

## Конструирование многослойных рентгеновских зеркал: теоретическое прогнозирование межфазовых реакций и продуктов их взаимодействия

Вопрос о возможности достижения теоретических значений пикового коэффициента отражения многослойных рентгеновских зеркал (МРЗ) остается открытым по сей день. Контроль и управление отражательной способностью и селективностью многослойных рентгеновских зеркал неразрывно связаны с проблемой качества “интерфейсов” и с толщинами периодов МРЗ. Введение тонких барьерных слоев на межфазовой границе способствует изменению ее состава и протяженности, однако выбор материалов этих слоев на текущий момент является произвольным. Нами был предложен подход к выбору материалов барьерного слоя на основе теоретического анализа возможных межфазовых реакций и продуктов их взаимодействия с использованием программного обеспечения Materials Project 25 с расчетом полной энергии соединений при использовании теории функционала плотности, реализованной в Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP). Изучение МРЗ (Mo/Be, W/Be, Cr/Be) с различными барьерными слоями (B<sub>4</sub>C, Be, Si, C) позволило выявить закономерности формирования продуктов реакции с учетом энергии их взаимодействия и сформулировать дополнительные требования к зеркалам при их конструировании. В частности показано, что введение барьерного слоя B<sub>4</sub>C на границе Be-на-тяжелом металле (ТМ) приводит к формированию боридов ТМ (Mo, W, Cr), подавлению формирования бериллида ТМBe<sub>12</sub>, и, как следствие, уплотнению поверхностного слоя ТМ, что, в свою очередь, увеличивает отражающую способность МРЗ. Выполненная коллективом группы работа показала, что система Si/[Mo/B<sub>4</sub>C/Be/Si] представляет собой оптимальную конфигурацию зеркала и может быть успешно использована для литографии в области 11 нм (рис.2). Также было установлено, что толщина слоя ТМ в зеркалах на основе бериллия может быть предельно маленькой (слои W с толщиной 0.6 нм наиболее эффективны) и определяется формированием устойчивого, ограниченной толщины слоя бериллида ТМBe<sub>2</sub>. Согласно проведенным исследованиям (рис.1), пленки бериллия должны быть достаточной толщины, чтобы обеспечить формирование пленки чистого бериллия, но при этом не слишком толстыми, чтобы минимизировать образование вклада бериллида ТМBe<sub>12</sub>. Используя сформулированные требования, было синтезировано МРЗ Si/[W(1,08 нм)/Be(2,05 нм)], отражательная способность которого возросла до 39% (по сравнению с 21%) на длине волны 0,989 нм. Введение барьерного слоя будет способствовать дальнейшему повышению отражающей способности МРЗ. Предложенный коллективом теоретический подход к выбору материала барьерного слоя в сочетании с установленными критериями выбора толщин слоев будет способствовать оптимизации технологии изготовления многослойных рентгеновских зеркал на основе бериллия. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Грант РНФ 19-72-20125) и опубликована в журналах *Applied Surface Science* (2020), doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147636 и *J. Phys. Chem. C* (2020) doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c0724.

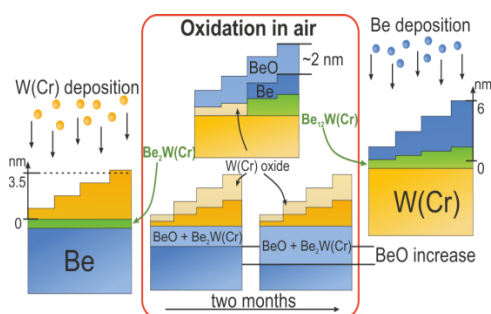


Рисунок 1

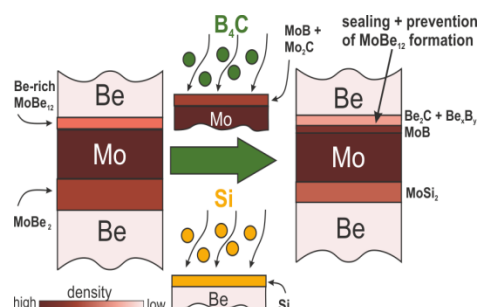


Рисунок 2

**Авторы:** научная группа д. ф.-м. н., профессора Е.О. Филатовой, кафедра электроники твердого тела.