

Calculation of Reflectivity for W/Si Multilayer Mirror of Small d-Spacing

Kwon Su Chon*

Department of Radiological Science, Daegu Catholic University

Received: November 26, 2017. Revised: February 20, 2018. Accepted: February 28, 2018

ABSTRACT

Multilayer mirrors are optical elements that can replace single crystal optical elements such as silicon or germanium, and they have artificial diffraction plane of a thickness of several nanometers. We examined the first Bragg angle and the reduction of reflectivity by variation of layer thickness in a W/Si multilayer mirror of small d-spacing. A W/Si multilayer mirror for an incidence angle of 0.55° and an energy of 17.5 keV was designed and showed a maximum reflectivity of 72.67%. When the thickness of tungsten or silicon layer was simultaneously changed, the first Bragg angle was shifted and the reflectivity was reduced. When there was a change in thickness for one layer of W/Si multilayer, no change in the reflectivity was showed but the unevenness of the envelope was observed. Reduction of reflectivity was also observed at random Gaussian thickness variations. It is possible to predict the tolerance of multilayer mirror by examining the reflectivity degradation according to the thickness change in the W/Si multilayer mirror of small d-spacing.

Keywords: X-ray Optics, Multilayer Mirror, d-Spacing, Reflectivity

I. INTRODUCTION

엑스선(X-ray)은 파장이 매우 짧기 때문에 엑스선용 광학소자(Optics)를 제작하기 매우 어렵다.^[1] 규소(Si) 또는 게르마늄(Ge) 단결정(Single-Crystal)을 이용하여 엑스선을 회절(Diffraction)시키는 광학소자^[2,3]가 대표적이고 엑스선회절분석기의 모노크로메이터(Monochromator) 및 방사광가속기의 단색화장치로 광범위하게 사용되고 있다.

엑스선 회절에 적용할 수 있는 규소나 게르마늄의 격자 평면(Lattice Plane)의 간격이 제한적이기 때문에 획득할 수 있는 엑스선의 단색 파장의 범위도 제한적일 수밖에 없다. 이러한 단점을 극복하기 위해 인공적으로 격자를 증착한 다층박막거울(Multilayer Mirror)이 많이 사용된다.^[4,5]

연(Soft) 엑스선용 다층박막거울은 두께 주기(d-Spacing)가 상대적으로 크기 때문에 비교적 제작이 쉽다. 반면 경(Hard) 엑스선용 다층박막거울은

엑스선의 짧은 파장으로 인해 두께 주기가 수 나노미터(nm) 수준이다.^[6] 매우 짧은 두께 주기를 가지는 수십 층의 매우 균일한 박막을 증착하고 또 계면(Interface)에서의 표면 거칠기(Surface Roughness)가 엑스선의 산란을 최소화 하도록 0.3 nm rms 이하가 되도록 조절^[7,8]하는 것은 매우 도전적인 연구이다.

본 논문에서는 두께 주기가 짧은 W/Si 균일(Uniform) 다층박막거울의 특성을 조사하였다. 특히 다층박막거울을 제작하는 과정에서 발생하는 증착의 두께 변화에 따른 반사율 및 첫 번째 브래그 각도(1st Bragg Angle)의 변화에 중심을 두었다.

II. MATERIAL AND METHODS

1. 다층박막거울

다층박막거울은 기판(Substrate) 위에 경원소(Low Z-Element)와 중원소(High Z-Element)가 번갈아 적층되어 있다.^[4] 통상 최상위층은 중원소가 된다. 중원소는 엑스

* Corresponding Author: Kwon Su Chon

E-mail: kschon@cu.ac.kr

Tel: +82-53-850-2521

선을 반사시키는 역할을 하고, 경원소는 중원소에서 반사되지 못한 엑스선을 흡수하여 아래에 있는 중원소에서 다시 반사되도록 하는 역할을 한다. 다층박막거울에서 경원소를 최상위층이 되도록 설계할 수도 있다.

다층박막거울의 중원소 및 경원소는 사용하는 엑스선의 에너지 근방에서 흡수단(Absorption Edge)이 없는 물질이 바람직하다. 몰리브덴(Mo)의 특성 엑스선(Characteristic X-ray)인 17.5 keV에 대한 가능한 중원소와 경원소 조합은 많이 있지만 물리적 화학적 안정성을 고려하면 그 조합의 수는 매우 제한된다. Pt/C,^[9] W/C,^[7] W/Si^[10] 조합이 가장 잘 알려져 있다. 여기서는 W/Si 조합을 다룬다. Fig. 1은 균일 W/Si 다층박막거울의 구조를 나타낸 것이다. 규소(Si)와 텅스텐(W) 층이 쌓을 이루어 동일한 두께 주기(d)로 N층 적층된다. 두께 주기에 대한 텅스텐의 두께를 두께비(γ)가 되고, 각 층의 표면 거칠기(σ)는 반사율에 영향을 준다.

