальном и наклонном падении излучения. При малых скользких углах падения МЗ способны эффективно отражать жесткое рентгеновское излучение [3].

Современные МЗ представляют собой наноструктуры из чередующихся слоев двух различных веществ (А/В), нанесенных на плоскую или фигурную подложку с высоким качеством полировки. При нанесении структуры удается добиться постоянства толщины слоев по глубине с точностью порядка 1 \AA . Спектральный контур коэффициента отражения $r(\lambda)$ у такой регулярной структуры имеет вид резонансной кривой с максимумом на длине волны λ_0 , определяемой известным условием Брэгга $m\lambda_0 \approx 2nd \cos \theta$, где $d = d_A + d_B$ обозначает период структуры, n – среднее по периоду значение показателя преломления, θ – отсчитанный от нормали угол падения излучения, m – порядок отражения. Ширина резонансного максимума $\Delta\lambda_{1/2}$ определяется эффективным числом интерферирующих лучей, зависящим от коэффициента поглощения на данной длине волны, а также в некоторой степени отношением толщины одного из слоев (обычно имеют в виду сильно поглощающий материал) к периоду $\gamma = d_A/d$. Число слоев может составлять от нескольких десятков до нескольких сотен, а относительная ширина максимума $\Delta\lambda_{1/2}/\lambda_0$ – от 0.1 в области 300 \AA до 0.01 в области 30 \AA .

Сравнительно недавно было положено начало применению МЗ в дисперсионной спектроскопии для получения спектров лазерной плазмы с высоким спектральным и пространственным разрешением [4] и построения монохроматических спектральных изображений Солнца [5]. В сочетании с диспергирующим элементом (отражательной дифракционной решеткой, большеапертурной, свободно висящей решеткой "на пропускание") фокусирующие МЗ нормального падения позволили создать спектрометры, обладающие одновременно стигматизмом, высоким или сверхвысоким (10^4 и выше) спектральным разрешением и высокой светосилой – совокупностью свойств, ранее присущей лишь приборам видимого и ближнего УФ диапазона. Рабочий диапазон таких спектрометров ограничен полосой резонансного отражения используемых МЗ. Однако существует потребность и в спектрометрах обзорного типа с достаточно широким рабочим диапазоном (например, с $\Delta\lambda/\lambda \sim 0.5 - 1$). Одна из возможностей состоит в использовании фокусирующего МЗ с сильным градиентом периода многослойной структуры по апертуре. Таким путем удалось создать стигматический спектрограф на область $110 - 300 \text{ \AA}$ [6]. К сожалению, здесь удастся применить лишь схему с дифракционной решеткой "на пропускание", не обладающей сверхвысоким разрешением отражательной решетки. Принципиально другой путь состоит в поиске и синтезе многослойных структур, обладающих достаточно широкой полосой отражения. Очевидно, что речь идет о нерегулярных (апериодических) структурах, так как оптимизация периодической структуры исчерпывается варьированием параметра γ и сохраняет резонансный

характер отражения.

В ряде работ [7 – 9] обсуждались возможности аperiodических структур, прежде всего, с точки зрения максимизации интегрального коэффициента отражения. Рассматривалась задача о МЗ, способном отражать МР излучение на двух длинах волн [10]. В работе [3] сообщалось о синтезе МЗ (W/Si), предназначенного для отражения рентгеновского излучения с энергией фотона до 70 кэВ (0.18 \AA) при скользящем угле падения $\theta = 3 \text{ мрад}$. Его период монотонно уменьшался в глубину согласно закону $d_j = a(b+j)^{-c}$, где $c \approx 0.26$ и $b > -1$ (j – номер пары слоев).

Основной целью этой работы был поиск многослойных структур с широкой, насколько это возможно, полосой отражения в МР диапазоне. Более общая постановка задачи заключается в нахождении многослойных структур, обладающих какими-либо привлекательными, наперед заданными характеристиками (например, определенным спектральным контуром коэффициента отражения, высокой поляризующей способностью и т.п.).

