

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ КРИСТАЛЛОГРАФИИ ИМ. А.В. ШУБНИКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 535.312:537.531

На правах рукописи

Кожевников Игорь Викторович

**ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ ОТ НЕОДНОРОДНЫХ СЛОИСТЫХ
СРЕД**

Специальность 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Москва 2013

Содержание

Введение	6
Глава 1. Отражение рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей и границ раздела	18
1.1. Введение	18
1.2. Общие закономерности дифракции рентгеновского излучения от шероховатых сред	29
1.2.1. Амплитуда рассеяния. Оптическая теорема	29
1.2.2. Борновское приближение с искаженными волнами	33
1.2.3. Теория возмущений по высоте шероховатостей	35
1.2.4. Закон сохранения энергии	40
1.2.5. Сравнение различных подходов	45
1.2.6. О выборе теории и оптимальной длины волны для рентгеновского контроля шероховатостей	53
1.2.7. Дельта-коррелированные шероховатости	57
1.3. Применение теории возмущений для анализа дифракции рентгеновского излучения от шероховатых сред	61
1.3.1. Конформные шероховатости	61
1.3.2. Интегральный коэффициент отражения	65
1.3.3. Взаимосвязь каналов дифракции	69
1.3.4. Рассеяние рентгеновского излучения от шероховатой поверхности конечных размеров	83
1.3.5. Интерференционные эффекты в рассеянии от тонкой пленки	89
1.3.6. Интерференционные эффекты в рассеянии от многослойных структур	95
1.3.7. Уравнение переноса лучевой интенсивности	105
1.4. Рентгеновские исследования эволюции шероховатостей растущих и эродирующих поверхностей	113
1.4.1. Экспериментальное оборудование канала ВМ5 синхротрона ESRF для in-situ исследований эволюции шероховатостей	113
1.4.2. Исследования корреляции шероховатостей пленки и подложки	114
1.4.3. Анализ эволюции шероховатостей в рамках скэйлингового подхода	120
1.4.4. Влияние шероховатостей подложки на эволюцию роста пленки	125

1.4.5.	Методика корректного определения динамической экспоненты	130
1.4.6.	Эволюция шероховатости кремниевых подложек при ионном травлении	135
1.5.	Основные результаты главы 1	137
Глава 2.	Обратные задачи рентгеновской рефлектометрии	142
2.1.	Введение	142
2.2.	Реконструкция профиля диэлектрической проницаемости по измеренной кривой отражения	151
2.2.1.	Общие соображения	151
2.2.2.	Асимптотика коэффициента отражения	153
2.2.3.	Вычислительный алгоритм	157
2.2.4.	Модельные примеры восстановления профиля диэлектрической проницаемости	162
2.2.5.	О проблеме однозначности восстановления профиля диэлектрической проницаемости	169
2.2.6.	Экспериментальные примеры реконструкции профиля диэлектрической проницаемости	176
2.3.	Точное решение фазовой проблемы в in-situ рефлектометрии растущих пленок	183
2.3.1.	Вывод основного уравнения	183
2.3.2.	Анализ экспериментальных результатов	187
2.3.3.	Влияние шероховатостей на точность определения фазы	192
2.4.	Разработка самосогласованного модельно независимого подхода к исследованию трехмерной структуры пленочных покрытий	194
2.4.1.	Итерационная процедура	194
2.4.2.	Сравнительный анализ структуры вольфрамовых пленок после напыления, ионного травления и окисления	203
2.5.	О возможности определения профиля концентраций химических элементов по данным МР рефлектометрии	206
2.6.	Основные результаты главы 2	214
Глава 3.	Отражение рентгеновского излучения от аperiодических и ламеллярных многослойных структур	218
3.1.	Введение	218

3.2.	Коэффициент отражения рентгеновского излучения от широкополосных многослойных зеркал с монотонно изменяющимся периодом	228
3.3.	Обратная задача синтеза в теории градиентных многослойных зеркал	235
3.3.1.	Аналитическое решение задачи	235
3.3.2.	Широкополосные зеркала для каналов СИ	238
3.3.3.	Численное уточнение аналитического решения задачи синтеза	243
3.3.4.	Широкополосные зеркала для ЭУФ литографии	250
3.3.5.	Влияние технологических факторов на оптические свойства широкополосных многослойных зеркал	256
3.3.6.	Анализ экспериментальных результатов	262
3.3.7.	Широкополосные МИС с минимально возможным изменением толщины слоев	269
3.4.	Многослойные зеркала с максимальной интегральной эффективностью	276
3.4.1.	Конструирование зеркал с максимальной эффективностью на основе формализма Эйлера-Лагранжа	276
3.4.2.	Численное уточнение аналитического решения	282
3.4.3.	Упрощенные подходы к оптимизации зеркал с максимальной эффективностью	284
3.4.4.	О выборе материалов для многослойных зеркал с максимальной эффективностью	287
3.5.	Отражение МР излучения от ламеллярной многослойной структуры	292
3.5.1.	Основные уравнения метода связанных волн	292
3.5.2.	Численные расчеты эффективности дифракции от ЛМС	296
3.5.3.	Аналитическое решение для коэффициента отражения от одномодовой ЛМС	302
3.5.4.	Аналитическое решение для эффективности дифракции от одномодовой ЛМС	304
3.5.5.	Дифракция р-поляризованного излучения от ЛМС	307
3.5.6.	Дифракция МР излучения от неидеальных ЛМС.	309
3.5.7.	Анализ экспериментальных результатов.	318
3.6.	Основные результаты главы 3	323
	Основные результаты и выводы	327

Литература	330
Список публикаций автора по теме диссертации	350

Введение

Термин “рентгеновское излучение” (РИ) применяется сегодня к чрезвычайно широкому диапазону электромагнитных волн, простирающемуся от 0.01 нм до 30 нм. В соответствии с общепринятой терминологией, хотя и с некоторой долей условности, этот диапазон подразделяется на жесткий рентгеновский (ЖР, $\lambda \sim 0.01 - 0.3$ нм), мягкий рентгеновский (МР, $\lambda \sim 0.3 - 10$ нм) и экстремальный ультрафиолетовый (ЭУФ, $\lambda \sim 10 - 30$ нм).

В настоящее время рентгеновское излучение все шире применяется в научных исследованиях и современных технологиях. Причина заключается в особенностях взаимодействия рентгеновского излучения с веществом.

Энергия рентгеновских фотонов совпадает с энергией колебаний внутренних атомных электронов, благодаря чему рентгеновская спектроскопия наряду с оптической представляет собой важный метод изучения строения вещества. Наблюдение характеристических линий, возбуждаемых пучком электронов или фотонов, анализ углового и энергетического распределения фотоэлектронов, выбитых под воздействием РИ, а также исследования тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения или отражения лежат в основе современных чувствительных методов элементного и химического анализа твердых тел и поверхностей, которые широко применяются как в научных исследованиях, так и в промышленности [1–5].

В рентгеновском диапазоне лежит максимум интенсивности излучения горячей плазмы с температурой, превышающей 30 эВ. Поэтому рентгеновское излучение оказывается наиболее естественным источником информации о физических процессах, протекающих как в лабораторной, так и в космической плазме [6, 7].

Большими потенциальными возможностями обладает МР микроскопия, которая с точки зрения пространственного разрешения занимает промежуточное положение между оптической и электронной, но в отличие от последней позволяют проводить прямые неразрушающие исследования достаточно толстых образцов живых, влажных тканей и микроорганизмов [8, 9]. В свою очередь, ЖР излучение, обладая более высокой проникающей способностью, все шире применяется в томографических исследованиях для реконструкции трехмерной структуры биологических, кристаллических, полимерных и других объектов с микронным разрешением [10–12].

Длина волны рентгеновского излучения соответствует представлениям о минимальных размерах поверхностных шероховатостей и объемных дефектах. Поэтому значительное диффузное рассеяние возникает при отражении рентгеновского излучения от поверхности даже при использовании самых совершенных методов ее обработки. В результате, методы рентге-

новского рассеяния все шире применяются для исследования микрогеометрии поверхностей, пленочных покрытий и границ раздела [10, 13–15]. Одновременно продолжают совершенствоваться и методы малоуглового рассеяния РИ для исследования внутренней структуры вещества [16].

Наконец, уже в течение двух десятилетий ведутся работы по ЭУФ литографии, призванной в будущем по мере миниатюризации микросхем заменить УФ литографию. ЭУФ литография позволяет перенести (с уменьшением) изображение шаблона на пластину, обеспечивая нанометровый размер индивидуальных элементов микросхемы [17–19].

Таким образом, физика рентгеновского излучения смыкается сегодня как со многими научными дисциплинами, так и с новой технологией. Уровень ее развития существенным образом зависит от наличия мощных источников излучения и эффективных оптических устройств для управления им.

Основными источниками РИ долгое время оставались рентгеновские трубки, интенсивность которых крайне мала даже для ЖР излучения и катастрофически падает при переходе в МР диапазон. За последние 30 лет здесь произошли существенные сдвиги. Прежде всего, получили развитие рентгеновские исследования на синхротронных источниках третьего поколения, обладающих чрезвычайно высокой мощностью и яркостью рентгеновского излучения [20–22]. Затем появились и продолжают стремительно развиваться рентгеновские лазеры на свободных электронах [23, 24], не только превосходящие по своим параметрам (яркость и мощность излучения) синхротроны на несколько порядков величины, но и характеризующиеся длительностью отдельных импульсов в десятки фемтосекунд, что позволяет изучать различные быстро протекающие процессы в реальном времени [25]. Одновременно развивались компактные и мощные лабораторные источники МР и ЭУФ излучения на основе лазерной плазмы и различного вида пинчевых разрядов, включая когерентные источники (лазеры) этого диапазона длин волн [26].

Одновременно с развитием рентгеновских источников нового поколения быстро развивается и рентгеновская оптика. В первую очередь, благодаря совершенствованию изготовления сверхгладких поверхностей и тонкопленочных покрытий, стало возможным изготавливать многослойные рентгеновские зеркала, эффективно отражающих МР и ЭУФ излучение при нормальном падении. В свою очередь, зеркала нормального падения привели к созданию объективов с предельно малыми абберациями, что открывает совершенно новые возможности, например, в ЭУФ литографии, МР микроскопии и астрономии. Кроме того, многослойные зеркала широко и успешно применяются в спектроскопии, диагностике плазмы, анализе материалов и т.д. [27, 28].

Благодаря прогрессу в изготовлении сверхгладких поверхностей сложной формы методами глубокой полировки, алмазного точения и репликации продолжает совершенствоваться и оптика скользящего падения. Появились новые типы рентгенооптических элементов, основанных на многократных отражениях рентгеновского пучка: поликапиллярная оптика, зеркала с “шепчущими” модами и многофасеточные зеркала [29–31].

На основе достижений микролитографии развивается дифракционная оптика на основе свободновисящих зонных пластинок и систем преломляющих микролинз [32, 33]. Наиболее впечатляющие их применения - рентгеновская микроскопия и нанофокусировка пучков СИ.

Все это позволило еще в конце 80-х годов охарактеризовать современную ситуацию в рентгеновской оптике как ее возрождение [34] и даже революцию [35].

Исследования отражения РИ от слоисто-неоднородных сред играют особую роль в рентгеновской физике. Дело заключается в том, что большое число современных микро и нанотехнологий, используемых, например, в электронике, спинтронике, оптике, в значительной степени основывается на напылении пленочных и многослойных структур с толщиной отдельных слоев в единицы и даже доли нанометров. При такой толщине критическим фактором становится качество внутренней структуры пленок и границ разделов между ними (шероховатость, интерслои и т.д.). Дефекты структур даже ангстремного масштаба могут существенно ухудшить электрические или оптические параметры устройств и привести к исчезновению желаемых эффектов (например, квантово-размерных). Ясно, что в силу малой длины волны именно РИ является незаменимым инструментом для исследования и контроля внутренней структуры наноразмерных пленочных и многослойных покрытий.

Методы рентгеновской рефлектометрии начали широко применяться для решения подобных задач в 1980-х годах. Результаты исследований наглядно показали, с одной стороны, большие возможности рентгеновских методов, а с другой - ограниченную применимость в этом диапазоне длин волн теоретических подходов, разработанных первоначально в оптике, акустике и радиофизике. Среди интересных экспериментальных эффектов, которые не могли быть описаны в рамках широко используемого в то время приближения Кирхгофа [36], отметим обнаружения пика [37] и анти-пика [38] Ионеды, кажущееся увеличение среднеквадратичной высоты шероховатостей при уменьшении угла скольжения зондирующего пучка [39] и значительное превышение измеренного коэффициента отражения над рассчитанным по формуле Френеля при падении пучка вне области ПВО [40]. Тем самым, в 1980-х годах на повестку дня остро встал вопрос о необходимости разработки теории, которая адекватно описывала бы все особенности отражения и рассеяния РИ от слоисто-неоднородных шероховатых структур и могла бы служить основой для их исследований и контроля.

Более того, после появления мощных источников РИ появилась возможность для *in situ* исследований модификации внутренней структуры образцов при различных технологических воздействиях (напылении, травлении, окислении и т.д.). Ясно, что такие исследования позволяют получить несравненно больший объем информации об исследуемом объекте, но лишь при условии развития соответствующих методик ее извлечения из экспериментальных данных.

Далее, именно многослойные структуры обусловили в значительной степени быстрый прогресс в рентгеновской оптике в 80-х – 90-х годах прошлого века. В то же время, традиционные периодические многослойные зеркала характеризуются спектральной селективностью $\lambda/\Delta\lambda \sim 20 - 200$. Уже в начале 1990-х годов стало ясно, что для многих практических задач крайне желательно увеличить полосу отражения многослойных зеркал (зеркала для каналов синхротронного излучения (СИ) и ЭУФ литографии, зеркала Гёбеля для увеличения эффективности использования РИ точечных источников). Для других же, наоборот, следует увеличить спектральную селективность зеркала (рентгено-флуоресцентный анализ легких элементов). Ясно, что разработка и оптимизация параметров таких рентгенооптических устройств, основанных, как правило, на аперидических и ламеллярных многослойных структурах, подразумевает и разработку соответствующих теоретических подходов для описания отражения и дифракции РИ.

Отметим, что до последнего времени оптимизация аперидических и ламеллярных многослойных структур основывалась, как правило, на чисто компьютерных методах расчета (многомерной оптимизации с выбором той или иной целевой функции в случае аперидических зеркал или переборе огромного числа комбинаций параметров в случае ЛМС), недостатком которых является отсутствие ясного физического обоснования полученных результатов. В качестве иллюстрации отметим утверждение, сделанное авторами работы [41], что проблема дифракции РИ от ламеллярной многослойной структуры является настолько сложной, что невозможно найти аналитические критерии (правила) для оптимизации параметров структуры.

Таким образом, быстрое развитие рентгеновской физики за последние 30 лет и практическая необходимость в разработке перспективных и совершенствовании традиционных рентгеновских методов исследования вещества, а также разработке и создании новых рентгенооптических элементов для управления пучками РИ обуславливает **актуальность темы исследований**, проведенных в диссертации.

Целью диссертационной работы является развитие теории дифракции рентгенов-

ского излучения от одномерно-неоднородных шероховатых сред, имея в виду (а) разработку самосогласованного безмодельного подхода к исследованию трехмерной структуры слоисто-неоднородных сред на основе анализа угловых зависимостей коэффициента отражения и интенсивности рассеянного рентгеновского излучения и (б) решение обратной задачи синтеза (т.е. оптимизации конструкции) в теории аперiodических и ламеллярных многослойных структур применительно к ряду прикладных задач рентгеновской оптики, таких как управление пучками СИ, создание широкополосных зеркал для ЭУФ литографии и оптики Гёбеля, а также увеличения разрешения спектрально селективных элементов для рентгено-флуоресцентного анализа (РФА).

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Теоретически исследовать общие закономерности отражения и рассеяния рентгеновского излучения от шероховатых слоисто-неоднородных сред.
2. Разработать количественные методики извлечения информации из данных рентгеновских экспериментов без использования каких-либо моделей отражающей среды и, в частности, из *in-situ* измерений отражения и рассеяния рентгеновского излучения от растущих/эродирующих слоисто-неоднородных структур.
3. Разработать безмодельный подход к решению обратной задачи рентгеновской рефлектометрии, т.е. восстановлению распределения диэлектрической проницаемости по глубине на основе измеренной угловой зависимости коэффициента отражения.
4. Разработать подход к решению фазовой проблемы рентгеновской рефлектометрии, т.е. определению фазы амплитудного коэффициента отражения по измерениям его модуля.
5. Разработать итерационную процедуру для самосогласованного безмодельного подхода к исследованию трехмерной структуры слоисто-неоднородных сред, позволяющего одновременно определить как профиль диэлектрической проницаемости по глубине образца, так и статистические параметры шероховатости границ раздела.
6. Разработать аналитическую теорию отражения рентгеновского излучения от аперiodических многослойных структур. С помощью созданного программного обеспечения применить эту теорию к решению обратных задач в теории и практике синтеза широкополосных рентгеновских зеркал, предназначенных для управления пучками СИ, ЭУФ литографии и оптики Гёбеля.

7. Разработать аналитическую теорию дифракции рентгеновского излучения от ламеллярных многослойных структур, справедливую для любого числа слоев структуры и произвольной формы ламеллы, и оптимизировать их параметры для задач РФА.

Научная новизна

1. Впервые теория возмущений по высоте шероховатостей применена для анализа экспериментальных данных по рассеянию ЖР и МР излучения и холодных нейтронов. Обосновано применение этой теории для рентгеновского диапазона длин волн. Показано, что только теория возмущений позволяет определить параметры шероховатой поверхности (PSD-функцию) однозначным образом. Показано, что теория возмущений позволяет объяснить все основные особенности отражения и рассеяния рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей, такие как пик и анти-пик Ионеды, кажущееся увеличение высоты шероховатостей при предельно малых углах скольжения зондирующего пучка, переход от фактора Нево-Кроса (НК) к фактору Дебая-Валлера (ДВ) в выражении для коэффициента отражения при увеличении радиуса корреляции высот шероховатостей от нуля до бесконечности, а также поправки к фактору Нево-Кроса при малых, но конечных радиусах корреляции и, наконец, особенности коэффициента отражения при предельно малых углах скольжения зондирующего пучка, не описываемые ни фактором ДВ, ни фактором НК.
2. Разработаны методики определения скэйлинговых экспонент по in-situ измерениям рентгеновского рассеяния от растущих (эродирующих) поверхностей. Впервые в рентгеновском эксперименте наблюдался коллапс PSD-функций - одного из интересных предсказаний скэйлинговой теории роста (эрозии) пленок. Разработаны методики определения всех трех PSD-функций тонкой пленки из измерений набора индикатрис рентгеновского рассеяния, включая PSD-функцию внутренней границы раздела и кросс-корреляционную PSD-функцию.
3. Получено точное решение фазовой проблемы в in-situ рентгеновской рефлектометрии растущих слоистых структур. В отличие от существующих подходов, описанных в литературе, метод применим для поглощающих материалов и не требует дополнительных предположений о структуре объекта.
4. Разработан самосогласованный подход к исследованию 3D структуры тонкопленочных покрытий. Подход позволяет определить одновременно как профиль диэлектрической проницаемости по глубине, так и все три PSD-функции пленочных шероховатостей.

5. Разработан новый подход к обратной задаче синтеза широкополосных многослойных зеркал рентгеновского диапазона, основанный на комбинации аналитического и численного подходов. Проведен анализ конструкции и оптических свойств широкополосных многослойных зеркал применительно к задачам управления пучками СИ, широкоапертурной оптики нормального падения для ЭУФ литографии и увеличения эффективности использования излучения точечных источников (оптика Гёбеля).
6. Разработана аналитическая теория дифракции МР излучения от ламеллярных многослойных структур (ЛМС). Идентифицирован одномодовый режим работы ЛМС, при котором отсутствует связь между различными порядками дифракции. В результате коэффициент отражения от одномодовой ЛМС оказывается таким же, как у исходной многослойной структуры, а ширина пика отражения может быть сколь угодно мала.

Практическая ценность работы

1. Разработанные в диссертации подходы позволяют проводить количественные исследования 3D структуры слоистых покрытий без привлечения каких-либо априорных предположений о внутренней структуре объектов. Разработанные методы рентгеновского контроля были использованы для in-situ исследований процессов роста и ионного травления пленок ряда материалов, широко используемых в рентгеновской оптике и микроэлектронике. В некоторых случаях были определены нелинейные дифференциальные уравнения роста/эрозии, что открывает новые перспективы по численному моделированию этих процессов и нахождению оптимальных технологических условий роста/эрозии поверхностей, включая их сглаживание.
2. Разработанные подходы к конструированию широкополосных многослойных зеркал, основанные на комбинации аналитического и численного расчетов, позволяют оптимизировать конструкцию МИС для получения любого, даже очень сложного, спектрального или углового профиля кривой отражения, а также для получения максимального интегрального коэффициента отражения с учетом функции источника. Разработанные методы позволяют сконструировать широкополосные зеркала для самых разных практических приложений и, в частности, зеркала для управления пучками СИ, зеркала Гёбеля для увеличения эффективности использования излучения рентгеновских трубок и зеркала для высокоапертурной оптики в ЭУФ литографии. С помощью разработанного программного обеспечения были сконструированы (а затем и изготовлены)

широкополосные W/B₄C, W/Si, Ni/B₄C и Mo/Si зеркала для ЖР и МР диапазонов длин волн, проведен анализ экспериментальных данных и выработаны рекомендации по дальнейшему совершенствованию технологии изготовления широкополосных МИС.

3. Разработанное программное обеспечение (ПО), основанное на методе связанных волн, позволяет рассчитать и оптимизировать параметры ламеллярных многослойных структур с любым числом периодов МИС, произвольным распределением толщины слоев МИС по глубине и произвольной формой ламелл. Идентифицирован одномодовый режим работы ЛМС, который обеспечивает наивысшую эффективность (коэффициент отражения) ЛМС при сколь угодно большом ее спектральном (или угловом разрешении). С помощью разработанного ПО были сконструированы (а затем и изготовлены) W/Si ЛМС, предназначенные для использования в РФА легких элементов (от кремния до бора), оптимизированы их параметры, проведен анализ экспериментальных данных и выработаны рекомендации по дальнейшему совершенствованию технологии изготовления ЛМС.

Разработанные в диссертации методы и подходы уже в течение многих лет активно используются в Институте кристаллографии РАН, Физическом институте РАН, Всероссийском научно-исследовательском институте технической физики (РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск), НИИ физики СПбГУ, Европейском центре синхротронных исследований (Гренобль, Франция), Институте физики плазмы (Ньювихайн, Нидерланды), Университете Твенте (Энчедэй, Нидерланды), Институте прикладной оптики и точной механики (Йена, Германия), Университете Тонгжи (Шанхай, КНР), Европейском рентгеновском лазере на свободных электронах (Гамбург, Германия).

На защиту выносятся следующие положения:

1. Применение теории возмущений по высоте шероховатостей для исследования особенностей дифракции РИ от шероховатых слоисто-неоднородных сред и анализа экспериментальных данных по отражению и рассеянию РИ.
2. Методики определения скэйлинговых экспонент и PSD-функций границ раздела сред в in-situ исследованиях шероховатости растущих/эродирующих поверхностей.
3. Точное решение фазовой проблемы в in-situ рефлектометрии растущих слоистых структур.

4. Самосогласованный безмодельный подход к исследованию 3D структуры слоистых образцов.
5. Аналитическая теория отражения РИ от многослойных структур с монотонно изменяющимся периодом и основанный на ней подход к проблеме синтеза (конструированию) широкополосных рентгеновских зеркал.
6. Аналитическая теория отражения и дифракции РИ от ламеллярных многослойных структур, работающих в одномодовом режиме.

Личный вклад автора

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Идея о возможности применения теории возмущений по высоте шероховатостей для описания отражения РИ от шероховатых поверхностей и использования интегральной формы волнового уравнения для вывода формул теории возмущений была впервые высказана А.В. Виноградовым, в соавторстве с которым были написаны первые теоретические статьи на эту тему [А1-А4]. Постановка и разработка всех остальных задач и теоретических подходов проведена лично автором. Все программное обеспечение для расчетов разработано и написано лично автором. Модельные расчеты проведены или лично автором, или под его непосредственным руководством с помощью разработанных автором теоретических подходов и методов. Хотя сам автор не проводил рентгеновские измерения, он принимал непосредственное участие в постановке описанных в диссертации экспериментов, многие из которых были предложены и спланированы лично автором. Анализ результатов экспериментов проведен лично автором или под его непосредственным руководством на основе разработанных автором методик.

Экспериментальные кривые отражения и рассеяния, обсуждаемые и анализируемые в диссертации, были получены в ЖР диапазоне длин волн В.Е. Асадчиковым и Ю.С. Кривососовым (разделы 1.1 и 1.3.6), В.Е. Асадчиковым, Б.С. Роциным и Ю.О. Волковым (раздел 2.1 и 3.3.6), E. Ziegler, L. Peverini (разделы 1.4, 2.2.6, 2.3.2, 2.3.3, 2.4.2), а в МР диапазоне длин волн В.А. Слемзиным (раздел 1.1), Е.О. Филатовой и А.А. Соколовым (раздел 2.5), А. Якшиным и E. Zoethout (раздел 3.3.6) и R. van der Meer (раздел 3.5.7). Атомно-силовые измерения выполнены А. Duparré (раздел 1.2.5) и L. Peverini (разделы 1.2.6 и 1.4.4). Электронно-микроскопические изображения получены А.А. Соколовым (раздел 2.5) и R. van der Meer (раздел 3.5.6).

Анализ ряда экспериментальных данных проведен совместно с V. de Rooij-Lohman (раздел 1.4.6), Е.Н. Рагозиным и А.С. Пирожковым (раздел 3.3.6) и R. van der Meer (раздел 3.5.7). Некоторые из модельных расчетов проведены совместно с И.Н. Букреевой (раздел 3.3.3), А.Ю. Карабековым (раздел 1.3.5) и М.В. Пятахиным (раздел 1.2.5).

Существенная часть представляемой работы была выполнена в рамках проектов, поддержанных РФФИ (гранты 93-02-3254, 97-02-17870, 03-0239000) и Международным научно-техническим центром (гранты ISTC 139-95, 1051-99, 3124-06), в которых автор являлся руководителем.

Достоверность полученных результатов

Достоверность предложенных методов и решений подтверждается сравнением с результатами, полученными другими теоретическими методами, а также экспериментально.

Апробация работы

Результаты, полученные в диссертации, были представлены на целом ряде Всероссийских и Международных конференций, среди которых укажем следующие: Международная конференция по физике рентгеновских многослойных структур (PXRMS, Шамони, Франция, 2000, 2002; Саппоро, Япония, 2006; Биг Скай Ресорт, США, 2008); Международная конференция по рентгеновской дифракции и изображающей оптике высокого разрешения (ХТОР, С.-Петебург, 2012); Международный симпозиум по оптической технологии (SPIE, Сан-Диего, США, 1989, 1991, 1994, 1998, 2000, 2001, 2011; Прага, 2013); Международная конференция по рентгеновскому и нейтронному поверхностному рассеянию (Дубна, 1993); Международная конференция по рентгеновским лазерам (Шлиеерсее, Германия, 1992; Сант-Мало, Франция, 2000); Международный конгресс по рентгеновской оптике и микроанализу (Манчестер, Великобритания, 1992); Европейский оптический симпозиум (EUROPTO, Берлин, 1999); Международная конференция по синхротронному излучению (Новосибирск, 2006); Международная конференция по экспериментальной механике (Александрополис, Греция, 2007); Конференция европейского оптического общества по дифракционной оптике (Коли, Финляндия, 2010); Всероссийская конференция по применению рентгеновского, синхротронного излучения, нейтронов и электронов для исследования материалов (Дубна, 1997, Москва 1999, 2001, 2011); Всероссийское совещание по рентгеновской оптике (Н. Новгород, 1998, 1999, 2001, 2003, 2004; Черноголовка, 2008, 2010); Международный симпозиум по наноп физике и наноэлектронике (Н. Новгород, 2008, 2009); Международный научный семинар “Современные методы анализа дифракционных данных”(В. Новгород, 2008, 2011, 2013); Международная молодежная научная школа-семинар “Современные методы анализа дифракционных данных (дифракционные

методы для нанотехнологий)» (В. Новгород, 2008, 2011, 2013); Ежегодная конференция голландского общества FOM (FOM-Decemberdagen, Велдховен, 2005, 2011).

Результаты, полученные в диссертации, неоднократно докладывались и обсуждались на научных семинарах Института кристаллографии РАН, Физического института РАН, Физико-технологического института РАН, физического факультета и вычислительного центра МГУ им. М.В. Ломоносова, Всероссийского НИИ технической физики (Снежинск), Европейского центра синхротронных исследований (ESRF, Гренобль, Франция), Института физики плазмы (Ньювихайн, Нидерланды), Института прикладной оптики и точной механики (Йена, Германия), Университета Твенте (Энчедэй, Нидерланды), Университета Тонгжи (Шанхай, КНР), Европейского рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL, Гамбург, Германия), а также на конкурсе научных работ Института кристаллографии РАН в 2012 г., где были отмечены 1-й премией.

Публикации

Основные результаты исследований по теме диссертационной работы представлены в 63 публикациях, включая отдельные главы двух коллективных монографий и 43 статьи в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК для защиты докторских диссертаций, 6 из которых написаны автором единолично.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, основных результатов и выводов. Общий объем диссертации составляет 356 страниц, включая 168 рисунков, 11 таблиц, список литературы из 225 наименований и список публикаций автора по теме диссертации из 63 наименований.

Каждая глава диссертации начинается с введения, в котором дан обзор существующего положения дел в той или иной области рентгеновской оптики с тем, чтобы более детально пояснить роль и место исследований, проведенных в диссертации. В конце каждой главы приводится сводка основных полученных результатов.

В первой главе диссертации рассматриваются особенности отражения РИ от шероховатых сред и, в первую очередь те из них, которые не наблюдаются в рассеянии видимого излучения. Демонстрируется, что теория возмущений, объясняющая все наблюдаемые особенности дифракции РИ от слабо шероховатых поверхностей и слоистых сред, является наилучшей теоретической основой для рентгеновских методов контроля шероховатостей, поскольку позволяет однозначно определить параметры шероховатостей (PSD-функцию) непо-

средственно из индикатрисы рассеяния, не используя никаких априорных предположений ни о виде корреляционной функции, ни о функции распределения высот шероховатостей. Обсуждаются методики извлечения параметров шероховатостей применительно к in-situ измерениям рассеяния от растущих или эродирующих поверхностей.

Вторая глава посвящена разработке новых подходов к решению обратных задач рефлектометрии, а именно: реконструкции профиля диэлектрической проницаемости из измеренной угловой зависимости коэффициента отражения и определению фазы амплитудного коэффициента отражения по измерениям его модуля. Обсуждается самосогласованный модельно независимый подход к исследованию 3D структуры слоистых сред, который позволяет реконструировать профиль диэлектрической проницаемости и определить статистические параметры шероховатостей на основе одновременного анализа кривой отражения и набора индикатрис рассеяния, измеренных при разных углах скольжения зондирующего пучка, без каких-либо или, по крайней мере, при минимальных априорных предположениях об исследуемом объекте.

В третьей главе рассматривается отражение РИ от аперiodических и ламеллярных многослойных структур. Выводится выражение для коэффициента отражения РИ от произвольной многослойной структуры с периодом, монотонно изменяющимся по глубине. Обсуждаются подходы для решения обратной задачи синтеза (конструирования) широкополосных многослойных зеркал, обеспечивающих заданный угловой или спектральный профиль коэффициента отражения либо максимально возможный интегральный коэффициент отражения с учетом функции источника. На основе полученных результатов, рассматриваются особенности конструкций широкополосных зеркал для управления пучками СИ, ЭУФ литографии и зеркал Гёбеля для увеличения эффективности использования излучения точечных источников. На основе метода связанных волн анализируется дифракция РИ от ламеллярных многослойных решеток. Идентифицируется одномодовый режим работы ламеллярных структур, когда падающая волна эффективно возбуждает лишь один дифракционный порядок, и обсуждаются преимущества такой структуры, в первую очередь, для увеличения разрешения в рентгено-флуоресцентом анализе. Находится аналитическое выражение для коэффициента отражения и эффективности дифракции одномодовой ламеллярной структуры.

Отражение рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей и границ раздела

1.1. Введение

Для целого ряда областей современной науки, техники и технологии необходимы поверхности и тонкопленочные покрытия сверхвысокого качества, имеющие шероховатости высотой менее 1 нм. К таким отраслям, в первую очередь, относятся лазерная техника, оптика и рентгеновская оптика, точное машиностроение, микро и нанoeлектроника. В настоящее время разрабатываются и внедряются методы обработки поверхностей и нанесения покрытий, позволяющие, в принципе, изготовить столь совершенные поверхности. Однако вопросы их надежной количественной аттестации до сих пор остаются открытыми, особенно в случаях, когда дело касается тонкопленочных и многослойных покрытий, а также поверхностей сложной формы.

На сегодняшний день наиболее разработаны методы контроля одиночных поверхностей, которые можно разделить на четыре группы: (а) механические; (б) оптические; (в) туннельные и атомно-силовые; (г) рентгеновские. Эти методы основаны на различных физических принципах и дополняют друг друга. Конечно, каждому из них присущи свои достоинства и недостатки.

Так, недостатком механических профилометров является то, что измерительный щуп (алмазная игла) контактирует с поверхностью и, следовательно, в той или иной мере повреждает ее. Кроме того, процедура измерений длительная, особенно если необходимо исследовать поверхность по всей ее площади.

Наиболее распространенные на сегодняшний день оптические методы включают большое количество самых разнообразных подходов. Это и различные модификации интерференционных методов, и разные виды оптических профилометров, и методы, основанные на измерениях рассеяния видимого излучения. Принципиальный недостаток всех оптических методов состоит в том, что минимальный продольный (вдоль поверхности) размер шероховатостей, которые еще могут быть обнаружены, ограничен по порядку величины длиной волны зондирующего излучения, т.е. не может быть меньше, чем 0.3-0.5 мкм.

Туннельные и атомно-силовые методы обладают наивысшей чувствительностью и точностью, позволяя наблюдать атомную структуру поверхности. Однако поле зрения (иссле-

дуемая площадь образца) при этом ограничено единицами–десятками микрон, что является недостатком для целого ряда приложений. Кроме того, размеры и вес образцов должны быть достаточно малы.

Ограниченность всех профилометрических и оптических методов проявляется особенно наглядно, когда речь идет об исследованиях скрытых границ раздела таких, например, как граница между подложкой и напыленной на нее непрозрачной (скажем, металлической) пленкой.

На наш взгляд целый ряд новых возможностей по контролю шероховатостей поверхностей и границ раздела открывается благодаря использованию методов, основанных на анализе углового распределения (индикатрисы) рассеяния рентгеновского излучения. Малая длина волны излучения и возможность изменять глубину проникновения излучения в вещество от нескольких нанометров в условиях полного внешнего отражения до нескольких десятков микрометров делают это излучение незаменимым инструментом для контроля поверхностных и объемных неоднородностей нанометрового масштаба, включая шероховатости скрытых границ раздела.

Рентгеновские методы обладают целым рядом уникальных возможностей и преимуществ перед всеми другими методами:

- Это *неразрушающие* методы контроля.
- Эти методы позволяют получить *количественную* информацию о структуре вещества и поверхности.
- Рентгеновские методы *более информативны*, чем например, оптические методы, поскольку очевидно, что минимальный продольный размер неоднородностей, которые еще могут быть зарегистрированы, по порядку величины соответствует длине волны зондирующего пучка.
- Эти методы обладают *очень высокой чувствительностью* и позволяют исследовать приповерхностные слои и тонкие пленки толщиной вплоть до моноатомной, а также шероховатости со среднеквадратичной высотой менее 0,1 нм.
- Рентгеновские методы дают возможность изучать *скрытые границы раздела* (например, границу раздела между пленкой и подложкой), а также *приповерхностные* слои твердых тел и жидкостей.

- Рентгеновские методы могут быть использованы для контроля шероховатостей *вогнутых поверхностей* любой формы и размера. Подход основан на использовании эффекта шепчущей галереи в рентгеновском диапазоне.
- Рентгеновские методы позволяют исследовать образцы *большой площади*, включая кремниевые пластины, оптические детали, диски магнитной и оптической памяти и изделия машиностроения.
- Наконец, эти методы могут быть легко приспособлены для *измерений in situ*.

Следует подчеркнуть, что в отличие от прямых профилометрических измерений, метод рентгеновского рассеяния является опосредованным и существенным образом основывается на использовании результатов теории взаимодействия коротковолнового электромагнитного излучения с шероховатой слоисто-неоднородной средой. Поэтому проблема выбора адекватного теоретического приближения представляет особую важность при разработке практических методов контроля шероховатости по рассеянию рентгеновского излучения: с одной стороны, теория должна описывать все особенности рентгеновского рассеяния, наблюдаемые в эксперименте, а с другой - должна быть достаточно простой, чтобы извлечь данные о параметрах шероховатости однозначным образом.

Первое теоретическое исследование рассеяния звуковых волн на неровной поверхности было, по-видимому, проведено в 1907 г. Рэлеем [42], который рассмотрел дифракцию плоской волны на синусоиде. Несколько позднее Мандельштам [43] рассмотрел круг физических вопросов, связанных с наблюдением молекулярных движений свободной поверхности жидкости оптическими методами, а в 1926 г. Андронов и Леонтович [44] проанализировали электродинамическую часть задачи и фактически создали основу для описания диффузного рассеяния, возникающего из-за поверхностных неоднородностей (шероховатостей) в целом ряде физических явлений, например, при отражении радиоволн от земной поверхности или от взволнованной поверхности моря, видимого излучения от оптических поверхностей, медленных нейтронов от поверхности твердых тел, звуковых волн от границ раздела фаз и т.д. Следует, однако, отметить, что работа [44] недостаточно хорошо известна, и результаты ее неоднократно вновь выводились различными авторами.

В связи с необычайно широким кругом физических явлений, связанных с рассеянием волн на статистически неровной поверхности, опубликовано необозримое количество журнальных статей на эту тему. К настоящему времени проблемы дифракции электромагнитного и акустического излучения на шероховатых поверхностях описаны в целом ряде монографий [45]-[51].

В 1950-х - 1970-х г.г. разработка теории взаимодействия электромагнитных волн с шероховатыми поверхностями велась, в основном, в двух направлениях: либо на основе использования теории возмущений по высоте шероховатостей, либо на основе применения приближения Кирхгофа [52]-[60].

Теория возмущений, основанная на разложении рассеянного поля в ряд по высоте шероховатостей, справедлива лишь для достаточно гладких поверхностей, когда неоднородности границы раздела приводят лишь к слабому возмущению поля в дальней зоне. При этом рассматривалось два подхода к решению задачи. В первом подходе в ряд Тейлора по высоте шероховатостей разлагается профиль границы раздела сред и рассеяное поле на этой границе. Коэффициенты этого разложения находятся из граничных условий, а рассеяное поле вдали от границы раздела - с помощью теоремы Грина [36, 51].

Другой подход основан на использовании интегральной формы волнового уравнения, когда шероховатости поверхности рассматриваются как трехмерное возмущение диэлектрической проницаемости слоисто-неоднородной среды. Это возмущение разлагается в ряд Тейлора по высоте шероховатостей, что сразу же приводит к представлению в виде ряда и амплитуды рассеяния [59].

Приближение Кирхгофа основано на том, что поле в каждой точке поверхности представляется в виде суммы падающего поля и поля, отраженного по закону геометрической оптики от плоскости, касательной к поверхности в рассматриваемой точке¹. Тогда поле в любой точке пространства может быть найдено с помощью теоремы Грина. Кроме того, в большинстве работ предполагается, что коэффициент отражения один и тот же во всех точках поверхности (пологие шероховатости).

Приближение Кирхгофа, по-видимому, является в настоящее время наиболее распространенным подходом при изучении рассеяния акустических, оптических и радиоволн шероховатыми поверхностями [36, 45, 51]. Это произошло, главным образом, из-за следующих причин: приближение основано на физически понятной основе, не требует разложения по высоте шероховатостей, т.е. может быть использовано для более грубых поверхностей, и приводит к достаточно простым аналитическим выражениям, которые легко сравнивать с результатами эксперимента. В частности, коэффициент зеркального отражения $R_{spec}(\theta)$ и интегрального рассеяния в вакуум TIS(θ) (от английского Total Integrated Scattering) имеют

¹ Такой способ задания поля на поверхности во многом аналогичен известному методу, носящему такое же название, который широко используется для приближенного решения задачи дифракции на отверстии или экране [61, 62]

хорошо известный вид

$$R_{spec}(\theta) = R_F(\theta) \cdot \exp \left[- \left(\frac{4\pi\sigma \sin \theta}{\lambda} \right)^2 \right] \quad (1.1)$$

$$TIS(\theta) = R_F(\theta) \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{4\pi\sigma \sin \theta}{\lambda} \right)^2 \right] \right\} \quad (1.2)$$

где R_F - коэффициент отражения от идеально гладкой поверхности, описываемый формулами Френеля, σ - среднеквадратичная высота шероховатости и θ - угол скольжения, отсчитываемый от поверхности. Экспоненциальной сомножитель в выражениях (1.1)-(1.2) часто называют фактором Дебая-Валлера по аналогии с соответствующим выражением, возникающим в теории отражения рентгеновской волны от идеального кристалла при учете тепловых колебаний атомов [63].

Безусловно, выражения (1.1)-(1.2) не являются универсальными и были получены при целом ряде предположений, среди которых мы отметим следующие. Во-первых, рассматривалось отражение излучения от поверхности однородного вещества постоянной плотности в предположении скачкообразного изменения диэлектрической проницаемости на границе раздела вакуум-вещество. Во-вторых, функция распределения высот шероховатостей предполагалась гауссовой, что не соответствует существующим теориям роста пленок и ионного травления материалов, которые предсказывают, как правило, не только негауссову, но даже несимметричную функцию распределения высот [64]. В-третьих, предполагалось, что радиус корреляции высот шероховатостей достаточно велик.

Как в методе Кирхгофа, так и в методе малых возмущений рассматриваются только одно или двукратно рассеянные волны. Это допустимо, пока неровности малы (метод возмущений) либо достаточно длинны и пологи (метод Кирхгофа). С ростом высоты неровностей или с увеличением их наклона необходимо учитывать многократное рассеяние волн. Учет многократного рассеяния осуществлен, например, в [36, 65] на основе интегральной формы волнового уравнения и сводится к приближенному (частичному) суммированию бесконечного ряда теории возмущений. Этот подход оказался весьма эффективным, в частности, при рассмотрении волноводов с шероховатыми стенками [36] и возбуждения поверхностных плазмонов при рассеянии падающего излучения на шероховатостях [65, 66].

В последнее время, благодаря появлению мощных быстродействующих компьютеров, получили развитие прямые численные методы решения дифракции волны на шероховатой поверхности (см., например, [67]). При этом профиль поверхности моделируется на компьютере в виде последовательности случайных чисел, распределенных по заданному закону (как правило, рассматривается нормальный закон распределения высот шероховатости) и имеющих

заданную корреляционную функцию. Взаимодействие волны со случайной поверхностью также рассчитывается численно, исходя из того или иного представления волнового уравнения. Такой расчет осуществляется для достаточно большого количества разных реализаций случайной поверхности с тем, чтобы можно было провести статистическое усреднение. Конечно, подобные подходы требуют колоссальных затрат машинного времени даже для современных компьютеров. Краткий обзор существующих подходов к численному моделированию дифракции излучения на шероховатых поверхностях дан, например, в монографии [51].

Хотя в радиофизике и оптике экспериментальные и теоретические исследования взаимодействия излучения с шероховатыми отражателями активно проводились с начала 20-го века, подобные исследования в области рентгеновского излучения начались лишь в пятидесятых годах. Изучение зависимости отражательной способности ЖР излучения от состояния поверхности впервые было предпринято Эренбергом [68] и Параттом [69]. Позднее Эллиот [70] изучал связь качества полировки поверхности рентгеновского зеркала с рассчитанными им индикатрисами на основе модели поверхности в виде конических пиков. Начиная с 60-х годов количество исследований по рассеянию ЖР излучения резко увеличилось и постепенно методы рентгеновского отражения и рассеяния становятся достаточно распространенными подходами для исследования качества различных поверхностей (см., например, [13, 14, 71] и ссылки в них).

Исследование рассеяния МР излучения (K_α -линии алюминия и углерода) шероховатой поверхностью отражателя, по-видимому, впервые было проведено в работе [72]. Впоследствии исследования рассеяния в МР области спектра проводились рядом исследователей (см., например, [39, 73, 74]) в широком диапазоне длин волн и углов падения. Практически во всех указанных работах высота поверхностных шероховатостей определялась с использованием соотношений (1.1)-(1.2), а форма индикатрисы рассеяния анализировалась на основе формул приближения Кирхгофа. В то же время, был обнаружен целый ряд особенностей отражения и рассеяния рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей, которые не могли быть описаны в рамках существующих теорий.

Среди них особо выделим эффект аномального рентгеновского рассеяния, экспериментально обнаруженный Ионедой в 1963 г. [37]. Существо эффекта состоит в том, что если угол скольжения падающего пучка превышает критический угол полного внешнего отражения (ПВО), то в индикатрисе рассеяния наблюдаются два пика: один, как обычно, в направлении зеркального отражения, а второй - в направлении угла рассеяния близком к критическому углу ПВО, причем положение пика Ионеды практически не изменяется при изменении угла скольжения падающей волны и не зависит от микрогеометрии поверхности (высоты или ра-

диуса корреляции шероховатостей). Позднее эффект аномального рассеяния был подробно экспериментально исследован в ЖР [75–78], МР [79] и ЭУФ [80, 81] диапазонах длин волн. Экспериментальный пример представлен на рис.1.1а.

Эффект Ионеды не мог быть объяснен в рамках приближения Кирхгофа и в литературе возникла целая дискуссия относительно причин его появления. В частности, эффект объясняли либо как экспериментальный артефакт [82], либо как влияние загрязнений поверхности [83]. Первые попытки объяснить появления пика Ионеды как результата рассеяния на поверхностных шероховатостях с учетом специфических оптических свойств вещества в рентгеновском диапазоне были предприняты в работах [75, 76, 78, 84], но на основе усложненных моделей границы раздела сред.

Позднее в работах [38, 85] был обнаружен схожий эффект и при падении рентгеновского пучка в области ПВО, а именно: наблюдалась сильная асимметрия индикатрисы рассеяния, причем ее максимум был сильно сдвинут по направлению к критическому углу ПВО или даже полностью ему соответствовал и не изменял своего положения при изменении угла скольжения зондирующего пучка. Экспериментальный пример представлен на рис.1.1б.

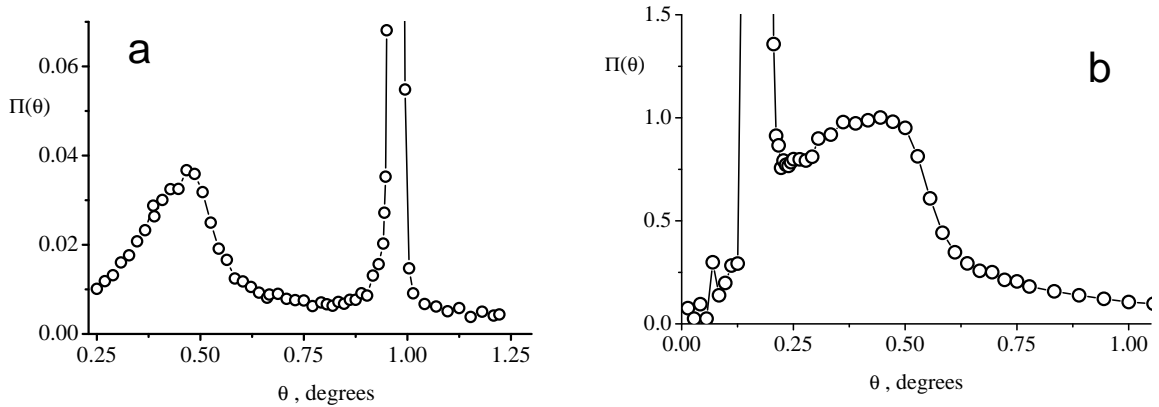


Рис. 1.1. Индикатрисы рентгеновского рассеяния ($\lambda = 0.154$ нм) от поверхности толстых ($h \sim 0.3$ мкм) пленок вольфрама (а) и золота (б). Угол скольжения зондирующего пучка составлял $\theta_0 = 0.97^\circ$ (а) и $\theta_0 = 0.15^\circ$ (б). Критический угол ПВО близок к 0.45° для обоих материалов. Зеркально отраженный пучок существенно большей интенсивности не показан на рисунках. (Из [А32]).

В целом ряде работ [39, 74, 86] было показано, что значение среднеквадратичной высоты шероховатости σ , определенное по интегральной интенсивности диффузного рассеяния (1.2), возрастает при уменьшении угла скольжения зондирующего пучка (при фиксированной длине волны) либо при увеличении длины волны (но фиксированном угле скольжения). Эти факты означают, что формула (1.2) далеко не всегда справедлива в рентгеновском диапазоне, а интенсивность рассеяния при предельно малых углах скольжения зондирующего

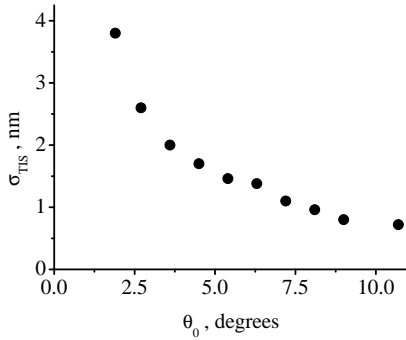


Рис. 1.2. Экспериментальные значения среднеквадратичной высоты шероховатостей поверхности толстой пленки Ni ($h \sim 0.2$ мкм) в зависимости от угла скольжения зондирующего пучка, определенные по измерениям интегрального рассеяния МР излучения с длиной волны $\lambda = 4.47$ нм с использованием формулы (1.2). (Из [A9]).

пучка оказывается существенно большей, чем это следует из приближения Кирхгофа. Экспериментальный пример представлен на рис.1.2.

Наконец, можно отметить и наблюдавшееся в [40] значительное превышение измеренного коэффициента отражения над рассчитанным по формуле Френеля в случае падения рентгеновского пучка на шероховатую поверхность под углом скольжения, превышающим критический угол ПВО.

Таким образом, к середине 80-х годов был накоплен большой экспериментальный материал по взаимодействию рентгеновского излучения с шероховатыми поверхностями. Результаты исследований наглядно показали, с одной стороны, большие возможности, присущие рентгеновским методам исследования шероховатостей, а с другой - ограниченную применимость в этом диапазоне длин волн теоретических подходов, разработанных первоначально в оптике, акустике и радиофизике. Сегодня причины этих ограничений совершенно ясны.

Во-первых, все оптические и радиофизические методы подразумевают нормальное или наклонное (но не скользящее) падение излучения на шероховатую поверхность. Поэтому малые скользящие углы зачастую оказывались вне области применимости разрабатываемых теорий. В то же время, характерная особенность всех рентгеновских методов как раз и состоит в том, что зондирующий пучок падает на поверхность под предельно малым углом скольжения, где только и велик коэффициент отражения. Так, для широко используемой в исследованиях K_α линии излучения меди ($\lambda = 0.154$ нм) типичные углы скольжения падающего пучка составляют $0.1 - 0.3^\circ$. Поэтому зачастую оказывается, что ширина углового распределения (индикатрисы) рассеяния сравнима с углом скольжения зондирующего пучка, т.е. индикатриса рассеяния “ложится” на поверхность. При этом характер рассеяния может меняться принципиальным образом.

Во-вторых, поляризуемость всех веществ в рентгеновском диапазоне крайне мала (т.е. мал скачок диэлектрической проницаемости на границе раздела сред), причем ее веществен-

ная часть, как правило, меньше единицы для любого вещества. Это приводит к явлению полного внешнего отражения (ПВО) при падении излучения на поверхность под углами скольжения меньшими критического угла ПВО $\theta_c = \sqrt{|1 - \varepsilon|}$ и быстрому уменьшению коэффициента отражения вне области ПВО. Ясно, что приближение Кирхгофа не будет описывать всех особенностей рентгеновского рассеяния, поскольку диэлектрическая проницаемость вещества входит, единственно, в коэффициент отражения падающего пучка от идеально гладкой поверхности. В частности, эффект Ионеды как раз и объясняется специфическими оптическими свойствами вещества в рентгеновском диапазоне.

В результате оказывается, что в теории рентгеновского рассеяния естественным образом возникают два параметра $\mu_0 = \xi\theta_0^2/\lambda$ и $\mu_c = \xi|1 - \varepsilon|/\lambda$, характерных именно для этого диапазона длин волн, где ξ - радиус корреляции шероховатостей и θ_0 - угол скольжения зондирующего пучка. Значения этих параметров и соотношение между ними определяют отражающие и рассеивающие свойства шероховатой поверхности.

Современные подходы в теории дифракции рентгеновского излучения на шероховатых отражателях можно разделить на несколько направлений:

Пожалуй, наиболее широко используемый в настоящее время подход - это Борновское приближение с искаженными волнами (DWBA, от английского Distorted Wave Born Approximation). Название было заимствовано от аналогичного приближения в квантово-механической теории рассеяния. В приближении DWBA амплитуда рассеяния представляется в виде ряда по возмущениям диэлектрической проницаемости (по кратности рассеяния). Отметим, что во всех известных нам работах (см., например, [87]-[92]), приближение DWBA еще более упрощается для облегчения вычислений, а именно, следуя пионерской работе [87] невозмущенное волновое поле в вакууме заменяется на аналитическое продолжение невозмущенного поля внутри вещества. Схожий подход был использован в работах Холи и др. (см., например, [93, 94]) применительно к рассеянию рентгеновского излучения от многослойных структур.

Еще один широко используемый подход, который мы будем называть приближением эффективного переходного слоя, основан на предположении о том, что влияние шероховатостей на коэффициент отражения эквивалентно влиянию эффективного переходного слоя, образованного в результате усреднения шероховатого рельефа. В наиболее явном виде это предположение сформулировано и используется с самого начала в работах Смирнова и др. [38, 95]. В действительности, это же предположение, но в неявной форме, содержится и в хорошо известной работе Нево и Кроса [96], где было получено следующее выражение для коэффи-

циента отражения

$$R_{spec}(\theta) = R_F(\theta) \cdot \exp \left[- \left(\frac{4\pi\sigma}{\lambda} \right)^2 \sin \theta \operatorname{Re} \sqrt{\varepsilon - \cos^2 \theta} \right] \quad (1.3)$$

Экспоненциальный множитель, часто называемый фактором Нево-Кроса, содержит, в отличие от (1.1), диэлектрическую проницаемость вещества ε в явном виде.

Благодаря ясной и простой физической идее, на которой основан подход, он широко используется при интерпретации результатов рентгеновских экспериментов вплоть до настоящего времени [97, 98].

Схожий подход применительно к отражению рентгеновского излучения от шероховатых многослойных зеркал был использован в работах Салащенко, Фраермана и др. [99–101].

В то же время, даже самый элементарный анализ показывает, что как формулы Дебая-Валлера (1.1)-(1.2), так и формула Нево-Кроса (1.3), если и справедливы, то далеко не всегда. Действительно, эти выражения зависят от единственного параметра, характеризующего шероховатость, - среднеквадратичной высоты σ и, в частности, не зависят от радиуса их корреляции (типичного продольного размера). Ясно, что такое предположение не соответствует реальности, поскольку, например, при уменьшении радиуса корреляции до очень малого значения, интенсивность рассеяния должна падать до нуля, что не описывается формулой (1.2). С другой стороны, формула (1.3) показывает, что при падении рентгеновской волны в области ПВО на непоглощающую среду экспоненциальный множитель точно равен единице, т.е. волна вообще не рассеивается на шероховатостях. Можно сказать иными словами, что формула Нево-Кроса “запрещает” существование дифракционных решеток скользящего падения.

В действительности, что сегодня совершенно ясно, формулы Дебая-Валлера и Нево-Кроса (а, следовательно, и приближение эффективного переходного слоя) справедливы в двух предельных случаях очень большого или очень малого радиуса корреляции шероховатостей.

В настоящее время разрабатываются и более общие подходы к рассмотрению дифракции рентгеновского излучения на шероховатых отражателях, авторы которых попытались вывести формулы, учитывающие многократное рассеяние волн и, следовательно, пригодных и для более грубых поверхностей. Прежде всего, следует упомянуть о подходе Андреева [102, 103], где задача о дифракции рентгеновской волны на шероховатой поверхности или шероховатой многослойной структуре сводится к интегральному уравнению, решаемому численно. Следует, однако, отметить, что в этих работах используется приближение, условие применимости которого трудно сформулировать, а именно: в [102, 103] предполагается, что амплитуда поля волны на шероховатой границе раздела есть величина детерминированная и может быть

вынесена из-под знака статистического усреднения, а случайной величиной является только фаза волны. По-видимому, в некотором смысле этот подход можно рассматривать как обобщение приближения Кирхгофа на случай многократного рассеяния.

Еще один общий подход был развит в работе [104]. Подход основан на перегруппировании бесконечного ряда теории возмущений с тем, чтобы точно просуммировать все члены ряда одного порядка по $1 - \varepsilon$, где ε - диэлектрическая проницаемость вещества. Обоснованием подхода служит то, что в рентгеновском диапазоне диэлектрическая проницаемость любого вещества очень близка к единице. Интересно то, что даже при (приближенном) учете многократного рассеяния коэффициент отражения совпадает с формулой Неве-Кроса (1.3). В то же время, как подчеркивалось выше и результаты работы [104] это подтверждают, скачок диэлектрической проницаемости входит в выражения для индикатрисы рентгеновского рассеяния и зеркального отражения в виде комбинации $\mu_c = \xi|1 - \varepsilon|/\lambda$, где ξ - радиус корреляции шероховатостей, значительно превышающий длину волны λ рентгеновского излучения. Следовательно, подход, разработанный в [104] и справедливый лишь при $\mu_c \ll 1$, вовсе не является общим для рентгеновского диапазона, как утверждали авторы, а справедлив только при достаточно малых радиусах корреляции шероховатостей. Тем самым, этот подход можно рассматривать как обобщение приближения Неве-Кроса с учетом многократного рассеяния.

Основные цели настоящей главы состоят в обосновании следующих утверждений:

- Теория возмущений по высоте шероховатостей описывает все наблюдаемые в экспериментах особенности дифракции РИ от шероховатых сред, включая появление пика и “анти-пика” Ионеды, кажущееся увеличение высоты шероховатостей при предельно малых углах скольжения, возможность превышения интегрального коэффициента отражения от шероховатой поверхности над френелевским коэффициентом отражением от идеально гладкой поверхности, появление квази-брэгговских пиков в рассеянии РИ от многослойных структур с коррелированными шероховатостями разных границ раздела. Более того, теория возмущений позволяет предсказать новые физические эффекты, такие как интерференционное подавление рассеяния, а также получить новые уравнения, учитывающие в явном виде многократное рассеяние, например, в теории рентгенооптических элементов с шепчущими модами.
- Теория возмущений является наилучшей теоретической основой для рентгеновского контроля шероховатостей поверхностей и границ раздела, поскольку она позволяет однозначно определить параметры шероховатостей (PSD-функции) непосредственно из измеренных индикатрис рассеяния без каких-либо априорных предположений о виде

корреляционной функции и функции распределения высот шероховатостей. Если поверхность является слишком грубой, то следует увеличить длину волны зондирующего пучка, чтобы остаться в условиях применимости теории возмущений.

1.2. Общие закономерности дифракции рентгеновского излучения от шероховатых сред

1.2.1. Амплитуда рассеяния. Оптическая теорема

Следуя [A1-A4], будем считать, что диэлектрическая проницаемость идеальной слоисто-неоднородной среды описывается кусочно-непрерывной и ограниченной функцией $\varepsilon_0(z)$, удовлетворяющей асимптотическим условиям

$$\varepsilon_0(z) \rightarrow \begin{cases} 1, & \text{если } z \rightarrow -\infty \\ \varepsilon_+ = \text{const}, & \text{если } z \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

Неидеальность среды будем связывать с наличием возмущений $\Delta\varepsilon(\mathbf{r})$, масштаб которых ограничен вдоль оси Z (направленной в глубь вещества) и, вообще говоря, не ограничен в поперечном направлении (в плоскости XY). Тогда распределение диэлектрической проницаемости в пространстве описывается функцией

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_0(z) + \Delta\varepsilon(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

где $\Delta\varepsilon(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \pm\infty$, а \mathbf{r} - радиус-вектор.

Будем предполагать, что среда является статистически однородной в плоскости XY и слоисто-неоднородной по оси Z , а именно,

$$\langle \Delta\varepsilon(\mathbf{r}) \rangle \equiv \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle \quad (1.5)$$

$$\langle \Delta\varepsilon(\mathbf{r})\Delta\varepsilon(\mathbf{r}') \rangle \equiv \langle \Delta\varepsilon(z, \boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')\Delta\varepsilon(z', 0) \rangle$$

где угловые скобки означают статистическое усреднение по реализациям.

Взаимодействие рентгеновской волны с шероховатой средой (1.4) будем описывать скалярным волновым уравнением поскольку из-за скользящего падения зондирующего пучка и малых углов рассеяния поляризационные эффекты пренебрежимо малы в реальном эксперименте. Запишем это уравнение в интегральной форме

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) - k^2 \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta\varepsilon(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}', \quad (1.6)$$

где $k = 2\pi/\lambda$ - волновое число в вакууме, $\Psi_0(\mathbf{r})$ - поле волны в отсутствие возмущений, а $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ - функция Грина, обеспечивающая выполнение надлежащих граничных условий, которые заключаются в том, что на больших расстояниях от границы раздела поле рассеянной волны представляет собой суперпозицию плоских волн, распространяющихся под различными углами к оси Z :

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int g(z, z'; q) \exp[i\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')] d^2\mathbf{q} \quad (1.7)$$

$$g(z, z'; q) = \frac{\psi_0(z_>; q)\psi_1(z_<; q)}{W(q)} ; \quad z_> = \max(z, z') ; \quad z_< = \min(z, z').$$

В этих выражениях функции ψ_0 и ψ_1 представляют собой решения одномерного волнового уравнения

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + [k^2\varepsilon_0(z) - q^2]\psi = 0 ; \quad q = k \cos \theta, \quad (1.8)$$

имеющие следующие асимптотики:

$$\psi_0(z; q) = \begin{cases} e^{ik_-(q)z} + r_0(q)e^{-ik_-(q)z}, & \text{если } z \rightarrow -\infty \\ t_0(q)e^{ik_+(q)z}, & \text{если } z \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (1.9)$$

$$\psi_1(z; q) = \begin{cases} \tilde{t}_0(q)e^{-ik_-(q)z}, & \text{если } z \rightarrow -\infty \\ e^{-ik_+(q)z} + \tilde{r}_0(q)e^{ik_+(q)z}, & \text{если } z \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (1.10)$$

где r_0 , \tilde{r}_0 и t_0 , \tilde{t}_0 - амплитудные коэффициенты отражения и прохождения; W - вронскиан функций ψ_0 и ψ_1 , θ_0 - угол скольжения зондирующего пучка; θ и φ - углы рассеяния; \mathbf{q}_0 и \mathbf{q} - проекции волновых векторов падающей и рассеянной волны на плоскость XY , а k_- и k_+ - z -компоненты волновых векторов в асимптотических областях $z \rightarrow \pm\infty$:

$$W(q) \equiv \psi_0'\psi_1 - \psi_0\psi_1' = 2ik_+(q)t_0(q)$$

$$k_-(q) = \sqrt{k^2 - q^2} ; \quad k_+(q) = \sqrt{k^2\varepsilon_+ - q^2} \quad (1.11)$$

$$\mathbf{q}_0 = k\{\cos \theta_0; 0\} ; \quad \mathbf{q} = k\{\cos \theta \cos \varphi; \cos \theta \sin \varphi\}.$$

Функция $g(z, z'; q)$ есть не что иное как одномерная функция Грина, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}g(z, z'; q) + [k^2\varepsilon_0(z) - q^2]g(z, z'; q) = \delta(z - z') \quad (1.12)$$

Геометрия рассеяния иллюстрируется рис.1.3.

Поле невозмущенной волны в (1.6), очевидно, равно $\Psi_0(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{q}_0\boldsymbol{\rho})\psi_0(z; q_0)$.

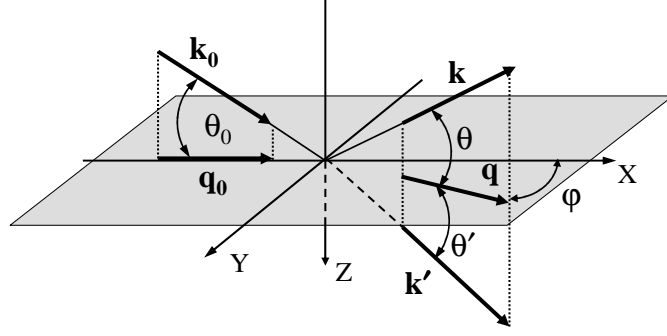


Рис. 1.3. Схема взаимодействия рентгеновской волны с шероховатой границей раздела сред.

Из (1.6)-(1.11) находим асимптотику поля волны вдали от границы раздела

$$\Psi(\boldsymbol{\rho}, z \rightarrow \pm\infty) = \psi_0(z \rightarrow \pm\infty, q_0) \exp(i\mathbf{q}_0\boldsymbol{\rho}) + \frac{i}{2\pi} \int \exp[i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho} \pm ik_{\pm}(q)z] A_{\pm}(\mathbf{q}) \frac{d^2\mathbf{q}}{k_{\pm}(q)}, \quad (1.13)$$

где амплитуда рассеяния A_{\pm} записывается в виде:

$$A_{\pm}(\mathbf{q}) = \frac{k^2}{4\pi} \int \exp(-i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}) \Delta\varepsilon(\mathbf{r}) \eta_{\pm}(z, q) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}; \quad (1.14)$$

$$\eta_{-}(z, q) \equiv \psi_0(z, q); \quad \eta_{+}(z, q) \equiv \psi_1(z, q).$$

Представляя асимптотику поля в виде суперпозиции плоских волн (1.13), предполагаем, что рассеивающая поверхность является неограниченной в плоскости XY . Особенности рентгеновского рассеяния в случае поверхности конечных размеров обсуждаются в разделе 1.3.4.

С помощью (1.13) и (1.14) вычислим поток энергии, пересекающий плоскость S , которая параллельна границе раздела и расположена вдали от нее:

$$Q_{-} \equiv \frac{1}{k} \text{Im} \int_S \left[\Psi^*(\boldsymbol{\rho}, z) \frac{\partial \Psi}{\partial z}(\boldsymbol{\rho}, z) \right]_{z \rightarrow -\infty} d^2\boldsymbol{\rho} = [1 - R_0(q_0)] \frac{k_{-}(q_0)}{k} \int_S d^2\boldsymbol{\rho} + \frac{4\pi}{k} \text{Im} \left[A_{-}(\mathbf{q}_0) r_0^*(q_0) \right] - \frac{1}{k} \int |A_{-}(\mathbf{q})|^2 \frac{d^2\mathbf{q}}{k_{-}(q)} \quad (1.15)$$

$$Q_{+} \equiv \frac{1}{k} \text{Im} \int_S \left[\Psi^*(\boldsymbol{\rho}, z) \frac{\partial \Psi}{\partial z}(\boldsymbol{\rho}, z) \right]_{z \rightarrow +\infty} d^2\boldsymbol{\rho} = T_0(q_0) \frac{k_{-}(q_0)}{k} e^{-2z \text{Im} k_{+}(q_0)} \int_S d^2\boldsymbol{\rho} - \frac{4\pi}{k} e^{-2z \text{Im} k_{+}(q_0)} \text{Im} \left[A_{+}(\mathbf{q}_0) t_0^*(q_0) k_{+}^*(q_0) \right] \text{Re} \frac{1}{k_{+}(q_0)} + \frac{1}{k} \int |A_{+}(\mathbf{q})|^2 e^{-2z \text{Im} k_{+}(q)} \text{Re} \frac{1}{k_{+}(q)} d^2\mathbf{q} \quad (1.16)$$

В выражениях (1.15)-(1.16) $R_0 = |r_0|^2$ и $T_0 = |t_0|^2 \operatorname{Re}(k_+)/k_-$ - это коэффициенты отражения и прохождения в случае идеально гладкой границы раздела.

Ясно, что в рентгеновском диапазоне длин волн, где все вещества поглощающие, т.е. $\operatorname{Im}k_+(q_0) > 0$, поток излучения Q_+ в глубине подложки равен нулю. Ниже при рассмотрении потока, направленного в глубь вещества, будем считать, что среда не обладает поглощением $\operatorname{Im}\varepsilon(\mathbf{r}) \equiv 0$.

Прежде чем переходить к дальнейшему анализу выражений (1.15)-(1.16), отметим справедливость оптической теоремы, выражающей закон сохранения энергии при падении плоской волны на непоглощающую слоистую среду. Запишем равенство потоков через плоскости параллельные границе раздела $Q_- = Q_+$, учтем, что $T_0 + R_0 = 1$, и перейдем в (1.15)-(1.16) от интегрирования по вектору \mathbf{q} к интегрированию по телесному углу. Тогда получим обобщение оптической теоремы для шероховатой слоистой среды, найденное впервые в [105] для одиночного рассеивателя, помещенного в слоисто-неоднородную среду:

$$\begin{aligned} \int_{n_z < 0} |A_-(\mathbf{q})|^2 d\Omega + \sqrt{\varepsilon_+} \int_{n_z > 0} |A_+(\mathbf{q})|^2 \frac{\operatorname{Re}k_+(q)}{k_+(q)} d\Omega = \\ = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} \left[A_-(\mathbf{q}_0) r_0^*(q_0) + A_+(\mathbf{q}_0) t_0^*(q_0) \frac{\operatorname{Re}k_+(q_0)}{k_+(q_0)} \right] \end{aligned} \quad (1.17)$$

где интегрирование ведется по телесному углу Ω в пределах передней ($n_z > 0$) или задней ($n_z < 0$) полусферы.

Известный результат - оптическая теорема для изолированного рассеивателя в вакууме - получается из (1.17) при $\varepsilon_+ = 1$, $r_0 = 0$, и $t_0 = 1$.

При выводе (1.17) учтено, что для непоглощающей среды $\operatorname{Re}k_+ = 0$, если $\operatorname{Im}k_+ \neq 0$, и наоборот, и в соответствии с законом преломления Снеллиуса $q = k \cos \theta = k \sqrt{\varepsilon_+} \cos \theta'$, где θ и θ' - углы между границей раздела и направлением рассеяния в вакуум и в глубь среды соответственно (рис.1.3).

Формулы (1.15)-(1.17) являются точными в скалярном приближении. При их выводе не использовалось никаких предположений о форме границы раздела и характере случайных или детерминированных неоднородностей на ней. Однако для того, чтобы определить интенсивности отраженной, преломленной и рассеянной волн, необходимо знать точно или приближенно поле $\Psi(\mathbf{r})$ вблизи поверхности, через которое выражаются амплитуды рассеяния $A_{\pm}(\mathbf{q})$. Различные теоретические подходы, используемые для описания рассеяния волны на шероховатом отражателе, как раз и отличаются видом приближенного решения волнового уравнения, подставляемого в (1.14) вместо точного.

1.2.2. Борновское приближение с искаженными волнами

Используя выражения (1.6) и (1.14), можно представить амплитуды рассеяния $A_{\pm}(\mathbf{q})$ (а значит и потоки Q_{\pm}) в виде обобщенного борновского ряда по степеням возмущения диэлектрической проницаемости $\Delta\varepsilon(\mathbf{r})$:

$$A_{\pm}(\mathbf{q}) = \frac{k^2}{4\pi} \int \psi_0(z, q_0) \exp[i(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q})\boldsymbol{\rho}] \eta_{\pm}(z, q) \Delta\varepsilon(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} -$$

$$- \frac{k^4}{4\pi} \int \int \psi_0(z', q_0) \exp(i\mathbf{q}_0\boldsymbol{\rho}' - i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}) \eta_{\pm}(z, q) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Delta\varepsilon(\mathbf{r}) \Delta\varepsilon(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' + \dots \quad (1.18)$$

$$\eta_+(z, q) \equiv \psi_1(z, q) \quad ; \quad \eta_-(z, q) \equiv \psi_0(z, q).$$

Интересуясь отражением рентгеновского излучения от сверхгладких поверхностей, ограничимся в выражениях (1.15)-(1.16) членами порядка $(\Delta\varepsilon)^2$. Предполагая, что диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\mathbf{r})$ есть случайная функция, выполним статистическое усреднение по реализациям, учитывая (1.5). Тогда после некоторых алгебраических преобразований найдем следующие выражения для коэффициентов зеркального отражения R и прохождения T :

$$R(q_0) = R_0(q_0) + 2\text{Re} \left\{ r_0^*(q_0) \left[\Delta r_1(q_0) + \Delta r_2(q_0) + \Delta\alpha_1(q_0) \right] \right\} + \left| \Delta r_1(q_0) \right|^2 \quad (1.19)$$

$$T(q_0) = T_0(q_0) + 2\text{Re} \left\{ t_0^*(q_0) \left[\Delta t_1(q_0) + \Delta t_2(q_0) + \Delta\beta_1(q_0) \right] \right\} \frac{\text{Re}k_+(q_0)}{k_-(q_0)} +$$

$$+ \left| \Delta t_1(q_0) \right|^2 \frac{\text{Re}k_+(q_0)}{k_-(q_0)}$$

где

$$\Delta r_1 = \frac{ik^2}{2k_-(q_0)} \int \psi_0^2(z, q_0) \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle dz \quad (1.21)$$

$$\Delta t_1 = \frac{ik^2}{2k_+(q_0)} \int \psi_0(z, q_0) \psi_1(z, q_0) \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle dz \quad (1.22)$$

$$\Delta r_2 = -\frac{ik^4}{2k_-(q_0)} \int \psi_0(z, q_0) \psi_0(z', q_0) g(z, z'; q_0) \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle \langle \Delta\varepsilon(z', 0) \rangle dz dz' \quad (1.23)$$

$$\Delta t_2 = -\frac{ik^4}{2k_+(q_0)} \int \psi_1(z, q_0) \psi_0(z', q_0) g(z, z'; q_0) \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle \langle \Delta\varepsilon(z', 0) \rangle dz dz' \quad (1.24)$$

$$\Delta\alpha_1 = -\frac{ik^4}{8\pi^2 k_-(q_0)} \int \psi_0(z, q_0) \psi_0(z', q_0) D(z, z'; \mathbf{q} - \mathbf{q}_0) g(z, z'; q) dz dz' d^2\mathbf{q} \quad (1.25)$$

$$\Delta\beta_1 = -\frac{ik^4}{8\pi^2 k_+(q_0)} \int \psi_1(z, q_0) \psi_0(z', q_0) D(z, z'; \mathbf{q} - \mathbf{q}_0) g(z, z'; q) dz dz' d^2\mathbf{q} \quad (1.26)$$

$$D(z, z'; \mathbf{q}) = \int \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}) [\langle \Delta\varepsilon(z, \boldsymbol{\rho}) \Delta\varepsilon(z', 0) \rangle - \langle \Delta\varepsilon(z, \boldsymbol{\rho}) \rangle \langle \Delta\varepsilon(z', 0) \rangle] d^2\boldsymbol{\rho} \quad (1.27)$$

Отметим, что выражения (1.19)-(1.20) можно рассматривать как первые члены следующих разложений по возмущению $\Delta\varepsilon$ диэлектрической проницаемости:

$$R(q_0) = \left| r_0(q_0) + \Delta r_1(q_0) + \Delta r_2(q_0) + \dots + \Delta\alpha_1(q_0) + \dots \right|^2 \quad (1.28)$$

$$T(q_0) = \left| t_0(q_0) + \Delta t_1(q_0) + \Delta t_2(q_0) + \dots + \Delta\beta_1(q_0) + \dots \right|^2 \cdot \frac{\text{Re}k_+(q_0)}{k_-(q_0)} \quad (1.29)$$

Выражения для углового распределения рассеяния в вакуум $\Phi(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0)$ и в глубь среды $\Phi_+(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0)$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0) &\equiv \frac{1}{Q^{inc}} \frac{dQ^{scat}}{d\Omega}(z \rightarrow -\infty) = \\ &= \frac{k^5}{16\pi^2 k_-(q_0)} \int E(z, z'; \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}) \psi_0(z, q) \psi_0(z, q_0) \psi_0^*(z', q) \psi_0^*(z', q_0) dz dz' \end{aligned} \quad (1.30)$$

$$\begin{aligned} \Phi_+(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0) &\equiv \frac{1}{Q^{inc}} \frac{dQ^{scat}}{d\Omega'}(z \rightarrow +\infty) = \\ &= \frac{k^5 \sqrt{\varepsilon_+}}{16\pi^2 k_-(q_0)} \int E(z, z'; \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}) \psi_1(z, q) \psi_0(z, q_0) \psi_1^*(z', q) \psi_0^*(z', q_0) dz dz' \cdot \frac{\text{Re}k_+(q)}{k_+(q)} \end{aligned} \quad (1.31)$$

где

$$E(z, z'; \mathbf{q}) = \int \exp(i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}) [\langle \Delta\varepsilon(z, \boldsymbol{\rho}) \Delta\varepsilon^*(z', 0) \rangle - \langle \Delta\varepsilon(z, \boldsymbol{\rho}) \rangle \langle \Delta\varepsilon^*(z', 0) \rangle] d^2\boldsymbol{\rho} \quad (1.32)$$

а Q^{inc} - мощность излучения, падающего на поверхность под углом скольжения θ_0 ; dQ^{scat} - мощность излучения, рассеянного в телесный угол $d\Omega$; вектор \mathbf{q} определяет направление рассеянной волны, а вектор \mathbf{q}_0 - направление падающего потока (рис.1.3).

Обсудим теперь несколько подробнее структуру выражений (1.28)-(1.29). Рассмотрим отражение плоской волны от детерминированной слоистой среды с усредненной диэлектрической проницаемостью

$$\langle \varepsilon(\mathbf{r}) \rangle = \varepsilon_0(z) + \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle \quad (1.33)$$

Для этого надо решить одномерное волновое уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + k^2 \left[\varepsilon_0(z) + \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle - \frac{q_0^2}{k^2} \right] \psi = 0 \quad (1.34)$$

Считая $\langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle$ малой поправкой к диэлектрической проницаемости $\varepsilon_0(z)$, найдем решение уравнения (1.34) в виде обобщенного борновского ряда, а коэффициенты отражения и прохождения представим в следующем виде:

$$R(q_0) = \left| r_0(q_0) + \Delta r_1(q_0) + \Delta r_2(q_0) + \dots \right|^2 \quad (1.35)$$

$$T(q_0) = \left| t_0(q_0) + \Delta t_1(q_0) + \Delta t_2(q_0) + \dots \right|^2 \frac{\text{Re}k_+(q_0)}{k_-(q_0)} \quad (1.36)$$

где $\Delta r_{1,2}$ и $\Delta t_{1,2}$ те же самые, что и в формулах (1.21)-(1.24).

Сравнение выражений (1.28)-(1.29) и (1.35)-(1.36) показывает, что первые три слагаемых в рядах (1.28)-(1.29) описывают взаимодействие волны с усредненной одномерно-неоднородной средой и полностью определяется одномерной плотностью распределения неоднородностей (шероховатостей). В то же время выражения (1.28)-(1.29) отличаются от (1.35)-(1.36) наличием членов $\Delta\alpha_1$ и $\Delta\beta_1$, которые, вообще говоря, одного порядка малости с $\Delta r_{1,2}$ и $\Delta t_{1,2}$, но имеют иную структуру. В частности, эти поправки определяются двумерной плотностью распределения неоднородностей (шероховатостей) и зависят от их радиуса корреляции.

Отметим, что в литературе, следуя [96], довольно часто используется модель эффективного переходного слоя, предполагающая, что коэффициент отражения от шероховатой среды полностью определяется усредненной диэлектрической проницаемостью (1.33). Проведенное рассмотрение показывает, что такой подход, строго говоря, верен лишь в случае дельта-коррелированных шероховатостей (с предельно малым радиусом корреляции в плоскости XY). При этом

$$\langle \Delta\varepsilon(z, \boldsymbol{\rho})\Delta\varepsilon(z', 0) \rangle = \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle \langle \Delta\varepsilon(z', 0) \rangle$$

для любых $\boldsymbol{\rho}$ и, следовательно, $\Delta\alpha_1 = \Delta\beta_1 \equiv 0$. Подчеркнем, что в случае дельта-коррелированных шероховатостей интенсивность рассеянного излучения становится пренебрежимо малой в соответствии с (1.30)-(1.32).

1.2.3. Теория возмущений по высоте шероховатостей

Представим теперь пространственное распределение диэлектрической проницаемости в несколько ином общем виде: $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_0(z - \zeta(\boldsymbol{\rho}, z))$, где функция ζ описывает неоднородности среды, причем поверхность постоянного значения ε определяется уравнением $z - \zeta(\boldsymbol{\rho}, z) = \text{const}$. Такое представление диэлектрической проницаемости подразумевает, что рассеяние рентгеновского излучения может быть связано как с шероховатостью границ раздела, так и с объемными неоднородностями различного типа. Ниже будем предполагать, что поверхность постоянного значения ε является однозначной функцией вектора $\boldsymbol{\rho}$ и неограничена в плоскости XY, т.е. исключим из рассмотрения включения или дефекты (неоднородности) конечного объема, расположенные внутри или на поверхности слоистой среды.

Считая, что неоднородности среды малы (что это значит, будет видно из дальнейшего изложения), представим возмущение диэлектрической проницаемости в виде двух первых членов ряда Тейлора (приближение теории возмущений по высоте шероховатостей):

$$\Delta\varepsilon(\mathbf{r}) \equiv \varepsilon_0(z - \zeta(\boldsymbol{\rho}, z)) - \varepsilon_0(z) \approx -\zeta(\boldsymbol{\rho}, z)\varepsilon_0'(z) + \frac{\zeta^2(\boldsymbol{\rho}, z)}{2}\varepsilon_0''(z) \quad (1.37)$$

Прежде всего, рассмотрим случай, когда функция $\zeta(\boldsymbol{\rho})$ не зависит от z , причем без ограничения общности будем считать, что $\langle \zeta(\boldsymbol{\rho}) \rangle = 0$. Такие неоднородности (шероховатости) среды, полностью коррелированные вдоль оси Z , в литературе называют конформными. Используя (1.37) и общие соотношения (1.19)-(1.32), находим существенно более простые выражения для индикатрисы рассеяния и коэффициентов отражения и прохождения, справедливые с точностью до членов порядка ζ^2 и, что представляется еще более важным, для любой функции распределения высот шероховатостей:

$$R(q_0) = R_0(q_0) + 2\text{Re} \left\{ r_0^*(q_0) [\Delta r_1(q_0) + \Delta \alpha_1(q_0)] \right\} \quad (1.38)$$

$$T(q_0) = T_0(q_0) + 2\text{Re} \left\{ t_0^*(q_0) [\Delta t_1(q_0) + \Delta \beta_1(q_0)] \right\} \frac{\text{Re} k_+(q_0)}{k_-(q_0)} \quad (1.39)$$

$$\Delta r_1 = \frac{ik^2 \sigma^2}{4k_-(q_0)} \int \psi_0^2(z, q_0) \varepsilon_0''(z) dz \quad (1.40)$$

$$\Delta t_1 = \frac{ik^2 \sigma^2}{4k_+(q_0)} \int \psi_0(z, q_0) \psi_1(z, q_0) \varepsilon_0''(z) dz \quad (1.41)$$

$$\Delta \alpha_1 = -\frac{ik^4}{8\pi^2 k_-(q_0)} \int \psi_0(z, q_0) \psi_0(z', q_0) g(z, z'; q) \text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) \varepsilon_0'(z) \varepsilon_0'(z') dz dz' d^2 \mathbf{q} \quad (1.42)$$

$$\Delta \beta_1 = -\frac{ik^4}{8\pi^2 k_+(q_0)} \int \psi_1(z, q_0) \psi_0(z', q_0) g(z, z'; q) \text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) \varepsilon_0'(z) \varepsilon_0'(z') dz dz' d^2 \mathbf{q} \quad (1.43)$$

$$\Phi(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0) = \frac{k^5}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} \left| \int \psi_0(z, q) \psi_0(z, q_0) \varepsilon_0'(z) dz \right|^2 \text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) \quad (1.44)$$

$$\Phi_+(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0) = \frac{k^5 \sqrt{\varepsilon_+}}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} \left| \int \psi_1(z, q) \psi_0(z, q_0) \varepsilon_0'(z) dz \right|^2 \text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) \frac{\text{Re} k_+(q)}{k_+(q)}; \quad (1.45)$$

$$2\pi \boldsymbol{\nu} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_0, \quad \mathbf{q}_0 = k \{ \cos \theta_0, 0 \}, \quad \mathbf{q} = k \{ \cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi \} \quad (1.46)$$

Статистические свойства шероховатостей описываются их двумерной спектральной плотностью мощности $\text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu})$ ($\text{PSD} \equiv \text{Power Spectral Density}$), представляющей собой Фурье-преобразование корреляционной функции $C(\boldsymbol{\rho})$:

$$\text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) = \int C(\boldsymbol{\rho}) \exp(2i\pi \boldsymbol{\nu} \boldsymbol{\rho}) d^2 \boldsymbol{\rho}; \quad C(\boldsymbol{\rho}) = \langle \zeta(\boldsymbol{\rho}) \zeta(0) \rangle, \quad (1.47)$$

где угловые скобки означают усреднение по реализациям.

Уравнение (1.46) представляет собой обычное условие дифракции рентгеновской волны на двумерной дифракционной решетке и означает, что в рамках первого порядка теории возмущений, единственная гармоника из спектра шероховатостей (1.47) с частотой $\boldsymbol{\nu}$ рассеивает излучение в направлении \mathbf{q} , если пучок падает на поверхность в направлении \mathbf{q}_0 .

Определим, наконец, коэффициенты интегрального рассеяния в вакуум TIS и в глубь среды TIS₊ как

$$\text{TIS}(q_0) = \int_{n_z < 0} \Phi(q, q_0) d\Omega = \int_{n_z < 0} \Phi(q, q_0) \frac{d^2 \mathbf{q}}{kk_-(q)} \quad (1.48)$$

$$\text{TIS}_+(q_0) = \int_{n_z > 0} \Phi_+(q, q_0) d\Omega' = \int_{n_z > 0} \Phi_+(q, q_0) \frac{d^2 \mathbf{q}}{\sqrt{\varepsilon_+} k k_+(q)}, \quad (1.49)$$

где интегрирование ведется по телесному углу Ω в пределах задней ($n_z < 0$) или передней ($n_z > 0$) полусферы, а при переходе к интегрированию по вектору \mathbf{q} учтено, что в соответствии с законом преломления Снеллиуса $q = k \cos \theta = k \sqrt{\varepsilon_+} \cos \theta'$.

Эти коэффициенты характеризуют полную мощность излучения, рассеянного шероховатостями в вакуум и в глубь среды, соответственно.

Подробный анализ особенностей рентгеновского отражения и рассеяния от среды с конформными шероховатостями будет представлен ниже в разделе 1.2.4.

Отметим, что во многих рентгеновских экспериментах для увеличения интенсивности регистрируемого сигнала измеряется угловое распределение рассеяния, проинтегрированное по азимутальному углу:

$$\Pi(\theta; \theta_0) = \frac{1}{Q_{inc}} \frac{dQ_{scat}}{d\theta} = \int \Phi(\theta, \varphi; \theta_0) d\varphi \quad (1.50)$$

В выражениях(1.42)-(1.46) от азимутального угла рассеяния φ зависит только аргумент PSD-функции, причем для изотропных поверхностей PSD-функция зависит от модуля вектора пространственной частоты: $\text{PSD}_{2D}(\nu) = 2\pi \int C(\rho) J_0(2\pi\nu\rho) \rho d\rho$, где $2\pi\nu = |\mathbf{q} - \mathbf{q}_0|$ и J_0 - функция Бесселя. Тогда интегрирование по азимутальному углу φ можно провести в явном виде:

$$\int_0^{2\pi} \text{PSD}_{2D}(\nu) d\varphi = (2\pi)^2 \int_0^\infty C(\rho) J_0(q_0\rho) J_0(q\rho) \rho d\rho; \quad (1.51)$$

Сделаем далее естественное для рентгеновского диапазона предположение о том, что радиус корреляции шероховатостей ξ значительно превышает длину волны излучения λ , а углы θ_0 и θ малы. Это означает, что вклад от малых значений $\rho \sim q^{-1} \sim \lambda$ в интеграл (1.51) пренебрежимо мал. Поэтому, воспользовавшись асимптотическим разложением функций Бесселя при больших значениях аргумента, выразим азимутальный интеграл от двумерной PSD-функции через одномерную

$$\int_0^{2\pi} \text{PSD}_{2D}(\nu) d\varphi \simeq \frac{\pi}{\sqrt{q_0 q}} \text{PSD}_{1D}(p); \quad \text{PSD}_{1D}(p) = 4 \int C(\rho) \cos(2\pi\rho p) d\rho \quad (1.52)$$

$$2\pi p = |q - q_0|, \quad q = k \cos \theta, \quad q_0 = k \cos \theta_0$$

Формулы (1.52) позволяют легко переходить от двумерной индикатрисы рассеяния к индикатрисе, проинтегрированной по азимутальному углу. Такой переход сводится, по существу, к замене двумерной PSD-функции на одномерную, что, однако, справедливо лишь для изотропных поверхностей в предположении $q_0\xi \gg 1$ и $q\xi \gg 1$, которое выполняется для рентгеновского излучения, но может не выполняться для видимого диапазона и, особенно, при нормальном падении излучения.

Вернемся к общему виду функции $\zeta = \zeta(\boldsymbol{\rho}, z)$. В соответствии с (1.37) основной вклад в рассеяние дают те области среды, где диэлектрическая проницаемость изменяется наиболее быстро. На практике - это резкие границы раздела между слоями различных материалов, где диэлектрическая проницаемость меняется скачком. Ограничим рассмотрение случаем двух скачкообразных границ раздела (пленка на подложке), который только и понадобится в дальнейшем, хотя не представляет никаких сложностей и общий случай произвольного числа слоев. Распределение диэлектрической проницаемости в отсутствие шероховатостей записывается в виде

$$\varepsilon_0(z) = 1 + [\varepsilon_f(z) - 1] H(z) + [\varepsilon_s(z) - \varepsilon_f(z)] H(z - h) \quad (1.53)$$

где h - толщина пленки, $H(z)$ - ступенчатая функция Хэвисайда ($H(z < 0) = 0$, $H(z > 0) = 1$), а непрерывные функции $\varepsilon_f(z)$ и $\varepsilon_s(z)$ описывают распределение $\varepsilon(z)$ внутри пленки и подложки, соответственно. В простейшем случае однородной пленки на однородной подложке $\varepsilon_f(z)$ и $\varepsilon_s(z)$ - постоянные.

При наличии шероховатостей распределение $\varepsilon(\mathbf{r})$ может быть записано в виде очевидного обобщения (1.53)

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = 1 + [\varepsilon_f(z) - 1] H(z - \zeta_f(\boldsymbol{\rho})) + [\varepsilon_s(z) - \varepsilon_f(z)] H(z - h - \zeta_s(\boldsymbol{\rho})) \quad (1.54)$$

где функции ζ_f и ζ_s описывают рельеф пленки и подложки, соответственно.

В разложении (1.37) для возмущения диэлектрической проницаемости при этом возникают дельта-функции и их производные, что, однако, не вызывает никаких проблем, поскольку $\Delta\varepsilon$ появляется только в подинтегральных выражениях, а функции поля на границах раздела являются непрерывными вместе со своими производными.

После интегрирования по азимутальному углу и пренебрегая рассеянием от объемных неоднородностей, получим:

$$\begin{aligned} \Pi(\theta, \theta_0) = \frac{k^3}{16\pi \sin \theta_0} & \left[|\Delta(0)\psi_0(0, \theta_0)\psi_0(0, \theta)|^2 \text{PSD}_{ff}(p) \right. \\ & \left. + |\Delta(h)\psi_0(h, \theta_0)\psi_0(h, \theta)|^2 \text{PSD}_{ss}(p) \right] \end{aligned} \quad (1.55)$$

$$+2\text{Re}(\Delta(0)\Delta^*(h)\psi_0(0,\theta_0)\psi_0(0,\theta)\psi_0^*(h,\theta_0)\psi_0^*(h,\theta))\text{PSD}_{sf}(p) \Big] \\ \text{PSD}_{ij}(p) = 4 \int \langle \zeta_i(\boldsymbol{\rho})\zeta_j(0) \rangle \cos(2\pi p\rho) d\rho, \quad i, j = \{s, f\}; \quad p = \lambda^{-1}|\cos\theta - \cos\theta_0|$$

где $\Delta(0) \equiv 1 - \varepsilon_f$ и $\Delta(h) = \varepsilon_f - \varepsilon_s$ - скачки диэлектрической проницаемости на границах раздела вакуум-пленка и пленка-подложка. Одномерные PSD-функции PSD_{ss} и PSD_{ff} описывают шероховатость подложки и внешней поверхности пленки, соответственно, а функция PSD_{sf} характеризует статистическую корреляцию шероховатостей обеих границ раздела пленки. Индикатриса рассеяния от шероховатой пленки (1.55) представляет собой сумму трех слагаемых, где первые два характеризуют независимое рассеяние от шероховатостей границ раздела пленка-вакуум и пленка-подложка, соответственно, а третье слагаемое описывает интерференцию волн, рассеянных от разных границ раздела с коррелированными шероховатостями.

Выражение для коэффициента отражения имеет вид (1.38), где

$$\Delta r_1(\theta_0) = \frac{ik}{2 \sin \theta_0} \left[\sigma_f^2 \Delta(0) \psi_0(0, \theta_0) \frac{d\psi_0}{dz}(0, \theta_0) + \sigma_s^2 \Delta(h) \psi_0(h, \theta_0) \frac{d\psi_0}{dz}(h, \theta_0) \right] \quad (1.56)$$

$$\Delta \alpha_1(\theta_0) = -\frac{ik^4}{8\pi \sin \theta_0} \left[\Delta^2(0) \psi^2(0, \theta_0) \int \text{PSD}_{ff}(p) \frac{\psi_0(0, \theta) \psi_1(0, \theta)}{W(\theta)} \sin \theta d\theta \right. \\ \left. + \Delta^2(h) \psi^2(h, \theta_0) \int \text{PSD}_{ss}(p) \frac{\psi_0(h, \theta) \psi_1(h, \theta)}{W(\theta)} \sin \theta d\theta \right. \\ \left. + 2\Delta(0)\Delta(h)\psi_0(0, \theta_0)\psi_0(h, \theta_0) \int \text{PSD}_{sf}(p) \frac{\psi_0(h, \theta)\psi_1(0, \theta)}{W(\theta)} \sin \theta d\theta \right] \quad (1.57)$$

а W - вронскиан функций ψ_0 и ψ_1 .

Все выражения, полученные в этом и предыдущем разделах, основывались на представлении (1.4) для пространственного распределения диэлектрической проницаемости, т.е. волна, удовлетворяющая уравнению (1.8) в отсутствие шероховатостей, рассматривалась в качестве невозмущенной (начального приближения). Можно построить обобщенный Борновский ряд для амплитуды рассеяния, равно как и ряд теории возмущений по высоте шероховатостей, который имеет другую структуру. Для этого в качестве невозмущенного распределения диэлектрической проницаемости следует использовать представление (1.33) (модель “эффективного” переходного слоя). В этом случае возмущение имеет вид $\Delta\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon(\mathbf{r}) \rangle$ и, следовательно, $\langle \Delta\varepsilon(\mathbf{r}) \rangle \equiv 0$. Тем самым, все слагаемые Δr_j и Δt_j в выражениях (1.19)-(1.20) и (1.38)-(1.39) исчезают и остаются только слагаемые $\Delta\alpha_j$ и $\Delta\beta_j$, определяемые корреляторами возмущения диэлектрической проницаемости. В качестве невозмущенных волн ψ_0 и ψ_1 в этом случае следует выбирать решения уравнения (1.34), имеющие те же самые асимптотики

(1.9)-(1.10), что и раньше. Поскольку уравнение (1.34) соответствует случаю дельта-коррелированных шероховатостей, можно надеяться, что введение “эффективного” переходного слоя позволит увеличить точность расчетов в случаях, когда доминирующий вклад в общую шероховатость границ раздела дают мелкомасштабные (высоочастотные) шероховатости. Однако этому подходу присущи два недостатка. Во-первых, необходимо знать одномерную функцию распределения высот шероховатостей. Во-вторых, невозмущенные решения ψ_0 и ψ_1 уравнения (1.33), как правило, могут быть найдены только численно.