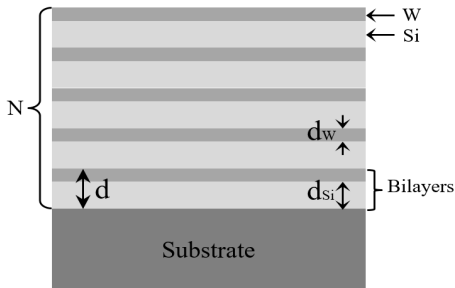


Fig. 1. Structure of uniform W/Si multilayer mirror.

2. 광학상수

W/Si 다층박막거울의 반사율을 계산하기 위해서 사용되는 에너지에 대한 굴절률($n = 1 - \delta - i\beta$)의 실수부 및 허수부에 대한 광학상수가 요구된다.^[11] 17.5 keV에서 텅스텐과 규소의 광학상수를 Table 1에 표시하였다. 다층박막거울의 기판으로 실리콘 웨이퍼(Si Wafer)를 사용한다고 가정하여 기판에 대한 광학상수를 추가하지 않았다.

Table 1. Optical constants of Si and W for an energy of 17.5 keV.

Constants	Air	W	Si
δ	0.0	1.0463×10^{-5}	1.5875×10^{-6}
β	0.0	9.6294×10^{-7}	7.9261×10^{-9}

3. W/Si Multilayer mirror of small d-spacing

다층박막거울에 의해 반사된 엑스선의 파장(λ)과 입사각도(θ) 및 두께 주기 사이에는 브래그 조건(Bragg Condition),

$$n\lambda = 2d_{eff} \sin\theta \quad (1)$$

이 만족되어야 한다. 여기서 n 은 정수이고, d_{eff} 는 광학상수에 의존하는 두께 주기이다. 작은 두께 주기를 갖는 다층박막거울의 특성을 조사하기 위해 17.5 keV의 엑스선에 대해 입사각도 0.55°를 가지는 경우로 한정하였다. 각도가 증가할수록 두께 주기는 작아진다. 균일 다층박막거울의 주요 인자를 Table. 2에 표시하였다. 이 다층박막에서 텅스텐 두께와 규소의 두께는 각각 1.149 nm와 2.683 nm 이다. 모든 계산 결과는 Visual C++ (Visual Studio 2010)로 자체 개발한 프로그램을 통해 얻었다.

Table 2. Specifications of a W/Si multilayer mirror for an energy of 17.5 keV and an incidence angle of 0.55°.

Parameters	d	γ	σ	N
Value	3.832 nm	0.3	0.3 nm	25

III. RESULT

1. 일정한 두께 주기

증착되는 텅스텐과 규소의 박막이 설계된 두께와 동일한 경우의 반사율을 계산하였다. Fig. 2에 나타낸 것과 같이 0.55° 및 17.5 keV에서 최대 반사율 72.67%를 보였다. 입사각 0.15° 이하에서 엑스선의 전반사(Total Reflection)를 관찰할 수 있으며, 각도가 증가함에 따라 반사율이 빠르게 감소하였다. 다층박막을 구성하는 텅스텐과 규소의 두께 주기에 일치하는 엑스선 파장이 서로 보강 간섭하여 피크(Peak)를 이루었다. 각도 및 에너지 반치폭(FWHM)은 각각 0.034°와 1.007 keV 이다.

2. 두께 오차에 의한 효과

텅스텐과 규소를 증착하는 과정에서 증착기

(Sputter)의 순간 변동 또는 증착물의 오차로 인해 적층되는 두께가 일정하지 않을 수 있다. 우선 규소의 두께는 정확하게 증착된다고 가정하고 텅스텐의 증착에 오차가 있는 경우를 살펴보았다. 텅스텐의 박막 두께가 모두 0.1 nm 증가하면 반사율의 피크 모양은 거의 변동이 없지만 피크 위치가 0.535°에서 나타나 0.015° 벗어나게 된다. 규소의 경우에도 텅스텐의 경우와 비슷하게 0.015°의 변화를 보였다. Fig. 3에서 첫 번째 브래그 각도의 기울기가 거의 비슷한 것을 통해 유사한 양상을 보이는 것을 알 수 있다. Eq. (1)을 통해 파장이 고정되어 있는 경우, 입사각이 작을 때 입사각과 두께주기 사이에는 역수 관계가 성립하지만 두께 주기의 변화가 매우 작기 때문에 거의 선형 반비례와 같은 양상을 나타내는 것이다.