Для решения этих задач был разработан вычислительный метод, позволяющий оптимизировать многослойную структуру с точки зрения различных критериев. Установлено, что среди множества возможных реализаций нерегулярной многослойной структуры существуют такие, которые превосходят регулярную по целому ряду параметров – ширине рабочего диапазона, интегральному коэффициенту отражения и коэффициенту отражения в максимуме (последнее заведомо справедливо для молибден-кремниевых МЗ в области $\lambda > 200 \text{ \AA}$). Существуют структуры, обладающие несколькими изолированными пиками отражения, не являющимися различными брэгговскими порядками. Расширение рабочего диапазона сопровождается увеличением интегрального коэффициента отражения и уменьшением коэффициента отражения в максимуме.

Описываемый далее численный метод эффективен при расчете многослойных структур, предназначенных для работы во всем МР диапазоне ($2 - 400 \text{ \AA}$) при различных углах падения излучения. В данной работе мы сконцентрируем внимание на отражающих многослойных структурах на основе пары Mo/Si для области длин волн $\lambda > 100 \text{ \AA}$.

Численный метод. Говоря о многослойной структуре $\{l_i\}$, $i = 1, \dots, N$, далее будем иметь в виду N чередующихся слоев двух различных веществ, нанесенных на идеально гладкую подложку из какого-либо материала, выбор которого чаще всего имеет значение лишь с точки зрения технологии изготовления. Межслойными шероховато-

стями и наличием переходных слоев на этом этапе мы пренебрегаем. Нумерация слоев идет вглубь, по направлению к подложке; нечетные и четные слои образованы различными материалами, характеризующимися комплексными диэлектрическими постоянными $\epsilon = n^2 = 1 - \delta + i\beta$. Оптические константы материалов (δ_A, β_A) и (δ_B, β_B) связаны с атомными факторами рассеяния $f = f_1 + if_2$ следующим соотношением:

$$\begin{pmatrix} \delta \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{r_0}{\pi} \lambda^2 N \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix},$$

где $r_0 = e^2/m_e c^2$ - классический радиус электрона, N - концентрация атомов. Толщины слоев l_i , вообще говоря, различны. В отличие от периодической структуры, суммарные толщины пар соседних слоев не предполагаются постоянными по глубине структуры: $l_1 + l_2 \neq l_3 + l_4 \neq \dots$. Также, вообще говоря, различны и оптические длины пути для пар соседних слоев: $l_1 n_1 + l_2 n_2 \neq l_3 n_3 + l_4 n_4 \neq \dots$. Таким образом, наличие периода у структуры ни в каком смысле *a priori* не предполагается.

Коэффициент отражения $R_{s,p}(\lambda, \theta)$ многослойной структуры для *s*- и *p*-поляризованного излучения, падающего под углом θ , рассчитывался методом рекуррентных соотношений, описанным в литературе [11] и неоднократно использовавшимся рядом авторов. В приводимых здесь расчетах мы воспользовались значениями атомных факторов рассеяния из работы [2].

Ключевым этапом использованного метода является задание целевой функции (ЦФ) для $R(\lambda, \theta_0)$ или $R(\lambda_0, \theta)$ (наличие нижнего индекса означает, что значение угла падения или длины волны фиксировано). ЦФ задавалась на каком-либо интервале длин волн или углов, а также на нескольких изолированных интервалах. Вводилась норма отличия коэффициента отражения от ЦФ, подсчитываемая на области определения ЦФ и рассматриваемая как функция N независимых переменных $\{l_i\}$. (Задание ЦФ и введение нормы в конечном итоге предопределяет результат оптимизации.) Затем определялся градиент расхождения и делался шаг по линии градиента, уменьшающий это расхождение (метод наискорейшего спуска). Возникающая после этого новая структура $\{l_i\}$ запоминалась, вновь подсчитывалось расхождение и процедура повторялась. Сходимость процесса контролировалась и служила основанием для прекращения процесса оптимизации многослойной структуры. Управление численными экспериментами осуществлялось через графический программный интерфейс. Время расчета аperiodической структуры зависело, главным образом, от числа слоев и составляло от нескольких

минут до нескольких суток на PC Pentium 200 MHz.

