

07

Влияние флуктуаций латерального периода многослойной дифракционной решетки на рассеяние жесткого синхротронного излучения

© В.И. Пунегов

Сыктывкарский государственный университет
E-mail: punegov@syktsu.ru

Поступило в Редакцию 5 июня 2003 г.

Исследовано влияние флуктуаций латерального периода неидеальной многослойной дифракционной решетки на рассеяние жесткого (рентгеновского диапазона частот) синхротронного излучения. Построены карты углового распределения когерентной и диффузной интенсивностей рассеяния в обратном пространстве. Теоретические дифракционные кривые от многослойной дифракционной решетки Ni/C сравниваются с экспериментальными данными высоко разрешающей трехосевой дифрактометрии. Показано, что хорошее согласие теоретических и экспериментальных результатов наблюдается при дисперсии флуктуаций, равной трем процентам от среднего значения латерального периода решетки.

Возрастающий интерес к многослойным дифракционным решеткам (МДР) вызван возможностью их применения в качестве дисперсионных элементов в рентгеновской и крайней ультрафиолетовой оптике. Существуют различные теоретические и вычислительные методы, описывающие процесс рассеяния рентгеновских лучей на МДР (см., например, [1] и приведенную в ней литературу). Однако все эти методы относятся к идеальным латерально-периодическим системам.

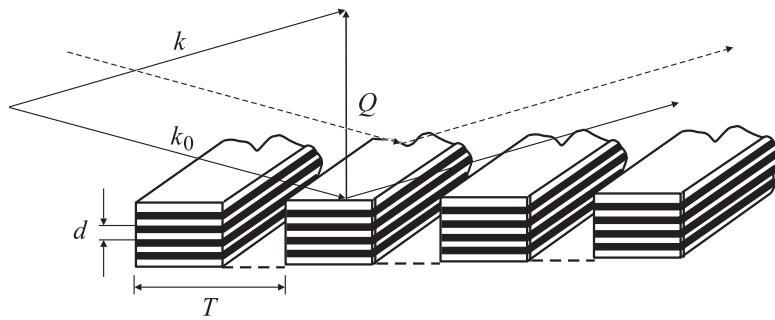


Рис. 1. Рассеяние синхротронного излучения на МДР. k_0 , k — волновые векторы падающей и дифракционной волн, Q — вектор рассеяния.

К сожалению, имеющиеся в настоящее время технологические методы не позволяют изготавливать идеально совершенные МДР. Различные нарушения структуры дифракционной решетки своеобразно влияют на угловое распределение интенсивности рассеяния рентгеновского (синхротронного) излучения.

Поскольку основой для создания МДР является многослойное рентгеновское зеркало, то исследуемая структура имеет периодическое строение в вертикальном и горизонтальном направлении (периоды соответственно d и T на рис. 1). Влияние флуктуации периода d полупроводниковых сверхрешеток и многослойных рентгеновских зеркал на формирование кривых дифракционного отражения учитывались рядом авторов [2–4]. Влияние флуктуаций латерального периода T многослойной дифракционной решетки на рассеяние жесткого синхротронного излучения до сих пор не исследовано. Поэтому настоящая работа посвящена этой проблеме.

Рассмотрим рассеяние рентгеновского излучения на многослойной дифракционной решетке, образованной периодически (квазипериодически) расположенными в латеральном направлении рентгеновскими зеркалами (рис. 1). Канавки между полосами рентгеновских зеркал (штрихов решетки) создают, как правило, методами литографии или ионного травления. Поскольку ни один из методов не позволяет изготавливать атомарно-гладкий поверхностный рельеф, возникают структурные искажения. К таким искажениям следует отнести шероховатости боковых стенок латерально-ограниченных многослойных рентгеновских

зеркал, случайные отклонения формы штриха и их размеров от технологически заданных параметров, а также флуктуации периода решетки.

Определим латеральный размер зеркала или ширину штриха как $l_x = \Gamma T$ ($0 < \Gamma < 1$), тогда расстояние между штрихами будет составлять $T(1 - \Gamma)$. Дифракционное отражение от МДР производится в угловой области брэгговского рефлекса рентгеновского зеркала.

Пусть амплитуда рассеяния от произвольного зеркала в структуре поверхностной решетки, например с номером n , равна A_n . Эта амплитуда может быть вычислена на основе статистической динамической теории отражения от многослойного рентгеновского зеркала [5]. Из-за отмеченных выше дефектов решетки, а также внутренних структурных особенностей отдельного многослойного штриха (например, нарушение планарности и размытость межслойных границ, наличие или отсутствие шероховатостей и т.д.), каждое зеркало в решетке может отличаться по своей отражательной способности. Поэтому амплитуда отраженной волны от отдельного штриха запишется в виде усредненной и флуктуационной части $A_n = \langle A \rangle + \delta A_n$, где $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение.