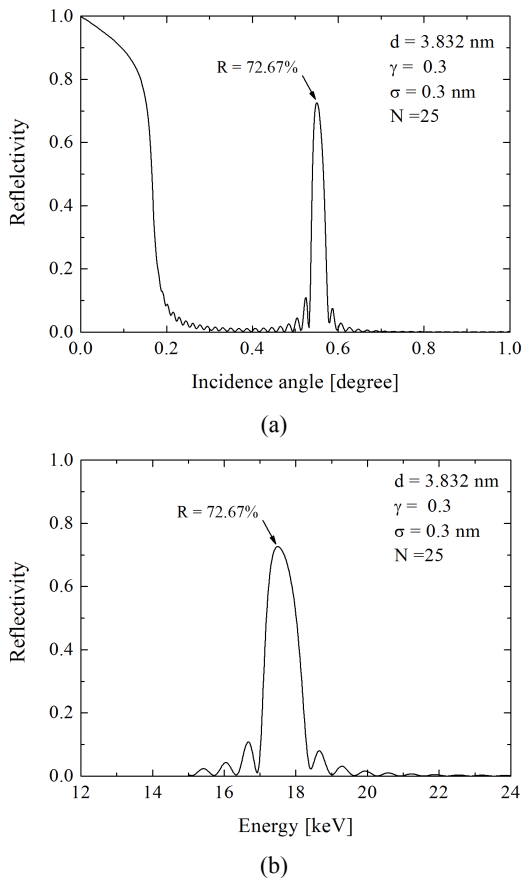


Fig. 2. Reflectivity as function of angle (a) and energy (b) for an W/Si multilayer mirror.

Fig. 3과 같이 반사율의 경우는 조금 다른 양상을 보였다. 텅스텐의 경우는 반사율이 거의 1.12%씩

선형 변화를 보였지만, 규소의 경우는 텅스텐의 경우보다 반사율이 상대적으로 빨리 증가하거나 감소하는 모습을 보였다.

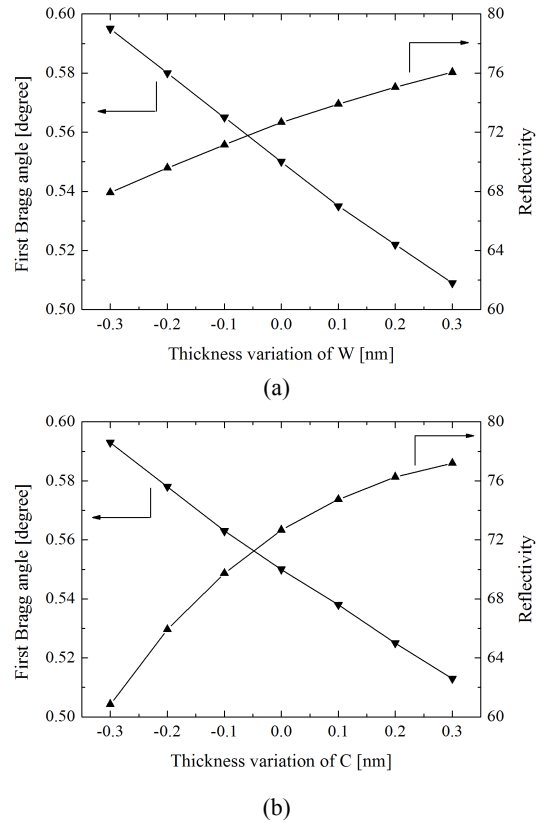


Fig. 3. The first Bragg angle and reflectivity for variation of W (a) and Si (b)

증착 과정에서 다른 박막 층은 이론적인 두께로 적층되거나 하나의 박막 층에서만 오차가 발생한 경우를 살펴보았다. 기관에서 11번째 위치한 텅스텐 층에 0.2 nm 두께가 추가적으로 적층된 경우를 Fig. 4에 표시하였다. 모든 층에서 오차가 없는 경우는 피크들이 나타내는 포락선(Envelope)이 매우 부드럽게 변하는 반면, 하나의 층에서 추가 오차가 발생한 포락선은 요철이 심하다는 것을 확인할 수 있다. Fig. 4의 왼쪽과 오른쪽은 축은 각각 텅스텐과 규소의 두께 변화에 따른 첫 번째 브래그 각도와 반사율을 나타낸 것이고 그래프 내부의 화살표는 대응되는 축을 나타낸 것이다.