1.2.4. Закон сохранения энергии

Все рентгеновские методы исследования вещества являются опосредованными, т.е. информация о внутренней структуре образца извлекается из измеренных кривых отражения и угловых распределений рассеяния. Тем самым проблема корректности теории, используемой для описания взаимодействия рентгеновской волны с шероховатой средой, приобретает особое значение для дальнейшего развития методов. Как было отмечено в [92], пробным камнем для обоснованности той или иной теории может служить закон сохранения энергии: если этот закон не выполняется, то все выводы теории могут быть поставлены под сомнение.

Несмотря на то, что результаты исследований шероховатостей с использованием DWBA представлены и обсуждаются во многих сотнях статей, тщательного анализа справедливости закона сохранения энергии в рамках этого приближения до сих пор проведено не было. Исключение составляет [92], автор которой попытался проанализировать проблему, но лишь для частного случая рассеяния излучения от одиночной поверхности в пределе больших и малых радиусов корреляции шероховатостей и в предположении нормального распределения их высот. Более того, в статье был сделан вывод о том, что закон сохранения энергии выполняется *приблизительно* в DWBA. Этот вывод не выдерживает критики с физической точки зрения. Дело в том, что всеобщность и фундаментальный характер закона сохранения энергии означает, что он либо выполняется в рамках той или иной теории, либо нет, но этот закон никоим образом не может выполняться *приблизительно*.

Ниже будет показано, что закон сохранения энергии выполняется *точно* в рамках DWBA для произвольной слоисто-неоднородной шероховатой среды и для произвольного закона распределения высот шероховатостей, если, как это и было сделано выше, при расчетах углового распределения рассеяния (1.30)-(1.31) учесть только однократное рассеяние волны на шероховатостях среды (первый член в ряду (1.18) для амплитуды рассеяния), а при расчетах коэффициентов зеркального отражения и прохождения (1.19)-(1.20) учесть как однократ-

ное, так и двукратное рассеяние (два первых члена в ряду (1.18)). Покажем, что тогда для непоглощающей среды точно выполняется равенство

$$R(q_0) + T(q_0) + \text{TIS}(q_0) + \text{TIS}_+(q_0) = 1 \quad (1.58)$$

Более того, оказываются справедливыми следующие соотношения:

$$\text{Re} \left\{ r_0^*(q_0) \Delta r_1(q_0) + t_0^*(q_0) \Delta t_1(q_0) \frac{\text{Re} k_+(q_0)}{k_-(q_0)} \right\} = 0 \quad (1.59)$$

$$2\text{Re} \left\{ r_0^*(q_0) \Delta r_2(q_0) + t_0^*(q_0) \Delta t_2(q_0) \frac{\text{Re} k_+(q_0)}{k_-(q_0)} \right\} + |\Delta r_1(q_0)|^2 + |\Delta t_1(q_0)|^2 \frac{\text{Re} k_+(q_0)}{k_-(q_0)} = 0 \quad (1.60)$$

$$2\text{Re} \left\{ r_0^*(q_0) \Delta \alpha_1(q_0) + t_0^*(q_0) \Delta \beta_1(q_0) \frac{\text{Re} k_+(q_0)}{k_-(q_0)} \right\} + \text{TIS}(q_0) + \text{TIS}_+(q_0) = 0 \quad (1.61)$$

которые показывают, что в выражениях (1.19)-(1.20) слагаемые, содержащие $\Delta r_{1,2}$ и $\Delta t_{1,2}$, описывают перераспределение падающей мощности между зеркально отраженной и преломленной волной, связанное с образованием “эффективного” переходного слоя как результата усреднения поверхностных шероховатостей (1.34)-(1.36). Слагаемые же, содержащие $\Delta \alpha_1$ и $\Delta \beta_1$, описывают перераспределение мощности между зеркально отраженной и преломленной компонентами, с одной стороны, и диффузным рассеянием в вакуум и в глубь среды, с другой.

Справедливость выражений (1.58)-(1.61) можно понять из следующих формальных соображений. Если бы значения R , T и диаграммы рассеяния Φ и Φ_+ удалось найти точно, то равенство (1.58) было бы выполнено. С другой стороны, точные значения R , T , Φ и Φ_+ являются некоторыми функционалами от возмущения диэлектрической проницаемости $\Delta \varepsilon$ и могут быть разложены в функциональный ряд Тейлора по степеням $\Delta \varepsilon$. Полученные выражения (1.19)-(1.20) и (1.30)-(1.31) и есть первые члены этих разложений. При этом разложение диаграммы рассеяния начинается со слагаемого порядка $(\Delta \varepsilon)^2$, а разложения R и T - со слагаемого порядка $(\Delta \varepsilon)^0$.

Поскольку $R_0 + T_0 = 1$, ясно, что каждая сумма членов разложения (1.58), соответствующих одной и той же степени $\Delta \varepsilon$, должна быть равна нулю аналогично тому, как это имеет место при разложении функции в обычный ряд Тейлора. Следовательно, выражение (1.59) должно быть справедливо, как сумма всех членов разложения порядка $\Delta \varepsilon$. Левые части (1.60) и (1.61) в сумме также должны быть равны нулю, как сумма всех членов разложения (1.58), имеющих порядок $(\Delta \varepsilon)^2$. Легко также понять, что (1.60) и (1.61) должны быть справедливы и по отдельности, поскольку левая часть (1.60) не зависит от радиуса корреляции

высот шероховатостей и описывает взаимодействие волны с плавной границей раздела сред (1.33). В частности, если радиус корреляции равен 0, то (1.61) выполняется автоматически, поскольку при этом $\Delta\alpha_1 = \Delta\beta_1 = 0$ и $\Phi = \Phi_+ = 0$. Следовательно, условие (1.60) должно выполняться независимо от (1.61).

Ясно, что все приведенные рассуждения будут справедливы только в том случае, если удастся доказать, что функционалы R , T , Φ и Φ_+ могут быть разложены в *сходящиеся* функциональные ряды Тейлора по степеням $\Delta\varepsilon(\mathbf{r})$. В настоящей работе соотношения (1.58)-(1.61) доказываются, исходя непосредственно из выражений для коэффициентов отражения, прохождения и угловых распределений рассеяния, полученных выше.

Предварительно приведем ряд вспомогательных формул, необходимых для доказательства. Сначала выпишем следующие соотношения, связывающие значения амплитудных коэффициентов отражения и прохождения r_0 , \tilde{r}_0 , t_0 и \tilde{t}_0 , через которые выражаются функции поля ψ_0 и ψ_1 в асимптотических областях $z \rightarrow \pm\infty$:

$$|r_0|^2 + |t_0|^2 \frac{\text{Re}k_+}{k_-} = 1 \quad (1.62)$$

$$k_+ t_0 = k_- \tilde{t}_0 \quad (1.63)$$

$$|\tilde{r}_0|^2 \frac{\text{Re}k_+}{k_-} + |\tilde{t}_0|^2 = \frac{\text{Re}k_+}{k_-} + 2\text{Im}\tilde{r}_0 \cdot \frac{\text{Im}k_+}{k_-} \quad (1.64)$$

$$it_0 \tilde{r}_0^* \frac{\text{Re}k_+}{k_-} + i\tilde{t}_0^* r_0 = t_0 \frac{\text{Im}k_+}{k_-}. \quad (1.65)$$

Эти выражения являются следствием того, что вронскианы функций $\psi_0(z, q)$, $\psi_0^*(z, q)$, $\psi_1(z, q)$ и $\psi_1^*(z, q)$ не зависят от z в случае, когда $\varepsilon_0(z)$ - вещественная функция, и легко могут быть получены из выражений (1.9)-(1.10) для асимптотических представлений функций поля ψ_0 и ψ_1 . Отметим, что в учебниках по квантовой механике (например, [106]) выражения (1.62)-(1.65) приводятся, как правило, для частного случая $\text{Im}k_+ = 0$, т.е. в предположении, что потенциал (поляризуемость вещества в оптике $\varepsilon - 1$) стремится к нулю в обеих асимптотических областях $z \rightarrow \pm\infty$.

Далее отметим следующие соотношения между решениями $\psi_0(z, q)$ и $\psi_1(z, q)$ волнового уравнения (1.8), справедливые для произвольной вещественной функции $\varepsilon_0(z)$:

$$\psi_0^*(z, q) = r_0^*(q)\psi_0(z, q) + t_0^*(q)\psi_1(z, q) \frac{\text{Re}k_+(q)}{k_+(q)} \quad (1.66)$$

$$\psi_0(z, q) = \frac{r_0(q)k_-(q)}{k_+(q)t_0(q)}\psi_1(z, q) + \frac{k_-(q)}{k_+^*(q)t_0^*(q)}\psi_1^*(z, q). \quad (1.67)$$

Для доказательства справедливости (1.66)-(1.67) следует убедиться, используя (1.9)-(1.10) и (1.62)-(1.65), что эти соотношения выполняются в асимптотических областях $z \rightarrow \pm\infty$. Далее, поскольку и правые, и левые части выражений (1.66)-(1.67) являются решениями одного

и того же волнового уравнения (1.8) и удовлетворяют одним и тем же граничным условиям, то в силу единственности решения граничной задачи соотношения (1.66)-(1.67) будут справедливы для любого z . Выражения (1.66)-(1.67) есть не что иное, как представления решений ψ_0^* и ψ_0 волнового уравнения (1.8) через два других линейно независимых его решения ψ_0 , ψ_1 или ψ_1 , ψ_1^* , соответственно.

Используя (1.66)-(1.67), докажем теперь справедливость закона сохранения энергии (1.58) и соотношений (1.59)-(1.61).

Рассмотрим левую часть выражения (1.59), воспользовавшись явным видом (1.21)-(1.22) величин Δr_1 и Δt_1 :

$$I_1 \equiv \operatorname{Re} \left[r_0^*(q_0) \Delta r_1(q_0) + t_0^*(q_0) \Delta t_1(q_0) \operatorname{Re} \frac{k_+(q_0)}{k_-(q_0)} \right] =$$

$$-\frac{k^2}{2k_-(q_0)} \int \langle \Delta \varepsilon(z, 0) \rangle \operatorname{Im} \left\{ \psi_0(z, q_0) \left[r_0^*(q_0) \psi_0(z, q_0) + t_0^*(q_0) \psi_1(z, q_0) \frac{\operatorname{Re} k_+(q_0)}{k_+(q_0)} \right] \right\} dz.$$

Учитывая (1.66), находим, что под знаком интеграла стоит функция

$$\operatorname{Im} |\psi_0(z, q_0)|^2 \equiv 0$$

. Тем самым $I_1 \equiv 0$ и соотношение (1.59) доказано.

Докажем теперь более сложное соотношение (1.61). Прежде всего, перейдем от интегрирования по телесному углу к интегрированию по вектору \mathbf{q} . Тогда после некоторых алгебраических преобразований левая часть (1.61) может быть записана в следующем виде:

$$I_2 = \frac{k^4}{4k_-(q_0)} \int E(z, z'; \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}) \psi_0(z, q_0) \psi_0^*(z', q_0) F(z, z'; q) dz dz' d^2 \mathbf{q},$$

где

$$F(z, z'; q) \equiv \frac{\psi_0(z, q) \psi_0^*(z', q)}{k_-(q)} + \frac{\psi_1(z, q) \psi_1^*(z', q)}{k_+(q)} \frac{\operatorname{Re} k_+(q)}{k_+(q)}$$

$$- \frac{\psi_0(z_>, q) \psi_1(z_<, q)}{k_+(q) t_0(q)} - \frac{\psi_0^*(z_>, q) \psi_1^*(z_<, q)}{k_+^*(q) t_0^*(q)}. \quad (1.68)$$

При выводе (1.68) учтено, что $D(z, z') = E(z, z')$ в отсутствие поглощения, а функции E и g симметричны по отношению к перестановке аргументов z и z' , т.е. $E(z, z') = E(z', z)$ и $g(z, z') = g(z', z)$. Далее рассмотрим по отдельности случаи $z > z'$ и $z < z'$ и, используя тождество (1.67), выразим функции ψ_0 и ψ_0^* через функции ψ_1 и ψ_1^* . Тогда немедленно получим, что

$$F(z, z'; q) \equiv 0 \quad \text{при любых } z, z' \text{ и } q,$$

если воспользуемся соотношением (1.62) и тем фактом, что $[|k_+|^2 - k_+^2] \operatorname{Re} k_+ \equiv 0$, поскольку $k_+(q)$ принимает либо чисто вещественные, либо чисто мнимые значения в отсутствие поглощения. Тем самым, $I_2 \equiv 0$ и соотношение (1.61) доказано.

Осталось доказать соотношение (1.60). Воспользовавшись явным видом (1.21)-(1.24) величин $\Delta r_{1,2}$ и $\Delta t_{1,2}$, запишем левую часть (1.60) в следующем виде:

$$I_3 = \frac{k^4}{4k_-(q_0)} \int \langle \Delta\varepsilon(z, 0) \rangle \langle \Delta\varepsilon(z', 0) \rangle \psi_0(z, q_0) \psi_0^*(z', q_0) F(z, z'; q_0) dz dz',$$

куда входит все та же функция $F(z, z'; q)$, определенная в (1.68), но при частном значении аргумента $q = q_0$. Поскольку $F \equiv 0$, то и $I_3 \equiv 0$ и, следовательно, соотношение (1.60) справедливо. Наконец, просуммировав тождества (1.59)-(1.61), получим (1.58).

Таким образом доказано, что в борновском приближении с искаженными волнами закон сохранения энергии выполняется, если в рядах для потоков отраженного, преломленного и рассеянного излучения сохранить все члены порядка $(\Delta\varepsilon)^2$. Точно так же выполняется и оптическая теорема (1.17), если в интегралах, содержащих $|A_{\pm}|^2$, учесть только однократное рассеяние, а в правой части (1.17) сохранить члены, отвечающие и однократному, и двукратному рассеянию. Вид возмущения диэлектрической проницаемости $\Delta\varepsilon(\mathbf{r})$ в (1.4) нигде не был конкретизирован, т.е. все выводы этого раздела справедливы при наличии как поверхностных, так и объемных неоднородностей среды.

Подобным же образом доказывается, что и теория возмущений по высоте шероховатостей (например, выражения (1.38)-(1.43)) обеспечивает выполнение закона сохранения энергии, если в рядах для коэффициентов отражения, прохождения и интегрального рассеяния сохранить все члены порядка ζ^2 .

В заключение раздела отметим, что во всех опубликованных статьях по рентгеновскому рассеянию от шероховатых поверхностей в приближении DWBA, используется не точный подход, изложенный выше, а его упрощенный вариант. Следуя [87], авторы всех других статей заменяют точную невозмущенную функцию поля $\psi_0(z; q)$ на приближенную, а именно: точное выражение для поля в вакууме заменяется аналитическим продолжением поля в веществе. Это приближение позволяет несколько упростить расчеты, но ценой довольно существенного рассогласования с вычислениями, проведенными в рамках точного DWBA, о чем подробнее будет сказано ниже. Более того, неизвестно, выполняется ли закон сохранения энергии при таком приближении, поскольку, если не по другим причинам, выражения (1.66)-(1.67) становятся несправедливыми. Возможно, именно это обстоятельство не позволило автору [92] доказать точное выполнение закона сохранения энергии в используемом им приближении.

1.2.5. Сравнение различных подходов

Рассмотрим простейший случай одиночной поверхности со скачкообразной границей раздела. Тогда общее соотношение (1.30) для индикатрисы рассеяния в приближении DWBA преобразуется в компактную формулу, справедливую для любого распределения высот шероховатостей [A24]

$$\Phi(\theta, \varphi) = \frac{k^5 |1 - \varepsilon_+|^2}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} \cdot \frac{1}{(q_0^2 - q^2)^2} \int \left[\langle W(\zeta_1(\vec{\rho}); q, q_0) W^*(\zeta_2(0); q, q_0) \rangle - \langle W(q, q_0) \rangle \langle W^*(q, q_0) \rangle \right] \exp[i(\mathbf{q}_0 - \mathbf{q})\boldsymbol{\rho}] d^2\boldsymbol{\rho} \quad (1.69)$$

где $W \equiv \psi'_0(z, q_0)\psi_0(z, q) - \psi_0(z, q_0)\psi'_0(z, q)$ - вронскиан функций $\psi_0(z, q_0)$ и $\psi_0(z, q)$.

Предположим, что распределение шероховатостей по высоте подчиняется нормальному закону и используем следующее разложение для двумерной плотности распределения высот шероховатостей [107]

$$\begin{aligned} p_2(\zeta_1, \zeta_2; \boldsymbol{\rho}) &\equiv \frac{1}{2\pi\sigma^2\sqrt{1 - c^2(\boldsymbol{\rho})}} \exp\left[-\frac{\zeta_1^2 + \zeta_2^2 - 2c(\boldsymbol{\rho})\zeta_1\zeta_2}{2\sigma^2(1 - c^2(\boldsymbol{\rho}))}\right] \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{\zeta_1^2 + \zeta_2^2}{2\sigma^2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n(\boldsymbol{\rho})}{2^n \cdot n!} H_n\left(\frac{\zeta_1}{\sigma\sqrt{2}}\right) H_n\left(\frac{\zeta_2}{\sigma\sqrt{2}}\right) \end{aligned} \quad (1.70)$$

где $C(\boldsymbol{\rho}) = \langle \zeta(\boldsymbol{\rho})\zeta(0) \rangle$ - корреляционная функция, $c(\boldsymbol{\rho}) \equiv C(\boldsymbol{\rho})/\sigma^2$ - нормированная корреляционная функция, $\sigma \equiv \sqrt{C(0)}$ - среднеквадратичная высота шероховатостей, а $H_n(x)$ - полиномы Эрмита.

Подставляя (1.70) в (1.69) и интегрируя по ζ_1 и ζ_2 один раз по частям, находим выражения для индикатрисы рассеяния в вакуум в виде бесконечных рядов по степеням корреляционной функции [A24]

$$\Phi(\theta, \varphi) = \frac{k^5 |1 - \varepsilon_+|^2 \sigma^2}{(2\pi)^3 k_-(q_0)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n \cdot n!} |K_{n-1}(q, q_0)|^2 \int \exp(2\pi i \boldsymbol{\nu} \boldsymbol{\rho}) c^n(\boldsymbol{\rho}) d^2\boldsymbol{\rho} \quad (1.71)$$

$$\begin{aligned} \Pi(\theta) &= \frac{k^4 |1 - \varepsilon_+|^2 \sigma^2}{2\pi^2 k_-(q_0)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n \cdot n!} |K_{n-1}(q, q_0)|^2 \int c^n(\rho) \cos(2\pi p \rho) d\rho \\ &2\pi \boldsymbol{\nu} = \mathbf{q}_0 - \mathbf{q}; \quad 2\pi p = |q_0 - q| \end{aligned} \quad (1.72)$$

где коэффициенты K_n определены следующим образом:

$$K_n(q, q_0) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n\left(\frac{\zeta}{\sigma\sqrt{2}}\right) \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2\sigma^2}\right) \psi_0(\zeta, q_0)\psi_0(\zeta, q) d\zeta \quad (1.73)$$

Для удобства численных расчетов введем следующие обозначения:

$$\psi_0(\zeta, q_0)\psi_0(\zeta, q) \equiv \begin{cases} b_1 \exp(i\kappa_1 \zeta), & \text{если } \zeta > 0 \\ \sum_{j=2}^5 b_j \exp(i\kappa_j \zeta), & \text{если } \zeta < 0 \end{cases} \quad (1.74)$$

где

$$\begin{aligned}
b_1 &= t(q_0)t(q) & ; & & \kappa_1 &= k_+(q_0) + k_+(q) \\
b_2 &= 1 & ; & & \kappa_2 &= k_-(q_0) + k_-(q) \\
b_3 &= r(q_0)r(q) & ; & & \kappa_3 &= -\kappa_2 \\
b_4 &= r(q) & ; & & \kappa_4 &= k_-(q_0) - k_-(q) \\
b_5 &= r(q_0) & ; & & \kappa_5 &= -\kappa_4
\end{aligned} \tag{1.75}$$

Отметим, что в силу непрерывности поля и его производной на границе раздела сред параметры b_j и κ_j удовлетворяют соотношениям:

$$b_1 = \sum_{j=2}^5 b_j \quad ; \quad b_1 \kappa_1 = \sum_{j=2}^5 b_j \kappa_j \tag{1.76}$$

Используя (1.74)-(1.76), представим коэффициенты K_n в виде, удобном для численных расчетов:

$$K_n(q, q_0) = \sum_{j=1}^5 b_j D_n^{(j)}(q, q_0) \tag{1.77}$$

где $D_n^{(j)}$ могут быть найдены с помощью рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned}
D_n^{(1)} &= i\kappa_1 \sigma \sqrt{2} D_{n-1}^{(1)} + H_{n-1}(0) ; \quad n = 1, 2, \dots \\
D_n^{(j)} &= i\kappa_j \sigma \sqrt{2} D_{n-1}^{(j)} - H_{n-1}(0) ; \quad n = 1, 2, \dots ; \quad j = 2, \dots, 5 \\
D_0^{(1)} &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(-\frac{\sigma^2 \kappa_1^2}{2}\right) \operatorname{erfc}\left(-\frac{i\sigma \kappa_1}{\sqrt{2}}\right) \\
D_0^{(j)} &= \frac{\sqrt{\pi}}{2} \exp\left(-\frac{\sigma^2 \kappa_j^2}{2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{i\sigma \kappa_j}{\sqrt{2}}\right) ; \quad j = 2, \dots, 5
\end{aligned} \tag{1.78}$$

Формулы (1.71)-(1.78) позволяют без особого труда рассчитать численно индикатрису рассеяния от шероховатой поверхности.

Убедимся, прежде всего, что ряд (1.71) сходится при любых значениях векторов \vec{q} и \vec{q}_0 . Для этого используем следующую оценку для многочленов Эрмита, справедливую при любых z и n [107]:

$$\exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) |H_n(z)| < \alpha \sqrt{2^n \cdot n!} ; \quad \alpha \simeq 1.086435$$

Учитывая, кроме того, что $|\psi_0(z, q)| \leq 2$ для любых z находим оценку сверху для индикатрисы рассеяния:

$$\Phi(\theta, \varphi) < \frac{2k^5 |1 - \varepsilon_+|^2 \sigma^2 \alpha^2}{\pi^2 k_-(q_0)} \int \exp(2\pi i \nu \rho) \cdot \ln \frac{1}{1 - c(\rho)} d^2 \rho$$

Для сходимости интеграла в полученном выражении достаточно, чтобы функция корреляции $c(\rho)$ убывала при $\rho \rightarrow \infty$ быстрее, чем $1/\rho$, а при $\rho \rightarrow 0$ приближалась к единице степенным образом $c(\rho \rightarrow 0) = 1 - \beta\rho^\alpha$. При выполнении этих условий ряд (1.71) сходится при любых значениях \mathbf{q} и \mathbf{q}_0 . Аналогичная оценка справедлива и для ряда (1.72). Расчеты показывают, что ряды сходятся достаточно быстро и суммирование уже нескольких первых членов ряда обеспечивает, как правило, точность расчета, достаточную для практических целей, если среднеквадратичная шероховатость σ не превышает 1-2 нм, по крайней мере.

Установим теперь связь между DWBA приближением и другими подходами, описанными в литературе.

Разложив (1.71) в ряд по высоте шероховатостей σ и ограничившись первым исчезающим членом, получим формулы теории возмущений, которые, как отмечалось выше, справедливы для любого распределения высот шероховатостей. Для этого в (1.74) достаточно положить $\psi_0(\zeta, q_0)\psi_0(\zeta, q) = b_1$ (приближение дельта-образного возмущения). Тогда в рядах (1.71), (1.72) остается только один член с $n = 1$, а выражение для индикатрисы рассеяния становится очень простым:

$$\Phi(\theta, \phi) = \frac{k^4 |1 - \varepsilon|^2}{(4\pi)^2 \sin \theta_0} |t(\theta_0)t(\theta)|^2 \text{PSD}_{2D}(\nu) \quad (1.79)$$

$$\Pi(\theta) = \frac{k^3 |1 - \varepsilon|^2}{16\pi \sin \theta_0} |t(\theta_0)t(\theta)|^2 \text{PSD}_{1D}(p), \quad t(\theta) = \frac{2 \sin \theta}{\sin \theta + \sqrt{\varepsilon - \cos^2 \theta}}$$

где t - амплитудный коэффициент прохождения (амплитуда поля невозмущенной волны на идеально гладкой поверхности). Эти выражения могут быть также легко получены из (1.44) или (1.55), т.е. в отличие от формул DWBA они не зависят от функции распределения высот шероховатостей. Отметим, что выражение (1.79) для двумерной индикатрисы рассеяния хорошо известно в видимой оптике и широко используется при исследованиях шероховатостей методом рассеяния видимого излучения.

Положим теперь, следуя [87], в выражении (1.74) $\psi_0(\zeta, q_0)\psi_0(\zeta, q) = b_1 \exp(i\kappa_1 \zeta)$ для всех значений $\zeta \in [-\infty, +\infty]$, а не только для $\zeta > 0$. Иными словами, заменим поле невозмущенной волны в вакууме на аналитическое продолжение поля в веществе. Тогда интегралы (1.73) рассчитываются в явном виде

$$K_n = \sqrt{\pi} t(q_0)t(q) \left(i\sigma\sqrt{2}\kappa_1\right)^n \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\sigma^2\kappa_1^2\right)$$

а ряды (1.71) и (1.72) суммируются точно. Окончательный результат имеет вид:

$$\Phi_{SA}(\theta, \varphi) = \frac{k^5 |1 - \varepsilon_+|^2 |t(q)t(q_0)|^2}{(4\pi)^2 k_-(q_0) |\kappa_1|^2} \exp(-\sigma^2 \text{Re } \kappa_1^2)$$

$$\times \int \exp(2\pi i \nu \rho) \cdot [\exp(\sigma^2 |\kappa_1|^2 c(\rho)) - 1] d^2 \rho \quad (1.80)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{SA}(\theta) &= \frac{k^4 |1 - \varepsilon_+|^2 |t(q)t(q_0)|^2}{4\pi k_-(q_0) |\kappa_1|^2} \exp(-\sigma^2 \text{Re } \kappa_1^2) \\ &\times \int \cos(2\pi p \rho) \cdot [\exp(\sigma^2 |\kappa_1|^2 c(\rho)) - 1] d\rho \end{aligned} \quad (1.81)$$

Выражение (1.80) совпадает (с точностью до обозначений) с тем, которое было получено в [87]. В дальнейшем мы будем называть формулы (1.80)-(1.81) приближением Синха (SA \equiv Sinha's Approximation) по имени одного из авторов работы [87]. Именно это приближение, как правило, и используется в литературе при анализе рассеяния РИ от шероховатых поверхностей [88]-[92].

По существу, как теория возмущений (1.79), так и формула Синха (1.80) основаны на приближенном представлении поля невозмущенной волны ($\psi_0(z, q_0)$ и $\psi_0(z, q)$) вблизи шероховатой границы раздела сред. Условия применимости обеих приближений состоят в том, чтобы ошибка определения поля волны была мала при $z = \pm\sigma$. Применимость теории возмущений ограничивается неравенствами

$$k\sigma \sin \theta_0 \ll 1; \quad k\sigma |\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0|^{1/2} \ll 1; \quad k\sigma \sin \theta \ll 1; \quad k\sigma |\varepsilon_+ - \cos^2 \theta|^{1/2} \ll 1 \quad (1.82)$$

которые означают, что высота шероховатостей достаточно мала, а измерения рассеяния проводятся при не слишком больших углах θ . Отметим, что еще Рэлей ввел параметр $\eta_R = 2k\sigma \sin \theta_0$, который представляет собой разность фаз волн, отраженных от вершины и подошвы неоднородности высотой σ , и разделял поверхности на гладкие или шероховатые в зависимости от того, больше или меньше $\pi/4$ значение этого параметра. Первые два неравенства в (1.82) как раз и соответствуют критерию Рэля, если угол скольжения зондирующего пучка порядка критического угла ПВО.

Приближение Синха также справедливо лишь при достаточно малой высоте шероховатостей

$$k\sigma |1 - \varepsilon_+|^{1/2} \ll 1 \quad (1.83)$$

В то же время условие (1.83) отличается от условий применимости теории возмущений (1.82) тем, что не зависит ни от угла скольжения падающей волны θ_0 , ни от угла рассеяния θ .

Отметим, что можно рассчитать индикатрису рассеяния (1.71), (1.72) с использованием приближения, которое в некотором смысле является дополнительным к подходу Синха (CSA \equiv Complimentary to SA). Для этого следует положить в выражении (1.74) $\psi_0(\zeta, q_0)\psi_0(\zeta, q) =$

$\sum_{j=2}^5 b_j \exp(i\kappa_j \zeta)$ для всех значений $\zeta \in [-\infty, +\infty]$, т.е. в противоположность SA, заменить поле невозмущенной волны в веществе на аналитическое продолжение поля в вакууме. Тогда индикатриса рассеяния приводится к следующему виду:

$$\begin{aligned} \Phi_{CSA}(\theta, \varphi) &= \frac{k^5 |1 - \varepsilon_+|^2}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} \sum_{j,l=2}^5 \frac{b_j b_l^*}{\kappa_j \kappa_l^*} \exp \left[-\frac{\sigma^2}{2} (\kappa_j^2 + \kappa_l^{*2}) \right] \\ &\times \int \exp(2\pi i \nu \rho) \cdot [\exp(\sigma^2 \kappa_j \kappa_l^* c(\rho)) - 1] d^2 \rho \end{aligned} \quad (1.84)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{CSA}(\theta) &= \frac{k^4 |1 - \varepsilon_+|^2}{4\pi k_-(q_0)} \sum_{j,l=2}^5 \frac{b_j b_l^*}{\kappa_j \kappa_l^*} \exp \left[-\frac{\sigma^2}{2} (\kappa_j^2 + \kappa_l^{*2}) \right] \\ &\times \int \cos(2\pi p \rho) \cdot [\exp(\sigma^2 \kappa_j \kappa_l^* c(\rho)) - 1] d\rho \end{aligned} \quad (1.85)$$

Условия применимости формул, полученных в CSA, точно такие же как и для SA, и определяются неравенством (1.83).

На рис.1.4 показаны индикатрисы рассеяния рентгеновского излучения $\Pi(\theta)$ (длина волны $\lambda = 0,154$ нм) от золотого отражающего покрытия (высота шероховатостей $\sigma = 1$ нм), рассчитанные в различных приближениях при угле скольжения падающего пучка $\theta_0 = 0.3^\circ < \theta_c$ и $\theta_0 = 0.8^\circ > \theta_c$, где критический угол ПВО $\theta_c \simeq 0.56^\circ$.

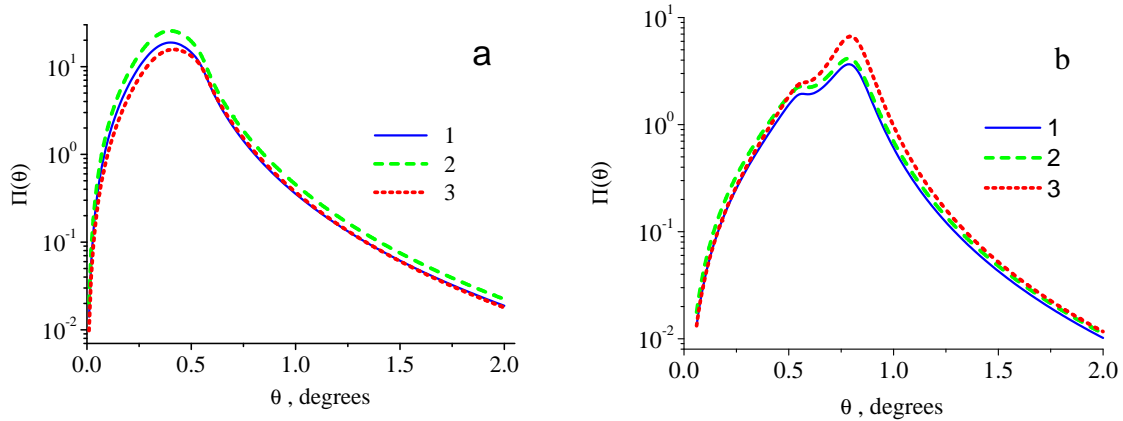


Рис. 1.4. Индикатриса рассеяния рентгеновского излучения $\Pi(\theta)$ от золотого отражающего покрытия на длине волны $\lambda = 0.154$ нм, рассчитанная с использованием формул DWBA (1), SA (2) и PT (3). Расчеты проведены для случая падения зондирующего пучка в области полного внешнего отражения при $\theta_0 = 0.3^\circ$ (а) и вне ее при $\theta_0 = 0.8^\circ$ (б). Корреляционная функция имеет вид (1.88) при $\sigma = 1$ нм, $\xi = 1$ мкм и $\alpha = 0.5$. (Из [A24]).

Как видно из рис.1.4а, вблизи от зеркально отраженного пучка интенсивности рассеяния, рассчитанные в SA и DWBA приближениях, отличаются примерно в 1.3 раза. Расчеты же, проведенные в рамках теории возмущений намного лучше согласуются с вычислениями,

проведенными в рамках точного DWBA приближения, причем при увеличении угла рассеяния θ кривые, рассчитанные в DWBA и РТ практически совпадают, хотя третье и четвертое условие применимости теории возмущений (1.82) не выполняются при больших углах рассеяния. Причины этого факта будут подробнее обсуждаться ниже. Параметр Рэлея не так уж мал и равен $\eta_R \approx 0.43$ в этом примере.

Если зондирующий пучок падает вне области ПВО (рис.1.4b), то теория возмущений становится менее точной, поскольку первое и второе неравенства в (1.82) перестают выполняться, а параметр Рэлея становится равным $\eta_R \approx 1.1$. Тем не менее, даже в этом примере согласие между РТ и DWBA вполне удовлетворительное, причем оно улучшается при увеличении угла рассеяния θ .

Рассмотрим поэтому асимптотическое поведение индикатрисы при рассеянии излучения на большие углы θ более детально. Эта асимптотическая зависимость определяется, вообще говоря, видом корреляционной функции $c(\rho)$.

В настоящее время в литературе по исследованию шероховатостей широко используется модель самоаффинной фрактальной поверхности [64, 108–110]. В математическом плане эта модель предполагает, что структурная функция шероховатостей однородной и изотропной поверхности при достаточно малых ρ ведет себя как

$$g(\rho) = \langle [\zeta(\rho) - \zeta(0)]^2 \rangle \sim \rho^{2\alpha}; \quad 0 < \alpha < 1 \quad (1.86)$$

где параметр α характеризует фрактальную размерность поверхности $D = 3 - \alpha$. Это означает, что корреляционная функция $C(\rho) = \sigma^2 - g(\rho)/2$ при малых ρ приближается к единице следующим образом: $C(\rho \rightarrow 0) = \sigma^2 - \beta\rho^{2\alpha}$, т.е. не является аналитической в нуле (при $\alpha \neq 1/2$).

Предположим, что корреляционная функция имеет вид:

$$C(\rho) \equiv \sigma^2 f((\rho/\xi)^\alpha); \quad 0 < \alpha < 1$$

$$f(x) \in C^\infty([x, \infty)); \quad f(0) = 1; \quad f'(0) = 0; \quad f''(0) \neq 0 \quad (1.87)$$

где функция $f(x)$ имеет непрерывные производные любого порядка по аргументу x всюду при $x \in [0, \infty)$. В (1.87) ξ - радиус корреляции высот шероховатостей, а штрих означает производную по аргументу x . Частный вид такой корреляционной функции, а именно:

$$C(\rho) = \sigma^2 \exp \left[- \left(\frac{\rho}{\xi} \right)^{2\alpha} \right]; \quad \text{т.е.} \quad f(x) = \exp(-x^2) \quad (1.88)$$

широко используется в литературе для теоретических расчетов и при анализе данных эксперимента [87]-[92].

Используя лемму Эрдейи [111], находим асимптотическое поведение интегралов в (1.72) при больших пространственных частотах $p \rightarrow \infty$, которое справедливо для любой функции $f(x)$, удовлетворяющей условиям (1.87):

$$I_n = \int_0^{\infty} c^n \left[\left(\frac{\rho}{\xi} \right)^\alpha \right] \cos(2\pi p \rho) d\rho \approx n \frac{\Gamma(1+2\alpha) \sin(\pi\alpha)}{4\pi \xi^{2\alpha} p^{1+2\alpha}} |f''(0)| \quad (1.89)$$

Учитывая, что при $\rho = 0$ двумерная функция распределения высот шероховатостей сводится к одномерной $p_2(\zeta_1, \zeta_2, 0) = p_1(\zeta_1)\delta(\zeta_1 - \zeta_2)$, суммирование ряда (1.72) может быть выполнено точно и окончательный результат имеет вид:

$$\Pi(\theta) \approx \frac{k^5 |1 - \varepsilon_+|^2 \sigma^2}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} \cdot \frac{|f''(0)| \Gamma(1+2h) \sin(\pi h)}{a^{2h} p^{1+2h}} \cdot J(q, q_0) \quad (1.90)$$

где

$$J(q, q_0) = \frac{|b_1|^2}{2} \exp[2(\sigma \operatorname{Im} \kappa_1)^2] \operatorname{erfc}(\sigma \sqrt{2} \operatorname{Im} \kappa_1) \quad (1.91)$$

$$+ \sum_{j,l=2}^5 \frac{b_j b_l^*}{2} \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2} (\kappa_j - \kappa_l)^2\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{i\sigma}{\sqrt{2}} (\kappa_j - \kappa_l)\right]$$

Аналогичные расчеты асимптотического поведения индикатрисы рассеяния в SA, CSA и PT приближениях приводят к схожим формулам с несколько иными функциями J :

$$J_{PT}(q, q_0) = |b_1|^2 = |t(q_0)t(q)|^2 \quad (1.92)$$

$$J_{SA}(q, q_0) = |b_1|^2 \cdot \exp[2(\sigma \operatorname{Im} \kappa_1)^2] \quad (1.93)$$

$$J_{CSA}(q, q_0) = \sum_{j,l=2}^5 b_j b_l^* \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2} (\kappa_j - \kappa_l^*)^2\right] \quad (1.94)$$

Предположим, что исследуемая поверхность достаточно гладкая, так что условие (1.83) выполнено, а зондирующий пучок падает в области ПВО $\theta_0 < \theta_c$. Рассмотрим интенсивность рассеяния на большие углы, считая справедливыми условия $p\xi \gg 1$ и $\theta \gg \theta_c$. Тогда в выражениях для параметров b_j можно положить $r(q) \approx 0$ и $t(q) \approx 1$ и все функции J , рассчитанные в разных приближениях (1.91)-(1.94), становятся приблизительно равными $J \simeq |t(q_0)|^2$. Подчеркнем, что функции J , рассчитанные в PT, DWBA и CSA, ограничены при любых значениях σ и ε_+ , в то время как функция J_{SA} неограниченно возрастает при увеличении σ или $|\varepsilon_+|$. В результате, при рассеянии на большие углы приближение Синха хуже согласуется с расчетами в DWBA, чем теория возмущений или CSA.

Тем самым, в случае малых шероховатостей (условие (1.83)) асимптотическое поведение индикатрисы рассеяния (1.92), рассчитанной в приближении теории возмущений, полностью соответствует поведению индикатрисы (1.90), рассчитанной в рамках точного DWBA приближения, даже если третье и четвертое условия в (1.82) не выполнены. Этот факт обусловлен

тем, что в рамках модели (1.87) все слагаемые в ряду (1.72) убывают при больших p по одному и тому же закону (1.89), не зависящему от номера слагаемого в ряду. Таким образом, условия применимости теории возмущений определяются только первым и вторым неравенством в (1.82), если в области высоких пространственных частот индикатриса рассеяния спадает в соответствии с фрактальным (обратным степенным) законом (1.90).

Если же функция корреляции не удовлетворяет условиям (1.87) (например, $C(\rho)$ описывается гауссовой функцией), так что каждое слагаемое в ряду (1.72) характеризуется своим асимптотическим поведением при больших p , то угловой диапазон углов рассеяния, где теория возмущений еще остается справедливой, может быть существенно уже, чем в случае SA или CSA приближений. При этом условия применимости теории возмущений определяются всеми четырьмя неравенствами в (1.82). Подчеркнем, что во всех наших экспериментах, описанных ниже, всегда наблюдалось фрактальное поведение индикатрисы рассеяния (1.90) в области высоких пространственных частот.

Были проведены сравнения PSD-функций целого ряда образцов с использованием различных методов, включая методы рассеяния ЖР, МР и видимого излучения, а также атомно-силовой микроскопии [A19, A20, A22, A25, A28, A36]. Было найдено чрезвычайно хорошее совпадение PSD-функций, так что среднеквадратичная шероховатость различалась, как правило, не больше чем на 10-15% в пересекающихся интервалах пространственной частоты. Этот факт может служить экспериментальным доказательством справедливости теории возмущений в рентгеновском диапазоне длин волн. Здесь мы приводим только два примера. На рис.1.5а сравниваются 2D PSD-функции поверхности суперполированной кварцовой подложки, найденные методами атомно-силовой микроскопии (AFM) и рассеяния ЖР ($\lambda = 0.154$ нм, HXR) и МР ($\lambda = 4.47$ нм, SXR) излучения. Рентгеновские измерения проведены на лабораторных источниках, так что верхний предел измеряемой пространственной частоты ($\sim 8 \cdot 10^{-3}$ нм $^{-1}$) не слишком высок по сравнению с АСМ. На рис.1.5b показаны PSD-функции поверхности суперполированной кремниевой подложки, причем рентгеновские измерения были проведены на синхротроне ESRF (канал ID1 с ондулятором в качестве источника, длина волны $\lambda = 0.15$ нм). Совпадение найденных PSD-функций также очень хорошее, исключая, быть может, диапазон предельно высоких частот, где точность измерений атомно-силового микроскопа была ограничена радиусом иглы кантеливера (~ 10 нм).

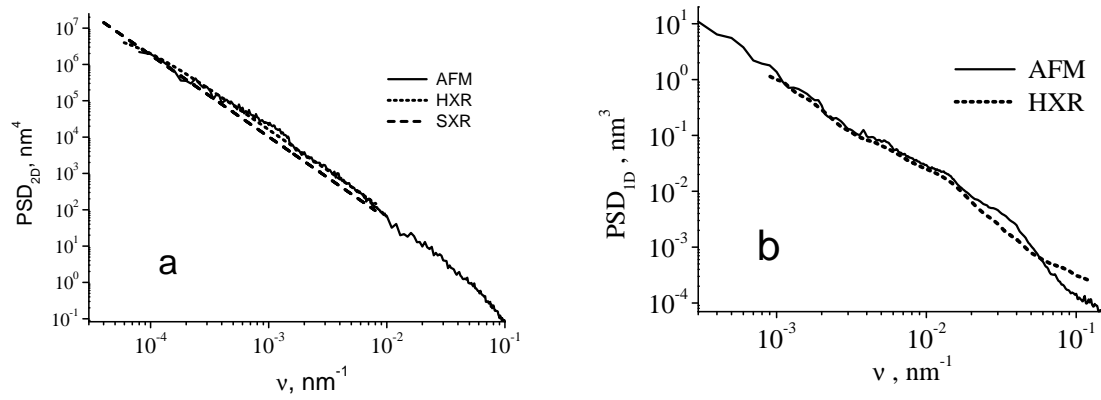


Рис. 1.5. PSD-функции суперполированных кварцевой (а) и кремниевой (б) подложек, найденные методами рассеяния ЖР излучения ($\lambda = 0.15 - 0.154$ нм, HXR), МР излучения ($\lambda = 4.47$ нм, SXR) и атомно-силовой микроскопии (AFM). Все PSD-функции были сглажены по статистическим флуктуациям для лучшего сравнения. (Из [A25, A36]).

1.2.6. О выборе теории и оптимальной длины волны для рентгеновского контроля шероховатостей

Как отмечалось выше, методы рентгеновского рассеяния, в отличие от профилометрических, являются опосредованными, т.е. информация о статистических параметрах шероховатостей извлекается из угловых распределений рассеянного излучения. Тем самым, выбор теоретической основы методов рассеяния РИ приобретает принципиальную важность. С одной стороны, теория должна количественно описывать все особенности рассеяния РИ. С другой стороны, теория должна быть достаточно простой, чтобы параметры шероховатостей могли бы быть найдены однозначно. Наш подход к исследованию шероховатостей заключается в использовании формул теории возмущений, в то время как в большинстве работ других авторов анализ рассеяния РИ проводится в рамках приближения Синха (см. формулы (1.80)-(1.81)).

Прежде всего отметим еще раз, что приближение Синха зачастую хуже соответствует точному приближению DWBA по сравнению с теорией возмущений по высоте шероховатостей, о чем говорилось в предыдущем разделе. Безусловно, теория возмущений применима лишь для сверхгладких поверхностей со среднеквадратичной шероховатостью, не превышающей 1.5-3 нм. В то же время, только такие поверхности и представляют основной интерес для современной оптики, рентгеновской оптики, микро и наноэлектроники.

Далее, использование DWBA (или другого более общего подхода) в качестве основы количественного метода контроля шероховатостей наталкивается на целый ряд принципиальных проблем. Прежде всего, в отличие от теории возмущений, DWBA требует задания

вида одномерного и двумерного (а в более общих подходах - всех многомерных) распределений плотности вероятности высот шероховатостей. Во всех известных нам подходах предполагается, что это распределение подчиняется нормальному закону. В то же время имеется целый ряд экспериментальных данных, свидетельствующих, что это предположение далеко не всегда справедливо [51, 56]. Нами были проведены специальные исследования одномерной плотности распределения высот поверхностных шероховатостей $p(h)$ различных образцов методом атомно-силовой микроскопии [A22]. Вывод состоит в том, что в случае суперполированных подложек со среднеквадратичной шероховатостью на уровне 0.2-0.5 нм распределение высот действительно подчиняется нормальному закону. Однако для столь гладких поверхностей безусловно может быть использована теория возмущений, не зависящая от функции $p(h)$. В случае же более грубых подложек, а особенно, в случае поверхностей пленочных или многослойных покрытий, функция распределения высот шероховатостей очень часто отличается от гауссовой. Пример дан на рис.1.6 для пленки Ni толщиной около 35 нм, нанесенной на Si подложку методом магнетронного распыления. Видно, что экспериментальное распределение высот шероховатостей, во-первых, асимметричное и, во-вторых, функция распределения убывает на своих хвостах быстрее, чем гауссова. В следующем разделе мы покажем на примере шероховатостей с очень малым радиусом корреляции, что даже небольшое отличие функции распределения от гауссовой может приводить к совершенно иной кривой отражения РИ, а значит, и интенсивности рассеяния.

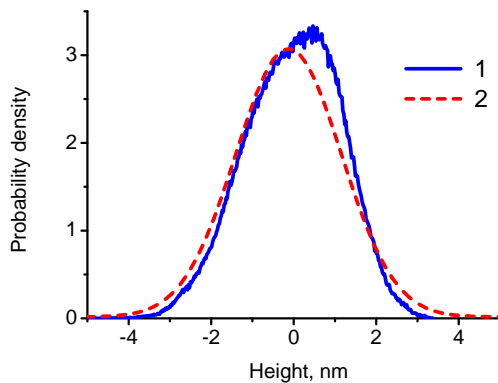


Рис. 1.6. Одномерная функция распределения высот шероховатостей пленки Ni, найденная методом атомно-силовой микроскопии (1), и лучшая подгонка распределения с использованием гауссовой функции (2).

Вторая проблема, возникающая при использовании формул DWBA или даже их упрощенного варианта - приближения Синха, состоит в том, что эти формулы намного более сложные, чем формулы теории возмущений. В приближении теории возмущений (1.79) индикатриса рассеяния связана с PSD-функцией шероховатостей очень простым (линейным) образом, так что последняя может быть найдена из экспериментальных данных без использования каких-либо моделей. В приближении DWBA (или даже SA), искомая функция корреляции

ляции шероховатостей находится под знаком интеграла и прямое ее определение оказывается невозможным. Во всех известных нам работах, где используется приближение Синха, а priori предполагается, что функция корреляции имеет вид (1.88) (или представляет собой сумму таких функций), а параметры σ , ξ и α определяются путем подгонки рассчитанной индикатрисы рассеяния к экспериментальной. Функция (1.88) монотонно убывает при увеличении своего аргумента. В то же время, многочисленные данные атомно-силовой микроскопии свидетельствуют о том, что очень часто функция корреляции стремится к нулю осциллирующим образом и может быть отрицательной. Иными словами, функция корреляции вида (1.88) вовсе не является универсальной и физически никоим образом не обоснована. Более того, в соответствии с (1.79), мы можем однозначно определить PSD-функцию, но лишь в ограниченном с обеих сторон интервале пространственных частот. Продолжая PSD-функцию в полубесконечный интервал частот $p \in [0, \infty)$ тем или иным образом и выполнив обратное Фурье преобразование, мы можем получить бесконечно много корреляционных функций, адекватно описывающих индикатрисы рассеяния в измеряемом угловом диапазоне.

Если PSD-функция ведет себя в соответствии с фрактальным (обратным степенным) законом при увеличении пространственной частоты, то теория возмущений применима при выполнении первых двух неравенств в (1.82). В общем же случае произвольной корреляционной функции необходимо выполнение всех четырех условий в (1.82). Модельные расчеты показывают, что независимо от вида корреляционной функции точность описания индикатрисы рассеяния в рамках теории возмущений не хуже 10%, если выполнено условие Рэлея для рассеянного излучения $2k\sigma \sin \theta < \pi/4$, т.е. угол рассеяния удовлетворяет условию $\sin \theta < \lambda/(16\sigma)$. Тем самым, если длина волны зондирующего излучения $\lambda \geq 16\sigma$, то теория возмущений применима для описания рассеяния на любой угол и для любой функции корреляции, даже не удовлетворяющей условию (1.87). С другой стороны, максимальная детектируемая в эксперименте пространственная частота $p_{max} = 2/\lambda$ уменьшается при увеличении длины волны. Поэтому можно заключить, что для исследования шероховатостей существует оптимальная длина волны зондирующего излучения, которая составляет $\lambda_{opt} = 16\sigma$. При этом максимальная детектируемая частота достигает значения $p_{max} = 1/(8\sigma)$, а анализ индикатрисы рассеяния может быть проведен в рамках теории возмущений независимо от вида корреляционной функции. Если среднеквадратичная шероховатость поверхности равна $\sigma \sim 0.1 - 1$ нм, то оптимальная длина волны зондирующего излучения $\lambda_{opt} \sim 1.6 - 16$ нм лежит в МР и ЭУФ диапазоне, а максимальная детектируемая пространственная частота составляет $p_{max} \sim 0.125 - 1.25$ нм⁻¹. Для сравнения укажем, что верхняя измеряемая частота в атомно-силовой микроскопии не превышает 0.1 нм⁻¹, как правило.

Измерения PSD функции на столь высоких пространственных частотах, соответствующих чрезвычайно слабой интенсивности рассеяния на очень большие углы, подразумевает использование источников излучения чрезвычайно высокой яркости (большой мощности и малой расходимости). Лучшими кандидатами являются, очевидно, лазеры на свободных электронах, синхротронные источники и плазменные лазеры МР и ЭУФ диапазонов, длина волны которых как раз и соответствует оптимальному спектральному диапазону.

Оценим возможность измерений индикатрисы рассеяния на предельно большие углы с использованием существующего компактного ЭУФ лазера, описанного в [112, 113]. Этот лазер генерирует импульсное излучение с длиной волны $\lambda = 49.6$ нм, частотой повторения 7 Гц, средней выходной мощностью 0.6 мВт и расходимостью пучка $2 \cdot 10^{-4}$ рад. Поток излучения на исследуемой поверхности составляет, тем самым, $1.4 \cdot 10^{14}$ фотон/сек или $2 \cdot 10^{13}$ фотон/имп. Для сравнения, использование традиционной рентгеновской трубки в качестве источника излучения с длиной волны 0.154 нм, позволяет получить типичный поток излучения (после монохроматизации и коллимации) порядка $10^5 - 10^6$ фотон/сек, т.е. на 8 – 9 порядков величины меньше. Если функция корреляции имеет вид (1.88) при значениях $\alpha = 0.5$, $\xi = 1$ мкм, а угловой размер апертуры детектора (в обеих направлениях) равен 1° , то регистрируемый поток излучения, рассеянного на угол $\theta = 170^\circ$ (пространственная частота $\nu \sim 0.05$ нм $^{-1}$), составляет порядка $4 \cdot 10^4$ фотон/сек при $\sigma = 2$ нм и 10^2 фотон/сек при $\sigma = 0.1$ нм. Такой поток рассеянного излучения может быть измерен без особых проблем, поскольку собственный шум современных МР и ЭУФ детекторов составляет на несколько порядков меньше.

Исходя из проведенного рассмотрения, мы можем сделать следующий вывод: наиболее естественный и корректный подход к обработке данных по рентгеновскому рассеянию с целью извлечения информации о поверхностных шероховатостях состоит в использовании формул теории возмущений и определении PSD-функции непосредственно из измеренной индикатрисы рассеяния безо всяких предположений о ее виде и о распределении высот шероховатостей. Если поверхность является слишком грубой, то следует увеличить длину волны зондирующего пучка (например, перейти от ЖР диапазона длин волн к МР) с тем, чтобы остаться в пределах применимости теории возмущений, поскольку в ином случае необходимо быть уверенным в том, что высота шероховатостей распределена по нормальному закону, а функция корреляции имеет вид (1.88). Более общие и точные теоретические подходы, в свою очередь, необходимы для контроля условий применимости теории возмущений в конкретном эксперименте.

1.2.7. Дельта-коррелированные шероховатости

Рассмотрим более подробно предельный случай шероховатостей с исчезающе малым радиусом корреляции и в вертикальном, и в латеральном направлении, так что

$$\langle \varepsilon(\mathbf{r})\varepsilon(\mathbf{r}') \rangle = \langle \varepsilon(z, 0) \rangle \langle \varepsilon(z', 0) \rangle \quad \text{для любых } \mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$$

В этом случае, как обсуждалось в разделе 1.2.2, рассеянное излучение отсутствует, а взаимодействие падающей волны с шероховатой средой описывается одномерным волновым уравнением (1.34) с усредненной диэлектрической проницаемостью $\langle \varepsilon(\mathbf{r}) \rangle$.

В литературе часто утверждается, что в случае предельно малых радиусов корреляции коэффициент отражения описывается формулой Неве-Кроса (1.3), забывая при этом, что эта формула справедлива лишь для нормального распределения высот шероховатостей. Ниже мы покажем, что для других функций распределения формула (1.3) не работает и может приводить к значениям коэффициента отражения, отличающихся от реальных на порядки величины.

Пусть $p(\zeta)$ - одномерная плотность вероятности распределения высот шероховатостей одиночной поверхности со скачкообразным изменением диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{r}) = 1 - \chi_+ H(z - \zeta(\boldsymbol{\rho}))$, где H - функция Хэвисайда, а χ_+ - поляризуемость вещества. Тогда

$$\langle \varepsilon(\mathbf{r}) \rangle \equiv 1 - \chi(z) = 1 - \chi_+ \int_{-\infty}^z p(\zeta) d\zeta \quad (1.95)$$

Для иллюстративных вычислений рассмотрим три следующие плотности вероятности:

$$\begin{aligned} p_G(\zeta) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2\sigma^2}\right) \\ p_{CH}(\zeta) &= \frac{1}{2\beta\sigma \cosh^2(\zeta/\beta\sigma)}, \quad \beta = \frac{2\sqrt{3}}{\pi} \\ p_{DE}(\zeta) &= \frac{1}{\alpha\sigma} \exp\left(-\gamma - \frac{\zeta}{\alpha\sigma} e^{-\gamma - \zeta/\alpha\sigma}\right), \quad \alpha = \frac{\sqrt{6}}{\pi}, \quad \gamma = 0.57721\dots \end{aligned} \quad (1.96)$$

первая из которых соответствует нормальному (гауссовому) распределению, а третья - так называемому двойному экспоненциальному распределению, где γ - постоянная Эйлера.

Эти плотности вероятности приводят, в соответствии с (1.95), к образованию “эффективного” приповерхностного слоя, изменение поляризуемости в котором описывается следующими выражениями

$$\begin{aligned} \chi_G(z) &= \frac{\chi_+}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{z}{\sigma\sqrt{2}}\right) \right] \\ \chi_{CH}(z) &= \frac{\chi_+}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{z}{\sigma\beta}\right) \right] \end{aligned} \quad (1.97)$$

$$\chi_{DE}(z) = \chi_+ \exp(-e^{-\gamma-z/\sigma\alpha})$$

Вид плотности распределений высот шероховатостей (1.96) и соответствующие им профили “эффективных” приповерхностных слоев (1.97) показаны на рис.1.7. Для определенности было взято значение $\sigma = 0.5$ нм. Плотности вероятности p_G и p_{CH} и, особенно, соответствующие им профили приповерхностных слоев очень близки друг к другу. Функция p_{DE} , в отличие от двух предыдущих - асимметричная, хотя профиль приповерхностного слоя тоже близок к двум другим.

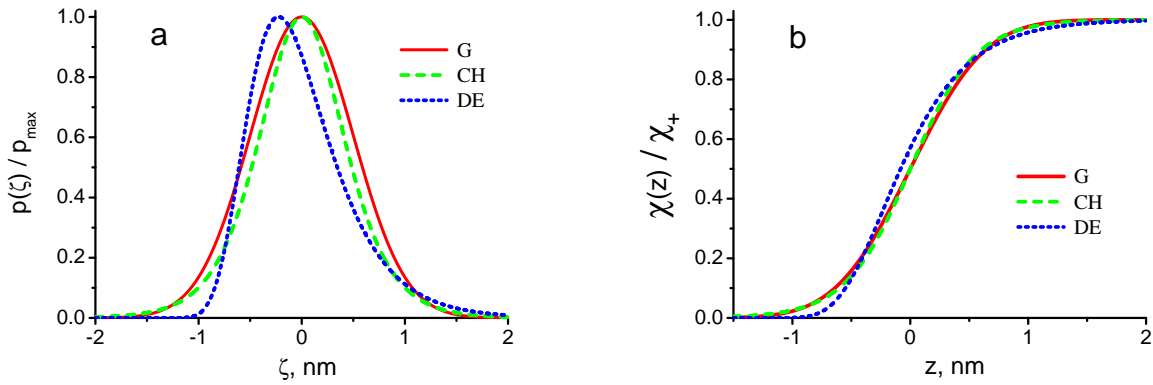


Рис. 1.7. Три модельные плотности распределения высот шероховатостей 1.96 при $\sigma = 0.5$ нм (a) и соответствующие им профили “эффективного” приповерхностного слоя (1.97) (b).

Рассмотрим теперь коэффициент отражения от этих приповерхностных слоев. Прежде всего, из первого члена борновского ряда для коэффициента отражения находим, что при больших углах скольжения амплитудный коэффициент отражения

$$r(\theta) \simeq -\frac{1}{4 \sin^2 \theta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\langle \varepsilon(z) \rangle}{dz} \exp(2ikz \sin \theta) dz = \frac{\chi_+}{4 \sin^2 \theta} F(q) \quad (1.98)$$

$$F(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(z) \exp(iqz) dz; \quad q = 2k \sin \theta$$

пропорционален характеристической функции $F(q)$, которая вводится в теории случайных функций как Фурье-преобразование от одномерной плотности распределения высот шероховатостей. Подставив плотности распределений (1.96) в (1.98), находим выражения для асимптотического поведения коэффициента отражения

$$R_G(\theta) \sim R_F(\theta) \cdot \exp[-(2k\sigma \sin \theta)^2]$$

$$R_{CH}(\theta) \sim R_F(\theta) \cdot (2\pi\beta k\sigma \sin \theta)^2 \cdot \exp(-2\pi\beta k\sigma \sin \theta) \quad (1.99)$$

$$R_{DE}(\theta) \sim R_F(\theta) \cdot 4\pi\alpha k\sigma \sin\theta \cdot \exp(-2\pi\alpha k\sigma \sin\theta)$$

где $R_F \sim |\chi_+|^2/16 \sin^4\theta$ - френелевский коэффициент отражения при больших углах скольжения. Эти выражения наглядно показывают, что, несмотря на кажущуюся близость профилей приповерхностного слоя, коэффициенты отражения ведут себя совершенно по-разному при больших углах скольжения.

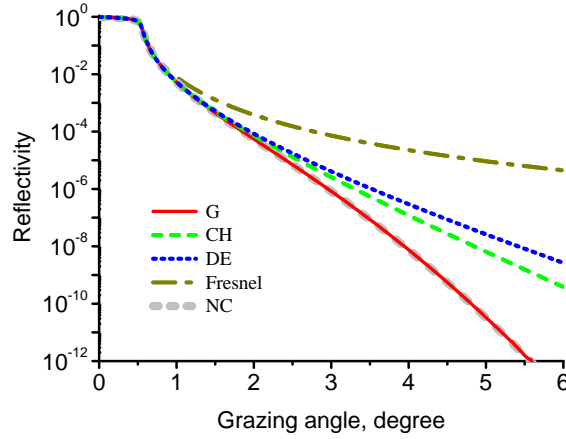


Рис. 1.8. Коэффициенты отражения в зависимости от угла скольжения для трех модельных профилей диэлектрической проницаемости (1.97) при значении $\sigma = 0.5$ нм. Для сравнения показан френелевский коэффициент отражения от идеально гладкой скачкообразной границы и он же, скорректированный на эффект шероховатостей путем введения фактора Нево-Кроса (1.3). При расчетах предполагалось отражение РИ с длиной волны $\lambda = 0.154$ нм от поверхности вольфрама.

Кривые отражения, рассчитанные численно с использованием алгоритма Паратта во всем диапазоне углов скольжения, показаны на рис.1.8 для всех трех модельных профилей диэлектрической проницаемости. Для сравнения показан также френелевский коэффициент отражения от поверхности со скачкообразным изменением диэлектрической проницаемости и он же, скорректированный на эффект шероховатостей путем введения фактора Нево-Кроса (1.3). Видно, что, действительно, фактор Нево-Кроса идеально описывает коэффициент отражения от границы раздела с дельта-коррелированными шероховатостями, высота которых распределена по гауссову закону. Однако, если распределение высот шероховатостей отличается от нормального, то коэффициент отражения может сильно отличаться от предсказываемого формулой Нево-Кроса (1.3). Так, при угле скольжения $\theta = 5.5^\circ$, отличие между кривыми G и DE на рис.1.8 достигает четырех порядков величины. В то же время отличие кривой DE от френелевской (отсутствие шероховатостей) меньше трех порядков величины.

Тем самым, первый вывод этого раздела состоит в том, что предположение о нормальном распределении высот шероховатостей, которое делается во всех без исключения работах,

где отражение и рассеяние РИ рассчитывается вне рамок теории возмущений, может приводить к результатам, абсолютно не соответствующим реальности даже в случаях, когда распределение высот шероховатостей лишь незначительно отличается от нормального.

В то же время, в условиях применимости теории возмущений, когда параметр Рэлея $\eta_R = 2k\sigma \sin \theta < 1$ (что соответствует углам скольжения $\theta < 1.4^\circ$ на рис.1.8), кривые отражения практически совпадают для всех модельных профилей диэлектрической проницаемости, т.е. для всех функций распределения высот шероховатостей.

Рассмотрим теперь границу раздела с плавным изменением диэлектрической проницаемости, обусловленным диффузией или имплантацией. Пусть к тому же на границе раздела присутствуют дельта-коррелированные шероховатости, так что усредненный профиль границы раздела описывается функцией

$$\langle \varepsilon(\mathbf{r}) \rangle = 1 - \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_0(z - \zeta) p(\zeta) d\zeta \quad (1.100)$$

где $p(\zeta)$ - плотность распределения высот шероховатостей, а функция $\chi_0(z)$ описывает профиль поляризуемости в переходном слое.

Введем следующие функции: $\chi(z) \equiv \int_{-\infty}^z p(\zeta) d\zeta$ (профиль поляризуемости “эффективного” переходного слоя, образованного в результате усреднения дельта-коррелированных шероховатостей) и $p_0(z) \equiv d\chi_0(z)/dz$. Интегрируя (1.100) по частям, получим

$$\langle \varepsilon(\mathbf{r}) \rangle = 1 - \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(z - \zeta) p_0(\zeta) d\zeta \quad (1.101)$$

Сравнение (1.100) и (1.101) показывает, что усредненную диэлектрическую проницаемость можно интерпретировать двумя разными способами: либо как плавный переходной слой $\chi_0(z)$ с дельта-коррелированными шероховатостями, плотность распределения которых описывается функцией $p(\zeta)$, либо, наоборот, как плавный переходной слой, описываемый функцией $\chi(z)$, с шероховатостями, распределенных по закону $p_0(\zeta)$. Иными словами, и это - второй вывод настоящего раздела, измерения коэффициента отражения не позволяют разделить эффекты реального переходного слоя и “эффективного”, образованного в результате усреднения мелкомасштабных шероховатостей. В частности, коэффициент отражения при больших углах скольжения записывается в симметричном виде

$$R(\theta) \simeq R_F(\theta) \cdot |F(q)|^2 \cdot |F_0(q)|^2 \quad (1.102)$$

где введена характеристическая функция $F_0(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_0(z) \exp(iqz) dz$, связанная с “эффективным” переходным слоем, образованным в результате усреднения мелкомасштабных шероховатостей.

1.3. Применение теории возмущений для анализа дифракции рентгеновского излучения от шероховатых сред

В этом разделе мы проанализируем особенности дифракции рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей и границ раздела в рамках теории возмущений по высоте шероховатостей и, прежде всего, те из них, которые обычно не наблюдаются в рассеянии видимого излучения. Кроме того, мы покажем, что теория возмущений способна объяснить все “необычные” явления, наблюдаемые в экспериментах и, более того, предсказать новые эффекты.

1.3.1. Конформные шероховатости

Рассмотрим шероховатую слоистую среду с диэлектрической проницаемостью следующего вида:

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_0(z - \zeta(\boldsymbol{\rho})), \quad \boldsymbol{\rho} = \{x, y\}, \quad \varepsilon_0(z \rightarrow -\infty) = 1, \quad \varepsilon_0(z \rightarrow +\infty) = \varepsilon_+, \quad (1.103)$$

где ось Z направлена в глубь вещества, функция $\varepsilon_0(z)$ описывает изменение диэлектрической проницаемости по глубине в отсутствие неоднородностей, причем изменение диэлектрической проницаемости на границах раздела может быть как скачкообразным, так и плавным из-за эффектов диффузии, имплантации или химических реакций, а функция $\zeta(\boldsymbol{\rho})$, описывающая неоднородности среды в продольном направлении, не зависит от z . Общие выражения для коэффициентов отражения и прохождения, а также для индикатрис рассеяния в вакуум и в глубь среды в случае конформных шероховатостей были получены выше в разделе 1.2.3 в рамках теории возмущений (см. выражения (1.38)-(1.46)).

Предположим теперь, что угловая ширина индикатрисы рассеяния в плоскости падения $\Delta\theta_{scat} \sim \lambda/(\pi\xi \sin \theta_0)$, где ξ - радиус корреляции шероховатостей в плоскости XY , мала по сравнению с углом скольжения падающего пучка θ_0 , т.е. $\theta_0 \gg \sqrt{\lambda/(\pi\xi)}$, а также по сравнению с типичным угловым масштабом изменения коэффициента отражения (прохождения) $\Delta\theta$. Например, в случае одиночной поверхности $\Delta\theta$ соответствует критическому углу полного внешнего отражения, а в случае периодической многослойной структуры - угловой ширине брэгговского пика. Тогда мы можем пренебречь в выражениях для коэффициентов интегрального рассеяния и поправок к коэффициентам зеркального отражения и прохождения (1.42)-(1.43) и (1.48)-(1.49) зависимостью от вектора \mathbf{q} , т.е. положить $\mathbf{q} = \mathbf{q}_0$ во всех членах, исключая PSD-функцию, и выполнить интегрирование по направлениям рассеяния

$$\int \text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) d^2\mathbf{q} = 4\pi^2\sigma^2. \quad (1.104)$$

Покажем теперь, что остающиеся в (1.42)-(1.43) и (1.48)-(1.49) интегралы по координате z , а именно,

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^2(z, q_0) \varepsilon_0'(z) dz \quad (1.105)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(z, q_0) \psi_1(z, q_0) \varepsilon_0'(z) dz \quad (1.106)$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} g(z, z'; q_0) \psi_0(z, q_0) \psi_0(z', q_0) \varepsilon_0'(z) \varepsilon_0'(z') dz dz' \quad (1.107)$$

$$I_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} g(z, z'; q_0) \psi_0(z, q_0) \psi_1(z', q_0) \varepsilon_0'(z) \varepsilon_0'(z') dz dz' \quad (1.108)$$

могут быть вычислены в явном виде для произвольного распределения диэлектрической проницаемости $\varepsilon_0(z)$.

Коэффициенты отражения, прохождения и интегрального рассеяния выражаются через I_1, \dots, I_4 следующим образом:

$$\text{TIS}(q_0) = \frac{k^4 \sigma^2}{4k_-^2} |I_1|^2; \quad R(q_0) = R_0(q_0) + 2\text{Re} \left[r_0^* \Delta r_1 - \frac{ik^4 \sigma^2 r_0^*}{2k_-} I_3 \right] \quad (1.109)$$

$$\text{TIS}_+(q_0) = \frac{k^4 \sigma^2}{4k_- k_+} |I_2|^2 \frac{\text{Re} k_+}{k_+}; \quad T(q_0) = T_0(q_0) + 2\text{Re} \left[t_0^* \Delta t_1 - \frac{ik^4 \sigma^2 t_0^*}{2k_+} I_4 \right] \cdot \frac{\text{Re} k_+}{k_+} \quad (1.110)$$

где учтено (1.104), а Δr_1 и Δt_1 определены в (1.40)-(1.41).

Прежде чем вычислять интегралы (1.105)-(1.108) приведем несколько вспомогательных формул:

$$\varepsilon_0(z) [\psi_0^2(z)]' = \frac{q_0^2}{k^2} [\psi_0^2(z)]' - \frac{1}{k^2} [(\psi_0'(z))^2]' \quad (1.111)$$

$$\varepsilon_0(z) [\psi_0(z) \psi_1(z)]' = \frac{q_0^2}{k^2} [\psi_0(z) \psi_1(z)]' - \frac{1}{k^2} [\psi_0'(z) \psi_1'(z)]' \quad (1.112)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(z) \frac{\partial}{\partial z} [g(z, z') \psi_0(z)] &= \frac{q_0^2}{k^2} \frac{\partial}{\partial z} [g(z, z') \psi_0(z)] + \frac{1}{k^2} \psi_0'(z) \delta(z - z') - \\ &- \frac{1}{k^2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\psi_0'(z) \frac{\partial}{\partial z} g(z, z') \right] \end{aligned} \quad (1.113)$$

Эти тождества прямо следуют из (1.8) и (1.12). Например, чтобы получить (1.113), надо умножить (1.8) на $\partial g(z, z') / \partial z$, а (1.12) - на $\psi_0'(z)$ и сложить полученные выражения. Тожественные преобразования (1.111)-(1.113) позволят избавиться от функции $\varepsilon_0(z)$ под знаком интеграла в (1.105)-(1.108).

Отметим, наконец, что в асимптотических областях $z \rightarrow \pm\infty$ справедливы следующие равенства, которые могут быть легко получены из (1.9)-(1.10):

$$[\psi'_0(z)]^2 - \psi_0(z)\psi''_0(z) = \begin{cases} 0, & \text{если } z \rightarrow +\infty \\ 4k_-^2(q_0)r(q_0), & \text{если } z \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (1.114)$$

$$\psi'_0(z)\psi'_1(z) - \psi''_1(z)\psi_0(z) = \begin{cases} 2k_+^2(q_0)t(q_0), & \text{если } z \rightarrow +\infty \\ 2k_+(q_0)k_-(q_0)t(q_0), & \text{если } z \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (1.115)$$

Рассмотрим теперь интеграл (1.106). Возьмем его один раз по частям

$$I_2 = \lim_{L_{1,2} \rightarrow \infty} \left\{ \left[\varepsilon_0(z)\psi_1(z)\psi_0(z) \right]_{z=-L_1}^{z=L_2} - \int_{-L_1}^{L_2} \varepsilon_0(z)[\psi_1(z)\psi_0(z)]' \right\}$$

Воспользовавшись (1.112), находим

$$I_2 = \frac{1}{k^2} \lim_{L_{1,2} \rightarrow \infty} \left\{ \psi'_0(z)\psi'_1(z) + [k^2\varepsilon_0(z) - q_0^2]\psi_0(z)\psi_1(z) \right\}_{z=-L_1}^{z=L_2} \quad (1.116)$$

В силу (1.8) второе слагаемое в фигурных скобках в (1.116) равно $[-\psi''_1\psi_0]$. Принимая во внимание (1.115), находим окончательно

$$I_2 = \frac{2k_+(q_0)t(q_0)}{k^2} [k_+(q_0) - k_-(q_0)] \quad (1.117)$$

Таким образом, интеграл (1.106) удается выразить через z -компоненты волновых векторов k_{\pm} в асимптотических областях $z \rightarrow \pm\infty$ и амплитудный коэффициент прохождения t , причем (1.117) справедливо для любого одномерно-неоднородного распределения диэлектрической проницаемости $\varepsilon_0(z)$.

Аналогичным образом вычисляется интеграл (1.105)

$$I_1 = -\frac{4k_-^2(q_0)}{k^2} r(q_0). \quad (1.118)$$

Рассмотрим, наконец, более сложный интеграл (1.108). Проинтегрируем его по переменной z один раз по частям и воспользуемся (1.113). Тогда получим:

$$I_4 = \frac{1}{k^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon'_0(z')\psi_1(z') \left\{ \lim_{L_{1,2} \rightarrow \infty} \left[\psi'_0(z) \frac{\partial}{\partial z} g(z, z') + [k^2\varepsilon_0(z) - q_0^2]\psi_0(z)g(z, z') \right]_{z=-L_1}^{z=L_2} - \psi'_0(z') \right\} dz'. \quad (1.119)$$

Второе слагаемое в квадратных скобках в (1.119) равно $[-\psi_0''g]$. Принимая во внимание явный вид (1.7) функции $g(z, z')$ и тождества (1.113)-(1.115), получаем

$$I_4 = \frac{ik_-(q_0)}{k^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_0'(z) \psi_1(z) \psi_0(z) dz - \frac{1}{k^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_0'(z) \psi_1(z) \psi_0'(z) dz. \quad (1.120)$$

Первый интеграл в (1.120) вычислен выше. Рассмотрим два вспомогательных интеграла

$$I_5 = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_0'(z) [\psi_1(z) \psi_0'(z) - \psi_1'(z) \psi_0(z)] dz \quad (1.121)$$

$$I_6 = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_0'(z) [\psi_1(z) \psi_0'(z) + \psi_1'(z) \psi_0(z)] dz, \quad (1.122)$$

так что второй интеграл в (1.120) равен $(I_5 + I_6)/2$.

Выражение в квадратных скобках в интеграле (1.121) есть не что иное, как вронскиан функций ψ_0 и ψ_1 , который от z не зависит. Следовательно,

$$I_5 = (\varepsilon_+ - 1)W \equiv 2ik_+(q_0)t(q_0) \frac{k_+^2(q_0) - k_-^2(q_0)}{k^2}. \quad (1.123)$$

Интегрируя по частям и учтя, что $\varepsilon_0'(\pm\infty) = 0$, представим (1.122) в следующем виде:

$$I_6 = - \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_0''(z) \psi_0(z) \psi_1(z) dz \equiv \frac{4ik_+(q_0)}{k^4 \sigma^2} \Delta t_1(q_0), \quad (1.124)$$

где Δt_1 определено в (1.41).

Из (1.120)-(1.124) получаем:

$$I_4 = \frac{ik_+(q_0)t(q_0)}{k^4} \left[k_+^2(q_0) - k_-^2(q_0) \right] - \frac{2ik_+(q_0)}{k^4 \sigma^2} \Delta t_1(q_0). \quad (1.125)$$

Аналогичным образом интеграл (1.107) приводится к виду:

$$I_3 = \frac{4ik_-^3(q_0)r(q_0)}{k^4} - \frac{2ik_-(q_0)}{k^4 \sigma^2} \Delta r_1(q_0). \quad (1.126)$$

Подставив (1.118), (1.126) в (1.109), окончательно получаем, что коэффициенты отражения и интегрального рассеяния в вакуум определяются факторами Дебая-Валлера, разложенными в ряд теории возмущений

$$R(\theta) = R_0(\theta) \cdot \left[1 - (4\pi\sigma \sin \theta/\lambda)^2 \right], \quad \text{TIS}(\theta) = R_0(\theta) \cdot (4\pi\sigma \sin \theta/\lambda)^2 \quad (1.127)$$

которые оказываются справедливыми не только для одиночной поверхности со скачкообразным изменением диэлектрической проницаемости, но и для любой слоистой среды (1.103)

с конформными шероховатостями и, более того, для любой функции распределения высот шероховатостей.

Аналогичным образом находим коэффициенты прохождения и интегрального рассеяния в глубь среды

$$\frac{T(\theta_0)}{T_0(\theta_0)} = 1 - \sigma^2(k_+(\theta_0) - k_-(\theta_0))^2, \quad \frac{\text{TIS}_+(\theta_0)}{T_0(\theta_0)} = \sigma^2(k_+(\theta_0) - k_-(\theta_0))^2, \quad (1.128)$$

где $T_0 = |t|^2 \text{Re}(k_+)/k_-$ - коэффициент прохождения в отсутствие шероховатостей.

1.3.2. Интегральный коэффициент отражения

Важная особенность выражений (1.127) и (1.128) состоит в том, что коэффициенты интегрального отражения $R_\Sigma(q_0) = R(q_0) + \text{TIS}(q_0)$ и прохождения $T_\Sigma(q_0) = T(q_0) + \text{TIS}_+(q_0)$, описывающие суммарную интенсивность излучения, направленного в вакуум и в глубь среды, совпадают с коэффициентами отражения и прохождения для идеально гладкого отражателя: $R_\Sigma(q_0) = R_0(q_0)$ и $T_\Sigma(q_0) = T_0(q_0)$. Иными словами, конформные шероховатости с большими (в продольном направлении) радиусами корреляции не приводят к увеличению потока, направленного в глубь среды, т.е. к дополнительному поглощению излучения в веществе, а лишь перераспределяют его интенсивность между зеркально отраженной/преломленной и рассеянной в вакуум/в глубь среды компонентами. Это означает, что измерения интегрального коэффициента отражения вместо зеркального позволяют свести на нет влияние на кривую отражения конформных шероховатостей с большим продольным (вдоль поверхности) радиусом корреляции и, в частности, существенно увеличить точность реконструкции профиля диэлектрической проницаемости при решении обратной задачи рентгеновской рефлектометрии.

В качестве примера рассмотрим пленку постоянной плотности на однородной подложке, а для расчетов отражения и рассеяния будем использовать так называемую ABC-модель PSD-функции изотропных шероховатостей, широко используемую в оптике [114]:

$$\text{PSD}_{2D}(\nu) = \frac{\sigma^2 \xi^2 \alpha}{\pi(1 + \nu^2 \xi^2)^{1+\alpha}}; \quad \text{PSD}_{1D}(p) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(\alpha + 1/2)}{\Gamma(\alpha)} \frac{\sigma^2 \xi}{(1 + p^2 \xi^2)^{\alpha+1/2}} \quad (1.129)$$

где σ и ξ - среднеквадратичная высота и радиус корреляции шероховатостей, а параметр α определяет фрактальную размерность шероховатой поверхности $D = 3 - \alpha$, если $0 < \alpha < 1$ [64], а $\Gamma(x)$ - гамма-функция.

Отметим, что в области низких пространственных частот ($\nu \ll 1/\xi$) PSD-функция (1.129) практически постоянна, в высокочастотной области ($\nu \gg 1/\xi$) ведет себя в соот-

ветствии с фрактальным (обратным степенным) законом

$$\text{PSD}_{2D}(\nu) \sim \frac{\sigma^2}{\xi^{2\alpha}} \cdot \frac{1}{\nu^{2+2\alpha}}, \quad \text{PSD}_{1D}(p) \sim \frac{\sigma^2}{\xi^{2\alpha}} \cdot \frac{1}{p^{1+2\alpha}} \quad (1.130)$$

а переход от одного режима к другому происходит на частоте $\nu \sim 1/\xi$, что наглядно проявляется в экспериментах по исследованию рассеяния от тонких пленок (см. раздел 1.4). В то же время PSD-функция полированных подложек из самых разных материалов (стекло, плавленый кварц, кремний, сапфир) ведет себя, за редкими исключениями, в соответствии с (1.130) во всем измеряемом диапазоне пространственных частот, а перехода к режиму насыщения не наблюдается [10, 15]. Минимальная регистрируемая пространственная частота составляет обычно 0.03-0.01 мкм⁻¹ в экспериментах по рассеянию рентгеновского или видимого излучения и, следовательно, радиус корреляции шероховатостей хорошо полированных подложек порядка или более 100 мкм. Более того, исследования длиннопериодных шероховатостей с помощью интерференционных микроскопов и профилометров демонстрируют, как правило, все то же фрактальное поведение PSD-функции (1.130) вплоть до максимального значения пространственной частоты $\nu \sim 1/L$, еще имеющей физический смысл для исследуемого образца размера L [109, 115, 116]. Тем самым, хорошо полированные подложки характеризуются очень большими радиусами корреляции шероховатостей, составляющими, как минимум, доли миллиметра, а зачастую и больше. Фрактальный параметр α сверхгладких подложек лежит, как правило, в диапазоне от 0.1 до 0.5 и определяется как материалом подложки, так и технологией ее полировки.

Кривая 1 на рис.1.9 показывает угловую зависимость коэффициента отражения (умноженного на $\sin^4 \theta_0$ для наглядности) на длине волны $\lambda = 0.154$ нм от пленки Ni толщиной $h = 5$ нм на подложке Si в отсутствие шероховатостей, а кривая 2 - коэффициент отражения, рассчитанный по формуле Дебая-Валлера (1.1) при значении $\sigma = 0.3$ нм. Даже такие небольшие шероховатости приводят к падению коэффициента отражения в 75 раз при угле скольжения $\theta_0 = 5^\circ$.

Предположим теперь, что щель детектора достаточно широкая, так что в эксперименте измеряется не коэффициент зеркального отражения, а интегральный коэффициент отражения $R_\Sigma(\theta_0)$, причем PSD-функция конформных шероховатостей пленки и подложки описывается выражением (1.129) при значениях $\sigma = 0.3$ нм, $\xi = 100$ мкм и $\alpha = 0.5$. Результаты численного расчета коэффициента $R_\Sigma = R + \text{TIS}$ с использованием (1.38)-(1.49) представлены на рис.1.9 кривой 3, которая совпадает с кривой отражения 1 от идеально гладкой пленки в рассматриваемом интервале углов скольжения в полном соответствии с проведенным выше анализом.

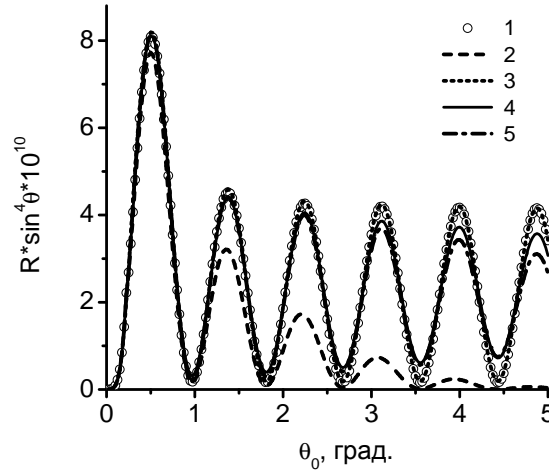


Рис. 1.9. Коэффициент зеркального отражения R на длине волны $\lambda = 0.154$ нм от пленки Ni толщиной $h = 5$ нм на кремниевой подложке. Расчеты проведены для идеально гладкой пленки (1) и с использованием формулы Дебая-Валлера при среднеквадратичной высоте шероховатостей $\sigma = 0.3$ нм (2). Кривые 3-5 представляют расчеты интегрального коэффициента отражения $R_{\Sigma} = R + \text{TIS}$ в предположении, что конформные шероховатости пленки и подложки описываются АВС-моделью со следующими параметрами: $\xi = 100$ мкм и $\alpha = 0.5$ (3), $\xi = 5$ мкм и $\alpha = 0.5$ (4), $\xi = 100$ мкм и $\alpha = 0.2$ (5), а высота шероховатостей $\sigma = 0.3$ нм одна и та же.

Однако, если уменьшить радиус корреляции до 5 мкм, оставив значения σ и α теми же самыми, то коэффициент интегрального отражения (кривая 4 на рис.1.9) начинает отличаться от коэффициента отражения от идеально гладкой структуры при увеличении угла θ_0 , поскольку ширина PSD-функции становится сравнимой с периодом изменения функций поля. Схожий эффект наблюдается и при уменьшении фрактального параметра α (кривая 5 на рис.1.9), поскольку при уменьшении α “крылья” PSD-функции, соответствующие высоким частотам, дают все больший вклад в интегралы. Тем не менее, в любом из этих случаев коэффициент интегрального отражения лежит намного ближе к коэффициенту отражения в отсутствие шероховатостей по сравнению с кривой 2 и, во всяком случае, $R_{\Sigma}(\theta_0)$ спадает, в среднем, как $1/\sin^4 \theta_0$, а не экспоненциально как $R(\theta_0)$.

С одной стороны, совершенно ясно, что представление формул Дебая-Валлера в виде (1.127)-(1.128) справедливо лишь для достаточно малой высоты шероховатостей. Сравнение с расчетами в DWBA показывает, что ошибка в коэффициенте зеркального отражения и в интенсивности рассеяния не превышает 10 отн.%, только если $\sigma \sin \theta < \lambda/20$. С другой стороны, рис.1.9 наглядно демонстрирует, что интегральный коэффициент отражения практически совпадает с коэффициентом отражения в отсутствие шероховатостей и при значительно больших углах скольжения, т.е. пределы применимости теории возмущений для интеграль-

ного коэффициента отражения существенно более широкие и зависят от радиуса корреляции шероховатостей.

Проведенное выше рассмотрение существенным образом основывалось на том, что при интегрировании общих выражений для $R(\theta)$ и $TIS(\theta)$ по направлениям рассеяния PSD-функция заменялась дельта-функцией. Это предположение справедливо лишь при выполнении двух условий. Первое из них состоит в том, что значения TIS и TIS_+ не равны нулю. Например, из (1.128) следует, что при прохождении излучения через свободновисящую пленку с конформными шероховатостями, рассеяние в глубь вообще отсутствует, поскольку в этом случае $k_+ = k_-$. Действительно, как следует из (1.45), интенсивность рассеяния в направлении прошедшего пучка ($\theta = \theta_0$) равна нулю из-за деструктивной интерференции рассеянных волн, что и приводит к $TIS_+ = 0$. В то же время интенсивность рассеяния в других направлениях конечна и, следовательно, коэффициент интегрального рассеяния $TIS_+(\theta) \neq 0$, хотя и мал. Тем самым, замена PSD-функции дельта-функцией не совсем корректна, а $TIS_+(\theta)$ должен быть рассчитан с большей точностью для этого случая.

Аналогичным образом, коэффициент интегрального рассеяния в вакуум должен быть рассчитан более аккуратно при предельно малых углах скольжения θ , когда $TIS(\theta_0) \rightarrow 0$.

Второе из необходимых условий справедливости (1.127)-(1.128) требует, чтобы радиус корреляции шероховатостей в продольном направлении был достаточно большой, а PSD-функции достаточно быстро убывала при увеличении пространственной частоты. Как и выше, в качестве примера рассмотрим отражение рентгеновского излучения от пленки Ni на подложке Si, считая шероховатости полностью конформными и используя модель (1.129) для PSD-функции.

Пусть зондирующий пучок с длиной волны $\lambda = 0.154$ нм падает на образец под углом скольжения $\theta_{max} = 2.3^\circ$. Тогда параметр $4\pi\sigma \sin \theta_{max}/\lambda = 1$ (для $\sigma = 0.3$ нм) и, в соответствии с (1.127), это максимальный угол скольжения, при котором теория возмущений еще приводит к физически разумному результату $R > 0$. В качестве условия применимости формул Дебая-Валлера (1.127) выберем следующее, которое и представляет наибольший интерес для обратной задачи рентгеновской рефлектометрии: коэффициент суммарного отражения R_Σ в интерференционных максимумах отличается от значения коэффициента отражения от идеально гладкого образца не более, чем на 10 отн.%. Проведя расчеты с использованием полученных выше общих выражений для R и TIS , находим, что это условие выполняется, если значения радиуса корреляции ξ и фрактального параметра α лежат выше кривой 2 на рис.1.10 для пленки толщиной $h = 5$ нм. Обращает на себя внимание очень быстрое возрастание этой кривой при $\alpha < 0.15$, когда высокочастотная часть спектра шерохова-

тостей дает все более существенный вклад в интегралы для R и TIS. Отметим, что в пределе $\alpha \rightarrow 0$ PSD-функция (1.129) становится неинтегрируемой, а понятие среднеквадратичной высоты шероховатостей теряет смысл. Кривая 2 на рис.1.10 показывает, что конформные шероховатости практически не влияют на интегральный коэффициент отражения, если их радиус корреляции составляет от единиц микрон (при $\alpha > 0.3$) до единиц миллиметров (при $\alpha \sim 0.1$), что является типичным для хорошо полированных подложек.

При увеличении толщины пленки область параметров $\xi - \alpha$ сдвигается вверх, поскольку осцилляции напряженностей поля в подинтегральных выражениях для R и TIS становятся более частыми и, следовательно, радиус корреляции шероховатостей должен быть увеличен, чтобы уменьшить угловую ширину индикатрисы рассеяния. Так, при толщине пленки $h = 20$ нм область значений параметров лежит выше кривой 3 на рис.1.10, а при $h = 50$ нм - выше кривой 4. Для иллюстрации показана и кривая 1, соответствующая отражению излучения от чистой шероховатой подложки.

Отметим, что увеличение длины волны зондирующего излучения, наоборот, приводит к сдвигу кривых на плоскости $\xi - \alpha$ вниз. Если положить $\lambda = 0.989$ нм (K_α линия Al), то вместо кривых 1 (чистая подложка Si) и 4 (пленка Ni толщиной 50 нм), получим кривые 5 и 6, соответственно. При этом угол θ_{max} составляет 15.2° . Иными словами, чем *больше* длина волны излучения, тем *меньше* может быть радиус корреляции конформных шероховатостей, еще не приводящих к увеличению потока излучения в глубь среды.

1.3.3. Взаимосвязь каналов дифракции

В этом разделе мы проанализируем более детально взаимосвязь каналов дифракции от одиночной шероховатой поверхности, в общем виде определяемую соотношениями (1.59)-(1.61).

Будем считать, что границей раздела вещества (с диэлектрической проницаемостью ε_+) и вакуума является шероховатая поверхность $z = \zeta(\boldsymbol{\rho})$, на которой происходит скачкообразное изменение свойств вещества. Используя общие формулы из предыдущих разделов, запишем выражения для углового распределения рассеяния в вакуум $\Phi(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0)$ и в глубь среды $\Phi_+(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0)$, справедливые с точностью до членов порядка ζ^2 для любой функции распределения высот шероховатостей:

$$\Phi(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0) = \frac{k^5 |1 - \varepsilon_+|^2}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} |t(q_0)t(q)|^2 \text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) \quad (1.131)$$

$$\Phi_+(\mathbf{q}; \mathbf{q}_0) = \frac{k^5 \sqrt{\varepsilon_+} |1 - \varepsilon_+|^2}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} |t(q_0)\tilde{t}(q)|^2 \text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) \frac{\text{Re}k_+(q)}{k_+(q)}; \quad (1.132)$$

$$t(q) = \frac{2k_-(q)}{k_-(q) + k_+(q)}; \quad \tilde{t}(q) = \frac{2k_+(q)}{k_-(q) + k_+(q)}$$

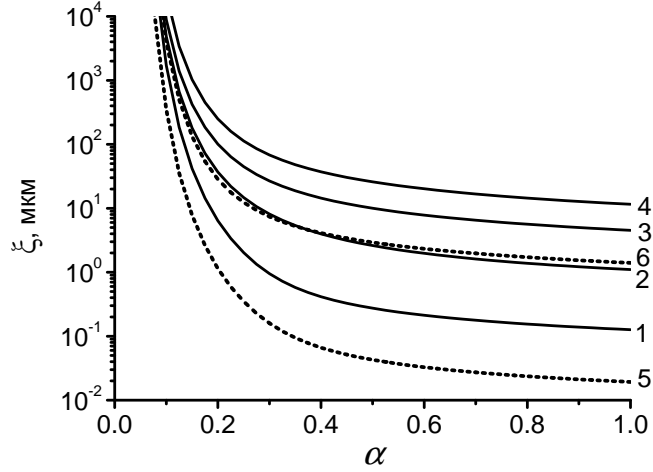


Рис. 1.10. Область параметров $\xi - \alpha$, для которых интегральный коэффициент отражения (при $\lambda = 0.154$ нм и $\theta \leq 2.3^\circ$) от пленки Ni на подложке Si отличается в интерференционных максимумах от коэффициента отражения в отсутствие шероховатостей не более, чем на 10 отн.%. Эта область расположена выше кривой 1 для чистой подложки и выше кривых 2–4 при толщине пленки 5 нм (2), 20 нм (3) и 50 нм (4). Среднеквадратичная высота шероховатостей $\sigma = 0.3$ нм. Точечные кривые 5 и 6 соответствуют кривым 1 и 4 при $\lambda = 0.989$ нм и $\theta \leq 15.2^\circ$.

$$2\pi\nu = \mathbf{q} - \mathbf{q}_0, \quad \mathbf{q}_0 = k\{\cos\theta_0, 0\}, \quad \mathbf{q} = k\{\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi\},$$

Проведя некоторые алгебраические преобразования, представим коэффициенты интегрального рассеяния в следующем виде:

$$\text{TIS}(q_0) = \frac{k_-(q_0)}{\pi^2 |k_-(q_0) + k_+(q_0)|^2} \int \text{PSD}_{2D}(\nu) k_-(q) |k_-(q) - k_+(q)|^2 d^2\mathbf{q} \quad (1.133)$$

$$\text{TIS}_+(q_0) = \frac{k_-(q_0)}{\pi^2 |k_-(q_0) + k_+(q_0)|^2} \int \text{PSD}_{2D}(\nu) \text{Re}k_+(q) |k_-(q) - k_+(q)|^2 d^2\mathbf{q} \quad (1.134)$$

Коэффициенты зеркального отражения R и прохождения T с точностью до членов порядка ζ^2 записываются как

$$R(q_0) = R_F(q_0) - \delta R(q_0); \quad T(q_0) = T_F(q_0) - \delta T(q_0)$$

$$\frac{\delta R(q_0)}{R_F(q_0)} = 4k_-(q_0)\text{Re}k_+(q_0)\sigma^2 + \frac{k_-(q_0)}{\pi^2} \int \text{PSD}_{2D}(\nu) [k_-(q) - \text{Re}k_+(q)] d^2\mathbf{q} \quad (1.135)$$

$$\frac{\delta T(q_0)}{T_F(q_0)} = -[k_-(q_0) - k_+(q_0)]^2 \sigma^2 + \frac{k_-(q_0) - k_+(q_0)}{2\pi^2} \int \text{PSD}_{2D}(\nu) [k_-(q) - \text{Re}k_+(q)] d^2\mathbf{q} \quad (1.136)$$

$$R_F(q) = \left| \frac{k_-(q) - k_+(q)}{k_-(q) + k_+(q)} \right|^2; \quad T_F(q) = \left| \frac{2k_-(q)}{k_-(q) + k_+(q)} \right|^2 \cdot \frac{\text{Re}k_+(q)}{k_-(q)}$$

σ - среднеквадратичная шероховатость, а R_F и T_F - френелевские коэффициенты отражения и прохождения в случае идеально гладкой поверхности.

Непосредственной проверкой можно убедиться, что полученные выше выражения (1.133) - (1.136) обеспечивают выполнение закона сохранения энергии, т.е. в отсутствие поглощения справедливо тождество $R + T + \text{TIS} + \text{TIS}_+ \equiv 1$. Следует рассмотреть по отдельности случаи падения пучка вне области ПВО, когда $\text{Im}k_+(q_0) = 0$, и внутри области ПВО, когда $\text{Re}k_+(q_0) = 0$. Аналогичным образом, область интегрирования в плоскости вектора рассеяния \mathbf{q} следует разбить на две части, где $q < k\sqrt{\varepsilon_+}$ или $q > k\sqrt{\varepsilon_+}$.