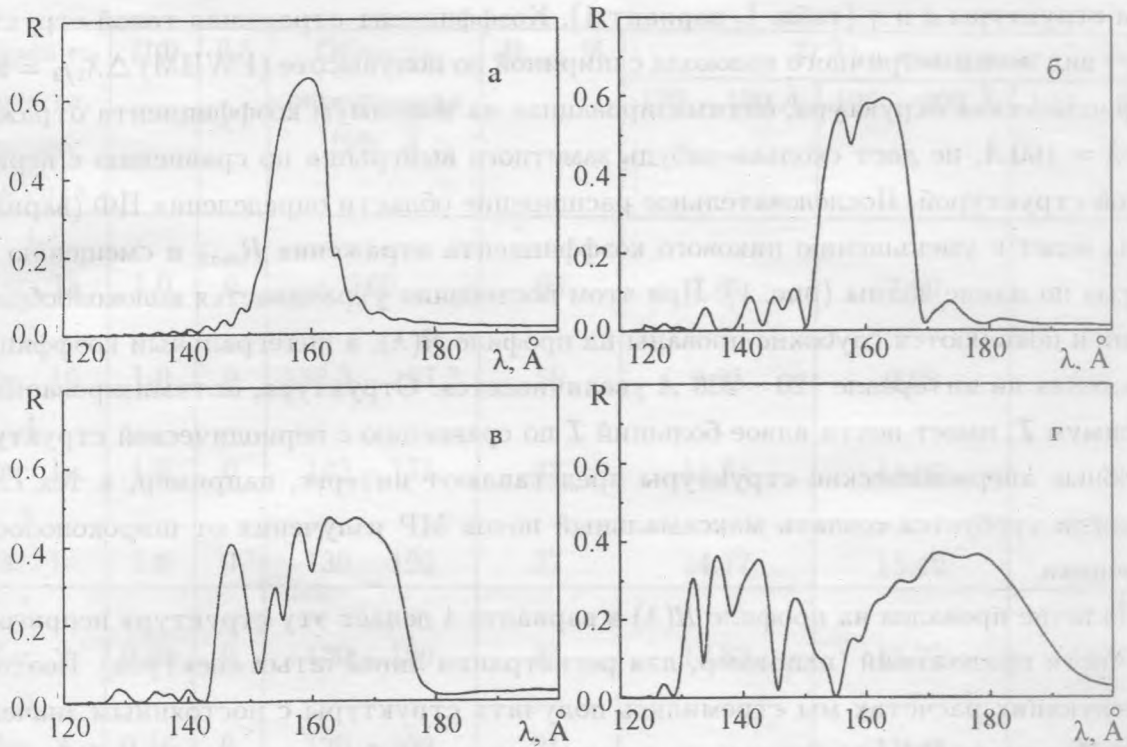


Рис. 1. Коэффициент отражения в интервале 120 – 200 Å: а – периодическая структура, оптимизированная по параметрам структуры d и γ на максимум коэффициента отражения на $\lambda = 160$ Å; б – г – аperiodические структуры, оптимизированные на максимум I в интервале 152.5 – 167.5 (б), 145 – 175 (в) и 130 – 190 Å (г); $N = 80$ (40 пар слоев).

Была также предусмотрена возможность параметрической оптимизации структуры. Например, варьированием параметров γ и d подбирались периодическая структура с максимальным коэффициентом отражения на заданной λ_0 .

Многослойные структуры с широким спектром отражения. Выясним возможности аperiodической структуры для расширения полосы отражения и увеличения интегрального коэффициента отражения $\mathcal{I}(\lambda_1, \lambda_2) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} R(\lambda) d\lambda$ при нормальном падении излучения. Была выбрана структура на основе пары Mo/Si , эффективная выше L -края поглощения Si . В первой серии расчетов ЦФ полагалась равной единице, а ее область определения последовательно расширялась от точки $\lambda = 160$ Å до интервала 130 – 190

