

09.4;15.1

Многослойные рентгеновские зеркала в районе 100 eV на легированной сверхрешетке в *n*-Si на переходах рентгеновских термов

© А.А. Андронов, В.И. Позднякова

Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия
E-mail: andron@ipmras.ru, vera@ipmras.ruПоступило в Редакцию 17 апреля 2024 г.
В окончательной редакции 27 мая 2024 г.
Принято к публикации 28 мая 2024 г.

Проведены расчеты диэлектрической проницаемости в вырожденном *n*-Si на переходах рентгеновских термов. Продемонстрирована возможность создания многослойных рентгеновских зеркал на частотах вблизи таких переходов при периодическом легировании с коэффициентом отражения около 50% при температуре 77 К. Указано на возможность создания с помощью эффекта Штарка в мощном оптическом излучении динамических масок в таких многослойных рентгеновских зеркалах.

Ключевые слова: рентгеновское излучение, многослойные рентгеновские зеркала, рентгеновские термы.

DOI: 10.61011/PJTF.2024.18.58628.19959

Создание многослойных рентгеновских зеркал (МРЗ) является вызовом России для будущего российской микроэлектроники. В России передовые позиции здесь занимает команда наших коллег из Института физики микроструктур РАН (см. работы [1,2], ссылки в них, а также многочисленные доклады в трудах симпозиумов „Нанозифика и нанозлектроника“, проводимых на базе ИФМ РАН). Для дизайна МРЗ используются базы данных по рентгеновским характеристикам, в частности база данных [3]. Она содержит данные о материалах GaAs, Si, SiO₂ и использовалась в дизайне МРЗ в [1]. Мы используем эти данные для оценок, хотя, конечно, проблемы технологии всегда существуют и влияют на параметры МРЗ. Создаваемые сейчас МРЗ основаны на сращивании различных материалов, что часто вызывает трудности и в ряде случаев требует использования буфера между слоями. Основой МРЗ здесь являются тяжелые металлы, у которых существеннейший вклад в диэлектрическую проницаемость в рентгеновском диапазоне длин волн вносит нерезонансный плазменный вклад [4], а резонансный вклад термов [5] является дополнением (ср. с [1]). Такой подход позволяет выбирать толщины слоев под заданную частоту источника рентгеновского излучения. Для одного материала проблемы сращивания слоев нет, хотя частота здесь ограничена узкой резонансной областью переходов на терме. Но в легких материалах (к которым относится и кремний) резонансный вклад термов преобладает. Основную роль в создании МРЗ на переходах термов играет вырождение электронов в верхней зоне, где край распределения Ферми является слабым (логарифмическим) резонансом.

Целью настоящей работы является демонстрация возможности реализации МРЗ с неплохим коэффициентом отражения на переходе рентгеновского терма, а так-

же стимулирование экспериментальных исследований, включая динамические маски для таких МРЗ.

Энергетический спектр кремния состоит из глубоких почти дискретных уровней *K*, *L* и *M* и верхних зон. Мы рассматриваем переход с уровня *L* (который слабо расщеплен) в электронные состояния зоны проводимости — *X*-долины, которых шесть. Масса плотности состояний в долинах $m_d = 0.32m_0$, масса проводимости $m_c = 0.26m_0$, где m_0 — масса свободного электрона. Анизотропию долин мы не учитываем. На рис. 1 приведен спектр пропускания кремния в окрестности частоты перехода на терме (около 100 eV), построенный по данным [3]. Если записать диэлектрическую проницаемость как $\varepsilon = 1 + \Delta\varepsilon$, где $\Delta\varepsilon = \Delta\varepsilon_1 - i\Delta\varepsilon_2$, то

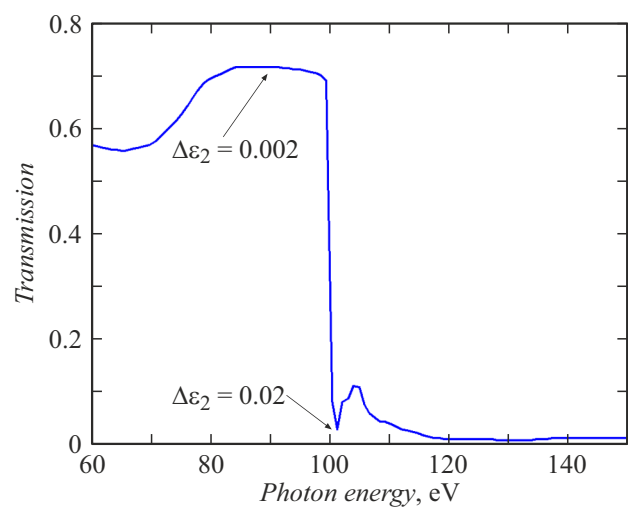


Рис. 1. Пропускание пластины кремния толщиной $0.2\ \mu\text{m}$ [3]. Указаны значения мнимой части добавки к единице диэлектрической проницаемости $\Delta\varepsilon_2$.

