

# Analysis of Reflectivity for Interfacial Roughness of Depth-Graded W/Si Multilayer Mirror

Kwon Su Chon\*

Department of Radiological Science, Daegu Catholic University

Received: January 30, 2018. Revised: February 20, 2018. Accepted: February 28, 2018

## ABSTRACT

Multilayer mirrors have widely been used for monochromatization of X-ray with high reflection efficiency. The reflected X-ray energy or wavelength is determined by the d-spacing of a multilayer mirror and the incidence angle. The reflectivity critically depends on the number of bilayers and surface roughness on each interface. The multilayer mirror has a structure of alternative deposition of high and low Z-elements on the substrate. Each interface should be considered in the calculation of reflectivity. In this paper, we examine the degradation of reflectivity by the inter-diffusion combined with surface roughness on each interface for a W/Si multilayer mirror. In the depth-graded W/Si multilayer mirror, the FWHMs for angle and energy were larger than them of the uniform multilayer mirror. Inter-diffusion considerable gave rise to the degradation of reflectivity. To obtain measured reflectivity closed to the expected reflectivity, the inter-diffusion on W-Si and Si-W interfaces should be considered.

Keywords: X-ray Optics, Multilayer Mirror, Reflectivity, Inter-diffusion

## I. INTRODUCTION

다층박막거울(Multilayer Mirror)은 기판(Substrate)위에 중원소(High Z-Element)와 경원소(Low Z-Element)가 번갈아 적층되어 있는 구조<sup>[1,2]</sup>로 되어 있으며 브래그 조건(Bragg Condition)을 만족하는 엑스선(X-ray)만을 반사시킴으로써 엑스선의 특성을 변화시키는 광학소자이다.<sup>[3]</sup> 다층박막거울은 엑스선의 단색화용으로 사용될 수 있고,<sup>[4]</sup> 넓은 에너지 영역을 반사시키도록 설계될 수 있다.<sup>[5]</sup>

다층박막거울의 설계인자로는 두께주기(d-spacing), 두께비(Thickness Ratio), 층수(Number of Bilayers), 표면 거칠기(Surface Roughness)가 있다.<sup>[4]</sup> 이 가운데 표면 거칠기는 엑스선의 반사율을 감소시키는 데 매우 중요한 역할을 하기 때문에 높은 반사율을 가지는 다층박막거울을 설계 및 제작하기 위해서는 다층박막거울의 각 계면(Interface)에서의 표면 거칠기<sup>[6]</sup>를 이해할 필요가 있다. 본 논문에서는 텅

스텐(W) 및 규소(Si)로 이루어진 층의 계면 거칠기 이외에 텅스텐-규소 계면 및 규소-텅스텐 계면에서의 확산이 반사율의 저하에 미치는 영향을 두께 변화(Depth-Graded)를 가지는 다층박막거울에서 조사하였다.

## II. MATERIAL AND METHODS

### 1. 다층박막거울의 설계인자(Design Parameters)

다층박막거울에서는 중원소와 경원소가 하나의 기본층(Bilayers)을 이루며 이 층의 두께가 두께주기(d)가 된다. 균일한(Uniform) 다층박막거울에서는 이 두께가 N층 반복된다. 반면 두께 변화 다층박막거울에서는 이 두께가 달라진다. 통상적으로 기판에서 멀어질수록 얇아지는 구조를 갖는다. 두께비( $\gamma$ )는 두께주기에 대한 중원소 또는 경원소 층의 두께비로 정의할 수 있다. 여기에서는 중원소 박막의 두께를 기준으로 하였다.

