УДК 535.421,536.971,537.874

БЛЕСК МНОГОСЛОЙНЫХ ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТОК В МР-ДИАПАЗОНЕ – ДИЗАЙН РОСТА С УЧЕТОМ ДЕФОРМАЦИИ ПРОФИЛЯ ШТРИХОВ

© 2019 г. Л. И. Горай^{1, *}, М. Н. Лубов²

¹Университет ИТМО, 197101 Санкт-Петербург, Россия ²Академический университет, 194021 Санкт-Петербург, Россия *E-mail: lig@pcgrate.com Поступила в редакцию 20.04.2018 г. После доработки 26.04.2018 г. Принята к публикации 28.04.2018 г.

Показано, что изменение угла осаждения покрытия на нано-структурированную подложку с несимметричным профилем (высокочастотную решетку с блеском) влияет как на сглаживание профиля штриха многослойной решетки (его симметризацию и/или уменьшение глубины), так и на значительное смещение максимума профиля влево или вправо относительно профиля подложки. Установлено, что смещение межслойных границ есть линейная функция угла осаждения материала, а изменение их глубины — нелинейная. В нелинейном континуальном уравнении роста можно получать контролируемую деформацию профиля, управляя ориентацией источника осаждения относительно рабочей грани штриха. При определенной ориентации источника и с учетом реалистических профилей границ максимальная дифракционная эффективность решетки в заданном порядке спектра будет выше аналогичной эффективности решетки с идеальными треугольными границами, расположенными строго вертикально друг над другом. Оптимальные значения смещения границ, найденные из моделирования роста W/B₄C 2500/мм-решетки с углом блеска 1.76° и углом анти-блеска 20°, позволяют получить дифракционную эффективность, составляющую ~0.82–0.9 отражения многослойного зеркала, оптимизированного на длину волны 1.3 нм. Максимально достижимая эффективность немного выше для более крутых углов нерабочей грани.

Ключевые слова: многослойная дифракционная решетка, решетка с блеском, мягкое рентгеновское излучение, коротковолновая рефлектометрия, дифракционная эффективность, строгий метод электромагнитной теории дифракции, метод граничных интегральных уравнений, моделирование роста тонких пленок, нелинейное континуальное уравнение, магнетронное и ионно-лучевое напыление.

DOI: 10.1134/S0207352819010086

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что теоретический предел относительной (т.е. для идеально-отражающей поверхности) дифракционной эффективности несимметричных ("с блеском") дифракционных решеток с углом при вершине 90° составляет 100% для одной поляризации падающего излучения [1]. Максимальные коэффициенты отражения многослойных покрытий в мягком рентгеновском (МР) диапазоне составляют несколько десятков % [2]. Однако, получить абсолютную дифракционную эффективность (т.е. эффективность по отношению к интенсивности падающего пучка), близкую к коэффициенту отражению идеального многослойного зеркала, в заданном порядке спектра изготавливаемых сегодня решеток не удается. Разница может составлять от нескольких десятков % до одного порядка.

Для изготовления высокочастотных решеток с идеальными характеристиками необходимо:

 а) разработать новый дизайн многослойной несимметричной дифракционной решетки (МНДР) и учесть форму профилей межслойных границ, их взаимное расположение, соотношение толщин слоев, геометрию падения излучения, его поляризацию;

б) численно оптимизировать основные параметры излучения и многослойной рельефной структуры для достижения максимально возможной эффективности;

в) предложить способ проектирования подобной МНДР, например, с помощью моделирования ее роста и с учетом особенностей существующих технологий; г) учесть несовершенство интерфейсов (сглаживание профилей, шероховатость, диффузность) и их вклад в отток интенсивности излучения, направляемого в рабочий порядок;

д) оценить действие других негативных факторов, таких как шум источника осаждения, неоднородность по времени и пространству плотности потока частиц на подложку, возникающих в технологических процессах, чтобы минимизировать их влияние на техпроцесс.