Первые слагаемые в выражениях (1.135)-(1.136) совпадают по абсолютной величине, в чем легко убедиться, используя явный вид коэффициентов отражения R_F и прохождения T_F . Они являются не чем иным как первыми членами разложения фактора Нево-Кроса (1.3) в ряд по σ^2 . В случае шероховатостей с исчезающе малым радиусом корреляции $\xi \rightarrow 0$ интенсивность рассеянного излучения как в вакуум, так и в глубь среды тоже стремится к нулю поскольку $\text{PSD} \rightarrow 0$. В этом случае именно первые слагаемые в (1.135)-(1.136) играют главную роль, а уменьшение коэффициента отражения связано с увеличением интенсивности прошедшей компоненты, обусловленной образованием плавного переходного слоя на границе раздела сред как результата усреднения мелкомасштабных шероховатостей.

В противоположном предельном случае очень больших радиусов корреляции шероховатостей, т.е. в случае очень узкой угловой ширины диаграммы рассеяния, можно положить $q = q_0$ в подинтегральных выражениях (1.133)-(1.136), исключая PSD-функцию, и выполнить интегрирование в плоскости вектора рассеяния \mathbf{q} , расширив ее до бесконечности: $\int \text{PSD}_{2D}(\boldsymbol{\nu}) d^2\mathbf{q} = (2\pi)^2\sigma^2$. Тогда немедленно получаем хорошо известные выражения

$$\text{TIS} \simeq \delta R \simeq (2k\sigma \sin \theta_0)^2 R_F(\theta_0) \quad (1.137)$$

$$\text{TIS}_+ \simeq \delta T \simeq \sigma^2 T_F(\theta_0) [k_+(\theta_0) - k_-(\theta_0)]^2 \quad (1.138)$$

которые являются не чем иным, как первыми членами разложения фактора Дебая-Валлера (1.1)-(1.2) в ряд по высоте шероховатостей σ .

Справедливость формул Дебая-Валлера и Нево-Кроса в предельных случаях очень больших и очень малых радиусов корреляции шероховатостей одиночной поверхности неоднократно обсуждалась в литературе в рамках приближения Синха (см., например, [88]). Проведенное рассмотрение показывает, что этот же вывод является простым и очевидным следствием теории возмущений. Более того, в разделе 1.3.1 была доказана справедливость (1.137) для произвольной слоисто-неоднородной среды с конформными шероховатостями, радиус корреляции которых в плоскости XY велик. Ниже мы рассмотрим ряд других предельных случаев, некоторые из которых до сих пор не были подробно исследованы.

Введем следующие два параметра

$$\mu_0 = \frac{\pi\xi \sin^2 \theta_0}{\lambda} \simeq \frac{\pi\xi\theta_0^2}{\lambda} \quad \text{и} \quad \mu_c = \frac{\pi\xi(1 - \varepsilon_+)}{\lambda} \quad (1.139)$$

которые, как будет показано ниже, полностью определяют особенности рентгеновского рассеяния одиночной поверхностью в случае слабого поглощения излучения в веществе $\text{Im}\varepsilon_+ \ll \text{Re}(1 - \varepsilon_+)$.

Смысл параметра μ_0 совершенно ясен. Действительно, угловая ширина диаграммы рассеяния в плоскости падения зондирующего пучка равна $\Delta\theta \sim \lambda/(\xi \sin \theta_0)$. Поэтому условие $\mu_0 \gg 1$ означает, что ширина диаграммы рассеяния $\Delta\theta$ мала по сравнению с углом скольжения зондирующего пучка θ_0 , т.е. рассеянное излучение распространяется под достаточно большими углами к поверхности. Если же параметр $\mu_0 \leq 1$, то диаграмма рассеяния “ложится” на поверхность. В этом случае можно ожидать изменения характера рассеяния.

Параметр μ_c тоже имеет простой физический смысл. Пусть пучок падает на поверхность под углом θ_0 порядка критического угла ПВО $\theta_c = |1 - \varepsilon_+|^{1/2}$, что типично для рентгеновских экспериментов. Тогда, если параметр μ_c велик ($|\mu_c| \gg 1$), то угловая ширина PSD-функции мала по сравнению с характерным масштабом θ_c изменения электродинамического фактора в (1.131), который от параметров шероховатости не зависит, и, следовательно, форма диаграммы рассеяния определяется, главным образом, PSD-функцией. Если же параметр μ_c мал ($|\mu_c| < 1$), то форма диаграммы рассеяния в значительной степени определяется электродинамическим фактором, приводящему, в частности, к появлению пика аномального рассеяния (пика Ионеды) [37].

Параметр μ_c характеризует радиус корреляции шероховатостей ξ , который мы будем называть “большим”, если $|\mu_c| \gg 1$, и “малым”, если $|\mu_c| \leq 1$. Поскольку параметр μ_c изменяется пропорционально длине волны зондирующего излучения, то для данной поверхности радиус корреляции может оказаться “большим” для МР диапазона, но будет “малым” для ЖР излучения. Переход от больших радиусов корреляции к малым, соответствующий значению параметра $|\mu_c| = 1$, происходит при $\xi \sim 0.1 - 1$ мкм для длины волны излучения $\lambda = 0.1$ нм и при $\xi \sim 0.025 - 0.1$ мкм для $\lambda = 10$ нм (критические значения ξ больше для легких материалов).

Представим одномерную PSD-функцию в виде $\text{PSD}_{1D}(p) \equiv 2\pi\sigma^2\xi F(2\pi p\xi)$, где безразмерная функция F монотонно убывает с характерным масштабом изменения аргумента $p\xi$ порядка 1 и удовлетворяет условию нормировки $\int_0^\infty F(\tau) d\tau = 1$.

Вместо интегрирования по $q \in [0, k]$ перейдем к интегрированию по параметру $\tau = 2\pi p\xi = |q - q_0|\xi$ и, используя (1.52)-(1.139), перепишем выражения для интегрального рассея-

ния в вакуум и коэффициента зеркального отражения в следующем виде, наиболее удобном для последующего анализа:

$$\begin{aligned} \frac{\text{TIS}(\theta_0)}{R_F(\theta_0)} \simeq 2\sqrt{2} \frac{k k_-(q_0) \sigma^2}{\sqrt{k\xi}} \cdot \left[\int_0^{\xi q_0} \sqrt{\mu_0 + \tau} \left| \frac{\sqrt{\mu_0 + \tau} - \sqrt{\mu_0 - \mu_c + \tau}}{\sqrt{\mu_0} - \sqrt{\mu_0 - \mu_c}} \right|^2 F(\tau) d\tau \right. \\ \left. + \int_0^{\mu_0} \sqrt{\mu_0 - \tau} \left| \frac{\sqrt{\mu_0 - \tau} - \sqrt{\mu_0 - \mu_c - \tau}}{\sqrt{\mu_0} - \sqrt{\mu_0 - \mu_c}} \right|^2 F(\tau) d\tau \right] \end{aligned} \quad (1.140)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta R(\theta_0)}{R_F(\theta_0)} \simeq 2\sqrt{2} \frac{k k_-(q_0) \sigma^2}{\sqrt{k\xi}} \cdot \text{Re} \left[2\sqrt{\mu_0 - \mu_c} - \int_0^{\xi q_0} \sqrt{\mu_0 - \mu_c + \tau} F(\tau) d\tau \right. \\ \left. - \int_0^{\mu_0} \sqrt{\mu_0 - \mu_c - \tau} F(\tau) d\tau + \int_0^{\xi q_0} \sqrt{\mu_0 + \tau} F(\tau) d\tau + \int_0^{\mu_0} \sqrt{\mu_0 - \tau} F(\tau) d\tau \right] \end{aligned} \quad (1.141)$$

Выражения (1.134), (1.136) могут быть записаны подобным же образом.

При выводе (1.140)-(1.141) предполагалось, что углы рассеяния, дающие вклад в интегралы, достаточно малы, так что $k - q \ll k$. Тогда $k_-(q)\xi \simeq \sqrt{2k\xi(\mu_0 \pm \tau)}$ и $k_+(q)\xi \simeq \sqrt{2k\xi(\mu_0 - \mu_c \pm \tau)}$, где знак выбирается в зависимости от того положительна или отрицательна разность $q - q_0$.

1. *Большие углы скольжения падающего излучения:* $\mu_0 \gg 1$.

Этот случай соответствует ситуации, когда угловая ширина диграммы рассеяния существенно меньше угла скольжения зондирующего пучка, т.е. все рассеянное излучение распространяется под значительным углом к поверхности. Типичный вид индикатрисы рассеяния показан кривыми 3-6 на рис.1.11а. Максимум индикатрисы рассеяния совпадает с направлением зеркального отражения, а ее угловая ширина в плоскости падения равна $\Delta\theta \simeq \lambda/(\pi\xi\theta_0)$.

Исключая из рассмотрения область углов скольжения близких к критическому углу ПВО, т.е. предполагая, что $|\mu_0 - \mu_c| \gg 1$, пренебрегая переменной τ по сравнению с большими параметрами μ_0 и $|\mu_0 - \mu_c|$ в подынтегральных выражениях в формулах (1.140)-(1.141) и устремив верхние пределы интегрирования в бесконечность, получаем все те же хорошо известные выражения (1.137)-(1.138). Тем самым, введение фактора Дебая-Валлера оказывается обоснованным при выполнении единственного условия: ширина диаграммы рассеяния мала по сравнению с углом скольжения зондирующего пучка, что выполняется либо при достаточно большом радиусе корреляции ξ и фиксированном θ_0 , что неоднократно отмечалось в литературе, либо при достаточно большом угле скольжения θ_0 и фиксированном, пусть даже малом, ξ .

Формула (1.137) показывает, что в случае больших параметров μ_0 интегральное рассеяние в вакуум в первом приближении как раз соответствует убыли из зеркально отраженного пучка. Иначе говоря, шероховатости с достаточно большими ξ не приводят к появлению дополнительного поглощения или потока энергии, направленного в глубь вещества, а лишь перераспределяют его интенсивность между зеркально отраженной и рассеянной в вакуум компонентами. Аналогичный вывод справедлив и относительно соотношения между коэффициентом интегрального рассеяния в вещество и коэффициентом прохождения.

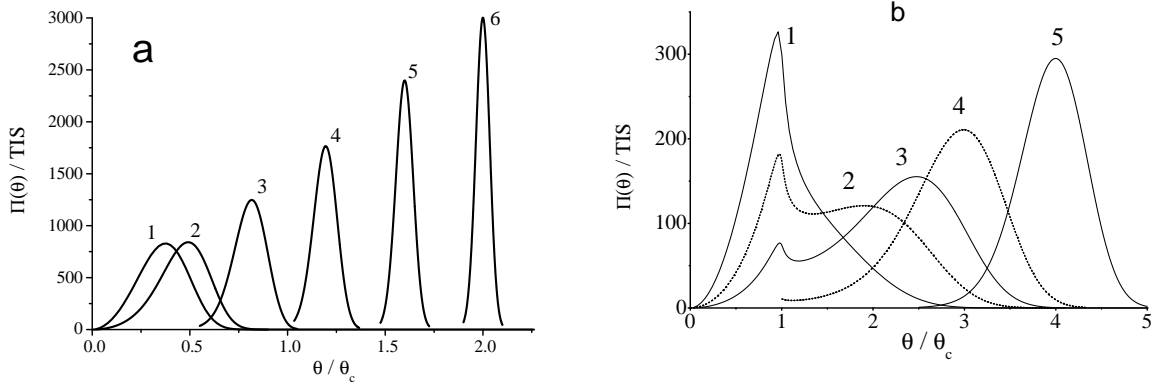


Рис. 1.11. (а) Изменение формы индикатрисы рассеяния $\Pi(\theta)$ при увеличении угла скольжения падающего пучка: $\theta_0/\theta_c = 0.1$ (кривая 1); 0.4 (2); 0.8 (3); 1.2 (4); 1.6 (5) и 2.0 (6). При расчетах предполагалось, что радиус корреляции шероховатостей большой (параметр $\mu_c = 10$), корреляционная функция имеет гауссову форму, а поглощение мало ($\gamma/\delta = 0.05$). Все кривые нормированы на коэффициент интегрального рассеяния, так что площадь под ними одинакова. (б) То же, что и на рис.(а) для случая малого радиуса корреляции (параметр $\mu_c = 0.5$). Угол скольжения падающего пучка составляет $\theta_0/\theta_c = 0.3$ (кривая 1); 2 (2); 2.5 (3); 3 (4) и 4 (5).

2. Большие радиусы корреляции и предельно малые углы скольжения падающего излучения: $\mu_c \gg 1$, но $\mu_0 \ll 1$.

При уменьшении угла скольжения θ_0 индикатриса рассеяния расширяется. Если угол θ_0 становится настолько малым, что индикатриса рассеяния “ложится” на поверхность $\Delta\theta \sim \lambda/(\pi\xi\theta_0) \sim \theta_0$, т.е. $\mu_0 \sim 1$, то характер рассеяния меняется: максимум рассеянного излучения сдвигается от поверхности относительно направления зеркального отражения, а угловая ширина индикатрисы рассеяния $\Delta\theta \sim \sqrt{\lambda/(\pi\xi)}$ не зависит от угла скольжения θ_0 . Этот случай иллюстрируется кривой 1 на рис.1.11б и соответствует падению излучения под малым углом скольжения $\theta_0 = 0.1\theta_c$. В то же время максимум рассеяния приходится на угол $\theta \simeq 0.35\theta_c$, т.е. далеко сдвинут от зеркально отраженного пучка. Дальнейшее уменьшение угла θ_0 не приводит ни к изменению положения этого максимума, ни к изменению формы индикатрисы рассеяния.

В рассматриваемом случае предельно малых углов скольжения положим $\mu_0 = 0$ в интегралах (1.140)-(1.141) и пренебрежем величиной переменной интегрирования τ по сравнению с большим параметром μ_c . Тогда получим

$$\frac{\text{TIS}(\theta_0)}{R_F(\theta_0)} \simeq f_1 \frac{(k\sigma)^2 \sin \theta_0}{\sqrt{k\xi}}; \quad \frac{\delta R(\theta_0)}{R_F(\theta_0)} \simeq \left[\frac{f_1}{\sqrt{k\xi}} + 2\text{Re}\sqrt{\varepsilon_+ - 1} \right] (k\sigma)^2 \sin \theta_0 \quad (1.142)$$

$$\frac{\text{TIS}_+(\theta_0)}{R_F(\theta_0)} \simeq 2\text{Re}\sqrt{\varepsilon_+ - 1} (k\sigma)^2 \sin \theta_0; \quad \delta T(\theta_0) \simeq 0 \quad (1.143)$$

где значение параметра $f_1 = 2\sqrt{2} \int_0^\infty F(\tau) \sqrt{\tau} d\tau$ определяется явным видом PSD функции, предполагая, что функция $F(\tau)$ убывает достаточно быстро при $\tau \rightarrow \infty$, так что интеграл f_1 существует.

Формулы (1.142)-(1.143) показывают, что для непоглощающей среды с $\varepsilon_+ < 1$ интегральное рассеяние в вакуум соответствует убыли из зеркальной компоненты. Если же $\varepsilon_+ > 1$ или вещество поглощающее, то поправка к коэффициенту зеркального отражения становится несколько больше TIS, что связано с появлением рассеяния в глубь вещества, причем шероховатость не влияет на коэффициент прохождения в рассматриваемом случае предельно малых углов скольжения падающего пучка.

Принципиальная особенность выражений (1.142) состоит в том, что при очень малых θ_0 интегральная интенсивность рассеянного излучения становится пропорциональной $\sin \theta_0$ в первой степени, а не $\sin^2 \theta_0$, как в (1.137), т.е. по сравнению с обычным случаем интенсивность рассеяния увеличивается. Этот эффект наблюдался экспериментально в целом ряде работ [74, 85, 86]. Если определить среднеквадратичную высоту шероховатостей σ с использованием формулы Дебая-Валлера (1.137), то значение σ будет увеличиваться как $1/\sqrt{\sin \theta_0}$ при уменьшении угла скольжения в полном соответствии с рис.1.2. Кроме того, интенсивность интегрального рассеяния при малых θ_0 зависит не только от высоты шероховатостей σ , но и от их корреляционного радиуса ξ . Подчеркнем, что при неограниченном возрастании ξ (но фиксированном угле скольжения θ_0) рассматриваемый случай $\mu_0 \ll 1$ перейдет в конце концов в случай $\mu_0 \gg 1$, т.е. интегральное рассеяние в вакуум не будет стремиться к нулю, а будет определяться выражением (1.137).

3. Малые радиусы корреляции и не слишком большие углы скольжения: $\mu_0, \mu_c \ll 1$.

В этом случае PSD-функция медленно меняется при изменении угла рассеяния. Поэтому при падении пучка в области ПВО форма индикатрисы рассеяния соответствует угловой зависимости электродинамического фактора в (1.131) и, в частности, максимум рассеянного излучения приходится на критический угол ПВО (“анти-пик” Ионеды). Этот случай иллюстрируется кривой 1 на рис.1.11b и объясняет экспериментальную индикатрису рассеяния

на рис.1.1b.

Обсудим теперь особенности, появляющиеся в индикатрисе рассеяния в случае, когда угол скольжения падающего пучка превышает критический угол ПВО, и покажем, что использованная простейшая модель поверхности позволяет объяснить эффект аномального рассеяния рентгеновского излучения (эффект Ионеды)², исходя из формулы (1.131) [А3]. Прежде всего ясно, что максимуму PSD функции при $p = 0$ соответствует обычный пик рассеяния в зеркальном направлении. Кроме того, в отсутствие поглощения у функции $|t(\theta)|^2$ имеется следующая особенность

$$\frac{d}{d\theta}|t(\theta)|^2 \rightarrow -\infty \quad \text{при } \theta \rightarrow \theta_c + 0; \quad \text{Im}\varepsilon_+ = 0$$

Это означает, что независимо от вида PSD-функции интенсивность рассеянного излучения уменьшается в некотором интервале углов наблюдения θ , расположенном справа от критического угла θ_c . Следовательно, если падающий пучок лежит вне области ПВО ($\theta_0 > \theta_c$), то в индикатрисе рассеяния имеется дополнительный максимум, угловое положение которого совпадает (при слабом поглощении) с критическим углом ПВО. Эти рассуждения иллюстрируются кривыми 2-3 на рис.1.11b и объясняют экспериментальную индикатрису рассеяния на рис.1.1a.

Для экспериментального наблюдения пика Ионеды должны выполняться определенные условия [А3]:

1. Необходимо, чтобы на поверхности имелись мелкомасштабные шероховатости с малым радиусом корреляции: $\mu_c < 1$, т.е. $\xi < \lambda/\pi\theta_c^2$. В противном случае быстрое спадание PSD функции при удалении от направления зеркального отражения приводит к тому, что уже при небольшом отличии угла скольжения θ_0 от θ_c высота пика аномального рассеяния становится крайне малой (кривая 4 на рис.1.11a).

2. Для надежного разделения двух пиков в рассеянном излучении желательно, чтобы угол скольжения падающего пучка достаточно далеко отстоял от критического угла ПВО. В то же время θ_0 не может быть слишком большим, чтобы высота пика Ионеды не была слишком малой (кривые 4-5 на рис.1.11b). Оптимальное значение угла скольжения падающего пучка составляет $\theta_0/\theta_c \sim 1/\mu_c$.

3. Поглощение падающего излучения в веществе ($\text{Im}\varepsilon_+ \neq 0$) приводит к сглаживанию функции $|t(\theta)|^2$ и, следовательно, к уменьшению высоты пика аномального рассеяния, причем при достаточно большом поглощении этот пик исчезает совсем (см. рис.1.12). Поэтому

² На возможность описания эффекта Ионеды на основе теории возмущений независимо от нас было указано в работе [84].

эффект Ионеды может наблюдаться лишь при условии $\text{Im}\varepsilon_+ \ll \text{Re}(1 - \varepsilon_+)$. Отметим, что угловое положение пика аномального рассеяния от поглощения зависит слабо.

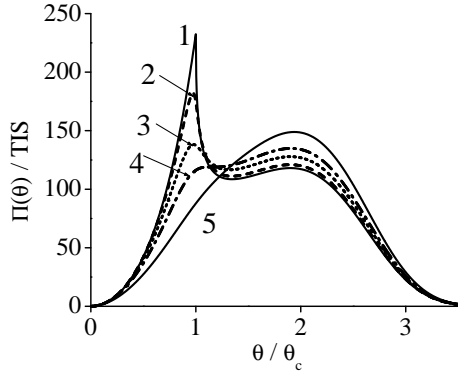


Рис. 1.12. Зависимость формы пика аномального рассеяния от поглощения в веществе: $\text{Im}\varepsilon_+/\text{Re}(1 - \varepsilon_+) = 0$ (1); 0.05 (2); 0.2 (3); 0.4 (4) и 1 (5). Функция корреляции - гауссова. Параметр $\mu_c = 0.5$. Угол скольжения падающего пучка $\theta_0 = 2\theta_c$.

Проанализируем теперь особенности, появляющиеся в коэффициентах зеркального отражения, прохождения и интегрального рассеяния в рассматриваемом случае малых радиусов корреляции шероховатостей. Разлагая подынтегральные выражения в (1.140)-(1.141) по малым параметрам μ_0 и μ_c , находим:

$$\text{TIS} \simeq \text{TIS}_+ \simeq f_2(k\sigma)^2 \sqrt{k\xi} \sin \theta_0 \left| \sin \theta_0 + \sqrt{\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0} \right|^2 R_F(\theta_0) \quad (1.144)$$

$$\delta R \simeq \left[(2k\sigma)^2 \sin \theta_0 \text{Re} \sqrt{\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0} + 2f_2(k\sigma)^2 \sqrt{k\xi} \sin \theta_0 \text{Re}(1 - \varepsilon_+) \right] R_F(\theta_0) \quad (1.145)$$

$$\delta T \simeq \left[-(2k\sigma)^2 \sin \theta_0 + (2k\sigma)^2 f_2 \sqrt{k\xi} \sin \theta_0 \left(\sin \theta_0 + \sqrt{\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0} \right) \right] \times \text{Re} \sqrt{\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0} R_F(\theta_0) \quad (1.146)$$

где параметр $f_2 = 1/(2\sqrt{2}) \int_0^\infty F(\tau) d\tau / \sqrt{\tau}$ определяется явным видом PSD функции.

В случае малых корреляционных длин выражения для TIS и TIS₊ формально совпадают. В то же время, как неоднократно отмечалось выше, понятие рассеяния в глубь вещества определено нами лишь для непоглощающего материала.

Выражение (1.144) показывает, что интенсивность рассеяния как в вакуум, так и в глубь среды мала в случае мелкомасштабных шероховатостей и уменьшается при уменьшении радиуса их корреляции. Поправки к коэффициентам зеркального отражения (1.145) и прохождения (1.146) представляют собой сумму двух слагаемых, первое из которых от радиуса корреляции шероховатостей не зависит (фактор Нево-Кроса). Подчеркнем, что при падении рентгеновского пучка на непоглощающую (или слабопоглощающую) среду в области ПВО именно второе слагаемое, зависящее от радиуса корреляции, играет определяющую роль в (1.145).

Рассмотрим далее по отдельности случаи, когда падающий пучок лежит внутри или далеко вне области ПВО и, кроме того, пренебрежем поглощением излучения в веществе.

а) падающий пучок лежит в области ПВО: $\mu_0 < \mu_c \ll 1$.

В этом случае выражения (1.144)-(1.146) становятся очень простыми:

$$\text{TIS}_+ \simeq \text{TIS} \simeq \delta R/2 \simeq f_2(k\sigma)^2 \sqrt{k\xi} \sin \theta_0 (1 - \varepsilon_+); \quad \delta T = 0; \quad \theta_0 < \theta_c \quad (1.147)$$

Ясно, что обе компоненты рассеяния обусловлены уменьшением коэффициента зеркального отражения $\text{TIS} + \text{TIS}_+ = \delta R$, поскольку коэффициент прохождения точно равен нулю при падении пучка на непоглощающую среду в области ПВО.

Как и во втором из рассмотренных случаев, интегральная интенсивность рассеяния пропорциональна углу скольжения θ_0 в первой степени. В то же время зависимость от радиуса корреляции в (1.147) обратная по отношению к (1.142). Кроме того, в отличие от предыдущих случаев, интенсивность рассеяния пропорциональна скачку диэлектрической проницаемости $1 - \varepsilon_+$. Поэтому, интенсивность рассеяния на длине волны $\lambda = 0.15$ нм от поверхности, например, вольфрама будет примерно в три раза больше, чем от поверхности стекла при одних и тех же параметрах шероховатостей.

Наконец, сравнение (1.137) и (1.147) показывает, что при одной и той же высоте шероховатостей интенсивность рассеяния примерно в $1/\mu_c \gg 1$ раз меньше в случае мелкомасштабных шероховатостей.

б) падающий пучок лежит далеко вне области ПВО: $\mu_c \ll \mu_0 \ll 1$.

Интегральные характеристики рассеяния приводятся к виду:

$$\text{TIS} \simeq \text{TIS}_+ \simeq 4f_2(k\sigma)^2 \sqrt{k\xi} \sin^3 \theta_0 R_F(\theta_0) \quad (1.148)$$

$$\delta R \simeq (2k\sigma)^2 \sin \theta_0 \sqrt{\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0} R_F(\theta_0) \quad (1.149)$$

$$\delta T \simeq \left[- (2k\sigma)^2 \sin \theta_0 \sqrt{\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0} + 8f_2(k\sigma)^2 \sqrt{k\xi} \sin^3 \theta_0 \right] R_F(\theta_0) \quad (1.150)$$

Только в этом случае в поправке δR к коэффициенту зеркального отражения определяющую роль играет первый член, описывающий перераспределение интенсивности между зеркально отраженной и преломленной компонентами. В свою очередь, первое слагаемое в поправке δT к коэффициенту преломления отрицательно и в $1/\mu_0$ раз больше второго слагаемого. Тем самым, мелкомасштабные шероховатости при $\theta_0 > \theta_c$ приводят к увеличению коэффициента прохождения излучения в глубь вещества из-за образования “эффективного” переходного слоя как результата усреднения шероховатостей. Рассеяние же как в вакуум, так и в глубь вещества мало, причем его существование обусловлено уменьшением коэффициента прохождения (но не отражения).

Таблица 1.1. Выражения для коэффициентов интегрального рассеяния в вакуум (TIS) и в глубь вещества (TIS₊), а также для поправок к коэффициентам зеркального отражения (δR) и прохождения (δT), рассчитанных для ряда предельных значений параметров $\mu_0 = \pi\xi\theta_0^2/\lambda$ и $\mu_c = \pi\xi(1 - \varepsilon_+)/\lambda$. Выражения приведены для случая непоглощающей среды $\text{Im}\varepsilon_+ = 0$ в предположении $\text{Re}\varepsilon_+ < 1$. Параметры $k_-(q_0) = k \sin \theta_0$ и $k_+(q_0) = k\sqrt{\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0}$.

N	μ_0 и μ_c	TIS/R_F	TIS₊/R_F
1	$\mu_0 \gg 1$	$[2k_-(q_0)\sigma]^2$	$4k_-(q_0)\text{Re}k_+(q_0)\sigma^2$
2	$\mu_0 \ll 1; \mu_c \gg 1$	$f_1 k k_-(q_0)\sigma^2/\sqrt{k\xi}$	0
3а	$\mu_0 < \mu_c \ll 1$	$f_2 k k_-(q_0)\sigma^2\sqrt{k\xi}(1 - \varepsilon_+)$	$f_2 k k_-(q_0)\sigma^2\sqrt{k\xi}(1 - \varepsilon_+)$
3б	$\mu_c \ll \mu_0 \ll 1$	$4f_2 k_-^3(q_0)\sigma^2\sqrt{\xi/k}$	$4f_2 k_-^3(q_0)\sigma^2\sqrt{\xi/k}$
N	μ_0 и μ_c	$\delta R/R_F$	$\delta T/R_F$
1	$\mu_0 \gg 1$	$[2k_-(q_0)\sigma]^2$	$4k_-(q_0)\text{Re}k_+(q_0)\sigma^2$
2	$\mu_0 \ll 1; \mu_c \gg 1$	$f_1 k k_-(q_0)\sigma^2/\sqrt{k\xi}$	0
3а	$\mu_0 < \mu_c \ll 1$	$2f_2 k k_-(q_0)\sigma^2\sqrt{k\xi}(1 - \varepsilon_+)$	0
3б	$\mu_c \ll \mu_0 \ll 1$	$4k_-(q_0)k_+(q_0)\sigma^2$	$-4k_-(q_0)k_+(q_0)\sigma^2 + 8f_2 k_-^3(q_0)\sigma^2\sqrt{\xi/k}$

Выражения для коэффициентов отражения и прохождения, а также коэффициентов интегрального рассеяния в вакуум и в глубь вещества сведены в табл. 1.1 для разных предельных значений параметров μ_0 и μ_c в предположении отсутствия поглощения излучения в веществе. Легко убедиться, что полученные выражения обеспечивают выполнение закона сохранения энергии, а именно: $\text{TIS} + \text{TIS}_+ = \delta R + \delta T$. Кроме того, таблицы наглядно демонстрируют взаимосвязь каналов дифракции рентгеновского излучения, которая состоит в следующем:

1. Если параметр μ_0 велик по сравнению с единицей (т.е. все рассеянное излучение распространяется под большими углами скольжения к поверхности), то каналы дифракции в вакуум и в вещество, в первом приближении, являются независимыми, т.е. $\text{TIS} = \delta R$ и $\text{TIS}_+ = \delta T$.

2. Если же параметр μ_0 мал (т.е. индикатриса рассеяния “ложится” на поверхность), то взаимосвязь между каналами рассеяния более сложная: при падении пучка в области ПВО убыль из зеркально отраженной компоненты обеспечивает рассеяние как в вакуум, так и в глубь среды (поскольку преломленная компонента отсутствует). Если пучок падает вне области ПВО, то уменьшение зеркально отраженной компоненты объясняется увеличени-

ем коэффициента прохождения волны. Интенсивность рассеянного излучения мала в этом случае и обеспечивается некоторым уменьшением коэффициента прохождения.

Проведенное выше рассмотрение предполагало выполнение естественного для рентгеновского диапазона условия $\xi \gg \lambda$. Тем не менее, для полноты описания рассмотрим кратко и противоположный предельный случай чрезвычайно малого радиуса корреляции шероховатостей $\xi \ll \lambda$, который, в принципе, может выполняться в ЭУФ диапазоне длин волн. Этот случай означает, что PSD-функция практически постоянна во всем диапазоне углов рассеяния. Тогда основной вклад в интеграл (1.51) дают предельно малые $\rho \ll \lambda$ и аргумент функций Бесселя можно положить равным нулю. Кроме того, положим единице амплитудный коэффициент прохождения рассеянной волны $t(q) = 1$, поскольку он отличен от единицы лишь в очень узком интервале углов скольжения $\theta \leq \theta_c \ll 1$. Тогда получим окончательно следующее выражение для коэффициентов интегрального рассеяния

$$\text{TIS} \simeq \text{TIS}_+ \simeq 8\pi^4 |1 - \varepsilon_+|^2 \frac{\sigma^2 \xi^2}{\lambda^4} \frac{|t(\theta_0)|^2}{\sin \theta_0} f \quad (1.151)$$

При выводе (1.151) предполагалось, что корреляционная функция имеет вид $C(\rho) \equiv \sigma^2 c(\rho/\xi)$, а безразмерный численный коэффициент $f = \int_0^\infty c(\tau) \tau d\tau$.

Формула (1.151) показывает, что при уменьшении радиуса корреляции до нуля интенсивность рассеяния стремится к нулю еще быстрее ($\sim \xi^2$), чем в случае 3 из таблицы 1.1.

На рис.1.13 плоскость параметров ξ (радиус корреляции шероховатостей) - θ_0 (угол скольжения зондирующего пучка) условно разбита на четыре области, которые соответствуют рассмотренным выше предельным случаям, представленными в табл.1.1. В областях 1 и 3б влияние шероховатостей на коэффициент отражения описывается факторами Дебая-Валлера и Нево-Кроса, соответственно, в то время как в областях 2 и 3а поведение коэффициента отражения не описывается ни одним из этих факторов. В области ПВО (т.е. 3а)) в отсутствие поглощения фактор Нево-Кроса справедлив лишь в предельном случае нулевого радиуса корреляции ($\xi = 0$).

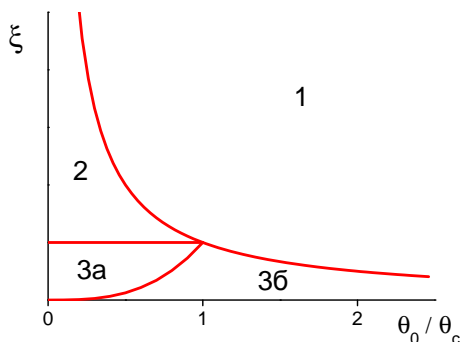


Рис. 1.13. Плоскость параметров $\xi - \theta_0$, разбитая на четыре области, соответствующие проанализированным выше предельным случаям и представленными в табл.1.1.

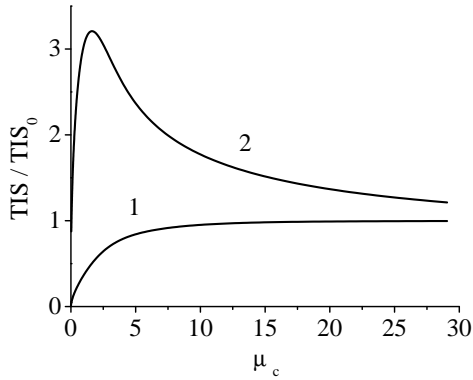


Рис. 1.14. Зависимость коэффициента интегрального рассеяния от радиуса корреляции шероховатостей (параметра μ_c). Расчеты проведены для случаев падения зондирующего пучка под углом скольжения $\theta_0 = 0.9\theta_c$ (1) и $\theta_0 = 0.1\theta_c$ (2). Все кривые нормированы на значение $TIS_0 = (2k\sigma \sin \theta_0)^2 R_F(\theta_0)$. Расчеты проведены для гауссовой корреляционной функции при значении $\sigma = 1$ нм.

В заключение этого раздела обсудим рис.1.14-1.15, где показаны значения коэффициента интегрального рассеяния в зависимости от радиуса корреляции высот шероховатостей при падении пучка внутри и вне области ПВО. Рассмотрим сначала кривую 1 на рис.1.14, которая соответствует падению излучения под углом скольжения порядка критического угла ПВО: $\theta_0 = 0.9\theta_c$. Отметим, что параметр $\mu_0 = 0.81\mu_c$ в рассматриваемом случае. При больших радиусах корреляции $\mu_c \gg 1$ реализуется случай 1 из таблицы 1.1 (см. также рис.1.13), когда значение TIS не зависит от радиуса корреляции. Когда радиус корреляции уменьшается, происходит переход от случая 1 к случаю 3а, интенсивность рассеяния начинает зависеть от радиуса корреляции и, в конце концов, обращается в нуль пропорционально $\sqrt{\mu_c}$.

Кривая 2 на рис.1.14 соответствует падению пучка под предельно малым углом скольжения $\theta_0 = 0.1\theta_c \ll \theta_c$ (при этом параметр $\mu_0 = 0.01\mu_c$) и зависимость TIS от радиуса корреляции более сложная. Как и для кривой 1 при очень больших радиусах корреляции реализуется обычный случай 1. Однако при уменьшении радиуса корреляции сначала происходит переход к случаю 2 и интенсивность рассеяния начинает возрастать как $1/\sqrt{\mu_c}$. Дальнейшее уменьшение радиуса корреляции означает переход к случаю 3а и интенсивность рассеяния падает.

Схожее поведение показывает и поправка к коэффициенту зеркального отражения δR .

Рассмотрим теперь рис.1.15, где показаны зависимости TIS и δR для случая падения пучка далеко вне области ПВО. При уменьшении радиуса корреляции происходит переход от случая 1 к случаю 3б. В обоих этих предельных случаях поправка к коэффициенту зеркального отражения практически одна и та же (факторы Дебая-Валлера и Нево-Кроса очень близки друг к другу вне области ПВО) и почти не зависит от параметра μ_c (т.е. от радиуса корреляции). Коэффициент же интегрального рассеяния при уменьшении радиуса корреля-

ции ведет себя совершенно иным образом: при больших радиусах корреляции соответствует значению TIS, рассчитанному по формуле Дебая-Валлера, затем уменьшается как $\sqrt{\mu_c}$ и, в конце концов, становится очень малым по сравнению с δR . Отличие коэффициента отражения от френелевского связано в этом случае не с потерями на рассеяние, а с возрастанием коэффициента прохождения при взаимодействии рентгеновской волны с "эффективным" переходным слоем, образовавшимся как результат усреднения шероховатой границы раздела сред. Тем самым, коэффициент интегрального отражения R_Σ практически совпадает с френелевским при $\mu_c > 1$ и приближается к коэффициенту зеркального отражения при уменьшении радиуса корреляции $\mu_c < 0.2$.

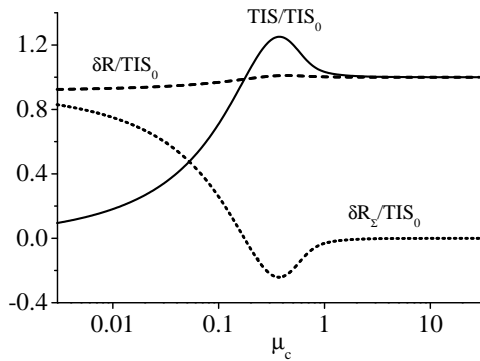


Рис. 1.15. Зависимость коэффициента интегрального рассеяния (TIS), а также поправок к коэффициентам зеркального ($\delta R = R_F - R$) и суммарного ($\delta R_\Sigma = R_F - R_\Sigma$) отражения от радиуса корреляции шероховатостей (параметра μ_c) в случае падения пучка вне области ПВО: $\theta_0 = 2.5\theta_c$. Все кривые нормированы на значение $TIS_0 = (2k\sigma \sin \theta_0)^2 R_F(\theta_0)$. Расчеты проведены для гауссовой корреляционной функции при значении $\sigma = 1$ нм.

Обращает на себя внимание наличие максимума на кривой интегрального рассеяния при значении $\mu_c \sim 0.35$. Тем самым интегральный коэффициент отражения становится больше френелевского, т.е. шероховатая поверхность направляет обратно в вакуум большую часть падающего пучка, чем идеально гладкая, если пучок падает на поверхность вне области ПВО. При этом, конечно, коэффициент прохождения уменьшается по сравнению со случаем идеально гладкой поверхности. Значительное превышение измеренного коэффициента отражения над рассчитанным по формуле Френеля наблюдалось, например, в [40].

В принципе, ничего необычного в этом эффекте нет. Действительно, рассмотрим отражение видимого излучения от стеклянной поверхности. Если поверхность гладкая, то коэффициент отражения равен примерно 4%, т.е. коэффициент прохождения излучения примерно 96%. Если же поверхность стекла сильно исцарапана, то коэффициент прохождения излучения может стать малым, т.е. поверхность стекла отражает обратно существенную долю падающего пучка. Однако отражение при этом является существенно диффузным. Несколько необычным является то, что превышение интегрального коэффициента отражения над

френелевским наблюдается лишь в ограниченном диапазоне корреляционных длин.

Тем самым, проведенное рассмотрение показало, что даже в простейшем случае одиночной поверхности взаимосвязь каналов дифракции не является тривиальной, а теория возмущений оказывается способной объяснить все эффекты, наблюдаемые в эксперименте.

1.3.4. Рассеяние рентгеновского излучения от шероховатой поверхности конечных размеров

В проведенном выше анализе дифракции РИ рассеивающая поверхность предполагалась неограниченно большой. В этом случае усреднение по площади поверхности эквивалентно усреднению по ее реализациям, а индикатриса рассеяния, следовательно, есть детерминированная величина, что конечно же является абстракцией. В действительности индикатриса рассеяния представляет собой случайную функцию, изменяющуюся от одной реализации поверхности к другой, поскольку в реальном физическом эксперименте размер рассеивающей площадки всегда ограничен либо размерами исследуемого образца, либо апертурой зондирующего пучка.

В этом разделе мы сформулируем условия, при выполнении которых можно пренебречь конечными размерами рассеивающей площадки. Сразу отметим, что эти условия оказываются зависящими от угловой ширины детектора излучения, причем чем уже щель, т.е. чем с большей точностью определяется форма углового распределения рассеяния, тем больше статистическая неопределенность измерений, связанная с конечным размером отражателя.

Поскольку мы не будем исследовать таких тонких эффектов, как дифракция волны на краях отражателя, то для упрощения выкладок будем считать, что отражающая поверхность неограничена в плоскости XU , однако шероховатости присутствуют лишь на ограниченном ее участке, а именно в квадрате со стороной L . При использовании другой модели (например, предполагая ограниченность поверхности в плоскости XU или конечную апертуру падающего пучка) возникает проблема нахождения поля невозмущенной волны.

Используя справедливое при больших r соотношение, которое можно доказать, воспользовавшись методом стационарной фазы [117],

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} \rightarrow \frac{2\pi i}{kr} \left[e^{-ikr} \delta\left(1 + \frac{\vec{k}\vec{r}}{kr}\right) - e^{ikr} \delta\left(1 - \frac{\vec{k}\vec{r}}{kr}\right) \right] \quad ; \quad r \rightarrow \infty$$

из выражения (1.13) находим асимптотику поля волны в вакууме для случая шероховатого отражателя конечных размеров

$$\Psi(r \rightarrow \infty; z < 0) = \Psi_0(r \rightarrow \infty; z < 0) + A(\vec{q}) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (1.152)$$

где амплитуда рассеяния в первом порядке теории возмущений определяется формулой

$$A(\vec{q}) = \frac{k^2}{4\pi} (1 - \varepsilon_+) t(q_0) t(q) \int_{L^2} \zeta(\vec{\rho}) \exp [i(\vec{q}_0 - \vec{q})\vec{\rho}] d^2\vec{\rho} \quad (1.153)$$

$$\vec{q}_0 = k\{\cos \theta_0; 0\}; \quad \vec{q} = k\{\cos \theta \cos \varphi; \cos \theta \sin \varphi\}; \quad k = \omega/c = 2\pi/\lambda,$$

Случайная функция $\zeta(\rho)$, входящая в выражение (1.153), описывает профиль шероховатой поверхности и, в соответствии с нашей моделью отражателя, отлична от нуля в квадрате $|x|, |y| < L/2$.

Определим индикатрису рассеяния следующим образом:

$$\Phi_L(\vec{q}) = \frac{1}{Q^{inc}} \frac{dQ^{scat}}{d\Omega}$$

где $Q^{inc} = L^2 \sin \theta_0$ – мощность излучения, падающего на рассеивающий участок поверхности площадью L^2 (предполагается, что падающая волна имеет единичную амплитуду), а $dQ^{scat} = |A(\vec{q})|^2 d\Omega$ – это мощность рассеянного излучения, пересекающего площадку $dS = r^2 d\Omega$ на поверхности сферы радиуса $r \rightarrow \infty$.

Используя (1.153), находим

$$\Phi_L(\vec{q}) = \frac{S(q)}{L^2} \int_{L^2} \zeta(\vec{\rho}_1) \zeta(\vec{\rho}_2) \exp [i(\vec{q}_0 - \vec{q})(\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2)] d^2\vec{\rho}_1 d^2\vec{\rho}_2 \quad (1.154)$$

где для сокращения записи введена следующая величина:

$$S(q) = \frac{k^5 |\varepsilon_+ - 1|^2}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} |t(q_0) t(q)|^2 \quad (1.155)$$

Интегрирование в (1.153) и (1.154) ведется по рассеивающему участку поверхности площадью L^2 .

Индикатриса рассеяния, записанная в виде (1.154) (т.е. без усреднения по реализациям), есть случайная величина. Предположим, что для случайной функции $\zeta(\vec{\rho})$ выполнены условия эргодичности (см., например, [46]). В частности, если функция ζ распределена по нормальному закону, то достаточным условием эргодичности является непрерывность PSD-функции [36]. Тогда справедливо соотношение

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^2} \int_{L^2} \zeta(\vec{\rho}_1) \zeta(\vec{\rho} + \vec{\rho}_1) d^2\vec{\rho}_1 = \langle \zeta(\vec{\rho}_1) \zeta(\vec{\rho} + \vec{\rho}_1) \rangle \equiv C(\vec{\rho})$$

т.е. значение функции $\zeta(\vec{\rho}_1) \zeta(\vec{\rho} + \vec{\rho}_1)$, усредненное по поверхности, равно среднему по реализациям. Тем самым, при $L \rightarrow \infty$ непосредственно из выражения (1.154) следует (1.44). При этом индикатриса рассеяния (1.44) есть величина детерминированная и одна и та же

для всех неограниченных шероховатых поверхностей с одними и теми же статистическими свойствами.

Иная ситуация в случае, когда площадь рассеивающего участка конечна. В этом случае интенсивность рассеяния (1.154) в заданном направлении \vec{q} есть случайная величина, изменяющаяся от одной реализации поверхности к другой и характеризующаяся своим средним значением и дисперсией. Цель дальнейшего рассмотрения состоит в том, чтобы рассчитать эти величины и понять, при каких значениях L можно не учитывать конечные размеры рассеивающего участка. Для этого среднее значение $\langle \Phi_L(\vec{q}) \rangle$ (здесь и ниже угловые скобки означают усреднение по реализациям) должно мало отличаться от значения $\Phi(\vec{q})$ для неограниченной шероховатой поверхности, а относительная дисперсия

$$\frac{D[\Phi_L]}{\langle \Phi_L \rangle^2} = \frac{\langle \Phi_L^2 \rangle - \langle \Phi_L \rangle^2}{\langle \Phi_L \rangle^2}$$

должна быть много меньше единицы.

Прежде всего, найдем среднее значение $\langle \Phi_L \rangle$. Для этого усредним (1.154) по реализациям и перейдем в полученном выражении от корреляционной функции к ее фурье-преобразованию. Тогда индикатриса рассеяния может быть записана в следующем виде:

$$\langle \Phi_L(\vec{q}) \rangle = \frac{S(q)}{L^2} \int \text{PSD}_{2D}(\vec{\nu}) \left[\frac{\sin(\Delta q_x - \nu_x)L/2}{(\Delta q_x - \nu_x)/2} \cdot \frac{\sin(\Delta q_y - \nu_y)L/2}{(\Delta q_y - \nu_y)/2} \right]^2 d^2\vec{\nu} \quad (1.156)$$

$$\Delta \vec{q} \equiv \vec{q} - \vec{q}_0$$

Будем считать, что функция $\text{PSD}_{2D}(\vec{\nu})$ максимальна при $\nu = 0$ и масштаб ее изменения равен ξ^{-1} , где ξ - радиус корреляции высот шероховатостей. Осциллирующий член в квадратных скобках в (1.156) связан с дифракцией падающей волны на площадке конечных размеров L , максимален при $\vec{\nu} = \Delta \vec{q}$, а типичный масштаб его изменения равен L^{-1} . Поэтому, в случае больших размеров площадки $L \gg \xi$, функцию $\text{PSD}_{2D}(\vec{\nu})$ можно считать постоянной в области значений $\vec{\nu} \sim \Delta \vec{q}$, где осциллирующий множитель отличен от нуля, и вынести из-под знака интеграла. В результате получим выражение (1.44) для индикатрисы рассеяния от неограниченной поверхности: $\langle \Phi_L(\vec{q}) \rangle \rightarrow \Phi(\vec{q})$ при $L \rightarrow \infty$.

В противоположном предельном случае, когда размер рассеивающей площадки крайне мал $L \ll \xi$, осциллирующий член в (1.156) практически постоянен в области значений $\nu \leq \xi$, где отлична от нуля функция $\text{PSD}_{2D}(\vec{\nu})$. Вынося его за знак интеграла, находим

$$\langle \Phi_L(\vec{q}) \rangle \rightarrow S(q)L^2\sigma^2 \left[\frac{\sin(L\Delta q_x/2)}{L\Delta q_x/2} \cdot \frac{\sin(L\Delta q_y/2)}{L\Delta q_y/2} \right]^2; \quad L \ll \xi \quad (1.157)$$

Таким образом, при малых $L \ll \xi$ ширина индикатрисы рассеяния (1.157) определяется дифракционной расходимостью пучка, но не радиусом корреляции шероховатостей, а интенсивность рассеяния – площадью L^2 рассеивающего участка. При этом, как видно из (1.157),

из углового распределения рассеяния полностью исчезла информация о спектре шероховатостей (т.е. о функции $\text{PSD}_{2D}(\vec{\nu})$).

Чтобы более наглядно представить переход от формулы (1.44) к формуле (1.157) при уменьшении размеров шероховатой площадки, рассмотрим рассеяние вперед ($\Delta q = 0$) для случая гауссовой корреляционной функции. Тогда интеграл в (1.156) вычисляется точно и результат имеет вид:

$$\langle \Phi_L(\vec{q}_0) \rangle = S(q_0) \pi \sigma^2 \xi^2 \left[\text{erf}\left(\frac{L}{\xi}\right) - \frac{\xi}{L\sqrt{\pi}} \left(1 - e^{-L^2/4\xi^2}\right) \right]^2 \quad (1.158)$$

В частности, при $L \gg \xi$ выражение (1.158) упрощается:

$$\langle \Phi_L(\vec{q}_0) \rangle \approx \Phi(\vec{q}_0) \left(1 - \frac{\xi}{L\sqrt{\pi}}\right); \quad L \gg \xi \quad (1.159)$$

Формула (1.159) показывает в явном виде, при каких условиях конечный размер рассеивающей площадки не сказывается на средней величине индикатрисы рассеяния. В то же время даже малое отличие между усредненной индикатрисой $\langle \Phi_L \rangle$ и индикатрисой рассеяния от неограниченной поверхности Φ не означает, строго говоря, что можно пренебречь конечными размерами рассеивающего участка. Для этого необходимо, чтобы была мала и относительная дисперсия индикатрисы. В противном случае наличие большого разброса в значениях Φ_L для разных реализаций, не позволит сколько-нибудь надежно определить параметры конкретной реализации поверхности.

Используя (1.154), найдем выражение для относительной дисперсии индикатрисы рассеяния в пределе большой рассеивающей площадки:

$$\frac{D[\Phi_L]}{\langle \Phi_L \rangle^2} \rightarrow 1 + \left[\frac{\sin \Delta q_x L}{\Delta q_x L} \cdot \frac{\sin \Delta q_y L}{\Delta q_y L} \right]^2 \rightarrow 1; \quad L \rightarrow \infty; \quad \Delta \vec{q} \equiv \vec{q} - \vec{q}_0 \quad (1.160)$$

При выводе (1.160) предполагалось, что высота шероховатостей распределена по нормальному закону.

Таким образом, получили, на первый взгляд, обескураживающий результат: даже в случае неограниченной рассеивающей поверхности ($L \rightarrow \infty$) дисперсия индикатрисы рассеяния равна квадрату ее среднего значения. Это означает, что никакой надежной информации о конкретной поверхности из данных по рассеянию извлечь нельзя, поскольку измеренное значение потока излучения, рассеянного от данной поверхности в данном направлении может сколь угодно отличаться от значения, усредненного по реализациям.

Чтобы понять смысл полученного результата, найдем, прежде всего, коэффициент корреляции потоков рассеянного излучения в направлениях \vec{q}_1 и \vec{q}_2 :

$$K \equiv \frac{\langle \Phi_L(\vec{q}_1) \Phi_L(\vec{q}_2) \rangle - \langle \Phi_L(\vec{q}_1) \rangle \langle \Phi_L(\vec{q}_2) \rangle}{\langle \Phi_L(\vec{q}_1) \rangle \langle \Phi_L(\vec{q}_2) \rangle} \quad (1.161)$$

В предельном случае неограниченной шероховатой поверхности $L \rightarrow \infty$ и в предположении нормального распределения высот шероховатостей из (1.154) и (1.161) находим

$$K = \frac{\text{PSD}_{2D}(\Delta\vec{q}_1)}{\text{PSD}_{2D}(\Delta\vec{q}_2)} \cdot \lim_{L \rightarrow \infty} \left\{ \left[\frac{\sin(L(\Delta q_{2x} - \Delta q_{1x})/2)}{L(\Delta q_{2x} - \Delta q_{1x})/2} \cdot \frac{\sin(L(\Delta q_{2y} - \Delta q_{1y})/2)}{L(\Delta q_{2y} - \Delta q_{1y})/2} \right]^2 + \left[\frac{\sin(L(\Delta q_{2x} + \Delta q_{1x})/2)}{L(\Delta q_{2x} + \Delta q_{1x})/2} \cdot \frac{\sin(L(\Delta q_{2y} + \Delta q_{1y})/2)}{L(\Delta q_{2y} + \Delta q_{1y})/2} \right]^2 \right\}; \quad \Delta\vec{q}_j \equiv \vec{q}_j - \vec{q}_0$$

Полученное выражение показывает, что коэффициент корреляции потоков K равен либо 0, либо 1, причем

$$K = \begin{cases} 1, & \text{если } \vec{q}_1 = \vec{q}_2 \\ 1, & \text{если } \vec{q}_1 - \vec{q}_0 = \vec{q}_2 - \vec{q}_0 \\ 0, & \text{в остальных случаях} \end{cases} \quad (1.162)$$

Первое условие из (1.162) очевидно (корреляция потока с самим собой). Второе условие из (1.162) также имеет простой физический смысл. Действительно, разложим профиль поверхности в интеграл Фурье

$$\zeta(\vec{\rho}) = \int \zeta(\vec{\nu}) \exp(i\vec{\nu}\vec{\rho}) d^2\vec{\nu} \quad (1.163)$$

т.е. представим поверхность в виде суперпозиции двумерных дифракционных решеток со случайными амплитудами $\zeta(\vec{\nu})$. В первом порядке теории возмущений (1.153) и при $L \rightarrow \infty$ рассеяние в направлении \vec{q} будет определяться той гармоникой из разложения (1.163), у которой вектор обратной решетки $\vec{\nu} = \vec{q} - \vec{q}_0$. Отсюда понятна причина корреляции потоков в направлениях \vec{q}_1 и \vec{q}_2 , связанных вторым из условий (1.162). Поскольку $\zeta(-\vec{\nu}) = \zeta^*(\vec{\nu})$, то эти потоки обусловлены дифракцией на одной и той же “решетке” из разложения (1.163), но соответствуют разным (+1 и -1) порядкам дифракции. Причина отсутствия корреляции потоков, связанных с дифракцией на разных “решетках” из (1.163), также вполне ясна, поскольку известно (см., например, [36]), что для однородных поверхностей амплитуды $\zeta(\vec{\nu})$ являются дельта-коррелированными.

Таким образом, вновь возвращаясь к полученному “парадоксальному” результату (1.160), мы можем заключить, что действительно, дисперсия потока, рассеянного в заданном направлении велика и сравнима со средним значением потока. В то же время при $L \rightarrow \infty$ полностью отсутствует корреляция между потоками, рассеянными в двух разных, сколь угодно близких направлениях. Поэтому, если бы можно было измерить поток в заданном направлении, то его величина для конкретной реализации поверхности могла бы сильно отличаться от среднего значения. Однако, поскольку апертура детектора конечна, то в реальном эксперименте измеряется значение потока, усредненное по некоторому диапазону направлений. Естественно

ожидать, что при $L \rightarrow \infty$, когда рассеянный поток дельта-коррелирован, измеряемый поток при сколь угодно малой, но конечной апертуре детектора будет соответствовать среднему и, тем самым, “парадокс” разрешается.

Чтобы более строго доказать это утверждение, предположим, что детектор регистрирует поток излучения, распространяющегося в телесном угле $\delta\Omega = \cos\theta \cdot \delta\theta\delta\varphi$, где $\delta\theta$ и $\delta\varphi$ – это угловые размеры апертуры детектора в плоскости падения и азимутальной плоскости, соответственно. Тогда измеряемый поток в направлении \vec{q} равен

$$\delta\Phi(\vec{q}) = \frac{S(q)}{L^2} \int_{\delta\Omega} \zeta(\vec{\rho}_1)\zeta(\vec{\rho}_2) \exp [i(\vec{q} - \vec{q}_0)(\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2)] d^2\vec{\rho}_1 d^2\vec{\rho}_2 d\Omega \quad (1.164)$$

где интегрирование по телесному углу ведется в пределах апертуры детектора, угловые размеры которой достаточно малы, так что функция $S(q)$ может быть вынесена за знак интеграла.

Из (1.164) после некоторых математических преобразований можно найти среднее значение потока и его дисперсию в пределе $L \rightarrow \infty$:

$$\langle \delta\Phi(\vec{q}) \rangle = (2\pi)^2 S(q) \int_{\delta\Omega} \text{PSD}_{2D}(\vec{q}_0 - \vec{q}) d\Omega \quad (1.165)$$

$$D[\delta\Phi(\vec{q})] = \frac{(2\pi)^6 S^2(q)}{2kk_-(q_0)L^2} \int_{\delta\Omega} [\text{PSD}_{2D}(q_0 - q)]^2 d\Omega \quad (1.166)$$

Считая, что угловые размеры детектора в обоих направлениях θ и φ значительно меньше ширины индикатрисы рассеяния, из (1.165) и (1.166) находим окончательно выражение для относительной дисперсии

$$\frac{D[\delta\Phi]}{\langle \delta\Phi \rangle^2} \simeq \frac{\lambda^2}{2L^2 \sin\theta_0 \delta\Omega} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad L \rightarrow \infty \quad (1.167)$$

Это выражение показывает, что действительно, дисперсия измеряемого потока равна нулю в пределе бесконечной рассеивающей площадки для любой конечной апертуры детектора. Интересно, что в выражение (1.167) не входит в явном виде радиус корреляции высот шероховатостей. Вместе с тем, форма индикатрисы рассеяния может быть определена в эксперименте лишь в том случае, когда угловая ширина детектора в обеих плоскостях θ и φ много меньше (скажем в N раз) угловой ширины диаграммы рассеяния. При этом $\delta\Omega = \lambda^2/(\pi^2\xi^2 N^2 \sin\theta_0)$ и из (1.167) находим

$$\frac{D[\delta\Phi]}{\langle \delta\Phi \rangle^2} \simeq \frac{\pi^2}{2} N^2 \frac{\xi^2}{L^2} \quad (1.168)$$

Таким образом, относительная дисперсия потока, так же как и его среднее значение (1.159), определяются отношением радиуса корреляции ξ к размеру L рассеивающей площадки. Предположим, в качестве примера, что угловая ширина приемной щели детектора в

$N = 10$ раз меньше ширины индикатрисы рассеяния, а радиус корреляции высот шероховатостей равен $\xi = 10$ мкм. Тогда, в соответствии с (1.168), среднее квадратичное отклонение потока не будет превышать 5%, если размер рассеивающего участка $L > 5$ мм. Тем самым, выражения (1.159) и (1.168) показывают, что методы исследования шероховатостей, основанные на анализе рассеянного излучения, по своей природе не могут быть локальными: чем точнее мы хотим прописать форму индикатрисы рассеяния (т.е. чем больше N), тем больше статистическая неопределенность измерений, связанная с конечным размером рассеивателя.

1.3.5. Интерференционные эффекты в рассеянии от тонкой пленки

Если форма индикатрисы рентгеновского рассеяния от одиночной поверхности полностью определялась всего лишь двумя параметрами μ_0 и μ_c (в случае малого поглощения), то форма индикатрисы рассеяния от шероховатой пленки зависит от большого числа параметров довольно сложным образом. Различные типы индикатрис рассеяния от тонкой пленки детально проанализированы в [A10]. Здесь же мы ограничимся рассмотрением некоторых физических эффектов, которые не имеют аналогов в рассеянии рентгеновского излучения от одиночной поверхности и наиболее интересны для задач рентгеновской оптики и контроля шероховатостей.

В соответствии с (1.55), проинтегрированная по азимутальному углу индикатриса рассеяния от изотропной пленки постоянной плотности, нанесенной на однородную и изотропную подложку, имеет следующий вид:

$$\Pi(\theta, h) = \frac{k^3}{16\pi \sin \theta_0} \left[A_s \text{PSD}_{ss}(p) + A_f \text{PSD}_{ff}(p, h) + A_{sf} \text{PSD}_{sf}(p, h) \right] \quad (1.169)$$

где электродинамические факторы A_j не зависят от параметров шероховатости:

$$\begin{aligned} A_f &= |(1 - \varepsilon_f)[1 + r(\theta_0, h)][1 + r(\theta, h)]|^2, & A_s &= |(\varepsilon_f - \varepsilon_s)t(\theta_0, h)t(\theta, h)|^2, \\ A_{sf} &= 2\text{Re} \left\{ (1 - \varepsilon_f)(\varepsilon_f - \varepsilon_s)^* [1 + r(\theta_0, h)][1 + r(\theta, h)]t^*(\theta_0, h)t^*(\theta, h) \right\} \end{aligned} \quad (1.170)$$

ε_s и ε_f - диэлектрические проницаемости подложки и пленки, а r и t - амплитудные коэффициенты отражения и прохождения идеально гладкой пленки толщиной h .

Рассеивающие свойства шероховатой пленки полностью характеризуются тремя PSD-функциями, причем PSD_{ss} и PSD_{ff} описывают шероховатость подложки и внешней поверхности пленки, а PSD_{sf} определяет их статистическую корреляцию. Первые два слагаемых в (1.169) показывают интенсивность рассеяния от шероховатостей индивидуальных границ

раздела, в то время как третье слагаемое описывает интерференцию волн, рассеянных от разных границ раздела с конформными шероховатостями. Электродинамический фактор A_{sf} является осциллирующей функцией угла рассеяния, приводя к появлению максимумов и минимумов на индикатрисе рассеяния, связанных с положительной или отрицательной интерференцией волн, рассеянных двумя границами пленки с коррелированными шероховатостями.

Предположим, что плоская рентгеновская волна падает на идеально гладкую пленку под углом скольжения θ_0 , причем выполняется следующее условие: $|1 - \varepsilon_f|^{1/2} < \theta_0 < |1 - \varepsilon_s|^{1/2}$. Это условие подразумевает, что электронная плотность вещества пленки меньше, чем вещества подложки, так что волна проникает в пленку, но испытывает полное внешнее отражение от поверхности подложки.

Если поглощение рентгеновской волны в веществе пренебрежимо мало, т.е. коэффициент отражения равен 1, то благодаря интерференции падающей и отраженной волн в полупространстве вне подложки образуется стоячая волна. Изменение угла скольжения θ_0 приводит к изменению фазы отраженной волны и, следовательно, к изменению положения в пространстве узлов и пучностей стоячей волны. При некоторых определенных значениях угла θ_0 может получиться так, что один из узлов будет расположен точно на внешней поверхности пленки. В этом случае наличие малых шероховатостей на внешней поверхности пленки не будет приводить к появлению рассеянного излучения. Формальное обоснование этому - равенство нулю электродинамических факторов A_f и A_{sf} в выражениях (1.170).

Иллюстрацией описанного эффекта служит рис.1.16, где показан коэффициент интегрального рассеяния от пленки (TIS) с некоррелированными шероховатостями, а также вклад в рассеяние от каждой из границ раздела при изменении угла скольжения падающего излучения. Из рисунка видно, что если угол скольжения не превышает критического угла ПВО от вещества пленки $\theta_0 < \sqrt{1 - \varepsilon_f}$, то рассеяние целиком обусловлено шероховатостью внешней поверхности пленки, поскольку амплитуда волны на поверхности подложки экспоненциально мала. Если же $\sqrt{1 - \varepsilon_f} < \theta_0 < \sqrt{1 - \varepsilon_s}$, то волна проникает в пленку, но испытывает полное внешнее отражение от поверхности подложки. При определенных значениях угла θ_0 происходит описанный выше эффект и вклад в рассеяние от шероховатостей внешней поверхности пленки становится очень малым. В частности, как видно из рисунка, при углах скольжения $\theta_0 \simeq 0.275^\circ$, 0.33° и 0.39° рассеяние практически целиком обусловлено шероховатостями подложки.

Этот эффект представляется нам весьма интересным для задачи контроля пленочных шероховатостей, поскольку позволяет проанализировать рассеяние от каждой из границ раз-

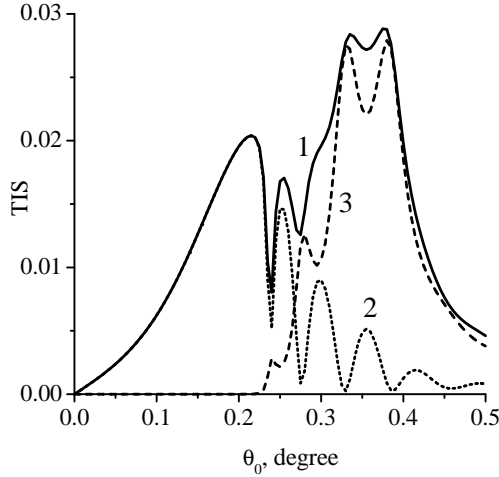


Рис. 1.16. Рассчитанное значение коэффициента интегрального рассеяния рентгеновского излучения ($\lambda = 0.154$ нм) от кремниевой пленки толщиной 50 нм, напыленной на молибденовую подложку, в зависимости от угла скольжения падающего пучка (1). Здесь же показан вклад в рассеяние от внешней (2) и внутренней (3) границ раздела пленки в предположении, что шероховатости обеих границ раздела некоррелированы, но описываются одной и той же PSD функцией вида (1.129) при $\sigma = 0.5$ нм, $\alpha = 0.5$ и $\xi = 10$ мкм. (Из [A10]).

дела по отдельности.

Оказывается, что деструктивная интерференция волн, рассеянных от двух границ раздела тонкой пленки, может при определенных условиях привести к значительному уменьшению (на несколько порядков величины) интенсивности рентгеновского рассеяния.

Рассмотрим простейшую модель пленки, которая означает, что рельеф внешней поверхности пленки повторяет рельеф подложки, но сглаживает его в $\beta > 1$ раз:

$$\zeta_1(\vec{\rho}) = \frac{1}{\beta} \zeta_2(\vec{\rho}) \quad (1.171)$$

Тогда

$$[\text{PSD}_{sf}(p)]^2 = \text{PSD}_s(p) \cdot \text{PSD}_f(p) \quad (1.172)$$

Потребуем отсутствия рассеяния в направлении зеркального отражения $\theta = \theta_0$ и определим условия, при которых это соотношение справедливо.

Очевидно, что в случае некоррелированных шероховатостей интенсивность рассеяния (1.169) в любом направлении не может быть равна нулю. В случае же коррелированных шероховатостей (1.172) интерференционный член в (1.169) может скомпенсировать два других, а условие подавления рассеяния может быть записано в виде

$$[1 + r_0(\theta_0)]^2 (1 - \varepsilon_f) + \beta [t_0(\theta_0)]^2 (\varepsilon_f - \varepsilon_s) = 0 \quad (1.173)$$

Для простоты пренебрежем сначала поглощением рентгеновского излучения в веществе. Тем не менее, амплитудные коэффициенты отражения r_0 и прохождения t_0 остаются комплексными. Следовательно, выражение (1.173) содержит, в действительности, два условия на амплитуды и фазы рассеянных волн. Таким образом, если (1.173) рассматривать как уравнение относительно толщины пленки, то физические (вещественные) его решения могут существовать лишь при определенных значениях параметров λ , θ_0 , ε_s , ε_f , и β .

Далее мы ограничимся наиболее важным случаем полного внешнего отражения рентгеновского излучения, т.е. $\theta_0 < \sqrt{1 - \varepsilon_s}$, когда коэффициент отражения велик. В этом случае физическое решение уравнения (1.173) существует и определяется следующей формулой [A11]:

$$h = \frac{1}{|k_f|} \ln \left\{ \frac{\kappa |k_f| + \sqrt{|k_f|^2(\kappa^2 - 1) + |k_s|^2}}{|k_f| + |k_s|} \right\} \quad (1.174)$$

$$\kappa^2 = \beta \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_f}{1 - \varepsilon_f} = \beta \frac{\delta_f - \delta_s}{\delta_f}; \quad \delta_j = 1 - \varepsilon_j; \quad k_j = k \sqrt{\sin^2 \theta_0 - \delta_j}$$

если параметры, содержащиеся в (1.173), удовлетворяют условиям:

$$\theta_0 < \sqrt{\delta_s} < \sqrt{\delta_f} \quad (1.175)$$

$$\beta > \frac{\delta_f}{\delta_f - \delta_s} \quad (1.176)$$

Второе неравенство в (1.175) означает, что электронная плотность материала подложки должна быть меньше, чем материала пленки. Условия (1.175) гарантируют, что разность фаз волн, рассеянных на разных границах раздела, равна π . Выполнение условий (1.174), (1.176) необходимо для того, чтобы обеспечить равенство амплитуд рассеянных волн.

Рассмотрим более детально следующие четыре случая:

1. Статистические свойства обеих границ раздела одинаковы, однако шероховатости пленки и подложки не коррелируют друг с другом: $\text{PSD}_f(p) = \text{PSD}_s(p)$, $\text{PSD}_{sf}(p) \equiv 0$.
2. Шероховатости пленки и подложки полностью коррелированы: $\text{PSD}_f(p) = \text{PSD}_s(p) = \text{PSD}_{sf}(p)$.
3. Пленка приводит к полному сглаживанию поверхностного рельефа: $\text{PSD}_{sf}(p) \equiv \text{PSD}_f(p) \equiv 0$, но $\text{PSD}_s(p) \neq 0$.
4. Шероховатости пленки и подложки коррелированы в соответствии с (1.171) при значении параметра сглаживания $\beta = 2$, а именно: $\text{PSD}_s(p) = 4\text{PSD}_f(p) = 2\text{PSD}_{sf}(p)$.

Рассчитанная индикатриса рассеяния, проинтегрированная по азимутальному углу, показана на рис.1.17 для случая тонкой молибденовой пленки ($h = 1.5$ нм), напыленной на кварцевую подложку. Предполагалось, что PSD-функции имели вид (1.129) с одним и тем же радиусом корреляции $\xi = 10$ мкм. Расчеты проведены при следующих значениях средне-квадратичной высоты шероховатостей:

$$\begin{aligned} \sigma_f = \sigma_s = 0.6 \text{ нм}; \quad \sigma_{sf} = 0, \quad & \text{в 1-м случае;} \\ \sigma_f = \sigma_{sf} = \sigma_s = 0.6 \text{ нм}, \quad & \text{во 2-м случае;} \\ \sigma_f = \sigma_{sf} = 0; \quad \sigma_s = 0.6 \text{ нм}, \quad & \text{в 3-м случае;} \\ \sigma_f = 0.3 \text{ нм}; \quad \sigma_{sf} = 0.6/\sqrt{2} \text{ нм}; \quad \sigma_s = 0.6 \text{ нм}, \quad & \text{в 4-м случае.} \end{aligned}$$

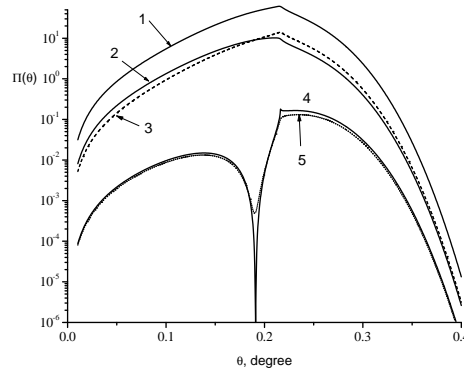


Рис. 1.17. Индикатриса рентгеновского рассеяния ($\lambda = 0.154$ нм) от молибденовой пленки толщиной 1.5 нм, напыленной на кварцевую подложку. Кривые 1-4 соответствуют случаям, описанным в тексте. Кривая 5 рассчитана с учетом поглощения излучения в веществе, в то время как при расчете кривой 4 поглощением пренебрегалось. (Из [A11]).

Следует подчеркнуть, что необходимые условия подавления рассеяния не зависят ни от значения высоты шероховатостей, ни от их радиуса корреляции. Выбранные значения σ и ξ взяты исключительно в качестве примера и не влияют на анализ, проведенный в этом разделе.

Во втором из рассматриваемых случаев, поскольку фазовые условия (1.175) деструктивной интерференции выполнены, значение TIS оказывается примерно в 5 раз меньше, чем в первом случае. Однако интенсивность рассеяния не равна нулю ни при каком значении угла рассеяния θ , поскольку амплитудные условия подавления рассеяния (1.176) не выполнены.

В четвертом же из рассматриваемых случаев выполнены как фазовые (1.175), так и амплитудные (1.176) условия деструктивной интерференции и наблюдается полное подавление рассеяния в направлении зеркального отражения. Значение интегрального рассеяния при этом оказывается примерно в 100 раз меньше, чем даже в случае 3, когда пленка полностью

сглаживает шероховатый рельеф подложки.

Если материалы пленки и подложки поглощающие, то интенсивность рассеяния в зеркальном направлении не равна нулю (см. кривую 5 на рис. 1.17), поскольку в этом случае условия (1.173) выполняются лишь приближенно. Тем не менее, интегральная интенсивность рассеяния все еще на 2-3 порядка меньше, чем в случаях 1-3.

Для очень тонкой пленки $|k_f h| \rightarrow 0$ и большого радиуса корреляции $\xi \gg \lambda / |1 - \varepsilon_s|$ значение интегрального рассеяния могут быть рассчитаны в явном виде:

$$\text{TIS} \simeq \begin{cases} \text{TIS}_{sub} (|1 - \varepsilon_f|^2 + |\varepsilon_f - \varepsilon_s|^2) / |1 - \varepsilon_s|^2, & \text{в случае 1} \\ \text{TIS}_{sub}, & \text{в случаях 2 и 3} \\ \text{TIS}_{sub} \cdot 2h^2 / \xi^2 \cdot |1 - \varepsilon_f|^2 / (|(1 - \varepsilon_s)|^2 |\varepsilon_s - \cos^2 \theta_0|), & \text{в случае 4} \end{cases} \quad (1.177)$$

$$\text{TIS}_{sub} \approx (2k\sigma_s \sin \theta_0)^2 R_{sub}(\theta_0)$$

где TIS_{sub} и R_{sub} - значения интегрального рассеяния и френелевского коэффициента отражения от чистой (без пленки) подложки. Эти выражения были получены в предположении, что угол скольжения падающего излучения удовлетворяет условию $\theta_0 \gg \sqrt{\lambda/\xi}$.

Формулы (1.177), в частности, показывают, что значение интегрального рассеяния от очень тонкой пленки с коррелированными шероховатостями такое же как и от чистой подложки. При напылении же пленки с шероховатостями, которые не коррелируют с шероховатостями подложки, значение TIS может быть как больше, так и меньше, чем для исходной подложки, в зависимости от соотношения между диэлектрическими проницаемостями ε_f и ε_s . В обоих этих случаях значение TIS не зависит от радиуса корреляции высот поверхностных шероховатостей. Напротив, в случае интерференционного подавления рассеяния значение TIS сильно зависит от радиуса корреляции ξ , причем чем больше ξ , тем меньше интегральное рассеяние. Этот эффект ясно виден на рис. 1.17. Так, в четвертом из рассматриваемых случаев шероховатость подложки предполагалась равной 0.6 нм, а шероховатость пленки - 0.3 нм. Значение же интегрального рассеяния из-за интерференционного подавления оказалось таким же, как от чистой подложки с высотой шероховатости около 0.02 нм. Такое значение шероховатости меньше размера атома и находится за пределами возможностей современной технологии обработки поверхностей. Тем самым, рассматриваемый эффект может быть полезным при разработке рентгенооптических элементов с предельно малым рассеянием.

Анализ формулы (1.174) показывает, что толщина пленки, необходимая для интерференционного подавления рассеяния, заключена в интервале 1-2.5 нм при значении параметра сглаживания $\beta = 2$. Конечно, вопрос о возможности напыления сверхтонких сглаживающих пленок требует специальных исследований. Возможно, подходящим для этой цели будет ме-

тод ионного травления, который состоит в том, что сначала напыляется пленка большей толщины, чем необходимо, а затем ее толщина уменьшается до нужного значения за счет обработки направленным потоком ионов. Как показано в [118, 119], этот метод позволяет сгладить поверхности многих материалов, причем длиннопериодные шероховатости остаются коррелированными с шероховатостями подложки.

1.3.6. Интерференционные эффекты в рассеянии от многослойных структур

Картина рассеяния рентгеновского излучения от многослойных структур принципиальным образом отличается от рассеяния как от одиночной поверхности, так и от одиночной пленки на подложке. Наиболее впечатляющей особенностью является появление так называемых квази-брэгговских пиков на индикатрисе рассеяния, связанных с интерференцией волн, рассеянных от разных границ раздела с коррелированными шероховатостями. Этот эффект, по-видимому, впервые был предсказан в работе [120], а затем наблюдался в целом ряде экспериментов [94], [121]-[126].

Теоретическое рассмотрение взаимодействия рентгеновской волны с шероховатой многослойной структурой проведено во многих работах и основывается, как правило, либо на упрощенном DWBA приближении (аналогичном приближению Синха) [14, 89, 93, 94], либо на теории возмущений по высоте шероховатостей [121, 122]. В принципе, численный расчет индикатрисы рассеяния в обоих подходах не представляет никаких сложностей для заданного набора PSD-функций межслоевых шероховатостей и позволяет описать особенности рентгеновского рассеяния, наблюдаемые в эксперименте. В то же время, на наш взгляд, всем существующим подходам присущи определенные недостатки.

Во-первых, в большинстве работ априори предполагается, что как автокорреляционные, так и кросс-корреляционные функции описываются модельными выражениями. Так, для автокорреляционной функции каждой из границ раздела часто используется представление (1.88), а кросс-корреляционные функции задают в виде экспоненты с показателем пропорциональным расстоянию между рассматриваемыми границами раздела [127–129]. Ясно, что такой подход позволяет качественно объяснить особенности рентгеновского рассеяния, но не может рассматриваться как основа для количественного метода определения параметров межслоевых шероховатостей. В этой связи следует выделить работы [121, 122, 130, 131], в которых формирование межслоевых шероховатостей описывается в рамках общей линейной модели роста пленок.

Далее, во всех существующих теоретических подходах индикатриса рассеяния представ-

ляется в виде двойной суммы парциальных амплитуд рассеяния от каждой границы раздела. Такое представление, на наш взгляд, не является полностью удовлетворительным и плохо пригодно для анализа физических явлений, наблюдаемых в эксперименте. По существу, объяснение этих явлений (например, угловое положение квази-брэгговских пиков) основывается на общих физических соображениях, а не на аккуратном математическом формализме.

Оказывается, что используя общую линейную модель роста пленок, двойное суммирование в выражении для индикатрисы рассеяния можно выполнить в аналитическом виде и получить компактные формулы, которые позволяют объяснить все явления, наблюдаемые в эксперименте, и могут служить основой для извлечения информации о межслоевых шероховатостях из экспериментальных данных по рентгеновскому рассеянию.

Разлагая, как и в случае тонкой пленки, возмущение диэлектрической проницаемости в ряд по высоте шероховатостей, получаем из (1.30) следующее выражение для индикатрисы рассеяния от произвольной многослойной структуры со скачкообразным изменением диэлектрической проницаемости на границах раздела сред:

$$\Phi(\theta, \varphi) = \frac{k^5}{(4\pi)^2 k_-(q_0)} \sum_{i,j=1}^{M+1} a_i(q_0, q) a_j^*(q_0, q) \cdot \text{PSD}_{2D}^{(ij)}(\vec{\nu}) \quad (1.178)$$

$$a_j(q_0, q) = (\varepsilon_{j-1} - \varepsilon_j) \psi(z_j, q_0) \psi(z_j, q); \quad \varepsilon_0 = 1 \quad \varepsilon_{M+1} = \varepsilon_s$$

$$C_{ij}(\vec{\rho}) = \langle \zeta_i(\vec{\rho} + \vec{\rho}') \zeta_j(\vec{\rho}') \rangle; \quad \text{PSD}_{2D}^{(ij)}(\vec{\nu}) = \int C_{ij}(\vec{\rho}) e^{i\vec{\nu}\vec{\rho}} d^2\vec{\rho}$$

где двойное суммирование ведется по всем границам раздела многослойной структуры, а функция $\zeta_j(\vec{\rho})$ описывает рельеф j -той границы раздела.

Ниже будем рассматривать периодическую многослойную структуру периода d , состоящую из чередующихся слоев двух различных материалов. Прежде всего проанализируем особенности рентгеновского рассеяния в двух предельных случаях конформных (т.е. полностью коррелированных по глубине структуры) и полностью некоррелированных шероховатостей разных границ раздела, но предполагая, что их статистические параметры (PSD-функции) одни и те же. Для упрощения рассмотрения ограничимся случаем полубесконечной структуры ($M \rightarrow \infty$). Тогда общее выражение (1.178) для индикатрисы рассеяния может быть переписано в следующем виде:

$$\Phi_c(\theta, \varphi) = \frac{k^5}{k_-(q_0)} \left| (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \cdot \sum_{j=2}^{\infty} (-1)^j a_j(\theta, \theta_0) + (1 - \varepsilon_1) \cdot a_1(\theta, \theta_0) \right|^2 \cdot \text{PSD}_{2D}(\vec{\nu}) \quad (1.179)$$

$$\Phi_n(\theta, \varphi) = \frac{k^5}{k_-(q_0)} \left[|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2 \cdot \sum_{j=2}^{\infty} |a_j(\theta, \theta_0)|^2 + |1 - \varepsilon_1|^2 \cdot |a_1(\theta, \theta_0)|^2 \right] \cdot \text{PSD}_{2D}(\vec{\nu}) \quad (1.180)$$

для полностью коррелированных (1.179) и некоррелированных (1.180) шероховатостей разных границ раздела. Суммирование в (1.179) и (1.180) проводится по всем внутренним границам раздела, а дополнительное слагаемое описывает рассеяние от внешней поверхности многослойной структуры.

Согласно теореме Флоке (см., например, [132]) поле внутри периодической полубесконечной многослойной структуры может быть представлено в следующем общем виде

$$\psi(z, \theta) = e^{i\eta(\theta)z} \cdot u(z, \theta); \quad \text{Im}\eta(\theta) \geq 0 \quad (1.181)$$

где $u(z)$ - периодическая функция периода d .

Условие конструктивной интерференции волн, отраженных от разных границ раздела

$$\text{Re}[2\eta(\theta_0)d] = 0 \quad \text{или} \quad \pm 2\pi \quad (1.182)$$

есть не что иное как обычное брэгговское условие рентгеновского отражения от многослойной структуры.

В общем случае нахождение функций $u(z, \theta)$ и $\eta(\theta)$ для произвольного θ и комплексной функции $\varepsilon(z)$ представляет собой сложную математическую проблему. Однако в рассматриваемом в диссертации случае многослойной структуры с резкими границами раздела достаточно знать, в соответствии с (1.179), (1.180) и (1.181), значения периодической функции $u(z)$ только в двух точках $z = 0$ и $z = \Gamma d$, где Γ - толщинный фактор. Кроме того, будем считать известным коэффициент отражения от идеально гладкой структуры, который может быть рассчитан с помощью того или иного стандартного метода. Тогда функции $u(0, \theta)$, $u(\Gamma d, \theta)$ и $\eta(\theta)$ находятся без труда. В самом деле, зная амплитудный коэффициент отражения $r(\theta)$, представив поле волны внутри каждого слоя постоянной плотности как суперпозицию плоских волн, распространяющихся в противоположных направлениях, и учитывая непрерывность поля и его производной на границах раздела, находим:

$$u(0, \theta) = \psi(0, \theta) = 1 + r(\theta) \quad (1.183)$$

$$u(\Gamma d, \theta) = \psi(\Gamma d, \theta) e^{-i\eta(\theta)\Gamma d} = \left[(1 + r) \cos \phi_1 + i \frac{k \sin \theta}{\kappa_1} (1 - r) \sin \phi_1 \right] e^{-i\eta(\theta)\Gamma d} \quad (1.184)$$

$$\begin{aligned} \exp[i\eta(\theta)d] &= \frac{\psi(d, \theta)}{u(0, \theta)} = \frac{1}{t_{21}} \left[\cos(\phi_1 + \phi_2) + r_{21} \cos(\phi_1 - \phi_2) \right. \\ &\quad \left. + i \frac{k \sin \theta}{\kappa_1} \frac{1 - r}{1 + r} \left(\sin(\phi_1 + \phi_2) + r_{12} \sin(\phi_1 - \phi_2) \right) \right] \end{aligned} \quad (1.185)$$

где

$$r_{21}(\theta) = \frac{\kappa_2(\theta) - \kappa_1(\theta)}{\kappa_2(\theta) + \kappa_1(\theta)}; \quad t_{21}(\theta) = \frac{2\kappa_2(\theta)}{\kappa_2(\theta) + \kappa_1(\theta)}$$

$$\kappa_j(\theta) = k\sqrt{\varepsilon_j - \cos^2\theta}; \quad \phi_1(\theta) = \kappa_1(\theta)\Gamma d; \quad \phi_2(\theta) = \kappa_2(\theta)(1 - \Gamma)d$$

Зависимость параметров $\text{Re}\eta d$ и $\text{Im}\eta d$ от угла скольжения θ показана на рис.1.18b,c для полубесконечного W/B₄C многослойного зеркала (период $d = 5$ нм, толщинный фактор $\Gamma = 0.3$), отражающего ЖР излучение с длиной волны $\lambda = 0.154$ нм. Коэффициент отражения зеркала показан на рис.1.18a. Параметр $\text{Re}\eta d$ вблизи второго брэгговского пика представлен в ббльшем масштабе на рис.1.19. Как видно из рисунков, затухание рентгеновской волны в глубь структуры резко увеличивается в условиях брэгговского отражения и внутри области ПВО. Параметр $\text{Re}\eta d$ почти постоянен и равен примерно $\pm\pi$ в нечетных брэгговских пиках и близок к нулю в четных пиках и области ПВО. Слабое изменение параметра $\text{Re}\eta d$ внутри брэгговских пиков обусловлено поглощением излучения в веществе многослойного зеркала.

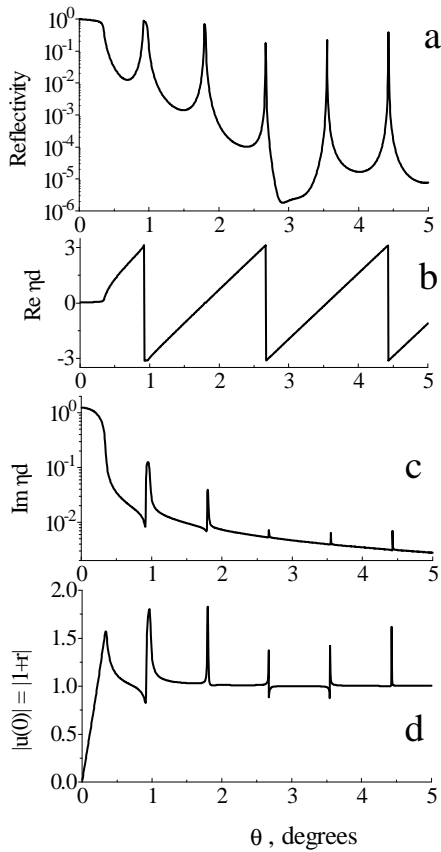


Рис. 1.18. Зависимость от угла скольжения θ (a) коэффициента отражения полубесконечного W/B₄C многослойного зеркала ($d = 5$ нм, $\Gamma = 0.3$, $\lambda = 0.154$ нм), (b) параметра $\text{Re}\eta d$, характеризующего разность фаз волн, отраженных от двух границ раздела, отстоящих на расстоянии периода друг от друга, (c) параметра $\text{Im}\eta d$, описывающего затухание волны в глубь структуры и (d) амплитуды поля волны на внешней поверхности многослойного зеркала. Параметр $\text{Re}\eta d$ показан также на рис.1.19 в большем масштабе.

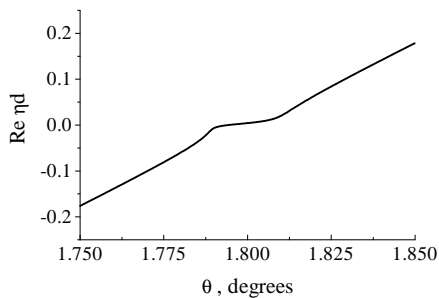


Рис. 1.19. Параметр $\text{Re}\eta d$ поблизости от второго брэгговского пика для того же многослойного зеркала, что и на рис.1.18.

Формулы (1.183)-(1.185) позволяют рассчитать параметр η и поле волны в точках $z = 0$ и $z = \Gamma d$. Тогда суммы в (1.179)-(1.180) сводятся к геометрическим прогрессиям и вычисляются в явном виде. Окончательное выражение для индикатрисы рентгеновского рассеяния имеет вид

$$\Phi_c(\theta, \varphi) = \frac{k^4}{4 \sin \theta_0} \text{PSD}_{2D}(\vec{\nu}) \cdot \left| \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \left[w(0)e^{i\gamma} - w(\Gamma d)e^{i\gamma\Gamma} \right]}{1 - e^{i\gamma}} + (\varepsilon_1 - 1)w(0) \right|^2 \quad (1.186)$$

$$\Phi_n(\theta, \varphi) = \frac{k^4}{4 \sin \theta_0} \text{PSD}_{2D}(\vec{\nu}) \quad (1.187)$$

$$\times \left\{ \frac{|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2 \left[|w(0)|^2 e^{-2Im\gamma} + |w(\Gamma d)|^2 e^{-2Im\gamma\Gamma} \right]}{1 - e^{-2Im\gamma}} + |\varepsilon_1 - 1|^2 |w(0)|^2 \right\}$$

$$w(z) \equiv w(z, \theta, \theta_0) \equiv u(z, \theta) \cdot u(z, \theta_0); \quad \gamma \equiv \gamma(\theta, \theta_0) \equiv \eta(\theta)d + \eta(\theta_0)d$$

для полностью коррелированных шероховатостей разных границ раздела (1.186) и для некоррелированных межслоевых шероховатостей с одной и той же PSD-функцией (1.187).

В выражениях (1.186)-(1.187) члены, содержащие разность $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$, описывают рассеяние от внутренних границ раздела, в то время как члены, содержащие разность $\varepsilon_1 - 1$, описывают рассеяние от внешней поверхности зеркала. Вклад в рассеяние от одиночной (внешней) поверхности мал по сравнению с суммарным рассеянием от всей структуры, если рентгеновский пучок падает на многослойное зеркало вне области ПВО, и, как правило, несущественен при анализе данных эксперимента. Если в (1.186)-(1.187) заменить $\varepsilon_1 - 1$ на $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$, т.е. пренебречь различием в скачке диэлектрической проницаемости на внешней поверхности зеркала и на внутренних границах раздела, то получим компактные выражения, очень хорошо подходящие для анализа физических эффектов, наблюдаемых в рентгеновском рассеянии от многослойных структур:

$$\Phi_c(\theta, \varphi) \simeq \frac{k^4 |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2}{4 \sin \theta_0} \cdot \left| \frac{w(0) - w(\Gamma d)e^{i\gamma\Gamma}}{1 - e^{i\gamma}} \right|^2 \cdot \text{PSD}_{2D}(\vec{\nu}) \quad (1.188)$$

$$\Phi_n(\theta, \varphi) \simeq \frac{k^4 |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2}{4 \sin \theta_0} \cdot \frac{|w(0)|^2 + |w(\Gamma d)|^2 e^{-2Im\gamma\Gamma}}{1 - e^{-2Im\gamma}} \cdot \text{PSD}_{2D}(\vec{\nu}) \quad (1.189)$$

Индикатрисы рассеяния (1.188)-(1.189) полностью определяются несколькими параметрами, имеющими ясный физический смысл, а именно: амплитудой поля волны на двух верхних границах раздела, коэффициентом экстинкции рентгеновской волны, а также сдвигом фазы волн, рассеянных разными границами раздела. Используя (1.183)-(1.185), можно выразить индикатрисы рассеяния через значения амплитуд поля на верхних трех границах раздела:

$$\Phi_c(\theta, \varphi) \simeq \frac{k^4 |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2}{4 \sin \theta_0} |\psi(0, \theta_0)\psi(0, \theta)|^2 \cdot \text{PSD}_{2D}(\vec{\nu})$$

$$\times \left| \frac{\psi(0, \theta_0)\psi(0, \theta) - \psi(\Gamma d, \theta_0)\psi(\Gamma d, \theta)}{\psi(0, \theta_0)\psi(0, \theta) - \psi(d, \theta_0)\psi(d, \theta)} \right|^2 \quad (1.190)$$

$$\begin{aligned} \Phi_n(\theta, \varphi) &\simeq \frac{k^4 |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2}{4 \sin \theta_0} |\psi(0, \theta_0)\psi(0, \theta)|^2 \cdot \text{PSD}_{2D}(\vec{v}) \\ &\times \frac{|\psi(0, \theta_0)\psi(0, \theta)|^2 + |\psi(\Gamma d, \theta_0)\psi(\Gamma d, \theta)|^2}{|\psi(0, \theta_0)\psi(0, \theta)|^2 - |\psi(d, \theta_0)\psi(d, \theta)|^2} \end{aligned} \quad (1.191)$$

Основная особенность выражения (1.188) по сравнению с (1.189) – наличие знаменателя $|1 - \exp(i\gamma)|^2$, приводящего к резонансной зависимости интенсивности рассеяния от угла рассеяния θ при фиксированном θ_0 . Действительно, поскольку $\text{Im}\eta d$ мало (вне области ПВО), то интенсивность рассеяния резко возрастает в направлении углов θ , подчиняющихся условиям

$$\text{Re}\gamma(\theta, \theta_0) \equiv \text{Re}\eta(\theta_0)d + \text{Re}\eta(\theta)d = 0 \quad \text{или} \quad \pm 2\pi \quad (1.192)$$

Уравнение (1.192) представляет собой условие конструктивной интерференции волн, рассеянных от разных границ раздела, и является обобщением брэгговского условия отражения (1.182).

Выражения (1.188), (1.189) и (1.192), а также рис.1.20 показывают, что индикатриса рассеяния от многослойной структуры с коррелированными шероховатостями (сплошные кривые на рис.1.20) состоит из последовательности четко различимых пиков (квази-брэгговских пиков), которые отсутствуют для структуры с некоррелированными шероховатостями (пунктирные кривые). Интенсивность рассеяния в квази-брэгговских пиках примерно в $1/\text{Im}\gamma \gg 1$ раз больше, а между квази-брэгговскими пиками в $1/\text{Im}\gamma$ раз меньше по сравнению со случаем структуры с некоррелированными шероховатостями. Малая интенсивность рассеяния между пиками связана с деструктивной интерференцией волн, рассеянных от коррелированных шероховатостей. Действительно, в противоположность условию (1.192), параметр $\text{Re}\gamma$ принимает значение $\pm\pi$ как раз между квази-брэгговскими пиками и, следовательно, знаменатель в (1.188) порядка единицы в этом случае.

Если рентгеновский пучок падает на зеркало в пределах нечетного брэгговского пика (т.е. $\text{Re}\eta(\theta_0)d = \pm\pi$ в выражении (1.192)), то на индикатрисе рассеяния возникают только нечетные квази-брэгговские пики ($\text{Re}\eta(\theta)d = \pm\pi$). Напротив, при падении пучка в четном брэгговском пике ($\text{Re}\eta(\theta_0)d = 0$) возникают только четные же квази-брэгговские пики ($\text{Re}\eta(\theta)d = 0$). Кроме того, в этом случае наблюдается хорошо выраженный пик Ионеды поблизости от критического угла ПВО.

Отмеченные особенности рентгеновского рассеяния являются следствием обобщенного условия Брэгга (1.192) и могут быть объяснены с использованием традиционных обозначе-

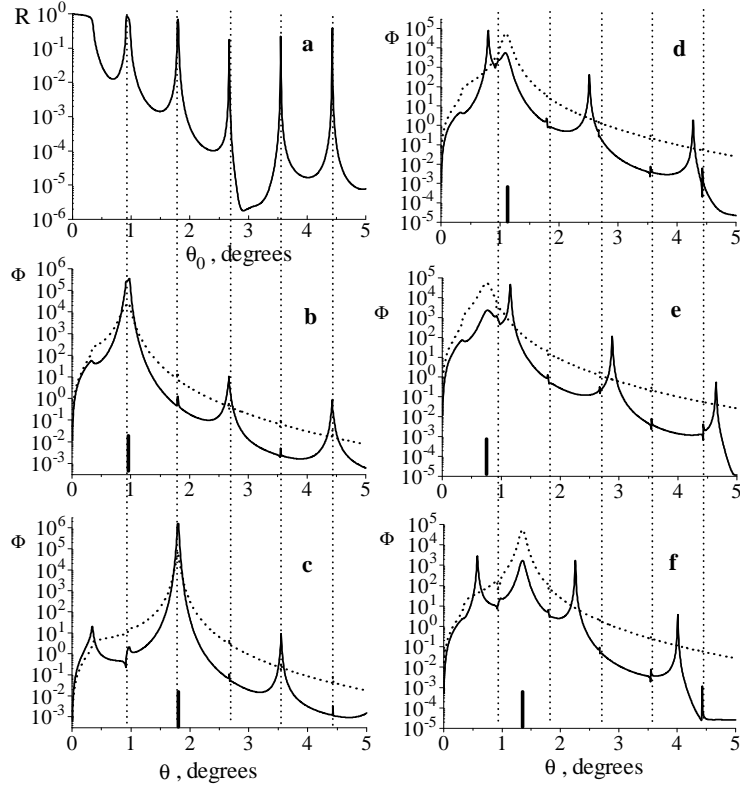


Рис. 1.20. Коэффициент отражения (на длине волны $\lambda = 0.154$ нм) от полубесконечного многослойного W/B_4C зеркала ($d = 5$ нм, $\Gamma = 0.3$) в зависимости от угла скольжения θ_0 зондирующего пучка (a) и индикатрисы рассеяния в плоскости падения ($\varphi = 0$) в зависимости от угла рассеяния θ (b-f). Расчеты проведены для полностью коррелированных шероховатостей разных границ раздела (сплошные кривые) и для некоррелированных шероховатостей (пунктирные кривые). Вертикальные точечные линии показывают угловое положение брэгговских пиков. Короткие вертикальные полоски показывают угловое положение зеркально отраженного пучка. Угол скольжения зондирующего пучка был равен 0.92° (b); 1.8° (c); 1.1° (d); 0.75° (e) и 1.35° (f). PSD-функция, использованная при расчетах, описывалась выражением (1.129) при $\sigma = 0.2$ нм, $\xi = 1$ мкм и $\alpha = 1/2$.