\* Corresponding Author: Kwon Su Chon

E-mail: kschon@cu.ac.kr

Tel: +82-53-850-2521

표면 거칠기는 기판 위에 규소와 텅스텐이 번갈아 적층될 때 각 물질의 표면 거칠기( $\sigma$ )를 나타내고 통상적으로 기준 계면에서 계면들의 높고 낮음에 대한 표준편차로 표시된다. 표면 거칠기는 기판의 표면 거칠기를 그대로 복사하거나 더 나빠지는 경우로 진행된다. 표면 거칠기에 대한 반사율의 효과를 나타내는 것으로 Nevot-Croce 모델이 잘 알려져 있다.<sup>[7]</sup> Fig. 1은 두께 변화 W/Si 다층박막거울의 구조를 나타낸 것이다. 각 기본층의 두께비는 일정하다.

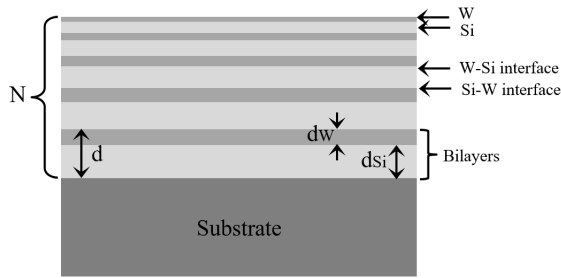


Fig. 1. Structure of depth-graded W/Si multilayer mirror.

## 2. 계면의 상호확산(Inter-diffusion)

다층박막거울을 제작하는 관점에서 보면 텅스텐 증원소와 규소 경원소를 증착하는 과정에서 상당히 다른 물리 현상을 보인다. 텅스텐과 규소의 밀도비가 8.23으로 매우 크기 때문에 규소층 위에 텅스텐이 적층되는 계면(W-Si Interface)과 텅스텐층 위에 규소가 적층되는 계면(Si-W Interface)의 상호확산 비율이 다르다. 상호확산을 포함한 표면 거칠기에 대한 효과를

$$\sigma = \sqrt{\sigma_{sr}^2 + \sigma_{id}^2} \quad (1)$$

로 표현하였다. 여기서  $\sigma_{sr}$ 는 표면 거칠기에 대한 표준편차이고  $\sigma_{id}$ 는 상호확산에 의한 표준편차이다.

## 3. 다층박막거울의 반사율(Reflectivity)

엑스선은 전자기파이기 때문에 두 매질의 경계에서의 전자기파의 반사와 동일한 식을 이용해서 반사율을 계산할 수 있다.<sup>[8]</sup> 엑스선관(X-ray tube)에

서 발생하는 엑스선은 Unpolarized 광선이므로 P편 광과 S편광의 평균으로 표시하였고, W-Si 계면과 Si-W 계면에서의 반사는 표면과 계면 거칠기의 효과를 추가하여 계산하였다. 다층박막거울 전체의 반사는

$$r = \frac{r_{ik} + r_{kj} e^{-2i\phi(j)}}{1 + r_{ik} r_{kj} e^{-2i\phi(j)}} \quad (2)$$

로 계산<sup>[9,10]</sup>되고 복소공액(Complex Conjugate)과의 곱을 통하여 입사각 또는 에너지에 대한 반사율을 계산하였다. 여기서  $r_{ij}$ 는 단일 층에서의 반사이고  $i, j$ 는 공기와 기판을 포함한 반사면을 나타내는 인자이며,

$$\phi(j) = \frac{2\pi}{\lambda} d_j \sqrt{n_j^2 - \cos^2 \theta} \quad (3)$$

는 위상인자이다. 여기서  $\theta$ 는 사입사각(Grazing Incidence Angle)이고 반사율 계산에 필요한 굴절률(Refractive Index)은

$$n_j = 1 - \delta_j - i\beta_j \quad (4)$$

로 표시하였다.  $\delta$ 와  $\beta$ 는 17.5 keV에서 텅스텐과 규소에 대한 Henke 광학상수를 이용하였다.<sup>[11]</sup> 모든 계산 결과는 Visual C++ (Visual Studio 2010)로 자체 제작한 프로그램을 통해 얻어졌다.