Å. Для сопоставления с результатами этой серии служила периодическая структура, оптимизированная на максимум коэффициента отражения при $\lambda = 160 \text{ Å}$ по параметрам структуры d и γ (табл. 1, вариант 1). Коэффициент отражения такой структуры имеет вид несимметричного колокола с шириной по полувысоте (FWHM) $\Delta\lambda_{1/2} = 9.8 \text{ Å}$. Аperiodическая структура, оптимизированная на максимум коэффициента отражения при $\lambda = 160 \text{ Å}$, не дает сколько-нибудь заметного выигрыша по сравнению с периодической структурой. Последовательное расширение области определения ЦФ (варианты 2 – 4) ведет к уменьшению пикового коэффициента отражения R_{max} и смещению максимума по длине волны (рис. 1). При этом постепенно утрачивается колоколообразная форма и появляются глубокие провалы на профиле $R(\lambda)$, а интегральный коэффициент отражения на интервале 120 – 200 Å увеличивается. Структура, оптимизированная на максимум \mathcal{I} , имеет почти вдвое больший \mathcal{I} по сравнению с периодической структурой. Подобные аperiodические структуры представляют интерес, например, в тех случаях, когда требуется создать максимальный поток МР излучения от широкополосного источника.

Наличие провалов на профиле $R(\lambda)$ в варианте 4 делает эту структуру непригодной для части приложений (например, для регистрации линейчатых спектров). Поэтому в последующих расчетах мы стремились получить структуры с постоянным значением $R(\lambda)$. Для этого ЦФ понижалась до такого уровня, чтобы площадь под ней была равна соответствующему значению \mathcal{I} , достигнутому в предыдущей серии расчетов. Кроме того, норма отличия от ЦФ была изменена таким образом, чтобы сделать невыгодными сильные выбросы на кривой $R(\lambda)$ (квадратичная норма). При задании ЦФ на уровне 0.24 на интервале 130 – 190 Å удается найти многослойную структуру с почти постоянным коэффициентом отражения (табл. 1, вариант 5; рис. 2). Отметим, что эта структура обладает почти таким же интегральным коэффициентом отражения на интервале 130 – 190 Å, что и структура варианта 4, а на интервале 120 – 200 Å даже несколько превосходит ее по этому параметру. Такое МЗ может служить эффективным фокусирующим элементом дифракционного спектрометра с шириной рабочего диапазона около 60 Å. Наличие L -края поглощения кремния (показан стрелкой на рис. 2) снижает эффективность МЗ на основе пары Mo/Si в области $\lambda < 125 \text{ Å}$ и не позволяет расширить рабочий диапазон в сторону более коротких длин волн.

Сходные результаты получаются и в диапазоне 130 – 300 Å (табл. 1, вариант 6; рис. 3). В этом случае удается найти структуру со средним коэффициентом отражения около 15%, обладающую интегральным коэффициентом отражения 25.4 Å.

Т а б л и ц а 1

Отражательные характеристики многослойных структур (Mo/Si)

Вариант расчета, номер рисунка	ЦФ	$\theta, ^\circ$	Область определения ЦФ, Å	$R_{max}, \%$	$\mathcal{I}(\text{Å})$ в интервале		
					130 – 190 Å	120 – 200 Å	120 – 360 Å
1 Рис. 1а	1.0	0	160	65	7.81	7.99	
2 Рис. 1б	1.0	0	152.5 – 167.5	59	9.75	9.98	
3 Рис. 1в	1.0	0	145 – 175	47	11.64	11.97	
4 Рис. 1г	1.0	0	130 – 190	37	14.77	15.49	
5 Рис. 2	0.24	0	130 – 190	24	13.83	15.72	18.91
6 Рис. 3	0.16	0	130 – 300	21		11.49	29.46
7 Рис. 4	0.34	41	130 – 190	36	19.67	22.92	