Предположим, что расстояние в латеральном направлении от первого зеркала до штриха с номером n равно $\sum_{s=1}^{n-1} T_s$, где T_s — расстояние между штрихом с номером s и штрихом с номером $s + 1$. Выделим средний период многослойной дифракционной решетки $\langle T \rangle$, при этом $T_s = \langle T \rangle + \Delta T_s$. Здесь ΔT_s — случайные отклонения от среднего значения $\langle T \rangle$.

Теоретическое рассмотрение проведем для трехосевой высоко-разрешающей рентгеновской дифрактометрии. Этот метод является наиболее информативным при исследовании структурных нарушений. В рамках данного подхода положение образца ω и анализатора ε относительно брэгговского угла ϑ_B задается через переменные $q_x = \frac{2\pi}{\lambda} \sin(\vartheta_B) \{2\omega - \varepsilon\}$ и $q_z = -\frac{2\pi}{\lambda} \cos(\vartheta_B) \varepsilon$ в обратном пространстве.

Интенсивность рассеяния от многослойной дифракционной решетки в приближении Фраунгофера запишется в виде

$$I_{MG}(q_x, q_z) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N (\langle A \rangle + \delta A_n) (\langle A^* \rangle + \delta A_m^*) \exp \left(i q_x \left(\sum_{s=1}^{n-1} T_s - \sum_{s=1}^{m-1} T_s \right) \right), \quad (1)$$

где N — число засвеченных рентгеновским пучком штрихов решетки.

Предположим, что флуктуации отражательной способности и периода решетки являются независимыми величинами, поэтому операция усреднения по этим параметрам может быть проведена отдельно. Поскольку $\langle \delta A_n \rangle = 0$ для любого n , решение (1) переписывается в виде суммы двух слагаемых: $I_{GS}(q_x, q_z) = I_{GS}^{(1)}(q_x, q_z) + I_{GS}^{(2)}(q_x, q_z)$. Первое слагаемое описывает когерентную дифракцию волн на решетке с усредненной рассеивающей способностью латерально расположенных штрихов

$$I_{MG}^{(1)}(q_x, q_z) = |\langle A \rangle|^2 \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \exp \left(i q_x \left(\sum_{s=1}^{n-1} T_s - \sum_{s=1}^{m-1} T_s \right) \right). \quad (2)$$

Вторая часть $I_{MG}^{(2)}(q_x, q_z)$ описывает некогерентное (диффузное) рассеяние на МДР, вызванное ее структурными нарушениями:

$$I_{MG}^{(2)}(q_x, q_z) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \langle \delta A_n \delta A_m^* \rangle \exp \left(i q_x \left(\sum_{s=1}^{n-1} T_s - \sum_{s=1}^{m-1} T_s \right) \right). \quad (3)$$

Пусть $A = A(q_x, q_z)$ — амплитуда рассеяния отдельным штрихом в структуре идеальной многослойной решетки, т.е. для всех n флуктуация $\delta A_n = 0$. Тогда амплитуда рассеяния на „усредненной“ решетке может быть записана в виде $\langle A \rangle = A \cdot f_{MG}$, где f_{MG} — статический фактор Дебая–Валлера многослойной дифракционной решетки. Простые преобразования в (2) приводят к следующему результату:

$$I_{MG}^{(1)}(q_x, q_z) = |A|^2 f_{MG}^2 \left\{ N + 2 \cdot \operatorname{Re} \left(\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^{n-1} \exp(-i q_x \langle T \rangle (n-m)) \right) \times \exp \left(-\frac{q_x^2 \sigma_T^2}{2} (n-m) \right) \right\}. \quad (4)$$

Здесь $\sigma_T = \sqrt{\langle \Delta T^2 \rangle}$ — дисперсия флуктуации латерального периода МДР.

Рассмотрим диффузную компоненту интенсивности рассеяния на МДР. Соотношение (3) может быть преобразовано к следующему

выражению:

$$I_{MG}^{(2)}(q_x, q_z) = |\Delta A|^2 (1 - f_{MG}^2) N \sum_{p=-\infty}^{\infty} G_p \exp(-iq_x \langle T \rangle p) \cdot \exp\left(-\frac{q_x^2 \sigma_T^2}{2} p\right), \quad (5)$$

где G_p — корреляционная функция латеральной решетки, ΔA — рассеивающая способность решетки в диффузный канал. Для разных условий дифракции корреляционная функция может принимать монотонно убывающую с ростом p или периодическую (с периодом T) зависимость.