## III. RESULT

### 1. 균일한 다층박막거울

두께 변화 다층박막거울의 반사율과 비교하기 위해 균일한 다층박막거울의 각도 및 에너지에 대한 반사율을 조사하였다. 폴리브덴 특성엑스선인 17.5 keV 및 입사각도 0.5°에서 첫 번째 브래그 피크(1st Bragg Peak)가 나타나도록 설계인자를 결정하였다. 이때의 설계인자는  $d=4.25$  nm,  $\nu=0.333$ ,  $\sigma=0.3$  nm,  $N=50$ 이다. 최대 반사율은 88.58%이고 각도 및 에너지 반치폭(FWHM)은 각각 0.03°와 1.258 keV 였다.

### 2. 두께 변화 다층박막거울

다층박막거울의 최소 두께부터 최대 두께를 균일한 간격으로 나눈 두께 변화 다층박막거울을 고려하였다. 두께주기를 제외하고는 균일 다층박막거울의 설계인자를 그대로 적용하였다. 입사각도 0.5°에서 최대 반사율을 나타내도록 두께주기의 범위를 조절하여 최소 및 최대 두께주기를 각각 3.9 nm와 4.4 nm로 하였다.

각도와 에너지에 따른 반사율의 그래프를 Fig. 2에 나타내었다. 피크 반사율은 77.89%로 감소하고 17.5 keV에서의 반사율은 피크 반사율 보다 낮은 70.77%를 보였다. 두께주기의 변화로 피크의 위치가 낮은 에너지 방향으로 소폭 이동하였다. 반면 반치폭은 증가하여 각도 및 에너지 반치폭은 각각 0.038°와 1.468 keV였다. 만약 두께주기의 최소 및 최대 두께를 3.575 nm 및 4.475 nm로 조정하면 각도 및 에너지에 대한 반치폭이 0.043°와 1.636 keV로 증가한다.

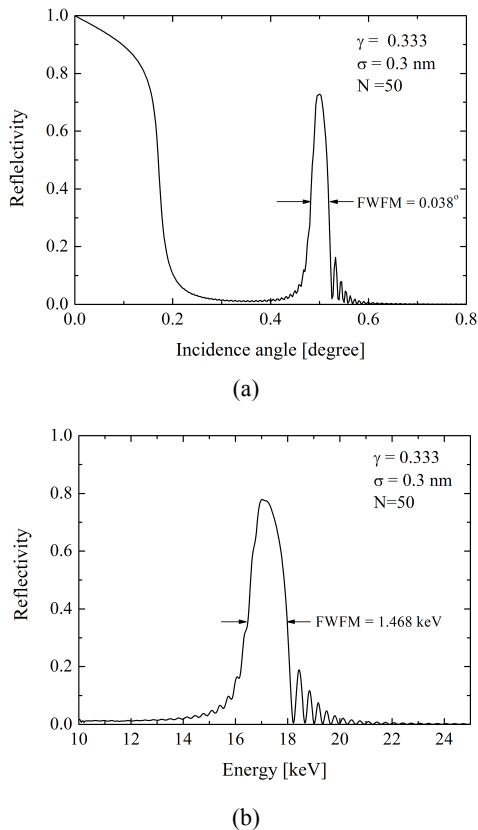


Fig. 2. Reflectivity as function of angle (a) and energy (b) for an depth-graded multilayer mirror.

### 3. 두께 변화 다층박막거울의 계면 확산

W-Si 계면과, Si-W 계면의 특성 차이로 인해 비대칭성 확산이 발생한다. 계면의 상호확산 영향을 Eq. 1을 이용하여 조사하였다. 두께 변화 다층박막거울의 설계 인자는 균일 다층박막과 동일하고 최소 및 최대 두께주기를 3.9 nm와 4.4 nm로 고정하였다.