ний. Действительно, при падении пучка на зеркало под углом θ_0 условие конструктивной интерференции волн, рассеянных под углом θ от границ раздела, расположенных на расстоянии d , записывается в виде (разность хода волн кратна длине волны) $d(\sin \theta_0 + \sin \theta) = j\lambda$. Пусть пучок падает на зеркало в условиях брэгговского отражения n -го порядка, и мы рассматриваем волны, рассеянные в пределах m -го брэгговского пика, т.е. $2d \sin \theta_0 = n\lambda$ и $2d \sin \theta = m\lambda$. Тогда немедленно получаем, что $n/2 + m/2 = j$, где n , m и j - целые числа. Ясно, что последнее условие выполняется, если только n и m четные или нечетные числа одновременно.

Небольшие особенности, наблюдаемые на индикатрисах рассеяния между квази-брэгговскими пиками, связаны с интерференционными эффектами для невозмущенного поля,

приводящими к особенностям амплитуды поля на границах раздела (см. рис.1.18d), а не с интерференцией рассеянных волн.

Если угол скольжения зондирующего пучка несколько больше (или меньше), чем угол Брэгга $\theta_{1B} \simeq 0, 92^\circ$ (рис.1.20d или 1.20e), то квази-брэгговские пики тоже слегка сдвигаются в сторону меньших (больших) углов по отношению к углам Брэгга. Если же угол скольжения падающего пучка лежит между брэгговскими пиками, то и максимумы индикатрисы рассеяния лежат между ними (рис.1.20f). В любом случае, положение квази-брэгговских пиков соответствует условию конструктивной интерференции рассеянных волн (1.192) и может быть найдено из рис.1.18b. Пик в направлении зеркального отражения ($\theta = \theta_0$) на рис.1.20d-f обусловлен тем, что PSD-функция имеет максимум при нулевой пространственной частоте.

Рассмотрим теперь рассеяние рентгеновского излучения от многослойной структуры с частично коррелированными шероховатостями, предполагая справедливость линейного уравнения роста пленок, так что PSD-функция шероховатостей верхней поверхности пленки толщиной h связана с PSD-функцией подложки следующим соотношением

$$\text{PSD}_f(\nu, h) = \beta(\nu, h)\text{PSD}_s(\nu) + \text{PSD}_{int}(\nu, h) \quad (1.193)$$

где фактор репликации шероховатостей β и PSD-функция собственных шероховатостей пленки PSD_{int} выражаются через функцию релаксации поверхности $b(\nu)$ и объем Ω , приходящийся на одну частицу материала пленки [137]

$$\beta_j(\nu, h) = e^{-b(\nu)h}; \quad \text{PSD}_{int}(\nu, h) = \frac{\Omega}{(2\pi)^2} \cdot \frac{1 - e^{-2b(\nu)h}}{2b(\nu)}$$

В свою очередь, функция релаксации b представляется в виде полинома по степеням пространственной частоты, каждый член которого связан с тем или иным механизмом релаксации поверхности (поверхностная и объемная диффузия частиц, испарение и распыление и т.д.) [64, 130, 137].

Многослойное зеркало состоит из слоев двух различных веществ и рост структуры определяется двумя функциям релаксации $b_j(\nu)$ ($j = 1, 2$). Применяя последовательно соотношение (1.193) к растущей многослойной структуре, можно найти явные выражения для всех PSD-функций, определяющих ее статистические и рассеивающие свойства:

$$\begin{aligned} \text{PSD}_{2D}^{(2i+1, 2j+1)} &= (\beta_1\beta_2)^{2N-i-j} \left[\text{PSD}_s - \frac{\text{PSD}_{int}^{(1)} + \beta_1^2\text{PSD}_{int}^{(2)}}{1 - (\beta_1\beta_2)^2} \right] \\ &+ \frac{(\beta_1\beta_2)^{|i-j|}}{1 - (\beta_1\beta_2)^2} \left[\text{PSD}_{int}^{(1)} + \beta_1^2\text{PSD}_{int}^{(2)} \right]; \quad i, j = 0, \dots, N \end{aligned} \quad (1.194)$$

$$\begin{aligned} \text{PSD}_{2D}^{(2i,2j)} &= \beta_2^2(\beta_1\beta_2)^{2N-i-j} \left[\text{PSD}_s - \frac{\text{PSD}_{int}^{(1)} + \beta_1^2 \text{PSD}_{int}^{(2)}}{1 - (\beta_1\beta_2)^2} \right] \\ &+ \frac{(\beta_1\beta_2)^{|i-j|}}{1 - (\beta_1\beta_2)^2} \left[\beta_2^2 \text{PSD}_{int}^{(1)} + \text{PSD}_{int}^{(2)} \right]; \quad i, j = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (1.195)$$

$$\begin{aligned} \text{PSD}_{2D}^{(2i+1,2j)} &= \beta_2(\beta_1\beta_2)^{2N-i-j} \left[\text{PSD}_s - \frac{\text{PSD}_{int}^{(1)} + \beta_1^2 \text{PSD}_{int}^{(2)}}{1 - (\beta_1\beta_2)^2} \right] \\ &+ \frac{\beta_2(\beta_1\beta_2)^{|i-j|} \text{PSD}_{int}^{(1)} + \beta_1(\beta_1\beta_2)^{|i-j+1|} \text{PSD}_{int}^{(2)}}{1 - (\beta_1\beta_2)^2}; \quad i = 0, \dots, N \quad j = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (1.196)$$

При вычислении PSD-функций мы учли конечное число слоев структуры N , которое, тем не менее, предполагается достаточно большим, так что представление (1.181) для поля волны внутри многослойного зеркала остается справедливым. Подставляя (1.194)-(1.196) и (1.181) в общее выражение (1.178) для индикатрисы рассеяния и выполнив суммирование, получим следующую формулу, описывающую рассеяние рентгеновского излучения от многослойной структуры для произвольной (частичной) корреляции межслоевых шероховатостей:

$$\begin{aligned} \Phi(\theta, \varphi) &= \frac{k^4 |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2}{4 \sin \theta_0} \cdot \frac{1}{|\beta_1\beta_2 - e^{i\gamma}|^2} \\ &\times \left\{ F \cdot \left| w(0) - e^{i\gamma\Gamma} w(\Gamma d) \right|^2 \cdot \left[\text{PSD}_s - \frac{\text{PSD}_{int}^{(1)} + \beta_1^2 \text{PSD}_{int}^{(2)}}{1 - (\beta_1\beta_2)^2} \right] \right. \\ &\left. + \frac{G}{1 - (\beta_1\beta_2)^2} \left[|w(0) - \beta_2 e^{i\gamma\Gamma} w(\Gamma d)|^2 \text{PSD}_{int}^{(1)} + |\beta_1 w(0) - e^{i\gamma\Gamma} w(\Gamma d)|^2 \text{PSD}_{int}^{(2)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.197)$$

где

$$F = \left| (\beta_1\beta_2)^N - e^{i\gamma N} \right|^2 \quad (1.198)$$

$$G = 2\beta_1\beta_2 \cdot \text{Re} \left[\left(\beta_1\beta_2 - e^{i\gamma} \right) \frac{1 - (\beta_1\beta_2)^N e^{i\gamma N}}{1 - \beta_1\beta_2 e^{i\gamma}} - \frac{(\beta_1\beta_2)^2 - e^{-2\text{Im}\gamma}}{1 - e^{-2\text{Im}\gamma}} \right] \quad (1.199)$$

При выводе (1.197) мы положили скачок диэлектрической проницаемости на внешней границе с вакуумом равным скачку на внутренних границах раздела, т.е. (1.197) справедливо, если пучок падает на зеркало вне области ПВО. Кроме того, мы пренебрегли разницей в числе четных и нечетных границ раздела. Экспоненциально малые члены $\exp(i\gamma N)$ сохранены в выражениях для F и G с тем, чтобы можно было раскрыть неопределенность, возникающую при $\beta_1\beta_2 = \exp(\pm \text{Im}\gamma)$ и $\text{Re}\gamma = 0$ или 2π .

Как и в случае полностью коррелированных или некоррелированных шероховатостей, индикатриса рассеяния (1.197) может быть выражена через значения поля волны на трех верхних границах раздела.

Проанализируем теперь случаи рассеяния на малые и большие углы. В первом случае рассеяние обусловлено низкочастотной частью спектра шероховатостей, где функции релаксации b_j очень малы, т.е. факторы репликации близки к единице $\beta_{1,2} \simeq 1$, а межслоевые шероховатости почти полностью коррелированы. Предполагая, что $b_j h_j \ll 1/N \ll \text{Im}\gamma \ll 1$, находим

$$\Phi(\theta, \varphi) \simeq \frac{k^4 |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2}{4 \sin \theta_0} \left| \frac{w(0) - w(\Gamma d) e^{i\gamma \Gamma}}{1 - e^{i\gamma}} \right|^2 \left[\text{PSD}_{2D}(\nu) + N(\Omega_1 h_1 + \Omega_2 h_2) \right] \quad (1.200)$$

Учитывая, что при малых пространственных частотах $\nu \rightarrow 0$ значение функции $\text{PSD}_{2D} \rightarrow \sigma^2 \xi^2$ обычно на несколько порядков величины больше, чем Ωh , заключаем, что рассеяние на малые углы от зеркала с частично коррелированными шероховатостями практически такое же, как и от структуры с полной корреляцией межслоевых шероховатостей. Следовательно, измерения индикатрисы рассеяния вблизи зеркально отраженного пучка не дают информации о ростовых параметрах многослойной структуры.

В противоположном предельном случае рассеяния на большие углы интенсивность рассеяния определяется высокочастотной частью спектра шероховатостей. В этом случае $b_j h_j \gg 1$, т.е. факторы репликации $\beta_{1,2} \rightarrow 0$ и межслоевые шероховатости не коррелируют. Учитывая, что $\text{Im}\gamma \ll 1$, получаем очень простую формулу

$$\Phi(\theta, \varphi) \simeq \frac{k^4 |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^2}{4 \sin \theta_0} \cdot \frac{1}{\text{Im}\gamma} \cdot \left[|w(0)|^2 \text{PSD}_{int}^{(1)} + |w(\Gamma d)|^2 \text{PSD}_{int}^{(2)} \right] \quad (1.201)$$

где $\text{PSD}_{int}^{(j)} \approx \Omega_j / [8\pi^2 b_j(\nu)]$ в области высоких пространственных частот. Выражение (1.201) представляет собой простейшее линейное уравнение по отношению к функциям $\text{PSD}_{int}^{(j)}$ и позволяет найти функции релаксации $b_j(\nu)$ из набора индикатрис рассеяния, измеренных при различных углах падения зондирующего пучка.

Рисунок 1.21 иллюстрирует переход от выражения (1.200) к (1.201) с увеличением угла рассеяния. Индикатриса рассеяния, показанная кривой 1, рассчитана в предположении, что функция релаксации b одна и та же для обоих материалов и равна $b_1(\nu) = b_2(\nu) = c\nu^4$, где $c = 20 \text{ нм}^3$. Для сравнения показана индикатриса рассеяния для полностью коррелированных межслоевых шероховатостей (кривая 2). Как видно из рисунка, индикатрисы рассеяния для частично и полностью коррелированных шероховатостей практически совпадают при малых углах рассеяния. При увеличении угла θ различие между кривыми становится заметным. Тем не менее, квази-брэгговские пики видны на индикатрисе рассеяния 1 вплоть до угла $\theta \sim 7^\circ$, что свидетельствует о наличии корреляции межслоевых шероховатостей при не слишком больших пространственных частотах. Квази-брэгговские пики полностью исчезают на кривой 1 при $\theta > 7^\circ$, что свидетельствует о полной некоррелированности шероховатостей

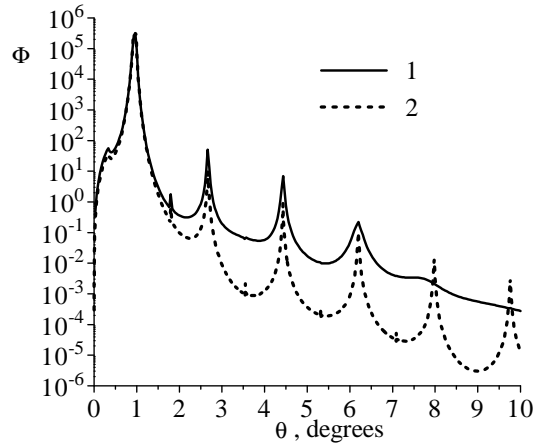


Рис. 1.21. Индикатриса рассеяния в плоскости падения ($\lambda = 0.154$ нм) для частично коррелированных (1) и полностью коррелированных (2) шероховатостей. Расчеты были проведены для той же самой W/V₄C структуры, что и на рис.1.20 ($N = 100$) в предположении, что функция релаксации одна и та же для пленок W и V₄C и равна $b_1(\nu) = b_2(\nu) = c\nu^4$, где $c = 20$ нм³. Угол скольжения зондирующего пучка $\theta_0 = \theta_{B1} \simeq 0.92^\circ$.

в области высоких пространственных частот. Индикатриса рассеяния описывается при этом выражением (1.201).

Пример измеренных индикатрис рассеяния от W/V₄C многослойных зеркал представлен на рис.1.22 (кружки) [A20]. Сплошные кривые – результат расчета в предположении полностью коррелированных межслоевых шероховатостей. PSD-функция исходной подложки была найдена экспериментально методом рентгеновского рассеяния. Рисунок наглядно демонстрирует, что, во-первых, теория возмущений может количественно описать индикатрису рассеяния от многослойной структуры и, во-вторых, действительно, межслоевые шероховатости исследованных структур хорошо коррелированы при не слишком высоких пространственных частотах.

1.3.7. Уравнение переноса лучевой интенсивности

Интересное направление развития современной рентгеновской оптики состоит в использовании эффекта шепчущей галереи, существо которого состоит в том, что пучок РИ, падающий по касательной на вогнутую поверхность, скользит вдоль нее за счет последовательных отражений [30, 31]. Зеркала с шепчущими модами могут, в частности, найти свое применение для управления пучками СИ [133], коллимации и концентрации излучения точечных источников [134, 135], а также для разделения каналов рентгеновских лазеров на свободных электронах [136].

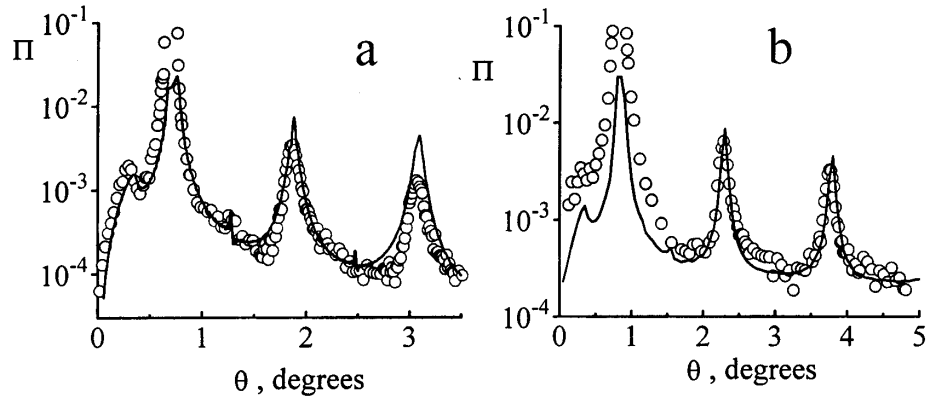


Рис. 1.22. Измеренные индикатрисы рассеяния (кружки) на длине волны $\lambda = 0.154$ нм от W/B_4C многослойных структур со следующими параметрами: (а) период $d = 7.2$ нм, число периодов $N = 20$, толщинный фактор $\Gamma = 0.43$ и (б) $d = 5.85$ нм, $N = 20$, $\Gamma = 0.44$. Угол скольжения падающего пучка соответствовал первому брэгговскому углу и равнялся 0.693° (а) или 0.828° (б). Сплошные кривые - результат расчета в предположении полностью коррелированных межслоевых шероховатостей. (Из [A20]).

При каждом отражении пучка, скользящего вдоль вогнутой поверхности, наряду с зеркальной компонентой возникает и рассеянная. Рассеянное излучение, в свою очередь, распространяется вдоль вогнутой поверхности и может испытать вторичное рассеяние и т.д. Поскольку при каждом отражении часть излучения рассеивается в глубь вещества и поглощается, то наличие поверхностных шероховатостей приводит к уменьшению эффективности поворота пучка. Кроме того, из-за конечной угловой ширины диаграммы рассеяния пучок, по мере своего распространения вдоль вогнутой поверхности, постепенно расширяется, то есть некоторая его часть за счет рассеяния на шероховатостях “перебрасывается” в область больших углов скольжения, где коэффициент отражения мал, и в конечном итоге, также поглощается в веществе зеркала. Тем самым, влияние поверхностных шероховатостей приводит, во-первых, к уменьшению эффективности передачи пучка и, во-вторых, к изменениям углового и пространственного распределения интенсивности выходящего излучения. Из-за большого числа отражений пучка, анализ влияния шероховатостей на эффективность передачи приобретает первостепенное значение.

Пусть коллимированный пучок падает на поверхность кругового цилиндра перпендикулярно к его образующей. Рассмотрим некоторую точку на поверхности с координатами (ψ, y) , где $\psi \in [0, \Psi]$ - текущий угол поворота пучка, а y - координата, отсчитываемая вдоль оси цилиндра (рис.1.3 на стр.31). Эта точка освещается множеством лучей, падающих на поверхность цилиндра под всевозможными углами (θ, φ) , где θ - угол скольжения, а φ -

азимутальный угол, отсчитываемый от плоскости XZ кругового сечения цилиндра. Мощность излучения, падающего на малую площадку $\delta S = r\delta\psi\delta y$ внутри малого телесного угла $\delta\Omega = \cos\theta\delta\theta\delta\varphi$ равна $\delta W_+ = b_+(\psi, y; \theta, \varphi) \sin\theta\delta\Omega\delta S$, где $b_+(\psi, y; \theta, \varphi)$ - яркость падающего излучения. Аналогично, мощность, излученная с площадки δS в пределах малого телесного угла $\delta\Omega$, равна $\delta W_- = b_-(\psi, y; \theta, \varphi) \sin\theta\delta\Omega\delta S$, где $b_-(\psi, y; \theta, \varphi)$ - яркость отраженного излучения. Учитывая, что отраженное излучение состоит из двух компонент - зеркальной и рассеянной - запишем следующее уравнение, определяющее связь между освещенностью и светимостью поверхности в точке (ψ, y) :

$$b_-(\psi, y; \theta, \varphi) = b_+(\psi, y; \theta, \varphi)R_{spec}(\theta) + \int \Phi(\theta' \rightarrow \theta; \varphi' \rightarrow \varphi)b_+(\psi, y; \theta', \varphi')\frac{\sin\theta'}{\sin\theta}d\Omega' \quad (1.202)$$

где R_{spec} - коэффициент зеркального отражения от шероховатой поверхности, а Φ - индикатриса рассеяния, описывающая угловое распределение мощности излучения, рассеянного на поверхностных шероховатостях.

Первый член в правой части уравнения (1.202) описывает уменьшение яркости зеркально отраженного пучка из-за поглощения излучения в веществе и рассеяния на шероховатостях, а второй (интегральный) член описывает вклад в яркость от излучения, падающего на поверхность под всевозможными углами (θ', φ') и рассеянного в данном направлении (θ, φ) .

Чтобы получить замкнутую систему, необходимо найти дополнительную связь между b_+ и b_- . Рассмотрим узкий пучок лучей, излученный с малой площадки δS с центром в точке (ψ, y) цилиндрической поверхности и распространяющийся в направлении (θ, φ) . Этот пучок освещает площадку $\delta S'$ с центром в точке (ψ', y') , связанной с точкой (ψ, y) следующими соотношениями

$$y' = y + \frac{2rtg\theta \sin\varphi}{tg^2\theta + \cos^2\varphi} \approx y + 2r\theta\varphi; \quad \psi' = \psi + \arcsin\left(\frac{2tg\theta \cos\varphi}{tg^2\theta + \cos^2\varphi}\right) \approx \psi + 2\theta \quad (1.203)$$

Поскольку поверхность цилиндрическая, то углы θ и φ одни и те же для обеих точек. Поэтому, учитывая, что яркость пучка в свободном пространстве постоянна, получаем

$$b_-(\psi, y; \theta, \varphi) = b_+(\psi', y'; \theta, \varphi) \approx b_+(\psi + 2\theta, y + 2r\theta\varphi; \theta, \varphi) \quad (1.204)$$

Введем теперь следующие функции

$$B_{\pm}(\psi, \theta) = \int b_{\pm}(\psi, y; \theta, \varphi) dyd\varphi$$

смысл которых вполне ясен, а именно: $B_+(\psi, \theta) \cdot r \sin\theta\delta\psi\delta\theta$ - это мощность излучения, падающего в интервале углов скольжения $\delta\theta$ на длинную узкую полосу, расположенную вдоль

поверхности цилиндра и имеющей угловой растров $\delta\psi$, а $B_-(\psi, \theta) \cdot r \sin \theta \delta\psi \delta\theta$ - мощность отраженного излучения. Переход от яркостей b_{\pm} к функциям B_{\pm} соответствует переходу от трехмерной задачи к плоской. Из (1.202) сразу же находим

$$B_-(\psi, \theta) = B_+(\psi, \theta)R_{spec}(\theta) + \int \Pi(\theta' \rightarrow \theta)B_+(\psi, \theta')\frac{\sin \theta'}{\sin \theta}d\theta' \quad (1.205)$$

где Π - индикатриса рассеяния, проинтегрированная по азимутальному углу φ . При выводе (1.205) учтено, что в случае изотропной поверхности двумерная индикатриса рассеяния Φ зависит только от разности азимутальных углов $\varphi - \varphi'$.

Далее необходимо перейти от (1.204) к соответствующему выражению для функций B_{\pm} , т.е. проинтегрировать обе части выражения (1.204) по $dyd\varphi$. Учтем, что углы θ и φ малы, и будем считать смещение луча вдоль образующей цилиндрической поверхности $|y - y'| \simeq 2r\theta\varphi$ малым по сравнению с ее длиной. Тогда, интегрируя, получаем соотношение, являющееся, как и (1.205), переходом к плоской задаче:

$$B_-(\psi, \theta) \simeq B_+(\psi + 2\theta, \theta) \approx B_+(\psi, \theta) + 2\theta\frac{\partial B_+}{\partial \psi}(\psi, \theta) \quad (1.206)$$

Введем далее функцию $I(\theta, \psi)$ такую, что $I\delta\theta$ соответствует суммарной мощности всех лучей, пересекающих сечение $\psi = const$ кругового цилиндра и падающих на его поверхность под углом скольжения θ . Полная мощность излучения в сечении $\psi = const$, очевидно, равна $W(\psi) = \int I(\theta, \psi)d\theta$.

Ясно, что вклад в $I(\theta, \psi)$ будут давать точки цилиндрической поверхности, угловая координата ψ' которых принадлежит интервалу $[\psi - 2\theta, \psi]$. Тогда

$$I(\theta, \psi) = r \int_{\psi-2\theta}^{\psi} B_-(\psi', \theta)d\psi' = r \int_{\psi}^{\psi+2\theta} B_+(\psi', \theta)d\psi' \quad (1.207)$$

$$\frac{\partial I}{\partial \psi}(\theta, \psi) = r[B_-(\psi, \theta) - B_+(\psi, \theta)] \quad (1.208)$$

где мы использовали соотношение (1.206) и то обстоятельство, что лучи падают на круговое сечение цилиндра практически по нормали.

Считая, что светимость поверхности почти не меняется вдоль дуги малого углового раствора 2θ , а угол скольжения θ мал, из (1.205)-(1.208) находим окончательное уравнение переноса лучевой интенсивности:

$$2\theta\frac{\partial I}{\partial \psi}(\theta, \psi) = -\left[1 - R_{spec}(\theta)\right]I(\theta, \psi) + \int \Pi(\theta' \rightarrow \theta)I(\theta', \psi)d\theta' \quad (1.209)$$

Первое слагаемое в правой части уравнения (1.209) описывает уменьшение интенсивности из-за частичного поглощения излучения в веществе и рассеяния на шероховатостях при

каждом отражении пучка. Второе слагаемое описывает диффузию лучевой интенсивности, т.е. уширение пучка из-за многократных актов рассеяния по мере его распространения вдоль шероховатой вогнутой поверхности.

К уравнению (1.209) следует добавить начальное условие, т.е. задать распределение мощности по углу скольжения во входном сечении цилиндрической поверхности $\psi = 0$. Если мы предполагаем, что на вогнутую поверхность по касательной падает пучок ширины d с постоянной по сечению плотностью потока q_0 , то

$$I(\theta, 0) = \begin{cases} q_0 r \theta, & \text{если } \theta \leq \theta_{max} \equiv \sqrt{2d/r} \\ 0, & \text{если } \theta > \theta_{max} \end{cases} \quad (1.210)$$

а мощность падающего пучка $W_0 = \int I(\theta, 0) d\theta = q_0 r \theta_{max}^2 / 2 = q_0 d$.

Эффективность передачи пучка вогнутой поверхностью равна

$$TE(\Psi) \equiv \frac{W}{W_0} = \frac{1}{q_0 d} \int_0^{\pi/2} I(\theta, \Psi) d\theta \quad (1.211)$$

Отметим, что уравнение (1.209) для лучевой интенсивности выглядит более предпочтительным, чем уравнение (1.205)-(1.206) для светимости поверхности, как раз из-за простоты формулировки начального условия.

Выражения (1.209)-(1.211) позволяют рассчитать эффективность передачи пучка шероховатой вогнутой поверхностью. Рассмотрим сначала два предельных случая.

Если радиус корреляции шероховатостей мал, а именно $\xi \ll \lambda / (\pi \theta_c^2)$, то интегральным членом в уравнении (1.209) можно пренебречь, поскольку мелкомасштабные шероховатости рассеивают излучение на большие углы, превышающие критический угол ПВО. При последующих отражениях от вогнутой поверхности это излучение поглотится в веществе зеркала и не даст вклада в интенсивность выходящего пучка. В результате получаем, что в случае малых радиусов корреляции коэффициент транспортировки пучка определяется коэффициентом зеркального отражения:

$$I(\theta, \Psi) \simeq I(\theta, 0) \cdot \exp\left(-\Psi \frac{1 - R_{spec}(\theta)}{2\theta}\right); \quad \xi \ll \frac{\lambda}{\pi \theta_c^2} \quad (1.212)$$

В предельном случае нулевого радиуса корреляции $\xi \rightarrow 0$, коэффициент зеркального отражения описывается формулой Неве-Кроса (1.3). Тогда эффективность поворота скользящего луча ($\theta \rightarrow 0$) в наиболее важном для практики случае слабопоглощающего отражающего покрытия ($\gamma \ll \delta$) оказывается равной

$$R(\Psi) = [R_0(\Psi)]^{1+k^2\sigma^2\delta} \quad (1.213)$$

где $R_0(\Psi)$ - эффективность транспортировки для идеально гладкой поверхности. В результате получаем следующее условие на гладкость вогнутой поверхности, справедливое для исчезающе малого радиуса корреляции шероховатостей

$$\sigma < \frac{\lambda}{4\pi\theta_c} \cdot \left[\ln \frac{1}{R_0(\Psi)} \right]^{-1/2} ; \quad \xi \rightarrow 0 \quad (1.214)$$

В противоположном случае большого радиуса корреляции $\xi \gg \lambda/(\pi\theta_c^2)$ индикатриса рентгеновского рассеяния очень узкая, так что диффузией лучевой интенсивности по мере распространения пучка можно, в первом приближении, пренебречь. Формально это означает, что функцию $I(\theta')$, медленно меняющуюся по сравнению с индикатрисой рассеяния $\Pi(\theta')$, можно вынести из-под знака интеграла в (1.209). Тогда получим:

$$I(\theta, \Psi) \simeq I(\theta, 0) \cdot \exp \left(-\Psi \frac{1 - R_\Sigma(\theta)}{2\theta} \right) ; \quad \xi \gg \frac{\lambda}{\pi\theta_c^2} \quad (1.215)$$

$$R_\Sigma = R_{spec} + \text{TIS} ; \quad \text{TIS} = \int \Pi(\theta \rightarrow \theta') d\theta'$$

где TIS - коэффициент интегрального рассеяния, а R_Σ - интегральный коэффициент отражения, характеризующий полную мощность излучения, направленную шероховатой поверхностью обратно в вакуум.

При больших радиусах корреляции и независимо от угла скольжения падающего излучения (см. случаи 1 и 2 в табл.1.1) интегральный коэффициент отражения совпадает с френелевским $R_\Sigma(\theta) = R_F(\theta)$ с точностью до членов порядка θ^2 , по крайней мере. Поэтому шероховатости с большим радиусом корреляции вообще не влияют на эффективность транспортировки скользящего луча. Ясно, что этот вывод справедлив лишь в случае применимости теории возмущений для описания однократного отражения волны от шероховатой поверхности в области ПВО:

$$\sigma < \frac{\lambda}{4\pi\theta_c} ; \quad \xi \rightarrow \infty \quad (1.216)$$

Выражение $\lambda/(4\pi\theta_c)$, входящее в (1.214) и (1.216) есть не что иное как глубина проникновения поля волны в вещество при предельно малых углах скольжения падающего пучка $\theta \ll \theta_c$, равная 1.5-4.5 нм во всем рентгеновском диапазоне (глубина проникновения волны больше для легких материалов). Тем самым, требования к гладкости отражающей поверхности вогнутого зеркала оказываются не слишком жесткими, несмотря на большое число отражений: необходимо, чтобы высота шероховатостей не превышала единиц нанометров.

Причина слабого влияния шероховатостей на коэффициент транспортировки объясняется тем, что в случае большого радиуса корреляции шероховатостей рассеянное излучение не теряется, а само поворачивается вогнутой поверхностью и дает существенный вклад в

интенсивность выходящего пучка. В случае малого радиуса корреляции интенсивность рассеянного излучения крайне мала, а влияние шероховатостей на коэффициент отражения полностью эквивалентно влиянию плавного переходного слоя, образованного как результат усреднения шероховатостей. Если поглощение излучения в веществе мало ($\gamma \ll \delta$), то наличие плавного изменения диэлектрической проницаемости в приповерхностном слое мало сказывается на коэффициенте отражения пучка в области ПВО.

При численном решении уравнения лучевой интенсивности (1.209) для определенности будем рассматривать поворот пучка МР излучения с длиной волны $\lambda = 7$ нм вогнутым цилиндрическим зеркалом углового раствора $\Psi = 90^\circ$ с углеродным отражающим покрытием плотностью $\rho = 2.2$ г/см³. Будем предполагать, что угол скольжения крайнего луча в падающем пучке равен $\theta_{max} = 0.5\theta_c \simeq 4^\circ$, т.е. ширина падающего пучка $d = r\theta_{max}^2/2 \simeq 2.4 \cdot 10^{-3}r$, где r - радиус кривизны вогнутой поверхности. Будем считать, что плотность потока постоянна вдоль сечения первичного пучка, а PSD-функция поверхностных шероховатостей, необходимая для расчета значений $R_{spec}(\theta)$ и $\Pi(\theta)$, имеет вид (1.129) при значениях $\sigma = 1.5$ нм, $\alpha = 0.5$ и $\xi = 1$ мкм.

На рис.1.23 показано распределение лучевой интенсивности по углу скольжения θ на выходе поворотного зеркала. Кривая 1 - результат расчета для случая идеально гладкой поверхности. В соответствии с (1.211), площадь под кривой определяет эффективность передачи пучка равную 35.7% в отсутствие шероховатостей. Кривая 2 описывает угловое распределение лучевой интенсивности при учете рассеяния на шероховатостях.

Рисунок наглядно показывает, что по мере распространения пучка вдоль вогнутой поверхности часть излучения “перебрасывается” в область больших углов скольжения из-за рассеяния на шероховатостях (на распределении появляется “хвост” при углах $\theta > 0.5\theta_c$), причем та его часть, которая выходит из области ПВО, проходит в глубь вещества и не дает вклада в мощность повернутого пучка. Тем не менее, эффективность передачи пучка равна примерно 32.8%, т.е. близка к значению ТЕ для случая идеально гладкой вогнутой поверхности. Как отмечалось выше, дело состоит в том, что излучение, рассеянное на шероховатостях, дает существенный вклад в интенсивность выходящего пучка. Для иллюстрации кривые 3 и 4 на рис.1.23 показывают вклад от зеркально отраженной и рассеянной компонент, соответственно. Если бы рассеянное излучение терялось, то эффективность передачи составляла бы 23.9%.

Зависимость эффективности транспортировки от радиуса корреляции шероховатостей показана кривой 1 на рис.1.24. При уменьшении радиуса корреляции индикатриса рассеяния расширяется. Следовательно, все большая часть лучевой интенсивности “перебрасывается” в

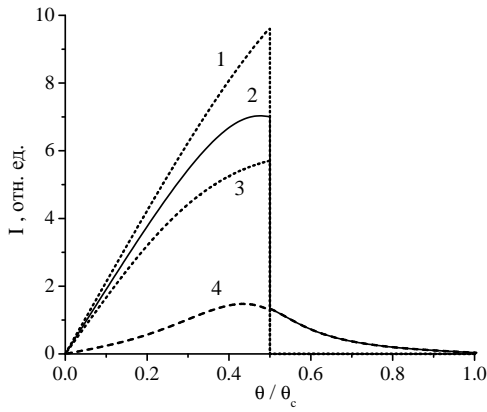


Рис. 1.23. Распределение лучевой интенсивности $I(\theta)$ при повороте МР пучка ($\lambda = 7$ нм) цилиндрической поверхностью углового раствора $\Psi = 90^\circ$ с углеродным отражающим покрытием: 1 - расчет для идеально гладкой поверхности; 2 - расчет для шероховатой поверхности в предположении, что PSD-функция поверхностных шероховатостей описывается выражением (1.129) при значениях $\sigma = 1.5$ нм и $\xi = 1$ мкм; 3 и 4 показывают вклад в интенсивность выходящего пучка от зеркальной и рассеянной компоненты, соответственно.

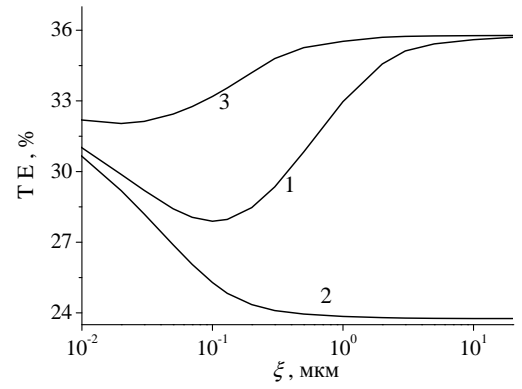


Рис. 1.24. Зависимость эффективности транспортировки МР пучка от радиуса корреляции шероховатостей вогнутой поверхности. Расчеты проведены на основе точного решения уравнения переноса лучевой интенсивности (1.209) (кривая 1) и с использованием приближенных выражений (1.212) и (1.215) (кривые 2 и 3, соответственно). Значения всех остальных параметров те же, что и на рис.1.23.

область углов скольжения, превышающих критический угол ПВО и, тем самым, эффективность поворота пучка уменьшается. Наименьшее значение эффективности транспортировки достигается при значении $\xi \sim \lambda/(\pi\theta_c^2) \sim 0.1$ мкм. При дальнейшем уменьшении радиуса корреляции эффективность транспортировки начинает возрастать, поскольку интенсивность рассеянного излучения стремится к нулю при $\xi \rightarrow 0$, а коэффициент зеркального отражения близок к френелевскому в случае падения рентгеновского пучка в условиях ПВО на слабопоглощающее отражающее покрытие зеркала. Для сравнения на рис.1.24 показаны значения ТЕ, рассчитанные для двух предельных случаев (1.212) и (1.215) (кривые 2 и 3, соответственно). Как и ожидалось, точная кривая 1 на рис. 3 лежит между кривыми 2 и 3, поскольку при расчете кривой 2 предполагалось, что все рассеянное излучение теряется, а при расчете кривой 3, наоборот, предполагалось, что все рассеянное излучение поворачивается вогнутой поверхностью. При малых радиусах корреляции кривая 1 приближается к кривой 2, а при больших ξ - совпадает с кривой 3.

Разработанный в этом разделе подход может быть обобщен и для описания распространения рентгеновского излучения в планарных и цилиндрических, плоских и изо-

гнутых рентгеновских волноводах и поликапиллярных системах с шероховатыми стенками [29, 138, 139].

1.4. Рентгеновские исследования эволюции шероховатостей растущих и эродирующих поверхностей

1.4.1. Экспериментальное оборудование канала BM5 синхротрона ESRF для in-situ исследований эволюции шероховатостей

Все описанные ниже экспериментальные исследования эволюции шероховатостей, основанные на in-situ измерениях индикатрисы рассеяния, были проведены на канале BM5 синхротрона ESRF (Гренобль, Франция), который был разработан и создан E. Ziegler при участии L. Reverini. Устройство канала, подробно описанное в [A37, A39-A42] и схематично показанное на рис.1.25, подразделяется на две части: приготовление образцов и проведение измерений отражения и рассеяния. Источником рентгеновского пучка служит поворотный магнит. В схеме используется двойной кристаллический монохроматор Si (111), обеспечивающий спектральное разрешение $\Delta E/E = 10^{-4}$ на рабочей длине волны $E = 17.5$ кэВ ($\lambda = 0.071$ нм). Расходимость излучения в вертикальной плоскости составляет $3 \cdot 10^{-6}$ радиан. Коллимирующая система формирует пучок высотой 20-200 мкм (в зависимости от размеров исследуемого образца и угла скольжения зондирующего пучка) и, как правило, шириной в несколько миллиметров для увеличения потока излучения, падающего на образец. Тем самым, в наших экспериментах, описанных ниже, измерялась индикатриса рассеяния, проинтегрированная по азимутальному углу. Вакуумная камера, в которой располагался образец, оснащена магнетронным источником для напыления различных материалов и ионной пушкой для их травления. Пушка может быть размещена под различным углом к поверхности образца (угол падения ионов - от 0 до 80°). Входное и выходное окно вакуумной камеры закрыты практически бесструктурной полиамидной пленкой толщиной 150 мкм. Внутри камеры расположен держатель образца и небольшой вакуумный гониометр, обеспечивающий необходимые перемещения (смещение по вертикали и наклон по двум углам с точностью лучше 3 угловых секунд) для юстировки образца.

Детектирующая система состоит из двух детекторов. Первый из них - ионизационная камера, работающая как пропускающий детектор и измеряющая интегральную интенсивность отраженного пучка. Второй из детекторов - двумерная CCD камера (1024×256 пикселей размером 19 мкм), регистрирующая угловое распределение рассеянного излучения. Перед

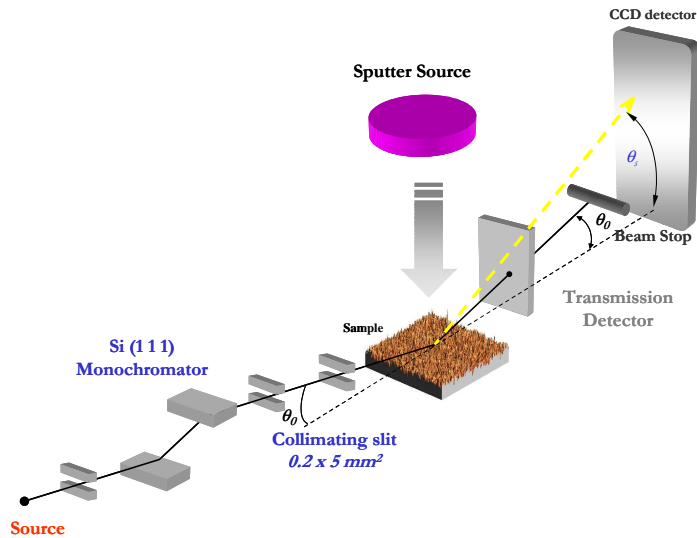


Рис. 1.25. Схема канала BM5 синхротрона ESRF.

CCD детектором расположена узкая заслонка (beamstop), блокирующая попадание зеркально отраженного пучка высокой интенсивности на детектор. Обычно расстояние от образца до CCD детектора составляло 1 м. Технологические параметры магнетронного источника и ионной пушки выбирались так, что типичные скорости роста/травления составляли 5-15 пм/сек. Типичные времена записи индикатрисы рассеяния составляли 0.1-20 сек, что соответствует росту/эрозии поверхности не более чем на 1/5-1/2 долю атомного/молекулярного монослоя.

1.4.2. Исследования корреляции шероховатостей пленки и подложки

Измерив индикатрису рассеяния от тонкой пленки при разных углах скольжения зондирующего пучка θ_0 и используя (1.169), получим систему линейных алгебраических уравнений для определения неизвестных PSD-функций для каждой пространственной частоты p из измеряемого интервала частот без использования каких-либо моделей роста пленки и корреляционных функций шероховатостей. Однако система линейных уравнений представляет собой классический пример плохо обусловленной задачи, когда даже очень малая ошибка в измеренной индикатрисе рассеяния может привести к очень большим ошибкам в найденных PSD-функциях [140]. Более детальное обсуждение неустойчивости задачи и прямой подход к ее решению, основанный на использовании стабилизирующего функционала, описан ниже в разделе 2.4. В этом разделе мы рассмотрим подходы, основанные на физическом анализе проблемы. В качестве иллюстрации будем анализировать рост пленок вольфрама на суперполированных кремниевых подложках, причем будем считать, что напыление пленки не изменяет шероховатость подложки. Ниже в разделе 2.4 будет показано, что это предположение

соответствует реальности.

В первом эксперименте [A32] было проведено два последовательных напыления пленок вольфрама с in-situ измерениями индикатрисы рассеяния от растущих пленок. В первом из них угол скольжения зондирующего пучка составлял $\theta_0 = 0.125^\circ$, что примерно в два раза меньше критического угла ПВО на рабочей длине волны ($\lambda = 0.071$ нм), а во втором $\theta_0 = 0.5^\circ$, т.е. в два раза превышал критический угол. Несколько из измеренных индикатрис рассеяния представлены на рис.1.26 для разной толщины напыленных пленок. Глубокий минимум в направлении зеркального отражения ($\theta = \theta_0$) обусловлен блокирующей заслонкой, расположенной между образцом и детектором.

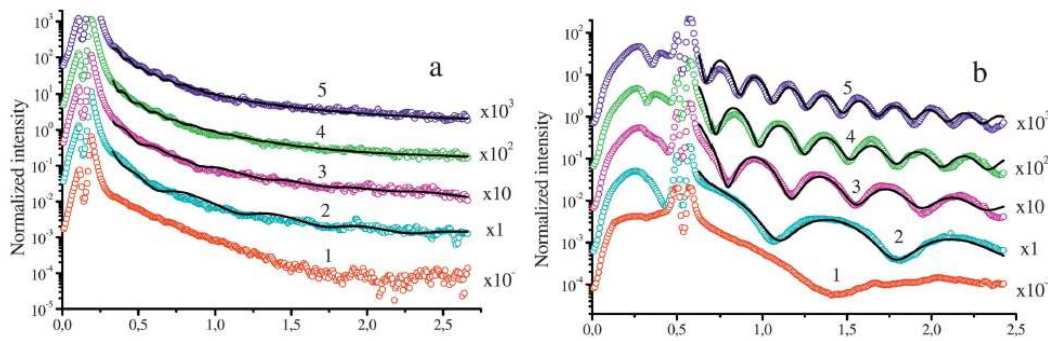


Рис. 1.26. Индикатрисы рассеяния от растущей пленки вольфрама (кружки), измеренные in-situ при двух разных углах скольжения зондирующего пучка $\theta_0 = 0.125^\circ$ (а) и $\theta_0 = 0.5^\circ$ (б). Толщина пленок составляла $h = 2.5$ нм (1), 5.6 нм (2), 10.2 нм (3), 14.8 нм (4) и 19.4 нм (5). Сплошные кривые были рассчитаны с использованием PSD-функций, показанных на рис.1.27. Для большей наглядности индикатрисы рассеяния сдвинуты по вертикали. (Из [A32]).

Если угол скольжения меньше критического угла ПВО, то коэффициент прохождения излучения сквозь пленку резко (экспоненциально) уменьшается при увеличении ее толщины. Поэтому, начиная с толщины пленки $h = 5 - 6$ нм, можно пренебречь вкладом в рассеяние от границы раздела пленка-подложка и положить электродинамические факторы $A_{ss} = A_{fs} = 0$. Тогда PSD-функция внешней поверхности пленки находится сразу же из (1.169). Чтобы устранить статистические осцилляции, было использовано полиномиальное сглаживание PSD-функций, которые показаны сплошными кривыми 2-5 на рис.1.27 для разной толщины пленок. Для сравнения показана и PSD-функция подложки (кривая 6). Точки на рисунке показывают PSD-функцию поверхности пленки толщиной 19.4 нм, найденную непосредственно из измеренной индикатрисы рассеяния (без сглаживания). Несмотря на статистические осцилляции, кривые 3, 4 и 5 вполне различимы. PSD-функция несколько возрастает при увеличении толщины пленки, что связано с развитием собственных шерохова-

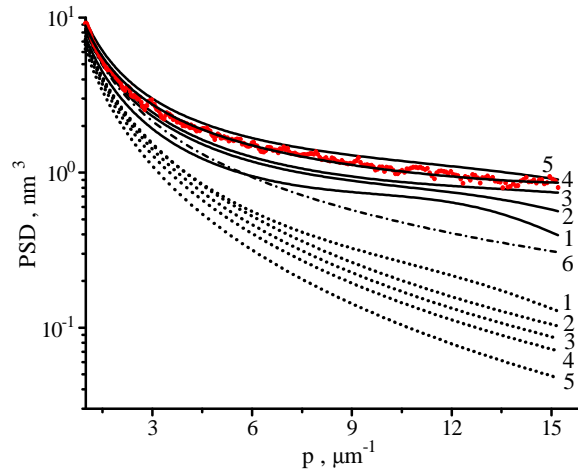


Рис. 1.27. PSD-функции внешней поверхности пленки (сплошные кривые) и кросс-корреляционные PSD-функции (точечные кривые) для разной толщины пленки W : 5.6 нм (1), 10.2 нм (2), 14.8 нм (3), 19.4 нм (4) и 23.5 нм (5). Кривая 6 - PSD-функция исходной кремниевой подложки. Точки показывают PSD-функцию поверхности пленки толщиной 19.4 нм, найденную непосредственно из индикатрисы рассеяния без полиномиального сглаживания. (Из [A32]).

тостей, хотя в измеряемом диапазоне частот среднеквадратичная шероховатость увеличивается крайне незначительно от 0.18 нм (поверхность исходной подложки) до 0.21 нм (пленка толщиной 23.5 нм). Физическая причина столь медленного возрастания шероховатости на сегодняшний день не ясна, но эта особенность вольфрама широко используется в многослойной рентгеновской оптике, где вольфрам-содержащие многослойные зеркала демонстрируют наивысший коэффициент отражения в ЖР диапазоне. Следует отметить, что очень слабое развитие шероховатостей наблюдается только на начальной стадии роста пленок W вплоть до толщины порядка 35-40 нм. При большей толщине происходит катастрофический рост шероховатостей из-за кристаллизации пленок, по-видимому. В частности, измерения с использованием атомно-силового микроскопа показали, что среднеквадратичная шероховатость пленки W толщиной 70 нм составляет 2.5 нм (для окна сканирования в 8 мкм).

Во-втором цикле измерений угол скольжения зондирующего пучка ($\theta_0 = 0.5^\circ$) превышал критический угол ПВО, так что шероховатости обеих границ раздела давали вклад в рассеянное излучение. Поскольку функция PSD_{ff} была найдена в предыдущем цикле, а PSD_{ss} предполагается известной, то кросс-корреляционная функция PSD_{sf} может быть найдена непосредственно из (1.169). Сглаженные функции PSD_{sf} показаны на рис.1.27 пунктирными кривыми 1-5 для разной толщины пленки. Рисунок ясно демонстрирует, что корреляция между шероховатостями пленки и подложки уменьшается при росте пленки и при увеличении пространственной частоты.

Сплошные кривые на рис.1.26 представляют результаты расчета индикатрис рассеяния

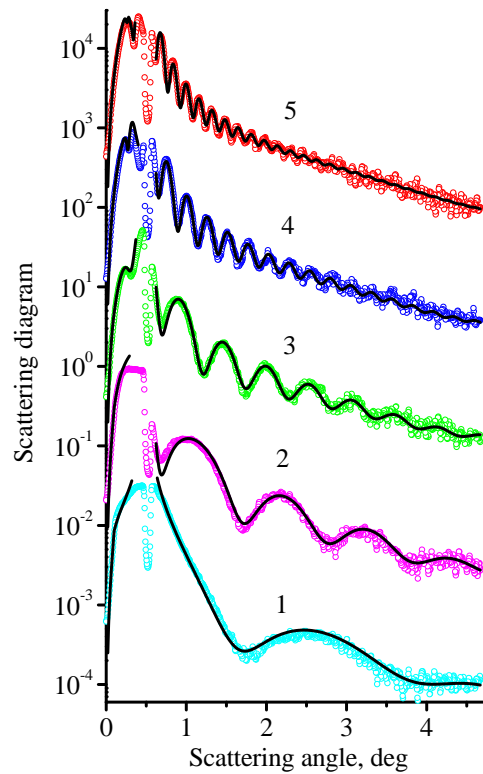


Рис. 1.28. Измеренные in-situ индикатрисы рассеяния ($\lambda = 0.154$ нм) от растущей пленки вольфрама (символы) при ее толщине 1.90 нм (1), 3.83 нм (2), 7.55 нм (3), 15.75 нм (4) и 24.6 нм (5). Сплошные кривые показывают точность описания экспериментальных данных с использованием PSD-функций, показанных на рис.1.29b. (Из [A39])

с использованием найденных PSD-функций. Обработка экспериментальных данных начиналась с толщины пленки $h = 5.6$ нм. При меньшей толщине пленки описанная выше простейшая процедура независимого определения функций PSD_{ff} и PSD_{sf} неприменима, поскольку даже при падении пучка в области ПВО обе границы раздела дают вклад в рассеяние.

Основным недостатком рассмотренного подхода является необходимость проведения двух последовательных экспериментов по исследованию рассеяния от двух пленок, растущих на различных подложках, причем предполагается, что рост пленок происходит совершенно одинаковым образом, что может и не соответствовать реальности из-за различных артефактов. Более аккуратный подход предполагает измерение рассеяния от растущей пленки при двух различных углах скольжения зондирующего пучка, но это требует разработки существенно более сложного оборудования, позволяющего быстро переключать схему измерений из одного положения в другое. Ниже мы покажем, что отмеченные трудности могут быть легко преодолены, поскольку оказывается возможным однозначно определить две неизвестные PSD-функции (PSD_{ff} и PSD_{sf}) из одной индикатрисы рассеяния.

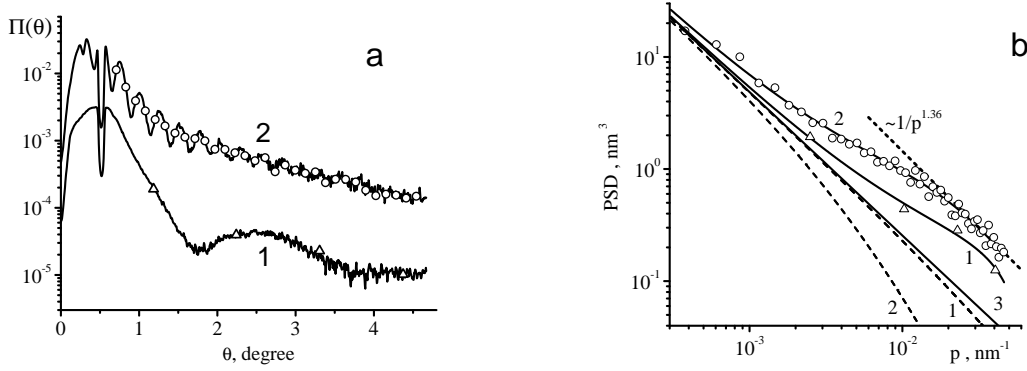


Рис. 1.29. (а) Индикатрисы рассеяния от растущей пленки вольфрама, измеренные in-situ для пленок толщиной 1.90 нм (1) и 24.6 нм (2). Для большей наглядности кривые сдвинуты по вертикали. Точки соответствуют углам рассеяния, где интерференционный фактор $A_{sf} = 0$. (б) PSD-функции PSD_{ff} и PSD_{sf} (сплошные и пунктирные кривые, соответственно) для пленок толщиной 1.90 нм (1) и 24.6 нм (2). Символы показывают значения этих функций, найденные непосредственно из индикатрисы рассеяния. Кривая 3 - PSD-функция исходной подложки. Точечная прямая показывает асимптотику PSD-функции при больших пространственных частотах, которая соответствует значению статической экспоненты $\alpha = 0.18$. (Из [A39]).

Рассмотрение будет проведено на основе экспериментальных индикатрис рассеяния от растущей пленки вольфрама, которые показаны на рис.1.28 [A39]. Угол скольжения зондирующего пучка превышал критический угол ПВО $\theta_0 = 0.5^\circ$. Отметим, что индикатрисы были измерены в существенно более широком угловом диапазоне по сравнению с первым экспериментом, описанным выше. Если угол скольжения зондирующего пучка превышает критический угол ПВО, то коэффициент A_{sf} в (1.169) является осциллирующей функцией угла рассеяния θ и обращается в ноль при определенных значениях этого угла, т.е. при определенных значениях пространственной частоты. Символы на индикатрисах рассеяния на рис.1.29а от самой тонкой ($h = 1.9$ нм) и самой толстой ($h = 24.6$ нм) пленок из рассмотренных как раз и соответствуют тем углам рассеяния, при которых электродинамический фактор $A_{sf} = 0$. В этих точках интерференционный член в (1.169) не дает вклада в рассеяние, а функция PSD_{ff} определяется немедленно и однозначно (если, как и выше, предположить, что шероховатость подложки известна и не меняется при напылении пленки). Найденные в этих точках значения PSD_{ff} для пленок толщиной 1.9 нм и 24.6 нм показаны соответствующими символами на рис.1.29б. Ясно, что чем толще пленка, тем выше частота осцилляций коэффициента A_{sf} и, следовательно, тем больше число нулей в измеряемом диапазоне углов рассеяния (50 для толстой пленки и только 4 для тонкой). Тем не менее, поведение функции PSD_{ff} хорошо определено даже для самой тонкой пленки, поскольку из общих физических

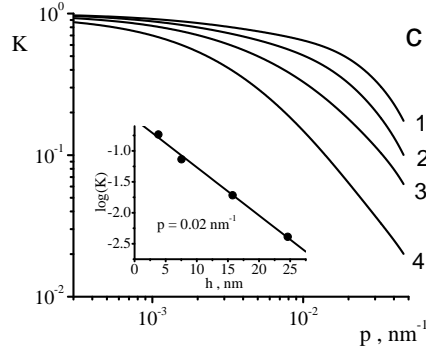


Рис. 1.30. Коэффициент конформности в зависимости от пространственной частоты для разной толщины пленки вольфрама: 3.83 нм (1), 7.55 нм (2), 15.75 нм (3) и 24.6 нм (4). На вставке показан коэффициент конформности в зависимости от толщины пленки при фиксированной частоте $p = 0.02$ нм⁻¹. (Из [А39]).

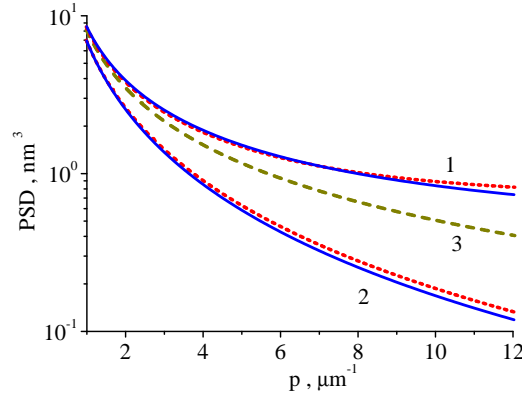


Рис. 1.31. PSD-функции PSD_{ff} (1) и PSD_{sf} (2) пленки вольфрама толщиной 14.8 нм, найденные из двух индикатрис рассеяния (пунктирные кривые) и из одной индикатрисы (сплошные кривые). Кривая 3 - PSD-функция исходной кремниевой подложки.

соображений мы ожидаем, что эта функция гладкая и, более того, низкочастотные шероховатости пленки и подложки полностью конформные, т.е. $PSD_{ff}(p) \rightarrow PSD_{ss}(p)$ при $p \rightarrow 0$. Поэтому, чтобы уменьшить статистические ошибки и интерполировать PSD-функции между экспериментальными точками, мы представили функцию $PSD_{ff}(p)$ в следующем виде:

$$PSD_{ff}(p) = PSD_{ss}(p) \left(1 + \sum_{j=1}^{j_{max}} a_j p^j \right) \quad (1.217)$$

где $j_{max} = 3$, как правило. Результат интерполяции показан на рис.1.29b (сплошные кривые 1 и 2) для самой тонкой и самой толстой пленки. PSD-функции при промежуточных толщинах лежат между этими двумя кривыми.

Поскольку PSD-функция внешней поверхности пленки определена во всем интервале углов скольжения, мы можем найти и функцию PSD_{sf} , используя то же самое выражение (1.217), где коэффициенты a_j находятся подгонкой к измеренной индикатрисе рассеяния.

Полученные функции $\text{PSD}_{sf}(p)$ показаны пунктирными кривыми на рис.1.29b для самой тонкой (1) и самой толстой (2) пленки. PSD-функции при промежуточных толщинах лежат между этими кривыми.

Чтобы количественно охарактеризовать корреляцию шероховатостей пленки и подложки, введем коэффициент конформности

$$K(p, h) = \frac{\text{PSD}_{sf}(p, h)}{\sqrt{\text{PSD}_{ss}(p)\text{PSD}_{ff}(p, h)}} \quad (1.218)$$

показанный на рис.1.30 и демонстрирующий экспоненциальное уменьшение корреляции шероховатостей пленки и подложки как с увеличением толщины пленки, так и с увеличением пространственной частоты.

Наконец, на рис.1.31 сравниваются PSD-функции пленки вольфрама толщиной 14.8 нм, найденные с помощью двух описанных выше подходов. Пунктирные кривые были найдены из двух индикатрис рассеяния при падении пучка внутри и вне области ПВО (кривые 4 на рис.1.26a и рис.1.26b), в то время как сплошные кривые были найдены из одной индикатрисы рассеяния при падении пучка вне области ПВО (кривая 4 на рис.1.26b). Как видно, оба подхода приводят к практически совпадающим PSD-функциям.

1.4.3. Анализ эволюции шероховатостей в рамках скэйлингового подхода

В настоящее время для описания эволюции шероховатости при росте или эрозии поверхности используется концепция динамического скэйлинга, впервые сформулированная в [141] на основе атомно-силовых исследований пленок различной толщины для разных размеров области сканирования. Согласно этой концепции среднеквадратичная шероховатость растущей или эродирующей поверхности увеличивается со временем по степенному закону $\sigma(t) \sim t^\beta$ до тех пор, пока радиус корреляции шероховатостей $\xi(t) \sim t^{1/z}$ не сравняется с размером L образца (размером области сканирования). Дальнейший рост пленки не изменяет статистических свойств поверхности, а среднеквадратичная высота насыщенной шероховатости определяется размером образца $\sigma_{sat} \sim L^\alpha$. Следуя этой концепции, вводятся несколько чисел α , β и $z = \alpha/\beta$, известных как скэйлинговые экспоненты, которые характеризуют в пространстве и во времени некоторые фундаментальные свойства чрезвычайно сложных неравновесных процессов роста и эрозии. Современные теории роста/эрозии, основанные, как правило, на анализе нелинейных дифференциальных уравнений различного типа, подтверждают гипотезу скэйлинга [64]. Более того, различные уравнения приводят к различным скэйлинговым экспонентам (см. табл.1.2). Тем самым, сравнение экспериментальных скэйлинговых экспонент с теоретическими предсказаниями позволяет иногда определить вид уравнения, описываю-

Таблица 1.2. Наиболее широко используемые уравнения роста пленок и соответствующие им значения скейлинговых экспонент. $h = h(x, y, t)$ - уравнение поверхности. η - случайный поток падающих частиц. Численные коэффициенты в уравнениях опущены.

Уравнение	Название	α	β	z	Ссылка
$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla^n h + \eta$	Линейное	$\frac{n-2}{2}$	$\frac{n-2}{2n}$	n	[64]
$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla^2 h + (\nabla h)^2 + \eta$	Кардара-Паризи-Занга	~ 0.38	~ 0.24	~ 1.58	[142]
$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla^4 h + \nabla^2(\nabla h)^2 + \eta$	Молек.-луч. эпитаксии	~ 0.7	~ 0.2	~ 3.5	[64]
$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla^2 h - \nabla^4 h + (\nabla h)^2 + \eta$	Курамото- Сивашинского	$\sim 0.77^a$	$\sim 0.23^a$	$\sim 3.3^a$	[143]
		$\sim 0.26^b$	$\sim 0.19^b$	$\sim 1.4^b$	[143]

^a на начальной стадии роста/эрозии;

^b на поздней стадии роста/эрозии

щего процесс роста/эрозии, что открывает новые перспективы для оптимизации параметров того или иного технологического процесса.

Скейлинговая гипотеза подразумевает, что одномерная PSD-функция шероховатостей может быть записана как

$$\text{PSD}_{1D}(p, t) = p^{-1-2\alpha} g(pt^{1/z}), \quad \text{где } g(u \rightarrow 0) \sim u^{1+2\alpha}, \quad g(u \rightarrow \infty) \rightarrow \text{const} \quad (1.219)$$

Это означает, в частности, что в области высоких пространственных частот PSD-функция ведет себя в соответствии с обратным степенным законом $\text{PSD}_{1D}(p) \sim 1/p^{1+2\alpha}$. Тем самым, анализируя асимптотику PSD-функции, можно определить статическую экспоненту α , характеризующую насыщенную шероховатость. В свою очередь, динамическая экспонента β может быть найдена из анализа изменения среднеквадратичной шероховатости со временем $\sigma^2(t) = \int \text{PSD}_{1D}(p, t) dp \sim t^{2\beta}$.

Кроме того, если построить зависимость функции $\text{PSD}_{1D}(p, t) \cdot p^{1+2\alpha}$ для различных моментов времени от “ренормализованной” пространственной частоты $pt^{1/z}$ и выбрать надлежащим образом скейлинговые экспоненты, то получим коллапс (сжатие) всех функций в универсальную кривую, соответствующую скейлинговой функции $g(u)$ из (1.219).

Проиллюстрируем процедуру определения скейлинговых экспонент на примере ионного травления пленки вольфрама [A40]. Пленка толщиной около 30 нм была нанесена на суперполированную кремниевую подложку методом магнетронного распыления. После напыления образец облучался ионами Ag с энергией 1 кэВ, падающих на поверхность под углом скольжения 10°. Скорость травления составляла 10 пм/сек. Зондирующий рентгеновский пучок

($E = 17.5$ кэВ) падал на образец под углом скольжения $\theta_0 = 0.125^\circ$, что в два раза меньше критического угла ПВО и, следовательно, нижняя граница раздела не давала вклада в рассеяние. Время записи индикатрисы рассеяния составляло 0.5 сек.

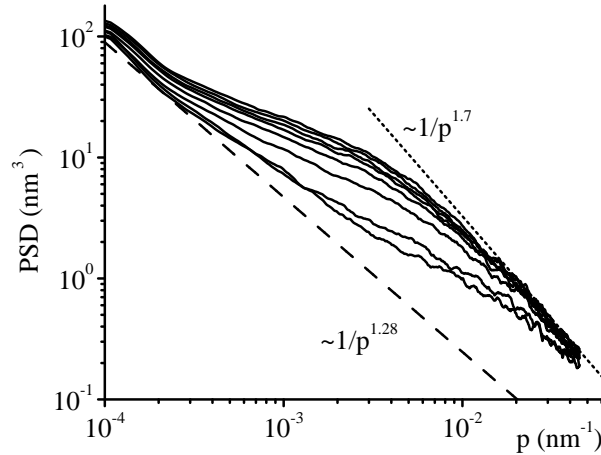


Рис. 1.32. Измеренные (через каждые 200 сек) PSD-функции внешней поверхности вольфрамовой пленки при ее травлении ионами аргона. Пунктирная кривая - PSD-функция кремниевой подложки. Точечная кривая показывает асимптотическое поведение PSD-функции в области высоких пространственных частот, соответствующее фрактальному закону при значении статической экспоненты $\alpha = 0.35$. (Из [A40]).

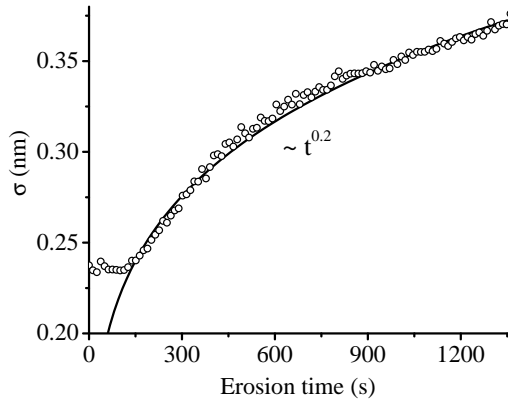


Рис. 1.33. Эволюция среднеквадратичной шероховатости вольфрамовой пленки при ионной бомбардировке. Сплошная кривая соответствует степенной зависимости от времени при значении динамической экспоненты $\beta = 0.2$. (Из [A40]).

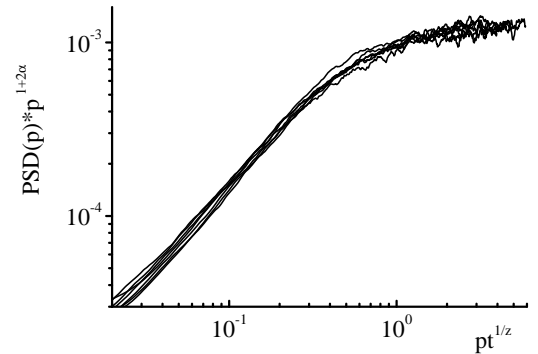


Рис. 1.34. Иллюстрация коллапса экспериментальных PSD-функций внешней поверхности эродирующей пленки вольфрама. (Из [A40]).

Несколько из измеренных PSD-функций, найденных непосредственно из индикатрис рассеяния через равные промежутки времени (~ 200 сек), показаны на рис.1.32. Пунктирная кривая показывает сглаженную PSD-функцию исходной кремниевой подложки, демонстрирующую ясно выраженное фрактальное поведение $PSD(p) \sim 1/p^{1.28}$. Нижняя сплошная

кривая - PSD-функция напыленной пленки вольфрама толщиной 31.4 нм до начала ионной бомбардировки. В течение ионного травления PSD-функция монотонно возрастала во всем измеряемом диапазоне пространственных частот, демонстрируя развитие мелкомасштабных шероховатостей. Верхняя сплошная кривая - PSD-функция пленки вольфрама после удаления слоя толщиной около 13 нм. Рисунок наглядно демонстрирует фрактальное поведение PSD-функции в области высоких пространственных частот (точечная кривая), причем статическая экспонента $\alpha = 0.35 \pm 0.03$. Эволюция среднеквадратичной шероховатости в измеряемом диапазоне пространственных частот показана на рис.1.33 и соответствует степенному закону с динамической экспонентой $\beta = 0.20 \pm 0.02$. Отметим, что найденные значения экспонент хорошо согласуются с предсказаниями уравнения Кардара-Паризи-Занга - простейшего нелинейного уравнения, используемого для описания процессов роста пленок и эрозии поверхностей. Экспериментальные значения скейлинговых экспонент для ряда исследованных образцов представлены в табл.1.3. Наконец, рис.1.34 иллюстрирует коллапс всех PSD-функций в единую универсальную кривую, соответствующую скейлинговой функции $g(u)$. Наиболее отчетливо коллапс наблюдался при значениях экспонент $\alpha = 0.33$ и $\beta = 0.18$, что хорошо согласуется с найденными выше значениями. Кроме того, рис.1.34 ясно демонстрирует переход от одного режима изменения скейлинговой функции к другому при значении параметра $pt^{1/z} \simeq 1$. Следовательно, радиус корреляции собственных шероховатостей пленки, возникших в процессе травления, ведет себя как $\xi \simeq t^{0.67}$, где ξ выражено в нанометрах, а время - в секундах, и достигает 130 нм в конце травления.

Такой же анализ скейлинговой эволюции был проведен и для растущей пленки вольфрама, исследования которой описаны в предыдущем разделе. Точечная прямая на рис.1.29 показывает асимптотическое поведение PSD-функции в конце напыления пленки, которая соответствует значению статической экспоненты $\alpha = 0.18 \pm 0.02$. Эволюция среднеквадратичной шероховатости, показанной на вставке к рис.1.35, соответствует степенному закону при значении динамической экспоненты $\beta = 0.06 \pm 0.01$, а коллапс PSD-функций, наблюдаемый при тех же значениях скейлинговых экспонент, показан на рис.1.35. Отметим, что уравнение роста пленки, предсказывающего такое малое значение β , неизвестно.

Следует отметить две особенности наблюдаемого коллапса PSD-функций. Во-первых, экспериментальная скейлинговая функция $g(u)$ стремится к ненулевому значению при уменьшении аргумента u . Во-вторых, чтобы наблюдать коллапс PSD-функций при очень малой толщине пленки порядка 2-4 нм, мы заменили номинальную толщину пленки h (время напыления) ее эффективным значением $h' = h - 1.5$ нм. Основная причина, приводящая к этим особенностям, состоит в том, что классическая формулировка скейлинговой гипотезы пред-

Таблица 1.3. Экспериментальные значения скейлинговых экспонент и соответствующее им уравнение роста/эрозии.

Образец	Процесс	α	β	Уравнение
W	Магнетронное напыление	0.18 ± 0.02	0.06 ± 0.01	Неизвестно
W	Травление ионами Ag	0.35 ± 0.03	0.20 ± 0.02	Кардара-Паризи-Занга
Al ₂ O ₃	Магнетронное напыление	0.26 ± 0.03	0.23 ± 0.02	Курамото-Сивашинского
Si	Травление ионами Ag	0.23 ± 0.08	0.07 ± 0.01	Неизвестно

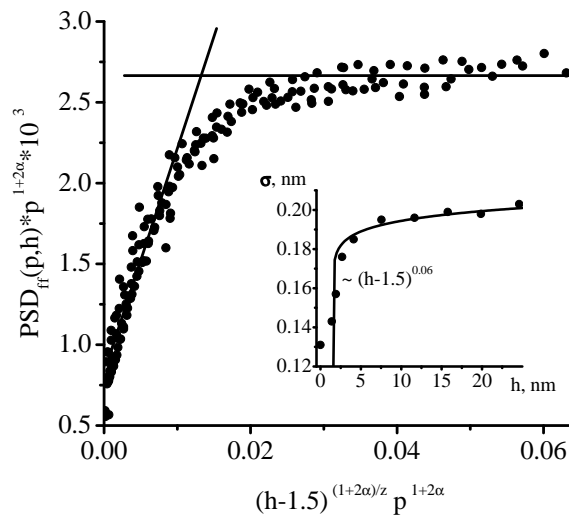


Рис. 1.35. Иллюстрация коллапса PSD-функций растущей пленки вольфрама (см. рис.1.29). При расчетах использовалось 8 PSD-функций пленок различной толщины от 1.9 нм до 24.6 нм. На вставке показана экспериментальная зависимость среднеквадратичной шероховатости от толщины пленки (кружки), а сплошная кривая соответствует степенному закону при значении динамической экспоненты $\beta = 0.06$. (Из [A39]).

полагает совершенно гладкую поверхность подложки, физические и химические свойства которой полностью соответствуют наносимой пленке, т.е. нет различия между начальной и последующей стадиями роста.

В этой связи возникает целый ряд вопросов. Как шероховатость подложки влияет на модель скейлинга? Зависят ли скейлинговые экспоненты от шероховатости и материала подложки? Как отличить вклады в шероховатость внешней поверхности пленки, индуцированные шероховатостью подложки и самим процессом напыления (собственная шероховатость пленки), где только собственные шероховатости подчиняются скейлинговому закону?

Наиболее простая модель предполагает, что шероховатость подложки σ_S дает постоян-

ный вклад в шероховатость пленки $\sigma(t)$ независимо от ее толщины [144, 145]:

$$\sigma^2(t) = \sigma_S^2 + \sigma_G^2(t) \quad (1.220)$$

где $\sigma_G(t)$ - собственная шероховатость пленки, возникающая при ее росте. В то же время, это простое выражение игнорирует тот факт, что “память” о шероховатости подложки постепенно теряется в процессе роста пленки. Более того, (1.220) не может объяснить сглаживание поверхности, наблюдаемой в ряде экспериментов на начальной стадии роста пленок [146]-[148] и ионного травления [118, 119]. Более детальный анализ проблемы, проведенный в рамках линейной теории роста/эрозии, показал [149], что (1.220) остается справедливым до тех пор, пока радиус корреляции шероховатостей пленки $\xi(t) \sim t^{1/z}$ остается малым по сравнению с радиусом корреляции шероховатостей подложки ξ_S . В противоположном предельном случае $\xi(t) \gg \xi_S$ вклад от шероховатости подложки в (1.220) начинает зависеть от времени и уменьшается при росте пленки по следующему универсальному закону:

$$\sigma_S(t) = \sigma_S(0) \cdot \xi_S / \xi(t), \quad \xi(t) \gg \xi_S \quad (1.221)$$

Чтобы получить плавный переход между двумя предельными случаями (1.220) и (1.221), авторы [149] предложили следующую модель:

$$\sigma_S(t) = \frac{\sigma_S(0)}{(1 + t/t_S)^{1/z}} \quad (1.222)$$

где параметр t_S имеет ясный физический смысл: он характеризует время напыления, необходимое для того, чтобы радиус корреляции собственных шероховатостей пленки сравнялся с радиусом корреляции шероховатостей исходной подложки.

В следующих двух разделах мы проанализируем эволюцию шероховатостей пленок Al_2O_3 , растущих на кремниевых подложках, характеризуемых совершенно разными радиусами корреляции шероховатостей, и покажем, что простая модель (1.220)-(1.222) может описать эволюцию шероховатостей даже в том случае, когда рост пленки не соответствует линейной модели. Кроме того, мы покажем, как можно различить между шероховатостью, индуцируемой подложкой, и собственной шероховатостью пленки, а также продемонстрируем справедливость скэйлинговой модели на начальной стадии роста пленки, когда шероховатость внешней поверхности пленки определяется, главным образом, шероховатостью подложки.

1.4.4. Влияние шероховатостей подложки на эволюцию роста пленки

Пленки Al_2O_3 были напылены на кремниевые подложки методом высокочастотного (150 кГц) магнетронного распыления. До исследований рентгеновского рассеяния были проведены in-situ измерения коэффициента отражения от растущих пленок при фиксированном угле

скольжения $\theta_0 = 0.25^\circ$ зондирующего пучка ($E = 17.5$ кэВ). Анализ кривых отражения $R(t)$ позволил определить скорость роста пленок (3.85 ± 0.03 нм/сек), падающий поток частиц ($(5.20 \pm 0.04) \cdot 10^{12}$ частиц/сек/см²) и плотность пленок (2.29 ± 0.02 г/см³), которая практически постоянна по глубине [A49]. По-видимому, из-за относительно высокого давления рабочего газа Ar (2.66 Па), необходимого для стабилизации плазменного разряда, плотность исследованных пленок оказалась очень низкой. В результате, поляризуемость пленок Al₂O₃ лишь на несколько процентов превышала поляризуемость естественного окисла SiO₂ на поверхности подложки. Поэтому при обработке экспериментальных данных мы пренебрегли вкладом в рассеянный сигнал от границы раздела пленка-подложка. Измеренные индикатрисы рассеяния от исходных подложек и от растущих пленок различной толщины показаны на рис.1.36.

Рассмотрение, проведенное ниже, основано на анализе in-situ измерений рассеяния рентгеновского излучения от пленок Al₂O₃, растущих на двух кремниевых подложках (S1 и S2), которые характеризуются различной микротопографией поверхности. Кристаллографическая ориентация подложек была разная: (111) для S1 и (100) для S2. Сглаженные по статистическим осцилляциям PSD-функции обеих подложек показаны на рис.1.36. Среднеквадратичная шероховатость обеих подложек почти одинакова ($\sigma_S = 0.25 \pm 0.02$ нм для S1 и $\sigma_S = 0.23 \pm 0.02$ нм для S2) в измеряемом диапазоне пространственных частот (от $1 \cdot 10^{-4}$ нм⁻¹ до $3 \cdot 10^{-2}$ нм⁻¹). В то же время зависимость PSD-функций от пространственной частоты совершенно разная. PSD-функция подложки S1 имеет форму, типичную для хорошо полированных образцов. Она плавно уменьшается при увеличении пространственной частоты p и ведет себя в соответствии с обратной степенной зависимостью $1/p^{1+2\alpha}$ при больших p , где статическая экспонента $\alpha = 0.20 \pm 0.03$. Радиус корреляции шероховатостей ξ_S не может быть определен, поскольку PSD-функция не выходит на уровень насыщения в диапазоне измеряемых частот. Поскольку такое насыщения должно происходить при пространственных частотах меньших $1/\xi_S$, мы можем только заключить, что радиус корреляции шероховатостей больше 10 мкм.

Поведение PSD-функции подложки S2 более сложное. Ясно наблюдаются две системы шероховатостей разных масштабов, связанных с наличием точек перегиба на PSD-функции. Один из них соответствует радиусу корреляции, превышающему 10 мкм, как и для подложки S1, а второй - радиусу корреляции порядка 150-200 нм, что, по крайней мере, на два порядка меньше, чем радиус корреляции шероховатостей подложки S1. В области высоких пространственных частот ($p > 1 \cdot 10^{-2}$ нм⁻¹) PSD-функция подложки S2, по-видимому, тоже уменьшается в соответствии с обратным степенным законом, однако оценить статиче-

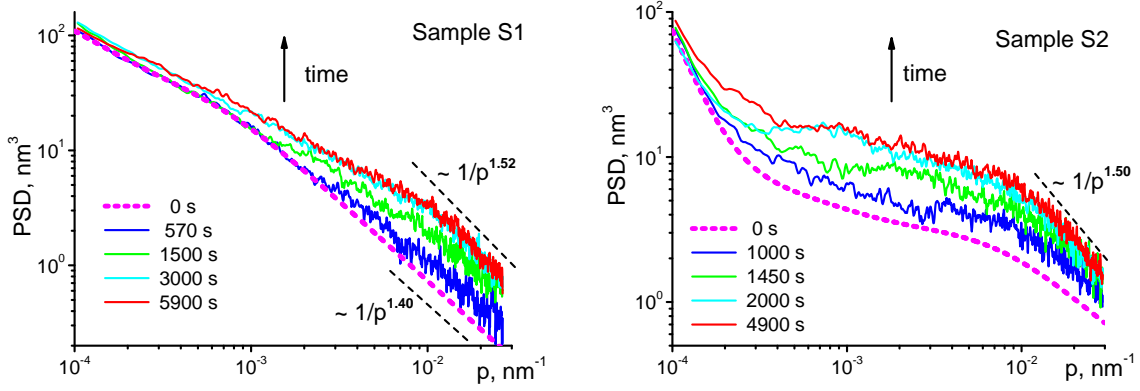


Рис. 1.36. Одномерные PSD-функции (сплошные кривые) для различных моментов напыления пленки Al_2O_3 на подложки S1 и S2. Точечная кривая - сглаженная по статистическим осцилляциям PSD-функция исходной подложки. Пунктирная прямая демонстрирует асимптотическое поведение PSD-функций при больших p . (Из [A49]).

скую экспоненту α оказывается затруднительным из-за недостаточно широкого интервала частот, измеряемых в рентгеновском эксперименте. Поэтому мы провели дополнительные исследования шероховатостей подложки с использованием АСМ. Сравнение PSD-функций, полученных двумя методами, представлено на рис.1.37. Согласие между кривыми вполне хорошее, и значение статической экспоненты определяется теперь без каких-либо проблем: $\alpha = 0.09 \pm 0.02$. Это значение существенно меньше, чем для подложки S1.

На рис.1.38 показана зависимость эффективной среднеквадратичной шероховатости $\sigma(p)$ от верхней границы интервала интегрирования PSD-функции:

$$\sigma^2(p) = \int_{p_{min}}^p \text{PSD}(p') dp' \quad (1.223)$$

где нижний предел интегрирования $p_{min} = 1 \cdot 10^{-4} \text{ nm}^{-1}$ фиксирован и соответствует экспериментальному значению. Для значений p , превышающих $3 \cdot 10^{-2} \text{ nm}^{-1}$ (верхний предел рентгеновских измерений), мы используем асимптотическое представление $\text{PSD}(p) = \text{PSD}(p_{max}) \cdot p_{max}^{1+2\alpha} / p^{1+2\alpha}$, где статические экспоненты α были найдены выше. Строго говоря, мы не можем гарантировать такое поведение PSD-функций при $p > 0.1 \text{ nm}^{-1}$ (верхний предел АСМ измерений) и проводим этот анализ для иллюстративных целей. Рисунок 1.38 показывает, что вклад высокочастотных шероховатостей ($p > 10^{-2} \text{ nm}^{-1}$) в среднеквадратичное значение превышает 80% для подложки S2, в то время как для подложки S1 этот вклад около 25%. В результате, среднеквадратичная шероховатость, определенная из рентгеновских измерений подложки S1, близка к значению $\sigma_S = 0.27 \pm 0.02 \text{ nm}$, найденного с помощью (1.223) в полубесконечном интервале пространственных частот. Напротив, значение $\sigma_S = 0.41 \pm 0.02$

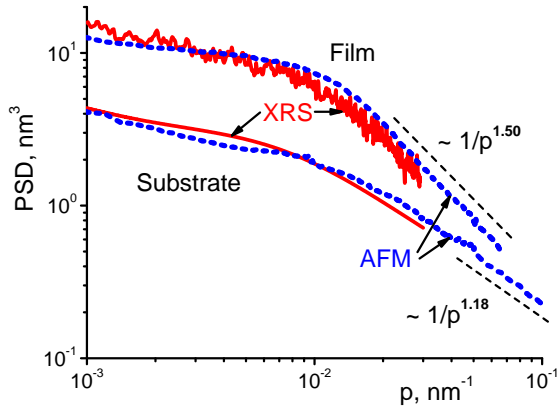


Рис. 1.37. Одномерные PSD-функции подложки S2 и пленки Al_2O_3 толщиной 18.9 нм. PSD-функции измерены методом рентгеновского рассеяния (сплошные кривые) и АСМ (точечные кривые). Пунктирные прямые демонстрируют асимптотическое поведение PSD-функций при больших p . (Из [A49]).

нм для подложки S2, найденное в полубесконечном интервале, почти в два раза превышает значение, определенное из рентгеновских измерений. Суммируя вышесказанное, можно заключить, что подложки S1 и S2 очень интересны для сравнительного исследования роста пленок, поскольку микротопография их поверхностей совершенно разная. Главный вклад в среднеквадратичную шероховатость подложки S1 дает низкочастотная часть спектра, в то время как для подложки S2, наоборот, высокочастотная часть.

PSD-функции пленок Al_2O_3 , растущих на этих подложках показаны на рис.1.36. В области высоких пространственных частот они ясно демонстрируют фрактальное поведение, причем оказалось, что статические экспоненты α совпадают в пределах экспериментальной ошибки: $\alpha = 0.26 \pm 0.03$ для образца S1 и $\alpha = 0.25 \pm 0.03$ для образца S2. Дополнительные АСМ измерения, проведенные после напыления пленки на подложку S2, подтверждают правильность найденных значений (см. рис.1.37). Как и для подложек, микротопография поверхностей пленок существенно различная. Для пленки на подложке S1 наблюдается, в основном, развитие высокочастотных шероховатостей ($p > 5 \cdot 10^{-3} \text{ нм}^{-1}$). Наоборот, рост пленки на S2 характеризуется развитием шероховатостей в области меньших пространственных частот ($4 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^2 \text{ нм}^{-1}$). Таким образом, с одной стороны, эволюция шероховатости во время роста пленки зависит от PSD-функции исходной подложки, причем “память” об ис-

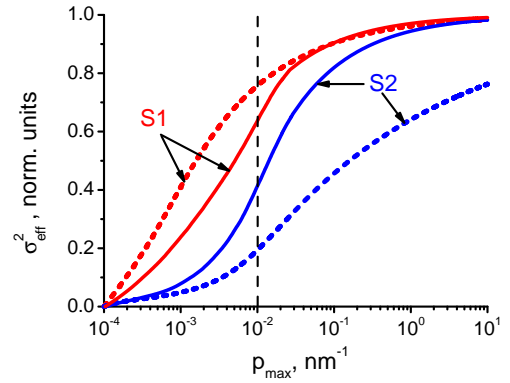


Рис. 1.38. Эффективная шероховатость (1.223) двух исходных подложек (точечные кривые) и пленок Al_2O_3 после их напыления (сплошные кривые). Вертикальная пунктирная линия условно разбивает диапазон частот на низкочастотную и высокочастотную области. (Из [A49]).

ходных шероховатостях сохраняется после напыления пленок толщиной 20-23 нм. С другой стороны, кривые эффективной шероховатости (1.223), показанные сплошными кривыми на рис.1.38, существенно приближаются друг к другу по сравнению с исходными подложками (точечные кривые). Можно ожидать, что после напыления достаточно толстой пленки эти кривые будут полностью совпадать.

Рисунок 1.39 демонстрирует коллапс PSD-функций. Использовалось несколько PSD-функций обоих образцов при различных временах напыления $t > 1400$ сек. Коллапс отчетливо наблюдался для обоих образцов при одних и тех же значениях скейлинговых экспонент $\alpha = 0.26$ и $\beta = 0.23$. Статическая экспонента α та же самая, что была найдена из анализа асимптотического поведения PSD-функций, и может быть определена с высокой точностью (± 0.03), поскольку она определяет постоянное значение “ренормализованной” PSD-функции при больших $pt^{1/z}$. В то же время, затруднительно определить ошибку в динамической экспоненте β , поскольку зависимость функции $\text{PSD}(p, t)p^{1+2\alpha}$ от экспоненты β хорошо выражена лишь при малом аргументе $pt^{1/z}$. Однако скейлинговая гипотеза справедлива, строго говоря, лишь для собственных шероховатостей пленки, а в области малых пространственных частот вклад в σ от шероховатостей, индуцируемых подложкой, сравним или даже превосходит вклад от собственных шероховатостей, индуцируемых ростом пленки. Тем самым, необходимо уметь различать эти два вклада.

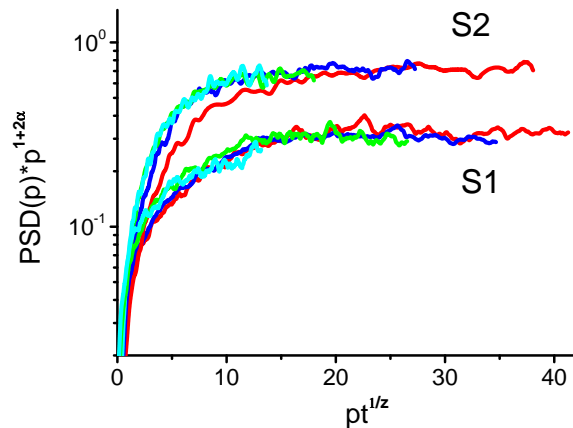


Рис. 1.39. Коллапс PSD-функций двух исследованных образцов (S1 и S2) при толщине пленок, превышающей 5.4 нм (время напыления $t > 1400$ сек). Коллапс наблюдается наиболее отчетливо при значениях скейлинговых экспонент $\alpha = 0.26$ и $\beta = 0.23$. Экспериментальные PSD-функции были сглажены по статистическим осцилляциям. (Из [A49]).

Скейлинговые функции $g(u)$ разных образцов на рис.1.39 несколько отличаются друг от друга. Это может быть связано либо с более быстрым развитием высокочастотных шероховатостей при росте пленки на подложке S2, либо с разным вкладом шероховатости подложки

в шероховатость пленки. Тем не менее, переход между двумя режимами изменения скейлинговой функции хорошо выражен и для обоих образцов происходит в одной и той же точке $pt^{1/z} \sim 10$. Поэтому мы заключаем, что радиус корреляции собственных шероховатостей пленки увеличивается со временем как

$$\xi(t) \simeq 0.1 \cdot t^{\beta/\alpha} \quad (1.224)$$

(где t выражено в секундах, ξ - в нм) и для самых толстых пленок достигает $\xi \sim 180 - 220$ нм.

1.4.5. Методика корректного определения динамической экспоненты

Более аккуратный подход к определению динамической экспоненты β состоит в анализе изменения среднеквадратичной шероховатости со временем напыления. Как и выше, основная проблема состоит, чтобы различить между вкладами в общую шероховатость $\sigma(t)$ от шероховатостей подложки $\sigma_S(t)$ и от собственных шероховатостей пленки $\sigma_G(t)$, причем только последняя изменяется в соответствии со скейлинговым законом. Обсудим проблему более подробно, основываясь на простейшей модели (1.220)-(1.222).

Временная зависимость измеренной шероховатости $\sigma_{exp}(t)$ образца S1 показана на рис.1.40, кривая 1, где значение σ было определено в интервале пространственных частот $1 \cdot 10^{-4} - 3 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$, измеряемом в рентгеновском эксперименте. Чтобы описать экспериментальную кривую и определить динамическую экспоненту, мы минимизировали стандартную функцию невязки

$$MF = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left[\frac{\sigma_{exp}(t_j) - \sigma(t_j)}{\sigma_{exp}(t_j)} \right]^2 \quad (1.225)$$

где функция $\sigma(t)$ определена в (1.220)-(1.222) и зависит от трех параметров β , t_s , A так, что $\sigma_G(t) = At^\beta$.

Оказывается, что несмотря на чрезвычайную простоту модели (1.220)-(1.222), проблема минимизации функции невязки оказывается многозначной: совершенно разные наборы подгоночных параметров приводят практически к одной и той же зависимости $\sigma(t)$, хорошо соответствующей экспериментальной кривой. Для иллюстрации проблемы неоднозначности мы минимизировали функцию невязки (1.225) по отношению к параметрам β и A при фиксированном t_s . Отклонение рассчитанной кривой $\sigma(t)$ от экспериментальной будем характеризовать относительной дисперсией $D[\sigma] = \sqrt{MF_{min}}$, где MF_{min} - значение функции невязки после минимизации. Зависимость дисперсии от временного параметра t_s показана на рис.1.41. Дисперсия изменяется крайне незначительно (от 0.9% до 1.8%) при изменении

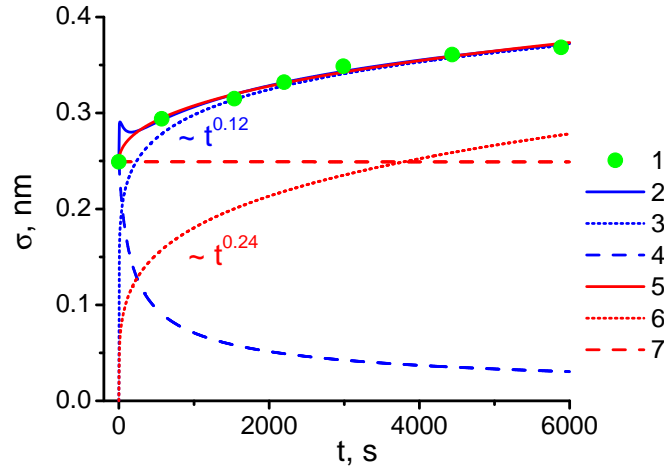


Рис. 1.40. Демонстрация неоднозначности определения динамической экспоненты β . Кривая 1 показывает эволюцию среднеквадратичной шероховатости $\sigma(t)$ по мере роста пленки на подложке S1. Сплошные кривые 2 и 5 - результат подгонки для двух фиксированных значений параметра $t_S = 100$ сек (2) и $t_S = 10^7$ сек (5). Вклады от шероховатости подложки $\sigma_S(t)$ и от собственных шероховатостей пленки $\sigma_G(t)$ показаны пунктирными кривыми 4, 7 и точечными кривыми 3, 6. Значение динамической экспоненты равно $\beta = 0.12$ для $t_S = 100$ сек (3) и $\beta = 0.24$ для $t_S = 10^7$ сек (6), хотя точность подгонки к экспериментальной кривой одна и та же (кривые 2 и 5).

t_S в чрезвычайно широком диапазоне значений, хотя два неглубоких и широких минимума все же наблюдаются на кривой при $t_S \simeq 100$ сек и $t_S \simeq 7 \cdot 10^4$ сек. Однако, если принять во внимание экспериментальную ошибку определения среднеквадратичной шероховатости (несколько процентов, по крайней мере), можно заключить, что расчетная кривая $\sigma(t)$ совпадает с экспериментальной в пределах ошибки измерений для любого значения параметра t_S . Динамическая экспонента β , найденная для различных t_S , показана на рис.1.42а, кривая 1. Поэтому, можно заключить только то, что экспонента β лежит в интервале от 0.10 до 0.27.

В качестве иллюстрации сплошные кривые 2 и 5 на рис.1.40 показывают точность подгонки для двух совершенно разных временных параметров $t_S = 100$ сек (2) и $t_S = 10^7$ сек (5). Различие между кривыми настолько мало, что выбрать одну из них как более точную не представляется возможным даже в начале напыления, если принять во внимание 20-ти секундный интервал детектирования индикатрисы рассеяния, приводящий к сглаживанию распределения $\sigma(t)$. Кроме того, на рисунке показаны и вклады в общую шероховатость от собственных шероховатостей пленки (точечные кривые 3 и 6) и от шероховатостей подложки (пунктирные кривые 4 и 7). Видно, что рост собственных шероховатостей подчиняется скэйлинговому закону, но значения динамической экспоненты отличаются в два раза в рассмотренных случаях ($\beta = 0.12$ для кривой 4 и $\beta = 0.24$ для кривой 7).

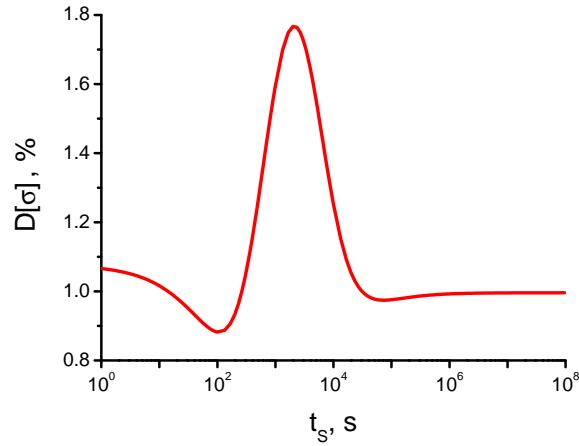


Рис. 1.41. Относительная дисперсия D , характеризующая точность подгонки экспериментальной кривой $\sigma(t)$ для образца S1, в зависимости от параметра t_S .

Следует отметить, что значение $t_S = 100$ сек соответствует глобальному минимуму функции невязки (1.225) (см. рис.1.41). Тем не менее, это решение не имеет физического смысла. Действительно, сравнение кривых 3 и 4 на рис.1.40 показывает, что вклад от шероховатостей подложки становится пренебрежимо малым уже после 300 сек напыления. Это означает, что “память” о шероховатости подложки исчезает после напыления только 3-х монослоев Al_2O_3 . Ясно, что этот вывод нереалистичен и, более того, находится в противоречии с моделью (1.220)-(1.222), использованной при подгонке, если мы примем во внимание большой радиус корреляции (> 10 мкм) шероховатостей подложки S1.