Численное моделирование рентгеновского рассеяния проведем для многослойной дифракционной решетки Ni/C с периодом зеркала $d = 4 \text{ nm}$, при этом отношение никелевого слоя к периоду $d_{\text{Ni}}/d = \gamma = 0.4$. Толщина рентгеновского зеркала $l_z = 0.2 \mu\text{m}$, что составляет 50 бислоев Ni/C. Период многослойной дифракционной решетки $T = 2 \mu\text{m}$, отношение средней ширины штриха l_x к периоду решетки $\Gamma = l_x/T = 0.4$ количество штрихов $N = 100$.

В расчетах используются параметры для рентгеновского излучения с длиной волны 0.154 nm . Предполагается, что штрихами решетки являются латерально ограниченные рентгеновские зеркала с идеальной внутренней структурой. Однако размеры и форма поперечного сечения штрихов имеют случайные отклонения от рельефа совершенной поверхностной решетки, при этом статический фактор $f_{MG} = 0.7$.

Для исследования диффузного рассеяния принята латерально-мозаичная модель многослойной системы. В отличие от традиционной кристаллической мозаичности [6] здесь не учитывается угловая разориентация блоков мозаики. Поведение корреляционной функции зависит от размеров поперечного сечения отдельного штриха решетки и от ее латерального периода.

На рис. 2 показаны теоретические карты распределения интенсивности рассеяния от МДР и дифракционные кривые в режиме q_x -сканирования для решетки с идеальным периодом (рис. 2, *a, c*) и с дисперсией флуктуации периода $\sigma_T = 0.1 \mu\text{m}$ (рис. 2, *b, d*). Наличие флуктуаций периода приводит к уменьшению интенсивностей спутных максимумов, в то время как интенсивность основного дифракционного порядка остается неизменной. При десятипроцентной флуктуации периода дифракционной решетки $\sigma_T = 0.1 \cdot \langle T \rangle = 0.2 \mu\text{m}$ практически полностью исчезает спутная структура дифракционного спектра.

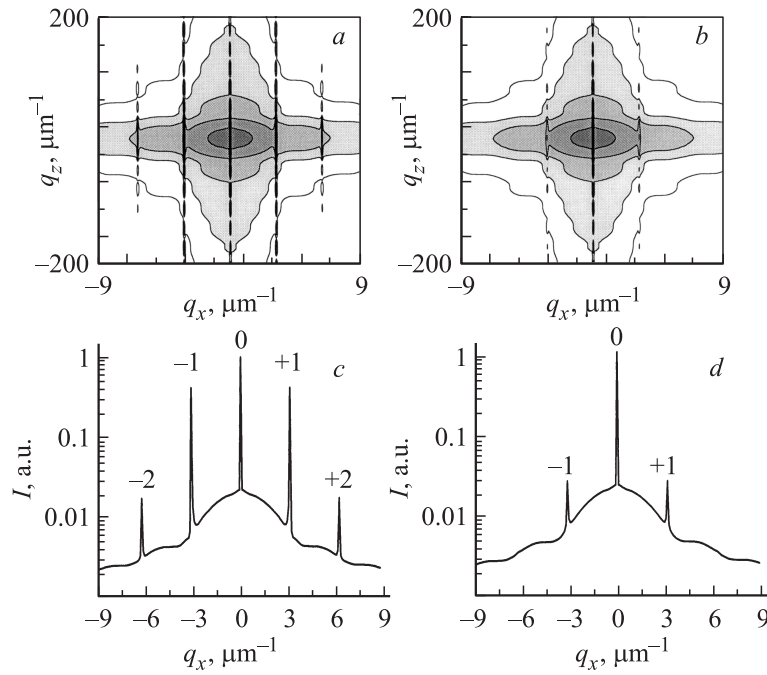


Рис. 2. Результаты численного моделирования дифракционного рассеяния от МДР с идеальным периодом (*a, c*) и с дисперсией флуктуации периода $\sigma_T = 0.1 \mu\text{m}$ (*b, d*).