можно видеть, что при 100 eV переход включается, что приводит к росту поглощения и появлению мнимой части диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon_2$. Как следует из данных [3], $\Delta\epsilon_2$ составляет до перехода на терме 0.002, а в пике 0.02. Действительная часть диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon_1$ отрицательна (плазменная), но падает до величины меньше 0.001 при приближении к области энергии терма 100 eV, о которой пойдет речь.

Выражение для добавки $\Delta\epsilon$ в слабом поле $E \propto \exp(i\omega t)$ [6] можно переписать в виде, используемом в физике лазеров, с разностью населенностей уровней и положительной силой осцилляторов f_{ij}^0 . В кремнии сумма по уровням — это сумма по волновым векторам k блоховских функций, а для однородного электрического поля E сила осцилляторов имеет дельта-функцию по k — закон сохранения импульса. В результате $\Delta\epsilon$ для кремния выглядит следующим образом:

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon_1 - i\Delta\epsilon_2 = 2 \cdot 6 \frac{4\pi e^2}{m_c(2\pi)^3} \int d^3k \sum_{ij} (n_i(k) - n_j(k)) \frac{(f_{ij}^0)^+}{\omega_{ij}^2(k) - \omega^2 + i\nu\omega}. \quad (1)$$

Здесь множитель 2 — учет спина, 6 — число X -долин, которые мы рассматриваем отдельно, сумма по k заменена интегралом, $n_i(k)$ и $n_j(k)$ — числа заполнения зон, $(f_{ij}^0)^+$ — положительная сила осцилляторов, ν — уширение уровней, которое может отражать и неполное вырождение в верхней зоне. Это выражение описывает резонансный вклад на частоте переходов терма и нерезонансный вклад. Нерезонансный вклад можно приближенно считать плазменным ($\Delta\epsilon \propto 1/(-\omega^2 + i\nu\omega)$) только для тех членов в (1), для которых $\omega_{ij}^2(k) \ll \omega^2$. Фактически это означает, что энергия нижнего уровня перехода E_l меньше кванта частоты ω : $\hbar\omega > E_l$ [4], так как энергия уровней $E_l \propto (Z/n)^2$ (n — номер уровня) и энергия верхних уровней уменьшается как $1/n^2$. У кремния заряд ядра $Z = 14$ и энергия K -уровня $E_0 > 100$ eV, т.е. для перехода с K -уровня вклад в $\Delta\epsilon_1$ положительный. Для кремния плазменный вклад возникает при нерезонансных переходах с уровня L и при переходах с частично заполненного уровня M .

Для резонансного вклада в (1) берем только один член, где нижний уровень — это L -уровень, который будем считать единственным и дискретным с энергией E_L . Верхний уровень (зону) считаем параболическим с эффективными массами плотности состояний m_d и проводимости m_c . Тогда резонансное $\Delta\epsilon$ имеет вид

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon_1 - i\Delta\epsilon_2 = 2 \cdot 6 \frac{4\pi e^2}{m_c(2\pi)^3} \int d^3k (n_L(k) - n_B(k)) \times \frac{(f_{LB}^0)^+}{\omega_{LB}^2(k) - \omega^2 + i\nu\omega}. \quad (2)$$

Здесь k отсчитывается от дна X -долины,

$$\omega_{LB}(k) = \frac{E_b^0 - E_L + (\hbar k)^2/(2m_d)}{\hbar} = \omega_0 + \frac{\hbar k^2}{2m_d}.$$

Кремний можно легировать донорами до концентрации N около 10^{21} cm^{-3} . Но концентрация располагается в шести долинах.