В то же время, второе из представленных решений (кривая 5 на рис.1.39) хорошо согласуется с физическим смыслом модели (1.220)-(1.222). Поскольку шероховатости исходной подложки характеризуются очень большим радиусом корреляции, то их вклад в общую шероховатость пленки почти постоянен. Рассмотренный пример ясно демонстрирует, что все шире применяющийся подход к обработке экспериментальных данных, основанный на применение алгоритмов глобальной оптимизации, вовсе не гарантирует правильности найденного решения.

Тем самым, мы заключаем, что прямое некритическое использование модели (1.220)-(1.222) не позволяет различить между шероховатостью, генерируемую подложкой, и шероховатостью, индуцированную ростом пленки. Поэтому мы должны обратиться к физическому смыслу используемой модели. Как обсуждалось выше, смысл параметра t_S совершенно очевиден. Он характеризует время напыления, за которое радиус корреляции собственных шероховатостей пленки возрастает до значения, соответствующего шероховатости исходной подложки. Принимая во внимание (1.224), заключаем, что параметр t_S должен быть связан с радиусом

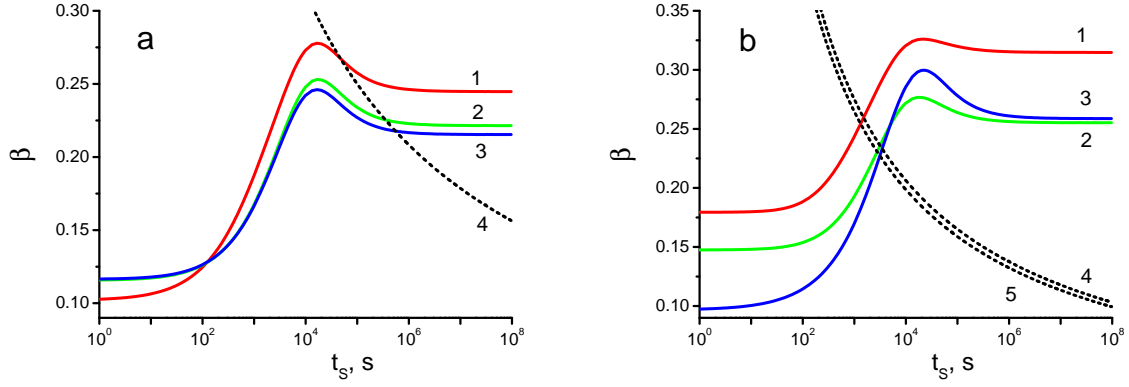


Рис. 1.42. (а) Иллюстрация нашего подхода к определению динамической экспоненты β . Кривые 1-3 показывают зависимость экспоненты β для образца S1 от временного параметра t_S , найденную в результате минимизации функции невязки (1.225). Среднеквадратичная шероховатость рассчитана в интервале пространственных частот, простирающихся до $p_{max} = 3 \cdot 10^{-2}$ нм (1), $p_{max} = 0.1$ нм (2), и $p_{max} \rightarrow \infty$ нм (3). Кривая 4 рассчитана из уравнения (1.226) при значении радиуса корреляции шероховатостей исходной подложки $\xi_S = 10$ мкм. Физически обоснованные значения экспоненты β лежат на кривых 1-3 (в соответствии с выбранным значением p_{max} справа от кривой 4. (б) То же, что и на рис.а для образца S2. Кривые 4 и 5 рассчитаны из уравнения (1.226) при значении радиуса корреляции шероховатостей исходной подложки $\xi_S = 200$ нм (4) или 150 нм (5). Физически обоснованные значения экспоненты β лежат на кривых 1-3 (в соответствии с выбранным значением p_{max} между кривыми 4 и 5.

корреляции шероховатостей исходной подложки следующим соотношением

$$\beta \ln t_S \simeq \alpha \ln(10\xi_S) \quad (1.226)$$

где $\xi_S > 10$ мкм - радиус шероховатостей подложки S1. Следовательно, физически обоснованные значения параметра β должны лежать на кривой 1 справа от кривой 4 на рис.1.42, где кривая 4 построена с использованием (1.226) при $\xi_S = 10$ мкм. Тем самым, заключаем, что $\beta = 0.25 \pm 0.01$. Некоторая неопределенность в значении точки кроссовера $pt^{1/z} \simeq 10$ скэйлинговой функции $g(u)$ не является критичной, поскольку (1.226) слабо (логарифмически) зависит от этого значения.

Имеется другая причина, которая может привести к бóльшей ошибке в определении динамической экспоненты β . Дело в том, что (1.220)-(1.222) были выведены в предположении, что среднеквадратичная шероховатость определена в бесконечном интервале пространственных частот, хотя в наших экспериментах PSD-функция измерялась лишь до значения $p_{max} = 3 \cdot 10^{-2}$ нм⁻¹. Рисунок 1.39 показывает, что PSD-функция может быть экстраполирована в область высоких пространственных частот в соответствии с обратным степенным

законом $1/p^{1+2\alpha}$ после 1400 сек напыления (толщина пленки больше 5.4 нм). Результаты АСМ измерений (рис.1.37) демонстрируют, что такая экстраполяция законна вплоть до частоты $p_{max} = 0.1 \text{ нм}^{-1}$, по крайней мере. Наконец, мы можем рассчитать среднеквадратичную шероховатость и в полубесконечном интервале пространственных частот, а priori предполагая то же самое поведение PSD-функции при $p \rightarrow \infty$ как и на рис.1.37,1.39. Эволюция среднеквадратичной шероховатости со временем напыления показана на рис.1.43а, символы, для трех случаев: $p_{max} = 3 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$ (1), $p_{max} = 0.1 \text{ нм}^{-1}$ (2) и $p_{max} \rightarrow \infty$ (3). Снова проведя минимизацию функции невязки (1.225) для двух последних случаев, получаем кривые 2 и 3 на рис.1.42а, которые очень близки друг к другу, хотя несколько отличаются от кривой 1. В результате динамическая экспонента оказывается несколько меньшей по сравнению с той, что была найдена выше из кривой 1: $\beta = 0.21 - 0.22$. В любом случае, мы можем гарантировать, что динамическая экспонента лежит в интервале $\beta = 0.23 \pm 0.02$ независимо от интервала пространственных частот, принятого во внимание при анализе. Точность подгонки иллюстрируется сплошными кривыми на рис.1.43а для всех трех случаев. Вклад от собственных шероховатостей пленки $\sigma_G(t)$ показан точечными кривыми. Вклад от шероховатостей подложки практически постоянен $\sigma_S(t) \approx \sigma_S(0)$ и не показан на рисунке. Тем самым, модель (1.220)-(1.222) позволяет количественно описать изменение шероховатости пленки по мере ее роста и определить с высокой точностью динамическую экспоненту β .

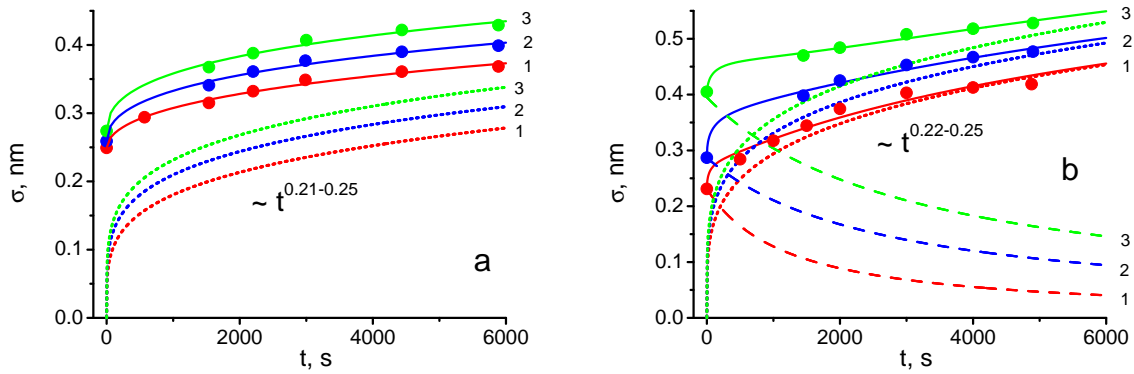


Рис. 1.43. Среднеквадратичная шероховатость образцов S1 (а) и S2 (б) в зависимости от времени напыления (символы) для различных верхних значений пространственной частоты $p_{max} = 3 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$ (1), $p_{max} = 0.1 \text{ нм}^{-1}$ (2), и $p_{max} \rightarrow \infty \text{ нм}^{-1}$ (3). Сплошные кривые показывают результаты расчета для значений экспоненты β , найденных с помощью рис.1.42. Вклады в полную шероховатость от шероховатости подложки $\sigma_S(t)$ и от собственных шероховатостей пленки $\sigma_G(t)$ показаны, соответственно, пунктирными и точечными кривыми. Значение $\sigma_S(t) \approx \sigma_S(0)$ практически не меняется при росте пленки на подложке S1 и не показано на рис.а.

Такой же анализ был проведен и для образца S2. Эволюция шероховатости со временем показана на рис.1.43b, символы. Как и выше, среднеквадратичная шероховатость была рассчитана для трех диапазонов пространственной частоты $p_{max} = 3 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$ (1), $p_{max} = 0.1 \text{ нм}^{-1}$ (2) и $p_{max} \rightarrow \infty$ (3). Рисунок 1.42b показывает зависимость экспоненты β от параметра t_S , найденную в результате минимизации функции невязки (1.225) для трех значений p_{max} . Как обсуждалось выше, высокочастотная часть спектра шероховатостей дает главный вклад в среднеквадратичное значение для образца S2, а радиус корреляции коротко-периодных шероховатостей составляет 150-200 нм. Поэтому значение динамической экспоненты β должно лежать вблизи точки пересечения кривых 1-3 (в соответствии с выбранным значением p_{max}) и кривой 4 или 5, рассчитанной с помощью уравнения (1.226) при $\xi_S = 200 \text{ нм}$ (4) или 150 нм (5). Как видно из рисунка, неопределенность в значении ξ_S практически не влияет на найденное значение $\beta = 0.23 \pm 0.02$, которое хорошо согласуется со значением β для образца S1.

Суммируя полученные результаты, мы можем утверждать, что эволюция шероховатости пленок Al_2O_3 , растущих на подложках S1 и S2, характеризуемых совершенно различным типом шероховатостей, во-первых, подчиняется скэйлинговому закону, причем скэйлинговые экспоненты не зависят от исходной шероховатости и, во-вторых, хорошо согласуется с моделью (1.220)-(1.222), которая изначально была разработана в рамках линейной теории роста пленок. Найденные скэйлинговые экспоненты $\alpha = 0.26 \pm 0.03$ и $\beta = 0.23 \pm 0.02$ соответствуют предсказаниям уравнения Курамото-Сивашинского (KS) [143]: $\alpha_{KS} = 0.25 - 0.28$ и $\beta_{KS} = 0.16 - 0.21$. Независимость скэйлинговых экспонент от кристаллографической ориентации подложек, наблюдаемое в наших экспериментах, скорее всего, связана с тем, что подложки не были очищены от слоя естественного окисла толщиной порядка 2 нм, который, вероятно, был аморфным, хотя этот вопрос требует дальнейших исследований.

1.4.6. Эволюция шероховатости кремниевых подложек при ионном травлении

В следующем цикле экспериментов была изучена эволюция шероховатости кремниевых подложек (100) при их травлении ионами Ag с энергией 1 кэВ. Угол падения ионов равнялся 35° , а скорость эрозии составляла 3.5 нм/сек. Использовались два типа подложек, характеризуемых разной среднеквадратичной высотой шероховатостей в диапазоне пространственных частот от $2 \cdot 10^{-4} \text{ нм}^{-1}$ до $2 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$, измеряемом в эксперименте: $\sigma = 0.15 \text{ нм}$ для подложки S1 и $\sigma = 0.28 \text{ нм}$ для подложки S2. Изменение PSD-функции при травлении показано на рис.1.44 для подложки S2, а эволюция среднеквадратичной шероховатости - на рис.1.45 для

обоих образцов.

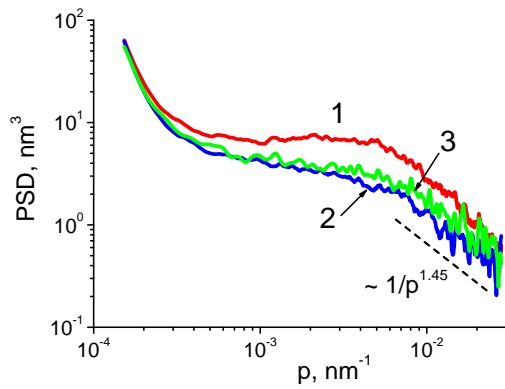


Рис. 1.44. Эволюция PSD-функции кремниевой подложки S2 при травлении ионами Ag. Показаны PSD-функции исходной подложки (1) и после травления в течении 26 с (2) и 348 с (3). Пунктирная кривая показывает асимптотику PSD-функции в области высоких пространственных частот. (Из [A51]).

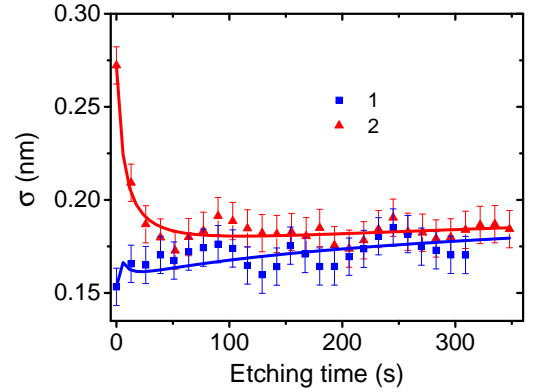


Рис. 1.45. Эволюция среднеквадратичной шероховатости кремниевых подложек S1 (1) и S2 (2) при травлении ионами Ag. Сплошные кривые показывают результат подгонки с использованием модели (1.220)-(1.222). (Из [A51]).

Рисунки наглядно показывают, что эволюция шероховатостей существенно зависит от начального значения σ . Для более гладкого образца S1 как PSD-функция, так и среднеквадратичная шероховатость практически не изменяются в процессе травления. В то же время для более шероховатого образца S2 наблюдается быстрое уменьшение начальной шероховатости в течение первых 30 сек травления, а затем очень медленное ее возрастание, связанное с развитием собственных шероховатостей и соответствующее динамике поверхности образца S1.

Как обычно, статическая экспонента α находилась из асимптотического поведения PSD-функции в области высоких пространственных частот, а ее значение $\alpha = 0.23 \pm 0.05$ оказалось одним и тем же для обоих образцов в пределах экспериментальной ошибки.

Для определения динамической экспоненты β использовалась модель (1.220)-(1.222), причем обе кривые $\sigma(t)$ подгонялись одновременно. Результат подгонки показан сплошными кривыми на рис.1.45 для значения $\beta = 0.07$. Ошибка определения динамической экспоненты оценена как ± 0.01 .

Тем самым, как и при напылении пленки Al_2O_3 , скейлинговые экспоненты оказались независимыми от шероховатости исходной подложки, хотя эволюция шероховатостей существенно различна. Простейшая модель (1.220)-(1.222) позволила описать как развитие шеро-

ховатостей подложки, так и ее сглаживание. Уравнение процесса травления, предсказывающее найденные скэйлинговые экспоненты, в литературе неизвестно.

1.5. Основные результаты главы 1

- Получено обобщение оптической теоремы при дифракции РИ от шероховатой слоисто-неоднородной среды.
- Доказано, что как Борновское приближение с искаженными волнами (DWBA), так и теория возмущений по высоте шероховатостей обеспечивают строгое выполнение закона сохранения энергии для непоглощающей среды, если индикатриса рассеяния в вакуум и в глубь среды рассчитываются в первом порядке DWBA или теории возмущений, а коэффициенты зеркального отражения и прохождения - во втором.
- Получено выражение для индикатрисы рассеяния от шероховатой поверхности в рамках строгого DWBA приближения, в котором, в отличие от подходов, описанных в литературе (теория Sinha), не делается никаких упрощающих предположений о структуре поля невозмущенной волны вблизи поверхности.
- Проведено сравнение расчетов индикатрисы рассеяния в рамках DWBA и теории возмущений. Показано, что теория возмущений применима в случае, когда параметр Рэлея $\eta_R = 2k\sigma \sin \theta_0$ не превышает единицу, т.е. σ не превышает 1.5 - 3 нм, если угол скольжения θ_0 порядка критического угла ПВО. Угол рассеяния может быть любым в случае фрактальной поверхности, когда PSD-функция убывает по обратному степенному закону при увеличении пространственной частоты. Показано, что существует оптимальная длина волны излучения $\lambda \sim 16\sigma$, при которой теория возмущений описывает индикатрису рассеяния с точностью не худшей 10% во всем диапазоне углов рассеяния для PSD-функции любого вида, причем максимальная регистрируемая в эксперименте пространственная частота достигает значения $p_{max} \sim 1/(8\sigma)$. Продемонстрировано, что теория возмущений зачастую лучше согласуется с точным DWBA по сравнению с упрощенным подходом Синха, наиболее часто используемым в литературе.
- Показано, что описание коэффициентов зеркального отражения R и интегрального рассеяния TIS с помощью фактора Дебая-Валлера, разложенного в ряд до σ^2 , справедливо для произвольной слоисто-неоднородной среды с конформными (повторяющимися по глубине) шероховатостями и для произвольного распределения их высот при условии,

что радиус корреляции шероховатостей в латеральном направлении достаточно большой, так что угловая ширина индикатрисы рассеяния меньше размера особенностей, наблюдаемых на кривой отражения. Это означает, что интегральный коэффициент отражения $R_{\Sigma} = R + \text{TIS}$ от среды с длиннопериодными конформными шероховатостями очень близок к коэффициенту отражения от идеально гладкой среды.

- Показано, что описание коэффициента отражения от границы раздела сред с исчезающе малым радиусом корреляции шероховатостей с помощью фактора Нево-Кроса справедливо только для нормального распределения высот шероховатостей. Если же это распределение даже слегка отличается от нормального, то коэффициент зеркально отражения вне области ПВО может отличаться на порядки величины от значения, предсказываемого формулой Нево-Кроса.
- Проанализирована взаимосвязь между четырьмя каналами дифракции рентгеновского излучения от шероховатой поверхности (рассеяние в вакуум и в глубь среды, зеркальное отражение и прохождение). Показано, что при достаточно большом угле скольжения зондирующего пучка (параметр $\mu_0 \equiv \pi\xi\theta_0^2/\lambda \gg 1$), когда ширина индикатрисы рассеяния мала по сравнению с углом θ_0 , каналы дифракции в вакуум и в глубь среды независимы в том смысле, что полное интегральное рассеяние в вакуум как раз соответствует убыли из зеркально отраженного пучка. Если же параметр μ_0 мал (индикатриса рассеяния "ложится" на поверхность), то взаимосвязь между каналами дифракции более сложная: при падении пучка в области ПВО убыль из зеркальной компоненты обеспечивает рассеяние как в вакуум, так и в глубь среды. Если пучок падает вне области ПВО, то уменьшение зеркально отраженной компоненты объясняется увеличением коэффициента прохождения (эффективный переходной слой, образованный как результат усреднения шероховатостей), а интенсивность рассеяния мала и обеспечивается некоторым уменьшением коэффициента прохождения.
- Проанализирована дифракция РИ от шероховатых поверхностей при предельно малых углах скольжения падающего излучения. Показано, что этот случай не может быть описан ни фактором Дебая-Валлера, ни фактором Нево-Кроса. В частности, коэффициент интегрального рассеяния TIS становится пропорциональным $\sin \theta_0$ в первой степени в отличие от формулы Дебая-Валлера, в которой $\text{TIS} \sim \sin^2 \theta_0$. В результате, если определить среднеквадратичную высоту шероховатости σ из измерений интегрального рассеяния в рамках теории Дебая-Валлера, то значение σ быстро увеличивается при

уменьшении угла скольжения θ_0 .

- Показано, что уже в рамках простейшей модели скачкообразной поверхности и в предположении, что на ней существуют мелкомасштабные шероховатости, теория возмущений объясняет появление пика и анти-пика Ионеды, а также возможность превышения интегрального коэффициента отражения над френелевским при падении пучка вне области ПВО.
- Проанализировано рассеяние РИ от шероховатой поверхности конечных размеров, когда индикатриса рассеяния является случайной функцией и зависит от конкретной реализации поверхности. Получено условие, когда конечными размерами поверхности можно пренебречь, т.е. индикатриса рассеяния от данной поверхности не отличается от усредненной по реализациям. Это условие зависит от угловой ширины приемной щели детектора, причем чем точнее прописывается форма индикатрисы рассеяния, тем больше статистическая неопределенность измерений, связанная с конечным размером поверхности.
- Рассмотрены особенности рассеяния рентгеновского излучения от тонкой шероховатой пленке, не имеющие аналогов при рассеянии от одиночной поверхности и обусловленные интерференционными эффектами. Среди них: отсутствие рассеяния от внешней поверхности пленки и интерференционное подавление рассеяния. Эти эффекты могут быть полезны как при исследовании шероховатостей пленки, так и при разработке рентгенооптических элементов с предельно малым рассеянием.
- В рамках теории возмущений проанализированы особенности рентгеновского рассеяния от шероховатой периодической многослойной структуры. В отличие от всех известных подходов, где индикатриса рассеяния представляется в виде двойной суммы парциальных амплитуд рассеяния от каждой границы раздела, это суммирование проведено в явном виде и получены компактные формулы, описывающие индикатрису рентгеновского рассеяния в предположении справедливости линейной модели роста пленок. Полученные выражения описывают все особенности рассеяния от многослойных структур, наиболее интересным среди которых являются квази-брэгговские пики, обусловленные интерференцией волн, рассеянных от разных границ раздела с коррелированными шероховатостями. Показано, что для извлечения информации о ростовых параметрах многослойных структур необходимо производить измерения рассеяния на большие углы. Имеющиеся в нашем распоряжении экспериментальные данные указывают на высо-

кую коррелированность межслоевых шероховатостей исследованных структур в измеряемом в эксперименте диапазоне пространственных частот.

- Выведено уравнение переноса лучевой эффективности при распространении пучка РИ вдоль шероховатой вогнутой поверхности в режиме шепчущей галереи. Показано, что влияние шероховатостей на эффективность передачи пучка не слишком велико: необходимо, чтобы высота шероховатостей не превышала 1.5-2 нм. Дело заключается в том, что рассеянное излучение не теряется, а в свою очередь поворачивается вогнутой поверхностью и дает существенный вклад в интенсивность выходящего излучения.
- На основе теории возмущений разработаны методики определения параметров шероховатости применительно к in-situ рефлектометрии растущих или эродирующих поверхностей без каких-либо априорных предположений о модели роста/эрозии. Среди них,
 - Определение скэйлинговых экспонент из анализа асимптотического поведения PSD-функции в области высоких пространственных частот, зависимости среднеквадратичной высоты шероховатостей от времени напыления/травления и наблюдения коллапса (сжатия) “перенормированных” PSD-функций в единую универсальную кривую, что иногда позволяет определить вид нелинейного дифференциального уравнения, описывающего процесс роста/эрозии. В частности, показано, что рост пленок Al_2O_3 соответствует предсказаниям уравнения Курамото-Сивашинокого, а ионное травление пленок вольфрама - уравнению Кардара-Паризи-Занга. В то же время, рост пленок вольфрама и ионное травление поверхности кремниевых подложек не соответствуют ни одному из уравнений, рассмотренных в литературе.
 - Однозначное определение двух PSD-функций (внешней поверхности пленки и кросс-корреляционной) из одной измеренной индикатрисы рассеяния при падении зондирующего пучка вне области ПВО.
 - Однозначное разделение шероховатостей внешней поверхности пленки на две составляющие, одна из которых связана с шероховатостью подложки, а вторая - собственная шероховатость пленки, индуцированная случайным характером процессов роста/эрозии.
 - Демонстрация независимости скэйлинговых экспонент, т.е. уравнения роста или эрозии, от шероховатости исходной подложки (на примере роста пленок Al_2O_3 и ионного травления кремниевой подложки).

- Продемонстрировано, что наиболее естественный и корректный подход к обработке данных по рентгеновскому рассеянию с целью извлечения информации о поверхностных шероховатостях состоит в использовании формул теории возмущений и определении PSD-функции непосредственно из измеренной индикатрисы рассеяния безо всяких предположений о ее виде и о распределении высот шероховатостей. Если поверхность является слишком грубой, то следует увеличить длину волны зондирующего пучка (например, перейти от ЖР диапазона длин волн к МР) с тем, чтобы остаться в пределах применимости теории возмущений, поскольку в ином случае необходимо быть уверенным в том, что высота шероховатостей распределена по нормальному закону, а функция корреляции имеет тот или иной модельный вид. Более общие и точные теоретические подходы, в свою очередь, необходимы для контроля условий применимости теории возмущений в конкретном эксперименте.

Обратные задачи рентгеновской рефлектометрии

2.1. Введение

Рассмотрим одномерное скалярное волновое уравнение:

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + [q^2 - k^2 \delta(z)] E = 0; \quad q = k \sin \theta; \quad k = \omega/c \quad (2.1)$$

$$\delta(z) \equiv 1 - \varepsilon(z) \rightarrow \begin{cases} \delta_+ = \text{const} \neq 0, & \text{если } z \rightarrow +\infty \\ 0, & \text{если } z \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (2.2)$$

где $\varepsilon(z)$ - диэлектрическая проницаемость, изменяющаяся по глубине образца и стремящаяся к постоянным значениям в вакууме и в глубине вещества, а θ - угол скольжения. Отметим, что (2.1) формально совпадает со стационарным одномерным уравнением Шредингера, если интерпретировать $q^2 \equiv E$ как энергию частицы, движущейся в потенциале $V(z) \equiv k^2 \delta(z)$.

Классическая обратная задача одномерного потенциального рассеяния формулируется следующим образом: необходимо реконструировать потенциал $V(z)$ (профиль диэлектрической проницаемости $\varepsilon(z) \equiv 1 - \delta(z)$ в нашем случае), по известной зависимости коэффициента отражения от энергии частицы (угла скольжения в нашем случае).

Применительно к академической обратной задаче квантовой механики получен целый ряд важных результатов и, прежде всего, доказана

Теорема 1 (Гельфанда-Левитана-Марченко [150, 151]). *Если функции $\delta(z)$ и $r(q)$ удовлетворяют ряду условий общего характера, то существует единственное $\delta(z)$ -распределение, обеспечивающее заданный амплитудный коэффициент отражения $r(q)$ во всем диапазоне значений $q \in (-\infty, +\infty)$, причем функция $\delta(z)$ определяется однозначно как решение уравнения Гельфанда-Левитана-Марченко (ГЛМ).*

Среди необходимых условий справедливости этой теоремы для нас наиболее критичными являются следующие:

1. Теорема подразумевает измерения (комплексного) амплитудного коэффициента отражения $r(q)$, в то время как в рентгеновских экспериментах измеряется, как правило, только его абсолютное значение $R(q) = |r(q)|^2$.
2. Теорема подразумевает измерения коэффициента отражения во всем (бесконечном) интервале значений параметра $q \in [0, \infty)$, в то время как реальные измерения могут быть

выполнены лишь в конечном интервале значений $q \in [q_{min}, q_{max}]$, где уж во всяком случае, $q_{max} \leq k$.

3. Теорема справедлива только для вещественных функций $\delta(z)$, т.е. предполагается, что поглощения в веществе нет.
4. Функция $\delta(z)$ должна стремиться к нулю в обеих асимптотических областях $z \rightarrow \pm\infty$, а более точно, должен существовать следующий интеграл:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\delta(z)| \cdot (1+z) dz < \infty \quad (2.3)$$

В то же время практически всегда мы имеем дело со структурой нанесенной на подложку, т.е. асимптотика диэлектрической проницаемости удовлетворяет несимметричным условиям (2.2), так что интеграл (2.3) не существует. В течение последних десятилетий были приложены значительные усилия к решению обратной задачи для одномерного потенциала, имеющего более общий вид по сравнению с (2.3), но при наличии некоторой дополнительной информации о поведении этого потенциала (см., например, [152]-[154] и ссылки в этих работах). В частности, для потенциалов, неизвестных лишь на ограниченном интервале Z-оси, были получены различные доказательства теоремы единственности, однако аналога ГЛМ-уравнения до сих пор не найдено.

Каждый из отмеченных факторов делает невозможным однозначное восстановление $\delta(z)$ -распределения, даже если пренебречь ошибками измерения коэффициента отражения. Иллюстрацией этого утверждения служит рис.2.1. Здесь показаны два совершенно разных $\delta(z)$ -распределения (b и c), которые, тем не менее, приводят к одинаковому коэффициенту отражения (с относительной разницей менее 0.1%) в интервале углов скольжения от 0 до 6.5° на длине волны 0.154 нм (см. рис. 2.2). Вне этого интервала коэффициенты отражения сильно отличаются (на несколько порядков величины). Более того, можно нарисовать сколько угодно профилей $\delta(z)$, приводящих к точно такому же коэффициенту отражения в ограниченном интервале углов скольжения $\theta \in [0, 6.5^\circ]$.

Тем самым, для однозначного восстановления профиля диэлектрической проницаемости необходима дополнительная информация об исследуемом объекте или, иными словами, та или иная модель отражающей структуры. Простейший и наиболее широко используемый подход состоит в аппроксимации распределения $\delta(z)$ той или иной функцией с большим или меньшим числом неизвестных параметров, которые находятся путем подгонки рассчитанной кривой отражения к экспериментальной. Этот подход действительно работает, если внутренняя структура исследуемого образца достаточно хорошо известна a priori [155–157]. В

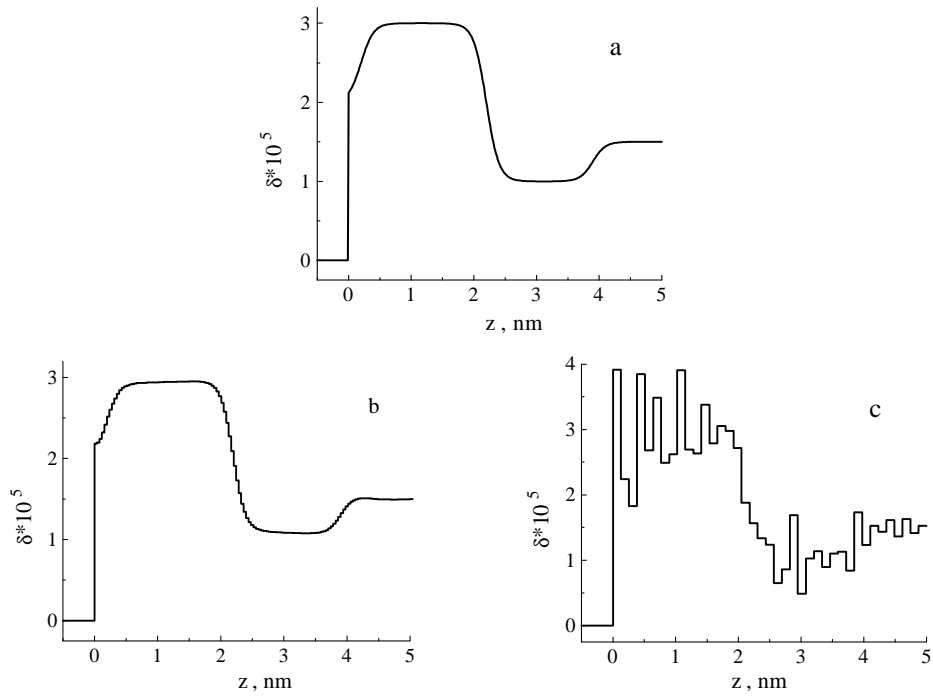


Рис. 2.1. Исходный (а) и два реконструированных (b и c) профиля диэлектрической проницаемости $\delta(z)$. При реконструкции использовалась часть кривой отражения, показанной кружками на рис.2.2, вплоть до угла скольжения $\theta = 6.5^\circ$.

качестве примера рассмотрим отражение ЖР излучения ($\lambda = 0.154$ нм) от двух пленок HfO_2 разной толщины, нанесенных методом послойного атомарного наслаивания (ALD = Atomic Layer Deposition) на кремниевые подложки (рис.2.3а, кружки). В качестве модельной выбрана структура $\text{C}/\text{HfO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$, которая учитывает окисный слой на поверхности подложки и адгезионный слой, всегда образующийся на любой поверхности при хранении образца на воздухе и состоящий, главным образом из молекул углеводородов и воды. Параметрами подгонки служили толщина и плотность каждой пленки, а также толщина "эффективного" переходного слоя, образующегося на каждой границе раздела из-за влияния мелкомасштабных шероховатостей и возможной имплантации или диффузии материалов. Общее число подгоночных параметров равнялось 10. В рамках этой модели точность подгонки экспериментальных кривых отражения практически идеальная (сплошные кривые на рис.2.3а), а реконструированные профили поляризуемости $\delta(z)$ полностью соответствуют друг другу, включая тонкую структуру адгезионных и окисных слоев (рис.2.3b), что, на наш взгляд, свидетельствует о корректности найденного решения обратной задачи.

Контрпример показан на рис.2.4, где представлены результаты исследования плёнки Al_2O_3 , нанесённой на Si-подложку методом ALD. Как и в рассмотренном выше случае, для описания экспериментальной кривой отражения была использована трёхслойная модель

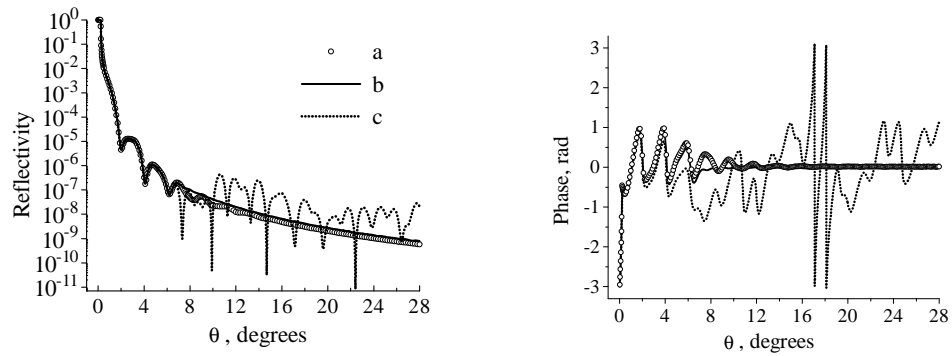


Рис. 2.2. ”Экспериментальный” (а) и рассчитанные (b и c) коэффициенты отражения, а также фаза амплитудного коэффициента отражения в зависимости от угла скольжения падающего излучения ($\lambda = 0.154$ нм). Обозначения a, b и c соответствуют обозначениям профиля диэлектрической проницаемости на рис.2.1.

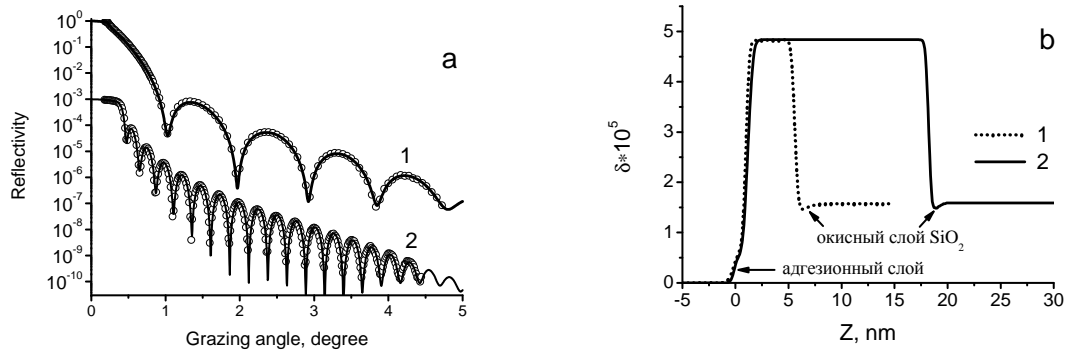


Рис. 2.3. (а) Измеренный коэффициент отражения (кружки) на длине волны $\lambda = 0.154$ нм в зависимости от угла скольжения падающего пучка от пленок HfO_2 толщиной около 5 нм (1) и 17 нм (2). Сплошные кривые демонстрируют точность подгонки с использованием простейшей модели пленки. Кривые 2 сдвинуты по оси ординат на фактор 10^3 . (b) Реконструированные профили диэлектрической проницаемости исследованных пленок.

$\text{C}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2/\text{Si}$. Восстановленный профиль диэлектрической проницаемости приведен на рис.2.4b, кривая 1. На первый взгляд, в логарифмическом масштабе точность подгонки рассчитанной кривой отражения под экспериментальную вполне приемлема. Однако более внимательное сопоставление модельной кривой отражения с экспериментальными данными в области малых углов скольжения (вставка к рис.2.4а) явно показывает, что осцилляции на модельной кривой находятся в противофазе с осцилляциями на экспериментальной кривой. Следовательно, в данном случае процедура модельной подгонки не даёт правильного результата, а возможности усовершенствования модели неочевидны.

Если не удастся построить адекватную модель образца, то следует использовать так называемые модельно независимые подходы, основанные на минимальной информации или минимальных предположениях об исследуемом объекте. К настоящему моменту разработано

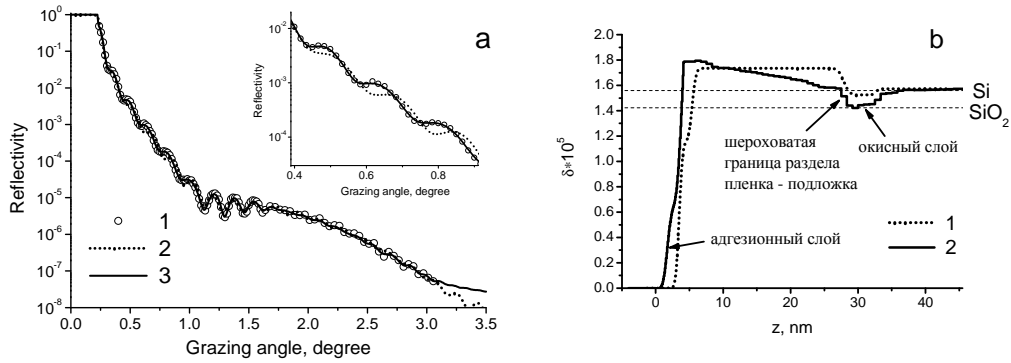


Рис. 2.4. (а) Измеренный коэффициент отражения ($\lambda = 0.154$ нм) в зависимости от угла скольжения от пленки Al_2O_3 (1). Представлены результаты подгонки с использованием простейшей модели пленки (2) и в рамках модельно независимого подхода (3). (б) Профили диэлектрической проницаемости, реконструированные с использованием простейшей модели пленки (1) и в рамках модельно независимого подхода (2).

несколько безмодельных подходов к восстановлению профиля диэлектрической проницаемости по данным рентгеновской или нейтронной рефлектометрии. Из наиболее общих подходов можно указать метод максимума энтропии и спектральный анализ по Байесу [158], параметризацию профиля диэлектрической проницаемости с использованием кубических В-сплайнов или разложения по синусам/косинусам [159], а также итерационные алгоритмы, основанные либо на линеаризации интегрального уравнения для коэффициента отражения [160], либо на применении регуляризационного подхода по Тихонову [161]. Итерационные алгоритмы используются и для реконструкции профиля электронной плотности и распределения деформаций по глубине кристаллических гетероструктур (см. [162, 163] и ссылки в них). Тем не менее, как отмечалось в [158, 160], ни один из этих подходов не снимает проблему многозначности решения обратной задачи.

В [164] разработан подход, позволяющий, по мнению его авторов, определить все возможные физически обоснованные решения обратной задачи рефлектометрии. В этом подходе, основанном на применении генетического алгоритма совместно с алгоритмом восстановления фазы амплитудного коэффициента отражения, количество возможных решений существенно ограничивается за счет наложения на них ряда общих условий.

Похожим образом подход, разработанный в настоящей работе и обсуждаемый в разделе 2.2, позволяет выбрать из неограниченного количества возможных решений такие, которые удовлетворяют требуемому (моделируемому) поведению амплитудного коэффициента отражения при больших значениях параметра $q = k \sin \theta$, включая нефизическую область $q > k$. Необходимость такого выбора иллюстрируется рис.2.2. Действительно, для профи-

ля b диэлектрической проницаемости асимптотическое поведение коэффициента отражения при больших θ , в отличие от профиля c , очень близко к коэффициенту отражения от исходного профиля. Именно это обстоятельство, как будет видно из дальнейшего изложения, и позволило реконструировать исходный профиль c с высокой точностью. Моделирование коэффициента отражения в асимптотической области оказывается возможным, если известны особые точки функции $\delta(z)$, где или сама эта функция, или ее n -ная производная $\delta^{(n)}$ испытывает разрыв. В свою очередь, информация об особых точках может быть получена из измеренной части кривой отражения. Более того, оказывается, что число подобных решений крайне ограничено и составляет ровно четыре в случае, когда различны все расстояния между особыми точками, причем два из них приводят к нефизическим для ЖР диапазона значениям диэлектрической проницаемости, превышающим единицу.

Одним из ключевых факторов, приводящих к многозначности решения обратной задачи рефлектометрии, является отсутствие информации о фазе отраженной волны. Действительно, фазы амплитудного коэффициента отражения на рис.2.2 для профилей b и c заметно отличаются при $\theta \sim 4 - 6.5^\circ$, хотя его абсолютные значения совпадают вплоть до $\theta = 6.5^\circ$. Поэтому представляется чрезвычайно важным решение фазовой проблемы рентгеновской рефлектометрии: можно ли и каким образом определить фазу амплитудного коэффициента отражения, зная его модуль.

Вообще говоря, воспользовавшись теоремой Коши, можно установить связь между комплексным амплитудным коэффициентом отражения и его модулем, а именно, оказывается справедливой

Теорема 2. *Если абсолютное значение коэффициента отражения $R(q) = |r(q)|^2$ известно при всех $q \in (-\infty, +\infty)$ и, кроме того, известно расположение полюсов α_n и нулей β_m функции $r(q)$ в верхней части комплексной q -плоскости (ВКП), то связь между комплексным амплитудным коэффициентом отражения и его модулем определяется следующей формулой:*

$$r(q) = \sqrt{R(q)} \exp \left[\frac{1}{2\pi i} \text{v.p.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\ln R(\kappa)}{\kappa - q} d\kappa \right] \prod_n \frac{q - \alpha_n^*}{q - \alpha_n} \cdot \prod_m \frac{q - \beta_m}{q - \beta_m^*} \quad (2.4)$$

Теорема 2 означает, что в общем случае невозможно определить амплитудный коэффициент отражения по его модулю даже в гипотетическом случае проведения измерений в бесконечном интервале значений q , поскольку ни полюса, ни нули амплитудного коэффициента отражения не известны а priori. Отметим, что полюса в ВКП соответствуют связанным состояниям в квантовой механике или волноводным модам в электродинамике. Ясно, что

волноводные моды (связанные состояния) могут существовать, если только функция $\delta(z)$ отрицательна в некотором интервале значений z . В то же время в рентгеновском диапазоне функция $\delta(z)$ положительна, исключая, быть может, очень узкие спектральные интервалы вблизи краев фотопоглощения элементов, составляющих структуру. Поэтому, как правило, амплитудный коэффициент отражения рентгеновского излучения не имеет полюсов в ВКП, т.е. функция $r(q)$ является аналитической в ней, однако проблема нулей все равно сохраняется. В настоящее время фазовая проблема решается, как правило, в рамках упрощенного борновского или БПИВ приближения. Однако даже в этих простейших случаях существует неоднозначность в определении фазы амплитудного коэффициента отражения [13].

Тем самым, точное решение фазовой проблемы даже для каких-то специальных случаев имеет фундаментальное значение. На сегодняшний день, по-видимому, известен только один точный подход к фазовой проблеме в нейтронной и рентгеновской рефлектометрии (см. [165] и ссылки в ней). Он заключается в следующем. Предположим, что три идентичные слоистые структуры нанесены на подложки из разных материалов, либо, наоборот, три идентичных структуры покрыты пленками различных веществ. Тогда, измеряя модуль коэффициента отражения от каждой из этих трех систем, возможно найти и фазу амплитудного коэффициента отражения от исследуемой структуры. Хотя этот подход и является точным с математической точки зрения, он имеет целый ряд недостатков для практических применений. Во-первых, подход справедлив только в отсутствие поглощения. Во-вторых, оптические свойства подложки или покрывающей пленки, включая амплитудный коэффициент отражения, должны быть известны а priori. В-третьих, необходимо гарантировать абсолютную идентичность исследуемой структуры, несмотря на различные подложки или покрывающие пленки, что не представляется реалистичным из-за, например, образования отличающихся интерслоев между исследуемой структурой и различными подложками или покрывающими пленками.

В разделе 2.3 диссертации описывается подход, который свободен от всех этих недостатков и, более того, представляется весьма подходящим для современных технологий синтеза слоистых структур, таких как магнетронное распыление материалов, электронно - лучевое испарение, молекулярно - лучевая эпитаксия и т.д. Подход применим для анализа слоистых структур, коэффициент отражения от которых измеряется *in situ* в процессе их роста, так что в момент времени t известен как коэффициент отражения $R(t) = |r(t)|^2$, так и его производная dR/dt . Оказывается, что этих двух чисел достаточно, чтобы точно определить вещественную $\text{Re}[r(t)]$ и мнимую $\text{Im}[r(t)]$ части амплитудного коэффициента отражения $r(t)$ в тот же момент времени.

В настоящее время две основные задачи рентгеновской рефлектометрии, а именно, (а) определение статистических параметров шероховатости границ раздела и (б) реконструкция профиля диэлектрической проницаемости решаются, как правило, независимо друг от друга. В частности, при исследовании шероховатостей обычно используется простейшая модель отражающей среды, например, система пленок постоянной плотности на однородной подложке без учета интерслоев на границах раздела соседних веществ, образующихся из-за диффузии, имплантации и химических реакций, или окисных и адгезионных слоев на поверхности образца. Точно так же, при реконструкции профиля влияние шероховатостей на коэффициент отражения или вовсе не принимается во внимание, или учитывается с использованием упрощенных подходов, например, путем введения факторов Неве-Кроса или Дебая-Валлера. В то же время, совершенно ясно, что шероховатости границ раздела изменяют профиль кривой отражения. Это, во-первых, приводит к деформациям реконструированного профиля диэлектрической проницаемости, таким как кажущемуся сглаживанию границ раздела и, во-вторых, к появлению проблем с определением и анализом особых точек в распределении $\delta(z)$. Аналогично, распределение диэлектрической проницаемости по глубине может существенно изменить распределение поля волны внутри образца, а значит, привести и к изменению картины рассеяния. Тем самым, наиболее последовательный подход к исследованию 3D структуры среды состоит в одновременном восстановлении как профиля диэлектрической проницаемости по глубине, так и определении статистических параметров шероховатости границ раздела.

Такой самосогласованный подход был разработан и обсуждается в разделе 2.4. Подход основан на итерационной процедуре, так что параметры шероховатости, найденные на предыдущей итерации, принимаются во внимание при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости на последующей итерации и, наоборот, найденный профиль $\delta(z)$ учитывается при определении PSD-функций исследуемого образца.

Даже если удастся реконструировать профиль диэлектрической проницаемости на основе анализа кривой отражения, измеренной на фиксированной длине волны, оптические свойства образца еще не полностью определены, поскольку, вообще говоря, невозможно предсказать распределение $\varepsilon(z)$ на другой длине волны. Чтобы полностью охарактеризовать образец, необходимо определить распределения концентраций всех химических элементов, составляющих образец. Только в этом случае распределение диэлектрической проницаемости по глубине может быть рассчитано для любой длины волны, лежащей в рентгеновском диапазоне, по крайней мере.

Коэффициент отражения слоисто-неоднородной среды полностью определяется распределением диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z, E) \equiv 1 - \chi(z, E)$, где комплексная поляризуемость χ зависит от энергии фотонов. Если образец состоит из нескольких химических элементов A, \dots, B , то распределение поляризуемости по глубине представляется в виде [27, 28]

$$\chi(z, E) \sim E^{-2} [C_A(z)f_A(E) + \dots + C_B(z)f_B(E)] \quad (2.5)$$

где $C_j(z)$ - распределение концентраций по глубине, а $f_j(E)$ - комплексный фактор атомного рассеяния j -того элемента. Значения $f(E)$ затабулированы в зависимости от энергии для всех химических элементов [166].

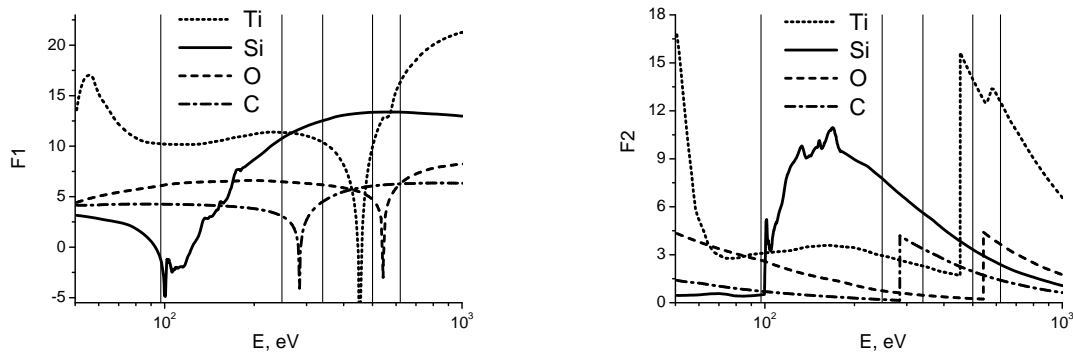


Рис. 2.5. Вещественные (F1) и мнимые (F2) части фактора атомного рассеяния нескольких химических элементов в МР диапазоне. Тонкие вертикальные прямые показывают значения энергии фотонов, на которых были проведены измерения коэффициента отражения, описанные в разделе 2.5.

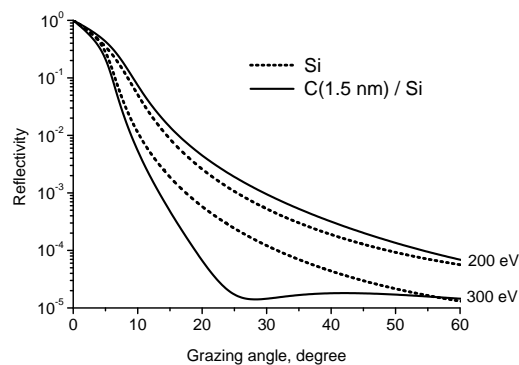


Рис. 2.6. Коэффициент отражения от кремниевой подложки (пунктирные кривые) и от пленки углерода толщиной 1.5 нм на подложке Si (сплошные кривые) для двух разных энергий фотонов (200 эВ и 300 эВ), лежащих ниже и выше края поглощения углерода.

На рис.2.5 показаны факторы атомного рассеяния в МР диапазоне для нескольких химических элементов (Ti, Si, O, C). Рисунок ясно демонстрирует, что вклад в поляризуемость

(2.5) от разных элементов может быть совершенно разным в разных спектральных диапазонах, что может приводить к существенному изменению формы кривой отражения $R(\theta)$. Пример представлен на рис.2.6. Сплошные кривые показывают кривые отражения от тонкой пленки C (плотность 2.2 г.см^3), нанесенной на кремниевую подложку (2.42 г/см^3). Для сравнения показаны и кривые отражения от исходной подложки (пунктирные кривые). Разница в кривых отражения от C/Si образца и Si подложки слабо выражена при энергии фотонов $E = 200 \text{ эВ}$, лежащей ниже края поглощения углерода, так что обнаружить наличие тонкой пленки на поверхности подложки весьма проблематично. В то же время, разница между кривыми отражения очень хорошо выражена (больше, чем на порядок величины) при энергии фотонов $E = 300 \text{ эВ}$, расположенной выше края поглощения углерода. Более того, даже форма кривых совершенно разная с ясно различимым интерференционным минимумом на кривой отражения от C/Si образца. Отметим, что положение минимума определяется не только толщиной пленки, как это обычно предполагается при измерениях в ЖР диапазоне, но и разностью фаз амплитудного коэффициента отражения от обеих границ раздела углеродной пленки. При переходе через край поглощения углерода фаза амплитудного коэффициента отражения резко меняется.

Тем самым, проводя измерения кривых отражения на разных длинах волн МР излучения и используя (2.5), можно попытаться реконструировать профили концентраций всех химических элементов, составляющих образец, а не только профиль диэлектрической проницаемости на фиксированной длине волны. Этот подход будет описан в разделе 2.5.

2.2. Реконструкция профиля диэлектрической проницаемости по измеренной кривой отражения

2.2.1. Общие соображения

Назовем, что $\delta(z)$ -распределение имеет особую точку n -ного порядка в точке z , если функция $\delta(z)$ вместе с $n - 1$ производной $\delta'(z), \dots, \delta^{(n-1)}(z)$ являются непрерывными функциями в этой точке, в то время как n -ная производная $\delta^{(n)}(z)$ претерпевает скачок в точке z , т.е. $\Delta^{(n)}(z) \equiv \delta^{(n)}(z + 0) - \delta^{(n)}(z - 0) \neq 0$. В частности, сама функция $\delta(z)$ изменяется скачкообразно в особой точке нулевого порядка.

Подход, рассматриваемый в этом разделе, будет ограничен следующими упрощающими предположениями:

- Будем предполагать, что $\delta(z)$ -распределение имеет особые точки, т.е. случай аналити-

ческой функции $\delta(z)$ рассматриваться не будет.

- Диэлектрическая проницаемость равна 1, т.е. $\delta(z) \equiv 0$, при $z < z_{min}$ и равна постоянно-му значению (диэлектрической проницаемости материала подложки), т.е. $\delta(z) \equiv \delta_+ \neq 1$ при $z > z_{max}$.
- Все особые точки имеют один и тот же порядок.
- Поглощением рентгеновского излучения в веществе будем пренебрегать, т.е. будем считать, что $\text{Im}\delta(z) \equiv 0$. В противном случае необходимо найти две неизвестные функции $\text{Re}\delta(z)$ и $\text{Im}\delta(z)$. Ясно, что сложность решения обратной задачи значительно возрастает в этом случае, а доказательство единственности решения становится неизмеримо проблематичней.

Наш подход основывается на следующей последовательности утверждений:

1. Предположим, что амплитудный коэффициент отражения $r(q)$ известен в некоторой области ВКП. Тогда, продолжая аналитически функцию $r(q)$ на всю ВКП и, в пределе, на вещественную q -ось, мы приходим к условиям теоремы единственности и, по крайней мере, в принципе, можем однозначно восстановить распределение $\delta(z)$.
2. Предположим, что известна асимптотика амплитудного коэффициента отражения при больших (комплексных) q , т.е. $r(q)$ известна *приблизженно* в некоторой части ВКП. Известно, что аналитическое продолжение представляет собой плохо обусловленную задачу, т.е. небольшая неточность в функции $r(q)$, заданной в некоторой области ВКП, может привести к большой ошибке в аналитическом продолжении $r(q)$ [140]. Однако в нашем случае имеется жесткое регуляризирующее условие, налагаемое на функцию $r(q)$, а именно, экспериментально измеренное значение $R(q) = |r(q)|^2$ известно на некотором интервале вещественной q -оси. Это обстоятельство приводит к возможности аналитического продолжения функции $r(q)$ на всю ВКП и, следовательно, к однозначному восстановлению $\delta(z)$ -распределения. Это утверждение является ключевым для нашего подхода, но пока не доказано в виде математической теоремы. Тем не менее, многочисленные примеры успешной реконструкции модельных профилей диэлектрической проницаемости позволяет нам утверждать, что это утверждение справедливо.
3. Асимптотическое поведение амплитудного коэффициента отражения $r(q)$ при больших (комплексных) q полностью определяется особыми точками функции $\delta(z)$. В свою очередь, информация об особых точках может быть извлечена и, следовательно, поведение

$r(q)$ при больших q может быть предсказано по измеренной части кривой отражения $R(q)$.

4. Разработана вычислительная процедура, позволяющая выбрать (из бесконечного множества возможных) тот профиль диэлектрической проницаемости, который приводит не только к заданному (измеренному) коэффициенту отражения $R(q)$ при $q \leq q_{max}$, но и к заданному (моделированному) амплитудному коэффициенту отражения $r(q)$ при $q > q_{max}$.
5. Существует лишь конечное число различных амплитудных коэффициентов отражения $r(q)$, приводящих к заданному значению его модуля $R(q) = |r(q)|^2$ при $q \leq q_{max}$, если известно поведение диэлектрической проницаемости в точках разрыва.
6. В результате, имеется конечное число функций $\delta(z)$, приводящих к заданному значению его модуля $R(q) = |r(q)|^2$ при $q \leq q_{max}$, если известно поведение диэлектрической проницаемости в особых точках. Основываясь на общих физических соображениях и/или дополнительных экспериментах, профиль диэлектрической проницаемости может быть реконструирован однозначно.

2.2.2. Асимптотика коэффициента отражения

Исходя из борновского приближения для коэффициента отражения, легко убедиться что асимптотика амплитудного коэффициента отражения $r(q)$ при $|q| \rightarrow \infty$ определяется значениями скачков $\Delta^{(n)}(z_j)$ в особых точках z_1, \dots, z_m и расстояниями между этими точками:

$$r(q) \simeq -k^2 \left(\frac{i}{2q} \right)^{n+2} \sum_{j=1}^m \Delta^{(n)}(z_j) \exp(2iqz_j) \quad (2.6)$$

$$\Delta^{(n)}(z_j) = \frac{d^n \delta}{dz^n}(z_j + 0) - \frac{d^n \delta}{dz^n}(z_j - 0)$$

где суммирование проводится по всем точкам разрыва n -ного порядка.

Сравнивая (2.6) с более общим асимптотическим представлением коэффициента отражения, полученным в [167], можно заключить, что (2.6) справедливо пока эффекты поглощения и преломления не слишком велики, а именно, общая толщина L приповерхностного слоя структуры, где только и меняется диэлектрическая проницаемость, не слишком велика: $L \ll \lambda \sin \theta / |1 - \varepsilon|$.

Главный член асимптотики для модуля коэффициента отражения, очевидно, равен

$$R(q) \simeq \frac{k^4}{(2q)^{2n+4}} \left\{ \sum_j [\Delta^{(n)}(z_j)]^2 + 2 \sum_{l < j} \Delta^{(n)}(z_j) \Delta^{(n)}(z_l) \cos(2qd_{jl}) \right\} \quad (2.7)$$

Тем самым, модуль коэффициента отражения ведет себя как $R(q) \sim 1/q^{n+4}$ при больших q , если $\delta(z)$ -распределение имеет точки разрыва n -ного порядка. Отметим, что $R(q)$ спадает экспоненциально, если функция $\delta(z)$ бесконечно дифференцируема при всех z [167].

Введем теперь следующую функцию:

$$F(x) = \frac{2^{2n+4}}{k^4(q_{max} - q_{min})} \int_{q_{min}}^{q_{max}} [q^{2n+4}R(q) - C] \cos(2qx) dq \quad (2.8)$$

$$C = \frac{1}{q_{max} - q_{min}} \int_{q_{min}}^{q_{max}} q^{2n+4}R(q) dq$$

где интегрирование проводится по измеряемому интервалу значений параметра $q = k \sin \theta$. Воспользовавшись выражением (2.7), получим

$$F(x) = \sum_{j < i} \Delta^{(n)}(z_j) \Delta^{(n)}(z_i) \frac{\sin [(q_{max} - q_{min})(x - h_{ij})]}{(q_{max} - q_{min})(x - h_{ij})} \cos [(q_{max} - q_{min})(x - h_{ij})] + \text{(нерезонансные члены)} \quad (2.9)$$

где $h_{ij} = z_i - z_j$ - расстояния между особыми точками. Функция $F(x)$ осциллирует около нулевого значения, причем положения максимумов и минимумов зависят, вообще говоря, от значений q_{max} и q_{min} . В то же время имеется последовательность стабильных экстремумов, расположенных в фиксированных точках $x = h_{ij}$ независимо от значений q_{max} и q_{min} , причем значение $F(x)$ в этих точках равно

$$F(h_{ij}) = \Delta^{(n)}(z_i) \Delta^{(n)}(z_j) + \text{(нерезонансные члены)} \quad (2.10)$$

и определяется значениями скачков функции $\delta(z)$ (либо ее производной) в особых точках. Нерезонансные члены уменьшаются пропорционально $1/(q_{max} - q_{min})$ при увеличении q_{max} .

Тем самым, анализируя функцию $F(x)$ при разных q_{max} и q_{min} , оказывается возможным определить расстояния между всеми особыми точками. Пример дан на рис.2.7. Распределение $\delta(z)$ показано на рис.2.7а, а кривая отражения (на длине волны $\lambda = 0.154$ нм) - на рис.2.7б. Анализ кривой отражения позволяет заключить, что, во-первых, коэффициент отражения уменьшается в среднем как $1/q^4$ при больших q (следовательно, имеется как минимум, одна особая точка нулевого порядка) и, во-вторых, относительная амплитуда осцилляций остается неизменной при увеличении q (следовательно, имеется не меньше двух особых точек нулевого порядка). Функция $F(x)$, рассчитанная для несколько различных q_{max} и q_{min} , показана на рис.2.7с. Ясно видны отмеченные стрелками стабильные экстремумы функции $F(x)$, положение и значение которых не зависит от q_{max} и q_{min} . Они расположены в точках

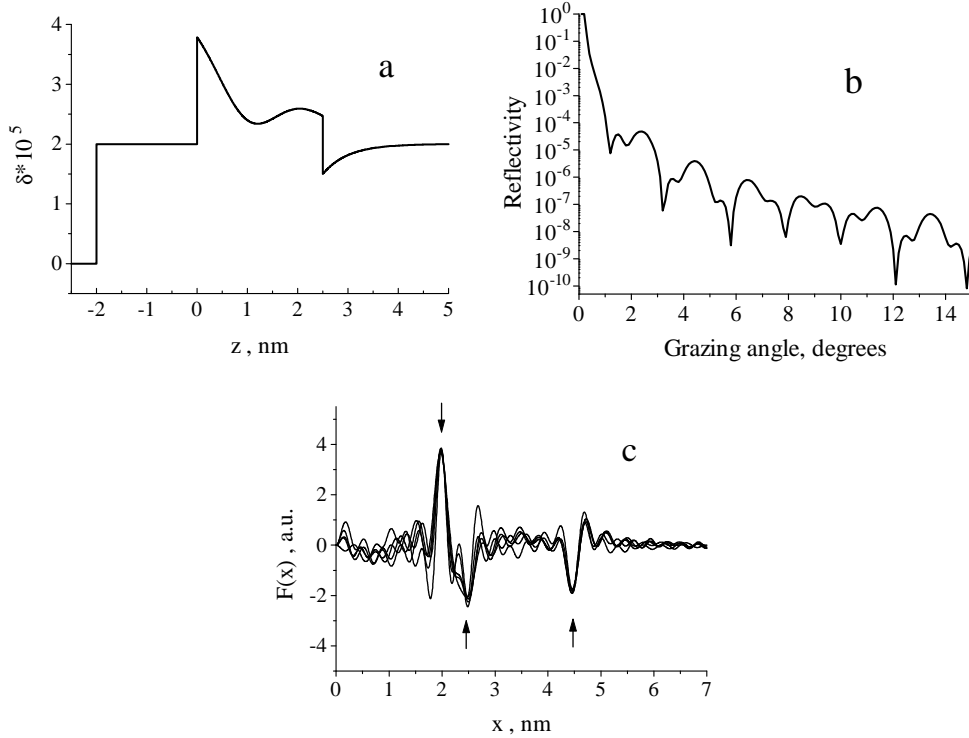


Рис. 2.7. Модельный профиль диэлектрической проницаемости $\delta(z)$ (а), кривая отражения на длине волны $\lambda = 0.154$ нм (б) и набор функций $F(x)$, умноженных на 10^{10} и рассчитанных для разных значений q_{max} и q_{min} (в). Стационарные пики указаны стрелками.

$x_1 = 2$, $x_2 = 2.5$ и $x_3 = 4.5$ нм. Следовательно, заключаем, что распределение $\delta(z)$ имеет три особых точки нулевого порядка, расстояния между которыми равны 2 нм и 2.5 нм.

Кроме того, можно найти еще и сумму

$$\sum_j [\Delta^{(n)}(z_j)]^2 = \frac{2^{2n+4}}{k^4} C + (\text{нерезонансные члены}) \quad (2.11)$$

и, рассматривая (2.10)-(2.11) как систему уравнений для неизвестных параметров $\Delta^{(n)}(z_j)$, определить значения скачков распределения $\delta(z)$ во всех особых точках, хотя, во-первых, значения $\Delta^{(n)}(z_j)$ могут быть найдены только с точностью до знака (поскольку уравнения (2.10)-(2.11) инварианты по отношению к замене $\Delta^{(n)}(z_j) \Rightarrow -\Delta^{(n)}(z_j)$ сразу для всех j) и, во-вторых, проведенный анализ не позволяет определить последовательность расположения точек разрыва по глубине.

Тем не менее, анализ измеренной части кривой отражения позволяет извлечь информацию о количестве и порядке особых точек распределения $\delta(z)$, расстояниях между ними и значениях скачков функции $\delta(z)$ в особых точках, т.е. позволяет сформулировать общую модель распределения диэлектрической проницаемости, описывающую все особенности, наблюдаемые на кривой отражения. Для того, чтобы полностью реконструировать профиль

$\delta(z)$, необходимо использовать специальную вычислительную процедуру.

Отметим, что введенная выше функция $F(x)$ отличается от традиционно используемой в рентгеновской рефлектометрии автокорреляционной функции профиля диэлектрической проницаемости [158] двумя особенностями. Во-первых, мы нормировали эту функцию таким образом, чтобы резонансные слагаемые в (2.10) не зависели от интервала интегрирования. Такая нормировка приводит к наличию стабильных экстремумов и позволяет (а) ясно отделить пики, соответствующие расстояниям между особыми точками, от побочных и (б) определить количественно значения произведений скачков диэлектрической проницаемости $\Delta_i \Delta_j$ в особых точках. Во-вторых, мы ввели слагаемое $C \neq 0$ в подинтегральное выражение для увеличения чувствительности метода. Проиллюстрируем последнее утверждение на следующем примере.

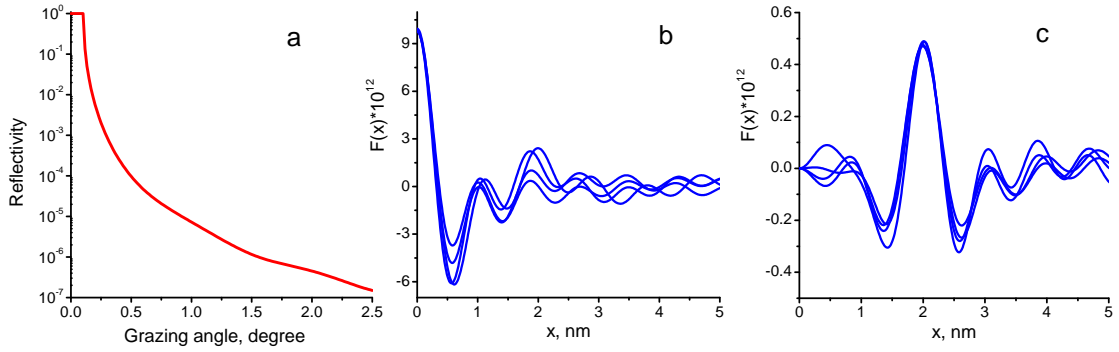


Рис. 2.8. (а) Кривая отражения ($E = 17.5$ кэВ) от пленки Si толщиной 2 нм, нанесенной на монокристаллическую кремниевую подложку. Плотность пленки составляет 95% от плотности подложки. (б) и (с) Определение толщины пленки с использованием традиционной автокорреляционной функции профиля диэлектрической проницаемости (б) или выражения (2.8) (с).

Предположим, что мы анализируем кривую отражения ($E = 17.5$ кэВ) от пленки Si толщиной 2 нм, нанесенной на кремниевую же подложку, причем плотность пленки лишь на 5% меньше плотности подложки. Предполагая, что кривая отражения измерена вплоть до угла скольжения $\theta_{max} = 2.5^\circ$ (рис.2.8а), и вычисляя функцию $F(x)$ в традиционной форме при $C = 0$, мы получим кривые с хорошо выраженным максимумом при $x = 0$, значение которого равно $F(0) = \sum_j [\Delta(z_j)]^2$. В то же время побочные осцилляции этого пика при $x > 0$ затухают и не позволяют различить пленку (рис.2.8б). Если же мы используем функцию $F(x)$ в форме (2.8) с введенным слагаемым $C \neq 0$, то высокий пик при $x = 0$ исчезает и ясно наблюдается стабильный максимум при $x = 2$ нм (рис.рис.2.8с).

2.2.3. Вычислительный алгоритм

С вычислительной точки зрения проблема состоит в том, чтобы из множества профилей диэлектрической проницаемости, приводящих к той же самой кривой отражения $R(q)$ в измеряемом диапазоне параметра $q = k \sin \theta \in [0, q_{max}]$, выбрать такое распределение $\delta(z)$, которое обеспечивает требуемое асимптотическое поведение амплитудного коэффициента отражения (2.6) при $q > q_{max}$.

Рассмотрим обычный Борновский ряд для амплитудного коэффициента отражения

$$r(q) \simeq -\frac{ik^2}{2q} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(2iqz) \delta(z) dz + (\text{члены более высокого порядка}) \quad (2.12)$$

где для сходимости интеграла предполагаем наличие малой мнимой части у волнового числа q . Здесь и ниже предполагаем, что особые точки z_1, \dots, z_m исключены из интервала интегрирования, т.е. интеграл в правой части (2.12) есть сумма интегралов между особыми точками:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(z) dz \equiv \left(\int_{-\infty}^{z_1} + \sum_{j=1}^{m-1} \int_{z_j}^{z_{j+1}} + \int_{z_m}^{\infty} \right) f(z) dz$$

Предполагая, без ограничения общности, что функция $\delta(z)$ имеет единственную особую точку нулевого порядка при $z = 0$, и выполнив интегрирование по частям получаем

$$r(q) \simeq \underbrace{\frac{k^2}{4q^2} \Delta(0)}_{r_{as}(q) = O(1/q^2)} + \underbrace{\frac{k^2}{4q^2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(2iqz) \frac{d\delta}{dz}(z) dz}_{O(1/q^3)} + \underbrace{\dots}_{O(1/q^4)} \quad (2.13)$$

Выполнив Фурье-преобразование от обеих частей выражения (2.13), находим $d\delta/dz$ и затем, после некоторых алгебраических вычислений, получаем следующую формулу

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d\delta}{dz}(z) \right]^2 dz = \frac{16}{\pi k^4} \int_0^{\infty} q^4 \left| r(q) - r_{as}(q) + O\left(\frac{1}{q^4}\right) \right|^2 dq \quad (2.14)$$

где $r_{as}(q)$ означает первый член асимптотического ряда (2.6), а особая точка исключена из интеграла в левой части (2.14). Хотя (2.14) - это тождество, оно может быть использовано в качестве стабилизирующего условия, налагаемого на решение обратной задачи.

Действительно, предположим, что асимптотика амплитудного коэффициента отражения $r(q)$ задана и рассмотрим множество распределений $\delta(z)$, приводящих к той же самой кривой отражения $R(q)$ при $q \in [0, q_{max}]$. Ясно, что произвольное решение из этого набора не удовлетворяет заданному асимптотическому поведению $r(q)$. Тогда $r(q) - r_{as}(q) = O(1/q^2)$ при $q \rightarrow \infty$ и, следовательно, интеграл в правой части (2.14) расходится. Тем самым, среди

всех возможных решений $\delta(z)$ необходимо выбрать те, которые, как минимум, обеспечивают существование интеграла в правой части (2.14). Для однозначного выбора решения наложим более жесткое условие на распределение $\delta(z)$, а именно, в качестве решения выберем то, которое минимизирует интеграл в левой части (2.14), что, по существу, означает выбор такого решения, которое описывается асимптотической формулой (2.6), начиная сразу с $q \approx q_{max}$.

Отметим, что формула (2.14) справедлива для любого числа особых точек нулевого порядка, если использовать соответствующее выражение для $r_{as}(q)$. Если распределение диэлектрической проницаемости имеет особые точки более высокого n -ного порядка, то (2.14) заменяется более общим выражением, которое может быть найдено аналогичным способом:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d^{n+1}\delta}{dz^{n+1}}(z) \right]^2 dz \sim \frac{1}{k^4} \int_0^{\infty} q^{2n+4} \left| r(q) - r_{as}(q) + O\left(\frac{1}{q^{2n+4}}\right) \right|^2 dq \quad (2.15)$$

Предположим, что функция $\delta(z)$ имеет m особых точек нулевого порядка z_1, \dots, z_m и, кроме того, $\delta(z) = 0$ при $z < z_0$ и $\delta(z) = \delta_+ = \text{const}$ при $z > z_{M+1}$. Разделим каждый из интервалов $[z_j, z_{j+1}]$ на l подинтервалов толщиной $d_j = (z_{j+1} - z_j)/l$ и предположим, что диэлектрическая проницаемость постоянна внутри каждого из подинтервалов. Тогда функция $\delta(z)$ зависит от $N + 2 = (m + 1)l + 2$ переменных, а именно, N значений δ внутри каждого из подинтервалов, значения δ_+ в глубине подложки и числа l подинтервалов внутри каждого интервала $[z_j, z_{j+1}]$ между точками разрыва. Введем следующую функцию невязки для случая особых точек нулевого порядка

$$\begin{aligned} MF(\delta_1, \dots, \delta_{N+1}, N) = & \sum_{j=1}^m [\log R(\theta_j) - \log R_{exp}(\theta_j)]^2 + \\ & + Q \sum_{i \neq i_1, \dots, i_m} (\delta_{i+1} - \delta_i)^2 \end{aligned} \quad (2.16)$$

где $R_{exp}(\theta_j)$ и $R(\theta_j)$ - измеренное и рассчитанное значения коэффициента отражения при угле скольжения θ_j , M - число измерений и Q - параметр задачи. Вторая сумма в (2.16) представляет собой конечно-разностный аналог интеграла в левой части (2.14). Суммирование проводится по всем подинтервалам, исключая особые точки $i = i_1, \dots, i_m$, где функция $\delta(z)$ меняется скачком.

Вычислительная процедура формулируется следующим образом. Необходимо найти последовательность значений диэлектрической проницаемости $\delta_1, \dots, \delta_{N+1}$, минимизирующая функцию невязки, причем параметр Q должен быть максимально возможным, но таким, чтобы различие между рассчитанной и измеренной кривой отражения еще не превышало

экспериментальную ошибку δR_{exp} :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{MF}(\delta_1, \dots, \delta_{N+1}, N) = \min \\ Q(N) = \max \\ \max \left[|R(\theta_j) - R_{exp}(\theta_j)| / \delta R_{exp}(\theta_j) \right] = 1 \end{array} \right. \quad (2.17)$$

Минимизация функции невязки проводится с использованием стандартного алгоритма Левенберга-Маркуардта [168]. В качестве начального (стартового) приближения используется, как правило, модель вещества постоянной плотности (подложка).

Отметим, что вторая сумма в функции невязки (2.16) играет несколько ролей. Первое и самое главное это то, что введение этой суммы позволяет найти $\delta(z)$ -распределение, обеспечивающее необходимое асимптотическое поведение коэффициента отражения. Во-вторых, эта сумма приводит к сглаживанию функции невязки и исчезновению большинства локальных минимумов. В-третьих, эта сумма играет роль регуляризирующего оператора, используемого в современных подходах к решению плохо обусловленных задач, и, в частности, приводит к высокой стабильности решения обратной задачи по отношению к экспериментальным ошибкам при измерении коэффициента отражения.

В случае особых точек первого порядка, когда функция $\delta(z)$ непрерывна, но ее первая производная $\delta'(z)$ меняется скачком, функция невязки (2.16) заменяется следующей

$$\begin{aligned} \text{MF}(\delta_1, \dots, \delta_{N+1}, N) = & \sum_{j=1}^m [\log R(\theta_j) - \log R_{exp}(\theta_j)]^2 + \\ & + Q \sum_{i \neq i_1, \dots, i_m} (\delta_{i+1} - 2\delta_i + \delta_{i-1})^2 + Q_1 \left[\sum_{i=i_1, \dots, i_m} (\delta_{i+1} - \delta_i)^2 + \delta_1^2 \right] \end{aligned} \quad (2.18)$$

где вторая сумма представляет собой конечно-разностный аналог интеграла в левой части (2.15) при $n = 1$, а последняя сумма обеспечивает непрерывность функции $\delta(z)$ в особых точках первого порядка.

Пример решения обратной задачи дан на рис.2.1 (стр. 144). Исходное распределение диэлектрической проницаемости представлено на рис.2.1а, кривая 1, а на рис.2.1б показана кривая отражения, которая, как предполагалось, измерена вплоть до угла скольжения $\theta = 6.5^\circ$. Кривая 2 на рис.2.1а - это реконструированное распределение $\delta(z)$, выбранное среди всех возможных из-за того, что оно минимизирует интеграл в левой части (2.14). Как видно, это распределение хорошо описывает не только “измеренную” часть кривой отражения при $\theta \leq 6.5^\circ$, но и асимптотику коэффициента отражения при $\theta > 6.5^\circ$ и, более того, фазу амплитудного коэффициента отражения (рис.2.1в), хотя фаза вообще не измерялась

в “эксперименте”. Эти факты наглядно демонстрируют, что амплитудный коэффициент отражения, даже если известен (моделирован) лишь приближенно в асимптотической области больших q , может быть корректно аналитически продолжен в верхнюю часть комплексной q -плоскости и, в пределе, на вещественную q -ось, если используется адекватная процедура регуляризации решения обратной задачи.

Рисунок 2.1 показывает, что рассчитанная кривая отражения выходит на асимптотику, начиная с угла $\theta = 6.5^\circ$, в то время как на “экспериментальной” кривой еще присутствуют слабые осцилляции вплоть до $\theta \sim 12^\circ$. Это различие как раз и обусловлено жестким условием (минимум интеграла в левой части (2.14)), налагаемым в нашем подходе на решение обратной задачи. В результате реконструированное распределение $\delta(z)$ на рис.2.1 слегка отличается от исходного, причем различие уменьшается при увеличении углового интервала, учитываемого при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости. Тем самым, в эксперименте кривая отражения должна измеряться в достаточно широком угловом интервале, чтобы быть уверенным, что при больших углах скольжения коэффициент отражения описывается главным членом (2.7) асимптотического ряда.

Относительная точность подгонки кривой отражения на рис.2.1-2.2 и всех последующих рисунках этой главы составляет 1%. Были проведены расчеты и при существенно лучшей точности подгонки (0.1%), однако при этом никакой разницы в реконструированных профилях $\delta(z)$ не наблюдалось, хотя время счета увеличилось в десятки раз.

Обсудим теперь более детально процедуру минимизации функции невязки. Рассмотрение основывается на рис.2.9. Исходное $\delta(z)$ -распределение с единственной особой точкой нулевого порядка показано пунктирной кривой. “Экспериментальная” кривая отражения на длине волны $\lambda = 0.154$ нм представлена на рис.2.9f кружками. На первой итерации мы анализируем лишь несколько точек на кривой отражения при малых углах скольжения и находим минимально возможное число подинтервалов, необходимое, чтобы описать эту часть кривой с требуемой точностью. Расчет начинается с $N = 1$ (одиночная пленка на подложке), выбирается какое-то значение параметра Q (типичное значение порядка 10^6 , находится минимум функции невязки и проверяется выполнение последнего условия в (2.17). Если точность подгонки недостаточна, то число подинтервалов увеличивается на единицу и процедура минимизации повторяется до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность подгонки. В частности, чтобы адекватно описать кривую отражения вплоть до угла $\theta_{max} = 1.8^\circ$, достаточно ввести $N = 5$ подинтервалов (рис.2.9a). Ясно, что профиль диэлектрической проницаемости, найденный на первой итерации, еще далек от исходного, что ясно демонстрируется значительным отличием расчетной кривой отражения от “экспериментальной” при $\theta > 1.8^\circ$

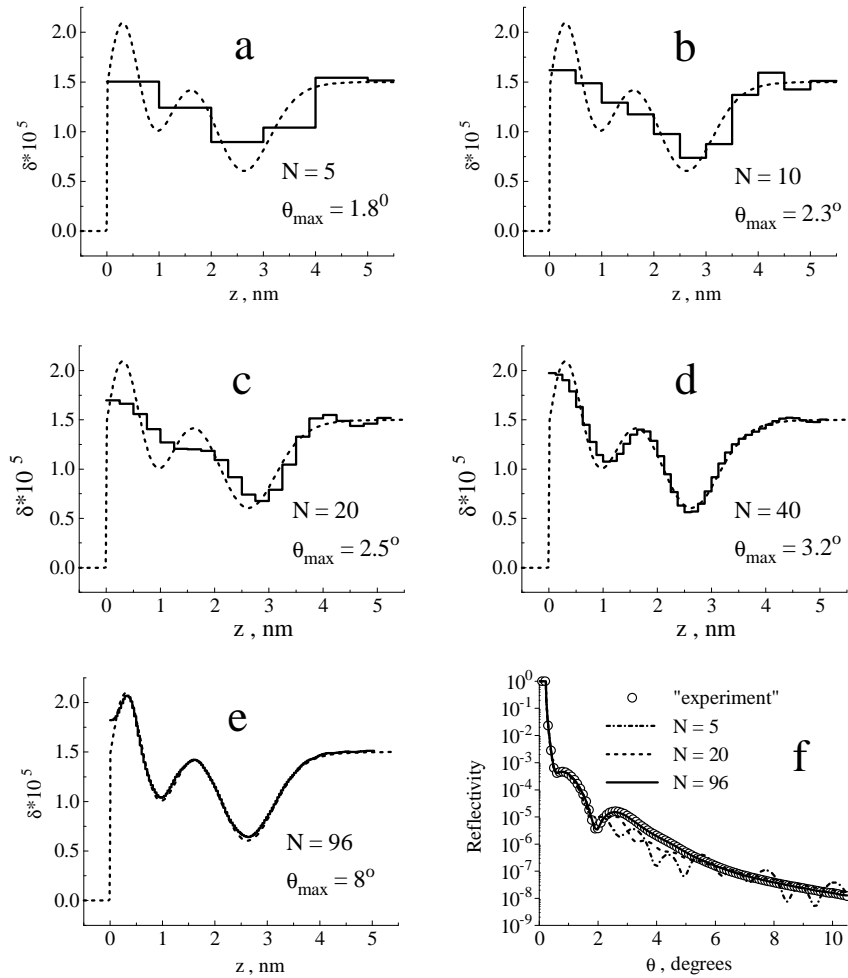


Рис. 2.9. Исходное (пунктирная кривая) и реконструированные (сплошные кривые) профили диэлектрической проницаемости (а-е). При расчетах учитывалась лишь часть “экспериментальной” кривой отражения в интервале углов скольжения $\theta < \theta_{max}$. Значения θ_{max} , а также число подинтервалов N , необходимое для того, чтобы описать кривую отражения, указаны на рисунках. “Экспериментальная” и рассчитанные при разных N) кривые отражения показаны на рис. f.

(см. рис. 2.9f).

На второй итерации в рассмотрение включается одна или несколько дополнительных точек на “экспериментальной” кривой отражения, значение параметра Q увеличивается пропорционально номеру итерации, и процедура минимизации повторяется вновь, т.е. опять находится минимальное число подинтервалов, необходимое, чтобы описать кривую отражения в более широком интервале углов. Профиль $\delta(z)$, найденный на предыдущей итерации, используется как начальное приближение для последующей. Процедура повторяется вновь и вновь, пока не удастся описать всю “экспериментальную” кривую целиком.

После этого увеличивается начальное значение параметра Q и расчеты начинаются с самого начала (с $N = 1$). Процедура повторяется до тех пор, пока не достигается максимально возможное значение Q , которое еще обеспечивает выполнение последнего условия в

(2.17). Типичное время счета для модельных задач составляет от десятков секунд до десятков минут при использовании стандартного современного компьютера. Ясно, что время счета существенно зависит от числа “экспериментальных” точек и требуемой точности подгонки.

Изменение реконструированного профиля диэлектрической проницаемости при расширении углового интервала, принятого во внимание при расчетах, иллюстрируется рис.2.9. Ясно, что чем шире угловой интервал, тем ближе реконструированный профиль $\delta(z)$ к исходному. Если взять в рассмотрение угловой интервал вплоть до $\theta_{max} = 8^\circ$, то согласие становится превосходным. Ясным свидетельством правильности реконструкции является тот факт, что и при $\theta > 8^\circ$ рассчитанная кривая отражения совпадает с “экспериментальной”.

2.2.4. Модельные примеры восстановления профиля диэлектрической проницаемости

Еще один пример реконструкции профиля диэлектрической проницаемости представлен на рис.2.10. В этом примере исходное распределение $\delta(z)$ имеет точку разрыва первого порядка, т.е. $\delta(z)$ - непрерывная функция, но ее первая производная изменяется скачком в точке $z = 0$. Поэтому при решении обратной задачи использовалась функция невязки (2.18). Как и выше, только часть кривой отражения при $\theta < 9^\circ$ использовалась при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости $\delta(z)$. Тем не менее, как видно из рисунка, рассчитанный коэффициент отражения хорошо согласуется с “экспериментальным” и вне этого углового интервала.

Модельный пример, демонстрирующий уникальную чувствительность метода рентгеновской рефлектометрии, представлен на рис.2.11. Этот пример показывает, что даже очень малые особенности на распределении $\delta(z)$ могут быть реконструированы с высокой точно-

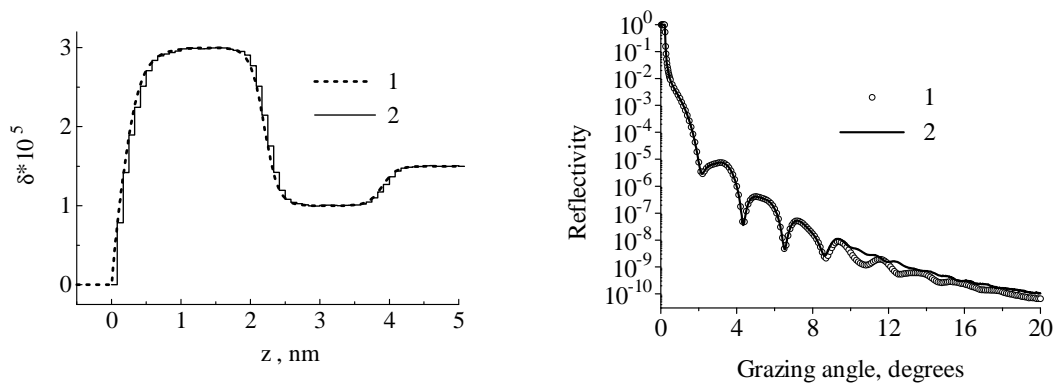


Рис. 2.10. Пример реконструкции профиля диэлектрической проницаемости $\delta(z)$ с особой точкой первого порядка.

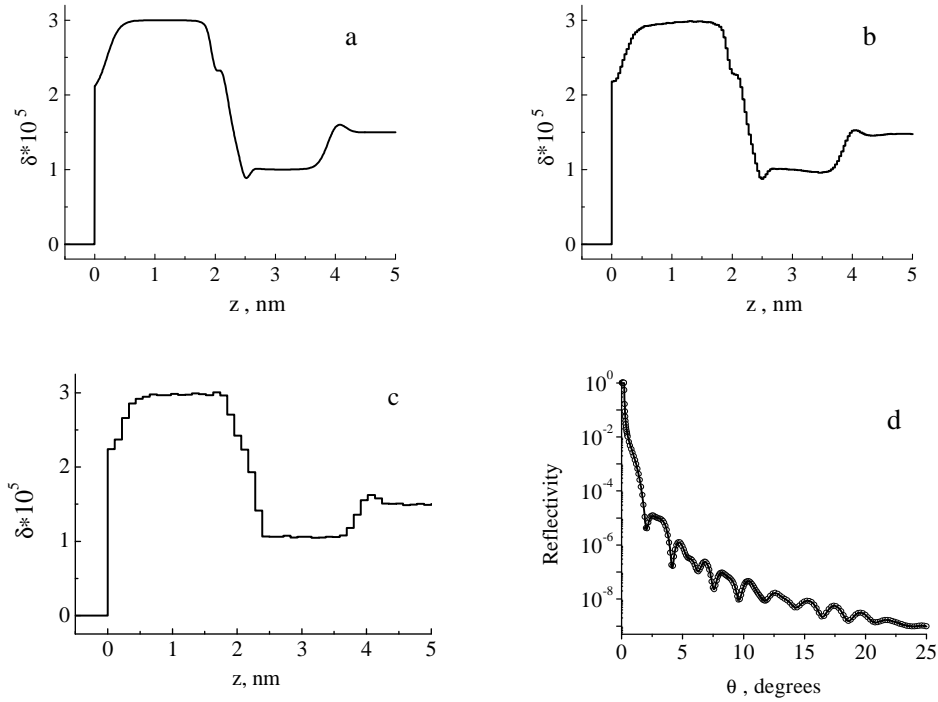


Рис. 2.11. Модельный (а) и реконструированные (b, c) профили диэлектрической проницаемости с особенностями размера 0.1 - 0.2 нм. Показана также и кривая отражения на длине волны $\lambda = 0.154$ нм (d) от модельного (кружки) и реконструированного (сплошная кривая) профиля $\delta(z)$. Угловым интервал измерений коэффициента отражения, принятый во внимание при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости, составлял 25° (b) или 6.5° (c).

стью, если кривая отражения измерена в достаточно широком угловом интервале. Отметим, что эффективная длина волны, описывающая периодичность поля падающей волны вдоль оси Z составляет $\lambda_{eff} = 2\pi/q = \lambda/\sin\theta \simeq 0.36$ нм при $\theta = 25^\circ$. Тем не менее, особенности толщиной всего лишь 0.1 нм восстанавливаются вполне корректно. Уменьшение интервала углов, где проводятся измерения до 6.5° ($\lambda_{eff} = 1.36$ нм) приводит к сглаживанию реконструированного профиля диэлектрической проницаемости и исчезновению малых особенностей (см. рис. 2.11c). Этот и другие примеры, представленные в диссертации, позволяют заключить, что минимальный размер особенностей распределения $\delta(z)$, которые еще могут быть корректно реконструированы, составляют порядка $\delta z \sim \lambda_{eff}/4 - \lambda_{eff}/3$.

Рисунок 2.12 демонстрирует высокую стабильность вычислительной процедуры по отношению к экспериментальным ошибкам. Исходное распределение показано на рис.2.12а, кривая 1. В кривую отражения (рис.2.12b) были введены “экспериментальные” ошибки, которые равномерно распределены в интервале от $\pm 1\%$ при малых углах скольжения до $\pm 50\%$ при больших θ . Результат подгонки кривой отражения показан на рис.2.12, кривая 2, а реконструированный профиль диэлектрической проницаемости - на рис.2.12, кривая 2. Как

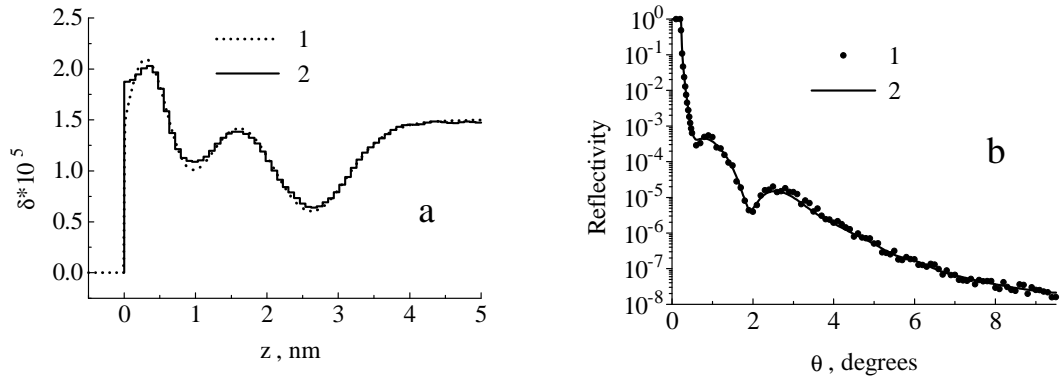


Рис. 2.12. (а) Исходный (1) и реконструированный (2) профили диэлектрической проницаемости. (б) “Экспериментальная” кривая отражения ($\lambda = 0.154$) нм с введенными ошибками измерений (1) и результат подгонки (2).

видно, точность восстановления $\delta(z)$ -распределения вполне приемлема, несмотря на наличие значительных “экспериментальных” ошибок измерения кривой отражения.

Ясно, что никакая реальная поверхность (граница раздела сред) не может рассматриваться как идеально гладкая для коротковолнового рентгеновского излучения. Поверхностные и межслоевые шероховатости приводят к появлению рассеянного излучения и уменьшению коэффициента зеркального отражения. Влияние шероховатостей на коэффициент отражения увеличивается с увеличением угла скольжения, т.е. приводит к деформации кривой отражения, а значит, и к искажениям реконструированного профиля диэлектрической проницаемости. Проанализируем особенности, появляющиеся на реконструированном распределении $\delta(z)$ из-за влияния шероховатостей.

Рассмотрим структуру, состоящую из двух пленок на подложке, предполагая плотности всех материалов постоянными по глубине, а границы раздела между ними абсолютно резкими (рис.2.13а, точечная кривая). Соответствующий коэффициент отражения показан кривой 1 на рис.2.13б. Предположим теперь, что все три границы раздела шероховатые (при одном и том же значении $\sigma = 0.3$ нм на каждой из границ раздела), а влияние шероховатостей учтем введением фактора Неве-Кроса в амплитудный коэффициент отражения от каждой границы раздела. Тогда коэффициент отражения от рассматриваемой структуры будет соответствовать кривой 2 на рис.2.13б. Анализ этой кривой позволяет заключить, что коэффициент отражения уменьшается примерно в соответствии с законом $1/\sin^6 \theta$ в измеренном интервале углов скольжения. Набор рассчитанных функций $F(x)$ показан на рис.2.13с. Поскольку асимптотическое поведение коэффициента отражения не точно соответствует закону $1/\sin^6 \theta$, по существу, наблюдается только один более или менее стабильный экстремум при $x = 5$ нм. Два других при $x = 2$ нм и $x = 3$ нм выражены далеко не столь отчетливо. Тем

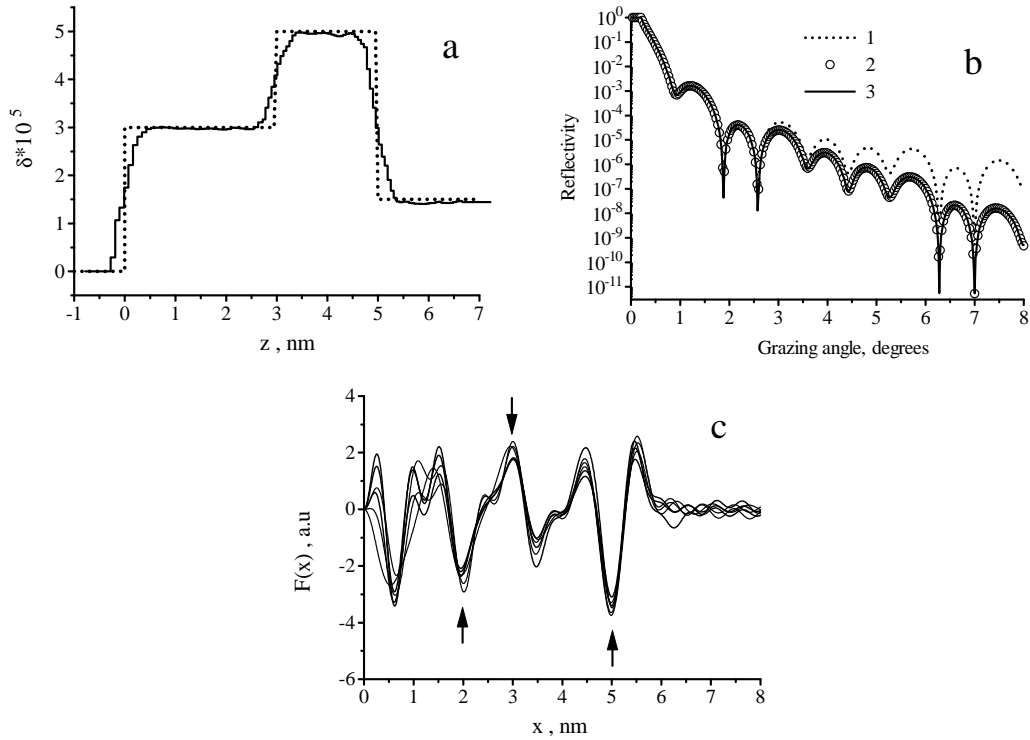


Рис. 2.13. (а) Исходное (точечная кривая) и реконструированное (сплошная кривая) распределение диэлектрической проницаемости в предположении наличия коротко-периодных шероховатостей высотой $\sigma = 0.3$ нм на каждой границе раздела. (б) Кривая отражения ($\lambda = 0.154$ нм для идеально гладкой (1) и шероховатой (2) структуры. Кривая 3 - результат подгонки. (с) Набор функций $F(x)$, рассчитанных в слегка отличающихся угловых интервалах. Стабильные пики указаны стрелками.