텅스텐 및 규소의 모든 박막 층에 무작위(Random) 오차가 수반된 경우를 Fig. 5에 나타내었다. 이론적인 각각의 두께에 무작위 가우시안 형태

의 오차를 추가하였다. 오차의 표준편차가 대략 0.1 nm까지는 반사율의 편차가 작았으나 0.1 nm 이후 부터는 편차가 크게 증가하였고 반사율도 동시에 감소했다.

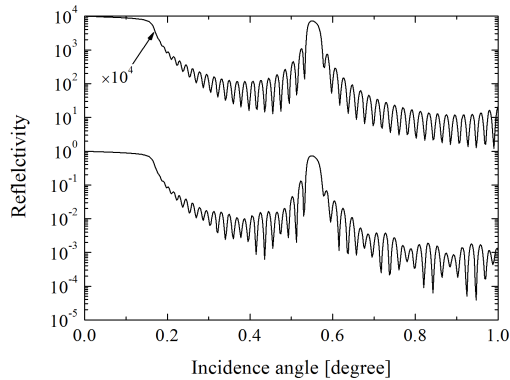


Fig. 4. Comparison of reflectivity for normal (upper) layers and 11st abnormal (lower) layer of W in W/Si multilayer mirror.

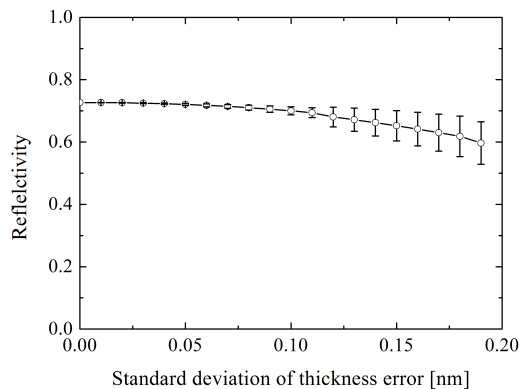


Fig. 5. Degradation of reflectivity by random Gaussian thickness error on each layers.

IV. DISCUSSION AND CONCLUSIONS

단결정의 단점을 극복할 수 있는 다층박막거울 광학소자의 증착과정에서 발생할 수 있는 두께 오차에 대한 반사율의 저하 양상을 조사하였다. 증원소 및 경원소 층의 두께가 모두 동일하게 변동되었을 때 첫 번째 브래그 피크의 위치 변동 및 반사율의 저하가 발생했다. 경원소의 두께가 변하는 경우가 증원소가 변하는 것 보다 반사율의 저하가 더 컸다.

적층되는 박막의 두께는 증착 시간의 조절을 통해 결정된다. 따라서 요구되는 증착 두께를 정확히 조절하기 위해서는 텅스텐과 규소의 단위 시간당 증착률(Deposition Rate)을 정확하게 파악해야한다. 정확한 증착률을 통해 모든 층에 일정하게 추가 또는 감소되는 오차를 줄일 수 있다.

텅스텐과 규소 층 중 하나의 층에서 두께 변화가 발생했을 때 최대 반사율의 변동은 없었으나 포락선의 모양에 요철이 관찰되었다. 박막의 증착 과정에서 텅스텐 또는 규소 건(Gun)에 순간 스파크(Spark)가 발생할 경우 스파크가 발생된 층의 두께 변화가 발생한다. 엑스선 반사율기법(XRR)으로 다층박막거울을 측정하면 관찰되는 포락선의 변화를 통해 적층의 두께 변화를 예측할 수 있을 것이다.

증착되는 텅스텐 및 규소 입자는 양자역학의 확률적 영향을 받는다. 즉, 증착의 두께에 있어서 무작위적인 증착의 변동이 필연적으로 수반된다. 무작위 증착의 정도가 증가할수록 반사율의 저하가 발생했다.

상대적으로 긴 두께 주기를 가지는 다층박막거울 보다 두께 주기가 짧은 다층박막거울의 제작을 위해서는 정밀한 두께 조절이 필요하다는 것을 두께 오차와 반사율과의 관계를 통해 예측할 수 있었다. 본 연구결과를 통해 두께 주기가 짧은 다층박막거울을 제작하기 위한 증착기의 사양을 역으로 예측할 수 있고, 또는 제작되는 다층박막거울의 제작 공차(Tolerance)를 분석하는데 사용될 수 있을 것이다.