В последнее время было опубликовано несколько пионерских работ по разработке и тестированию МНДР следующего поколения с уникальными дифракционными характеристиками, в том числе с использованием неклассических оптических схем (конической дифракции). В работах [3, 4] была описана методика численного эксперимента, заменяющая с помощью континуальной модели роста, разрушающие измерения профилей границ МНДР, а с помощью строгих электромагнитных расчетов — затратные измерения эффективности на синхротронных источниках. Предложенная в [3, 4] континуальная модель роста хорошо описывает как сглаживание и смещение профилей штрихов несимметричных решеток, так и изменение функции спектральной плотности мощности шероховатости многослойных зеркал [5]. В работе [6] было предсказано и обосновано увеличение в 2-3 раза эффективности короткопериодных МНДР, работающих в МР, в том числе в высоких порядках спектра, по сравнению с теоретическими пределами скалярной теории дифракции. Экспериментальное подтверждение этого факта было получено через год в работе [7]. В [8] было обнаружено, что максимальная эффективность МНДР в МР может быть еще увеличена на несколько десятков % (до 0.95-0.98 коэффициента отражения соответствующего многослойного зеркала) с использованием схем конической дифракции и полной оптимизации всех параметров излучения и решетки.

Остается невыясненным, насколько конформальные (смещенные строго по вертикали) слои и треугольная форма границ могут быть предпочтительнее сглаженных и/или смещенных по горизонтали интерфейсов, которые получаются при изготовлении МНДР с помощью анизотропного жидкостного травления Si-пластин и магнетронного или ионно-пучкового напыления многослойного покрытия [3, 4]. Проведенное ранее компьютерное моделирование роста многослойных Mo/Si и Al/Zr-решеток и использование рассчитанных профилей границ в строгом методе интегральных уравнений для вычисления абсолютной дифракционной эффективности решеток, работающих в экстремальном ультрафиолетовом (ЭУФ) и МР-диапазонах, продемонстрировали эффективность данной методики. Однако ее оптимизационный потенциал не был раскрыт в полной мере. Целью настоящей работы является теоретическое исследование зависимости деформации интерфейсов от геометрии штрихов и параметров напыления (релаксации), а также синтез оптимальной, с точки зрения эффективности, многослойной решеточной структуры с учетом реалистических параметров подложки и условий напыления многослойного покрытия.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА И СИНТЕЗ МНДР

При росте многослойной пленки профили ее границ определяются двумя процессами: осаждением, приводящим к увеличению высоты профиля, и релаксацией, сглаживающей ее профиль. Релаксация поверхности обусловлена тем, что в ходе роста тонкая пленка стремится перейти в такое термодинамическое состояние, в котором ее поверхностная свободная энергия минимальна. Механизмы релаксации поверхности определяются видом растущей пленки (аморфная, кристаллическая), условиями роста (температура подложки, скорость осаждения и т.д.) и начальным профилем пленки [5]. Особенностью релаксации крупномасштабных профилей, таких как дифракционные решетки, является существенное влияние угла наклона пучка осаждения на процесс эволюции профиля [3]. Это обусловлено тем, что взаимная геометрия пучка и геометрии профиля штрихов может приводить к неоднородному осаждению материала на разных гранях штриха решетки, что существенно влияет на его эволюцию в ходе роста.

При рассмотрении эволюции профиля МНДР будем считать, что поверхность изотропна и двумерна, т.е. высота профиля h может быть представлена функцией координаты x и времени t. На рис. 1 представлено схематическое изображение одного бислоя МНДР толщиной L и периодом d. Геометрия пучка осаждения задается углом падения α , а профиль штриха решетки определяется углами при рабочей (угол блеска) φ и нерабочей (угол анти-блеска) β гранях (рис. 1).