Проинтегрируем $\Delta\epsilon$ в (2) по телесному углу в k -области, вынесем $(f_{LB}^0)^+$ за интеграл, обозначив его среднее как f_0 , и введем переменные $x = k/k_B$, $\Omega = \omega/\omega_0$, $\gamma = [(\hbar k_B)^2]/\hbar\omega_0$, $\mu = \nu/\omega_0$, где k_B — это граница зоны Бриллюэна. Теперь в предположении, что есть полное вырождение в зонах (уровнях), $n_L(k) = 1$ при всех k , а $n_B(k) = 1$ при $k < k_F$. Поскольку в (2) входит разность $n_L(k) - n_B(k)$, нижняя граница интегрирования по k равна k_F . Обозначив $\chi = k_F/k_B$, имеем

$$\Delta\epsilon = \Delta\epsilon_1 - i\Delta\epsilon_2 = \Delta\Phi(\Omega, \chi, \mu), \quad (3)$$

$$\Delta = \frac{2 \cdot 6 (4\pi e)^2 k_B^3 f_0}{(2\pi)^3 m\omega_0^2}, \quad (4)$$

$$\Phi(\Omega, \chi, \mu) = \int_{\chi}^1 \frac{x^2 dx}{(1 + \gamma x^2)^2 - \Omega^2 - i\Omega\mu}. \quad (5)$$

Здесь $\gamma = 0.036$, $\Phi(\Omega, \chi, \mu)$ для различных χ и μ приведены на рис. 2 и 3. Для энергии 100 eV $\Delta = 0.06f_0$, $\max(\text{Im}\Phi) = 19$ и $\max(\Delta\epsilon_2) = 1.2f_0$. Согласно [3], $\max(\Delta\epsilon_2) = 0.02$, откуда получается $f_0 \sim 0.018$. Так как долин шесть, энергия Ферми в каждой долине $E_F = \hbar^2/(2m(N\pi^2/2)^{2/3})$, где N — полная концентрация. Имеем для $N = 10^{20}$ cm^{-3} , $E_F = 0.065$ eV, $k_F = 8.22 \cdot 10^6$ cm^{-1} $\chi = 0.143$ и для $N = 10^{21}$ cm^{-3} , $E_F = 0.14$ eV, $k_F = 1.77 \cdot 10^7$ cm^{-1} $\chi = 0.3$. Для вырождения нужно, чтобы выполнялось условие $E_F \gg kT$. Для азота $kT = 0.007$ eV, так что формулы (3)–(5) работают при $T = 77$ K и $N = 10^{20}$ cm^{-3} .

Рассматриваемые МРЗ состоят из слоев одинаковой толщины в четверть длины волны нелегированного ($\chi = 0$ ($\Delta\epsilon_n$)) и легированного ($\chi = 0.3$ или 0.2 ($\Delta\epsilon_l$)) кремния с резкими границами. Для оценки коэффициента отражения R МРЗ находим первую гармонику A_1 периода $\Delta\epsilon$ с разностью $\delta\epsilon$ в слоях. Обозначив эту разность как $\delta\epsilon = \Delta\epsilon_n - \Delta\epsilon_l$, находим гармонику $A_1 = \delta\epsilon/\pi$. Наше рассмотрение является мотивационным для привлечения экспериментальных исследований, поэтому проведем самые простые оценки коэффициента отражения предложенных МРЗ. Сначала находим длину поглощения L_d (по амплитуде волны рентгеновского излучения) из коэффициента поглощения $\zeta = \Delta\epsilon_2 k/2 = 1/L_d$. Здесь $\Delta\epsilon_2$ складывается как из нерезонансной величины $(\Delta\epsilon_2)_n$ (рис. 1), так и из $\Delta\epsilon_2$, возникающей из $\delta\epsilon$, поскольку $\delta\epsilon$ может зависеть и от $\Delta\epsilon_2$. Заметим, что вклад в L_d от такого $\Delta\epsilon_2$ нужно разделить на 4 (а не на 2, как выше в выражении для ζ), так как вклад происходит от половины периода МРЗ. Далее находим (методом возмущения по A_1) коэффициент отражения R на толщине МРЗ, равной L_d , считая, что амплитуда падающей волны на L_d не меняется: $R = kL_d\delta\epsilon/(2\pi)$. Найденные таким путем значения R представлены в