Acknowledgement

본 연구는 2011년도 대구가톨릭대학교 교내연구비 지원에 의한 것임.

Reference

[1] A. Erko, A. Firsov, D. Roshchoupin, I. Schelokov, Volume Modulated Diffraction X-Ray Optics. in: Modern Developments in X-Ray and Neutron Optics, A. Erko, M. Idir, T. Krist, A. G. Michette, Eds., Springer, Berlin, Springer Series in optical science, Vol. 137, pp. 471-500, 2008.

-
- [2] T. Matsushita, X-ray Monochromators, in: Handbook on Synchrotron Radiation, E. E. Koch, Eds., North-Holland Publishing Company, Vol. 1, 1983.
- [3] D. M. Mills, X-Ray Optics for Third-Generation Synchrotron Radiation Sources, in: Third-Generation Hard X-ray Sources, D. M. Mills, Eed, John Wiley & Sons Inc., New York, 2002.
- [4] E. Spiller, *Soft X-ray Optics*, Washington, SPIE OPTICAL ENGINEERING PRESS, 1994.
- [5] T. W. Barbee Jr, "Multilayers for X-ray Optics," Proceedings of SPIE, Vol. 563, pp. 5-28, 1985.
- [6] A. Akhsakhalyan, A. Akhsakhlyan, A. Kharitonov, E. Klunokov, V. Murav'ev, N. Salashchenko, "Multilayer mirror systems to form hard X-ray beams," Central European Journal of Physics, Vol. 3, No. 3, pp. 163-177, 2005.
- [7] K. S. Chon K. H. Yoon, "Monochromatic X-ray Imaging System Using a W/C Multilayer Mirror," Journal of the Korean Physical Society, Vol. 55, No. 6, pp. 2571-2577, 2009.
- [8] K. S. Chon, S. K. Juhng, K. H. Yoon, "Interdiffusion Region in a Tungsten-Carbon Multilayer Coating of Small d-Spacing," Journal of the Korean Physical Society, Vol. 54, No. 1, pp. 23-28, 2009.
- [9] Y. Tawara Y. Yamashita, H. Kunieda et al. "Development of multilayer suppermirror for hard X-ray telescopes," Proceedings of SPIE, Vol. 3444, pp. 569-575, 1998.
- [10] D. L. Windt, F. E. Christensen, W. W. Craig, C. Hailey, F. A. Harrison, M. Jimenez-Garate, R. Kalyanaraman, P. H. Mao, "Growth, structure and performance of depth-graded W/Si multilayers for hard X-ray optics," Journal of Applied Physics, Vol. 88, No. 1, pp. 460-470, 2000.
- [11] B. L. Henke, E. M. Gullikson, J. C. Davis, "X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at E=50-30000 eV, Z=1-92," Atomic Data and Nuclear Data Tables Vol. 54, No. 2, pp. 181-342, 1993.

작은 두께주기를 갖는 W/Si 다층박막거울의 반사율 계산

천권수*

대구가톨릭대학교 방사선학과

요 약

다층박막거울은 규소나 게르마늄과 같은 단결정 회절소자를 대체할 수 있는 광학소자로 수 나노미터 두께의 인공적인 회절 평면을 갖는다. 작은 두께 주기를 갖는 W/Si 다층박막거울에서 박막의 두께 변화에 따른 첫 번째 브래그 각도 및 반사율 저하를 조사하였다. 작은 두께 주기를 갖는 W/Si 다층박막거울은 0.55° 및 17.5 keV 에서 최대 반사율을 나타내도록 설계되었고 72.67%의 반사율을 보였다. 텅스텐 및 규소의 박막 두께가 동일하게 변화되었을 때 첫 번째 브래그 각도의 변화 및 반사율 저하가 관찰되었다. 다층박막거울에서 텅스텐 박막층 하나의 층에서만 두께 변화가 있을 때는 반사율의 변화는 없지만 포락선의 요철이 관찰되었다. 무작위적인 가우시안 두께 변화에서도 반사율 저하가 관찰되었다. 작은 두께 주기를 갖는 W/Si 다층박막거울에서 두께 변화에 따른 반사율의 저하를 통해 제작되는 다층박막거울의 공차를 예측할 수 있을 것이다.

중심단어: 엑스선광학소자, 다층박막거울, 두께 주기, 반사율