Для исследования влияния угла наклона пучка осаждения на процесс формирования МНДР будем использовать модифицированное уравнение Маллинза [3, 5, 9], в котором строго учитывается локальный радиус кривизны K(x, t) профиля штриха решетки:

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = g(x,t) - v_2 \sqrt{1 + \left[\nabla h(x,t)\right]^2 K(x)} + v_4 \sqrt{1 + \left[\nabla h(x,t)\right]^2} \left[\frac{\partial^2 K(x,t)}{\partial x^2} \right].$$
(1)

Здесь g(x, t) — плотность пучка осаждения, v_2, v_4 — коэффициенты релаксации, задающие скорости

процессов испарения—конденсации и диффузии. Величина K(x, t) определяется как:

$$K(x,t) = -\frac{\nabla^2 h(x,t)}{\left(1 + \nabla h(x,t)\right)^{3/2}}.$$
 (2)

Поток атомов, осаждающихся на поверхность МНДР, зависит от локального угла наклона рабочей грани решетки $\varphi(x, t)$ или ее нерабочей грани $\beta(x, t)$. В итоге, следуя подходу, предложенному в [3], получим для потока частиц, осаждаемых на рабочую грань:

$$g(x,t) = I_0 \sin(\alpha - \varphi(x,t)), \qquad (3)$$

где I_0 — поток частиц на подложку, локальный угол наклона рабочей грани может быть рассчитан как $\varphi(x, t) = \operatorname{arctg}(|\nabla h|)$.

Аналогично для потока частиц на нерабочую грань имеем [3]:

$$g(x) = I_0 \sin(\alpha + \beta(x, t)), \qquad (4)$$

где величина $\beta(x, t) = \operatorname{arctg}(|\nabla h|).$

Минимальный и максимальный углы наклона α определяются из условия отсутствия затенения, которое означает, что взаимная геометрия пучка осаждения и профиля штриха решетки такова, что осаждение материала происходит на все участки профиля. Минимальное значение α определяется из условия, что не затенена рабочая грань, т.е. $\alpha - \phi > 0$, а максимальное значение $\alpha -$ из условия, что не затенена нерабочая грань, т.е. $180 - \alpha > \beta$.

Таким образом, на основании уравнений (1)-(4) и с учетом условия отсутствия затенения можно рассчитать профили межслойных границ многослойной решетки, а значит и отклонение (деформацию) профилей штрихов от начального.

Для характеризации деформации профиля в зависимости от угла наклона пучка осаждения α , введем следующие параметры: смещение $\Delta d(\alpha)$ вершины профиля штриха относительно начального положения x_i^{\max} :

$$\Delta d(\alpha) = x_i^{\max} - x_f^{\max}, \qquad (5)$$

где, x_f^{\max} — положение вершины профиля в конечный момент роста; изменение $\Delta h(\alpha)$ высоты профиля относительно начальной h_i^{\max} высоты профиля:

$$\Delta h(\alpha) = h_i^{\max} - h_f^{\max}, \qquad (6)$$

где h_f^{\max} — высота профиля в конечный момент роста.

Для исследования влияния угла падения α пучка осаждения на эволюцию профилей межслойных границ решетки было проведено моделирование роста МНДР для различных углов осажде-



Рис. 1. Схематичное изображение одного бислоя идеальной МНДР. Параметры МНДР: φ – угол блеска, β – угол при нерабочей грани, d – период, L – толщина биослоя. Угол падения пучка осаждения α .



Рис. 2. График зависимости смещения вершины профиля Δd от угла наклона α пучка осаждения для двух решеток с углами при рабочей грани $\varphi = 6^{\circ}$ и нерабочей грани: $\beta = 45^{\circ}$, $\beta = 6^{\circ}$.

ния и различных углов ϕ и β . На рис. 2 представлены величины смещения $\Delta d(\alpha)$, рассчитанные для двух МНДР: первой с $\beta_1 = 45^\circ$ и второй с $\beta_2 = 6^\circ$ при следующих одинаковых для обеих решеток параметрах: $\phi = 6^\circ$, d = 200 нм, $\Gamma = 0.5$ (отношение толщины слоя к периоду многослойного покрытия), L = 3.06 нм, n = 40 (число бислоев). Параметры релаксации и осаждения были следующие: $I_0 = 0.579$ нм/с (для первого слоя $v_2 = 0.15$ нм²/с) и $v_4 = 15$ нм⁴/с (для второго слоя $v_2 = 0.15$ нм²/с и $v_4 = 10$ нм⁴/с).