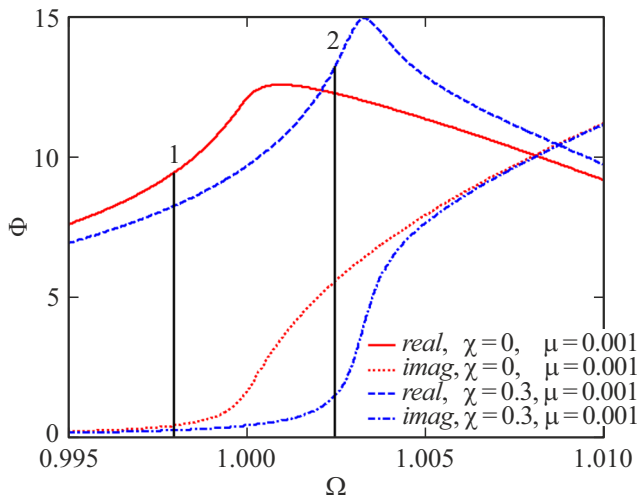


Рис. 2. Безразмерный коэффициент Φ в добавке для диэлектрической проницаемости: случай предельно легированного кремния с $N \approx 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ($\chi = 0.3$) с узким уширением ($\mu = 0.001$). Линиями с цифрами 1 и 2 отмечены безразмерные частоты Ω , где оценен коэффициент отражения R : $R_1 \approx 0.35$, $R_2 \approx 0.4$.

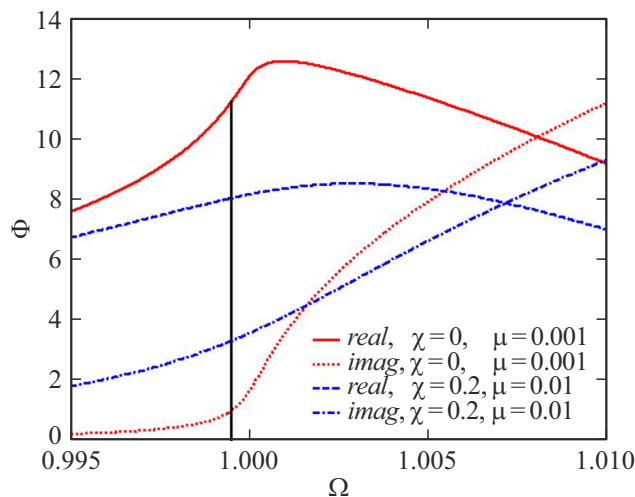


Рис. 3. Безразмерный коэффициент Φ в добавке для диэлектрической проницаемости: случай легированного кремния с $N \approx 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ($\chi = 0.2$) с увеличенным уширением ($\mu = 0.01$). Линией отмечена безразмерная частота Ω , где оценен коэффициент отражения $R \sim 0.4$ предлагаемого МРЗ.

подписях к рис. 2 и 3 вместе с выбранными частотами МРЗ.

На рис. 2 представлен случай предельно легированного кремния с $N \approx 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ($\chi = 0.3$) с узким уширением ($\mu = 0.001$). Здесь в области, где $\Delta\epsilon_2 = 0$, разность Φ в максимуме равна 2–2.5. Это дает значение $\delta\epsilon \approx 2.5 \cdot 10^{-3}$, а величина L_d , найденная из потерь вне терма, составляет $2 \mu\text{m}$. Максимальное значение для R здесь может быть около 0.35. Для частоты, где $\Delta\epsilon_2 \neq 0$ в нелегированном слое, а в леги-

рованном $\Delta\epsilon_2 = 0$ (рис. 2, частота 2), $\delta\epsilon = \delta\epsilon_1 + i\delta\epsilon_2$, $\delta\epsilon_1 = (\Delta\epsilon_1)_n - (\Delta\epsilon_1)_l$, а $\delta\epsilon_2 = (\Delta\epsilon_2)_l$ (здесь второй индекс соответствует слою периода). На рис. 2 для частоты 2 разность Φ в максимуме для $\delta\epsilon_1$ равна 2.5, а для $\delta\epsilon_2$ — около 6, так что $|\delta\epsilon| \approx 6.5 \cdot 10^{-3}$. Здесь длина поглощения $L_d = ((\Delta\epsilon_{2n} + \delta\epsilon_2/2)k/2)^{-1} = 0.8 \mu\text{m}$ и $R \approx 0.4$. Эти оценки значения R могут быть больше, если нерезонансное поглощение заметно падает при $T = 77 \text{ K}$.

На рис. 3 представлен случай легированного кремния с $N \approx 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ ($\chi = 0.2$) с увеличенным уширением ($\mu = 0.01$). Для $\Omega = 0.999$ разность Φ в максимуме $\delta\epsilon_1$ равна 4, а для $\delta\epsilon_2$ — около 2, так что $|\delta\epsilon| \approx 6.5 \cdot 10^{-3}$. Здесь длина поглощения $L_d \approx 1 \mu\text{m}$ и $R \approx 0.4$. Эта оценка R также может быть больше при $T = 77 \text{ K}$.