규소의 경우 밀도가 낮기 때문에 계면에서의 표면 거칠기에 해당하는 만큼의 확산이 이루어진다고 가정할 때를 규소의 확산비(Diffusion Ratio of Si)를 1로 두었다. 확산비가 1보다 작다는 것은 계면에서의 거칠기보다 확산이 적게 되었다는 것을 의미하고 1보다 크다는 것은 계면에서 표면 거칠기보다 깊이 확산되었다는 것을 의미한다. 텅스텐의 경우는 규소보다 밀도가 매우 크기 때문에 확산 정도가 더 크다. 규소에 대한 텅스텐의 확산에 대한 영향도 같이 고려하여 Fig. 3에 나타내었다. 확산비가 1보다 작을 때는 반사율의 저하가 상대적으로 낮았으나 텅스텐과 규소의 확산비가 2인 경우 규소 확산비가 증가할수록 매우 빠른 속도로 반사율의 저하가 발생하였다. 텅스텐과 규소의 확산비가 더 크게 증가할수록 반사율의 감소는 매우 빠르다. 예를 들어 규소의 확산비가 2이고 텅스텐과 규소의 확산비가 2인 경우는 텅스텐과 규소 확산비가 1인 경우에 비해 반사율이 19.7% 나빠지게 된다.

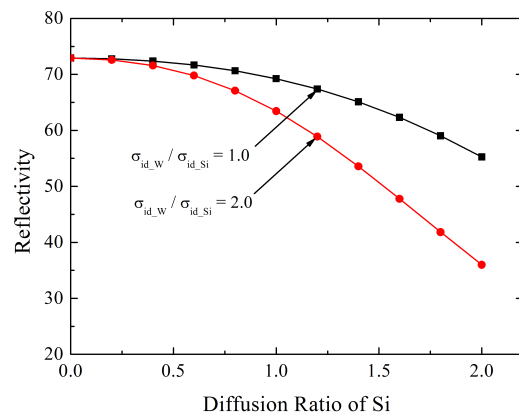


Fig. 3. Degradation of reflectivity by the inter-diffusion of W and Si on each interface.

#### IV. DISCUSSION

다층박막거울을 설계할 때의 이론적인 반사율과 실제 제작된 다층박막거울의 측정 반사율과는 차이가 발생한다. 설계 시에 제작과정에서 발생하는 오차 요인들을 고려하지 않을 때 그 차이는 더욱 더 증가한다.

텅스텐과 규소를 나노미터 두께로 증착하기 위해서 이온빔(Ion Beam)이나 마그네트론(Magnetron) 스퍼터링(Sputtering) 방식이 많이 사용되는데 이들 입자의 운동에너지가 서로 상이하기 때문에 확산 정도도 다르게 된다. 증원소(W)의 운동에너지가 크기 때문에 경원소(Si)가 적층된 박막 위에 적층될 때(W-Si Interface)는 확산이 증가하게 된다. 이러한 것을 반영하여 Fig. 3에 확산비가 2.0까지 차이가 나도록 결과를 나타내었다. 반사율의 저하가 매우 크기 때문에 제작 공정에서 계면 확산을 줄일 수 있는 방안이 강구되어야 할 것이다.

나노미터 두께의 박막을 정밀하게 제어하는 것은 매우 어려운 일이다. 적층 과정에서 두께의 변화는 설계된 입사각도 또는 피크 에너지에 영향을 준다. 박막의 두께가 동일하게 일정한 양 만큼 증가하거나 감소하면 입사각도 또는 피크 에너지의 위치가 평행이동하게 된다. 반면 무작위(Random)적으로 두께의 변화가 발생하면 설계된 각도 및 에너지의 위치에는 거의 변화가 없지만 무작위 정도가 심해지면 반사율이 저하된다.