Многослойные структуры с широким спектром отражения оказываются также широкополосными поляризаторами. Вопрос о поляризующей способности периодических МЗ (Mo/Si) в указанном диапазоне длин волн был изучен теоретически и экспериментально [13, 14]. Максимум поляризующей способности, определяемой как $P = (R_s - R_p)/(R_s + R_p)$, для периодической структуры достигается вблизи угла падения излучения $\theta \approx 41^\circ$. На рис. 4 представлены поляризующая способность $P(\lambda)$ и коэффициент отражения для s-поляризации $R_s(\lambda)$ для аперриодической структуры, оптимизированной на равномерное отражение в диапазоне 130 – 190 Å при $\theta \approx 41^\circ$. Видно, что $P(\lambda)$ во всем рабочем диапазоне (130 – 190 Å) изменяется от 1 до 0.94, убывая до 0.88 при $\lambda = 200 \text{Å}$. Как по ширине рабочего диапазона, так и по коэффициенту отражения такой однозеркальный поляризатор превосходит двухзеркальный поляризатор на область 140 – 200 Å [14].

Многослойные структуры с изолированными максимумами отражения. В некото-

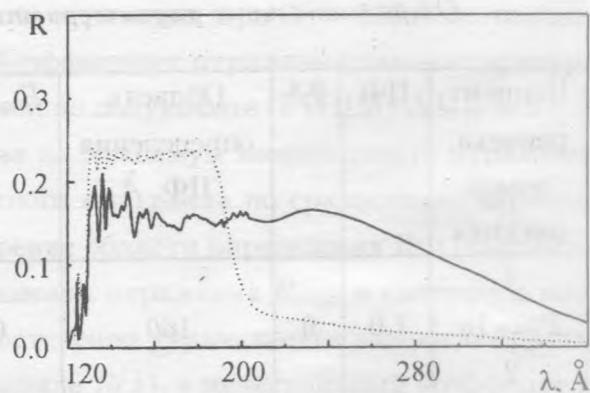
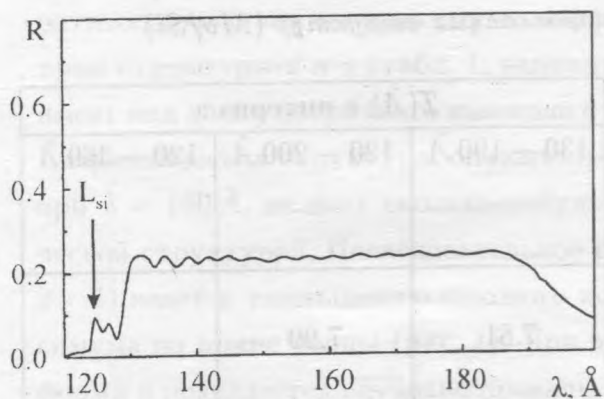


Рис. 2. Коэффициент отражения аperiodической структуры с $N = 80$, у которой минимизировано отклонение от уровня $R = 0.24$ в интервале $130 - 190 \text{ \AA}$ (вариант 5).

Рис. 3. Коэффициент отражения аperiodической структуры с $N = 80$, у которой минимизировано отклонение от уровня $R = 0.16$ в интервале $130 - 300 \text{ \AA}$ (вариант 6, сплошная линия). Для сравнения нанесен коэффициент отражения структуры, найденной в варианте 5 (пунктир).

рых специальных случаях представляют интерес МЗ, выделяющие не один, а сразу несколько интервалов длин волн. Так, при спектроскопическом исследовании элементарных процессов с участием многозарядных ионов и в диагностике плазмы большой интерес представляют интенсивности и спектральная форма линий серии Бальмера иона CVI , имеющих длины волн $\lambda = 182 \text{ \AA}$ (переход $3 \rightarrow 2$, линия H_α) и 135 \AA ($4 \rightarrow 2$, H_β). Для отыскания структуры, обладающей соответствующим коэффициентом отражения, ЦФ была задана в двух точках: на $\lambda_1 = 135$ и $\lambda_2 = 182 \text{ \AA}$. График коэффициента отражения найденной структуры показан на рис. 5. Коэффициенты отражения в максимумах составляют соответственно 61% и 43% против 74% и 53% у двух различных периодических структур, оптимизированных на получение максимального коэффициента отражения на указанных длинах волн. Что же касается интегрального коэффициента отражения аperiodической структуры, то он составляет 10.3 \AA , превосходя интегральные коэффициенты отражения этих периодических структур соответственно в 1.77 и 1.20 раз.