Как видно из рис. 2, смещение $\Delta d(\alpha)$ линейно зависит от угла наклона α пучка осаждения для обеих решеток. При этом величина угла α , при котором смещение равно нулю, определяется из условия:

$$\sin(\alpha - \varphi(x, t)) = \sin(\alpha + \beta(x, t)). \tag{7}$$



Рис. 3. График зависимости изменения высоты профиля Δh от угла α пучка осаждения для решетки с углами $\varphi = 6^{\circ}, \beta = 45^{\circ}.$



Рис. 4. График зависимости смещения профиля Δd от соотношения потоков осаждения на рабочую g_b и не рабочую g_{ab} грани для решетки с углами $\phi = 1.76^\circ$, $\beta = 20^\circ$.

Величины углов, рассчитанные из (7), равны: для несимметричной решетки ($\phi_1 = 6^\circ, \beta_1 = 45^\circ$), $\alpha_1 = 70.5^\circ$, для симметричной ($\phi_2 = 6^\circ, \beta_2 = 6^\circ$), $\alpha_2 = 90^\circ$. Величины этих углов, полученные из численных расчетов, отличаются для несимметричной решетки ($\alpha_1^{calc} \approx 72^\circ$) и совпадают для симметричной ($\alpha_2^{calc} = 90^\circ$). Это обусловлено тем, что несимметричная решетка вблизи вершины сглаживается неравномерно. В случае же симметричной решетки релаксация поверхности одинакова на обеих гранях.

Расчет изменения $\Delta h(\alpha)$ высоты профиля в зависимости от угла падения α -пучка осаждения показал, что с увеличением α значение $\Delta h(\alpha)$ уменьшается. На рис. 3 представлена зависимость $\Delta h(\alpha)$, полученная для несимметричной решетки с $\varphi_1 = 6^\circ$, $\beta_1 = 45^\circ$, d = 200 нм, $\Gamma = 0.5$, L = 3.06 нм, n = 40 и параметрами осаждения $I_0 = 0.579$ нм/с, $v_2 = 0.15$ нм²/с, $v_4 = 15$ нм⁴/с (первый слой) и $v_2 = 0.15$ нм²/с, $v_4 = 10$ нм⁴/с (второй слой).

График зависимости $\Delta h(\alpha)$, представленный на рис. 3, показывает, что чем меньше угол падения пучка на решетку, тем сильнее его релаксация (сглаживание). Это обусловлено тем, что частицы, осажденные на более короткую (нерабочую) грань профиля, быстрее достигают вершины профиля и стыка двух соседних профилей штрихов (рис. 1), а значит релаксация, зависящая от потока частиц к неоднородностям профиля, происходит быстрее. Величина же смещения для симметричного профиля не зависит от угла наклона пучка и для профиля с $\varphi_2 = 6^\circ$, $\beta_2 = 6^\circ$ значение $\Delta h(\alpha)$ равно 1.8 нм.

Особый интерес для исследования влияния деформации профиля решетки на ее дифракционную эффективность в МР-диапазоне представляют несимметричные решетки с малым углом блеска. Исходя из этого, было проведено компьютерное моделирование формирования МНДР и рассчитаны $\Delta d(\alpha)$ и $\Delta h(\alpha)$ для начального профиля с $\phi = 1.76^{\circ}$, $\beta = 20^{\circ}$. При таких значениях углов блеска и анти-блеска возможно осаждения материала при больших значениях угла падения пучка. На рис. 4 представлена зависимость смещения профиля Δd от соотношения потоков осаждения на рабочую g_b и нерабочую g_{ab} грани, $\Delta d =$ $=\Delta d(g_{\rm b}/g_{\rm ab})$. Расчеты проводились для решетки с $φ = 1.76^\circ$, $β = 20^\circ$, d = 402 нм, Γ = 0.5, L = 5.78 нм, $n = 18, I_0 = 1$ нм/с. В расчетах учитывалась релаксация поверхности только за счет диффузии, т.е. второй член в правой части (1) был равен нулю, значения параметров релаксации были следующие: $v_4 = 100$ нм⁴/с (первый слой), $v_4 = 75$ нм⁴/с (второй слой).