не менее, если мы знаем а priori, что структура состоит из двух пленок, причем более толстая пленка расположена сверху, то мы можем идентифицировать пики при $x = 2.00 \pm 0.03$ нм и $x = 3.00 \pm 0.03$ нм и реконструировать профиль диэлектрической проницаемости, показанный сплошной кривой на рис.2.13а. Точность подгонки кривой отражения иллюстрируется кривой 3 на рис.2.13б. В соответствии с проведенным выше анализом мелкомасштабные шероховатости привели к сглаживанию границ раздела и появлению эффективных переходных слоев толщиной примерно 3σ .

Таким образом, влияние шероховатостей на коэффициент отражения может привести к значительным трудностям при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости, что связано с двумя обстоятельствами. Во-первых, эффекты шероховатостей зачастую делают проблематичным обнаружение и анализ особых точек на распределении $\delta(z)$, т.е. затрудняют выбор адекватной модели слоистой среды. Во-вторых, эффекты шероховатостей приводят к сглаживанию границ раздела, причем оказывается невозможным отличить реальный переходной слой, обусловленный диффузией, химическими реакциями или имплантацией, от "эффективного", проявляющегося в результате усредненного влияния мелкомасштабных ше-

роховатостей на коэффициент отражения. В то же время, именно анализ тонкой структуры интерфейсов представляется чрезвычайно важным для многих задач микроэлектроники и многослойной рентгеновской оптики. Единственный последовательный подход к решению этих проблем предполагает одновременное определение как статистических параметров шероховатостей, так и профиля диэлектрической проницаемости. Такой подход будет описан ниже в разделе 2.4.

Здесь же мы обсудим экспериментальную возможность некоторого уменьшения влияния шероховатостей на измеряемую кривую отражения. Как обсуждалось в разделе 1.3.2, в случае конформных шероховатостей с достаточно большим радиусом корреляции в латеральном направлении, интегральный коэффициент отражения $R_{\Sigma}(\theta) \equiv R(\theta) + \text{TIS}(\theta)$, характеризующий суммарную интенсивность всего излучения (и зеркально отраженного, и рассеянного), направленного шероховатой поверхностью обратно в вакуум, совпадает с коэффициентом отражения от идеально гладкого образца $R_0(\theta)$. Иными словами, конформные шероховатости с большими (в продольном направлении) радиусами корреляции не приводят к увеличению потока излучения, направленного в глубь среды, а лишь перераспределяют его интенсивность между зеркально отраженной и рассеянной в вакуум компонентами. Тем самым, измеряя в эксперименте $R_{\Sigma}(\theta)$ вместо коэффициента зеркального отражения $R(\theta)$, оказывается возможным свести к минимуму влияние шероховатостей с большим радиусом корреляции на кривую отражения.

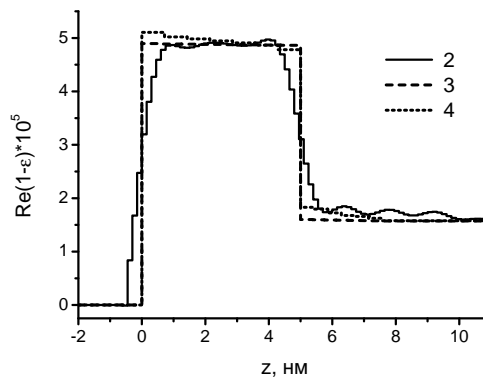


Рис. 2.14. Реконструированные профили диэлектрической проницаемости пленки Ni ($h = 5$ нм, $\lambda = 0.154$ нм) на кремниевой подложке. Профили 2-4 были реконструированы с использованием кривых отражения 2-4 на рис.1.9, соответственно.

Проиллюстрируем это утверждение, основываясь на рис.1.9 (стр. 67), где показан зеркальный (2) и интегральные (3-4) коэффициенты отражения от шероховатой пленки. Попробуем реконструировать профиль диэлектрической проницаемости $\delta(z)$, основываясь на

кривой отражения, измеренной вплоть до угла скольжения $\theta = 3^\circ$. Предположим сначала, что в эксперименте измерялся коэффициент зеркального отражения (кривая 2). Реконструированный профиль диэлектрической проницаемости показан кривой 2 на рис.2.14. Видно, что профиль сильно деформирован, а границы раздела вакуум-пленка и пленка-подложка размыты, как и в предыдущем примере. Если же в эксперименте измеряется интегральный коэффициент отражения (кривая 3, радиус корреляции высот шероховатостей $\xi = 100$ мкм), то реконструированный профиль $\delta(z)$ (кривая 3) точно соответствует исходному. Наконец, профиль 4 был реконструирован с использованием кривой отражения 4 на рис.1.9 (радиус корреляции уменьшен до 5 мкм). Этот профиль, хотя и несколько деформирован, довольно близок к исходному распределению диэлектрической проницаемости. Приведенный пример наглядно демонстрирует, что при решении обратной задачи рефлектометрии измерения суммарного коэффициента отражения вместо зеркального позволяют существенно увеличить точность восстановления профиля диэлектрической проницаемости, даже если эффекты шероховатостей не учитываются в явном виде. В описанных ниже экспериментах по реконструкции профиля диэлектрической проницаемости, мы всегда измеряли коэффициент интегрального отражения $R_\Sigma(\theta)$, а не зеркального.

Одним из критических моментов разработанного подхода является пренебрежение поглощением в веществе. Более точный подход должен позволить найти две неизвестные функции - вещественную и мнимую части диэлектрической проницаемости. Ясно, что проблема однозначного выбора решения становится намного более сложной.

Рассмотрим влияние поглощения на точность восстановления функции $\delta(z)$. Предположим, что на кремниевую подложку напылена пленка вольфрама, и примем во внимание как интерслой силицида вольфрама, образующийся на границе раздела W/Si, так и окисный слой на поверхности пленки. Модельное распределение концентрации химических элементов показано на рис.2.15а, а профиль вещественной части диэлектрической проницаемости для длины волны излучения $\lambda = 0.154$ нм - точечной кривой на рис.2.15б. Кривая отражения представлена кружками на рис.2.15д, причем поглощение излучения в веществе учитывалось при расчете. Влияние поглощения на коэффициент отражения максимально в области ПВО. Поэтому при подгонке использовалась только часть кривой отражения при $\theta > 0.6^\circ$. В то же время ясно, что как раз удаленная часть кривой отражения содержит информацию о диэлектрической проницаемости подложки (критический угол ПВО), которая, тем самым, оказывается утерянной. Поэтому значение диэлектрической проницаемости в глубине подложки считалось известным, а при определении $\delta(z)$ поглощением, как и раньше, пренебрегалось.

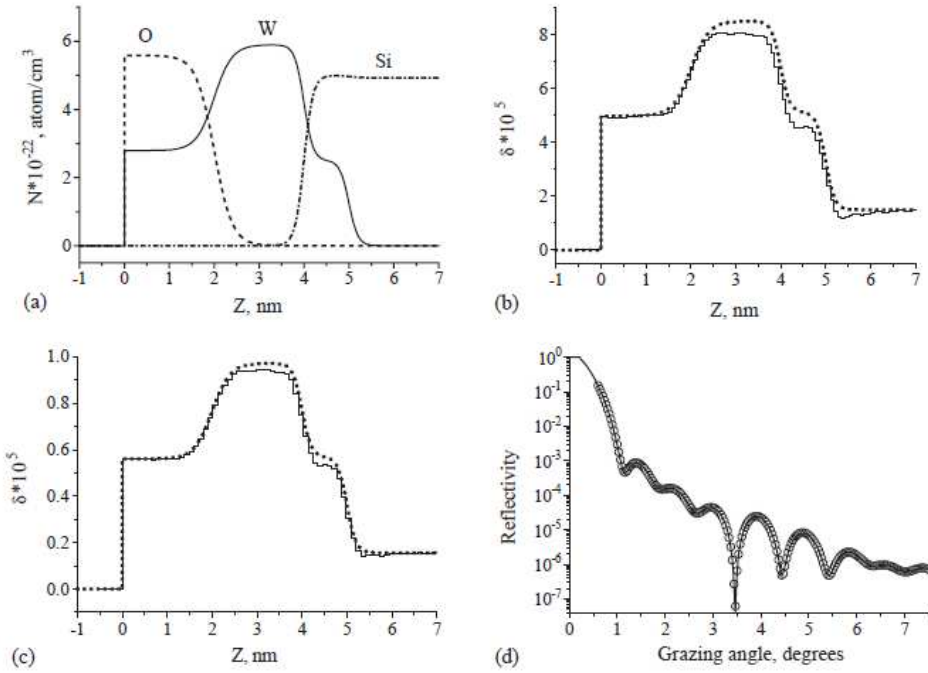


Рис. 2.15. (а) Модельное распределение концентраций W, Si и O по глубине образца. (б) Исходное (точечная кривая) и реконструированное (сплошная кривая) распределение диэлектрической проницаемости на длине волны $\lambda = 0.154$ нм. (с) То же, что и на рис.б, но на длине волны $\lambda = 0.05$ нм. (д) "Экспериментальная" кривая отражения (кружки) и результат подгонки (сплошная кривая) на длине волны $\lambda = 0.154$ нм. Поглощение излучения в веществе (ненулевая мнимая часть диэлектрической проницаемости) было учтено при расчете "экспериментальной" кривой, но не принималось во внимание при реконструкции распределения $\delta(z)$.

Реконструированный профиль диэлектрической проницаемости показан сплошной кривой на рис.2.15b. Все особенности, присущие исходному профилю, проявились на реконструированной кривой, которая однако несколько деформирована. Ясно, что эти деформации обусловлены пренебрежением поглощения при определении профиля $\delta(z)$. Тем самым, для корректного восстановления профиля диэлектрической проницаемости толщина пленки вольфрама не должна превышать 6 - 7 нм, если длина волны зондирующего излучения $\lambda = 0.154$ нм. Ясно, что для пленок легких материалов, их толщина может быть в десятки раз больше. Кроме того, имеется очевидная возможность для увеличения толщины пленки тяжелого материала, которая еще приемлема для реконструкции профиля диэлектрической проницаемости. Она состоит в уменьшении длины волны излучения, а следовательно, в уменьшении поглощения. Пример представлен на рис.2.15с, где показан исходный и реконструированный профиль $\delta(z)$ для того же самого образца, но при использовании более жесткого излучения с длиной волны $\lambda = 0.05$ нм. Различие между кривыми существенно меньше в этом случае.

2.2.5. О проблеме однозначности восстановления профиля диэлектрической проницаемости

Рассмотрим $\delta(z)$ -распределение, показанное на рис.2.16, кривая 1. "Экспериментальная" кривая отражения приведена на рис.2.16, кривая 6. Распределение $\delta(z)$ имеет две точки разрыва нулевого порядка, расстояние между которыми однозначно определяется по анализу осцилляций на кривой отражения.

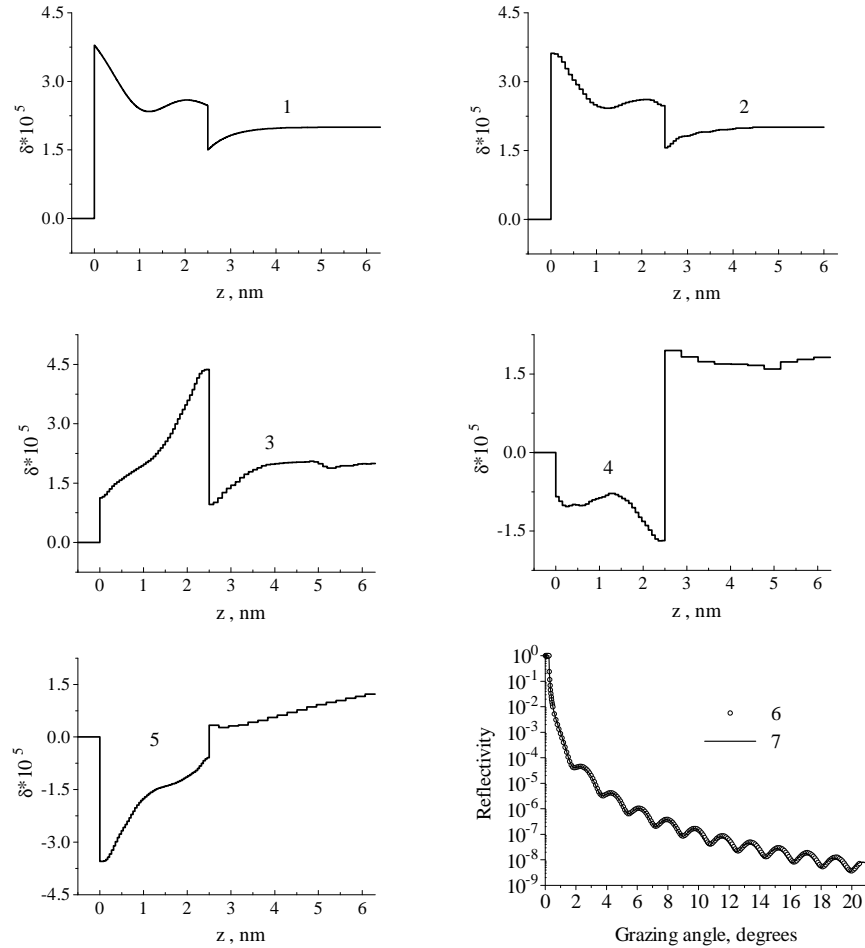


Рис. 2.16. Исходное распределение диэлектрической проницаемости (1) и четыре возможных решения обратной задачи рефлектометрии (2-5). Представлена также "экспериментальная" кривая отражения (6) и результат расчета (7).

В соответствии с описанным выше подходом, профиль диэлектрической проницаемости может быть реконструирован, если известна асимптотика амплитудного коэффициента отражения, которая в рассматриваемом случае имеет следующий вид:

$$r(q) \simeq \frac{k^2}{4q^2} [\Delta(0) + \Delta(d) \exp(2iqd)] \quad (2.19)$$

Следовательно, измеряемый в эксперименте модуль коэффициента отражения $R(q) =$

$|r(q)|^2$ ведет себя при больших q как

$$R(q) \simeq \frac{k^4}{16q^4} \left[\Delta^2(0) + \Delta^2(d) + 2\Delta(0)\Delta(d) \cos(2qd) \right] \quad (2.20)$$

Сравнение (2.19) и (2.20) показывает, что, вообще говоря, имеется четыре разных асимптотических зависимостей $r(q)$, приводящих к одному и тому же асимптотическому поведению $R(q)$, т.е. имеется четыре разных решения обратной задачи. Действительно, в противоположность (2.19), выражение (2.20) инвариантно по отношению к следующим преобразованиям:

$$\begin{aligned} \text{(а)} \quad & \Delta(0) \implies -\Delta(0) \text{ и, одновременно, } \Delta(d) \implies -\Delta(d) \\ \text{(б)} \quad & \Delta(0) \iff \Delta(d) \end{aligned} \quad (2.21)$$

Первое из этих преобразований означает, что из экспериментальных данных можно определить только знак произведения $\Delta(0)\Delta(d)$, но не знак каждого из скачков диэлектрической проницаемости по отдельности. Второе преобразование означает, что асимптотическое поведение коэффициента отражения $R(q)$ не позволяет установить, в какой точке $z = 0$ или $z = d$ произошло заданное (например, большее) изменение $\delta(z)$.

Четыре возможных решения обратной задачи показаны на рис.2.16, кривые 2-5. Все эти распределения приводят к одной и той же кривой отражения $R(q)$ во всем интервале изменения параметра $q \in [0, \infty)$. Четыре, и только четыре решения были найдены при использовании различных стартовых распределений $\delta(z)$. Тем самым, процедура минимизации функции невязки (2.17) позволяет найти ограниченное число возможных решений обратной задачи вместо непрерывного множества решений в общем случае, причем одно из найденных решений (кривая 2) совпадает с исходным $\delta(z)$ -распределением. Отметим, что только часть кривой отражения $\theta < 10^\circ$ была использована для реконструкции профиля диэлектрической проницаемости. Тем не менее, правильный выбор модели (т.е. числа и порядка точек разрыва) привел к превосходному согласию рассчитанной и "экспериментальной" кривой отражения и вне принятого во внимание интервала углов скольжения.

Если бы было возможным измерить фазу отраженной волны, которая, в соответствии с (2.19) совершенно разная для найденных распределений диэлектрической проницаемости (см. рис.2.17), то решение, соответствующее реальности, находится немедленно. Подход к решению фазовой проблемы описан ниже в разделе 2.3. Если фаза неизвестна, то однозначный выбор решения может быть проведен на основе общих физических соображений или дополнительных экспериментов. В частности, профили 3 и 4 на рис.2.16 могут быть сразу же исключены из рассмотрения, поскольку диэлектрическая проницаемость меньше единицы в жестком рентгеновском диапазоне (т.е. $\delta(z) > 0$). Для однозначного выбора решения

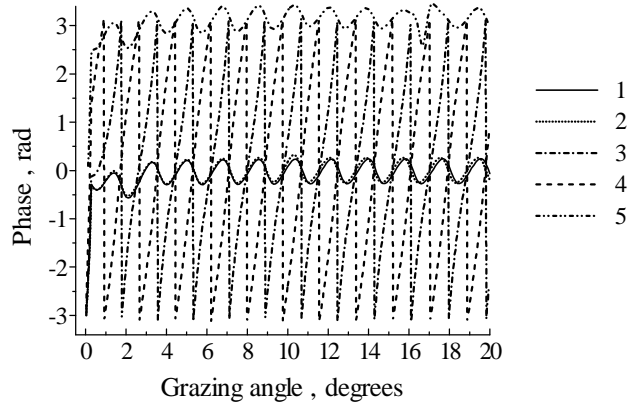


Рис. 2.17. Фаза амплитудного коэффициента отражения для тех же самых распределений $\delta(z)$, что и на рис.2.16.

из оставшихся двух можно провести дополнительные эксперименты, которые чувствительны к фазе амплитудного коэффициента отражения. В качестве примера предположим, что тонкий слой образца удален с помощью ионного травления. Тогда, в первом порядке теории возмущений, изменение коэффициента отражения может быть записано в следующем виде:

$$\Delta R(q) = -\frac{k^2}{q} \delta(0) \cdot \Delta x \cdot \text{Im}[r(q)] \quad (2.22)$$

где Δx - толщина удаленного слоя. Тем самым, изменение модуля коэффициента отражения зависит от фазы амплитудного коэффициента отражения исходного образца (до травления). Решив обратную задачу для образца после травления, получим снова четыре возможных решения. Два из них, для которых $\delta(z) > 0$, показаны на рис.2.18, кривые 2 и 4. Кривые 1 и 3 были получены выше при решении обратной задачи для исходного образца. Видно, что кривые 1 и 2 очень хорошо согласуются друг с другом, в то время как кривые 3 и 4 значительно отличаются. Следовательно, $\delta(z) > 0$ -распределение, показанное кривой 1 на рис.2.18, является правильным решением обратной задачи.

Отметим, что число возможных решений (четыре) не зависит от числа особых точек в распределении $\delta(z)$, если все расстояния h_{ij} между особыми точками и все попарные произведения $\Delta_i \Delta_j$ различны. Рассмотрим три произвольные особые точки, следующие друг за другом: z_{j-1} , $z_j = z_{j-1} + h_{j-1,j}$, $z_{j+1} = z_j + h_{j,j+1}$ и соответствующую им последовательность скачков диэлектрической проницаемости Δ_{j-1} , Δ_j , Δ_{j+1} . Один из экстремумов функции $F(x)$ расположен в точке $x = h_{j-1,j+1} = h_{j-1,j} + h_{j,j+1}$, соответствующей расстоянию между $(j-1)$ -й и $(j+1)$ -й особыми точками. Поскольку мы предположили, что все h_{ij} различные, то единственная возможность изменить последовательность трех выбранных особых точек, сохранив при этом значение $h_{j-1,j+1}$ (положение экстремума), состоит в том, чтобы

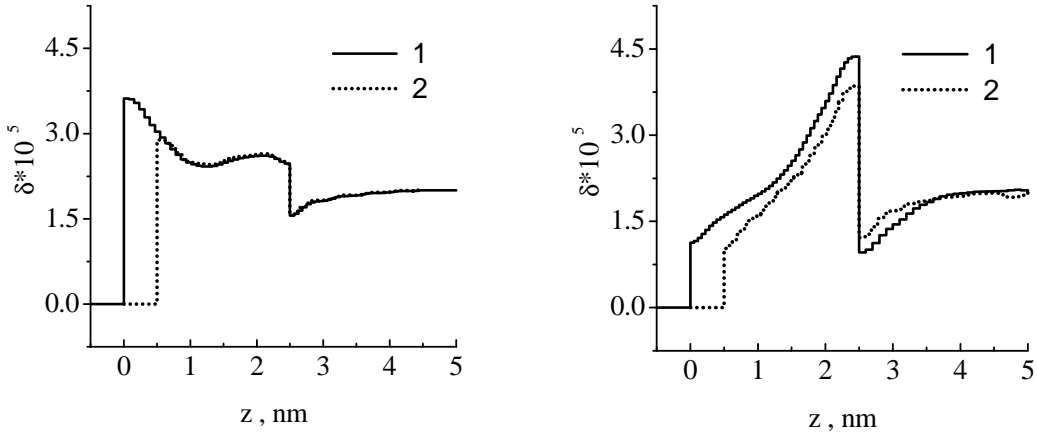


Рис. 2.18. Два возможных решения обратной задачи (1, 3) для исходного $\delta(z)$ -распределения, показанного на рис.2.16, кривая 1, и соответствующие решения (2, 4) после стравливания верхнего слоя образца толщиной 0.5 нм.

заменить ее на обратную следующим образом: $z_{j-1}, z_j = z_{j-1} + h_{j,j+1}, z_{j+1} = z_j + h_{j-1,j}$. Одновременно следует заменить на обратную и последовательность скачков диэлектрической проницаемости $\Delta_{j+1}, \Delta_j, \Delta_{j-1}$, чтобы сохранить значения экстремумов $\Delta_{j-1}\Delta_j$ и $\Delta_j\Delta_{j+1}$ в точках, соответствующих расстояниям $h_{j-1,j}$ и $h_{j,j+1}$. Поскольку эти рассуждения должны быть справедливы для любого j , мы заключаем, что среди множества всех возможных перестановок, только зеркально отображенная последовательность особых точек и скачков диэлектрической проницаемости, приведет к тем же самым положениям и значениям экстремумов функции $F(x)$. Иными словами, имеется ровно две последовательности особых точек, приводящих к одной и той же асимптотике коэффициента отражения, а именно:

$$\Delta_1(z=0), \Delta_2(z=h_{12}), \dots, \Delta_{n-1}(z=h_{12} + \dots + h_{n-2,n-1}), \Delta_n(z=h_{12} + \dots + h_{n-1,n}) \quad (2.23)$$

$$\Delta_n(z=0), \Delta_{n-1}(z=h_{n-1,n}), \dots, \Delta_2(z=h_{n-1,n} + \dots + h_{23}), \Delta_1(z=h_{n-1,n} + \dots + h_{23})$$

Два дополнительных возможных решения обратной задачи немедленно следуют из (2.23) заменой Δ_j на $-\Delta_j$.

Случай, когда некоторые расстояния между особыми точками одинаковы, является более сложным для анализа. Для обсуждения рассмотрим модель структуры, состоящей из трех пленок постоянной плотности на однородной подложке, и для простоты пренебрежем поглощением излучения в веществе. Если толщины всех пленок различны, то функция $F(x)$ характеризуется наличием шести стабильных экстремумов. Если же толщины h всех пленок одинаковы, то $F(x)$ содержит всего три экстремума, расположенных в точках $x = h, x = 2h$ и $x = 3h$. Значения $F(x)$ в этих точках равны

$$F(h) = \Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_3 + \Delta_3\Delta_4, \quad F(2h) = \Delta_1\Delta_3 + \Delta_2\Delta_4, \quad F(3h) = \Delta_1\Delta_4 \quad (2.24)$$

Если у нас нет никакой информации об образце, то из вида функции $F(x)$ можно было бы заключить, что образец состоит всего из двух слоев толщиной h и $2h$. Возникает вопрос, а можно ли правильно определить число слоев, составляющих структуру, основываясь исключительно на кривой отражения и не проводя дополнительных экспериментов? Удивительно, но это действительно возможно, поскольку помимо расстояний между особыми точками у нас есть дополнительная информация о произведении скачков диэлектрической проницаемости в этих точках, которые определяют значения экстремумов функции $F(x)$. Поясним сказанное, основываясь на двух примерах.

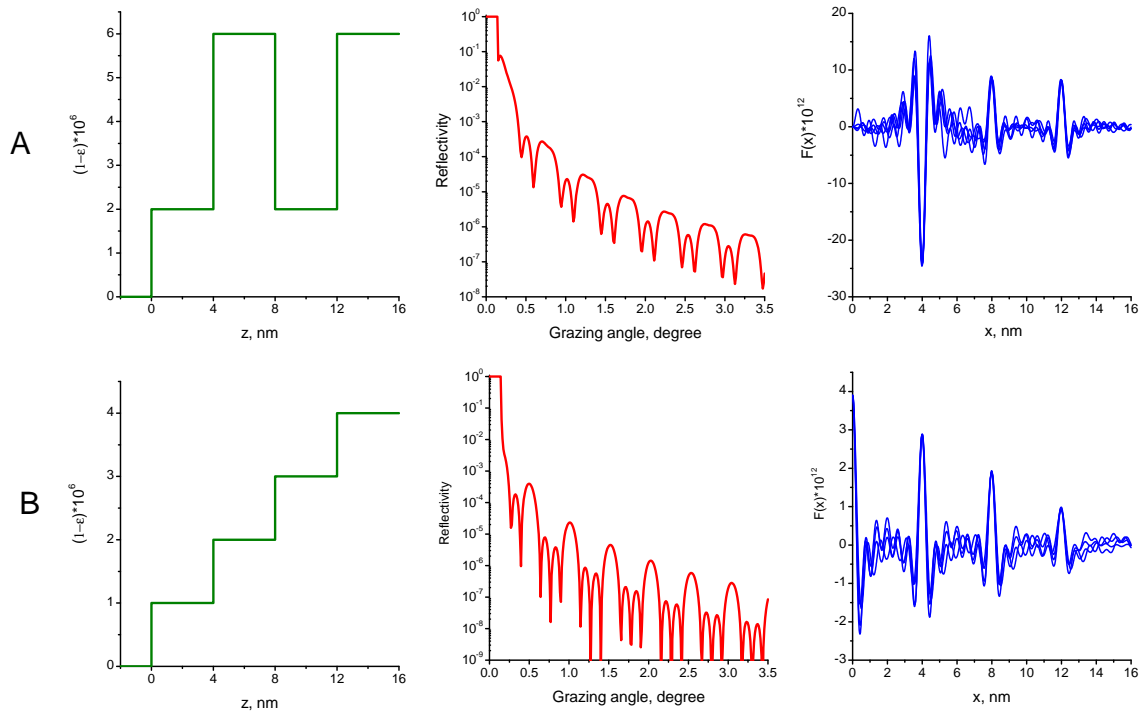


Рис. 2.19. Два модельных примера (строки А и В) трехслойных образцов с равными толщинами пленок ($h = 4$ нм). Профили диэлектрической проницаемости показаны в левом столбце, кривые отражения при $E = 17.5$ кэВ - в среднем и функции $F(x)$ - в правом.

Первый модельный пример представлен на рис.2.19, строка А. Структура состоит из трех пленок равной толщины, а функция $F(x)$ содержит три стабильных экстремума. Если мы предположим простейшую двух-пленочную модель, т.е. наличие только трех особых точек на распределении $\delta(z)$, и обозначим значения скачков диэлектрической проницаемости в этих точках как $\tilde{\Delta}_1$, $\tilde{\Delta}_2$ и $\tilde{\Delta}_3$, то имеем систему трех уравнений $\tilde{\Delta}_1\tilde{\Delta}_2 \approx -24$, $\tilde{\Delta}_1\tilde{\Delta}_3 \approx 8$ и $\tilde{\Delta}_2\tilde{\Delta}_3 \approx 8$. Перемножив эти уравнения, получаем нефизический результат $(\tilde{\Delta}_1\tilde{\Delta}_2\tilde{\Delta}_3)^2 < 0$, что ясно указывает на неправильность двухслойной модели. В более общей модели n особых точек ($n - 1$ пленка на подложке), все расстояния h_{ij} между которыми различны, аналогичным образом можно рассчитать произведение значений функции $F(x)$ во всех экстремумах

$P = \prod F(h_{ij})$. Можно убедиться, что каждый скачок $\tilde{\Delta}_i$ появляется в этом произведении ровно $n - 1$ раз, так что $P = (\tilde{\Delta}_1 \tilde{\Delta}_2 \dots \tilde{\Delta}_n)^{n-1}$. Тем самым, знак произведения P должен быть всегда положительным в случае нечетного числа особых точек, что может служить одним из критериев правильности выбранной модели.

Второй пример трехслойного покрытия с пленками равной толщины показан на рис.2.19, строка В. Здесь для иллюстративных целей мы использовали стандартный вид функции $F(x)$, положив в ней $C = 0$, поскольку в этом примере пик при $x = 0$ слабо влияет на соседний экстремум. Видно, что все произведения $\tilde{\Delta}_i \tilde{\Delta}_j$ положительны и $(\tilde{\Delta}_1 \tilde{\Delta}_2 \tilde{\Delta}_3)^2 > 0$. Тогда (в рамках двухслойной модели) находим $\tilde{\Delta}_1^2 \approx 1.5$, $\tilde{\Delta}_2^2 \approx 6.0$ и $\tilde{\Delta}_3^2 \approx 0.7$, т.е. значение суммы $\tilde{\Delta}_1^2 + \tilde{\Delta}_2^2 + \tilde{\Delta}_3^2 \approx 8.2$ более чем в два раза превышает высоту пика при $x = 0$. Тем самым, снова заключаем, что двухслойная модель не соответствует реальности.

В общем случае n особых точек с различными расстояниями между ними мы можем определить $n(n-1)/2$ произведений $\tilde{\Delta}_i \tilde{\Delta}_j$ и сумму $\tilde{\Delta}_1^2 + \dots + \tilde{\Delta}_n^2$, т.е. имеем $n(n-1)/2 + 1$ уравнение для n неизвестных $\tilde{\Delta}_i$. Если $n > 2$, то число уравнений превышает число неизвестных и уравнения не противоречат друг другу только в модели с правильно выбранным числом особых точек, исключая очень специфические случаи, которые, по-видимому, никогда не встречаются на практике, хотя и имеют определенный академический интерес.

Такой специфический случай представлен на рис.2.20а, модель 1. В этой модели трех пленок одинаковой толщины, значения скачков диэлектрической проницаемости в особых точках выбраны так, чтобы одновременно выполнялись следующие два условия:

$$\Delta_1 \Delta_2 + \Delta_2 \Delta_3 + \Delta_3 \Delta_4 = 0 \quad \text{и} \quad \Delta_1 \Delta_3 + \Delta_2 \Delta_4 = 0 \quad (2.25)$$

Тогда, в соответствии с (2.24), мы наблюдаем лишь один стабильный экстремум функции $F(x)$ (рис.2.20с) и можем заключить, что на распределении $\delta(z)$ имеется лишь две особые точки, расстояние между которыми равно 12 нм. Обозначив скачки диэлектрической проницаемости в эти точках как $\tilde{\Delta}_1$, $\tilde{\Delta}_2$ и решив систему уравнений $\tilde{\Delta}_1 \tilde{\Delta}_2 = \Delta_1 \Delta_4$ и $\tilde{\Delta}_1^2 + \tilde{\Delta}_2^2 = \Delta_1^2 + \dots + \Delta_4^2$, мы можем сконструировать однослойную структуру (модель 2 на рис.2.20а), коэффициент отражения от которой точно такой же как и для трехслойной модели 1 при больших углах скольжения (рис.2.20б). Небольшое различие между кривыми отражения заметно лишь в интервале углов скольжения $\theta \sim 0.2^\circ - 0.45^\circ$. Поскольку в рассматриваемом случае $n = 2$, то число уравнений и число неизвестных $\tilde{\Delta}_{1,2}$ совпадает, а решение уравнений всегда может быть найдено. Тем самым, в рассматриваемом специфическом случае, когда значения скачков в особых точках удовлетворяют условию (2.25), мы действительно не можем определить число особых точек распределения диэлектрической

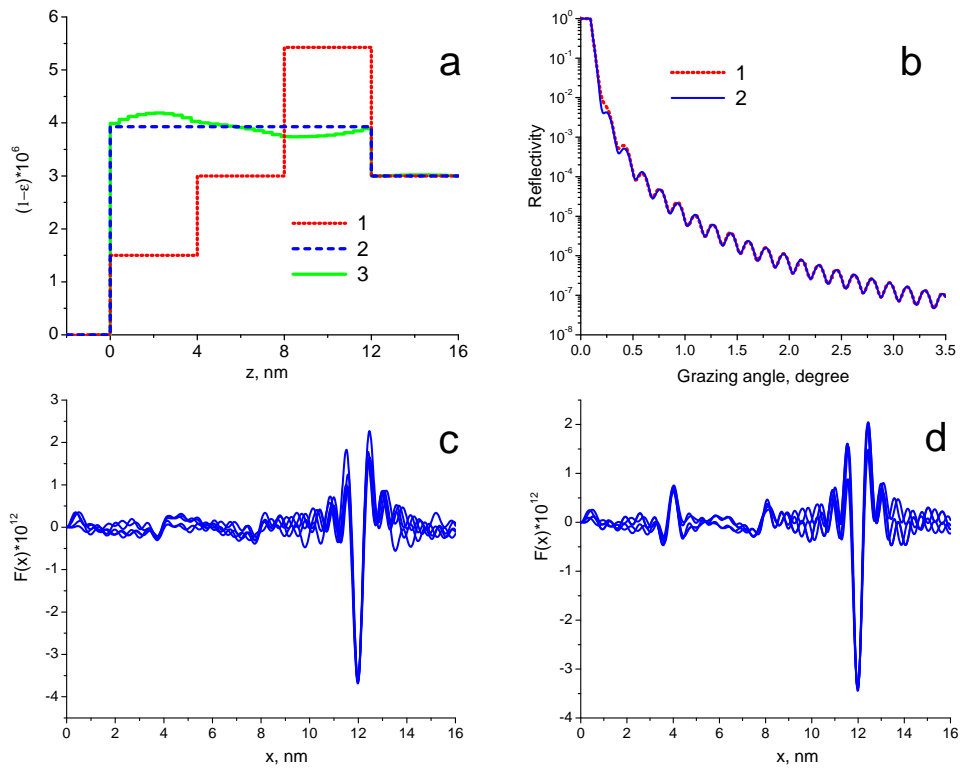


Рис. 2.20. (а) Профили диэлектрической проницаемости трехслойного (1) и однослойного (2) образцов, обеспечивающих совпадающие коэффициенты отражения при больших углах скольжения. Кривая 3 - уточненный профиль однослойного образца, кривая отражения которого идентична кривой отражения от трехслойного образца. (b) Кривая отражения ($E = 17.5$ кэВ) от трехслойного (1) и однослойного (2) образца. (c) Функция $F(x)$ для трехслойного образца. (d) Функция $F(x)$ для трехслойного образца в предположении, что поляризуемость верхней и нижней пленки изменилась на +5% и -5%, соответственно.

проницаемости.

Наконец, профиль 3 на рис.2.20а был найден из кривой отражения 1 на рис.2.20b в предположении двух особых точек. Иными словами, коэффициенты отражения от распределений $\delta(z)$, показанных кривыми 1 и 3 на рис.2.20а совпадают при всех углах скольжения, хотя число особых точек различно.

Отметим, что если изменить поляризуемость $\delta = 1 - \epsilon$ верхней и нижней пленки на +5% и -5%, соответственно, то на функции $F(x)$ немедленно появляются два дополнительных стабильных пика в точках $x = 4$ нм и $x = 8$ нм (рис.2.20с), т.е. ситуации становится похожа на отражение от структуры, имеющей три особые точки, что было проанализировано выше. Тем самым, адекватная модель образца может быть построена на основе измерений кривых отражения при энергиях рентгеновских квантов, лежащих выше и ниже скачка поглощения какого-нибудь элемента, составляющего структуру. При этих энергиях поляризуемость эле-

мента может быть существенно различной, так что выполнение условия (2.25) сразу при двух энергиях представляется практически невероятной.

2.2.6. Экспериментальные примеры реконструкции профиля диэлектрической проницаемости

Пример экспериментальной кривой отражения от пленки вольфрама толщиной 5.1 нм, измеренной на длине волны $\lambda = 0.071$ нм, представлен на рис.2.21а (кривая 1) [А59]. Эта кривая спадает при больших θ несколько быстрее, чем $1/\sin^4\theta$, что хорошо видно на рис.2.21b, где показан коэффициент отражения, умноженный на $\sin^4\theta$, но все же заметно медленнее, чем $1/\sin^6\theta$. На наш взгляд логично предположить, что в распределении $\varepsilon(z)$ имеются особые точки нулевого порядка (границы раздела вакуум-пленка и пленка-подложка), где диэлектрическая проницаемость изменяется скачкообразно, а более быстрое спадание коэффициента отражения по сравнению с законом $1/\sin^4\theta$ связано с влиянием шероховатостей.

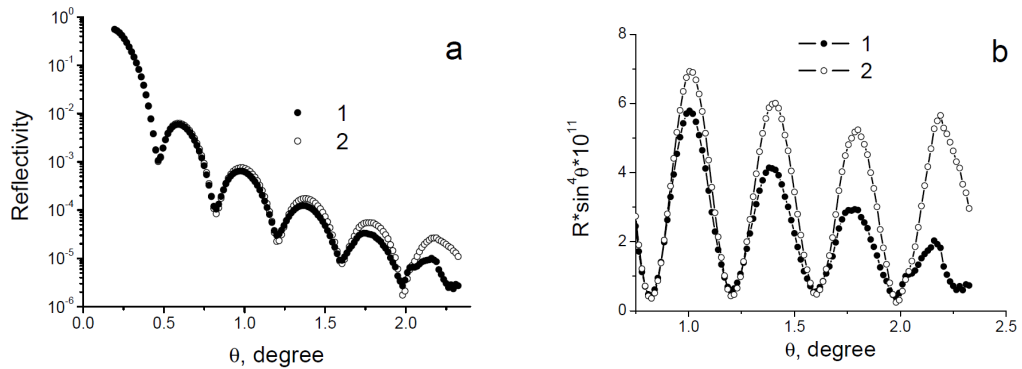


Рис. 2.21. (а) Измеренный ($\lambda = 0.071$ нм) коэффициент отражения от пленки вольфрама ($h = 5.1$ нм) на кремниевой подложке (1) и коэффициент отражения, скорректированный на эффект шероховатостей (2). (б) Измеренный (1) и скорректированный на эффект шероховатостей (2) коэффициент отражения, умноженный на $\sin^4\theta$ для иллюстрации поведения кривой отражения в области больших углов θ . (Из [А59]).

Функция $F(x)$ (2.8), рассчитанная для исследуемой пленки вольфрама при $n = 0$ и для слегка отличающихся интервалов значений q (угол скольжения θ меняется от до), показана на рис.2.22а. Видно, что имеется один хорошо выраженный стабильный экстремум, указанный стрелкой. Можно заключить, что для исследуемого образца существует две особые точки нулевого порядка, расстояние между которыми (толщина пленки) составляет $h = 5.07 \pm 0.03$ нм. Отрицательное значение функции $F(x)$ в минимуме означает, что скачки диэлектрической проницаемости на границах раздела пленки имеют разный знак, причем для количественного определения значений этих скачков мы имеем, в силу (2.10)-(2.11), следующую

систему уравнений

$$\Delta(0)\Delta(h) = -(1.5 \pm 0.2) \cdot 10^{-10} , \quad \Delta^2(0) + \Delta^2(h) = (4.1 \pm 0.4) \cdot 10^{-10}$$

Небольшое изменение функции $F(x)$ в минимуме (рис.2.22а) и связанная с этим ошибка в правых частях системы (9), равно как и в найденной толщине пленки, обусловлены влиянием шероховатостей, приводящему к более быстрому уменьшению коэффициента отражения по сравнению с зависимостью $1/\sin^4 \theta$.

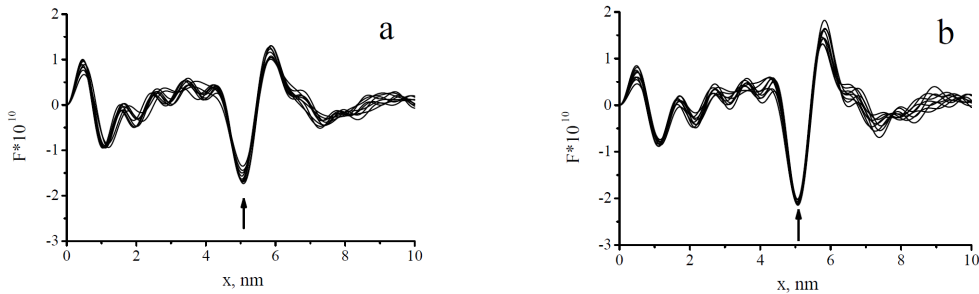


Рис. 2.22. Функция $F(x)$, рассчитанная в слегка отличающихся интервалах угла скольжения с использованием измеренной кривой отражения (а) и кривой отражения, скорректированной на эффект шероховатостей (б). Стрелки указывают на стабильный экстремум.

Отметим, что возможность определения толщины пленки из периода осцилляций на кривой отражения хорошо известна и широко используется на практике. В то же время, возможность определения значений скачков диэлектрической проницаемости в особых точках (на границах раздела пленки) из анализа поведения кривой отражения, по-видимому, в литературе подробно не обсуждалась, исключая наши работы. Следует подчеркнуть, что определение скачков подразумевает измерения количественного значения коэффициента отражения (т.е. отношения интенсивности отраженного излучения к интенсивности падающего пучка), а не относительного, выраженного в отчетах детектора в секунду, что является довольно распространенной практикой в рентгеновских измерениях.

Таким образом, анализ измеренной части кривой отражения позволил определить как толщину пленки вольфрама, так и значения скачков диэлектрической проницаемости на границах раздела пленка-подложка и вакуум-пленка, т.е. дал возможность сформулировать довольно детальную модель исследуемого образца.

При реконструировании профиля $\varepsilon(z)$ в качестве начального приближения бралась однородная пленка постоянной плотности на однородной подложке. Стартуя с разных начальных приближений (разной диэлектрической проницаемости пленки) и используя функцию невязки (2.16), мы нашли все четыре и только четыре возможных решения, обсуждаемых выше.

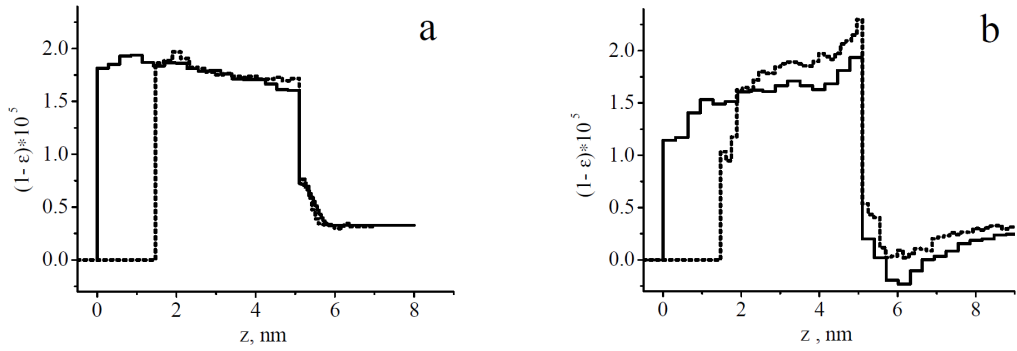


Рис. 2.23. Два возможных решения обратной задачи, приводящие к положительному скачку на поверхности вольфрамовой пленки. Показаны реконструированные профили $\varepsilon(z)$ для пленок толщиной 5.1 нм (сплошные кривые) и 3.6 нм (точечные кривые). Ось Z направлена в глубь подложки. Эффекты шероховатостей не учитывались. (Из [A59]).

Два из них, приводящих к положительному скачку на поверхности вольфрамовой пленки, показаны сплошными кривыми на рис.2.23. В нашем случае, решение (b), по-видимому, можно сразу исключить, поскольку оно приводит к значениям $\varepsilon > 1$ вблизи поверхности подложки ($z \sim 6$ нм). Чтобы убедиться в правильности этого предположения, мы исследовали другую пленку несколько меньшей толщины $h = 3.6$ нм. Реконструированные профили $\varepsilon(z)$ показаны на рис.2.23 точечными кривыми. Как видно, профили диэлектрической проницаемости хорошо соответствуют друг другу на рис.2.23а, но сильно отличаются на рис.2.23б. Тем самым, заключаем, что именно решение (а) соответствует реальности. Отметим, что значения $\Delta(0)\Delta(h) = -1.58 \cdot 10^{-10}$ и $\Delta^2(0) + \Delta(h) = 4.07 \cdot 10^{-10}$, найденные из рис.2.23а для более толстой пленки, соответствуют значениям, полученным выше из анализа функции $F(x)$. Реконструированный профиль $\varepsilon(z)$ характеризуется двумя специфическими чертами. Во-первых, вблизи поверхности подложки хорошо виден слой повышенной плотности толщиной около 0.8 нм, появление которого связано с имплантацией и/или диффузией атомов вольфрама в кремниевую подложку. Во-вторых, плотность пленки изменяется по глубине от 80% от плотности массива в начале напыления до 95% на поверхности пленки.

Таким образом, используя самую общую модель отражающей среды, а именно, предполагая, единственно, что имеется ровно две особые точки, где диэлектрическая проницаемость изменяется скачком, удалось однозначно восстановить профиль $\varepsilon(z)$ по глубине. Более того, само наличие особых точек, их порядок и число, а также расстояние между ними определено из измеренной части кривой отражения.

Рассмотрим далее следующий пример, а именно, отражение рентгеновского излучения с длиной волны $\lambda = 0.154$ нм от хорошо полированной кремниевой подложки [A36]. Если

рассчитать коэффициент отражения от однородной подложки по формуле Френеля, то получим монотонно убывающую кривую 2 на рис.2.24а. В то же время, поведение измеренного коэффициента отражения (кривая 1) существенно более сложное и характеризуется ярко выраженным минимумом при $\theta = 1.5^\circ$. Хотя коэффициент отражения снова убывает при больших θ несколько быстрее, чем $1/\sin^4 \theta$, мы можем предположить, как и выше, что этот факт связан с влиянием шероховатостей, а в распределении имеется единственная особая точка нулевого порядка, где диэлектрическая проницаемость изменяется скачком.

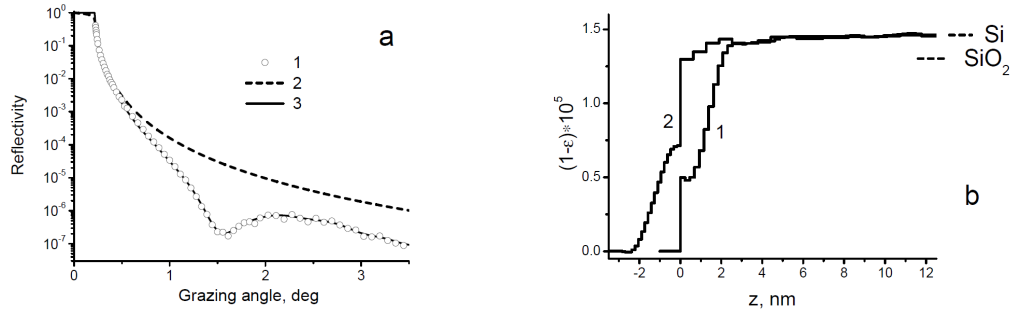


Рис. 2.24. (а) Измеренный коэффициент отражения ($\lambda = 0.154$ нм) от кремниевой подложки (кружки) [А36]. Точечная кривая 2 - коэффициент отражения от однородной подложки, рассчитанный по формуле Френеля. Сплошная кривая 3 рассчитана для профиля $\epsilon(z)$, показанного кривой 2 на рис.б, и демонстрирует точность описания экспериментальной кривой отражения. (б) Реконструированные профили диэлектрической проницаемости в предположении, что особая точка нулевого порядка расположена на поверхности образца (1) и на некотором расстоянии от нее (2) из-за наличия адгезионного слоя. Эффекты шероховатостей не учитывались.

Предположим сначала, что особая точка расположена на поверхности образца. Используя описанную выше процедуру, основанную на минимизации функции невязки (2.18), находим профиль диэлектрической проницаемости, показанный кривой 1 на рис.2.24б. Полученный профиль показывает чрезвычайно низкую плотность вещества на поверхности образца, в три раза меньшую, чем плотность кремния. Этот результат вряд ли имеет физический смысл и, на наш взгляд, связан с неправильной моделью образца, предполагающей наличие особой точки на его поверхности. Дело заключается в том, что любая поверхность, находящаяся на воздухе, покрывается адгезионным слоем, состоящим, главным образом, из молекул углеводородов и воды. Рассмотрим, поэтому, другую общую модель, предполагающей наличие этого слоя. Пусть, для определенности, поверхность подложки (особая точка на распределении $\epsilon(z)$) соответствует $z = 0$, а левая граница интервала, в котором мы ищем решение, расположена в точке $z = z_{min} < 0$. Положив $z_{min} = -3$ нм, получаем профиль диэлектрической проницаемости, показанный кривой 2 на рис.2.24б. На этом профиле отчетливо виден

адгезионный слой толщиной около 2 нм и низкой плотностью, не превышающей 1.1 г/см^3 . Кроме того, на поверхности подложки наблюдается и окисный слой той же примерно толщины 2 нм, причем в этом слое диэлектрическая проницаемость плавно изменяется от значения, соответствующего окислу SiO_2 , до значения, соответствующего монокристаллическому кремнию.

Выбор значения дополнительного параметра минимизации z_{min} достаточно прост. При увеличении z_{min} от (-2) нм до 0 кривая 2 постепенно деформируется и превращается в кривую 1. Если взять значение z_{min} меньшим (-10) нм, то процедура минимизации становится неустойчивой, а на распределении $\varepsilon(z)$ при $z < -2$ нм появляются нефизические знакопеременные осцилляции. В то же время имеется достаточно широкий интервал значений z_{min} от (-2) нм до (-10) нм, для которых профиль $\varepsilon(z)$ практически совпадает с кривой 2 и не меняется при изменении параметра z_{min} . Естественно, что именно это решение и следует выбрать в качестве правильного.

Для того, чтобы убедиться в правильности модели с адгезионным слоем на поверхности, был проведен дополнительный эксперимент на канале ВМ5 синхротрона ESRF. Как и в предыдущем примере, сначала была измерена кривая отражения от хорошо полированной кремниевой подложки в зависимости от угла скольжения излучения с энергией $E = 17.5 \text{ кэВ}$ (см. кружки 1 на рис.2.25а). Реконструированный профиль диэлектрической проницаемости показан кривой 1 на рис.2.25b. На поверхности подложки хорошо виден адгезионный слой толщиной ~ 3 нм, а толщина окисного слоя оказалась равной ~ 6 нм, т.е. существенно больше, чем в предыдущем примере. Дело заключается в том, что большая партия подобных подложек была закуплена ESRF примерно за 12-13 лет до проведения этого эксперимента, причем подложки хранились в воздушном окружении, хотя и были помещены в специальные контейнеры для предохранения от пыли. По-видимому, увеличение толщины как окисного, так и адгезионного слоя может быть объяснено этим фактом. После этого поверхность подложки была обработана потоком ионов Ag с энергией 600 эВ в течение нескольких десятков секунд и кривая отражения была измерена снова (см. кружки 2 на рис.2.25а) с сохранением образца в вакууме. Как видно, зависимость коэффициента отражения от угла скольжения стала близка к френелевской. Реконструированный профиль диэлектрической проницаемости (кривая 1 на рис.2.25b) демонстрирует полное отсутствие адгезионного слоя, а зависимость $\varepsilon(z)$ в окисном слое полностью повторяет кривую 1, хотя кривые отражения абсолютно разные для этих двух случаев. Этот эксперимент, во-первых, полностью подтверждает наличие адгезионного слоя на поверхности образца и, во-вторых, свидетельствует о корректности восстановленных профилей $\varepsilon(z)$.

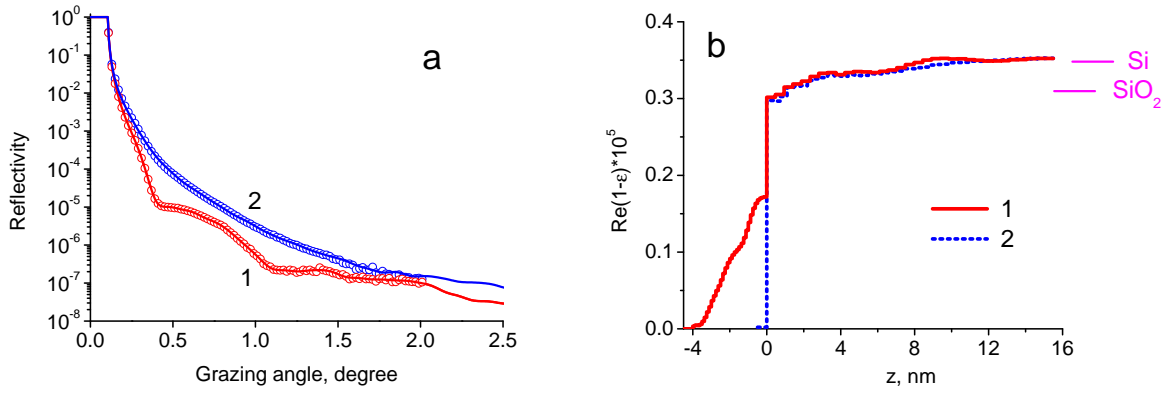


Рис. 2.25. (а) Кривая отражения в зависимости от угла скольжения излучения с энергией $E = 17.5$ кэВ от хорошо полированной кремниевой подложки до (1) и после (2) ионной очистки поверхности. Кружки - экспериментальные данные, сплошные кривые - результат расчета. (b) Реконструированные профили диэлектрической проницаемости до (1) и после (2) ионной очистки. (Из [A60]).

Рассмотрим еще один экспериментальный пример - отражение рентгеновского излучения ($\lambda = 0.154$ нм) от пленки Si_3N_4 на кремниевой подложке. Измеренная кривая отражения показана кружками на рис.2.26а. В отличие от двух предыдущих примеров, кривая отражения убывает в среднем как $1/\sin^6 \theta$ при больших θ . Это хорошо видно на рис.2.26b, где показан коэффициент отражения, умноженный на $\sin^6 \theta$. Кроме того, отчетливо видны два разных периода осцилляций на кривой. Действительно, построив функцию $F(x)$ при $n = 1$ (см. рис.рис.2.26с), мы отчетливо различаем два стабильных экстремума, характеризующихся расстоянием между особыми точками $h_{13} = 20.78 \pm 0.03$ нм и $h_{12} = 1.13 \pm 0.02$ нм. Третий экстремум, который должен соответствовать расстоянию $h_{23} \sim 18.65$ нм, проявляется не столь четко, просто потому, что вторичные осцилляции от наиболее высокого пика при $x = h_{13}$ сильно деформируют менее выраженный отрицательный пик при $x = h_{23}$. Тем не менее, мы можем предположить, что в распределении $\epsilon(z)$ существует три особые точки первого порядка, т.е. сама функция непрерывна везде, а ее первая производная меняется в этих точках скачком.

Найденный профиль диэлектрической проницаемости показан на рис.2.26d, а положения особых точек, найденных из рис.2.26с, указаны стрелками. Рисунок демонстрирует, что исследованная пленка была очень высокого качества с постоянной по глубине плотностью. Плавное изменение вблизи поверхности (между точками 1 и 2) объясняется совместным эффектом адгезионного слоя и поверхностных шероховатостей. Точно так же, плавное уменьшение вблизи поверхности подложки (слева от особой точки 3) объясняется ее шероховатостью. Второе из возможных решений соответствует зеркально отраженному положению особых то-

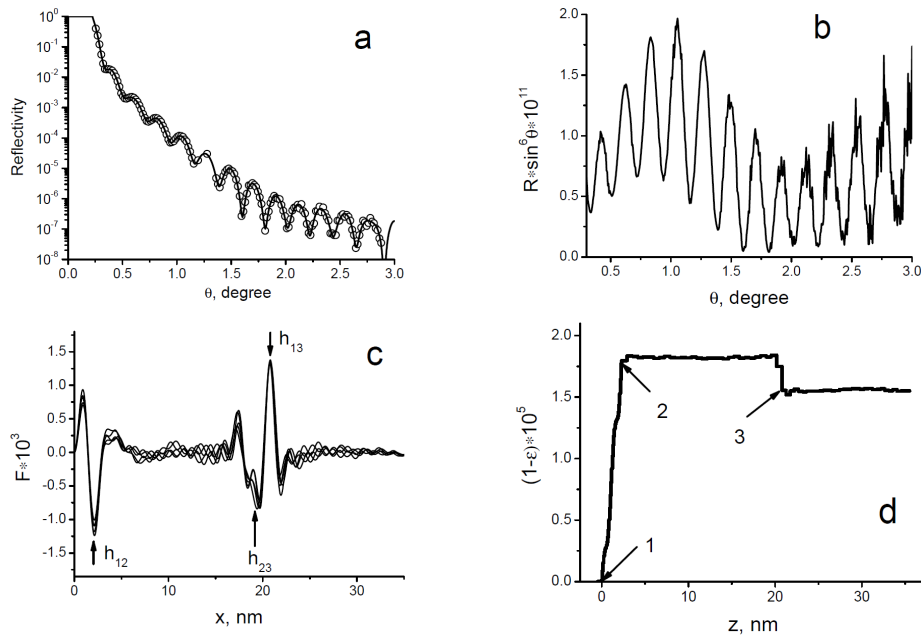


Рис. 2.26. (а) Измеренный (кружки) и рассчитанный (сплошная кривая) коэффициент отражения ($\lambda = 0.154$ нм) от пленки Si_3N_4 на кремниевой подложке. (б) Измеренный коэффициент отражения, умноженный на $\sin^6 \theta$ для иллюстрации поведения кривой отражения в области больших углов скольжения. (с) Функция $F(x)$, рассчитанная в слегка изменяющемся интервале углов скольжения. Стабильные экстремумы указаны стрелками. (д) Реконструированный профиль диэлектрической проницаемости. Особые точки первого порядка указаны стрелками. Эффекты шероховатостей в явном виде не учитывались.

чек, т.е. в этом случае расстояние между точками 1 и 2 составляет 20.78 нм, а между точками 2 и 3 - 2.12 нм. Это решение характеризуется сильно деформированным профилем $\epsilon(z)$ и не показано на рисунке, поскольку, на наш взгляд, не имеет физического смысла.

Наконец, рассмотрим последний экспериментальный пример, а именно, пленку Al_2O_3 , нанесенную на кремниевую подложку методом ALD, о которой речь шла выше в разделе 2.1 (рис.2.4 на стр.146). Кривую отражения от этого образца не удалось адекватно описать с использованием простой модели слоистой среды. Профиль диэлектрической проницаемости, найденный в рамках описанного выше модельно независимого подхода, показан кривой 2 на рис.2.4б, а практически идеальная точность подгонки иллюстрируется кривой 3 на рис.2.4а. Видно, что пленка сильно неоднородна и, вдобавок, ее нанесение привело к окислению подложки на значительную глубину (~ 5 нм), что связано с ошибочно выбранными технологическими параметрами напыления (по-видимому, с температурой подложки, которая была далека от оптимальной).

2.3. Точное решение фазовой проблемы в in-situ рефлектометрии растущих пленок

2.3.1. Вывод основного уравнения

Ниже мы будем рассматривать пленку, наносимую на поверхность либо однородной подложки, либо более сложной слоисто-неоднородной структуры. Химический состав падающего потока может меняться со временем, так что диэлектрическая проницаемость пленки может изменяться по глубине. Используя так называемый метод погружения [169], выведем уравнение, описывающее изменение амплитудного коэффициента отражения r при изменении толщины пленки h .

Направим ось Z в глубину образца и рассмотрим плоскую волну, падающую из вакуума на поверхность растущей пленки под углом скольжения θ . Поле волны, рассматриваемое как функция двух переменных z и h удовлетворяет следующим асимптотическим условиям:

$$E(z, h) = \begin{cases} \exp(i\kappa_0 z) + r(h) \exp(-i\kappa_0 z - 2i\kappa_0 h), & \text{если } z \leq -h \\ t(h) \exp[i\kappa_s z + i(\kappa_s - \kappa_0)h], & \text{если } z \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.26)$$

$$\kappa_0 = k \sin \theta; \quad \kappa_s = k \sqrt{\varepsilon_s - \cos^2 \theta}; \quad k = 2\pi/\lambda$$

где $r(h)$ и $t(h)$ - амплитудные коэффициенты отражения и прохождения, а ε_s - диэлектрическая проницаемость подложки (при $z \rightarrow +\infty$).

Из уравнения (2.26) следует, что

$$\frac{dE}{dh}(-h, h) = \left\{ -i\kappa_0 [1 + r(h)] + \frac{dr}{dh}(h) \right\} e^{-i\kappa_0 h} \quad (2.27)$$

С другой стороны, можно записать, что

$$\frac{dE}{dh}(-h, h) = -\frac{\partial E}{\partial z}(z, h) \Big|_{z=-h} + \frac{\partial E}{\partial h}(z, h) \Big|_{z=-h} \quad (2.28)$$

Из уравнения (2.26) немедленно получаем

$$\frac{\partial E}{\partial z}(z, h) \Big|_{z=-h} = i\kappa_0 [1 - r(h)] e^{-i\kappa_0 h} \quad (2.29)$$

Чтобы найти производную $\partial E/\partial z$, используем интегральную форму волнового уравнения

$$E(z, h) = E(z, h_1) - k^2 \int_{-h}^{-h_1} g(z, z'; h_1) [\varepsilon(z') - 1] E(z', h) dz' \quad (2.30)$$

где поле $E(z, h_1)$ описывает отражение волны от пленки толщиной $h_1 < h$. Уравнение (2.30) подразумевает, что диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(z)$ остается неизменной при $z > -h_1$

в течение роста пленки от толщины h_1 до толщины h . Функция Грина $g(z, z', h)$ определена в (1.7) на стр.30, где поле $E_1(z, h)$ соответствует волне, падающей на поверхность пленки из глубины подложки, и имеет следующую асимптотику

$$E_1(z, h) = \begin{cases} t(h) \exp[-i\kappa_0 z + i(\kappa_s - \kappa_0)h], & \text{если } z \leq -h \\ \exp(-i\kappa_s z) + r_+(h) \exp(i\kappa_s z + 2i\kappa_0 h), & \text{если } z \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (2.31)$$

а Вронскиан $W(h) = E' \tilde{E} - E \tilde{E}' = 2i\kappa_0 t(h) \exp[i(\kappa_s - \kappa_0)h]$.

Дифференцируя уравнение (2.31), получаем общее уравнение для производной $\partial E / \partial h$. Затем, устремляя $h_1 \rightarrow h$ и $z \rightarrow -h$, находим

$$\left. \frac{\partial E}{\partial h}(z, h) \right|_{z=-h} = \frac{ik^2}{2\kappa_0} [\varepsilon(-h) - 1] [1 + r(h)] e^{-i\kappa_0 h} \quad (2.32)$$

где $\varepsilon(-h)$ - диэлектрическая проницаемость на верхней поверхности растущей пленки.

Комбинируя уравнения (2.27)-(2.31), находим окончательное уравнение, описывающее изменение амплитудного коэффициента отражения r при изменении толщины пленки h :

$$\frac{dr}{dh}(h) = 2ikr(h) \sin \theta + \frac{ik}{2 \sin \theta} [\varepsilon(-h) - 1] [1 + r(h)]^2 \quad (2.33)$$

Как отмечено выше, уравнение (2.33) подразумевает, что диэлектрическая проницаемость внутри пленки не меняется во время напыления. В то же время, имеется ряд случаев, когда напыление материала на вершину пленки влияет на нижележащую структуру. Типичные примеры включают имплантацию и диффузию атомов. В течение очень коротких временных интервалов, когда происходят подобные процессы, уравнение (2.33) несправедливо.

Из уравнения (2.33) можно установить и поведение коэффициента отражения $R = |r|^2$:

$$\frac{dR}{dh} = -\frac{k}{\sin \theta} \text{Im} \left\{ [\varepsilon(-h) - 1] r^*(h) [1 + r(h)]^2 \right\} \quad (2.34)$$

На первый взгляд уравнение (2.34) выглядит непригодным для использования на практике, поскольку содержит неизвестное значение $\varepsilon(-h)$, которое может быть найдено только как решение обратной задачи рефлектометрии. Более того, производная dR/dh непосредственно не может быть измерена, поскольку толщина пленки не всегда является линейной функцией времени напыления. В то же время временная производная $dR/dt = (dR/dh) \cdot (dh/dt)$ может быть найдена непосредственно из измеряемой в эксперименте зависимости $R(t)$. Скорость напыления $dh/dt = q\mu/\rho$, где q - поток падающих частиц (на единицу площади за единицу времени), μ - масса падающей частицы и ρ - плотность вещества на поверхности

пленки. В свою очередь диэлектрическая проницаемость вещества в рентгеновском диапазоне записывается как $\varepsilon = 1 - A\rho/\mu \cdot (f_1 - if_2)$, где $f_1 - if_2$ - комплексный фактор атомного рассеяния, определяемый химическим составом падающего пучка. Постоянная $A = a_0\lambda^2/\pi$ выражается через классический радиус электрона a_0 и длину волны излучения λ . Окончательно находим выражение для временной зависимости коэффициента отражения, которое не содержит в явном виде параметры пленки:

$$\frac{dR}{dt} = -Aq(t)\frac{k}{\sin\theta} \left\{ f_1(t)[1 - R(t)]\text{Im}[r(t)] + f_2(t) \left[2R(t) + (1 + R(t))\text{Re}[r(t)] \right] \right\} \quad (2.35)$$

Если R и dR/dt известны, то уравнение (2.35) не является больше дифференциальным уравнением для коэффициента отражения R , а становится алгебраическим уравнением, устанавливающим линейную зависимость между вещественной и мнимой частями амплитудного коэффициента отражения r . Остальные параметры, входящие в уравнение (2.35), либо известны, либо экспериментально измеряемы. В общем случае как поток частиц q , так и его химический состав (f_1 и f_2) изменяются со временем.

Решая уравнение (2.35) совместно с очевидным соотношением

$$R(t) = \left[\text{Re}(r(t)) \right]^2 + \left[\text{Im}(r(t)) \right]^2 \quad (2.36)$$

находим $\text{Re}(R(t))$ и $\text{Im}(R(t))$ непосредственно из экспериментальных данных без использования какой-либо модели отражающей среды. Поскольку последнее уравнение квадратичное, имеется, строго говоря, два возможных решения фазовой проблемы. Поэтому решение, соответствующее реальности, следует выбирать на основе дополнительных физических соображений.

Сформулируем условия справедливости основного уравнения (2.35):

1. Уравнение справедливо для растущей (слоистой) пленки в предположении, что как коэффициент отражения $R(t)$, так и его производная dR/dt известны в некоторый момент времени t . Оказывается, что знание этих двух чисел достаточно для определения комплексного амплитудного коэффициента отражения $r(t)$ в тот же момент времени t .
2. Предполагается, что внутренняя структура пленки не изменяется в течение временного интервала, необходимого для измерения производной dR/dt . Поэтому уравнение (2.35) справедливо на определенных стадиях роста пленки, но может быть неверно на других стадиях, когда, в частности, происходит имплантация или диффузия атомов.
3. Уравнение (2.35) выведено при важном предположении, что поляризуемость вещества $\varepsilon - 1$ пропорциональна его плотности. Поэтому это уравнение может быть использова-

но в рентгеновской или нейтронной рефлектометрии, но несправедливо, например, в видимом диапазоне.

4. Строго говоря, уравнение (2.35) справедливо для s-поляризованного излучения. Однако при малых углах скольжения, что типично для рентгеновской и нейтронной рефлектометрии, различие между коэффициентами отражения s- и p- поляризованного излучения пренебрежимо мало.

Если перечисленные условия выполнены, то фазовая проблема рентгеновской рефлектометрии решается точно и очень просто, причем решение записывается в явной аналитической форме. Поскольку (2.35) представляет собой линейное алгебраическое уравнение для неизвестных функций $\text{Re}(R(t))$ и $\text{Im}(R(t))$, то фаза отраженной волны в момент времени t может быть найдена без какой-либо информации о предистории роста структуры. Поэтому для определения фазы амплитудного коэффициента отражения от, например, многослойной структуры нет необходимости измерять коэффициент отражения в течение всего процесса напыления. Достаточно измерять коэффициент отражения только в течение короткого временного интервала на последней стадии роста с единственной целью определить производную dR/dt в конце напыления. Тогда фаза амплитудного коэффициента отражения от структуры может быть найдена с помощью уравнений (2.35)-(2.36) независимо от химического состава структуры, материала подложки, наличия интерслоев и т.д. Единственными параметрами, которые необходимо знать, являются значение потока падающих частиц и его химического состава на последней стадии роста структуры.

Аналогичным образом предположим, что подложка представляет собой сложную слоистую структуру неизвестного состава. Тем не менее, если напылить на вершину этой структуры тонкую пленку известного материала и измерить in-situ коэффициент отражения на последней стадии напыления, то не составляет труда определить фазу амплитудного коэффициента отражения от всей системы (неизвестная подложка+пленка).

Поскольку мнимая часть фактора атомного рассеяния (т.е. эффекты поглощения) содержится в уравнении (2.35), то предлагаемый подход может быть использован для излучения любой длины волны (от жесткого рентгеновского до экстремального ультрафиолетового) до тех пор, по крайней мере, пока поляризуемость вещества остается пропорциональной его плотности.

2.3.2. Анализ экспериментальных результатов

В этом параграфе будут рассмотрены результаты простейшего эксперимента по измерению коэффициента отражения в зависимости от времени напыления пленки вольфрама на суперполированную кремниевую подложку [A43, A44].

Измерения были проведены на канале ВМ5 Европейского центра синхротронного излучения (ESRF, Гренобль, Франция). Описание канала и технологической камеры приведены выше в разделе 1.4.1. Найдено (см. ниже), что падающий поток атомов вольфрама составлял $q = 7.26 \cdot 10^{13}$ атом/см²/сек, что соответствует скорости напыления около 12 нм/сек. In-situ измерения коэффициента отражения проводились при энергии квантов $E=17.5$ кэВ и при угле скольжения зондирующего пучка $\theta = 0.5^\circ$, примерно равному удвоенному критическому углу ПВО массивного вольфрама. Измерения отражения проводились каждые 7 сек, что соответствует напылению примерно одной трети монослоя вольфрама. Экспериментальный коэффициент отражения показана точками на рис.2.27.

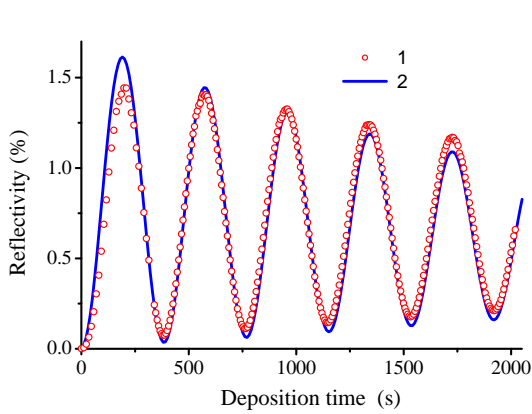


Рис. 2.27. Измеренный коэффициент отражения от растущей пленки вольфрама в зависимости от времени напыления (кружки). Энергия квантов $E = 17.5$ кэВ, угол скольжения $\theta = 0.5^\circ$. Сплошная кривая - результат расчета в предположении постоянной плотности пленки. (Из [A44]).

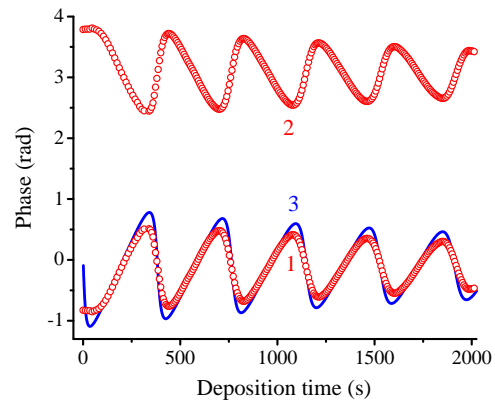


Рис. 2.28. Два решения фазовой проблемы (1 и 2), полученные непосредственно из экспериментальной кривой отражения. Сплошная кривая 3 - результат расчета в предположении постоянной плотности пленки. (Из [A44]).

В простейшем случае потока частиц постоянного химического состава, как это и было в нашем эксперименте, уравнение (2.33) позволяет определить изменение плотности пленки по мере ее роста, поскольку амплитудный коэффициент отражения был найден выше:

$$\rho(t) = \frac{2ikq\mu r(t) \sin \theta}{\frac{dr}{dt}(t) + \frac{ikqA}{2 \sin \theta} (f_1 - if_2) [1 + r(t)]^2} \quad (2.37)$$

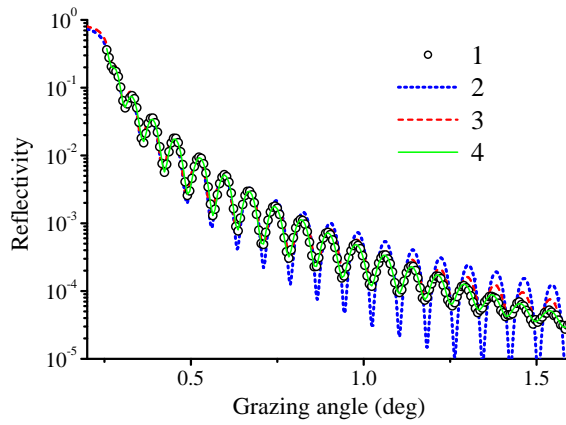


Рис. 2.29. Коэффициент отражения как функция угла скольжения, измеренный после напыления пленки вольфрама толщиной 24.6 нм. Кривая 2 - результат расчета в предположении постоянной плотности пленки. Кривая 3 рассчитана для профиля плотности вольфрама, найденного из уравнения (2.37) и показанного на рис.2.30 (кривая 1). Кривая 4 - решение обратной задачи рефлектометрии с использованием описанного выше подхода. Соответствующий профиль плотности вольфрама показан на рис.2.30 (кривая 3). (Из [A43]).

Фаза амплитудного коэффициента отражения $\varphi(t)$, определенная непосредственно из экспериментальной кривой $R(t)$ с помощью уравнений (2.35)-(2.36), показана кружками на рис.2.28. Как было отмечено выше, имеется два возможных решения фазовой проблемы, показанных кривыми 1 и 2 на рис.2.28. Кривая 3 на рис.2.28, а также сплошная кривая на рис.2.27 были рассчитаны в рамках простейшей модели, предполагающей постоянную по глубине плотность вольфрама. Поскольку кривые 1 и 3 на рис.2.28 близки друг к другу, можно заключить, что именно решение 1 соответствует реальности. Тем не менее, как экспериментальная фазовая кривая, так и измеренная кривая отражения заметно отличаются от модельного расчета, демонстрируя, что простейшая модель постоянной плотности не совсем правильна.

Кроме того, после напыления пленки вольфрама толщиной 24.6 нм была измерена кривая отражения в зависимости от угла скольжения зондирующего пучка, причем образец сохранялся в вакууме. Экспериментальная кривая показана точками на рис.2.29. Кривая 2 - результат расчета в модели постоянной плотности. Видно, что различие между кривой 2 и экспериментальными точками увеличивается драматически при увеличении угла скольжения, демонстрируя еще раз неточность модели пленки постоянной плотности.

Используя это уравнение и учитывая, что $h(t) = q \int_0^t \mu(t')/\rho(t') dt'$, можно определить изменение плотности пленки по глубине, показанное кривой 1 на рис.2.30. Поверхность подложки расположена в точке $z = 0$. Отметим, что второе возможное решение фазовой пробле-

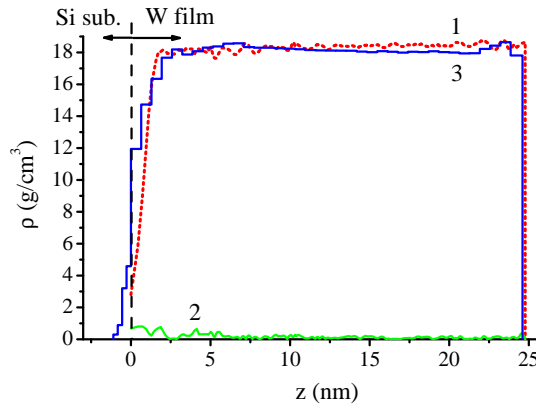


Рис. 2.30. Профиль плотности вольфрама, найденный с использованием уравнения (2.35) (кривая 1) и с использованием описанного выше подхода. Кривая 2 показывает нефизическую комплексную часть плотности $|\Delta\rho|$, связанную с неточностью модели роста (предположение о неизменности внутренней структуры образца во время напыления) и с экспериментальными ошибками. Поверхность подложки расположена в точке $z = 0$. Ось Z направлена в вакуум. (Из [A43]).

мы (кривая 2 на рис.2.28) приводит к отрицательной плотности пленки, подтверждая тем самым нефизический характер этого решения.

Из рис.2.30 видно, что плотность вольфрамовой пленки практически постоянна по глубине, исключая область толщиной около 2 нм, расположенную рядом с подложкой, где плотность вольфрама уменьшена. Уменьшение плотности может быть связано с проникновением атомов вольфрама в кремниевую подложку на начальной стадии магнетронного напыления. Поскольку наш подход несправедлив во временных интервалах, когда происходит изменение внутренней структуры образца, можно ожидать, что как фаза коэффициента отражения, так и профиль плотности определяются неправильно в течение первых 60-80 сек напыления, что эквивалентно росту пленки толщиной 0.8-1 нм. В самом деле, найденная плотность вольфрама вблизи подложки слишком мала с физической точки зрения. Кроме того, на начальной стадии роста экспериментальная фазовая кривая радикально отличается от модельных расчетов (см. рис. 2.28): экспериментальная фаза практически постоянна, в то время как модель постоянной плотности приводит к резко падающей фазовой кривой. Обсудим, поэтому, более детально точность определения фазы и профиля плотности.

Во-первых, уравнение (2.37), которое определяет профиль плотности, содержит комплексные величины. Ясно, что если необходимые условия справедливости уравнения (2.35) выполнены, а экспериментальные ошибки пренебрежимо малы, то мнимая часть правой части уравнения (2.37) равна нулю, обеспечивая вещественное значение плотности. Однако вычисления, проведенные с помощью этого уравнения, привели к нефизической мнимой части плотности пленки $\Delta\rho$, которая показана кривой 2 на рис.2.30. Тем самым, отношение

$|\Delta\rho|/\rho$ характеризует точность подхода. При большой толщине пленки ($h > 5$ нм) это отношение не превышает 1%, но увеличивается до 27% при ее малой толщине ($h < 0.5 - 1$ нм), снова демонстрируя несправедливость подхода на начальной стадии роста пленки.

Во-вторых, мы рассчитали угловую зависимость коэффициента отражения, используя найденный профиль плотности пленки (кривая 3 на рис.2.29). Эта кривая лежит намного ближе к экспериментальным значениям по сравнению с кривой 2, рассчитанной в модели постоянной плотности. Подчеркнем, что кривая 3 рассчитана без введения каких-либо подгоночных параметров, но с использованием профиля плотности, найденного из временной зависимости коэффициента отражения при фиксированном угле скольжения падающего пучка.

В-третьих, и числитель, и знаменатель в правой части уравнения (2.37) являются осциллирующими функциями времени напыления. В результате, если изменить значение потока на 10% по сравнению с правильным значением ($q = 7.26 \cdot 10^{13}$ атом/см²/сек), то на профиле плотности появляются ярко выраженные нефизические осцилляции (см. рис. 2.31), причем период осцилляций соответствует периоду, наблюдаемому на рис.2.27. Тем самым, уравнение (2.37) позволяет определить падающий поток с точностью лучше 1% ($\pm 0.3\%$ в нашем случае вольфрамовой пленки). Этот вывод представляется чрезвычайно важным для решения обратной задачи рефлектометрии. Действительно, поток q , входящий в приведенные выше уравнения, представляет собой не реальный поток падающих частиц, а некоторый "эффективный скорректированный на коэффициент адгезии". Более того, коэффициент адгезии может быть разным в начале напыления, когда атомы вольфрама падают на поверхность кремния, и после образования сплошной пленки. Рисунки 2.30 и 2.31 позволяют заключить, что (а) эффективный поток постоянен во времени (т.е. толщина пленки вольфрама увеличивается линейно со временем напыления) и (б) эффективный поток может быть определен с высокой точностью, по крайней мере, при толщине пленки вольфрама, превышающей 2 нм. Поэтому, если мы хотим исследовать тонкую структуру интерслоя между пленкой вольфрама и другим веществом, необходимо напылить пленку вольфрама толщиной более 2 нм для того, чтобы гарантировать правильное найденное значение эффективного потока частиц и его постоянство во времени.

Наконец, мы реконструировали профиль плотности вольфрамовой пленки на основе измеренной угловой зависимости коэффициента отражения $R(\theta)$ с использованием подхода, аналогичного рассмотренному выше. Поскольку в рассматриваемом случае толщина пленки вольфрама велика ($h = 24.6$ нм), то эффекты поглощения должны быть приняты во внимание. Именно поэтому мы реконструировали профиль плотности вольфрама, а не ве-

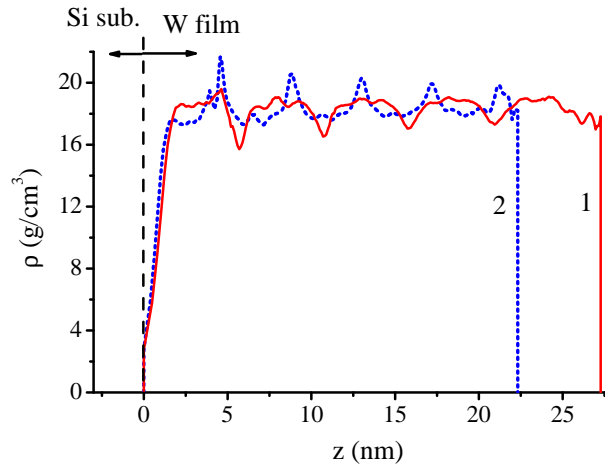


Рис. 2.31. Профиль плотности вольфрама, найденный с помощью уравнения (2.37) в предположении, что поток q на 10% больше (1) или на 10% меньше оптимального значения $q = 7.26 \cdot 10^{13}$ атом/см²/сек. Поверхность подложки расположена в точке $z = 0$. (Из [A43]).

ществленную часть диэлектрической проницаемости, причем концентрация атомов кремния в подложке предполагалась постоянной по глубине, несмотря на имплантацию атомов вольфрама в подложку, а наличием окисного слоя на поверхности подложки пренебрегалось. Реконструированный профиль плотности показан кривой 3 на рис.2.30, а точность подгонки измеренного коэффициента отражения демонстрируется кривой 4 на рис.2.29.

Профили плотности 1 и 3 на рис.2.30 очень похожи, несмотря на то, что они были реконструированы на основе совершенно разных экспериментальных данных с использованием разных теоретических подходов: профиль 1 был определен из временной зависимости коэффициента отражения при фиксированном угле скольжения, в то время как профиль 3 - из угловой зависимости коэффициента отражения при фиксированной толщине пленки. Профиль 3, который на наш взгляд, более точный, чем профиль 1, показывает наличие вольфрама в подложке, причем концентрация атомов вольфрама спадает экспоненциально на глубину около 1 нм, что может быть объяснено имплантацией и/или диффузией атомов вольфрама на начальной стадии напыления пленки.

Оба подхода приводят к практически одинаковому значению толщины пленки (различие в толщине около 0.17 нм), почти одинаковому значению фазы амплитудного коэффициента отражения при угле скольжения $\theta = 0.4^\circ$: $\varphi = -0.46$ рад для профиля 1 и $\varphi = -0.40$ рад для профиля 3. Наконец, полное число напыленных атомов вольфрама, которое может быть определено из профиля плотности, отличается менее чем на 1%: $N = 1.47 \cdot 10^{17}$ атом/см² для профиля 1 и $N = 1.48 \cdot 10^{17}$ атом/см² для профиля 3.

2.3.3. Влияние шероховатостей на точность определения фазы

В проведенном выше анализе экспериментальных данных влиянием шероховатостей пренебрегалось, хотя никакая поверхность не может рассматриваться как абсолютно гладкая по отношению к коротковолновому рентгеновскому излучению. Влияние шероховатостей проявляется двояким образом. Во-первых, шероховатость изменяет фазу зеркально отраженной волны (т.е. фазу амплитудного коэффициента отражения). Во-вторых, шероховатость деформирует кривую отражения и, следовательно, приводит к ошибке в определении фазы с использованием уравнения (2.35). Тем самым, вообще говоря, уравнения (2.33), (2.35) следует модифицировать, чтобы учесть влияние шероховатостей. Однако оказывается, что в условиях нашего эксперимента влиянием шероховатостей на определение фазы можно пренебречь.

В дополнение к измерениям угловой зависимости коэффициента отражения были измерены и индикатрисы рассеяния после напыления пленки. Используя описанный выше подход, были найдены три PSD-функции, характеризующие шероховатость пленки (см. рис.2.32). Исследуемый образец был очень гладкий: шероховатость полированной кремниевой пластины составляла лишь 0.13 нм в диапазоне пространственных частот от $4 \cdot 10^{-4}$ до $5 \cdot 10^{-2}$ нм⁻¹. Это значение слегка увеличилось до 0.20 нм после напыления пленки вольфрама толщиной 24.6 нм. Поведение PSD-функций вполне обычное. В области высоких пространственных частот p функции PSD_{ss} и PSD_{ff} ведут себя в соответствии с обратным степенным законом $\sim 1/p^{1+2\alpha}$, где параметр Хёрста $\alpha = 0.14$ для подложки и $\alpha = 0.18$ для внешней поверхности пленки, а функция PSD_{sf} спадает экспоненциально, демонстрируя отсутствие корреляции между мелкомасштабными шероховатостями пленки и подложки. Наоборот, при малых пространственных частотах все PSD-функции практически совпадают, что свидетельствует о полной вертикальной корреляции длинно-масштабных шероховатостей.

Фаза амплитудного коэффициента отражения от исследованного образца, рассчитанная с помощью выражений (2.35)-(2.36), показана на рис.2.33. Для простоты при расчетах использовалась простейшая модель пленки с постоянной плотностью (18 г/см³). Кривые 1 и 2 были рассчитаны в предположении абсолютно гладкой и шероховатой пленки, соответственно. При расчетах PSD-функции, показанные на рис.2.32, были экстраполированы в область высоких частот физически обоснованным образом, а именно, функции PSD_{ss} и PSD_{ff} по обратному степенному закону, а функция PSD_{sf} в соответствии с экспоненциальной зависимостью. Экстраполяция в область малых частот проводилась в соответствии с ABC моделью (1.129). Как видно из рисунка, кривые 1 и 2 совпадают друг с другом при $\theta < 0.7^\circ$, хотя при увеличении угла скольжения они начинают отличаться. Тем самым, в условиях нашего эксперимента

($\theta = 0.5^\circ$) шероховатости не влияют на фазу отраженной волны.

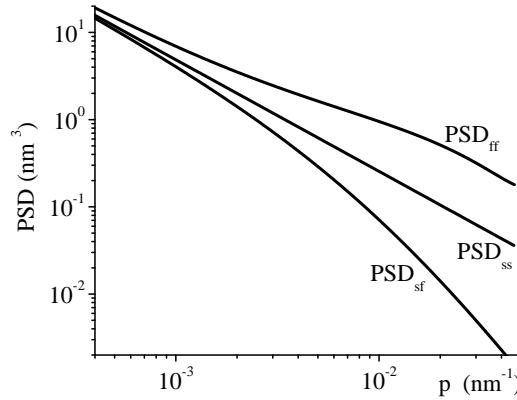


Рис. 2.32. Измеренные одномерные PSD-функции шероховатости кремниевой подложки (PSD_{ss}) и внешней поверхности пленки вольфрама (PSD_{ff}), а также функция PSD_{sf} , характеризующая корреляцию шероховатостей пленки и подложки. Все функции усреднены по статистическим осцилляциям. (Из [A43]).

Действительно, в случае полной вертикальной корреляции и большого радиуса корреляции в продольном направлении изменение амплитудного коэффициента отражения от слоистой структуры описывается фактором Дебая-Валлера: $r_{spec}(\theta)/r_0(\theta) = 1 - 2(k\sigma \sin \theta)^2$, где r_0 - коэффициент отражения от идеально гладкой структуры. Поскольку фактор Дебая-Валлера вещественный, то он не влияет на фазу амплитудного коэффициента отражения. Тем самым, различие между кривыми 1 и 2 на рис.2.33 обусловлено исключительно влиянием некоррелированных (в вертикальном направлении) мелкомасштабных шероховатостей, чья среднеквадратичная высота очень мала.

Для измерения коэффициента отражения использовалась ионизационная камера с широкой (6.7°) входной апертурой, так что в нашем эксперименте измерялся суммарный коэффициент отражения, т.е. сумма зеркально отраженной и диффузно рассеянной компонент $R_\Sigma = R_{spec} + TIS$. Как уже было проанализировано в разделе 1.3.2, влияние шероховатостей на суммарный коэффициент отражения мал, что иллюстрируется рис.2.34. Как и на предыдущем рисунке, кривые 1 и 2 рассчитаны в предположении абсолютно гладкой и шероховатой пленки, соответственно. Эти две кривые совпадают при $\theta < 0.7-0.8^\circ$. Следовательно в условиях нашего эксперимента уравнения (2.33), (2.35) могут быть использованы для определения фазы отраженной волны без какой-либо их модификации. Более того, суммарный коэффициент отражения не зависит от вида экстраполяции PSD-функций в область малых пространственных частот (детальное обоснование этого утверждения было представлено выше в разделе 1.3.2). Некоторое различие между кривыми 1 и 2 связано с двумя обстоятельствами: (а) исчезновением вертикальной корреляции в области высоких пространственных

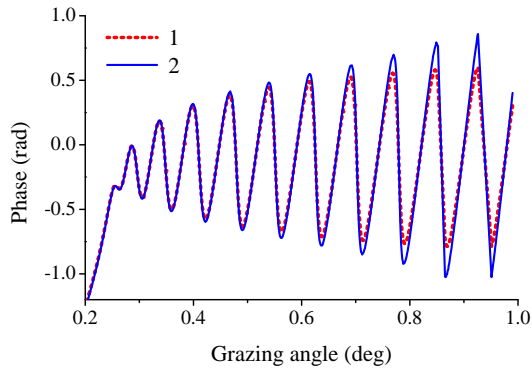


Рис. 2.33. Рассчитанная фаза амплитудного коэффициента отражения в модели постоянной плотности пленки вольфрама ($\rho = 18 \text{ г/см}^3$) как функция угла скольжения зондирующего пучка ($E = 17.5 \text{ кэВ}$). Расчеты проведены для абсолютно гладкой пленки (1) и для шероховатой пленки (2) с использованием PSD-функций, показанных на рис.2.32.

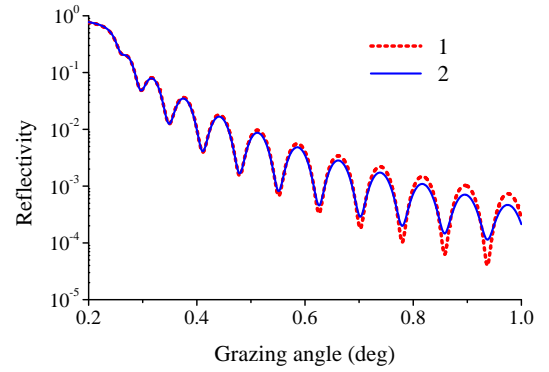


Рис. 2.34. Рассчитанный суммарный коэффициент отражения в модели постоянной плотности пленки вольфрама ($\rho = 18 \text{ г/см}^3$) как функция угла скольжения зондирующего пучка ($E = 17.5 \text{ кэВ}$). Расчеты проведены для абсолютно гладкой пленки (1) и для шероховатой пленки (2) с использованием PSD-функций, показанных на рис.2.32.

частот и (б) значительным вкладом высокочастотных шероховатостей (малый параметр Хёрста) в отражение и рассеяние.

Таким образом, в условиях нашего эксперимента влияние шероховатостей на определение фазы амплитудного коэффициента отражения пренебрежимо мало. При увеличении угла скольжения или в случае более шероховатых образцов влияние шероховатостей становится более заметным и, следовательно, эффект шероховатостей должен быть принят во внимание. Разработка самосогласованного подхода, позволяющего одновременно определить параметры шероховатостей, найти фазу амплитудного коэффициента отражения и, наконец, восстановить профиль диэлектрической проницаемости, обсуждается в следующем разделе.

2.4. Разработка самосогласованного модельно независимого подхода к исследованию трехмерной структуры пленочных покрытий

2.4.1. Итерационная процедура

В этом разделе мы обсудим самосогласованный подход к исследованию 3D структуры слоистых сред. Подход основан на итерационной процедуре, так что параметры шероховатости, найденные на предыдущей итерации, принимаются во внимание при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости на последующей итерации и, наоборот, найденный

профиль учитывается при определении PSD-функций исследуемого образца. Продемонстрируем подход на примере пленки вольфрама толщиной 5.1 нм, той же самой, о которой шла речь в разделе 2.2.6.

В дополнение к кривой отражения, показанной на рис.2.35 (незакрашенные кружки 1), были измерены три индикатрисы рассеяния при разных углах скольжения θ_0 зондирующего пучка (символы на рис.2.36) [A59]. Угловые распределения рассеянной интенсивности были проинтегрированы по азимутальному углу для увеличения детектируемого сигнала и уменьшения статистических ошибок измерения. Резкие минимумы на экспериментальных кривых в направлении зеркального отражения, т.е. при угле рассеяния $\theta = \theta_0$ обусловлены узкой заслонкой (beam stop), препятствующей попаданию зеркально отраженного пучка высокой интенсивности на координатно-чувствительный детектор для предохранения его от насыщения. Как уже отмечалось выше, осцилляции на индикатрисе рассеяния обусловлены интерференцией волн, рассеянных от статистически коррелированных шероховатых границ раздела пленки.

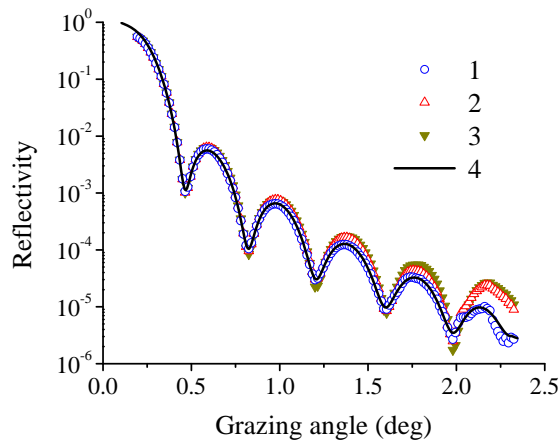


Рис. 2.35. Экспериментальный коэффициент отражения ($E = 17.5$ кэВ) от пленки вольфрама толщиной 5.1 нм (1). Кривые 2 и 3 - кривые отражения, скорректированные на эффекты шероховатостей на 2-м и 3-м шаге итерационной процедуры, соответственно. Кривая 4 рассчитана с использованием профиля диэлектрической проницаемости и PSD-функций пленочных шероховатостей, показанных на рис.2.38 и рис.2.37. (Из [A59]).