Оптимизация структуры Mo-Si для получения максимального коэффициента отражения. Выше мы указывали, что задание ЦФ в одной точке позволяет оптимизиро-

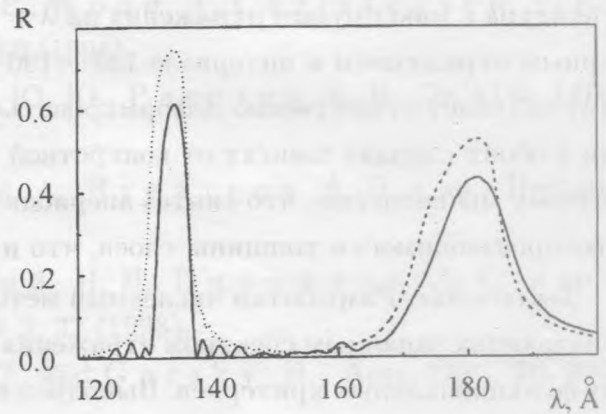
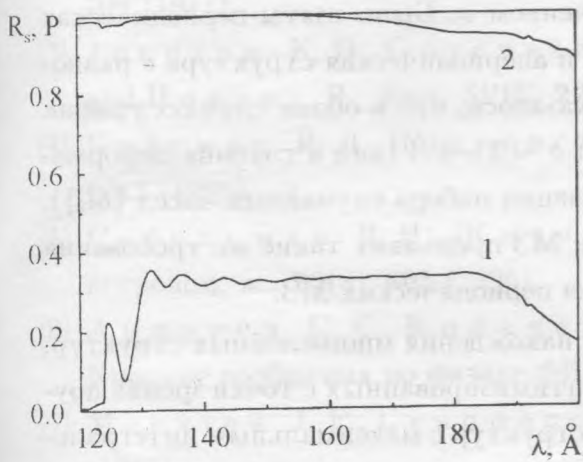


Рис. 4. Коэффициент отражения для *s*-поляризации (1) и поляризующая способность (2) аperiodической структуры, найденной в варианте 7, при угле падения 41° ($N = 40$).

Рис. 5. Коэффициент отражения аperiodической структуры с $N = 80$, оптимизированной на максимум суммы $R(\lambda_1) + R(\lambda_2)$, где $\lambda_1 = 135 \text{ \AA}$ и $\lambda_2 = 182 \text{ \AA}$ (сплошная линия). Для сравнения приведены графики $R(\lambda)$ для периодических зеркал, оптимизированных на максимум $R(\lambda_2)$ (пунктирная кривая) и $R(\lambda_1)$ (точки).

вать многослойную структуру с точки зрения коэффициента отражения в максимуме. Оказалось, что по коэффициенту отражения в максимуме на $\lambda = 160 \text{ \AA}$ оптимизированная аperiodическая структура несущественно (на 0.05%) превосходит периодическую, оптимизированную по параметрам γ и d для максимизации коэффициента отражения на этой длине волны. В области $\lambda > 200 \text{ \AA}$ аperiodическая структура дает существенный выигрыш. На $\lambda = 300 \text{ \AA}$, например, пиковый коэффициент отражения у аperiodической структуры в 1.3 раза выше, чем у периодической. Этот эффект достигается в основном за счет варьирования толщины всего одного (верхнего) слоя.

О требуемой точности воспроизведения толщины слоев. Известно, что экспериментально измеренные коэффициенты отражения периодических МЗ несколько ниже расчетных значений. Это связано с наличием шероховатости подложки и межслойных шероховатостей, наличием переходных слоев, отличием реальной плотности слоев от табличных значений и некоторыми другими причинами. Одна из них заключается в неидеальной воспроизводимости толщины наносимых слоев при синтезе многослойных структур. Мы сопоставили устойчивость расчетных функций $R(\lambda)$ у периодических и

апериодических МЗ относительно рандомизации толщины слоев: $l_i = l_i^{(0)} + \delta l_i$, где δl_i – случайная величина со среднеквадратичным значением σ . Были взяты периодическая структура с максимумом отражения на $\lambda = 135 \text{ \AA}$ и апериодическая структура с равномерным отражением в интервале $130 - 190 \text{ \AA}$. Оказалось, что в обоих случаях график $R(\lambda)$ начинает существенно деформироваться при $\sigma \sim 3 - 4 \text{ \AA}$ (вид и глубина деформации в обоих случаях зависят от конкретной реализации набора случайных чисел $\{\delta l_i\}$). Поэтому мы полагаем, что синтез апериодических МЗ предъявит такие же требования к воспроизводимости толщины слоев, что и синтез периодических МЗ.