Расчеты показывают, что профиль не смещается при значении соотношения потоков $g_b/g_{ab} =$ = 0.964. Это (как и в случае решетки с углами $\varphi = 6^\circ$, $\beta = 45^\circ$) обусловлено сглаживанием решетки вследствие релаксации, при этом влияние релаксации профиля штриха на смещение его вершины при данных значениях параметров V₄ мало.

Также как и в случае решеток с углом блеска равным шести градусам, нами были проведены расчеты изменения высоты $\Delta h(\alpha)$ профиля штриха для различных углов наклона α . Результаты расчетов показали, что изменение высоты профиля слабо зависит от угла α и равно $\Delta h(\alpha) \approx 0.56$ нм. Таким образом, изменение высоты профиля $\Delta h(\alpha)$ значительно меняется от угла наклона α пучка осаждения для решетки с углами $\phi_1 = 6^\circ$, $\beta_1 = 45^\circ$ и слабо зависит от величины угла α для решеток с углами $\phi_2 = 6^\circ$, $\beta_2 = 6^\circ$ и $\phi_3 = 1.76^\circ$, $\beta_3 = 20^\circ$. Такая зависимость изменения высоты Δh от угла α объясняется тем, что решетка с углами $\varphi_1 = 6^\circ$, $\beta_1 = 45^\circ$ обладает большей "кривизной", т.е. бо́льшим значением K(x, t) вблизи вершины и стыков двух зубцов профиля (уравнения (1) и (2)), чем две другие решетки (с $\varphi_2 = 6^\circ$, $\beta_2 = 6^\circ$ и $\varphi_3 = 1.76^\circ$, $\beta_3 = 20^\circ$). Следовательно, сглаживание профиля для решеток с бо́льшим значением K(x, t)происходит более интенсивно, что в свою очередь приводит к значительному уменьшению высоты.

Другим фактором, существенно влияющим на величину высоты профиля, являются параметры релаксации (1): чем выше значение параметра релаксации, тем сильнее сглаживается профиль и тем сильнее уменьшается его высота. Влияние кривизны и параметров релаксации на изменение высоты профиля представлено на рис. 5 и 6, соответственно. На рис. 5 показана зависимость изменения Δh высоты для решетки с углом блеска $\varphi = 6^{\circ}$ от угла анти-блеска. На рис. 6 представлены профили решетки с $\varphi_3 = 1.76^{\circ}$, $\beta_3 = 20^{\circ}$ для двух различных наборов значений параметров релаксации: 1) $v_4 = 100 \text{ нм}^4/\text{с}$ (первый слой), $v_4 = 75 \text{ нм}^4/\text{с}$ (второй слой); 2) $v_4 = 350 \text{ нм}^4/\text{с}$ (первый слой), $v_4 = 325 \text{ нм}^4/\text{с}$ (второй слой).

