

# Формирование межфазовых границ в многослойных рентгеновских зеркалах: теоретическое прогнозирование межфазовых реакций и экспериментальные данные

**Е.О. Филатова**

Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, д. 1, Петродворец, Санкт-Петербург, 198504

e.filatova@spbu.ru

Предложен теоретический подход для предсказания соединений, образующихся на межфазовой границе при использовании того или иного барьерного слоя. Анализируется влияние материала барьерного слоя, введенного на межфазовой границе на формирование возможных соединений с учетом энтальпии их взаимодействия и, как следствие, стабильность рассматриваемого интерфейса. Обсуждаются диаграммы Вагнера, подтверждающие определяющую роль энергии релаксации в сдвиге энергии связи деталей, описывающих образованный суммарный бериллид. Установлена хорошая корреляция теоретических и экспериментальных данных.

## Введение

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”. Продвижение использования МРЗ в коротковолновую область спектра еще более усугубляет эту проблему. Введение тонких буферных слоев на межфазовой границе способствует изменению ее состава и протяженности. На сегодняшний день существует ряд подходов, позволяющих получать информацию о межслоевых областях, среди которых особенно выделяется метод рентгеновского отражения: на основе аппроксимации кривых отражения получают информацию, как о составе и протяженности, так и о шероховатости межслоевой области. Главным ограничением этого метода является необходимость моделирования измеренных кривых отражения, т.е. фактически решение обратной задачи рефлектометрии. В то же время, фотоэлектронный спектр отображает распределение заполненных электронных состояний исследуемого вещества, а его анализ позволяет получать информацию об электронной структуре, как валентной зоны, так и остовных уровней, что позволяет изучать как состав, так и протяженность скрытых межфазовых границ. Анализ характера химического сдвига внутренних уровней позволяет выявлять различные

химические состояния атомов различных слоев. Проведение теоретического анализа возможных межфазовых реакций и продуктов взаимодействия помогает спрогнозировать состав межслоевой области исследуемой системы. Моделирование возможного состава межслоевой области на текущем этапе применения данного подхода рассматривается нами как способ качественного понимания возможных атомных взаимодействий.

## Результаты и обсуждение

С целью более эффективного подбора материалов барьерных слоев был предложен теоретический подход для предсказания соединений, образующихся на межфазовой границе при использовании того или иного барьерного слоя. Детальный теоретический анализ возможных межфазовых реакций и продуктов их взаимодействия проводился с использованием энергии реакций, рассчитанной с использованием программного обеспечения Materials Project с расчетом полной энергии соединений при использовании теории функционала плотности, реализованной в Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP). Анализировались результаты теоретического прогнозирования совместно с измерениями, проведенными методом фотоэлектронной спектроскопии для МРЗ (Mo/Si, Mo/Be, W/Be, Cr/Be). Также анализировалось влияние материала барьерного слоя (B<sub>4</sub>C, Be, Si, C), введенного на межфазовой границе на формирования возможных соединений с учетом энтальпии их

взаимодействия и, как следствие, стабильность рассматриваемого интерфейса.

Результаты, полученные в рамках предложенных моделей, сопоставлялись с экспериментальными данными, полученными в условиях высокого энергетического разрешения. Установлена хорошая корреляция теоретических и экспериментальных данных.

Также определенное внимание уделено анализу закономерности выявленной при анализе фотоэлектронных спектров тяжелых металлов в зеркалах на основе бериллия. Нами было установлено, что в фотоэлектронных спектрах тяжелых металлов (Mo 3d, W 4f и Cr 2p) сдвиг энергии связи детали, описывающей образованный суммарный бериллид, обусловлен главным образом энергией релаксации; в этом случае перенос заряда незначителен [1-3].

Экспериментально установленный факт подтверждается построением диаграмм Вагнера на основе оже-линий.

### Благодарности

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №19-72-20125.

### Литература

1. Filatova Elena O. et. al. // J. Phys. Chem. C. 124, 22601-22609 (2020).
2. Sakhonenkov Sergei S., Filatova Elena O. // Appl. Surface Sci. 534, 147636-43 (2020)
3. Filatova Elena O. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. (2020) DOI: 10.1039/d0cp05180b.