Заключение. Разработан численный метод для нахождения многослойных структур, обладающих заданным спектром отражения или оптимизированных с точки зрения других функциональных критериев. Выполнен поиск структур с максимальным интегральным коэффициентом отражения или с максимальным равномерным коэффициентом отражения на заданном интервале длин волн, с высокой поляризующей способностью в области $130 - 190 \text{ \AA}$, структур с несколькими максимумами отражения и др. Установлено, что множество реализаций нерегулярной (апериодической) многослойной структуры *Mo-Si* содержит такие, которые превосходят регулярную по ширине рабочего диапазона, интегральному коэффициенту отражения и коэффициенту отражения в максимуме. Найдены структуры с постоянным коэффициентом отражения в интервалах $130 - 190 \text{ \AA}$ (24%) и $130 - 300 \text{ \AA}$ (15%) при нормальном падении излучения и структуры, обладающие высокой поляризующей способностью во всем рабочем интервале длин волн ($130 - 190 \text{ \AA}$) при наклонном падении ($\theta \approx 41^\circ$). Рассчитаны структуры с несколькими изолированными максимумами отражения, не являющимися брэгговскими порядками друг друга. Рассчитано зеркало на основе пары *Mo-Si*, обладающее на треть более высоким коэффициентом отражения на $\lambda = 300 \text{ \AA}$, нежели оптимальная периодическая структура. Апериодические многослойные зеркала предназначены для управления параметрами (расходимостью, поляризацией, спектральным составом) пучков МР излучения и создания широкополосных стигматических оптико-спектральных приборов с высоким угловым и спектральным разрешением.

Авторы признательны И. Л. Бейгману и Н. Н. Салашенко за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект N 97-02-16337).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Spiller E. Appl. Opt., **15**, 2333 (1976).

- [2] Виноградов А. В., Зельдович Б. Я. Оптика и спектроскопия, **42**, 709 (1977).
- [3] Joensen K. D., Gorenstein P., Wood J., Christensen F. E., and Hoghoj P. Proc. SPIE, **2279**, 180 (1994).
- [4] Бейгман И. Л., Покровский Ю. Ю., Рагозин Е. Н. ЖЭТФ, **110**, 1783 (1996).
- [5] Собельман И. И., Житник И. А., Игнатьев А. П. и др. Письма астроном. ж., **22**(8), 605 (1996).
- [6] Андреев С. С., Колачевский Н. Н., Пирожков А. С., и др. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 3, 32 (1998).
- [7] Meekins J. F., Cruddace R. G., and Gursky H. Appl. Opt., **26**, 990 (1987).
- [8] Vernon S. P., Stearns D. G., and Rosen R. S. Opt. Lett., **18**, 672 (1993).
- [9] Van Loevezijn P., Schlattmann R., Verhoeven J., et al. Appl. Opt., **35**, 3614 (1996).
- [10] Balakireva L. L. and Kozhevnikov I. V. J. X-Ray Sci. Technol., **6**, 150 (1996).
- [11] Виноградов А. В., Брытов И. А., Грудский А. Я. и др. Зеркальная рентгеновская оптика. Л., "Машиностроение", 1989.
- [12] Souffi R. and Gullikson E. M. Proc. SPIE, **3113**, 222 (1997).
- [13] Васильев А. А., Митропольский М. М., Платонов Ю. Я. и др. Квантовая электроника, **22**, 408 (1995).
- [14] Колачевский Н. Н., Пирожков А. С., Рагозин Е. Н. Квантовая электроника, **25**, 843 (1998).

Поступила в редакцию 30 октября 1998 г.