Как следует из результатов расчетов, представленных на рис. 5, чем больше угол анти-блеска β , тем сильнее уменьшается высота профиля штриха решетки. Как видно из рис. 6, увеличение параметров релаксации существенно уменьшает высоту профиля, а также приводит к его дополнительному смещению. При этом влияние параметров релаксации на высоту профиля больше, чем на его смещение. Так, разница относительных изменений $|\Delta h_1 - \Delta h_2|/h_i^{\text{max}}$ высот профилей равна 0.14, а разница относительных смещений профиля $|\Delta d_1 - \Delta d_2|/x_i^{\text{max}} = 0.07$. Также отметим, что релаксация профиля приводит к тому, что рабочая грань профиля вблизи его вершины и стыков двух профилей штрихов решетки имеет угол наклона отличный от начального угла. При этом, чем выше параметры релаксации, тем больше длина деформированных участков, а значит "рабочая" длина профиля уменьшается (рис. 6). К деформации рабочей грани может также приводить шум источника осаждения, который вызывает неравномерное сглаживание грани и появление "впадин" и "холмов" на ней. Можно заключить, что процесс деформации профиля сложным образом зависит от взаимной геометрии пучка осаждения и профиля решетки и значений параметров релаксации. Поэтому, для выбора МНДР с максимальной дифракционной эффективностью необходимо находить оптимальное сочетание смещения профиля штриха и изменения его высоты.



Рис. 5. График зависимости изменения высоты профиля Δh от угла β для решетки с углом блеска $\varphi = 6^{\circ}$ и параметрами релаксации: $v_4 = 100 \text{ нм}^4/\text{с}$ (первый слой), $v_4 = 75 \text{ нм}^4/\text{с}$ (второй слой); $v_4 = 350 \text{ нм}^4/\text{с}$ (первый слой), $v_4 = 325 \text{ нм}^4/\text{с}$ (второй слой).



Рис. 6. Профили границ решетки с углами $\varphi = 1.76^\circ$, $\beta = 20^\circ$: начальный для двух различных наборов значений параметров релаксации.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ МНДР С РАЗЛИЧНОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ ГРАНИЦ

Для определения отражательных свойств МНДР с учетом эффектов затенения и реалистических профилей границ, имеющих тонкую структуру, в т.ч. со случайной шероховатостью, необходимо использовать подходящий строгий метод электромагнитной теории дифракции. Одним из немногих методов, сходящихся в самом коротковолновом диапазоне, является модифицированный метод граничных интегральных уравнений (МИМ), который зарекомендовал себя при анализе и синтезе самых различных типов дифракционных решеток, в том числе с реалистическими профилями границ и учетом случайной шероховатости [10]. Подробное описание МИМ с



Рис. 7. Модель 18 периодной W/B₄C-решетки с конформальными треугольными границами с углами $\phi = 1.76^{\circ}$ и $\beta = 20^{\circ}$.



Рис. 8. То же, что на рис. 7, но с расчетными границами со смещением и сглаживанием.

примерами численных расчетов и сравнений приведено в работе [11]. В настоящей работе все расчеты дифракционной эффективности МНДР выполнены с помощью коммерческого кода PCGrate®-SX v.6.7, основанного на МИМ [12].

На рис. 7 представлена модель идеальной $W/B_4C \sim 2500/MM$ (d = 402 нм) решетки с 18-ю конформальными бислоями и несимметричными треугольными границами с углом блеска 1.76° и углом анти-блеска 20°. На рис. 8 представлена модель аналогичной решетки, полученная с помощью континуального расчета роста слоев при осаждении потока материала со стороны рабочей граней под углом 60° (150° от горизонтали, рис. 1), от нормали к поверхности решетки (подложки). При выбранных геометрии напыления и параметрах релаксации, вершины границ смещаются влево на величину $\Delta d \sim 200$ нм и слегка сглажива-

ются. При другой ориентации осаждаемых пучков относительно нормали к поверхности решетки деформация границ (прежде всего), направление и величина смещение максимума, может быть совершенно иной (рис. 4).