На рис. 3 экспериментальная кривая синхротронного рассеяния на МДР Ni/C сравнивается с теоретическими результатами. Измерения были выполнены с использованием высокоразрешающего дифрактометра станции СИ „Аномальное рассеяние“ накопителя ВЭПП-3 в режиме трехкристальной схемы дифракции (Сибирский центр СИ при ИЯФ им. Г.И. Будкера, Новосибирск, Россия). Экспериментальная установка обеспечивала угловое разрешение 18 s на длине волны 0.154 nm (энергии 8.048 keV). Средний период многослойного зеркала $\langle d \rangle = 3.9 \text{ nm}$, отношение никелевого слоя к периоду $\langle d_1 \rangle / \langle d \rangle = \gamma = 0.37$, период МДР $T = 0.8 \mu\text{m}$, число периодов $N = 35$. В отличие от вышеизложенных результатов моделирования здесь в теоретических расчетах

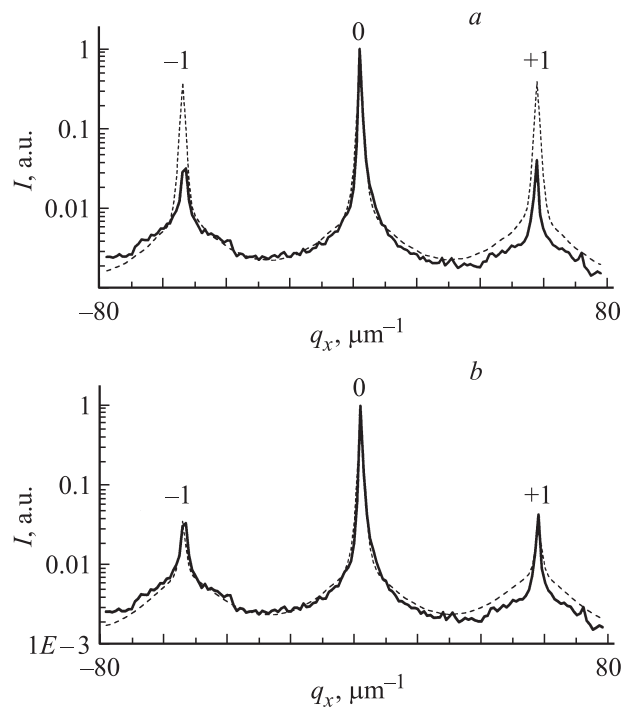


Рис. 3. Экспериментальная (жирная линия) и теоретические (пунктирная линия) дифракционные кривые q_x -сканирования от МДР Ni/C с идеальным (a) и флуктуационным (b) латеральным периодом.

использовалась периодическая корреляционная функция [7], поскольку диффузное рассеяние концентрируется не только в области основного максимума, но и вокруг спутников (статический фактор $f_{MG} = 0.7$, корреляционная длина $\tau_{MG} = 0.7 \mu\text{m}$). В случае модели решетки с идеальным периодом наблюдается существенное расхождение теоретических и экспериментальных данных в угловых областях спутничных максимумов (рис. 3, a). Учет флуктуаций периода решетки с дисперсией $\sigma_T = 0.03 \cdot \langle T \rangle = 0.024 \mu\text{m}$ приводит к удовлетворительному согласию теории и эксперимента (рис. 3, b). Таким образом, сопоставление рассчитанных и измеренных интенсивностей спутничных максимумов

может служить диагностическим методом для оценки флуктуаций латерального периода многослойной дифракционной решетки.

Автор выражает благодарность С.В. Мытниченко, Н.В. Коваленко и В.А. Чернову (Сибирский центр СИ при ИЯФ им. Г.И. Будкера, Новосибирск) за любезно предоставленные экспериментальные данные. Автор признателен С.В. Мытниченко за плодотворные дискуссии по рассматриваемой проблеме.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ (грант № Е02–3.4–302) и РФФИ (грант № 03–02–16239).

Список литературы

- [1] *Sammar A., Andre J.-M.* // Optics Communications. 1998. V. 149. P. 348–354.
- [2] *Нестерец Я.И., Пунегов В.И.* // Кристаллография. 1999. Т. 44. С. 980–988.
- [3] *Clemens В.М., Gay J.G.* // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. P. 9337–9340.
- [4] *Andreev A.V., Prudnikov I.R.* // Surf. Investig. 1997. V. 12. P. 421–424.
- [5] *Пунегов В.И.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2003. № 2. С. 19–23.
- [6] *Nesterets Ya.I., Punegov V.I.* // Acta Cryst. A. 2000. V. 56. N 6. P. 540–548.
- [7] *Shen Q., Umbach C.C., Weselak B., Blakely J.M.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 53. N 8. P. R4237–R4240.