두께 변화 다층박막거울은 천체우주물리의 경엑스선 망원경에서 넓은 에너지 영역의 엑스선을 검출하기 위한 용도로 제안되었다. 본 연구는 mamog라피(Mammography)에 사용되고 있는 몰리브덴의 특성엑스선인 17.5 keV에 중점을 두고 설계한 것이다. 최근에는 mamog라피에서 텅스텐 양극의 엑스선관이 많이 채용되고 있기 때문에 깊이 변화 다층박막거울을 이용하면 엑스선의 에너지는 17.5 keV 근방을 획득하면서 광량을 증가시킬 수 있는 방법으로 적용이 가능할 것이다.

#### IV. CONCLUSIONS

두께 변화 다층박막거울은 상대적으로 넓은 각

도 또는 에너지 분포를 갖는 광원에 효과적이지만 균일 다층박막보다 반사율의 저하가 발생하는 단점이 있다. 텅스텐과 규소의 밀도차에 의한 상호 확산으로 반사율의 저하가 발생할 수 있다는 것을 확인하였고 확산의 증가에 따라 반사율이 빠르게 감소하였다. 이론적인 반사율에 가까운 측정 반사율을 획득하기 위해서는 계면의 확산을 최소화 하도록 제작 공정을 최적화 할 필요가 있다.

#### Acknowledgement

본 연구는 2012년도 대구가톨릭대학교 교내연구비 지원에 의한 것임.

#### Reference

- [1] E. Spiller, *Soft X-ray Optics*, Washington, SPIE OPTICAL ENGINEERING PRESS, 1994.
- [2] T. W. Barbee Jr, "Multilayers for X-ray Optics," Proceedings of SPIE, Vol. 563, pp. 5-28, 1985.
- [3] J. Als-Nielsen D. McMorro, *Elements of modern X-ray physics*, West Sussex, John Wiley & sons, 2001.
- [4] 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, p. 2571-2577, 2009.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] L. Nevot, P. Croce, "Characterization of surface by grazing x-ray reflection: application to the study of polishing of some silicate glasses," Revue de Physique Applique, Vol. 15, No. 3, pp. 761-779, 1980.
- [8] D. Attwood, *SOFT X-RAYS AND EXTREME ULTRA VIOLET RADIATION: Principles and Applications*, Cambridge, Cambridge University Press, 1999.
- [9] E. Spiller, A. E. Rosenbluth, "Determination of thickness errors and boundary roughness from the measur

ed performance of a multilayer coating," *Optical Engineering*, Vol. 25, No. 8, pp. 2589-54, 1986.

- [10] E. Spiller, "Characterization of multilayer coating by X-ray reflection," *Revue de Physique Appliquee*, Vol. 23, No. 10, pp. 1687-1700, 1988.
- [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.

## 두께 변화 W/Si 다층박막거울의 계면 거칠기에 대한 반사율 분석

천권수\*

대구가톨릭대학교 방사선학과

### 요 약

다층박막거울은 높은 반사 효율로 엑스선을 단색화 하는데 많이 사용되고 있다. 반사되는 엑스선의 파장은 두께주기와 입사각도에 의해 결정되고, 반사율은 층수와 표면 거칠기에 크게 의존하게 된다. 다층박막거울은 중원소와 경원소가 번갈아 적층되어 있는 구조로 되어 있으며 각 계면에서의 거칠기를 고려해야 한다. 본 논문에서는 두께 변화 W/Si 다층박막거울에서 계면 거칠기와 상호확산을 동시에 고려하여 반사율을 조사하였다. 두께 변화 다층박막거울은 균일한 다층박막거울에 비해 반사율은 감소하나 각도 및 에너지 반치폭이 넓은 특징을 보였으며, 상호확산에 따른 반사율의 저하가 크게 증가하였다. 이론적인 설계값에 가까운 반사율을 획득하기 위해서는 다층박막거울을 제작 할 때 나타나는 상호확산의 효과를 고려하여 설계함으로써 목적에 부합하는 최적의 다층박막거울을 설계하고 제작할 수 있을 것이다.

중심단어: 엑스선광학소자, 다층박막거울, 반사율, 상호확산