На рис. 9 представлена дифракционная эффективность, найденная для различных дизайнов решеток, полученных из моделирования роста, с малыми и большим смещениями Δd максимума верхней границы влево ($\Delta d > 0$) или вправо ($\Delta d < 0$) относительно конформального (несмещенного) транслирования нижней границы. Показатели преломления материалов брались из базы данных [13]. Приведенные на рис. 9 высоты *h* верхних границ (профилей штрихов) решеток различного дизайна характеризуют степень сглаженности изначально треугольного профиля подложки с глу-

биной $h_i^{\text{max}} = 11.4$ нм. Как видно из рисунка, дифракционная эффективность 2-го рабочего порядка достигает максимума при определенном значительном смешении влево ($\Delta d = 189$ нм) и малом уменьшении глубины верхнего профиля (~5%). При меньших или больших смещениях профилей границ влево (по сравнению с оптимальной величиной) эффективность плавно спадает. Однако, даже при небольших смещениях профилей границ вправо ($\Delta d = -10$ нм) эффективность падает существенно (~30%). Уменьшение глубины профилей также играет значительную роль в падении эффективности в максимуме, начиная, примерно, с 10% для верхнего профиля. При уменьшении глубины верхнего профиля примерно в два раза ($h_f^{\text{max}} = 6$ нм) эффективность в максимуме падает более чем в два раза.

На рис. 10 представлена дифракционная эффективность, найденная для различных дизайнов решеток с углом анти-блеска 20° с треугольными (тр.) и реалистическими (реал.) профилями штрихов, полученными с помощью вертикального ($\Delta d = 0$) и оптимального ($\Delta d = 189$ нм) смешения границ относительно положения нижней границы. На этом рисунке также представлена эффективность аналогичной решетки с треугольными границами и углом анти-блеска 80° (h_i^{\max} = = 12.3 нм), для которого вертикальное смешение границ является почти оптимальным. Неожиданно, эффективность в максимуме второго порядка решетки с углом анти-блеска 20° и реалистическими профилями границ (рис. 8), полученными при оптимальных условиях осаждения многослойного покрытия на структурированную подложку, оказывается на 9% выше, чем эффективность решетки с конформальными идеальными треугольными границами (рис. 7), и составляет ~0.82 коэффициента отражения соответствующего многослойного зеркала (на рис. 10 – отражение). Эффективность решетки с идеальными тре-



Рис. 9. Эффективность моделей 18 периодной W/B₄C 2500/мм решетки на длине волны 1.3 нм во втором дифракционном порядке от угла падения (Δd – гори-

зонтальное смещение профиля штрихов, h_f^{\max} – его глубина).



Рис. 10. То же самое, что на рис. 9, но для оптимальных и идеальных моделей.

угольными границами и оптимальным смешением ($\Delta d = 189$ нм) достигает ~0.9 коэффициента отражения многослойного зеркала. Максимальная эффективность решетки с конформальными границами и углом анти-блеска, равным 80° , близка к коэффициенту отражения многослойного зеркала. Однако подобная величина нерабочего угла и возможность равномерного осаждения на нее материала пока остаются практически недостижимыми. На рис. 10 для сравнения приведен уровень максимальной эффективности второго порядка (макс. измеренная в эксп.), достигнутый для рассматриваемой лучшей решетки экспериментально [7].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было обнаружено, что эффективность рассматриваемых в работе МНДР с реалистическими профилями штрихов, получаемыми при напылении, может быть выше, чем эффективность аналогичной идеальной решетки с треугольными конформальными интерфейсами. Это связано с горизонтальным смещением границ, получаемым при напылении многослойного покрытия, и особенностями скользящей многоволновой и многократной дифракции рентгеновских волн на сдвинутых несимметричных интерфейсах, что подтверждается высокоточными численными расчетами.

Горизонтальное смешение профиля штрихов обусловлено наклоном пучка осаждения к профилю решетки. При больших углах наклона, когда осаждение происходит преимущественно на рабочую грань профиля, величина его горизонтального смещения может превышать половину периода решетки. При этом изменение высоты профиля незначительно, и при оптимальных величинах угла наклона пучка, параметров релаксации и угла анти-блеска высота профиля уменьшается менее, чем на 10% от начальной. Также исследования показали, что вблизи максимума эффективности дифракционной отклонение смешения профиля от оптимального оказывает большее влияние на величину эффективности, чем изменение высоты профиля.