Рассматривая (1.55) как систему линейных уравнений для определения неизвестных PSD-функций, все эти три функции могут быть найдены из экспериментальных индикатрис рассеяния без использования каких-либо модельных предположений о статистических свойствах шероховатостей. В то же время, как хорошо известно [140], решение системы линейных алгебраических уравнений представляет собой плохо обусловленную задачу. В нашем случае прямое решение этих уравнений приводит к сильно осциллирующим PSD-функциям и, более

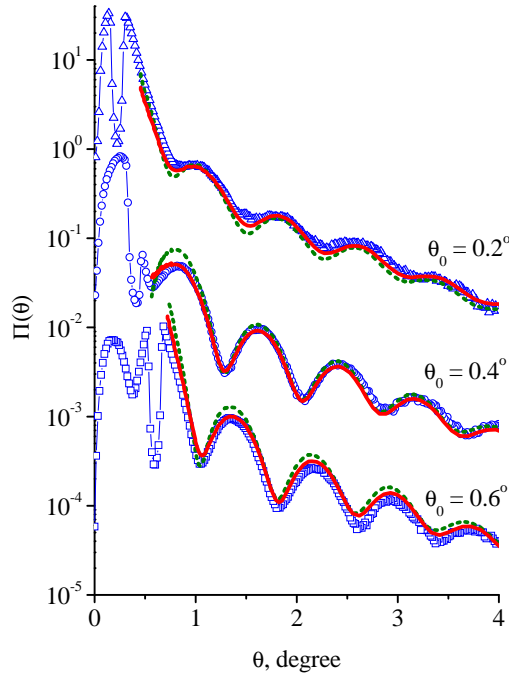


Рис. 2.36. Экспериментальные индикатрисы рассеяния рентгеновского излучения ($E = 17.5$ кэВ), проинтегрированные по азимутальному углу, от пленки вольфрама толщиной 5.1 нм (символы). Индикатрисы были измерены при трех разных углах скольжения зондирующего пучка $\theta_0 = 0.2^\circ$, 0.4° и 0.6° . Представлены также индикатрисы рассеяния, рассчитанные в рамках простейшей модели пленки постоянной плотности (пунктирные кривые) и с учетом реконструированного профиля диэлектрической проницаемости (сплошные кривые). Кривые сдвинуты по вертикальной оси на фактор 10 по отношению друг к другу. (Из [A59]).

того, к нефизическим отрицательным значениям функций PSD_{ff} и PSD_{ss} в том или ином интервале пространственных частот. Поэтому нахождение PSD-функций основывалось на минимизации следующей функции невязки

$$MF = \sum_i \int_{p_{min}}^{p_{max}} \left[\frac{\Pi_{exp}(p, \theta_0^{(i)}) - \Pi_{cal}(p, \theta_0^{(i)})}{\Pi_{exp}(p, \theta_0^{(i)})} \right]^2 dp + Q \sum_{i,j=s,f} \int_{p_{min}}^{p_{max}} \left[\frac{d \ln(PSD_{ij}(p))}{d \ln p} \right]^2 dp \quad (2.38)$$

где Π_{exp} и Π_{cal} означают измеренные и рассчитанные индикатрисы рассеяния при трех различных углах скольжения $\theta_0^{(i)}$ зондирующего пучка, а значения PSD-функций при 100 различных значениях пространственной частоты, лежащей в измеренном в эксперименте интервале $p \in [3.5 \cdot 10^{-4}, 3.5 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}]$, рассматривались как параметры минимизации. Вторая сумма в (2.38) представляет собой стабилизирующий оператор, обеспечивающий необходимую гладкость искомых PSD-функций. Параметр Q выбирался максимально большим, но еще обеспечивающим разницу между рассчитанной и измеренной индикатрисами рассеяния, лежащей в пределах экспериментальной ошибки. В качестве начального приближения использовалась экспериментальная PSD-функция исходной подложки, показанная на рис.2.37

штрих-пунктирной кривой PSD_0 . При минимизации функции невязки (2.38) было наложено единственное дополнительное условие: коэффициент вертикальной корреляции (1.218) не должен превышать единицу. Для этого вместо функции $\text{PSD}_{sf}(p)$ была введена новая неизвестная функция $f(p)$ так, что $\text{PSD}_{sf}(p) = \sqrt{\text{PSD}_{ss}(p) \cdot \text{PSD}_{ff}(p)} \cdot \exp[-f^2(p)]$.

Прежде всего, мы а priori предположили, что шероховатость подложки не изменилась после напыления пленки, и использовали простейшую модель пленки с постоянной плотностью $\rho = 17 \text{ г/см}^3$, напыленной на однородную подложку. Такое значение плотности позволяет наилучшим образом описать зависимость коэффициента отражения при фиксированном угле скольжения $\theta_0 = 0.4^\circ$ от времени напыления. В рамках этой модели выражение для индикатрисы рассеяния (1.55) упрощается и приводится к виду (1.169)-(1.170). Найденные функции PSD_{ff} и PSD_{sf} показаны на рис.2.37а,с пунктирными кривыми. Точность подгонки, которая иллюстрируется пунктирными кривыми на рис.2.36, не слишком высокая: различие между экспериментальными и рассчитанными индикатрисами рассеяния достигает 40-50%, что существенно превышает экспериментальную ошибку измерений. Увеличение параметра Q в (2.38), хотя и улучшает точность подгонки, но приводит к нефизическим осцилляциям PSD-функций.

Несколько лучшая точность может быть достигнута, если рассматривать PSD-функцию подложки как неизвестную при минимизации функции невязки. Однако в этом случае оказывается, что реконструированная функция $\text{PSD}_{ss}(p)$ оказывается примерно в 3-4 раза меньше PSD-функции исходной подложки (PSD_0) во всем измеряемом диапазоне пространственных частот. На наш взгляд такое сглаживание шероховатостей подложки представляется нереалистичным с физической точки зрения.

Рассмотрим теперь все три PSD-функции как неизвестные, но примем во внимание реконструированный профиль диэлектрической проницаемости, показанный точечной кривой 1 на рис.2.38. Процедура минимизации точно такая же, как и раньше. Однако электродинамические факторы в выражении для индикатрисы рассеяния (1.55) становятся более сложными, поскольку они зависят от распределения поля внутри невозмущенной слоистой среды, и должны быть найдены численно как решение одномерного волнового уравнения для реконструированного распределения $\varepsilon(z)$. Найденные PSD-функции, показанные на рис.2.37 точечными кривыми, похожи на найденные выше в модели однородной пленки, хотя и отличаются по абсолютному значению. Как результат, коэффициент конформности, показанный на рис.2.37d, указывает на увеличение вертикальной корреляции в области высоких пространственных частот. Интересно, что найденная PSD-функция подложки после напыления пленки (PSD_{ss} на рис.2.37 практически совпадает с PSD-функцией исходной подложки (PSD_0),

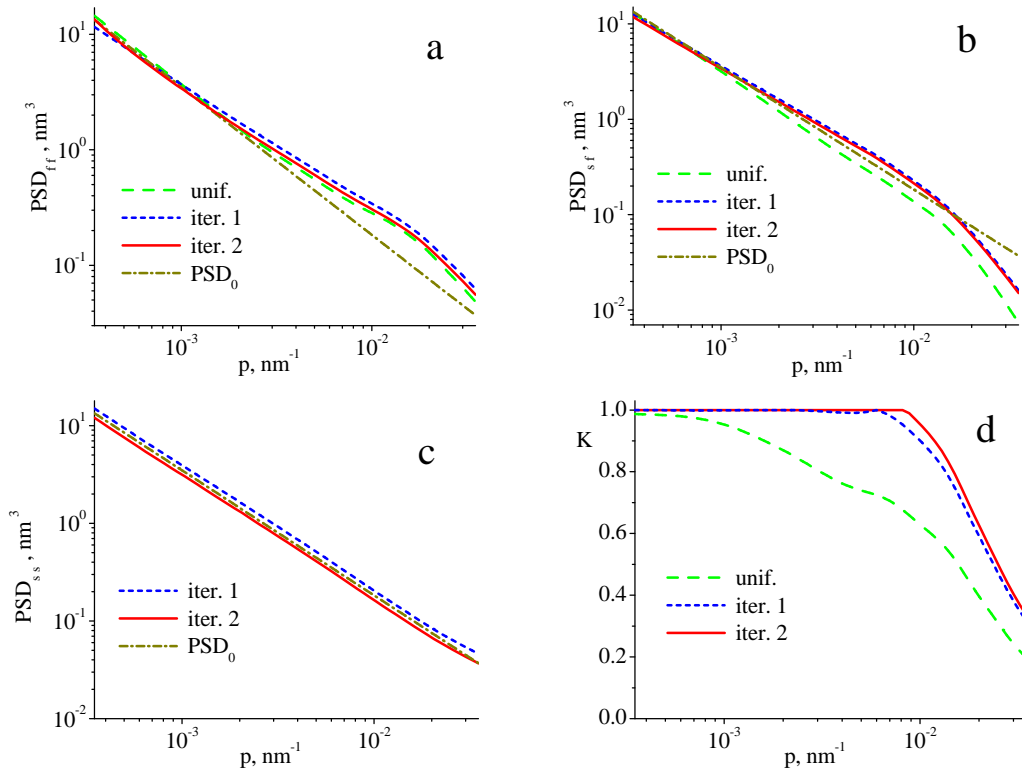


Рис. 2.37. Функции PSD_{ff} (a), PSD_{sf} (b) и PSD_{ss} (c) пленки вольфрама толщиной 5.1 нм, найденные из набора экспериментальных индикатрис рассеяния. Показана также PSD-функция исходной кремниевой подложки (PSD_0), усредненная по статистическим осцилляциям. Точечные кривые показывают PSD-функции, найденные в простейшей модели однородной пленки на однородной подложке и в предположении, что PSD-функция подложки не изменилась после напыления пленки. Пунктирные и сплошные кривые показывают PSD-функции, полученные на различных шагах итерационной процедуры. (d) Коэффициент вертикальной корреляции (конформности), найденный в модели однородной пленки и на различных шагах итерационной процедуры.

т.е. напыление пленки действительно не изменяет шероховатость подложки в измеряемом диапазоне пространственных частот, по крайней мере.

Столь большая разница в PSD-функциях подложки PSD_{ss} , найденных при использовании моделей пленок с постоянной и изменяющейся по глубине плотностью, легко может быть объяснена на основе выражения (1.55) для индикатрисы рассеяния. Дело заключается в том, что электродинамические факторы A_{sf} и A_{ss} пропорциональны скачку диэлектрической проницаемости $\Delta(h)$ на границе раздела пленка-подложка и его квадрату, соответственно. Поскольку этот скачок почти в 2 раза меньше для пленки с переменной плотностью (рис.2.38), PSD-функции PSD_{sf} и PSD_{ss} должны быть увеличены, чтобы обеспечить как изменение индикатрисы рассеяния в среднем, так и амплитуду наблюдаемых в эксперименте осцилляций. Точность подгонки индикатрис рассеяния, рассчитанных с учетом реконструированного про-

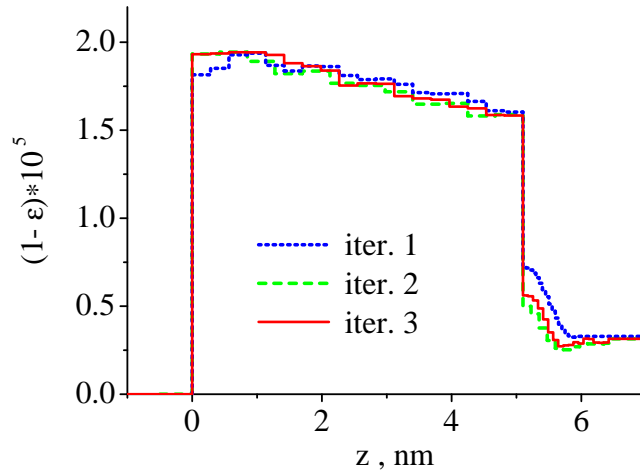


Рис. 2.38. Сравнение профилей диэлектрической проницаемости пленки вольфрама на кремниевой подложки, найденные на различных шагах итерационной процедуры.

филя $\varepsilon(z)$, иллюстрируется сплошными кривыми на рис.2.36. Разница между теоретическими и экспериментальными индикатрисами рассеяния не превышает 15%, что сравнимо с экспериментальными ошибками измерений, а среднеквадратичное отклонение кривых составляет около 5%.

Тем самым мы завершили первую итерацию, а именно: реконструировали профиль диэлектрической проницаемости, не учитывая в явном виде влияние шероховатостей на кривую отражения (рис.2.38, итерация 1), а затем определили все три PSD-функции шероховатостей границ раздела, принимая во внимание реконструированный профиль $\varepsilon(z)$ (рис.2.37, итерация 1). Наиболее выраженное отличие по сравнению с моделью однородной пленки видно для кросс-корреляционной функции PSD_{sf} . В результате коэффициент конформности сильно изменился, демонстрируя полную вертикальную корреляцию шероховатостей пленки и подложки вплоть до частоты $p \sim 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$. Тем самым, профиль диэлектрической проницаемости обязательно должен быть принят во внимание при количественном анализе вертикальной корреляции шероховатостей.

После этого следует провести вторую итерацию, т.е. заново найти профиль диэлектрической проницаемости, но уже с учетом влияния шероховатостей на кривую отражения $R(\theta_0)$, а затем уточнить все PSD-функции, принимая во внимание новый уточненный профиль $\varepsilon(z)$. Итерационную процедуру следует продолжать до тех пор, пока как профиль диэлектрической проницаемости, так и PSD-функции шероховатостей не перестанут изменяться от итерации к итерации. Схема, поясняющая итерационную процедуру, представлена на рис.2.39.

Основная сложность состоит в том, чтобы корректно учесть влияние шероховатостей на кривую отражения $R(\theta)$. Здесь возникают две проблемы, одна из которых - чисто расчетная,

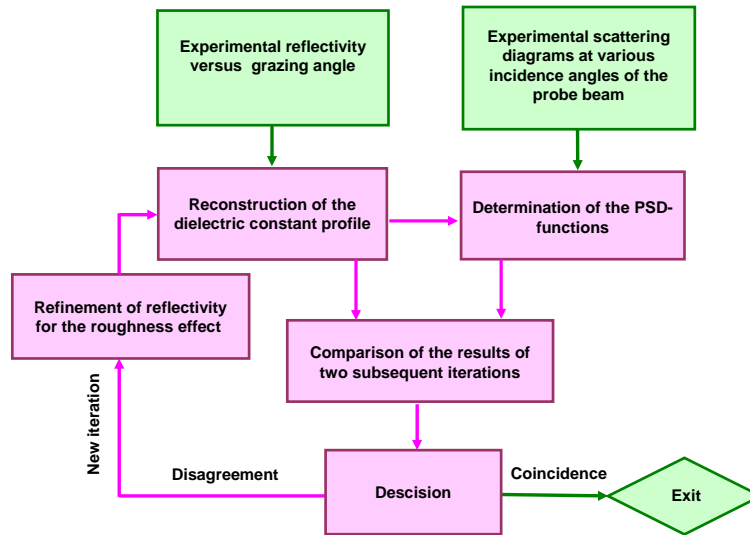


Рис. 2.39. Схема, поясняющая итерационную процедуру для одновременной реконструкции профиля диэлектрической проницаемости по глубине и нахождения всех PSD-функций шероховатостей пленочного покрытия.

а вторая - более фундаментальная. Коэффициент зеркального отражения от шероховатой пленки определен в (1.19), (1.56)-(1.57). Видно, что выражение для поправки $\Delta\alpha_1$ довольно громоздкое и представляет собой интегралы от PSD-функций пленочных шероховатостей и быстро осциллирующих функций поля невозмущенной волны внутри слоисто-неоднородной среды, которые в общем случае должны быть найдены численно как решение соответствующего одномерного волнового уравнения. Тем самым, если коэффициент отражения рассчитывается с учетом шероховатостей, минимизация функции невязки (2.16), зависящей от десятков, а иногда и сотен подгоночных параметров (значений диэлектрической проницаемости внутри малых субинтервалов на оси Z), требует миллионов расчетов кривой отражения, что приводит к нереалистично большому времени счета даже для современных компьютеров.

Еще более существенным является то, что в выражение (1.56) входят среднеквадратичные высоты шероховатостей пленки σ_f и подложки σ_s , т.е. интегралы от соответствующих PSD-функций во всем бесконечном интервале пространственных частот. В то же время, в эксперименте мы можем определить PSD-функции лишь в ограниченном диапазоне частот, поскольку измерения проводятся в ограниченном интервале углов рассеяния. Мы можем экстраполировать PSD-функции шероховатости пленки и подложки в область высоких пространственных частот, предполагая, что в соответствии с физически разумной скэйлинговой моделью, эти функции убывают по обратному степенному закону, а кросс-корреляционная PSD-функция убывает экспоненциально. Однако возникает вопрос, а каким образом следует экстраполировать PSD-функцию в область низких пространственных частот для того,

чтобы корректно определить значение σ ? Дело существенно осложняется тем фактом, что PSD-функции хорошо полированных подложек, как правило, убывают по закону (1.130) во всем измеряемом диапазоне пространственных частот, т.е. в двойном логарифмическом масштабе они близки к прямым, а перехода к насыщению не наблюдается. Тем самым, из измеренной индикатрисы рассеяния можно определить только отношение σ/ξ^α , но не σ и ξ по отдельности. В условиях нашего эксперимента минимальная регистрируемая пространственная частота равна $p_{min} = 3 \cdot 10^{-3} \text{ нм}^{-1}$ и единственное, что мы можем утверждать, это то, что радиус корреляции шероховатостей превышает 10 мкм.

Чтобы обойти эту проблему, во всех наших экспериментах мы измеряем не коэффициент зеркального отражения, а интегральный коэффициент отражения $R_\Sigma = R + \text{TIS}$, т.е. сумму зеркально отраженной интенсивности и интегральную интенсивность рассеянного в вакуум излучения. Наиболее важная для нас особенность интегрального коэффициента отражения состоит в том, что он, в отличие от зеркального, не зависит от вида экстраполяции PSD-функций в область малых пространственных частот. Действительно, в разделе 1.3.2 было показано, что в случае конформных шероховатостей с достаточно большим радиусом их корреляции в плоскости границ раздела, коэффициент интегрального отражения очень близок к коэффициенту отражения от идеально гладкой слоисто-неоднородной среды. Тем самым, поведение PSD-функций в области низких пространственных частот практически не влияет на значение $R_\Sigma(\theta)$. Естественно считать, что в области малых p все три PSD-функции пленочных шероховатостей совпадают друг с другом (конформные шероховатости). Тогда мы можем экстраполировать их в область низких частот с использованием ABC-модели (1.130) и рассчитать интегральный коэффициент отражения с использованием (1.19), (1.56)-(1.57). Оказывается, что при изменении радиуса корреляции шероховатостей от 10 мкм до 1 мм значение интегрального коэффициента отражения в измеряемом диапазоне углов $R_\Sigma(\theta)$ будет меняться лишь в третьей значащей цифре, в то время как значение σ^2 увеличивается в 3.6 раза. Тем самым, проблема экстраполяции PSD-функций в область малых пространственных частот исчезает, если в эксперименте измеряется интегральный коэффициент отражения.

Теперь мы можем определить коэффициент зеркального отражения от идеально гладкой структуры как

$$R_0 \simeq R_\Sigma + \delta R - \text{TIS} \quad (2.39)$$

где интегральный коэффициент отражения R_Σ измерялся в эксперименте, а поправка δR к коэффициенту зеркального отражения, обусловленная рассеянием на шероховатостях, и коэффициент интегрального рассеяния в вакуум TIS рассчитываются с помощью (1.55)-(1.57)

и с использованием PSD-функций и профиля диэлектрической проницаемости, найденных на первой итерации. Уточненный коэффициент отражения показан на рис.2.35, кривая 2. Различие между экспериментальной кривой 1 и ожидаемой кривой отражения от идеально гладкого образца 2 проявляется только в области больших углов скольжения и обусловлено наличием мелкомасштабных (высокочастотных) шероховатостей, среднеквадратичная высота которых очень мала.

Теперь мы можем уточнить профиль диэлектрической проницаемости, основываясь на кривой отражения 3 и повторяя всю описанную выше процедуру. Прежде всего, отметим, что кривая отражения 2, в отличие от измеренной кривой 1, очень хорошо соответствует зависимости $R_0 \sim 1/\sin^4 \theta_0$ при больших углах скольжения, что наглядно иллюстрируется кривой 2 на рис.2.21b. В результате экстремум, наблюдаемый на функции $F(x)$ намного более стабильный (см. рис.2.22b) как по отношению его положения на оси X , так и значения $F(h)$ в максимуме. Уточненное расстояние между особыми точками $h = 5.06 \pm 0.01$ нм почти то же самое, что было найдено выше, хотя точность определения h увеличилась в три раза. Значения скачков диэлектрической проницаемости на границах раздела пленка-вакуум и пленка-подложка находятся с точностью около 6%: $\Delta(0) = (1.93 \pm 0.12) \cdot 10^{-5}$ и $\Delta(h) = -(1.06 \pm 0.06) \cdot 10^{-5}$.

Уточненный профиль диэлектрической проницаемости, показанный на рис.2.38, итерация 2, очень близок к профилю, найденному на предыдущей итерации, когда эффекты шероховатостей не были приняты во внимание. Профиль стал более однородным вблизи поверхности пленки, а имплантированный слой вблизи поверхности подложки - несколько менее выраженным. Значения скачков диэлектрической проницаемости на границах раздела полностью совпадают со значениями, найденными из предварительного анализа функции $F(x)$: $\Delta(0) = 1.93 \cdot 10^{-5}$ и $\Delta(h) = -1.03 \cdot 10^{-5}$. После этого мы можем заново уточнить PSD-функции пленочных шероховатостей, которые мало изменились по сравнению с предыдущей итерацией (см. рис.2.37, итерация). На этом вторая итерация закончилась.

После этого мы провели третью итерацию, приведшую к совсем незначительному уточнению кривой зеркального отражения (рис.2.35, кривая 3). В результате как профиль диэлектрической проницаемости (рис.2.38), так и PSD-функции шероховатостей (не показаны на рис.2.37 из-за совпадения с кривыми, полученными на второй итерации) практически не изменились. Тем самым, всего двух итераций оказалось вполне достаточно, чтобы реконструировать профиль $\varepsilon(z)$ и найти все три PSD-функции в рассматриваемом случае очень гладкой пленки. Точность описания всего набора экспериментальных данных иллюстрируется рис.2.36, где сравниваются экспериментальные и рассчитанные индикатрисы рассеяния,

и рис.2.35, где сплошная кривая показывает кривую отражения, рассчитанную с использованием найденного профиля диэлектрической проницаемости и PSD-функций шероховатостей пленки.

2.4.2. Сравнительный анализ структуры вольфрамовых пленок после напыления, ионного травления и окисления

После измерений, описанных в предыдущем разделе, пленка вольфрама начальной толщины 5.1 нм была стравлена направленным пучком ионов Ag (энергия ионов 1 кэВ, угол падения 10° от поверхности пленки, скорость травления около 10 нм/сек) до толщины около 2.8 нм. Дополнительно была напылена еще одна пленка вольфрама толщиной около 5 нм, которая затем была выдержана на воздухе в течение около 30 мин. Пленки, подвергшиеся травлению и окислению, были исследованы с использованием описанной выше методики самосогласованного анализа 3D структуры.

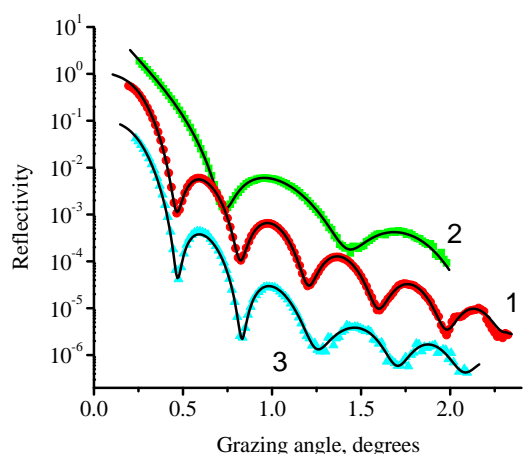


Рис. 2.40. Экспериментальные кривые отражения ($E = 17.5$ кэВ, символы) от пленки вольфрама толщиной 5.1 нм (1), после стравливания слоя толщиной около 2.3 нм (2) и после окисления на воздухе в течение примерно 30 мин (3). Сплошные кривые - результаты расчета с использованием профиля диэлектрической проницаемости и PSD-функций пленочных шероховатостей, показанных на рис.2.41 и рис.2.43. Кривые 2 и 3 сдвинуты по вертикали на фактор 10. (Из [A60]).

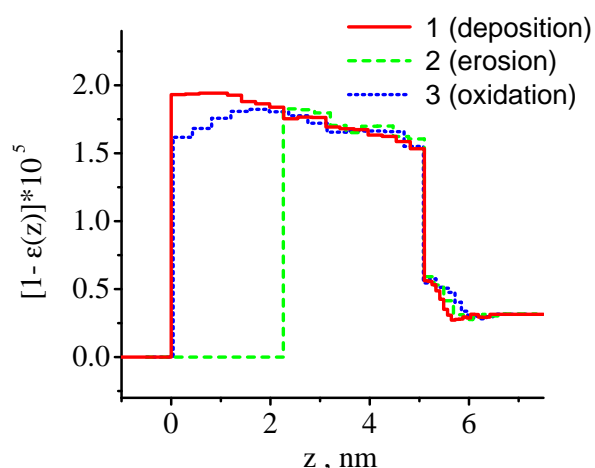


Рис. 2.41. Сравнение профилей диэлектрической проницаемости пленки вольфрама толщиной 5.1 нм непосредственно после напыления на кремниевую подложку (1), после стравливания верхнего слоя толщиной около 2.3 нм (2) и после окисления на воздухе в течение около 30 мин (3).

На рис.2.40, символы, представлены измеренные кривые отражения ($E = 17.5$ кэВ) от пленки вольфрама толщиной 5.1 нм (1), после стравливания верхнего слоя (2) и после окисле-

ния на воздухе (3). Экспериментальные индикатрисы рассеяния от травленой и окисленной пленок, показаны на рис.2.42 для трех разных углов скольжения зондирующего пучка. Типичная особенность индикатрис рассеяния от травленой пленки - отсутствие хорошо выраженных осцилляций по сравнению с индикатрисой рассеяния от исходной пленки (рис.2.36). Тем самым, мы можем сразу же заключить, что вертикальная корреляция шероховатостей пленки и подложки резко уменьшилась после травления. Далее, интенсивность рассеяния при больших углах θ от окисленной пленки заметно выше, чем от исходной. Следовательно, высокочастотные шероховатости увеличились после окисления.

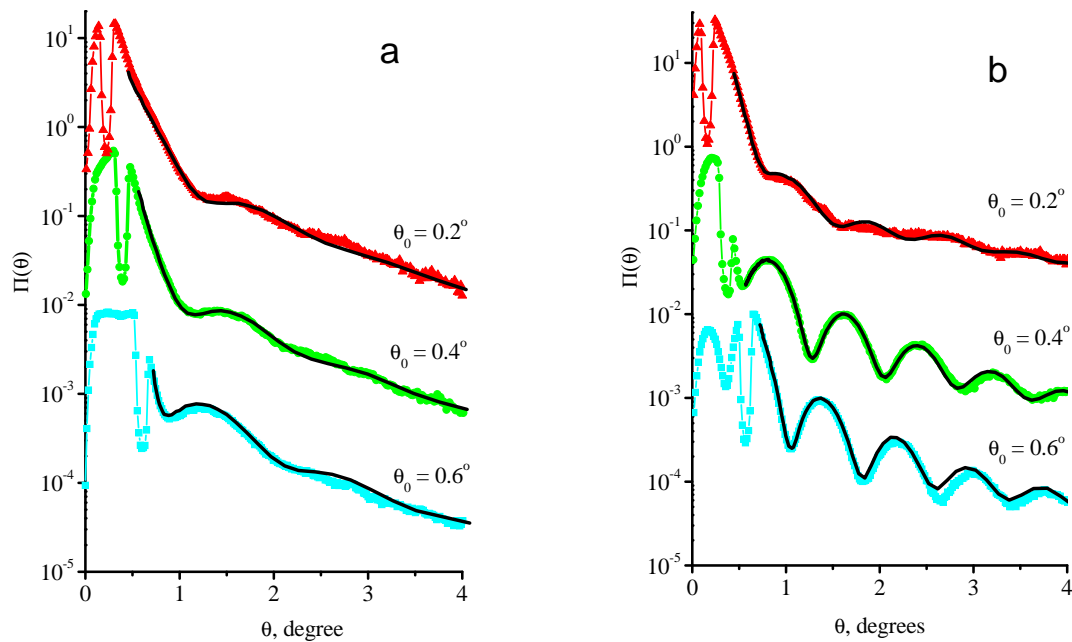


Рис. 2.42. Экспериментальные индикатрисы рассеяния ($E = 17.5$ кэВ, символы), проинтегрированные по азимутальному углу, от пленки вольфрама после травливания слоя толщиной около 2.3 нм (а) и после окисления на воздухе в течение примерно 30 мин (б). Индикатрисы измерены при трех разных углах скольжения зондирующего пучка θ_0 . Сплошные кривые - результаты расчета с использованием профиля диэлектрической проницаемости и PSD-функций пленочных шероховатостей, показанных на рис.2.41 и рис.2.43. (Из [A60]).

Для того, чтобы количественно охарактеризовать изменение внутренней структуры пленки вольфрама после травления и окисления, мы использовали описанную в предыдущем разделе итерационную процедуру (три итерации) и реконструировали профили диэлектрической проницаемости (рис.2.41), а также определили все три PSD-функции пленочных шероховатостей (рис.2.43) и коэффициенты конформности (рис.2.44).

Прежде всего отметим, что профиль $\varepsilon(z)$ травленой пленки полностью соответствует профилю исходной пленки, включая профиль диффузионного слоя вблизи поверхности

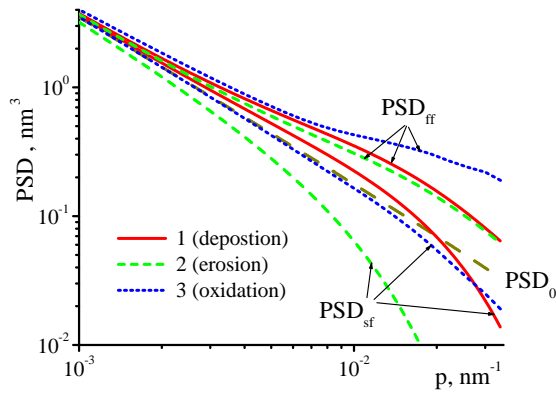


Рис. 2.43. PSD_{ff} -функции внешней поверхности и кросс-корреляционные PSD_{sf} -функции пленки вольфрама толщиной 5.1 нм (1), после стравливания верхнего слоя толщиной около 2.3 нм (2) и после окисления на воздухе в течение около 30 мин (3). Для сравнения PSD_0 -функция исходной кремниевой подложки тоже показана. (Из [A60]).

подложки. Кроме того, PSD -функция шероховатостей границы раздела пленка-подложка вообще не изменилась (и потому не показана на рис.2.43) в измеряемом в эксперименте диапазоне пространственных частот, по крайней мере. Эти заключения, вообще говоря, не были очевидными а priori, поскольку можно было бы ожидать, что ионное травление приводит как к развитию шероховатостей подложки, так и к увеличению диффузионного переходного слоя из-за значительного нагрева образца.

PSD -функция внешней поверхности после травления тоже не изменилась, что соответствует обсуждаемым выше in-situ исследованиям ионного травления пленок вольфрама. Как было видно из рис.1.33 на стр.122, рост шероховатостей наблюдается только после стравливания пленки на глубину 2.6-2.7 нм. В то же время кросс-корреляционная функция PSD_{sf} значительно уменьшилась после травления, приведя к резкому уменьшению осцилляций на индикатрисе рассеяния и резкому падению коэффициента вертикальной корреляции по сравнению с исходной пленкой. Это обстоятельство может быть полезным при изготовлении вольфрам содержащих многослойных рентгеновских зеркал, поскольку в случае некоррелированных шероховатостей различных границ раздела, во-первых, значительно уменьшается интенсивность рассеяния вблизи направления зеркального отражения и, во-вторых, исчезают интенсивные квази-брегговские пики рассеяния.

Реконструированный профиль диэлектрической проницаемости окисленной пленки лишь

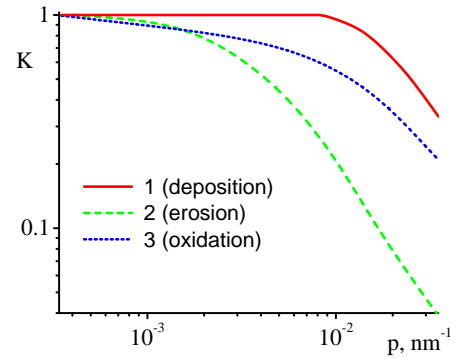


Рис. 2.44. Коэффициент вертикальной корреляции (конформности) шероховатостей подложки и пленки вольфрама толщиной 5.1 нм (1), после стравливания верхнего слоя пленки толщиной около 2.3 нм (2) и после окисления схожей пленки на воздухе в течение около 30 мин (3). (Из [A60]).

немного искажен вблизи ее поверхности по сравнению с исходным профилем. Из-за короткого времени окисления лишь верхняя часть пленки толщиной около 2 нм была окислена. Профиль же $\varepsilon(z)$ в глубине образца полностью соответствует исходному. PSD-функция шероховатостей внешней поверхности окисленной пленки заметно увеличилась в области высоких частот, демонстрируя развитие короткопериодных шероховатостей. Кроме того, окисление привело и к уменьшению вертикальной корреляции шероховатостей. Общая шероховатость в измеряемом диапазоне пространственных частот увеличивается крайне незначительно от 0.13 нм для исходной пленки до 0.14 нм после короткого окисления, хотя вклад от высокочастотной части спектра шероховатостей окисленной пленки не может быть определен из рис.2.43, поскольку PSD-функция еще не вышла на асимптотику. Отметим, что после выдержки образца на воздухе в течение одной недели шероховатость увеличилась катастрофически, так что ее среднеквадратичная высота превысила 1 нм (это значение было определено с помощью АСМ). Подобное развитие шероховатости при окислении молибденовой пленки наблюдалось и в работе [170]. В этой связи следует подчеркнуть, что в огромном числе работ описаны исследования шероховатости поверхностей самых разных материалов, проводимые на воздухе. Представленные нами результаты наглядно показывают, что такие измерения могут и не позволить отличить шероховатость, связанную с той или иной технологией обработки поверхности, от шероховатости, вызванной окислением.

2.5. О возможности определения профиля концентраций химических элементов по данным МР рефлектометрии

В этом разделе мы проанализируем возможность реконструкции профилей концентраций всех химических элементов, составляющих образец, а не только профиля диэлектрической проницаемости на рабочей длине волны. Подход основан на представлении (2.5) для диэлектрической проницаемости и того факта, что вклад в распределение $\varepsilon(z, E) \equiv 1 - \chi(z, E)$ от различных элементов может существенно отличаться на разных длинах волн, лежащих в МР диапазоне (см. рис.2.5).

Поскольку мы хотим определить несколько неизвестных функций - концентраций $C_j(z)$ различных элементов - и поглощением МР излучения нельзя пренебречь даже в случае легких материалов, проблема однозначности решения обратной задачи становится намного более сложной. Поэтому, в отличие от предыдущего анализа, в этом разделе мы будем использовать модельный подход, причем выбор модели будет основан на хорошо известном философском принципе “бритвы Оккама”, гласящем “не умножай существей сверх необходимого”.

Применительно к нашей проблеме этот принцип означает последовательное усложнение модели до тех пор, пока она не начнет описывать измеренные кривые отражения в пределах ошибки эксперимента, причем дальнейшее усложнение модели представляется не имеющим смысла.

Обсуждение подхода будет проводиться на примере двух образцов: пленок TiO_2 и чистого Ti , нанесенных методом магнетронного распыления на кремниевые подложки. Коэффициенты отражения были измерены в зависимости от угла скольжения зондирующего пучка при разных энергиях фотонов, лежащих между краями поглощения элементов, составляющих образец, и указанных вертикальными прямыми на рис.2.6. Экспериментальные кривые отражения показаны на рис.2.45, символы, при энергиях фотонов от $E = 97$ эВ ($\lambda = 12.78$ нм) до $E = 620$ эВ ($\lambda = 2$ нм). Измерения были проведены на оптическом канале синхротрона BESSY II. В дополнение к рентгеновским измерениям образцы были исследованы методом фотоэлектронной спектроскопии высоких энергий (HAXPES), которая позволяет исследовать химический и фазовый состав образцов по всей глубине, а также методом электронной микроскопии в проходящей геометрии (TEM).

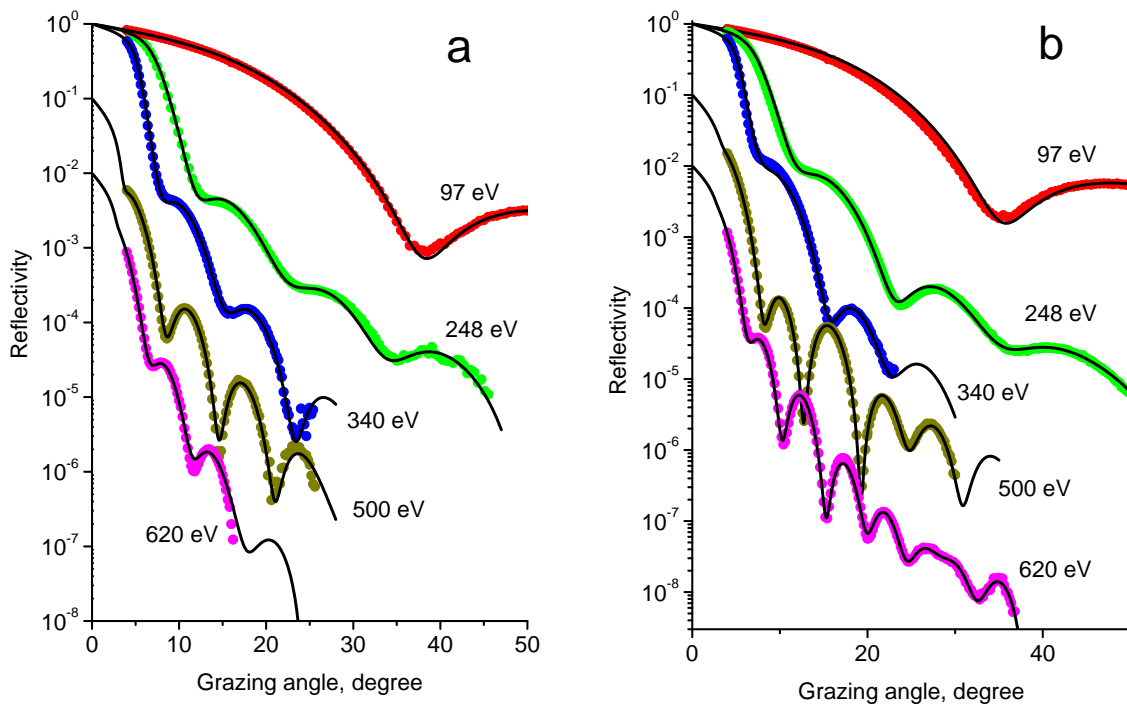


Рис. 2.45. Экспериментальные (символы) и рассчитанные (сплошные кривые) коэффициенты отражения, измеренные в зависимости от угла скольжения МР излучения с разными энергиями, от образцов TiO_2/Si (a) и Ti/Si (b). Кривые отражения для $E = 500$ эВ и 620 эВ сдвинуты по вертикали. (Из [A61]).

Для первого из рассматриваемых образцов простейшая однослойная модель представляет собой однородную пленку TiO_2 на однородной подложке Si. Неизвестными подгоночными параметрами являются толщина и плотность пленки, а также значения толщины “эффективного” переходного слоя на границах раздела вакуум-пленка и пленка-подложка, который для определенности моделировался с использованием функции ошибок (см. выражение (1.97) и рис.1.7b на стр.58), т.е. предполагался нормальный закон распределения высот шероховатостей. Плотность подложки (2.42 г.см^3) предполагалась известной. При подгонке анализировался весь набор измеренных кривых отражения. Использовался стандартный вид функции невязки

$$\text{MF} = \sum_{k,m} \left[\frac{R_{exp}(\theta_k, E_m) - R_{calc}(\theta_k, E_m)}{R_{exp}(\theta_k, E_m)} \right]^2 \quad (2.40)$$

где R_{exp} и R_{calc} - измеренный и рассчитанный коэффициенты отражения.

Несмотря на свой чрезвычайно простой вид, функции невязки имеет огромное число локальных минимумов различной глубины. Для нахождения наиболее глубокого минимума мы проводили минимизацию, стартуя с разных начальных приближений (разных значений подгоночных параметров). Кроме того, были наложены ограничения на возможные значения параметров подгонки: например, предполагалось, что плотность пленки не может превышать плотность массива. Точность подгонки в рамках простейшей модели иллюстрируется рис.2.46 для двух из измеренных кривых отражения. Как видно, простейшая однослойная модель удовлетворительно описывает кривую отражения при $E = 97 \text{ эВ}$, но не позволяет описать данные эксперимента при $E = 340 \text{ эВ}$.

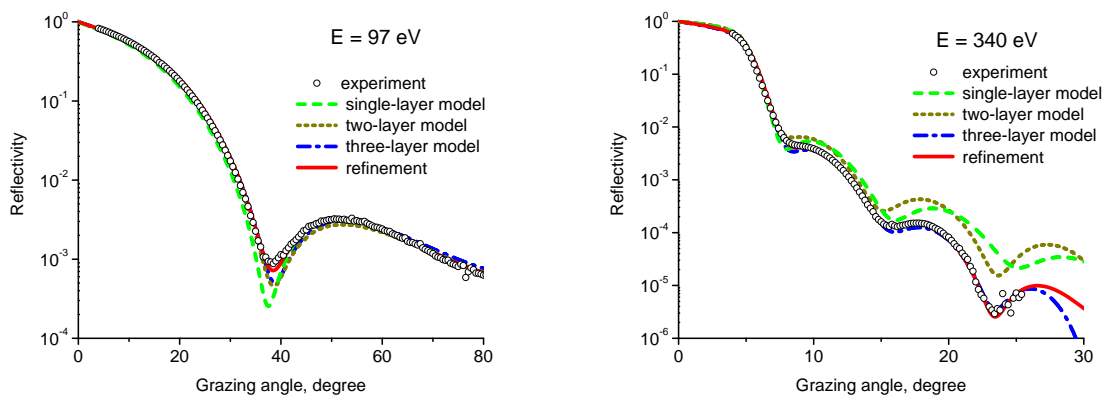


Рис. 2.46. Экспериментальные (кружки) коэффициенты отражения от образца TiO_2/Si , измеренные в зависимости от угла скольжения МР излучения для двух разных энергий фотонов. Кривые - результат расчета в рамках однослойной (TiO_2/Si), двухслойной ($\text{TiO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$) и трехслойной ($\text{C}/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$), а также после численного уточнения с использованием функции невязки (2.42).

Более сложная двухслойная модель $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$ принимает во внимание окисный слой

на поверхности кремниевой подложки. Как и выше, подгоночными параметрами являются плотности и толщины пленок, а также эффективные значения шероховатости всех границ раздела. Значение σ на границе раздела SiO_2/Si характеризует плавное уменьшение концентрации кислорода в глубь подложки, скорее чем шероховатость границы раздела между подложкой и окислом. Точность подгонки характеризуется точечными кривыми на рис.2.46. Она существенно улучшилась (в два раза) в минимуме кривой отражения при $E = 97$ эВ и практически не изменилась при $E = 340$ эВ.

Дальнейшее усложнение модели состоит в том, чтобы учесть наличие адгезионного слоя, всегда образующегося на любой поверхности, находящейся на воздухе, и состоящего, главным образом, из молекул углеводородов и воды. На первом этапе будем предполагать, что этот слой состоит только из углерода, т.е. трехслойная модель имеет вид $\text{C}/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$, а общее число подгоночных параметров равняется 10. Точность подгонки иллюстрируется штрих-пунктирными кривыми на рис.2.46. Хотя адгезионный слой практически не влияет на кривую отражения при $E = 97$ эВ, он привел к существенно лучшему описанию кривой отражения при энергии $E = 340$ эВ, лежащей выше края поглощения углерода, где резко меняется фаза амплитудного коэффициента отражения от углерод-содержащего слоя.

Трехслойная модель довольно хорошо описывает весь набор экспериментальных кривых отражения, хотя небольшие различия между теоретическими и измеренными кривыми отражения все еще наблюдаются. Найденное распределение профилей концентрации химических элементов показано на рис.2.47а, где было использовано представление (1.97) для описания переходных слоев между соседними материалами. Толщина пленки TiO_2 и окисного слоя SiO_2 оказались равными 9.84 нм и 2.25 нм, что точно совпадает с результатами НАХРЕС анализа. Плотность пленки TiO_2 (3.67 г.см^3) на 7-13% меньше плотности кристаллического TiO_2 и на те же 13% меньше значения, полученного из данных НАХРЕС. Мы связываем этот факт с упрощенной моделью образца, использованного в НАХРЕС анализе, где не были приняты во внимание ни шероховатости границ раздела, ни наличие адгезионного слоя на поверхности. Среднеквадратичная шероховатость внешней поверхности образца и поверхности исходной подложки практически одинаковы ($\sigma = 0.35$ нм) и близки к значениям, найденным с помощью АСМ. Адгезионный слой на поверхности тонкий ($h = 1.29$ нм) и рыхлый (максимальная плотность 1.26 г/см^3), что согласуется с результатами предыдущего раздела, полученными методом ЖР рефлектометрии.

Следующий шаг анализа состоит в численном уточнении найденных профилей концентрации химических элементов, чтобы описать все, даже самые малые особенности, наблюдаемые на кривых отражения. Используемая нами процедура численного уточнения основана на

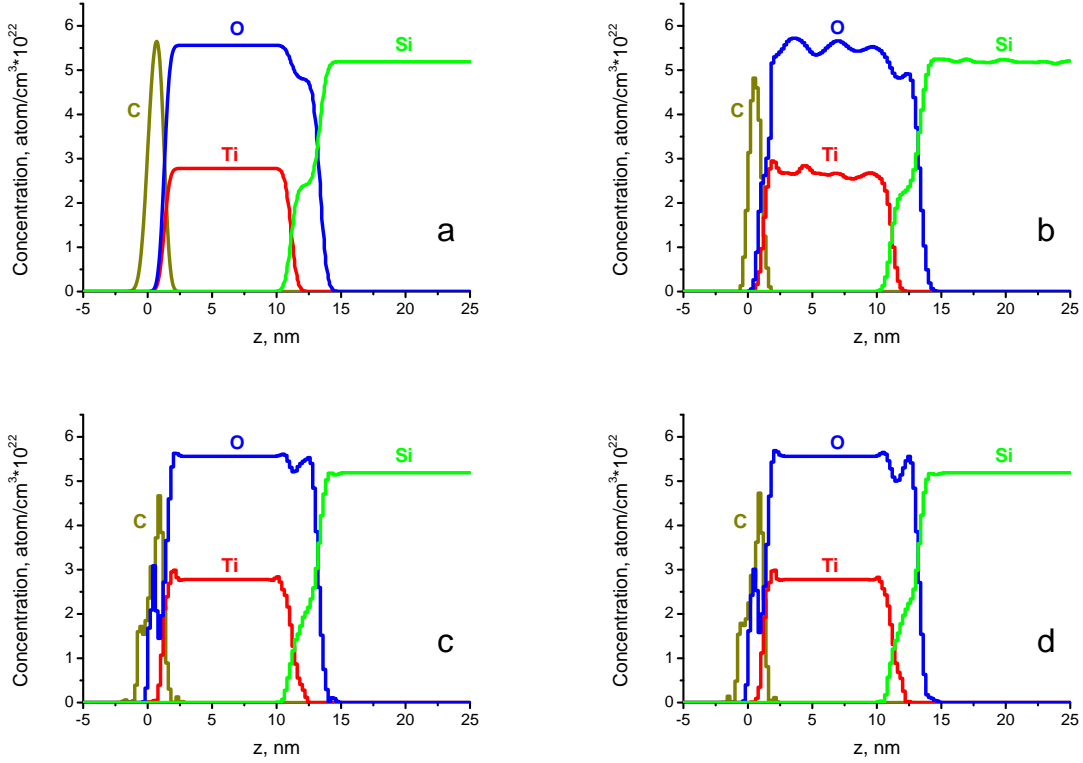


Рис. 2.47. Реконструированные профили концентрации химических элементов для образца TiO_2/Si . Расчеты проведены с использованием трехслойной модели ($\text{C}/\text{TiO}_2/\text{SiO}_2/\text{Si}$) и функции невязки (2.40) (a) и после численного уточнения с использованием функции невязки (2.42) (b) или (2.43) при $n=1$ (c) и $n=2$ (d).

концепции максимальной энтропии, использованной в ряде работ для обработки данных рентгеновской и нейтронной рефлектометрии и фотоэлектронной спектроскопии (см. [158, 171] и ссылки в них). Обобщенная энтропия Шэннона-Джейнса (отрицательная функция) представляется в виде [172]

$$S = \sum_{i,j} [C_j(z_i) - C_j^0(z_i) - C_j(z_i) \log (C_j(z_i)/C_j^0(z_i))] \quad (2.41)$$

где $C_j^0(z_i)$ - концентрация элемента j в i -той ячейке отцифрованного профиля $C_j(z)$, а $C_j^0(z)$ - начальное распределение концентрации, по отношению к которому измеряется энтропия. В нашем случае $C_j^0(z)$ - это решение проблемы, найденное в рамках трехслойной модели. Если положить $C_j(z) = C_j^0(z)$, то энтропия $S = 0$. Метод максимума энтропии основан на поиске решения $C_j(z)$, обеспечивающего подгонку экспериментальных кривых с заданной точностью и, одновременно, максимальное значение энтропии. Другими словами, в соответствии с принципом “бритвы Оккама”, мы хотим найти решение, ближайшее к исходному. Отметим, что если $C_j(z)$ близко к $C_j^0(z)$, то энтропия (2.41) может быть записана в виде $S \approx (-1/2) \sum_{i,j} [C_j(z_i) - C_j^0(z_i)]^2 / C_j^0(z_i)$. Поэтому, вместо (2.40) мы используем функцию

невязки следующего вида

$$\text{MF} = \sum_{k,m} \left[\frac{R_{exp}(\theta_k, E_m) - R_{calc}(\theta_k, E_m)}{R_{exp}(\theta_k, E_m)} \right]^2 + Q \sum_{i,j} \frac{[C_j(z_i) - C_j^0(z_i)]^2}{\alpha + C_j^0(z_i)} \quad (2.42)$$

где параметр Q обеспечивают необходимую точность подгонки, а малое положительное α введено в знаменатель, чтобы преодолеть проблему деления на 0. Суммирование по i и j проводится по всем точкам z (150 в наших расчетах) и всем химическим элементам, составляющих образец (4 в наших расчетах). Тем самым, общее число подгоночных параметров равно 600. Суммирование по k и m проводится по всем углам скольжения и энергиям фотонов зондирующего излучения.

Сплошные кривые на рис.2.45 и 2.46 иллюстрируют точность подгонки, которая практически идеальна. В то же время на профилях концентраций (см. рис.2.47b) появились нефизические осцилляции. Увеличение параметра Q в функции невязки (2.42) приводит к сглаживанию осцилляций, но точность подгонки экспериментальных кривых отражения становится хуже. Поэтому вместо (2.42) мы попытались использовать следующее обобщение функции невязки:

$$\text{MF} = \sum_{k,m} \left[\frac{R_{exp}(\theta_k, E_m) - R_{calc}(\theta_k, E_m)}{R_{exp}(\theta_k, E_m)} \right]^2 + Q \sum_{i,j} \frac{\left[\frac{d^n}{dz^n} (C_j(z_i) - C_j^0(z_i)) \right]^2}{\alpha + \left| \frac{d^n}{dz^n} C_j^0(z_i) \right|} \quad (2.43)$$

Мерой близости решения $C_j(z)$ к исходному $C_j^0(z)$ является разность концентраций $C_j(z) - C_j^0(z)$ при использовании функции невязки (2.42) и разность их производных $d^n C_j(z)/dz^n - d^n C_j^0(z)/dz^n$ для функции (2.43).

Уточненные профили концентраций показаны на рис.2.47c и d для функции невязки (2.43) при $n = 1$ и $n = 2$, соответственно. Видно, что осцилляции на профилях концентраций исчезли. Оба распределения очень близки друг к другу и к исходному распределению. На уточненном распределении концентраций можно заметить только две особенности: во-первых, внутри адгезионного слоя появился кислород (вода), а плотность углерода несколько уменьшилась и, во-вторых, несколько увеличилась концентрация кислорода вблизи поверхности подложки по сравнению с исходным распределением. Эти две особенности позволяют описать весь набор кривых отражения с той же самой точностью, что и для распределения на рис.2.47b.

Точно такой же анализ был проведен и для второго из исследованных образцов (Ti/SI), измеренные кривые отражения от которого показаны на рис.2.45b. Можно ожидать, что внутренняя структура этого образца более сложная, поскольку чистый титан мог сохраниться под окисленным слоем TiO_2 . Действительно, рис.2.48 демонстрирует точность подгонки кривой

отражения, измеренной при энергии фотонов $E = 248$ эВ, при использовании трехслойной модели C/TiO₂/SiO₂/Si. Различие между рассчитанной и измеренной кривыми весьма существенно, хотя эта модель позволила адекватно описать кривые отражения от предыдущего образца.

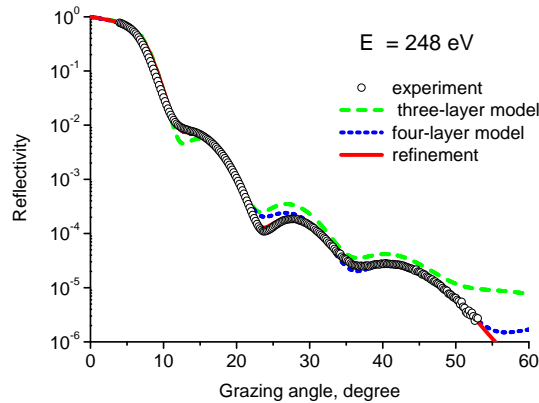


Рис. 2.48. Экспериментальные (кружки) коэффициенты отражения от образца Ti/Si, измеренные в зависимости от угла скольжения МР излучения при энергии фотонов $E = 248$ эВ. Кривые - результат расчета в рамках трехслойной (C/TiO₂/SiO₂/Si) и четырехслойной (C/TiO₂TiO_x/SiO₂/Si) моделей, а также после численного уточнения с использованием функции невязки (2.43) при $n = 1$.

Рассмотрим поэтому более сложную четырехслойную модель C/TiO₂TiO_x/SiO₂/Si, где TiO_x означает смесь чистого титана с его окислом, а дополнительный параметр x характеризует относительную концентрацию кислорода в глубине слоя титана. Мы предполагаем наличие TiO_x, а не чистого титана из-за возможного геттерирования кислорода из остаточной атмосферы технологической камеры или из воздуха. Точечная кривая на рис.2.48 показывает существенное улучшение точности подгонки, хотя небольшие отличия рассчитанной кривой отражения от измеренной еще сохраняются. Поэтому, как и выше, мы провели численное уточнение распределения концентраций с использованием функции невязки (2.43) при $n = 1$. В результате получили полное согласие между теоретическими и экспериментальными кривыми отражения (сплошные кривые на рис.2.45b и рис.2.48).

Распределение концентраций, полученное в рамках четырехслойной модели, показано на рис.2.49a. Верхняя часть титановой пленки полностью окислилась на воздухе. Концентрация кислорода плавно убывает в глубь пленки до относительного значения 8% (параметр $x = 0.08$). Полная толщина титан-содержащей пленки равна 11.7 нм, хотя данные НАXPES анализа показывают толщину в 13.8 нм. Однако в НАXPES анализе шероховатости границ раздела не были приняты во внимание. Если мы учтем плавное изменение концентрации титана вблизи границ раздела, то мы как раз и получим толщину титан-содержащей плен-

ки в 13.5 нм (см. рис.2.49). Максимальная плотность пленки TiO_2 (3.97 г/см^3) и плотность титана в глубине пленки (4.43 г/см^3) близки к плотности массива и полностью согласуются с данными НАXPES анализа.

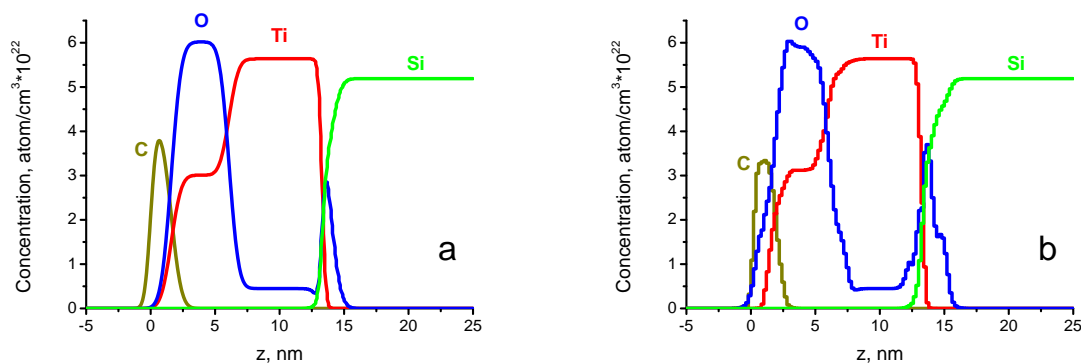


Рис. 2.49. Реконструированные профили концентрации химических элементов для образца Ti/Si. Расчеты проведены с использованием четырехслойной модели (C/TiO₂/TiO_x/SiO₂/Si) (a) и функции невязки (2.43) при n=1 (b).

Среднеквадратичная шероховатость подложки (0.3 нм) соответствует шероховатости первого из образцов, однако шероховатость внешней поверхности пленки (0.62 нм) почти в два раза больше. Это не является странным, поскольку окисление поверхности металлов часто приводит к развитию мелкомасштабных шероховатостей [170].

Наиболее интересной особенностью реконструированных распределений концентраций является очень малая толщина (0.62 нм) слоя окисла SiO₂ на поверхности кремниевой подложки. Этот факт полностью согласуется с данными НАXPES анализа и, по-видимому, объясняется химической диффузией кислорода из подложки в пленку химически активного титана.

Численное уточнение привело к очень малым изменениям в распределении концентраций (см. рис.2.49b). Наблюдается некоторое увеличение концентрации кислорода в адгезионном слое, хотя и не столь выраженное как для первого из исследованных образцов. Возможно, это связано с геттерированием кислорода (воды) в титановую пленку. Кроме того, концентрация кислорода немного увеличилась и вблизи поверхности подложки.

Толщины слоев исследованных образцов были также определены методом электронной микроскопии высокого разрешения. Изображения срезов образцов показаны на рис.2.50. Видно, что толщины слоев хорошо соответствуют распределениям концентраций, полученным из данных МР рефлектометрии, включая наиболее интересную особенность - крайне малую толщину окисла на поверхности кремниевой подложки в случае Ti/Si образца.

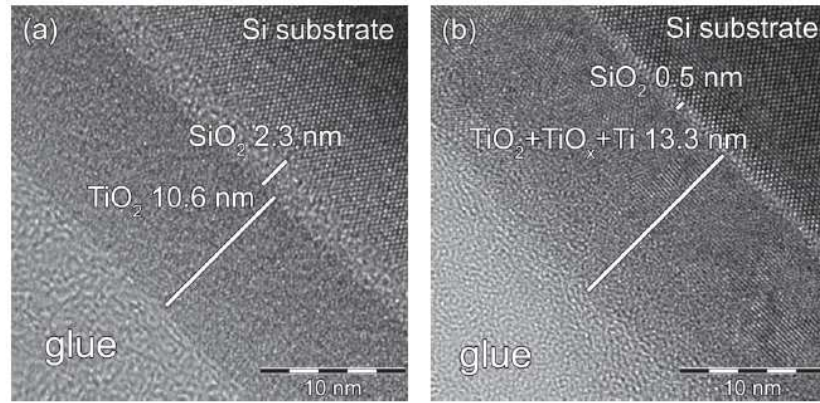


Рис. 2.50. Электронно-микроскопические изображения срезов образцов TiO_2/Si (a) и Ti/Si (b). (Из [A60]).

Таким образом в этом разделе мы продемонстрировали принципиальную возможность восстановления профилей концентраций химических элементов, составляющих образец, а не только профиля диэлектрической проницаемости на фиксированной длине волны. Подход основан на одновременном анализе набора кривых отражения, измеренных в зависимости от угла скольжения МР излучения при различных энергиях фотонов, лежащих между краями поглощения элементов. Ясно, что возможности подхода неизмеримо возрастут, если использовать его совместно с самосогласованным модельно независимым подходом, описанным в предыдущем разделе. Тогда задача может быть сформулирована следующим образом: требуется найти такое распределение концентраций химических элементов, которое не только позволяет описать набор кривых отражения в МР области спектра, но и приводит к правильному профилю диэлектрической проницаемости на рабочей длине волны ЖР излучения. Можно надеяться, что при таком подходе проблема однозначности решения существенно ослабится.

2.6. Основные результаты главы 2

- Разработан новый модельно независимый подход к решению обратной задачи рентгеновской рефлектометрии, т.е. реконструкции профиля диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z)$, основываясь на измерениях коэффициента отражения в зависимости от угла скольжения зондирующего пучка. Единственное, что предполагается в подходе - это наличие особых точек (границ раздела) на профиле диэлектрической проницаемости, в которых или сама функция $\varepsilon(z)$, или какая-то ее производная испытывает скачкообразное изменение. Тогда, анализируя измеренную часть кривой отражения,

оказывается возможным определить число особых точек на распределении $\varepsilon(z)$, расстояния между ними и, более того, значения скачков диэлектрической проницаемости в особых точках, т.е. построить адекватную и достаточно подробную модель отражающей среды. После этого можно определить и асимптотическое поведение амплитудного коэффициента отражения (не только его модуля, но и фазы) в области больших углов скольжения. Показано, что, используя специально разработанный алгоритм, возможно найти только те решения обратной задачи, которые описывают измеренную часть кривой отражения и, кроме того, обеспечивают требуемое поведение амплитудного коэффициента отражения в асимптотической области. Если различны все расстояния между особыми точками и попарные произведения скачков диэлектрической проницаемости в особых точках, то число возможных решений обратной задачи равно четырем, причем два из них приводят к значениям $\varepsilon(z)$, превышающим единицу, и могут быть сразу же отброшены. Решение, соответствующее реальности, может быть выбрано из оставшихся двух либо из общих физических соображений, либо на основе дополнительных экспериментов. Разработанный подход был успешно применен к исследованию внутренней структуры пленок различных материалов на кремниевых подложках, включая тонкую структуру границ раздела, образующихся из-за диффузии, химических реакций или имплантации, и адгезионного слоя на поверхности образцов. Дополнительным доказательством правильности найденных решений является практически идеальное соответствие профилей $\varepsilon(z)$ для пленок различной толщины. Показано, что минимальный размер особенности на распределении $\varepsilon(z)$, который еще может быть корректно реконструирован, составляет $(0.25 - 0.35)\lambda / \sin \theta_{max}$, где θ_{max} - максимальный угол скольжения, измеряемый в эксперименте.

- Разработан новый подход к решению фазовой проблемы рентгеновской рефлектометрии. Подход требует in-situ измерения коэффициента отражения от растущей слоистой структуры, так что как коэффициент отражения $R(t)$, так и его производная dR/dt известны в момент времени t . Этих двух чисел оказывается достаточно, чтобы определить комплексный амплитудный коэффициент отражения $r(t)$ в тот же момент времени, причем для определения фазы нет необходимости знать предисторию процесса роста. В отличие от подходов, рассмотренных в литературе, метод справедлив и для поглощающей среды. Показано (на примере растущей пленки вольфрама), что in-situ измерения коэффициента отражения даже при фиксированном угле скольжения зондирующего пучка позволяют восстановить профиль плотности пленки, по крайней мере, в течение

тех временных интервалов напыления, когда не происходит процессов имплантации или диффузии атомов. Ясно, что возможности подхода неизмеримо возрастут, если измерять коэффициент отражения как функцию угла скольжения $R(\theta, t)$ в каждый момент времени t . В этом случае было бы возможно определить зависимость амплитудного коэффициента отражения от угла скольжения $r(\theta, t)$, а следовательно, решить обратную задачу рефлектометрии более корректно и, кроме того, проанализировать изменение профиля диэлектрической проницаемости со временем напыления. Разработка подобного оборудования, совмещенного с мощным синхротронным источником, представляется вполне реальным на сегодняшний день.

- Разработан самосогласованный подход к исследованию трехмерной структуры пленочных покрытий. Подход позволяет одновременно реконструировать профиль диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z)$ и определить статистические параметры шероховатостей (PSD-функции), основываясь на угловой зависимости коэффициента отражения и набора индикатрис рентгеновского рассеяния, измеренных при разных углах скольжения зондирующего пучка. Подход основан на специально разработанной итерационной процедуре, так что параметры шероховатости, найденные на предыдущей итерации, принимаются во внимание при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости на последующей итерации и, наоборот, найденный профиль $\varepsilon(z)$ учитывается при определении PSD-функций исследуемого образца. Продемонстрирована быстрая сходимость итерационной процедуры: для исследованных гладких образцов две итерации оказались вполне достаточны. Подход существенным образом основан на измерениях интегрального коэффициента отражения вместо зеркального, что позволяет преодолеть проблему экстраполяции измеренной PSD-функции в область малых пространственных частот и, тем самым, проблему неоднозначности определения среднеквадратичной высоты шероховатости.
- Разработанный самосогласованный подход был использован для сравнительных исследований 3D структуры пленок вольфрама после их напыления, ионного травления и окисления. Показано, что плотность пленки, напыленной на Si подложку методом магнетронного распыления не постоянна по глубине, а составляет около 80% от плотности массива вблизи подложки и увеличивается до 95% на вершине пленки толщиной около 3 нм. Дальнейшее напыление плотность пленки не изменяет. Диффузия и/или имплантация атомов W в подложку приводит к появлению интерслоя толщиной 0.7 нм. Напыление пленки приводит к развитию короткопериодных шероховатостей. Ионное

травление пленки на глубину 2.3 нм не изменяет среднеквадратичную шероховатость пленки, но приводит к резкому уменьшению вертикальной корреляции между шероховатостями пленки и подложки. Ни напыление пленки, ни ее травление не изменило шероховатость подложки (в диапазоне пространственных частот до $3.5 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$, по крайней мере). Окисление приводит к сильному развитию короткопериодных шероховатостей и уменьшению вертикальной корреляции.

- Продемонстрирована возможность восстановления профилей концентраций химических элементов, составляющих образец, а не только профиля диэлектрической проницаемости на фиксированной длине волны. Подход основан на одновременном анализе набора кривых отражения, измеренных в зависимости от угла скольжения МР излучения при различных энергиях фотонов, лежащих между краями поглощения элементов. Ясно, что возможности подхода неизмеримо возрастут, если использовать его совместно с указанным выше самосогласованным модельно независимым подходом. Тогда задача может быть сформулирована следующим образом: требуется найти такое распределение концентраций химических элементов, которое не только позволяет описать набор кривых отражения в МР области спектра, но и приводит к правильному профилю диэлектрической проницаемости на длине волны ЖР излучения. Можно надеяться, что при таком подходе проблема однозначного выбора решения существенно облегчится.

Отражение рентгеновского излучения от аperiodических и ламеллярных многослойных структур

3.1. Введение

Многослойное рентгеновское зеркало представляет собой, как правило, периодическую структуру, состоящую из чередующихся слоев двух материалов с различными диэлектрическими проницаемостями. Такая структура может рассматриваться как искусственный одномерный кристалл, для которого справедливо обычное брэгговское условие отражения:

$$n\lambda \simeq 2d \cos \varphi \quad (3.1)$$

где λ и φ - длина волны и угол падения излучения; d - период структуры и n - порядок брэгговского пика.

Высокие коэффициенты отражения от многослойных интерференционных структур (МИС) при любых углах падения вплоть до нормального обусловили их широкое применение в самых разных областях рентгеновской физики, включая изображающую оптику высокого разрешения. В то же время, интерференционный характер отражения (3.1) зачастую ограничивает диапазон применений многослойной оптики. Дело заключается в том, что спектральная полоса отражения многослойного зеркала составляет обычно $\Delta\lambda \sim \lambda/200 - \lambda/20$. В то же время, для многих приложений необходимо иметь зеркала, отражающие в значительно более широком спектральном или угловом диапазонах. В качестве примеров отметим фокусирующие элементы для каналов синхротронного излучения, объективы с большой числовой апертурой (ЭУФ литография) и зеркала Гёбеля для фокусировки или коллимирования излучения рентгеновских трубок. С другой стороны, для ряда важных для практики задач таких как МР спектроскопия и рентгенофлуоресцентный (РФА) анализ легких элементов, наоборот, крайне желательно увеличить разрешение МИС для увеличения чувствительности методов. Обсудим эти проблемы более подробно.

Благодаря появлению синхротронных источников (СИ) третьего поколения и рентгеновских лазеров на свободных электронных (РЛСЭ), обладающих чрезвычайно высокой степенью пространственной когерентности, яркостью и мощностью рентгеновского пучка, в настоящее время открылись принципиально новые возможности для научных исследований в самых разных областях материаловедения, кристаллографии, физики твердого тела, биоло-

гии и медицины. Особый интерес представляет увеличение пространственного разрешения рентгеновских методов, для чего необходимо иметь эффективную оптику, способную сфокусировать пучок СИ в пятно субмикронного или даже нанометрового размера. Подчеркнем, что типичный диаметр h пучка СИ или РЛСЭ довольно большой и составляет несколько миллиметров. Поэтому единственный путь сфокусировать весь пучок без потерь - это использовать отражательную оптику, так как типичная апертура дифракционных элементов - френелевских и брэгг-френелевских зонных пластинок - составляет не более, чем доли миллиметра, причем эффективность дифракции на практике не превышает единиц процентов. Несколько бóльшую апертуру могут иметь составные (многокомпонентные) рентгеновские линзы. Однако коэффициент пропускания таких преломляющих элементов мал и не превышает, как правило, 5-7 процентов даже для очень жесткого рентгеновского излучения. Более того, фокусное расстояние дифракционных и преломляющих линз сильно зависит от длины волны, что значительно затрудняет проведение экспериментов, где требуется сканирование по длине волны зондирующего излучения.

От этих недостатков избавлены отражающие элементы (см. рис.3.1а). Однако длина зеркал скользящего падения очень велика ($L \sim h/\theta_c \sim 0.8$ м при $E = 25$ кэВ и $h = 2$ мм), поскольку пучок должен падать в условиях полного внешнего отражения (ПВО), т.е. под очень малым углом скольжения. Как результат, очень высока стоимость таких зеркал. Если же на отражающую поверхность зеркала нанести МИС, то длина концентратора уменьшится в несколько раз по сравнению с концентратором скользящего падения [173, 174], поскольку брэгговский угол в несколько раз превышает критический угол ПВО. Более того, размер пятна фокусировки составляет $S \sim \lambda F/h \sim \lambda/\sin \theta$ в предположении, что фокусное расстояние F по порядку величины соответствует размеру зеркала L и, следовательно, увеличение угла скольжения θ в несколько раз позволит во столько же раз уменьшить диаметр сфокусированного пятна. Учитывая условие Брэгга, можно заключить, что минимальный размер пятна фокусировки по порядку величины соответствует периоду отражающей МИС.

В то же время многие рентгеновские методы исследования материалов (EXAFS, XANES, ESCA) [3] основаны на изучении зависимости отклика образца (выход флуоресценции, коэффициент отражения или пропускания, выход фотоэлектронов и т.д.) от длины волны падающего излучения, которая должна меняться в довольно широком спектральном интервале, причем этот интервал зависит от исследуемого материала. Тем самым, периодическое многослойное зеркало плохо пригодно для решения этой задачи. Наиболее разумный подход состоит в разработке многослойной структуры, отражающей в существенно более широком интервале длин волн по сравнению с периодическим зеркалом. Такую структуру следует

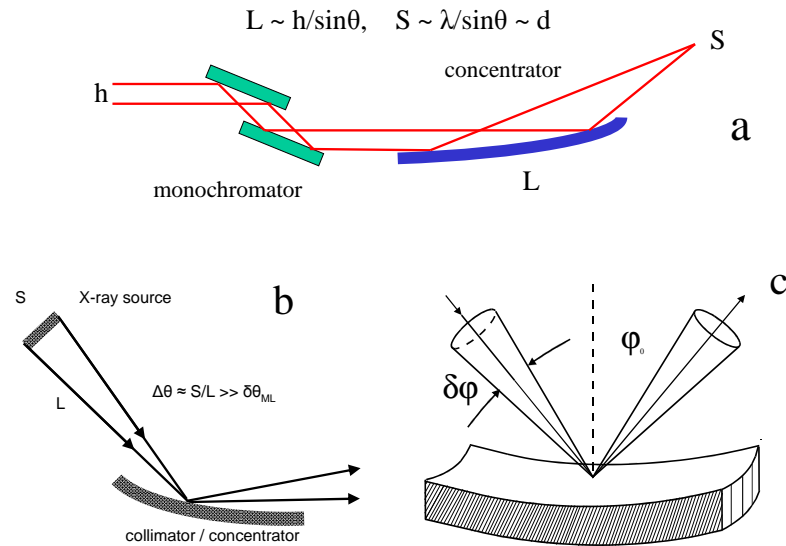


Рис. 3.1. Схема, демонстрирующая проблему отражения рентгеновского пучка от фокусирующего зеркала в канале СИ (a), схеме Гёбеля (b) и ЭУФ литографии (c).

нанести на поверхность фокусирующего элемента (широкополосный концентратор), а требуемое изменение по длине волны осуществлять с помощью, например, двух-кристального монохроматора.

Проблема широкополосных зеркал весьма остро стоит и при конструировании объективов нормального падения с предельно высоким пространственным разрешением (следовательно, и с большой числовой апертурой $D : F$), например, в ЭУФ литографии [17, 19]. Действительно, угловая полоса отражения периодического Mo/Si зеркала на длине волны 13.5 нм составляет около 9° . В то же время (см. рис. 3.1c), в случае высокоапертурного зеркала как изменение угла падения φ_0 вдоль его поверхности, так и расходимость излучения $\delta\varphi$ в фиксированной точке поверхности могут быть существенно больше. Изменение угла падения вдоль поверхности может быть скомпенсировано соответствующим изменением периода МИС, однако проблема высокой расходимости падающего излучения может быть решена только за счет увеличения полосы отражения. Более того, в ЭУФ литографии предпочтительно иметь постоянный коэффициент отражения внутри этой полосы, чтобы не допустить больших колебаний интенсивности излучения, падающего на резист.

Тем самым, при конструировании широкополосных зеркал, используемых в каналах СИ и ЭУФ литографии, особый интерес представляет решение следующей обратной задачи синтеза, которую сформулируем в достаточно общем виде:

Задача 1. Предположим, что спектральная $R(\lambda)$ или угловая $R(\theta)$ зависимость коэффициента отражения задана, причем полоса отражения значительно шире, чем у периодиче-

ских МИС. Требуется найти такой закон изменения толщин слоев по глубине многослойной структуры, который бы обеспечил требуемый профиль кривой отражения.

Очевидный способ расширить полосу отражения многослойного зеркала состоит в том, чтобы создать постепенное изменение периода в глубь структуры. Излучение с разными длинами волн будет тогда отражаться от слоев, расположенной на разной глубине. Градиентные многослойные зеркала с расширенной полосой отражения были первоначально разработаны в оптике холодных нейтронов и получили название суперзеркал [175, 176]. Возможность применения непериодических многослойных зеркал в рентгеновском диапазоне впервые была рассмотрена в работе [177]. В дальнейшем было предложено использовать широкополосные многослойные зеркала в рентгеновской астрономии [178] и каналах СИ [173]. Принципиальное отличие рентгеновской оптики от нейтронной состоит в том, что для холодных нейтронов многие вещества являются прозрачными и поэтому толщина многослойной структуры не является принципиальным фактором при разработке широкополосных зеркал, в то время как все вещества без исключения поглощают рентгеновское излучение, что ограничивает возможную толщину (следовательно, коэффициент отражения в заданном интервале длин волн) рентгеновского суперзеркала.

Теоретический анализ рентгеновских широкополосных многослойных зеркал базируется, в основном, либо на очень упрощенных или даже полуэмпирических формулах, либо на чисто компьютерных методах расчета. Так, в работе [179] используются формулы теории нейтронных суперзеркал, полученные в [175] в кинематическом приближении (т.е. без учета экстинкции рентгеновского излучения), но с учетом поглощения излучения в веществе. В работах [180, 181] используется полуэмпирическая зависимость толщины би-слоя (“периода”) от его номера $d(i) = a(b+i)^{-c}$, где $a, c > 0$ и $b > -1$ - варьируемые параметры. Оба этих подхода позволяют рассчитать конструкцию многослойного зеркала с широкой полосой отражения. Однако из-за приближенного рассмотрения проблемы коэффициент отражения оказывается сильно осциллирующей функцией длины волны, что абсолютно неприемлемо, например, в EXAFS экспериментах.

Более совершенные подходы к конструированию широкополосных многослойных зеркал основываются на различных методах прямой численной оптимизации. Например, в работе [182] используется два метода компьютерной оптимизации широкополосной структуры для ЭУФ диапазона длин волн. Первый из них основан на генерации серии конструкций многослойных структур случайным методом и выбором оптимальной реализации. Схожий подход использован и в работе [183]. Второй метод основан на целенаправленном поиске лучшей последовательности толщин всех слоев структуры (глобальная оптимизация), обес-

печивающей требуемый спектральный или угловой профиль кривой отражения. Этот метод, но основанный на совершенно разных алгоритмах, использован и в работах [184]-[190]. Недостаток всех компьютерных подходов состоит в отсутствии ясного физического обоснования полученных результатов. Кроме того, прямые численные методы основаны, как правило, на сложных компьютерных программах и требуют больших затрат машинного времени, измеряемых многими часами на один прогон программы [191].

Наш подход к решению задачи синтеза МИС обсуждается в разделе 3.3. Основная особенность нашего подхода состоит в сочетании аналитического и численного подходов, а именно: аналитическое (хотя и приближенное) решение обратной задачи используется как начальное приближение для численной компьютерной оптимизации. В результате удается преодолеть сложную проблему глобальной оптимизации, поскольку найденное ниже аналитическое решение оказывается очень хорошим приближением к оптимальному, а также значительно снизить время компьютерного счета до нескольких минут или даже секунд.

В настоящее время для увеличения потока излучения рентгеновских трубок и его фокусировки на поверхности образца используются так называемые зеркала Гёбеля, представляющие собой фокусирующие или коллимирующие элементы с МИС, нанесенными на их поверхность (см. рис. 3.1b). В большинстве коммерческих дифрактометров расстояние от трубки до образца составляет несколько десятков сантиметров. Следовательно, расстояние от трубки до зеркала не должно превышать 10 – 20 см. Если принять размер источника равным $S \sim 200$ мкм, то расходимость излучения на поверхности зеркала составит около $0.05 - 0.1^\circ$. В то же время полоса отражения периодической МИС не превышает $0.01 - 0.012^\circ$ на длине волны $\lambda = 0.071$ нм (Mo- K_α линия излучения), широко используемой на практике. Тем самым, крайне желательно увеличить полосу отражения МИС для того, чтобы увеличить поток излучения на образце.

Введем понятие эффективности многослойного зеркала

$$E = \frac{\int R(\theta)G(\theta) d\theta}{\int G(\theta) d\theta} \quad (3.2)$$

где $R(\theta)$ - коэффициент отражения МИС на рабочей длине волны, а $G(\theta)$ - функция источника, характеризующая расходимость излучения на поверхности зеркала. Для определенности будем считать, что функция источника имеет гауссову форму

$$G(\theta) = \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta} \right)^2 \right] \quad (3.3)$$

Для иллюстрации проблемы рассмотрим следующий модельный пример. Пусть коэффициент отражения градиентного многослойного зеркала тоже описывается гауссовой функцией

ей $R(\theta) = R_0 \exp[-(\theta - \theta_0)^2/2(\delta\theta)^2]$. Тогда значение эффективности (3.2) составляет $E = R_0/\sqrt{1 + (\Delta\theta/\delta\theta)^2}$. Предположим, что требуется сконструировать зеркало с эффективностью, превышающей 50%. Тогда получаем условие на пиковое значение коэффициента отражения $R_0 > 0.5\sqrt{1 + (\Delta\theta/\delta\theta)^2}$, которое наглядно демонстрирует сложность проблемы. В самом деле, если расширить полосу отражения градиентного зеркала $\delta\theta$ в несколько раз по сравнению с периодическим так, чтобы $\delta\theta$ была бы лишь в два раза меньше ширины $\Delta\theta$ функции $G(\theta)$, то получим нефизический результат $R_0 > 0.5\sqrt{5} > 1$. Если $\Delta\theta = \delta\theta$, то пик отражения все еще должен быть очень высоким $R_0 > 0.5\sqrt{2} \approx 0.71$. Если же пик отражения очень широкий $\delta\theta \gg \Delta\theta$, то $R_0 > 0.5$. А priori никоим образом не очевидно, что подобная структура может быть сконструирована из-за наличия поглощения в веществе. Кроме того, требуемое число пар слоев может оказаться слишком большим для практической реализации структуры.

Применительно к зеркалам Гёбеля обратная задача синтеза может быть сформулирована следующим образом:

Задача 2. Требуется сконструировать МИС, т.е. выбрать пару материалов структуры и распределение их толщин по глубине, которая обеспечивает максимальное значение эффективности (3.2).

Наш подход к решению этой задачи изложен в разделе 3.4. Поскольку аналитическое выражение для коэффициента отражения от широкополосного зеркала будет найдено в разделе 3.2, то для нахождения максимума интеграла (3.2) используется формализм Эйлера-Лагранжа, что позволяет свести Задачу 2 к простейшей рекуррентной последовательности, задающей распределение толщин слоев в аналитическом виде. Оказывается, что численное уточнение полученного решения не имеет смысла, поскольку приводит к крайне незначительному (доли процента) увеличению эффективности МИС. В то же время распределение толщин слоев по глубине становится значительно более сложным (сильно осциллирующим), что может привести к технологическим проблемам при изготовлении МИС.

Одним из практически важных применений МИС является рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) легких химических элементов, характеристические линии излучения которых лежат в МР диапазоне, а естественные кристаллы-анализаторы здесь не могут быть использованы из-за слишком малых межплоскостных расстояний. Ясно, что в противоположность рассмотренным выше проблемам, увеличение чувствительности РФА невозможно без увеличения разрешения многослойных зеркал, предельно достижимое значение которого не слишком велико и ограничено, в конечном итоге, поглощением МР излучения в веществе

[192].

Рассмотрим Mo/V₄C МИС с периодом $d = 5$ нм и толщинным фактором, т.е. отношением толщины слоя Мо к периоду МИС, $\gamma = 0.34$. Зависимость коэффициента отражения от угла скольжения θ_0 показана кривой 1 на рис.3.2 для длины волны излучения $\lambda = 6.76$ нм ($E = 183.4$ эВ, K_α линия излучения бора). Выбранное γ обеспечивает максимальное значение пика отражения на этой длине волны: $R = 48.1\%$ при $\theta_0 \approx 43^\circ$. Угловая ширина пика отражения $\Delta\theta = 0.73^\circ$. Предположим, что необходимо уменьшить $\Delta\theta$ в несколько раз, обеспечив, тем самым, и увеличение спектрального разрешения $\lambda/\Delta\lambda \approx \tan\theta_0/\Delta\theta$. Каким образом это можно сделать?

Угловое разрешение полубесконечной МИС можно описать очень простым выражением [192]:

$$\Delta\theta \simeq |\operatorname{Re}(\chi_A - \chi_S)| \cdot \frac{\sin(\pi m \gamma)}{\pi m} \cdot \frac{2}{\sin(2\theta_0)} \quad (3.4)$$

которое, конечно, является приближенным, поскольку вообще не содержит эффектов поглощения, и справедливо лишь в случае, когда глубина экстинкции волны значительно меньше длины свободного пробега МР излучения, ограниченного поглощением в веществе МИС. Тем не менее, оно наглядно показывает способы, которыми можно увеличить разрешение МИС. В (3.4) входит порядок Брэгговского отражения m , так что $m\lambda = 2d \sin\theta_0$, и разница между поляризуемостью χ сильно поглощающего (A = absorber) и слабо поглощающего (S = spacer) материалов структуры.

Во-первых, увеличить разрешение можно за счет увеличения порядка Брэгговского отражения. Пример показан кривой 2 на рис.3.2 для МИС с периодом $d = 15$ нм и толщинным фактором $\gamma = 0.14$, который обеспечивает максимальное значение отражения в Брэгговском пике третьего порядка ($m = 3$). Действительно, ширина пика уменьшилась до $\Delta\theta = 0.31^\circ$, т.е. в 2.4 раза по сравнению с кривой 1, однако коэффициент отражения упал почти в два раза (до 25.9%).

Вторая возможность увеличения разрешения состоит в уменьшении толщины слоев сильно поглощающего вещества. Положив параметр $\gamma = 0.09$, получим кривую отражения 3. Такое γ выбрано для того, чтобы значение коэффициента отражения в максимуме соответствовало кривой 2. Видно, что ширина пика отражения практически такая же, как и для кривой 2. Если продолжать уменьшать γ , то ширина пика отражения будет уменьшаться вплоть до минимально возможного значения $\Delta\theta_{min} = \operatorname{Im}\varepsilon_S \cdot 2/\sin(2\theta_0)$, определяемого максимально возможной глубиной проникновения волны в МИС и ограниченного поглощением излучения в слабопоглощающем материале структуры [192]. Для рассматриваемой МИС

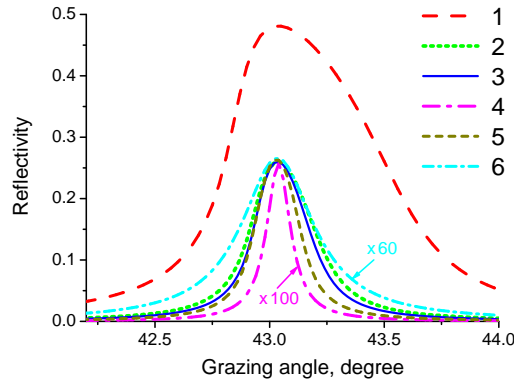


Рис. 3.2. Коэффициент отражения в зависимости от угла скольжения падающего пучка ($E = 183.4$ эВ) от следующих полубесконечных МИС: (1) Mo/B_4C , $d = 5$ нм, $\gamma = 0.34$; (2) Mo/B_4C , $d = 15$ нм, $\gamma = 0.14$; (3) Mo/B_4C , $d = 5$ нм, $\gamma = 0.09$; (4) Mo/B_4C , $d = 5$ нм, $\gamma = 0.01$; (5) C/B_4C , $d = 5$ нм, $\gamma = 0.12$; (6) Mo/B_4C , $d = 10$ нм, $\gamma = 0.48$. Для наглядности кривые 2-6 сдвинуты по оси абсцисс до совмещения углового положения максимумов отражения.

$\Delta\theta_{min} = 0.123^\circ$. Действительно, положив $\gamma = 0.01$ и не задумываясь о том, что значит толщина слоев Мо в 0.05 нм, получим кривую отражения 4 шириной $\Delta\theta = 0.13^\circ$, очень близкую к предельно возможной. В то же время, пиковое значение коэффициента отражения упало практически до нуля $R \approx 0.26\%$.

Еще один подход к увеличению разрешения состоит в замене Мо на какой-нибудь легкий, слабо поглощающий материал (например, С) с тем, чтобы уменьшить скачок диэлектрической проницаемости на границах раздела, от которого зависит разрешение (3.4). Действительно, взяв значение $\gamma = 0.12$, получим кривую отражения 5 от C/B_4C МИС. Отметим, что углерод играет здесь роль поглощающего материала. Видно, что такая МИС позволяет получить несколько лучшее разрешение ($\Delta\theta = 0.23^\circ$) по сравнению с рассмотренными выше зеркалами при том же пиковом значении отражения, которое определяется выбранным значением γ .

Наконец, для увеличения разрешения можно использовать квази-запрещенные Брэгговские отражения, выбрав значение γt в (3.4) близким к целому числу. Такой подход с успехом может быть использован в ЖР диапазоне [193] и обладает тем преимуществом, что толщины обоих слоев МИС оказываются близкими друг к другу (при $m = 2$ и $\gamma \approx 0.5$), в то время как нанесение ультратонких слоев поглощающего материала толщиной в доли нанометра представляет собой серьезную технологическую проблему. Однако большое поглощение излучения во всех без исключения материалах существенно ограничивает возможности такого подхода в МР диапазоне. Действительно, в отличие от предыдущих случаев, предельно достижимое разрешение будет ограничиваться поглощением, усредненному по периоду

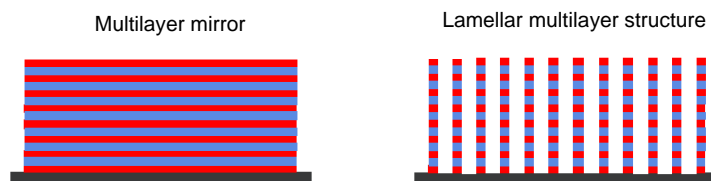


Рис. 3.3. Многослойное зеркало, состоящее из чередующихся слоев двух материалов, и созданная на его основе ламеллярная многослойная структура (ЛМС).

$\Delta\theta_{min} = \text{Im}(\varepsilon_A + \varepsilon_S) \cdot 1 / \sin(2\theta_0)$, а не поглощением излучения в легком материале. В частности, поглощение Мо (мнимая часть диэлектрической проницаемости) более чем в пять раз превышает поглощение В₄С. В результате, положив $d = 10$ нм, т.е. $m = 2$ и $\gamma = 0.48$ для Мо/В₄С МИС, получим разрешение близкое к предельному $\Delta\theta = 0.4^\circ$ (кривая 6 на рис.3.2), которое однако в три раза превышает то же значение для кривой 4. Конечно, для рассматриваемой длины волны имеется, как минимум, два материала с малым поглощением. Однако даже для С/В₄С МИС, работающей в условиях квази-запрещенного Брэгговского отражения 2-го порядка, минимальная ширина пика отражения $\Delta\theta_{min} = 0.16^\circ$ в 1.3 раза больше, чем для кривой 4. В области же более коротких длин волн ($\lambda \sim 0.6 - 2.5$ нм), где расположены линии излучения важных для практики элементов от кислорода до кремния, найти два вещества с малым поглощением, образующих стабильные границы раздела и приемлемых для современных технологий напыления, вообще проблематично.

Проведенное рассмотрение показало, что увеличение разрешения МИС в МР диапазоне длин волн не является такой уж простой проблемой, как могло бы показаться на первый взгляд. Да, полуширина пика отражения может быть уменьшена, но лишь в 2.5-3 раза с одновременным падением коэффициента отражения в 2-3 раза, что неприемлемо для многих практических приложений, включая РФА. Более того, поглощение излучения в веществе не позволяет даже в принципе увеличить разрешение более чем в 6 раз (для $\lambda = 6.76$ нм), причем при одновременном уменьшении коэффициента отражения до нуля. Тем самым, конструирование высоко селективных зеркал для МР диапазона требует нестандартных подходов. Один из них состоит в том, что если в обычной МИС сформировать ламеллярную многослойную структуру (ЛМС) (lamella = тонкая пластинка, чешуйка), схематично изображенную на рис. 3.3, то глубина проникновения МР излучения и, следовательно, угловое и спектральное разрешение структуры могут быть увеличены [194–197] хотя бы просто потому, что часть вещества зеркала удалена.

Расчет дифракции МР излучения от ЛМС является сложной теоретической проблемой. В настоящее время для этой цели используется ряд численных подходов, основанных на так называемой модальной теории [198] или на интегральном методе Л. Горая [199]. В то же время модальная теория непригодна для прямоугольной формы ламелл, равно как и в случае плавного изменения диэлектрической проницаемости на границах раздела многослойной структуры, обусловленного имплантацией или диффузией атомов соседних слоев. Интегральный метод хотя и преодолевает эти проблемы, но является довольно медленным, так что расчет дифракции МР излучения от ЛМС, имеющих сотни слоев, представляется весьма проблематичным.

Как утверждалось в [41], проблема дифракции МР излучения от ЛМС является настолько сложной, что, в отличие от обычного многослойного зеркала, невозможно найти аналитические критерии для оптимизации структуры ЛМС. До сих пор нахождение оптимальной конструкции ЛМС основывалось на переборе огромного числа вариантов и требовало сотен прогонов компьютерных программ.

В разделе 3.5 мы опишем подход к решению дифракции МР излучения от ЛМС на основе метода связанных волн (МСВ), хорошо известного в радиофизике и оптике видимого диапазона [200–202]. Оказывается, что МСВ очень хорошо подходит для задач рентгеновской оптики, поскольку малая поляризуемость всех материалов приводит к очень узким пикам отражения и дифракции от ЛМС. В результате оказывается, что в МСВ достаточно учесть лишь небольшое число дифракционных порядков, так что время компьютерного счета вполне разумное даже для ЛМС, имеющей тысячи слоев. Более того, мы покажем, что при достаточно малой ширине ламелл ЛМС работает в одномодовом режиме, при котором падающая волна возбуждает лишь единственную дифрагированную волну одного или другого порядка дифракции. При этом бесконечная система связанных уравнений МСВ сводится к системе двух дифференциальных уравнений первого порядка, решение которой может быть решено в аналитическом виде, причем, как будет показано ниже, согласие с точным численным расчетом превосходное. В результате, проблема оптимизации конструкции одномодовой ЛМС становится совершенно прозрачной, а аналитические критерии оптимизации могут быть четко сформулированы.

Отметим, что МСВ уже был успешно использован для расчета эффективности пропускающих зонных пластинок и “срезанных” многослойных решеток МР диапазона [203, 204].

3.2. Коэффициент отражения рентгеновского излучения от широкополосных многослойных зеркал с монотонно изменяющимся периодом

Коэффициент отражения многослойного зеркала полностью определяется комплексной функцией $\varepsilon(z)$, описывающей распределение диэлектрической проницаемости по глубине структуры. Для произвольной слоистой структуры со скачкообразными границами раздела эта функция может быть записана в следующем виде:

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)U(y(z); \Gamma); \quad z \in [0, L] \quad (3.5)$$

$$y(z) = \int_0^z q(z') dz'; \quad q(z) > 0 \quad (3.6)$$

где $U(y)$ - периодическая функция аргумента y , принимающая значения 0 или 1. В свою очередь, $y(z)$ - это монотонно возрастающая функция, а $q(z)$ - положительная, дифференцируемая и ограниченная на интервале $z \in [0, L]$ функция, где L - толщина многослойной структуры. Толщинный фактор Γ будем, для простоты, считать одним и тем же для всех пар слоев.

Граница z_{2j} между j -й и $(j+1)$ -й парой слоев (отсчитываемых от вершины структуры), а также граница z_{2j+1} между двумя соседними слоями различных веществ внутри $(j+1)$ -й пары слоев определяются уравнениями:

$$y(z_{2j}) = j; \quad y(z_{2j+1}) = j + \Gamma; \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (3.7)$$

где точка $z_0 = 0$ лежит на вершине многослойной структуры.

Ниже мы будем считать, что производная $q'(z)$ имеет один и тот же знак для всех $z \in [0, L]$. Следовательно, $y(z)$ - это или выпуклая ($q'(z) < 0$), или вогнутая ($q'(z) > 0$) функция, а толщина пары слоев (условно назовем ее периодом или би-слоем) увеличивается или уменьшается в глубь структуры монотонным образом. Функции $y(z)$ и $U(y(z))$ схематично показаны на рис.3.4 для случая $q'(z) > 0$.

В частном случае $q(z) = 1/d = const$, т.е. $y(z) = z/d$, выражение (3.5) описывает обычную периодическую структуру с периодом d .

Поскольку $U(y(z))$ - периодическая функция аргумента y , мы можем разложить ее в ряд Фурье

$$\varepsilon(z) = \mu + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cos[2\pi n y(z) + \pi n \Gamma]; \quad (3.8)$$

$$\mu = \Gamma \varepsilon_1 + (1 - \Gamma) \varepsilon_2; \quad B_n = 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \frac{\sin(\pi n \Gamma)}{\pi n}$$

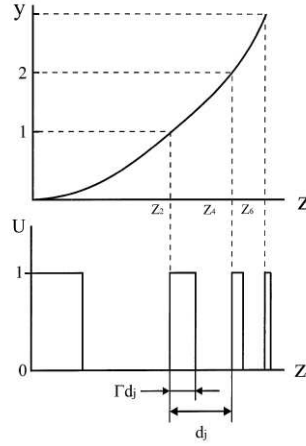


Рис. 3.4. Схематичный вид функций $y(z)$ и $U(y(z))$, описывающих изменение диэлектрической проницаемости и периода градиентной многослойной структуры.

и именно это представление для функции $\varepsilon(z)$ будет использоваться ниже.

Для того, чтобы рассчитать коэффициент отражения рентгеновского излучения, падающего на градиентное многослойное зеркало под углом скольжения θ , необходимо решить волновое уравнение (пренебрегая эффектами, связанными с поляризацией)

$$E''(z) + k^2[\varepsilon(z) - \cos^2 \theta]E = 0; \quad k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (3.9)$$

где распределение диэлектрической проницаемости $\varepsilon(z)$ определено в (3.8) при $z \in [0, L]$; в противном случае $\varepsilon(z) = 1$.