Итак, показана возможность создания МРЗ на легированной сверхрешетке в *n*-Si вблизи переходов на частотах рентгеновского терма на длинах волн около 12 nm . Расчеты показывают возможность достижения коэффициента отражения до 40% в сверхрешетке из ~ 200 – 400 периодов в 6 nm со слоями нелегированного и легированного кремния. Отмечено, что целесообразно охлаждение до 77 K , что может еще увеличить коэффициент отражения. Ширина спектра, где оценки работают, E_R составляет меньше 1 eV . В качестве оправдания отметим, что бывают и узкие по энергии источники рентгеновского излучения, и спектр можно (нужно) сужать для неухудшения параметров рентгеновской оптики, которой немало в установках по созданию чипов. С другой стороны, в узком рентгеновском спектре, где работает предлагаемое МРЗ, возможно использовать динамические маски, созданные импульсным оптическим излучением, изменяющим электронный спектр за счет высокочастотного (оптического) эффекта Штарка, включающим области МРЗ на время излучения импульса рентгеновского излучения. Характерным параметром, определяющим сдвиг спектра эффектом Штарка, является энергия осциллирующих электронов в оптическом поле $W = (e\Xi)^2/(2m\omega^2)$, где Ξ — амплитуда оптического поля [7]. Для излучения с длиной волны $1 \mu\text{m}$ и мощностью 1 MW , сфокусированного на $3 \mu\text{m}^2$, $W \gg E_R$.

Это условие и позволяет использовать динамические маски длительностью несколько наносекунд, т.е. с энергией меньше 1 mJ , но можно использовать и меньше, так как спектр отражения узкий. Для рассматриваемого МРЗ с $\chi = 0.2$ плазменная частота порядка частоты излучения с длиной волны $1 \mu\text{m}$, поэтому скин-слоем больше L_d . Такие оптические маски на основе микроэлектромеханических систем (МЭМС) могли бы служить альтернативой рентгеновским маскам на основе МЭМС.

Конечно, реальные перспективы использования предложенных МРЗ и динамических масок еще требуют анализа (в частности, по источнику рентгеновского излучения). Но возможность создания с помощью одной технологии и чипов, и зеркал выглядит заманчивой.

Безусловно, нужно растить и измерять в рентгеновской области излучения такие МРЗ, начав с тестовых сверхрешеток с малым числом периодов, где можно исследовать и эффект Штарка.

Благодарности

Авторы благодарят А.А. Фраермана, Н.И. Чхало и В.В. Курина за обсуждения.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках госконтракта № FFUF-2024-0020.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] М.М. Барышева, А.Е. Пестов, Н.Н. Салашченко, М.Н. Торопов, Н.И. Чхало, УФН, **182** (7), 727 (2012). DOI: 10.3367/UFNr.0182.201207c.0727 [M.M. Barysheva, A.E. Pestov, N.N. Salashchenko, M.N. Toropov, N.I. Chkhalo, Phys. Usp., **55** (7), 681 (2012). DOI: 10.3367/UFNe.0182.201207c.0727].
- [2] В.Н. Полковников, Н.Н. Салашченко, М.В. Свечников, Н.И. Чхало, УФН, **190** (1), 92 (2020). DOI: 10.3367/UFNr.2019.05.038623 [V.N. Polkovnikov, N.N. Salashchenko, M.V. Svechnikov, N.I. Chkhalo, Phys. Usp., **63** (1), 83 (2020). DOI: 10.3367/UFNe.2019.05.038623].
- [3] https://henke.lbl.gov/optical_constants/
- [4] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред* (Наука, М., 1992), § 124. [L.D. Landau, E.M. Lifshitz, L.P. Pitaevskii, *Electrodynamics of continuous media* (Butterworth-Heinemann, 1984), vol. 8, § 124].
- [5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, М., 1974), § 74. [L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum mechanics: non-relativistic theory* (Pergamon Press, 1977), vol. 3, § 74].
- [6] Д.И. Блохинцев, *Основы квантовой механики* (Наука, М., 1978), § 87, 88. [D.I. Blokhintsev, *Quantum mechanics* (Springer Science & Business Media, 2012). p. 284–297].
- [7] Н.Б. Делоне, В.П. Крайнов, УФН, **169** (7), 753 (1999). DOI: 10.3367/UFNr.0169.199907c.0753 [N.B. Delone, V.P. Krainov, Phys. Usp., **42** (7), 669 (1999). DOI: 10.1070/PU1999v042n07ABEH000557].