Предложенный в работе подход, основанный на совместном компьютерном моделировании роста многослойных решеток и строгом расчете интенсивности рентгеновского рассеяния на них, оказался успешным для поиска нового дизайна высокоэффективных МНДР с реалистическими значениями углов анти-блеска и степенью сглаживания границ. Проведенные исследования полезны с точки зрения конструирования приборов с высокой дифракционной эффективностью и разрешением для рентгеновской спектроскопии Солнца и других космических объектов, исследования физики плазмы, рентгеновской литографии, корреляционной и резонансной неупругой рентгеновской спектроскопии и др.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа поддержана проектом РФФИ № 16-29-11697, № 17-02-00362.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Hutley M.C.* Diffraction Gratings / Academic Press, 1982. 330 p.
- Attwood D. Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications / Cambridge University Press, 1999. 471 p.
- 3. Goray L., Lubov M. // J. Appl. Cryst. 2013. V. 46. P. 926.
- 4. *Goray L.I., Lubov M.N.* // J. Surface Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2014. V. 8. № 3. P. 444.

- Goray L., Lubov M. // Opt. Express. 2015. V. 23. № 8. P. 10703.
- 6. *Voronov D.L., Goray L.I., Warwick T., et al.* // Opt. Express. 2015. V. 23. № 7. P. 4771.
- Voronov D.L., Salmassi F., Meyer-Ilse J., et al. // Opt. Express. 2016. V. 24. № 11. P. 11334.
- Goray L.I., Egorov A.Yu. // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 109. P. 103502.
- Pellicione M., Lu T.-M. Evolution of Thin Film Morphology. Modelling and simulations. Berlin: Springer, 2007. 205 p.
- 10. Goray L.I. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2013. V. 77. № 1. P. 10.
- Goray L.I., Schmidt G. Boundary Integral Equation Methods for Conical Diffraction and Short Waves / Gratings: Theory and Numerical Applications. Popov E. Ed. 2nd rev. ed. Marceille: Presses Universitaires de Provence, 2014. 580 p.
- 12. Website of I. I. G., Inc.: [Интернет-ресурс] / URL: http://pcgrate.com (дата обращения 07.03.2018).
- Center of X-Ray Optics: [Интернет-ресурс] /URL: http://henke.lbl.gov/optical_constants/ (дата обращения 07.03.2018).

Blaze of Multilayer Coated Diffraction Gratings in Soft X-Rays – Growth Design Accounting Deformations of Groove Profiles

L. I. Goray, M. N. Lubov

It is shown that the change in the deposition angle of a coating on a nano-structured substrate with an asymmetric profile (high-frequency blaze grating) affects both the smoothing of the multilayer groove profile shape (its symmetrization and/or decreasing depth), and a significant shift of the maximum of the profile shape to the left or to the right relative to the substrate profile. It is established that the displacement of the interlayer boundaries is a linear function of the deposition angle of the material and a non-linear function in the profile depth. With a certain orientation of the source relative to the working facet and taking into account the realistic relaxation parameters of deposited materials in the nonlinear continuum growth equation, it is possible to obtain a controlled deformation of the boundaries, which leads to an increase in the maximum diffraction efficiency in a given order of the spectrum, in comparison with the efficiency of a similar grating with ideal triangular boundaries displaced exactly along the vertical. The optimal boundary displacement values, found from the W/B₄C 2500 /mm grating growth simulation with a blaze angle of 1.76° and an anti-blaze angle of 20° , make it possible to obtain the diffraction efficiency of $\sim 0.82-0.9$ of the reflection of a multilayer mirror optimized for a wavelength of 1.3 nm. The maximum achievable efficiency is a little higher for steeper angles of the non-working facet.

Keywords: multilayer diffraction grating, blazed grating, soft X-ray radiation, short-wave reflectometry, diffraction efficiency, rigorous method of electromagnetic diffraction theory, boundary integral equations method, thin film growth simulation, nonlinear continuum equation, magnetron and ion-beam sputtering deposition.