Прежде всего, запишем волновое уравнение в интегральной форме, которая полностью эквивалентна уравнению (3.9):

$$E(z) = E_0(z) - k^2 \int_0^L g(z, z')[\varepsilon(z') - \mu]E(z') dz' \quad (3.10)$$

Здесь $g(z, z')$ - это функция Грина более простого волнового уравнения, описывающего взаимодействие рентгеновской волны с однородной пленкой толщины L и диэлектрической проницаемости μ . Функция Грина выражается через два стандартных решения $E_0(z)$ и $E_1(z)$ этого уравнения, которые соответствуют волнам, падающим на пленку со стороны отрицательных или положительных z , соответственно:

$$g(z, z') = \frac{E_0(z_>)E_1(z_<)}{2ikt_f}; \quad z_< = \min(z, z'); \quad z_> = \max(z, z') \quad (3.11)$$

Поскольку нас интересует падение рентгеновской волны вне области ПВО, в полях $E_0(z)$

и $E_1(z)$ мы сохраним прошедшие волны и пренебрежем отраженными. Тогда можно записать

$$E_0(z) \approx \begin{cases} \exp(i\nu z) \\ \exp(i\kappa z) \\ t_f \exp(i\nu z) \end{cases} \quad E_1(z) \approx \begin{cases} t_f \exp(-i\nu z) & \text{если } z < 0 \\ t_f \exp(-i\kappa z) & \text{если } z \in [0, L] \\ \exp(-i\nu z) & \text{если } z > L \end{cases} \quad (3.12)$$

$$\nu = k \sin \theta ; \quad \kappa \equiv \kappa_1 + i\kappa_2 = k\sqrt{\mu - \cos^2 \theta}$$

где t_f - амплитудный коэффициент прохождения рентгеновской волны через однородную пленку.

Используя (3.11)-(3.12), получаем из (3.10) следующие выражения для амплитудного коэффициента отражения рентгеновской волны от градиентного многослойного зеркала и для поля волны внутри структуры:

$$r = \frac{ik^2}{2\kappa} \int_0^L E(z') [\varepsilon(z') - \mu] \exp(ikz') dz' \quad (3.13)$$

$$E(z) = \exp(i\kappa z) \cdot \left[1 + \frac{ik^2}{2\kappa} \int_0^z E(z') [\varepsilon(z') - \mu] \exp(-i\kappa z') dz' \right] + \exp(-i\kappa z) \cdot \frac{ik^2}{2\kappa} \int_z^L E(z') [\varepsilon(z') - \mu] \exp(i\kappa z') dz' ; \quad z \in [0, L] \quad (3.14)$$

Выражение (3.14) показывает, что поле внутри многослойной структуры представляет собой суперпозицию двух волн, распространяющихся в противоположном направлении вдоль оси z :

$$E(z) = \exp(i\kappa z)U_+(z) + \exp(-i\kappa z)U_-(z) \quad (3.15)$$

Подставив (3.8) и (3.15) в (3.13) и (3.14), получаем систему уравнений для определения амплитуд $U_{\pm}(z)$ и амплитудного коэффициента отражения $r = E_-(0)$:

$$U_+(z) = 1 + \frac{ik^2}{4\kappa} \sum_n B_n e^{i\pi n \Gamma} \int_0^z U_-(z') \exp[2i\pi n y(z') - 2i\kappa z'] dz' + S_+(z) \quad (3.16)$$

$$U_-(z) = \frac{ik^2}{4\kappa} \sum_n B_n e^{-i\pi n \Gamma} \int_z^L U_+(z') \exp[-2i\pi n y(z') + 2i\kappa z'] dz' + S_-(z) \quad (3.17)$$

$$r = \frac{ik^2}{4\kappa} \sum_n B_n e^{-i\pi n \Gamma} \int_0^L U_+(z') \exp[-2i\pi n y(z') + 2i\kappa z'] dz' + S_-(0) \quad (3.18)$$

где через $S_{\pm}(z)$ обозначены все члены, не выписанные в явном виде.

Формулы (3.16)-(3.17) показывают, что амплитуды U_{\pm} - медленно меняющиеся функции z : $|U'_{\pm}(z)| \ll |\kappa|$, если рентгеновская волна падает на многослойное зеркало вне области ПВО.

Ниже мы будем рассматривать градиентные многослойные зеркала, спектральная полоса отражения которых значительно шире полосы отражения периодических зеркал. В этом случае резонансное взаимодействие монохроматической волны с многослойной структурой происходит только в пределах достаточно узкой стопки слоев, толщины которых соответствуют брэгговскому условию отражения. В то же время, мы не будем предполагать, что отражение мало, т.е. стопка слоев, где происходит резонансное взаимодействие волны со структурой, может быть достаточно толстой, чтобы обеспечить высокий коэффициент отражения. Вне резонансной области взаимодействие волны со структурой слабое и сводится просто к поглощению излучения в веществе.

С математической точки зрения локальный характер взаимодействия рентгеновской волны с непериодической многослойной структурой проистекает из того факта, что интегралы в (3.16)-(3.18) содержат быстро осциллирующие функции. Следовательно, значения интегралов определяются, главным образом, вкладом от стационарных точек z , определяемых уравнением:

$$\frac{dy}{dz}(z) \equiv q(z) = \frac{\kappa_1(\lambda)}{\pi n}; \quad z \equiv z(\lambda); \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.19)$$

Подчеркнем, что стационарные точки присутствуют в интегральных членах, выписанных явно, и отсутствуют в слагаемых S_{\pm} . Поэтому вклад от этих слагаемых в значения $U_{\pm}(z)$ и r несущественен.

Уравнение (3.19) есть не что иное как условие Брэгга (с поправкой на преломление) для излучения с длиной волны λ , отражающегося от многослойной структуры с периодом $d = 1/q$. Это совершенно ясно, если переписать (3.19) в следующей форме:

$$n\lambda \simeq 2d(z) \sin \theta \left[1 + \frac{\text{Re}(1 - \mu)}{2 \sin^2 \theta} \right]$$

Далее мы будем предполагать, что для каждой длины волны λ из спектрального интервала $\lambda_{min} \leq \lambda \leq \lambda_{max}$ существует ровно одна стационарная точка, соответствующая брэгговскому отражению первого порядка ($n = 1$ в (3.19)). Это предположение справедливо, если функция $q(z)$ убывает или возрастает монотонно, а $\lambda_{max} < 2\lambda_{min}$.

Для интегрирования быстро осциллирующих функций естественно использовать метод стационарной фазы. Однако в традиционных учебниках и справочниках, как правило, рассматриваются два предельных случая в зависимости от того, где находится стационарная точка - внутри интервала интегрирования или на его краю. Вклад от стационарной точки

отличается в два раза в этих случаях. В нашем же случае стационарная точка z в интеграле (3.18) является функцией длины волны падающего излучения и смещается непрерывным образом от одной граничной точки $z = 0$ до другой $z = L$. Поэтому необходимо использовать несколько более общую оценку интегралов с быстро осциллирующей фазой.

Предположим, что точка z - это стационарная точка интеграла (3.18). Рассмотрим следующий интеграл

$$I(z) = \int_0^z U_+(z') \exp(2i\kappa z' - 2i\pi y(z')) dz' \quad (3.20)$$

Как обычно, разложим фазовую функцию $\Phi(z') = 2i\kappa_1 z' - 2i\pi y(z')$ в ряд Тейлора вблизи точки $z' = z$ вплоть до квадратичного по $z' - z$ члена, вынесем медленно меняющиеся амплитуды из-под знака интеграла и сделаем подходящую замену переменной интегрирования. Тогда получим:

$$I(z) \simeq \frac{U_+(z)}{\sqrt{2|q'(z)|}} \exp(2i\kappa z - 2i\pi y(z)) \int_0^{z\sqrt{2|q'(z)|}} \exp\left(-\frac{i\pi t^2}{2} \text{sign}(q'(z))\right) dt$$

где $\text{sign}(x > 0) = 1$ и $\text{sign}(x < 0) = -1$.

Если устремить верхний предел интегрирования в бесконечность, то получим обычную формулу метода стационарной фазы. Однако, нам необходимо выражение, которое было бы справедливо для любого $z \in [0, L]$. Поэтому оставим верхний предел интегрирования каким он есть и получим окончательно

$$I(z) \simeq \frac{U_+(z)}{\sqrt{2|q'(z)|}} \exp(2i\kappa z - 2i\pi y(z)) G\left(z\sqrt{2|q'(z)|}\right)$$

где функция $G(x)$ выражается через интегралы Френеля:

$$G(x) = C(x) - i\text{sign}(q'(z))S(x) \quad (3.21)$$

$$C(x) = \int_0^x \cos\left(\frac{\pi}{2}t^2\right) dt; \quad S(x) = \int_0^x \sin\left(\frac{\pi}{2}t^2\right) dt$$

Интеграл (3.20) от z до L оценивается аналогично.

Таким образом, применив метод стационарной фазы для вычисления интегралов в (3.16), находим, что коэффициент отражения от градиентного многослойного зеркала определяется градиентом периода и амплитудой прямой волны в стационарной точке $z(\lambda)$:

$$\begin{aligned} r(\lambda) &= \frac{ik^2 B_1}{4\kappa} \frac{U_+(z)}{\sqrt{2|q'(z)|}} \left[G\left(z\sqrt{2|q'(z)|}\right) + G\left((L-z)\sqrt{2|q'(z)|}\right) \right] \\ &\times \exp\left(2i\kappa z - 2i\pi y(z) - i\pi\Gamma\right); \quad z = z(\lambda) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Для того, чтобы найти значение медленных амплитуд в стационарной точке, вновь используем уравнения (3.16) с переменной z , удовлетворяющей условию (3.19). В этом случае стационарная точка лежит на краю интервала интегрирования. В результате получаем систему уравнений для определения медленных амплитуд в стационарной точке:

$$\begin{aligned} U_+(z) &= 1 + \frac{ik^2 B_1}{4\kappa} \frac{U_-(z)}{\sqrt{2|q'(z)|}} G^* \left(z\sqrt{2|q'(z)|} \right) \exp \left(-2i\kappa z + 2i\pi y(z) + i\pi\Gamma \right) \\ U_-(z) &= \frac{ik^2 B_1}{4\kappa} \frac{U_+(z)}{\sqrt{2|q'(z)|}} G \left((L-z)\sqrt{2|q'(z)|} \right) \exp \left(2i\kappa z - 2i\pi y(z) - i\pi\Gamma \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Решая систему (3.23) и подставляя результат в (3.22), находим окончательное выражение для коэффициента отражения $R(\lambda) = |r(\lambda)|^2$ рентгеновской волны от градиентной многослойной структуры [A18, A26]:

$$\begin{aligned} R(\lambda) &= \left| \frac{\eta(\lambda)\sqrt{2|q'(z)|}L \left[G \left(z\sqrt{2|q'(z)|} \right) + G \left((L-z)\sqrt{2|q'(z)|} \right) \right]}{|q'(z)|L^2 + 2\eta^2(\lambda)G^* \left(z\sqrt{2|q'(z)|} \right) G \left((L-z)\sqrt{2|q'(z)|} \right)} \right|^2 \exp[-4\kappa_2(\lambda)z] \quad (3.24) \\ \eta(\lambda) &\equiv \frac{k^2 B_1 L}{8\kappa} \equiv \frac{\pi L}{4\lambda} \frac{B_1(\lambda)}{\sqrt{\mu(\lambda) - \cos^2 \theta}}; \quad z = z(\lambda) \end{aligned}$$

где функция G определена в (3.21).

Подчеркнем еще раз, что z в выражениях (3.22)-(3.24) не является независимой переменной, а представляет собой функцию длины волны излучения λ и однозначно определяется выражением (3.19).

Специфическая особенность выражения (3.24) состоит в наличии осциллирующих функций G . Тем самым, для произвольной МИС с монотонно изменяющимся периодом коэффициент отражения представляет собой осциллирующую функцию длины волны (или угла скольжения) излучения.

Если заменить интегралы Френеля на их асимптотическое значение $1/2$, то получим существенно более простое выражение, описывающее кривую отражения в среднем [A26]:

$$R(\lambda) = \left| \frac{2\eta(\lambda)\sqrt{|q'(z)|}L}{\eta^2(\lambda) + |q'(z)|L^2} \right|^2 \exp[-4\kappa_2(\lambda)z] \quad (3.25)$$

Рассмотрим коэффициент отражения (3.25) в зависимости от градиента периода. Если период изменяется чрезвычайно быстро $|q'| \rightarrow \infty$, то коэффициент отражения падает до нулевого значения, как и ожидалось. При уменьшении же градиента периода коэффициент отражения сначала возрастает, достигает своего максимального значения при $|q'| \simeq (\eta/L)^2$, а затем вновь уменьшается вплоть до нуля при $|q'| = 0$. Ясно, что такое уменьшение коэффициента отражения не соответствует действительности и обусловлено применением метода

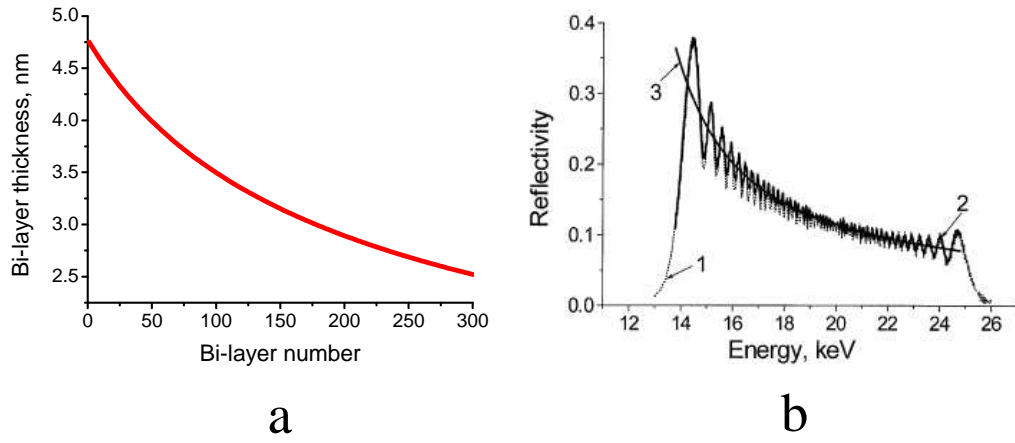


Рис. 3.5. (а) Изменение периода по глубине Cr/C МИС, определенного выражением (3.27) при $q_0 = 0.21 \text{ нм}^{-1}$ и $L = 1 \text{ мкм}$. Периоды отсчитываются от вершины структуры. (б) Коэффициент отражения от в зависимости от энергии рентгеновских квантов для угла скольжения падающего излучения равного 10 мрад. Расчеты проведены с помощью точного метода рекуррентных соотношений (1), а также с использованием аналитических выражений (3.24) (2) и (3.25) (3). (Из [A26]).

стационарной фазы. На самом деле коэффициент отражения должен непрерывно возрастать при уменьшении градиента периода, поскольку нулевой градиент означает периодическую многослойную структуру.

Тем самым, выражения (3.24)-(3.25) имеют физический смысл только для достаточно быстрого изменения периода в глубь структуры:

$$|q'(z)| > \left[\frac{\eta(\lambda)}{L} \right]^2 \quad (3.26)$$

Таким образом, выражение (3.24) и его упрощенная версия (3.25) описывают спектральную и угловую зависимости произвольного многослойного градиентного зеркала. При выводе этих выражений предполагалось монотонное изменение периода в глубь структуры и непрерывность производной $q'(z)$ по z , а также, что угол скольжения падающего пучка превышает критический угол ПВО. Отметим, что в противоположность нашему подходу теория отражения рентгеновской волны от градиентного зеркала была развита в [205] в предположении медленного изменения периода по глубине многослойной структуры.

Чтобы оценить точность полученных аналитических формул, рассмотрим пример многослойного зеркала, изменение периода которого $q(z)$ описывается следующим выражением:

$$q(z) = q_0 \left(1 + 0.9 \frac{z}{L} \right) \quad (3.27)$$

где $q_0 \simeq 0.21 \text{ нм}^{-1}$ определяет максимальную длину волны излучения $\lambda_{max} = 0.09 \text{ нм}$ ($E \simeq 14 \text{ кэВ}$), еще отражаемую многослойным зеркалом при угле скольжения $\theta = 10 \text{ мрад}$; $L = 1 \text{ мкм}$

- толщина многослойной структуры. Распределение толщины би-слоя (периода) по глубине показано на рис.3.5а

Используя выражения (3.6) и (3.7), можно найти толщины всех слоев структуры (3.27), а затем рассчитать коэффициент отражения с помощью точного метода рекуррентных соотношений. Результат расчета представлен кривой 1 на рис.3.5b. Кривая 2 была рассчитана по аналитической формуле (3.24). Как видно, согласие между кривыми 1 и 2 превосходное. Кривая 3 была рассчитана по упрощенной формуле (3.25) и адекватно описывает спектральную кривую отражения в среднем.

Безусловно, смысл полученных выражений (3.24) и (3.25) состоит не в том, чтобы использовать их для расчетов коэффициента отражения от зеркала с известным распределением периода по глубине, а в том, чтобы на их основе решить обратную задачу синтеза многослойной структуры, описанную в следующем разделе.

3.3. Обратная задача синтеза в теории градиентных многослойных зеркал

3.3.1. Аналитическое решение задачи

По существу решение обратной задачи состоит в нахождении функции $y(z)$ или $q(z)$. Поскольку уравнение (3.19) устанавливает связь (условие Брэгга) между периодом многослойной структуры в точке z и длиной волны излучения, отраженной от этой точки, то зависимость $\lambda = \lambda(z)$ полностью описывает многослойную структуру.

Рассмотрим обратную задачу, исходя из простейшего уравнения (3.25). Это алгебраическое уравнение второго порядка относительно градиента периода $|q'(z)|$. Одно из двух возможных решения уравнения выбирается в соответствии с условием (3.26):

$$|q'(z)| = \frac{\eta^2(\lambda)}{L^2} \frac{2 - \tau + 2\sqrt{1 - \tau}}{\tau} \equiv F(\lambda, z); \quad \tau \equiv R(\lambda) \exp[4\kappa_2(\lambda)z] \quad (3.28)$$

Параметр $\tau = \tau(\lambda)$ в уравнении (3.28) имеет простой физический смысл и представляет собой требуемый коэффициент отражения от стопки слоев, расположенных на глубине $z(\lambda)$ и находящихся в резонансе с длиной волны λ , с учетом уменьшения интенсивности волны на фактор $\exp[-4\kappa_2(\lambda)z]$ из-за двукратного прохождения излучения через вышележащие слои структуры. При выводе (3.28) мнимой частью функции $\eta(\lambda)$ пренебрегалось, что справедливо в жестком рентгеновском диапазоне длин волн. Таким образом, получаем систему двух

уравнений

$$\begin{cases} q(z) = \kappa_1(\lambda)/\pi \\ q'(z) = \pm F(\lambda, z) \end{cases} \quad (3.29)$$

где первое уравнение есть просто условие Брэгга для рентгеновской волны, а функция F является решением (3.28) уравнения (3.25). Учитывая, что

$$\frac{dq}{dz} = \frac{dq}{d\lambda} \cdot \frac{d\lambda}{dz}$$

и используя (3.29), находим уравнение

$$\frac{d\lambda}{dz} = \pm \pi F(\lambda, z) \left| \frac{d\kappa_1}{d\lambda}(\lambda) \right|^{-1} \quad (3.30)$$

устанавливающее связь между длиной волной излучения λ и точкой z , от которой отражение этой длины волны происходит.

Перейдя от непрерывных переменных z и λ к дискретным числовым последовательностям $\{z_{2j}\}$ и $\{\lambda_{2j}\}$ ($j = 0, 1, 2, \dots$), получаем простые рекуррентные соотношения, которые позволяют найти распределение периода по глубине структуры [A26]:

$$\begin{cases} z_{2j+2} = z_{2j} + \frac{\pi}{\kappa_1(\lambda_{2j})} \\ z_{2j+1} = z_{2j} + \Gamma(z_{2j+2} - z_{2j}) \\ \lambda_{2j+2} = \lambda_{2j} \pm 2\pi^2 F(\lambda_{2j}, z_{2j}) \left| \frac{d\kappa_1}{d\lambda}(\lambda_{2j}) \right|^{-1} \\ z_0 = 0; \quad \lambda_0 = \lambda_{min} \text{ или } \lambda_{max} \end{cases} \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (3.31)$$

Точки z_j соответствуют границе между слоями, а λ_j - длина волны, связанная с точкой z_j условием Брэгга. Расчет начинается с верхнего слоя структуры. Выбор знака в выражении для λ_{2j+2} и одного из граничных условий для λ зависит от того, увеличивается или уменьшается период в глубь структуры.

Аналогичным образом, исходя из уравнений (3.29), получаем рекуррентные соотношения, которые позволяют найти закон изменения периода по глубине структуры, обеспечивающей заданную угловую зависимость коэффициента отражения $R(\theta)$ [A26]:

$$\begin{cases} z_{2j+2} = z_{2j} + \frac{\pi}{\kappa_1(\chi_{2j})} \\ z_{2j+1} = z_{2j} + \Gamma(z_{2j+2} - z_{2j}) \\ \chi_{2j+2} = \chi_{2j} \pm \frac{\lambda^2}{2} F(\chi_{2j}, z_{2j}) \\ z_0 = 0; \quad \chi_0 = \sin^2 \theta_{min} \text{ или } \sin^2 \theta_{max} \end{cases} \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

где переменная $\chi \equiv \sin^2 \theta$, а угол скольжения θ связан с точкой z условием Брэгга.

Построим с помощью соотношений (3.31) Ni/C многослойную структуру, предполагая, что коэффициент отражения имеет постоянное значение $R(\lambda) = R_0 = 0.2$ в спектральном

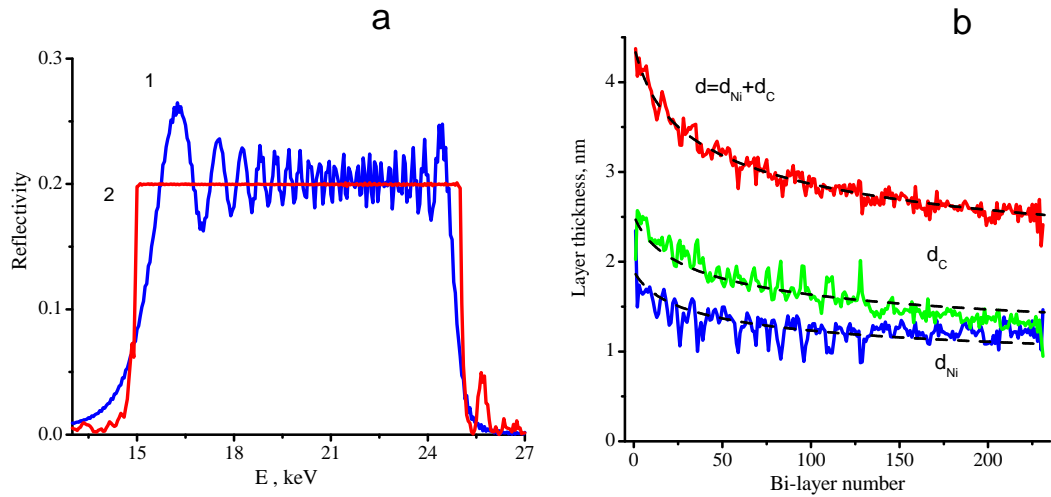


Рис. 3.6. Коэффициент отражения (а) и изменение периода по глубине Ni/C многослойного зеркала (b), оптимизированного на постоянный коэффициент отражения в спектральном диапазоне $E \in [15, 25]$ кэВ при $\theta = 10$ мрад. Толщины слоев были найдены с использованием рекуррентных соотношений (3.31) (пунктирные кривые на рис. b), а затем уточнены с помощью прямого численного алгоритма (сплошные кривые). Соответствующие им коэффициенты отражения показаны кривыми 1 и 2 на рис. а. Би-слои отсчитываются от вершины МИС. (Из [A26]).

интервале от $E_{min} = 15$ кэВ до $E_{max} = 25$ кэВ. При расчетах предполагалось, что период убывает в глубь структуры, а угол скольжения падающего излучения $\theta_0 = 10$ мрад. Толщина каждого слоя структуры легко находится из уравнений (3.31). Коэффициент отражения вычисляется с помощью точного алгоритма Паратта.

Распределение толщин слоев по глубине многослойной структуры показано пунктирными кривыми на рис. 3.6b. Зависимость коэффициента отражения от энергии излучения представлена на рис. 3.6a, кривая 1. Коэффициент отражения имеет в среднем постоянное значение, однако осциллирует относительно него. Это и не удивительно, поскольку упрощенная формула (3.25), которой мы пользовались при решении обратной задачи, вовсе не описывает осцилляций коэффициента отражения.

Тем не менее, аналитические расчеты градиентной многослойной структуры представляют существенную часть нашего подхода. Оказывается, что аналитическое распределение периода по глубине, хотя и приближенное, является превосходным начальным распределением для прямых численных вычислений. Пример компьютерного уточнения распределения толщин слоев показан сплошными кривыми на рис. 3.6b. Соответствующая кривая отражения представлена на рис. 3.6a (кривая 2). Как видно, небольшие изменения в распределении толщин слоев по глубине привели к полному подавлению осцилляций и появлению совершенно ровного плато на кривой отражения. Прямая компьютерная оптимизация конструкции

градиентных зеркал описана ниже в разделе 3.3.3.

3.3.2. Широкополосные зеркала для каналов СИ

В этом разделе мы используем аналитический подход для анализа конструкции, оптических свойств и предельных параметров широкополосных градиентных зеркал применительно к задаче управления пучками синхротронного излучения (СИ). Многослойные зеркала, используемые в каналах СИ, должны удовлетворять целому ряду требований, которые, вообще говоря, противоречат друг другу:

- Период структуры должен быть как можно меньше, поскольку длина зеркала обратно пропорциональна углу скольжения излучения.
- Коэффициент отражения должен быть как можно больше.
- Число периодов и общая толщина структуры должны быть минимальными, чтобы ослабить внутренние напряжения, которые могут привести к разрушению (отслаиванию и растрескиванию) МИС и деформации подложки.
- Наконец, пара материалов, составляющих МИС, должна обеспечить высокую тепловую и радиационную стойкость зеркала.

Как и выше, будем рассматривать многослойные структуры с постоянным коэффициентом отражения $R(E) = R_0 = const$ в спектральном интервале от 15 до 25 кэВ. Угол скольжения падающего излучения примем равным 10 мрад, а период будем считать монотонно убывающим в глубь структуры.

Прежде всего, рассчитаем максимально достижимые значения коэффициента отражения $R_{max} = \max(R_0)$ для разных пар материалов. Значения R_{max} , определяемые в конечном итоге поглощением излучения в веществе зеркала, представлены в Таблицах 3.1 и 3.2 для разных комбинаций материалов - компонентов многослойной структуры. Если выбрать значение R_0 большее, чем представлено в Таблицах, то параметр τ в выражении (3.28) становится больше единицы при некотором значении λ , приводя к нефизическим (комплексным) значениям функции F и, следовательно, периода структуры. Максимально достижимый коэффициент отражения как раз и соответствует предельному случаю $\tau = 1$ при $\lambda = \lambda_{min}$. Отношение толщин Γ (одно и то же для всех периодов) выбиралось так, чтобы обеспечить максимальное значение R_{max} . Число периодов N находилось непосредственно в процессе решения уравнений (3.31).

Таблица 3.1. Параметры углерод-содержащих многослойных градиентных зеркал

Структура	R_{max}	Γ	N	$0,9R_{max}$	$\Gamma_{0,9}$	$N_{0,9}$
Cr/C	23,5	0,38	908	21,2	0,43	500
Mn/C	22,4	0,38	805	20,2	0,42	444
Fe/C	23,2	0,38	652	20,9	0,43	359
Co/C	23,9	0,38	520	21,5	0,42	288
Ni/C	24,0	0,37	440	21,6	0,43	244
Cu/C	21,4	0,37	464	19,3	0,43	247
Ta/C	21,5	0,38	124	19,3	0,42	68
W/C	24,1	0,38	97	21,7	0,42	53
Re/C	24,9	0,38	82	22,4	0,41	46
Os/C	26,3	0,39	69	23,6	0,41	39
Ir/C	25,5	0,39	68	23,0	0,40	39
Pt/C	23,5	0,39	72	21,2	0,40	41
Au/C	20,9	0,39	84	18,8	0,42	46

В Таблицах 3.1 и 3.2 представлены только те зеркала, для которых R_{max} превышает 20%. Такие значения R_{max} могут быть достигнуты в том случае, если в качестве поглощающего компонента структуры используется либо легкое вещество с $Z = 24 - 29$, либо, наоборот, тяжелый материал с $Z \geq 73$.

Таблицы 3.1 и 3.2 показывают несколько специфических особенностей градиентных многослойных зеркал по сравнению с периодическими. Прежде всего, оптимальное значение параметра Γ , обеспечивающего максимальное значение коэффициента отражения, оказывается почти независимым от состава градиентного зеркала. Ситуация оказывается весьма схожей со случаем оптимизации периодической структуры на максимальный интегральный по спектру коэффициент отражения [192, 206], а не на максимальное пиковое значение отражения.

Другая специфическая особенность градиентных зеркал состоит в очень сильной зависимости необходимого числа пар слоев от поляризуемости сильнопоглощающего материала: чем тяжелее поглотитель, тем меньше, в целом, требуемое число пар слоев. Например, замена хрома на осмий приводит к уменьшению числа слоев Os/C структуры в 13 раз по сравнению с Cr/C зеркалом. В случае же периодических Cr/C и Os/C структур, необходимое число

Таблица 3.2. Параметры осмий-содержащих многослойных градиентных зеркал

Структура	R_{max}	Γ	N	$0,9R_{max}$	$\Gamma_{0,9}$	$N_{0,9}$
Os/Be	27,6	0,39	67	24,9	0,41	38
Os/B	26,5	0,39	69	23,8	0,41	39
Os/C	26,3	0,39	69	23,6	0,41	39
Os/Si	25,9	0,39	69	23,3	0,41	39
Os/B ₄ C	26,0	0,39	70	23,4	0,40	40
Os/SiO ₂	26,3	0,39	69	23,6	0,41	39
Os/LiF	25,9	0,39	70	23,3	0,42	39
Os/Al ₂ O ₃	22,5	0,39	76	20,3	0,40	43
Os/BaF ₂	20,8	0,40	71	18,7	0,42	39

периодов отличается всего в 1.5 раза.

Чтобы понять такую сильную зависимость N от поляризуемости поглотителя в градиентных зеркалах, рассмотрим упрощенную модель неперiodической структуры. Предположим, что широкополосное зеркало состоит из нескольких периодических стопок слоев, расположенных одна на другой, причем периоды разных стопок отличаются. Число периодов n внутри каждой стопки выберем в соответствии с хорошо известным выражением [192]

$$n \simeq \sqrt{R} \sin^2 \theta_0 |\operatorname{Re}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)|^{-1} \frac{\pi}{\sin \pi \Gamma} \quad (3.33)$$

которое справедливо для s-поляризации и предполагает слабое поглощение излучения в многослойной структуре. Для фиксированных R и Γ число периодов в каждой стопке примерно в 3,6 раз меньше для Os/C структуры. Число стопок m следует выбрать так, чтобы кривая отражения зеркала перекрыла заданный спектральный интервал $[E_{min}, E_{max}]$, который намного шире, чем полоса отражения ΔE отдельной стопки слоев:

$$m \sim \frac{E_{max} - E_{min}}{\Delta E}$$

Учитывая, что полоса отражения периодического зеркала обратно пропорциональна числу периодов, участвующих в образовании отраженной волны

$$\Delta E \sim \frac{1}{n} \sim \frac{|\operatorname{Re}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)|}{\sin^2 \theta} \quad (3.34)$$

закключаем, что необходимое число стопок также в 3,6 раза меньше для Os/C зеркала по сравнению с Cr/C структурой. Окончательно находим, что полное число пар слоев N широкопо-

лосного многослойного зеркала обратно пропорционально квадрату скачка диэлектрической проницаемости

$$N = mn \sim \frac{\sin^4 \theta}{|\operatorname{Re}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)|^2} \quad (3.35)$$

и, следовательно, примерно в 13 раз меньше для Os/C зеркала.

Еще одна интересная особенность широкополосных зеркал для жесткого рентгеновского диапазона длин волн состоит в относительно слабой зависимости максимально достижимого коэффициента отражения от сорта слабопоглощающего материала (см. Таблицу 3.1). Например, коэффициент поглощения ($\operatorname{Im}\varepsilon$) ВаF₂ при $E = 20$ кэВ на три порядка величины больше, чем коэффициент поглощения бериллия. Однако коэффициенты отражения зеркал Os/VaF₂ и Os/Be отличаются только на 7%. Дело заключается в том, что оптимальный толщинный фактор Γ практически один и тот же для рассматриваемых зеркал, а коэффициент поглощения осмия во много раз больше, чем у бериллия и фторида бария. Поэтому именно коэффициент поглощения осмия и является основным фактором, определяющим достижимый коэффициент отражения. Этот факт может быть весьма полезным для разработки многослойных зеркал с широкой полосой отражения, поскольку существенно расширяет класс материалов, пригодных для изготовления рентгеновских структур, включая, в частности, материалы, традиционно применяемые в видимой и УФ оптике.

Как и в случае периодических зеркал, необходимое число пар слоев градиентной структуры быстро возрастает при стремлении достичь максимально возможного коэффициента отражения. Для иллюстрации (см. Таблицы 3.1 и 3.2) мы рассчитали параметры структур, обеспечивающих коэффициент отражения равный 0,9 от максимального значения R_{max} . Отношение толщин слоев $\Gamma_{0,9}$ было выбрано из условия минимизации необходимого числа периодов $N_{0,9}$, который в результате уменьшился примерно в 1,8 раз по сравнению со случаем максимально возможного коэффициента отражения.

В Таблице 3.3 показаны максимально достижимые коэффициенты отражения и необходимое число периодов для многослойных структур с высокой тепловой и радиационной стойкостью. Как и выше, использование тяжелого материала в качестве поглотителя позволяет создать зеркало с приемлемым числом слоев и достаточно высоким коэффициентом отражения.

Зависимость максимально достижимого коэффициента отражения R_{max} от угла скольжения θ показана на рис.3.7а для Ni/C и Os/C зеркал. Как и выше, предполагалось, что структуры имеют постоянный коэффициент отражения в спектральном интервале от 15 до 25 кэВ. Для каждого θ толщинный фактор Γ был выбран так, чтобы обеспечить макси-

Таблица 3.3. Параметры многослойных градиентных зеркал с высокой тепловой стойкостью

Структура	R_{max}	Γ	N
WC/C	21,2	0,38	137
WSi ₂ /Si	21,3	0,38	283

мальное значение коэффициента отражения. Рисунок показывает, что R_{max} уменьшается с увеличением угла скольжения θ и становится меньше 10% при $\theta = 20$ мрад. В действительности, уменьшение коэффициента отражения будет более быстрое из-за экспоненциально нарастающего эффекта межплоскостных шероховатостей. Тем самым, имеется серьезное противоречие между углом скольжения падающего пучка СИ (т.е. длиной зеркала) и достижимым коэффициентом отражения. Необходимое число пар слоев структуры в зависимости от угла скольжения падающего пучка θ показано на рис.3.7b и увеличивается драматически с увеличением угла θ . Так, увеличение угла скольжения от 10 мрад до 20 мрад приводит к десятикратному увеличению числа слоев и пятикратному увеличению общей толщины структуры. Для сравнения, толщина периодической структуры при этом только удвоится.

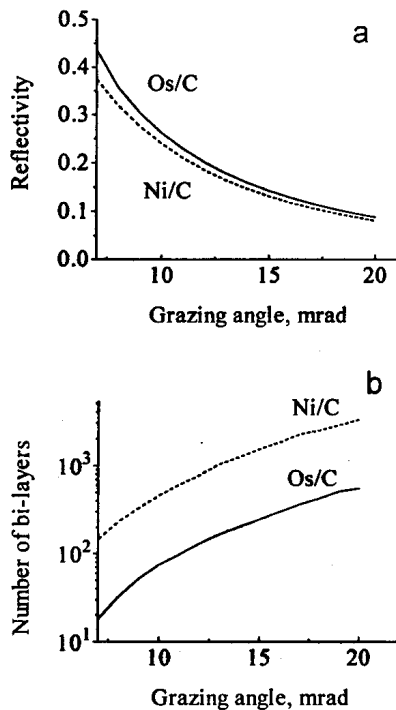


Рис. 3.7. Максимально достижимый коэффициент отражения (a) и необходимое число пар слоев (b) в зависимости от угла скольжения падающего пучка. Расчеты проведены для Os/C и Ni/C зеркал, имеющих постоянное значение R в спектральном диапазоне от 15 до 25 кэВ.

Чтобы понять результаты, показанные на рис.3.7, рассмотрим снова упрощенную модель градиентной структуры как состоящую из нескольких периодических стопок. Если угол скольжения θ удваивается, то число периодов в каждой стопке увеличивается в 4 раза в соответствии с выражением (3.33). Одновременно полоса отражения каждой стопки (3.34) сужается в 4 раза, так что необходимое число стопок увеличивается в 4 раза. В результате общая толщина градиентной многослойной структуры (3.35) возрастает при увеличении угла скольжения намного быстрее, чем для периодического зеркала. Быстрый рост толщины структуры с ростом θ приводит к увеличению поглощения излучения в вышележащих слоях и, следовательно, к уменьшению достижимого коэффициента отражения. Сильная зависимость R_{max} от угла скольжения θ также отличает градиентные зеркала от обычных периодических, максимально достижимый коэффициент отражения от которых не зависит от угла скольжения (для s-поляризации) [192].

3.3.3. Численное уточнение аналитического решения задачи синтеза

Численный подход к решению обратной задачи синтеза градиентных многослойных зеркал основан, как обычно, на минимизации функции невязки стандартного вида

$$MF = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m [R_0(E_j) - R(E_j)]^2 = \min \quad (3.36)$$

которая характеризует среднеквадратичное отклонение рассчитанного профиля коэффициента отражения $R(E)$ от желаемого $R_0(E)$. Толщины всех слоев рассматриваются как независимые переменные. Решение обратной задачи синтеза - это набор толщин, обеспечивающий достижение минимума функции невязки. Подчеркнем, что функция MF многих переменных имеет, вообще говоря, большое число локальных минимумов разной глубины. Решение обратной задачи подразумевает нахождение глобального минимума функции невязки или, по крайней мере, достаточно глубокого минимума, где значение MF настолько мало, что рассчитанный профиль коэффициента отражения очень близок к желаемому. Поиск глобального минимума представляет собой чрезвычайно сложную проблему в задаче минимизации функции многих переменных. Большинство существующих подходов к задаче синтеза многослойных зеркал основано на чрезвычайно сложных компьютерных программах, требующих к тому же длительных расчетов.

Основная особенность нашего подхода состоит в использовании аналитического решения как начального приближения для прямого численного расчета. В результате снимается проблема глобальной минимизации функции невязки, поскольку оказывается, что аналитическое распределение толщин слоев почти совпадает с тем, которое обеспечивает очень глу-

бокий минимум функции невязки. Для иллюстрации этого утверждения рассмотрим рис.3.8, на котором представлены результаты численной оптимизации Os/C градиентного зеркала с постоянным коэффициентом отражение в спектральном диапазоне от 15 до 25 кэВ (угол скольжения - 10 мрад). Число слоев структуры - 39, следовательно, MF является функцией 78 переменных. В качестве начального распределения толщин слоев использовалось аналитическое решение (сплошная кривая 1 на рис.3.8a), линейная зависимость (прямая 2) и периодическая структура (прямая 3). С помощью численной программы был найден минимум функции невязки во всех трех случаях. Полученные в результате оптимизации распределения толщин показаны символами 1, 2 и 3, соответственно, на рис.3.8a. Как видно из рисунка найденные распределения совершенно различны.

Стартовав с аналитического решения, мы получили зеркало с совершенно плоским плато на кривой отражения (кривая 1 на рис.3.8b). Относительная дисперсия кривой отражения, характеризующая среднюю амплитуду осцилляций на плато

$$RD = \frac{\sqrt{MF}}{R_0} \cdot 100\% \quad (3.37)$$

составляет всего лишь 0.4% в рассматриваемом случае. Стартовав с линейной зависимости, мы также получили более или менее плоское плато (кривая 2) с относительной дисперсией 1.5%, т.е. амплитуда осцилляций на кривой 2 в среднем в 4 раза больше, чем на кривой 1. Более того, время расчета увеличилось в этом случае почти в 20 раз. Наконец, стартовав с периодического зеркала, мы получили структуру с сильно осциллирующим коэффициентом отражения (кривая 3 на рис.3.8b). Иными словами, найденный в этом случае минимум функции невязки недостаточно глубок.

Рассмотренный пример ясно демонстрирует сложность проблемы глобальной минимизации, равно как чрезвычайную простоту, быстроту и точность нашего подхода, в котором аналитическое решение берется в качестве начального приближения при прямом численном расчете. В качестве алгоритма минимизации функции невязки использовалась стандартная программа (из библиотеки стандартных программ Microsoft Fortran Power Station), основанная на алгоритме Левенберга-Маркуарда [168], который не предназначен для поиска глобального минимума функции многих переменных и позволяет найти лишь, в некотором смысле, ближайший к начальному распределению минимум функции MF . Тем не менее, если аналитическое распределение периода используется в качестве начального, алгоритм обеспечивает очень хорошее согласие между рассчитанным и желаемым профилями коэффициента отражения. Более того, алгоритм Левенберга-Маркуарда, по-видимому, является наиболее быстрым на сегодняшний день, поскольку он был специально разработан для минимизации

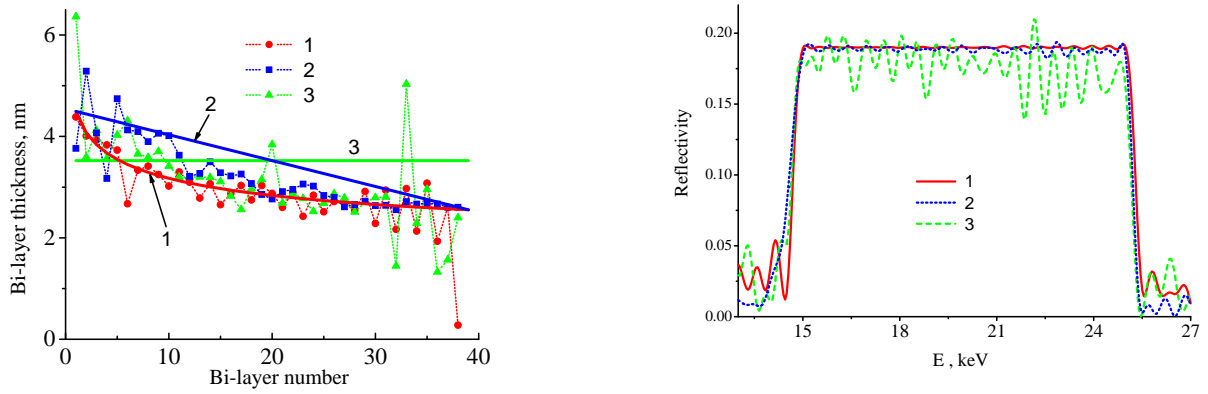


Рис. 3.8. Распределение периода по глубине (а) и соответствующий профиль коэффициента отражения (б) для Os/C градиентного многослойного зеркала ($N = 39$, $\theta = 10$ мрад), оптимизированного на постоянное значение R в спектральном диапазоне $E \in [15, 25]$ кэВ. Распределения периодов, показанных символами 1, 2, и 3, были найдены в результате численной оптимизации функции невязки с помощью алгоритма Левенберга-Маркуарда и с использованием распределений, показанных сплошными линиями 1, 2 и 3, соответственно, в качестве начального приближения.

функций частного вида (3.36). Время счета, необходимое для нахождения распределения периода по глубине (символы 1 на рис.3.8а, 78 переменных), составляет для современных компьютеров порядка единиц секунд, что несоизмеримо со временем счета при использовании алгоритмов глобальной оптимизации.

Отметим, что в работах [189, 190] для оптимизации ЭУФ многослойных структур с постоянным коэффициентом отражения в широком диапазоне длин волн был использован подход, схожий, в определенном смысле, с нашим. Авторы этих работ, как и мы, сначала находят подходящее начальное распределение толщин слоев, которое затем уточняется с помощью прямой численной оптимизации всех слоев структуры. Однако вместо аналитического решения они аппроксимируют начальное распределение толщин с помощью модельной функции, представляющей собой сумму экспонент, весовые коэффициенты и показатели которых также находятся с помощью численного метода. Хотя физический смысл начального приближения при этом в значительной мере утерян, результаты, представленные в [189, 190], выглядят очень хорошими. В то же время, не является очевидным, что начальное распределение толщин в виде суммы экспоненциальных функций будет адекватным приближением для более сложного профиля кривой отражения (см. ниже). Упомянем также работу [186], где обратная задача синтеза широкополосного многослойного зеркала сведена к решению вариационной проблемы.

Обсудим теперь некоторые особенности численной минимизации функции невязки на

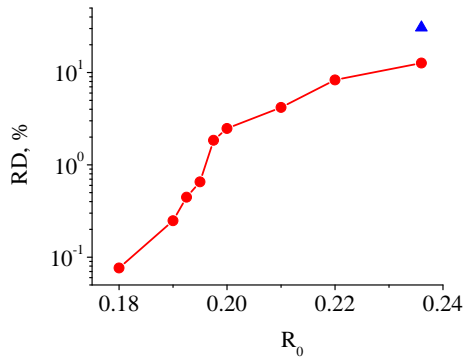


Рис. 3.9. Относительная дисперсия (3.31) как функция желаемого коэффициента отражения на плато для Os/C зеркал, состоящих из 39 пар слоев и оптимизированных на постоянный коэффициент отражения в спектральном диапазоне $E \in [15, 25]$ кэВ ($\theta = 10$ мрад). Оптимизация конструкции зеркала выполнена с помощью аналитических соотношений (треугольник) и уточнена прямым компьютерным расчетом (кружки).

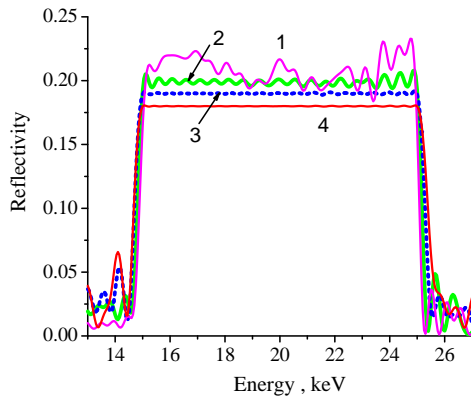


Рис. 3.10. Профиль коэффициента отражения для Os/C многослойного зеркала ($N = 39$, $\theta = 10$ мрад), оптимизированного с помощью прямого компьютерного расчета для получения постоянного коэффициента отражения $R_0 = 23.6\%$ (1), 20% (2), 19% (3) и 18% (4) в спектральном диапазоне $E \in [15, 25]$ кэВ.

примере Os/C многослойной структуры с постоянным коэффициентом отражения в спектральном диапазоне $E \in [15, 25]$ кэВ. На рис.3.9 показана зависимость относительной дисперсии кривой отражения от значения коэффициента отражения на плато. Треугольник показывает значение RD при оптимизации конструкции зеркала с использованием аналитических рекуррентных соотношений (3.31). Расчеты были выполнены в предположении, что коэффициент отражения на плато $R_0 = R_{max} = 23.6\%$ (при этом число пар слоев $N = 39$ было найдено из рекуррентной процедуры непосредственно, см. Таблицу 3.1). Значение RD оказалось равным примерно 20% . Уточнение конструкции зеркала с помощью численного алгоритма привело к некоторому уменьшению относительной дисперсии, которая, однако, осталась значительной. Профиль коэффициента отражения для зеркала, оптимизированного численно на достижение $R_0 = 23.6\%$, показан на рис.3.10, кривая 1. Как видно из рисунка, такое значение R_0 слишком велико, чтобы получить ровное плато на кривой отражения ($RD \sim 10\%$).

Чтобы получить более ровное плато, можно несколько уменьшить желаемое значение R_0 . Например, положив $R_0 = 19\%$, получем структуру, для которой RD составляет всего

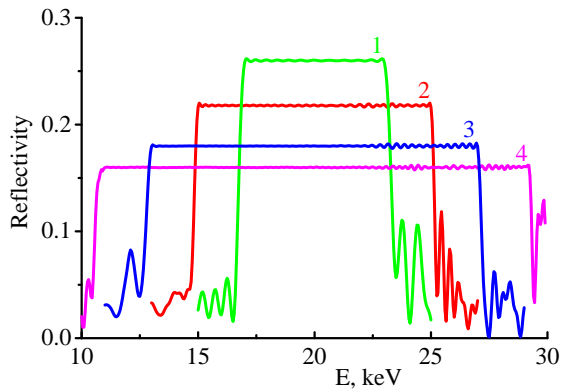


Рис. 3.11. Коэффициент отражения от Os/C многослойных зеркал, состоящих из 39 (1), 69 (2), 79 (3) и 104 (4) пар слоев и оптимизированных на постоянный коэффициент отражения (при $\theta = 10$ мрад) во все более широком спектральном интервале.

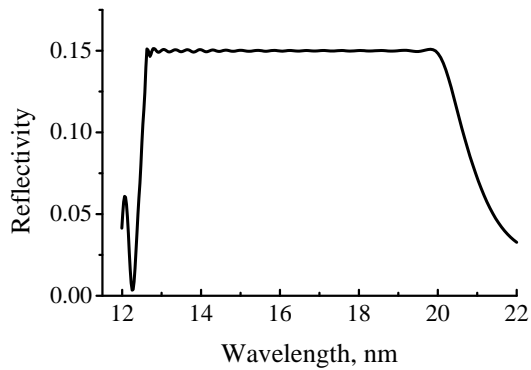


Рис. 3.12. Коэффициент отражения при нормальном падении от Mo/Si многослойного зеркала ($N = 45$), оптимизированного на постоянный коэффициент отражения в интервале длин волн $\lambda \in [12.5, 20]$ нм.

лишь 0.25% (кривая 3 на рис.3.10). Еще одна возможность для получения ровного плато состоит в увеличении числа пар слоев структуры. Например, увеличение числа периодов от 39 до 69 приводит к уменьшению относительной дисперсии от 7% до 0.6% при значении $R_0 = 22\%$. При этом расчете мы использовали в качестве начального распределение толщин то, которое было найдено при помощи аналитического подхода для верхних 39 периодов (кривая 1 на рис.3.8). Дополнительные же 30 нижних периодов были положены постоянными, поскольку период в глубине МИС изменяется очень медленно и почти постоянен. Дальнейшее увеличение числа периодов позволяет еще немного увеличить значение R_0 на плато при той же самой относительной дисперсии RD .

Тем самым, аналитический расчет, во-первых, действительно определяет максимально достижимый коэффициент отражения R_0 от широкополосной МИС, ограниченный поглощением излучения в веществе, и, во-вторых, определяет минимально возможное число периодов, необходимое для достижения такого значения R_0 . Для уменьшения относительной дисперсии на плато отражения следует либо несколько уменьшить желаемое значение R_0 , либо значительно увеличить число би-слоев по сравнению с тем, которое было найдено аналитически, причем значения толщины добавленных би-слоев можно положить постоянными в начальном распределении.

Рассмотрим далее несколько примеров, демонстрирующих возможности нашего подхо-

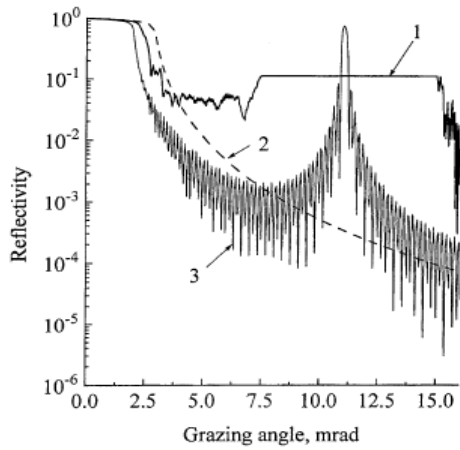


Рис. 3.13. Коэффициент отражения Os/C многослойного зеркала ($N = 60$, $\lambda = 0.05$ нм), оптимизированного на постоянный коэффициент отражения в интервале углов скольжения $\theta \in [7.5, 15]$ мрад (кривая 1). Для сравнения представлены кривые отражения от массивного осмия (2) и периодического Os/C зеркала ($N = 60$, $d = 2.3$ нм, $\Gamma = 0.35$) (3).

да. На рис.3.11 показан результат оптимизации Os/C многослойного зеркала с постоянным коэффициентом отражения во все более широком спектральном интервале. Чем шире плато на кривой отражения, тем больше оказывается интегральный по спектру коэффициент отражения

$$R_{int} = \int_{E_{min}}^{E_{max}} R(E)dE$$

который есть не что иное как площадь под плато. Значение R_{int} составляют 1.86, 2.39, 2.63 и 3.07 кэВ для кривых 1, 2, 3 и 4, соответственно. Для сравнения, $R_{int} \simeq 0.7$ кэВ для периодического Os/C зеркала, оптимизированного на максимальный пиковый коэффициент отражения при $E = 20$ кэВ.

На рис.3.12 показан профиль коэффициента отражения при нормальном падении ЭУФ излучения на Mo/Si многослойное зеркало. При расчете использовался тот же самый подход, что и для жестких рентгеновских зеркал, т.е. комбинация аналитического и численного методов.

На рис.3.13 показан профиль коэффициента отражения от Os/C многослойного зеркала, оптимизированного на постоянный коэффициент отражения в широком интервале углов скольжения. Для сравнения показаны кривые отражения от массивного осмия и от периодического Os/C зеркала.

Ясно, что наш подход может быть использован для оптимизации многослойного зеркала с любым желаемым профилем коэффициента отражения, а не только с постоянным. В диссертации мы ограничимся рис. 3.14, который иллюстрирует возможность решения обратной задачи синтеза МИС даже для очень сложного профиля коэффициента отражения, близкого к профилю мавзолея Тадж-Махал. Распределение периода по глубине показано сплошной кривой на рис.3.15. Пунктирная кривая - результат аналитического расчета. Рисунок ясно

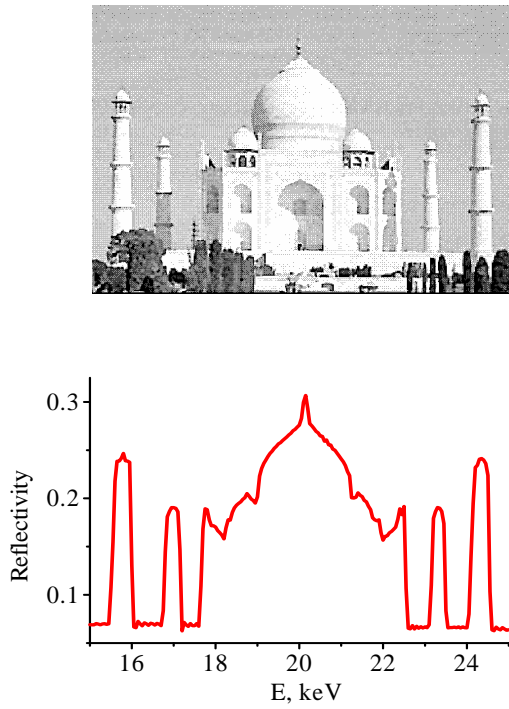


Рис. 3.14. Фотография мавзолея Тадж-Махал и кривая отражения, найденная как результат решения обратной задачи синтеза многослойных структур. (Из [A26]).

демонстрирует большие возможности разработанного нами подхода.

Наконец, на рис.3.16 проведено сравнение наших расчетов с результатами работы [182] по оптимизации конструкции Mo/Si многослойного зеркала с тем, чтобы получить постоянный коэффициент отражения $R = 0.3$ в интервале длин волн от 15 до 17 нм. Авторы [182] использовали компьютерную программу по поиску глобального минимума функции невязки (3.36) методом случайного поиска в пространстве огромного числа переменных - толщин слоев многослойной структуры. В целом, результат, полученный в работе [182], достаточно хороший: коэффициент отражения почти постоянен на плато и соответствует требуемому значению R (сплошная кривая на рис.3.16). В то же время, осцилляции, хотя и небольшой амплитуды, все еще присутствуют на плато. Кроме того, плато отражения оказалось примерно на 0.4 нм (т.е. на 20%) уже требуемого.

Результат нашего расчета показан пунктирной кривой на рис.3.16. Как неоднократно отмечалось выше, использование аналитического решения в качестве начального приближения позволяет без каких-либо проблем найти требуемую конструкцию многослойного зеркала, используя стандартную программу минимизации функции многих переменных, которая, конечно же, находит лишь тот (локальный) минимум, который, в некотором смысле, ближе

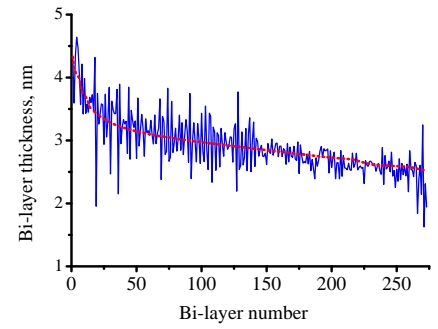


Рис. 3.15. Распределение толщин би-слоев, обеспечивающее требуемый профиль коэффициента отражения, показанный на соседнем рисунке. Расчеты проведены для Ni/C многослойного зеркала с 273 пар слоев при $\theta = 10$ мрад. Пунктирная кривая найдена с помощью аналитических рекуррентных соотношений, сплошная кривая получена в результате численного уточнения конструкции зеркала.

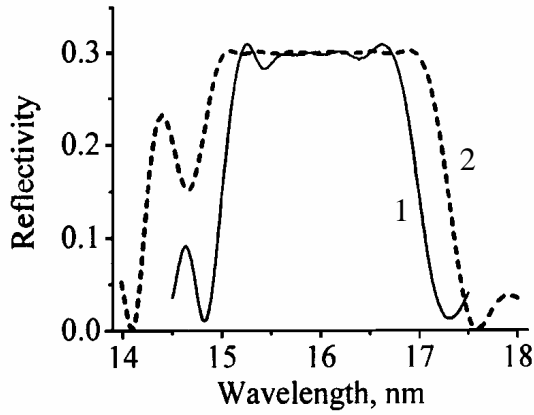


Рис. 3.16. Коэффициент отражения от Mo/Si многослойного зеркала, сконструированного для получения постоянного значения $R = 0.3$ в интервале длин волн $\lambda = 15 \div 17$ нм. Сплошная кривая 1 была получена в работе [182]. Пунктирная кривая 2 - наш расчет.

всего расположен к начальной точке (аналитическому распределению толщин слоев). Как видно из рисунка, на нашей кривой осцилляции на плато отражения отсутствуют полностью, а ширина плато точно соответствует требуемой.

3.3.4. Широкополосные зеркала для ЭУФ литографии

В этом разделе мы проанализируем предельные возможности широкополосных многослойных зеркал применительно к проблемам ЭУФ литографии, о чем говорилось выше в разделе 3.1. На рис.3.17 показан коэффициент отражения периодического Mo/Si зеркала в зависимости от угла падения излучения с длиной волны 13.5 нм. МИС оптимизирована на максимум коэффициента отражения при нормальном падении, достигающего значения около 74%. Межплоскостные шероховатости и интерслои при расчете не учитывались. Отметим, что экспериментальный коэффициент отражения, полученный на сегодняшний день, близок к предельному теоретическому значению и составляет 70.3% [207]. В то же время полуширина кривой отражения составляет около 9° , что оказывается недостаточным для ЭУФ оптики с большой числовой апертурой, когда расходимость излучения на поверхности зеркала превышает ширину Брэгговского пика.

Прежде всего рассмотрим упрощенную модель Mo/Si МИС, пренебрегая эффектами межплоскостных шероховатостей и наличием интерслоев. Верхний слой - кремний, причем предполагается, что на поверхности МИС имеется слой естественного окисла SiO_2 толщиной 2 нм. Задача состоит в том, чтобы сконструировать МИС с постоянным коэффициентом отражения R_0 на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в интервале углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$, что в два раза превышает ширину Брэгговского пика периодической МИС. Конструирование МИС основано на минимизации стандартной целевой функции

$$MF_1 = \sum_{m=1}^M \left[R_0 - R(\varphi_m, \vec{d}) \right]^2, \quad \varphi_m \in [0, 18^\circ] \quad (3.38)$$

где толщины $\vec{d} = \{d_1, \dots, d_N\}$ всех слоев Mo и Si рассматриваются как параметры оптимизации, R_0 - желаемое значение коэффициента отражения на плато, $R(\varphi)$ - рассчитанный коэффициент отражения, а M , как правило, равно числу параметров оптимизации. Исследованные МИС и их параметры показаны в табл.3.4.

Чтобы количественно охарактеризовать оптическое качество МИС, введем понятия среднего значения $\langle R \rangle$, относительной дисперсии RD и максимальной вариации ΔR коэффициента отражения на плато, т.е. в диапазоне углов скольжения $\varphi \in [0\varphi_{min}, \varphi_{max}]$:

$$\langle R \rangle = \frac{1}{\varphi_{max} - \varphi_{min}} \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} R(\varphi) d\varphi \quad (3.39)$$

$$RD = \frac{1}{\langle R \rangle} \sqrt{\frac{1}{\varphi_{max} - \varphi_{min}} \int_{\varphi_{min}}^{\varphi_{max}} [\langle R \rangle - R(\varphi)]^2 d\varphi} \quad (3.40)$$

$$\Delta R = \max R(\varphi) - \min R(\varphi), \quad \varphi \in [\varphi_{min}, \varphi_{max}] \quad (3.41)$$

где $\varphi_{min} = 0$, $\varphi_{max} = 18^\circ$, а RD и ΔR , будучи тесно связаны друг с другом, характеризуют нежелательные искажения плато отражения.

Таблица 3.4. Параметры МИС, оптимизированных на постоянный коэффициент отражения R_0 на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в интервале углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$.

МИС	Состав	Число N би-слоев	Интерслой или барьерный слой	$\langle R \rangle$ (%) при $RD = 0.6 - 0.7 \%$
1	SiO ₂ /[Si/Mo] _{N} /подл.	100	нет	61
2	SiO ₂ /[Si/MoSi ₂ /Mo/MoSi ₂] _{N} /подл.	100	MoSi ₂	54
3	SiO ₂ /[Si/MoSi ₂ /Mo/MoSi ₂] _{N} /подл.	50	MoSi ₂	52
4	SiO ₂ /[Si/Mo ₂ C/Mo/Mo ₂ C] _{N} /подл.	100	Mo ₂ C	58
5	SiO ₂ /[Si/Mo ₂ C] _{N} /подл.	100	нет	56

Рассчитанные коэффициенты отражения (рис.3.17) наглядно демонстрируют, что при достаточно малом R_0 плато коэффициента отражения идеально плоское. При увеличении R_0 плато деформируется тем сильнее, чем больше R_0 , причем среднее значение $\langle R \rangle$ становится существенно меньше, чем R_0 . Этот факт совершенно понятен и обусловлен фундаментальной причиной - поглощением ЭУФ излучения в веществе зеркала, ограничивающей максимально

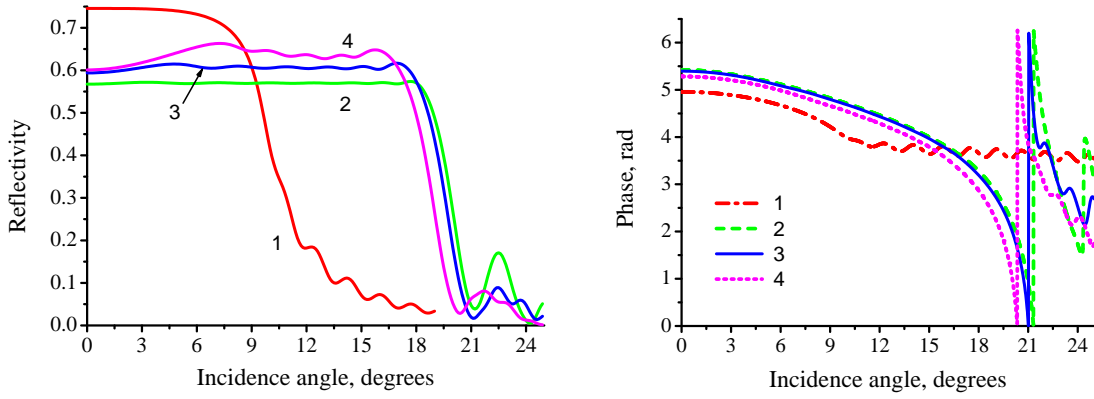


Рис. 3.17. Рассчитанные коэффициенты отражения естественно поляризованного излучения и фаза амплитудного коэффициента отражения s-поляризованного излучения ($\lambda = 13.5$ нм) от периодической (1) и градиентных (2-4) Mo/Si МИС. Зеркала 2-4 оптимизированы на получение постоянного коэффициента отражения R_0 в интервале углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$, причем $R_0 = 57\%$ (2), 61% (3) и 70% (4). Расчеты проведены для идеальных МИС, не имеющих интерслоев и межслоевых шероховатостей. Верхний слой МИС - кремний, покрытый слоем естественного окисла SiO_2 толщиной 2 нм.

возможное значение коэффициента отражения. Рассчитанная фаза амплитудного коэффициента отражения показана на рис.3.17 для тех же самых МИС. Видно, что изменение фазы, будучи гладкой и монотонной функцией угла падения, очень похоже как для периодического (1), так и для градиентных МИС (2-4).

Средний коэффициент отражения $\langle R \rangle$ в зависимости от требуемого значения R_0 на плато и относительная дисперсия RD в зависимости от среднего значения коэффициента отражения $\langle R \rangle$ показаны на рис.3.18, кривые 1. Пунктирная прямая на левом рисунке соответствует идеальному случаю $\langle R \rangle = R_0$. При достаточно малых R_0 средний коэффициент отражения близок к требуемому. При увеличении R_0 значение $\langle R \rangle$ начинает отличаться от R_0 и стремится к определенному значению, определяемому поглощением ЭУФ излучения в веществе зеркала. Относительная дисперсия быстро возрастает с увеличением R_0 , ограничивая приемлемые для практики значения коэффициента отражения на плато. Если для определенности предположить, что приемлемое для практических целей значение относительной дисперсии равно $0.6 - 0.7\%$, то значение среднего коэффициента отражения составляет около 61% . Соответствующий этому значению RD профиль коэффициента отражения показан на рис.3.19, кривая 1.

Распределение толщин слоев по глубине Mo/Si структуры, оптимизированной на постоянное значение $R_0 = 61\%$, показано на рис.3.20. Распределение имеет характерную для широкополосных ЭУФ зеркал квази-периодическую форму. Отметим, что в результате ком-

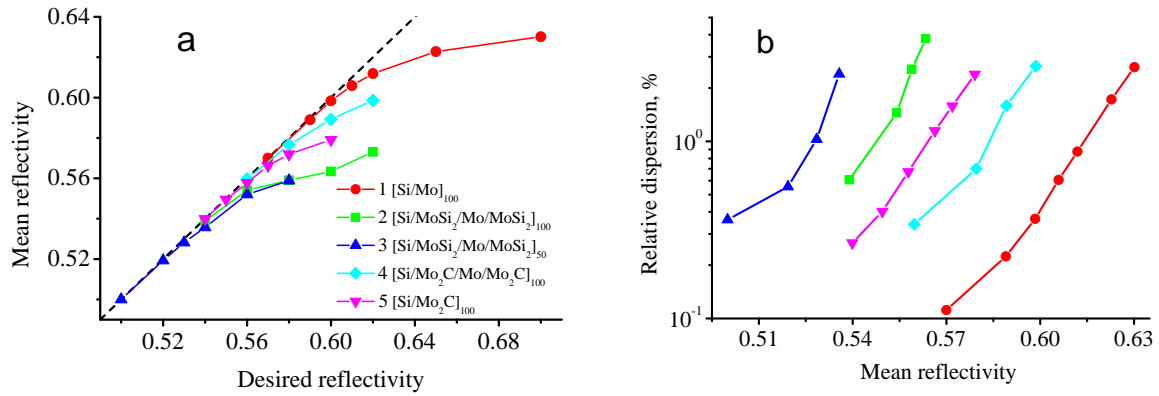


Рис. 3.18. (а) Средний на плато коэффициент отражения $\langle R \rangle$ в зависимости от его желаемого значения R_0 для нескольких широкополосных МИС. Номер кривой на рисунке соответствует номеру МИС в табл.3.4. Пунктирная прямая соответствует идеальному случаю $\langle R \rangle = R_0$. (б) Относительная дисперсия RD в зависимости от среднего значения коэффициента отражения $\langle R \rangle$ для тех же самых МИС.

пьютерной оптимизации толщина нескольких нижних слоев структуры (примыкающих к подложке) часто оказывается довольно большой (более 10 нм) по сравнению с толщиной остальных слоев.

Рассмотрим теперь более реалистичную $\text{Mo}/\text{MoSi}_2/\text{Si}/\text{MoSi}_2$ структуру, предполагая, что верхний слой структуры - кремний, и принимая во внимание наличие MoSi_2 интерслоев толщиной 1 нм, а также SiO_2 окисного слоя толщиной 2 нм (образец 2 из таблицы 3.4). Независимыми переменными функции невязки являются толщины пленок Mo и Si , в то время как толщины MoSi_2 и SiO_2 слоев фиксированы и не меняются при оптимизации структуры. Как и для идеализированной Mo/Si структуры, чем больше требуемое значение коэффициента отражения на плато R_0 , тем сильнее средний коэффициент отражения $\langle R \rangle$ отличается от R_0 и тем больше осцилляции на кривой отражения, т.е. тем больше значение RD (см. рис.3.18, кривые 2). Как видно из рисунков, интерслои приводят к существенному уменьшению среднего коэффициента отражения по сравнению с идеализированной структурой при той же самой относительной дисперсии. Например, при значении $RD \sim 0.6 - 0.7\%$ средний коэффициент отражения реалистической структуры (с интерслоями) составляет 54% вместо 61% для идеализированной структуры (без интерслоев). Профиль коэффициента отражения для $\text{Mo}/\text{MoSi}_2/\text{Si}/\text{MoSi}_2$ зеркала показан на рис.3.19, кривая 2.

Различие в значениях среднего коэффициента отражения $\langle R \rangle$ (при фиксированном $RD \sim 0.6 - 0.7\%$) составляет 7% для широкополосных $\text{Mo}/\text{MoSi}_2/\text{Si}/\text{MoSi}_2$ и Mo/Si МИС, в то время как эта разница равна 4% для периодических структур. Тем самым, влияние интерслоев

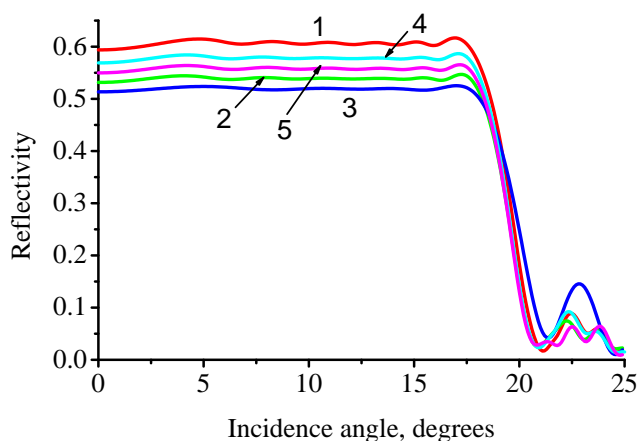


Рис. 3.19. Коэффициент отражения исследованных широкополосных МИС при практически одинаковой относительной дисперсии $RD \sim 0.6 - 0.7\%$. Номер кривой на рисунке соответствует номеру МИС в табл.3.4.

более выражено в случае широкополосных зеркал. Помимо того, что оптические константы MoSi_2 хуже, чем чистого молибдена, имеется еще одна причина, объясняющая сильное влияние интерслоев на коэффициент отражения широкополосного многослойного зеркала. Дело состоит в том, что при оптимизации идеализированной Mo/Si структуры (без интерслоев) толщина некоторых слоев молибдена оказалась меньше 2 нм (см. рис.3.20). В свою очередь поглощающий слой $\text{Mo/MoSi}_2/\text{Si/MoSi}_2$ структуры состоит, в действительности, из трех подслоев: $\text{MoSi}_2/\text{Mo/MoSi}_2$, причем толщина MoSi_2 подслоев фиксирована и равна 1 нм. Следовательно, минимально возможная толщина поглощающего материала равна 2 нм в рассматриваемом случае. Это обстоятельство ограничивает степени свободы при компьютерной оптимизации структуры и приводит, в результате, к увеличению дисперсии кривой отражения.

Сравним теперь оптические параметры $\text{Mo/MoSi}_2/\text{Si/MoSi}_2$ зеркал с разным числом пар слоев $N = 100$ и $N = 50$ (образцы 2 и 3 в таблице 3.4). Как видно из рис.3.19, кривые 2 и 3 очень близки, т.е. 50 пар слоев достаточно, чтобы получить практически тот же самый средний коэффициент отражения, что и для зеркала, состоящего из 100 пар слоев. Иными словами, нижние 50 “периодов” дают лишь очень малый вклад в отражение ЭУФ волны. В то же время этот малый вклад может быть важным. Действительно, сравнение кривых 2 и 3 на рис.3.18 показывает, что при фиксированной относительной дисперсии среднее отражение от зеркала со 100 парами слоев примерно на 2% больше, чем от зеркала с $N = 50$. Тем самым нижние 50 пар слоев, хотя и не дают сколько-нибудь заметного вклада в средний коэффициент отражения, приводят к существенному сглаживанию плато на кривой отражения.

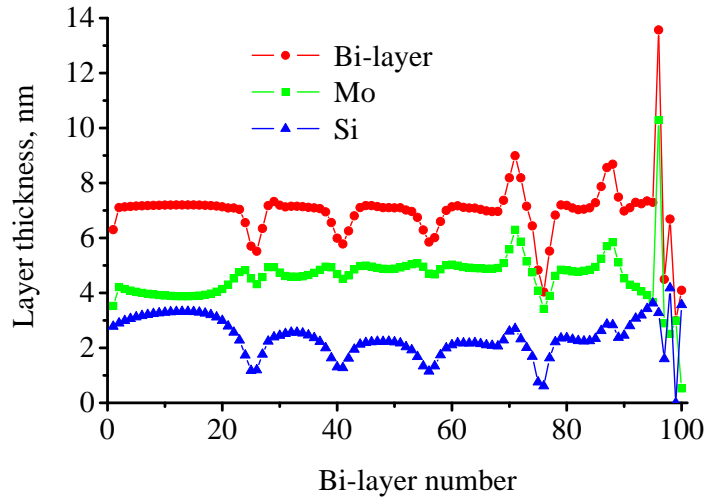


Рис. 3.20. Распределение толщины слоев по глубине Mo/Si МИС (структура 1 в табл.3.4), оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения $R_0 = 61\%$ на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в интервале углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$. Номер би-слоя отсчитывается от вершины МИС.

В реальной жизни интерслои, образующиеся естественным образом при изготовлении МИС из-за имплантации и диффузии атомов, не могут быть полностью контролируемы. Их внутренняя структура, т.е. изменение плотности и химического состава по глубине, известна недостаточно хорошо, что может помешать практическому изготовлению МИС с желаемыми оптическими характеристиками. Один из возможных путей для преодоления этой неопределенности, является создание МИС с введенными и хорошо контролируемыми барьерными слоями между соседними материалами. В частности, для этой цели можно использовать пленки Mo_2C . Коэффициент отражения в ЭУФ диапазоне и тепловая стойкость периодических $\text{Mo}/\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}/\text{Mo}_2\text{C}$ МИС были исследованы экспериментально в [208]. Ниже, чтобы упростить анализ, мы будем считать толщину Mo_2C диффузионных барьеров фиксированной и равной 1 нм. Такая толщина вполне достаточна, чтобы предотвратить проникновение атомов Si в молибденовые пленки с последующим образованием MoSi_2 интерслоев [208].

Эта МИС имеет наибольший коэффициент отражения (при той же самой RD) среди всех рассмотренных реалистических зеркал с окисленным слоем кремния на вершине (см. рис.3.18). Профиль коэффициента отражения $\text{Mo}/\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}/\text{Mo}_2\text{C}$ зеркала показан на рис.3.19, кривая 4. Коэффициент отражения может быть несколько увеличен (при той же самой RD), если уменьшить толщину барьерного слоя, которая, однако, не может быть слишком малой из-за технологических проблем напыления ультратонких слоев и возможной диффузии атомов кремния в слой молибдена через очень тонкие пленки Mo_2C .

Поскольку проведенный выше анализ показал весьма сильное влияние интерслоев на

предельные оптические характеристики градиентных многослойных зеркал, то представляется интересным рассмотреть зеркала, которые состоят из пар материалов, образующих стабильные границы раздела между соседними слоями. Примером может служить $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ МИС (образец 5 в таблице 3.4), предложенную для использования в ЭУФ литографии и экспериментально исследованную в [208]. Как видно из таблицы 3.4 и рис.3.18, коэффициент отражения $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ структуры примерно на 4% больше, чем для реалистичного Mo/Si зеркала при той же самой относительной дисперсии RD .

3.3.5. Влияние технологических факторов на оптические свойства широкополосных многослойных зеркал

До сих пор мы не накладывали никаких ограничений на допустимую толщину отдельных слоев МИС. В то же время зачастую оказывается, что толщина слоев тяжелого вещества оказывается чрезвычайно малой (0.5 нм и менее), что может оказаться неприемлемым с технологической точки зрения. Пример показан на рис.3.21, где представлено распределение толщины слоев по глубине (закрашенные символы) для $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ МИС (образец 5 из табл.3.4).

Ограничим теперь минимально возможную толщину слоев значением d_{min} и сконструируем $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ МИС, которая, как и образец 5, должна обеспечить постоянный коэффициент отражения $R_0 = 56\%$ на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в интервале углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$. Как отмечалось выше, любые дополнительные ограничения на толщину слоев приводит к ограничению степеней свободы при минимизации функции невязки и появлению искажений на плато коэффициента отражения. На рис.3.22 показана зависимость относительной дисперсии на плато от d_{min} (кривая 1). Для рассматриваемой структуры RD практически постоянна вплоть до значения $d_{min} = 2$ нм, но затем драматически возрастает. Пример найденного распределения толщины слоев по глубине в предположении $d_{min} = 1.5$ нм представлен незакрашенными символами на рис.3.21. Хотя найденное решение значительно отличается от предыдущего, обе конструкции МИС обеспечивают практически идентичные плато отражения, неразличимые глазом на рис.3.19, кривая 5. Тем самым, ограничения на минимальную толщину слоев не является критичным для МИС, используемых в ЭУФ диапазоне, поскольку для современных технологий изготовления рентгеновских МИС толщина пленки в 1.5 - 2 нм вполне обычна.

Ситуация осложняется для МИС, работающих в ЖР диапазоне и имеющих, в среднем, существенно меньшие толщины слоев по сравнению с ЭУФ зеркалами. Пример представлен

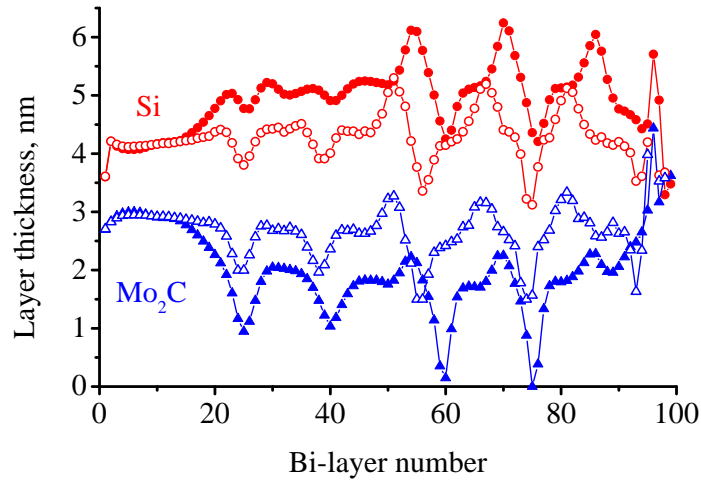


Рис. 3.21. Распределение толщины слоев по глубине $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ МИС (структура 5 в табл.3.4), оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения $R_0 = 56\%$ на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в интервале углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$ (закрашенные символы) и для схожей структуры с ограничением на минимальную толщину слоев $d_{min} = 1.5$ нм (незакрашенные символы). Номер би-слоя отсчитывается от вершины МИС. Обе МИС приводят к неразличимым глазом профилям коэффициента отражения на плато.

кривой 2 на рис.3.22, которая показывает относительную дисперсию коэффициента отражения для Os/C МИС, оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения $R_0 = 19\%$ в интервале энергий квантов $E \in [15, 25]$ кэВ при угле скольжения 10 мрад. Толщина би-слоя для этой структуры изменяется по глубине от примерно 4.5 нм до 2 нм, как показано на рис.3.8, кривая 1, в то время как для рассмотренной выше $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ МИС период осциллирует около значения 7 нм. В результате резкое возрастание относительной дисперсии коэффициента отражения начинается при $d_{min} = 0.85$ нм, что, впрочем, еще приемлемо для современных технологий.

Еще одним фактором, влияющим на оптические параметры короткопериодных МИС, являются неточности в оптических константах (плотностях) материалов, используемых при оптимизации структуры. Пример дан на рис.3.23, где кривая 1 показывает коэффициент отражения от Ni/C МИС, сконструированной для получения постоянного коэффициента отражения в интервале энергий квантов $E \in [15, 25]$ кэВ при угле скольжения 10 мрад в предположении, что плотности материалов соответствуют табличным. Предположим, что при изготовлении МИС плотности материалов оказались отличными от табличных и составляют 0.9 от их значений. Тогда в эксперименте мы получим вместо кривой 1 или кривую 2, если плотность углеродных пленок отличается от табличной, или кривую 3 при мень-

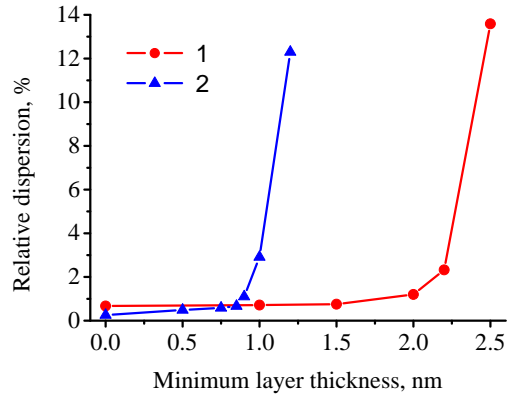


Рис. 3.22. Относительная дисперсия на плато отражения в зависимости от минимально допустимой толщины слоев. Расчеты проведены для двух МИС: (1) $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ МИС (структура 5 в табл.3.4), оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения $R_0 = 56\%$ на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в интервале углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$; (2) Os/C МИС, оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения $R_0 = 19\%$ ($N = 40$) в интервале энергий квантов $E \in [15, 25]$ кэВ при угле скольжения 10 мрад.

шей плотности пленок Ni. В обоих случаях на плато отражения появляются осцилляции, амплитуда которых намного больше в случае неправильно выбранного значения плотности тяжелого материала. Тем самым, для получения желаемого профиля коэффициента отражения плотности материалов, составляющих МИС, должны быть известны с точностью не худшей нескольких процентов.

До сих пор оптимизация МИС проводилась без учета шероховатостей границ раздела, чье влияние на коэффициент отражения может быть очень значительным особенно в случае короткопериодных структур. Этот эффект иллюстрируется на рис.3.24. Кривая 1 на этом рисунке показывает коэффициент отражения от Ni/C МИС, сконструированной в пренебрежении эффектами шероховатостей для получения постоянного коэффициента отражения в интервале энергий квантов $E \in [15, 25]$ кэВ при угле скольжения 10 мрад. Тогда в двух простейших предельных случаях полностью некоррелированных короткопериодных шероховатостей или полностью коррелированных длиннопериодных шероховатостей, распределенных по нормальному закону со среднеквадратичной высотой $\sigma = 0.3$ нм, мы будем наблюдать в эксперименте коэффициенты отражения, показанные пунктирными кривыми 2 или 3, соответственно. Как и ожидалось, влияние шероховатостей увеличивается с уменьшением длины волны излучения, приводя к сильной деформации профиля кривой отражения. В то же время эффект шероховатостей может быть учтен при конструировании МИС, если статистические параметры шероховатостей, включая коэффициент корреляции шеро-

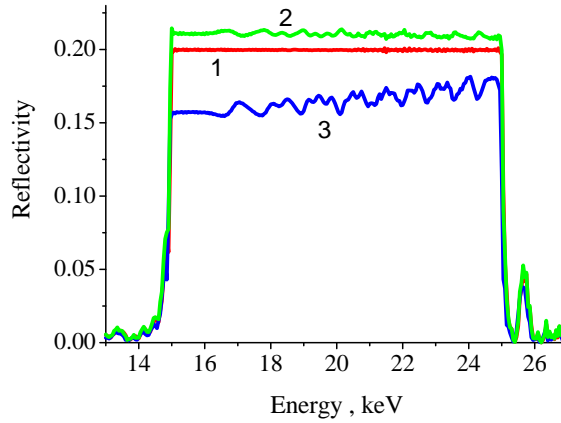


Рис. 3.23. Коэффициент отражения от Ni/C МИС, оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения в интервале энергий квантов $E \in [15, 25]$ кэВ при угле скольжения 10 мрад в предположении, что плотности материалов соответствуют табличным (кривая 1). Кривые 2 и 3 показывают коэффициент отражения от МИС с тем же самым распределением толщины слоев, но в предположении, что плотность углеродных (кривая 2), или никелевых (кривая 3) пленок составляет 0.9 от табличных значений.

хovatостей разных границ раздела, известны. В рассматриваемых простейших предельных случаях необходимо заменить коэффициент отражения от МИС R_0 на $R_0 \exp[(4\pi\sigma \sin \theta/\lambda)^2]$ для полностью коррелированных шероховатостей или модуляцию структуры B_1 в (3.24) на $B_1 \exp[-2(\pi\sigma \sin \theta\lambda)^2]$ [209] в случае некоррелированных шероховатостей. Результаты оптимизации показаны сплошными кривыми 2 и 3 на рис.3.24, который наглядно демонстрирует, что эффекты шероховатостей могут быть учтены при конструировании широкополосных МИС, если статистические свойства шероховатостей известны. Ясно, что шероховатости приводят к уменьшению достижимого коэффициента отражения, как и в случае периодических МИС.

По-видимому, единственным фактором, который не может быть учтен при конструировании МИС, является случайный разброс толщин слоев, неизбежно возникающий в процессе изготовления многослойной структуры. Кривая 1 на рис.3.25 показывает коэффициент отражения от идеальной Ni/C МИС, оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения $R_0 = 20\%$ в интервале энергий квантов $E \in [15, 25]$ кэВ при угле скольжения 10 мрад. Плато отражения идеально ровное, а максимальная вариация коэффициента отражения на плато ΔR не превышает 0.1%. Предположим, что во время изготовления МИС возникли случайные отклонения толщины слоев, равномерно распределенные в интервале ± 0.025 нм. Тогда вместо кривой 1 мы будем наблюдать сильно осциллирующий коэффициент от-

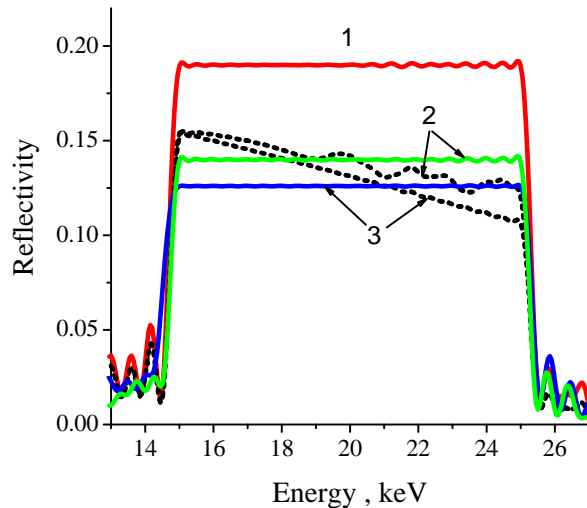


Рис. 3.24. Коэффициент отражения от Os/C МИС, оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения в интервале энергий квантов $E \in [15, 25]$ кэВ при угле скольжения 10 мрад в предположении отсутствия шероховатостей границ раздела (1). Пунктирные кривые 2 и 3 показывают коэффициент отражения от той же самой МИС в случае полностью некоррелированных короткопериодных шероховатостей (2) или полностью коррелированных длиннопериодных шероховатостей (3) среднеквадратичной высоты $\sigma = 0.3$ нм в обоих случаях. Сплошные кривые 2 и 3 получены в результате конструирования МИС, когда эффекты шероховатостей принимались во внимание.

ражения, показанный кривой 2, а его максимальная вариация увеличивается до 6%. Этот пример наглядно демонстрирует нестабильность решения обратной задачи синтеза МИС по отношению к случайным флуктуациям толщины слоев. Тем не менее, имеется возможность уменьшения этого эффекта. Дело заключается в том, что до сих пор мы рассматривали плоские многослойные зеркала. В подавляющем же большинстве применений (рентгеновская астрономия, зеркала для каналов СИ, зеркала Гёбеля для точечных рентгеновских источников) МИС наносятся на изогнутые подложки для фокусировки или коллимации падающего излучения. В этом случае положения максимумов и минимумов на кривой отражения 2 будут смещаться в соответствии с условием Брэгга, что приведет к сглаживанию суммарной кривой отражения от всего зеркала. Действительно, кривая 3 на рис.3.25 показывает коэффициент отражения от параболического зеркала, на поверхность которой нанесена МИС со случайными флуктуациями толщин слоев (теми же, что и для кривой 2). Угол скольжения падающего излучения изменяется от 9.5 мрад до 10.5 мрад, что, как видно из рисунка, приводит к почти полному исчезновению осцилляций, хотя плато отражения несколько сузилось. Максимальная вариация коэффициента отражения уменьшилась до 0.7%, что, по-видимому,

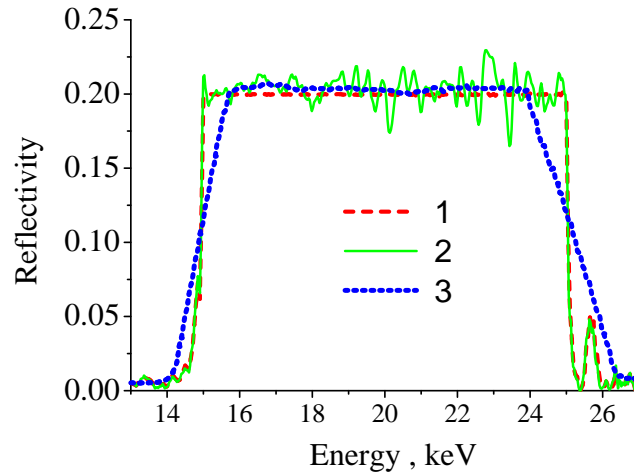


Рис. 3.25. Коэффициент отражения от Ni/C МИС, оптимизированной на получение постоянного коэффициента отражения в интервале энергий квантов $E \in [15, 25]$ кэВ при угле скольжения 10 мрад (1). Кривая 2 показывает типичный коэффициент отражения от той же самой МИС в предположении случайных флуктуаций толщины слоев, равномерно распределенных в интервале ± 0.025 нм. Кривая 3 - коэффициент отражения от той же МИС, что и для кривой 2, но нанесенной на параболическую подложку, так что угол скольжения меняется вдоль поверхности зеркала от 9.5 мрад до 10.5 мрад.

вполне приемлемо для большинства применений МИС. Схожий эффект наблюдается и для плоского зеркала, если ввести градиент толщины всех слоев МИС вдоль подложки, а также в случае достаточно большой расходимости падающего излучения.

Схожее поведение коэффициента отражения наблюдается и для ЭУФ зеркал, хотя эффект случайных флуктуаций слоев может быть менее выраженным из-за большей их толщины. Рассмотрим две структуры: $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ без интерслоев на границах раздела и $\text{Mo}/\text{MoSi}_2/\text{Si}/\text{MoSi}_2$, где MoSi_2 - естественно образующийся интерслой (структуры 2 и 5 в таблице 3.4). Кривые отражения от идеальных структур показаны на рис.3.26, толстые сплошные кривые. Введем теперь случайные флуктуации всех слоев (включая и интерслои MoSi_2), равномерно распределенные в интервале ± 0.05 нм. Коэффициенты отражения, рассчитанные для пяти реализаций случайных флуктуаций, показаны на рисунке тонкими кривыми. Так же как и для широкополосных МИС, работающих в ЖР диапазоне, флуктуации толщин приводят к сильной деформации плато отражения, причем их влияние более выражено для $\text{Mo}/\text{MoSi}_2/\text{Si}/\text{MoSi}_2$ МИС. Этот факт объясняется кумулятивным влиянием случайных флуктуаций [210, 211]. Действительно, флуктуации толщин приводят к случайному сдвигу $(j + 1)$ -й границы раздела на величину $\Delta z_j = \sum_{i=1}^j \delta z_i$, где δz_i - где случайная флуктуация

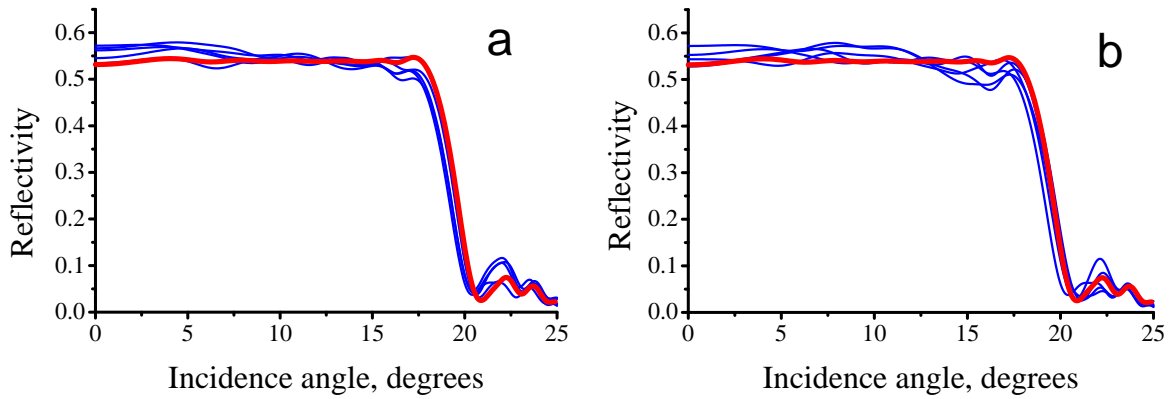


Рис. 3.26. Коэффициент отражения от Mo/MoSi₂/Si/MoSi₂ (a) и Mo₂C/Si (b) МИС ($\lambda = 13.5$ нм), оптимизированных на получение постоянного коэффициента отражения $R_0 = 54\%$ в угловом интервале от 0 до 18°. Расчеты проведены для идеальных МИС (толстые кривые) и для пяти реализаций случайных флуктуаций толщин, равномерно распределенных в интервале углов падения от 0 до 18°.

i -того слоя, а суммирование проводится по всем предыдущим слоям. Следовательно, дисперсия фазы волны, отраженной от $j + 1$ -й границы раздела, пропорциональна дисперсии одиночного слоя, умноженной на число всех предыдущих слоев $DP_j \sim j\langle\delta z\rangle^2$. Тем самым, влияние разброса толщин на коэффициент отражения сильнее для Mo/MoSi₂/Si/MoSi₂ МИС, поскольку число слоев в ней удвоено по сравнению с Mo₂C/Si. Если зафиксировать толщину всех интерслоев, то влияние случайного разброса будет практически одинаково для обеих зеркал.

3.3.6. Анализ экспериментальных результатов

Разработанный подход был использован при изготовлении широкополосных многослойных зеркал, предназначенных для практических применений в ЖР и ЭУФ диапазонах. Зеркала были изготовлены на синхротроне ESRF (Гренобль, Франция), в Университете Тонгжи (Шанхай, Китай) и Институте физики плазмы (Ньювихайн, Голландия).

Рассмотрим подробнее результаты исследований W/Si и W/B₄C многослойных градиентных зеркал, которые должны обеспечить постоянный коэффициент отражения ($R_0 = 25\% - 35\%$ для разных зеркал) на длине волны $\lambda = 0.154$ нм в широком интервале угла скольжения (ширина плато $\Delta\theta$ на кривой отражения составляет от 0.25° до 0.4°). Во всех зеркалах в качестве тяжелого материала использовался вольфрам, а в качестве легкого - кремний или карбид бора. Верхним слоем в каждой структуре являлась пленка легкого материала. Описание изготовленных и исследованных зеркал дано в табл.3.5.

Таблица 3.5. Параметры исследованных широкополосных МИС для ЖР диапазона

Зеркало	Состав	N	$R_{calc}, \%$	$R_{exp}, \%$	$\Delta\theta, ^\circ$	$\rho_s, \text{г/см}^3$	$\rho_w, \text{г/см}^3$	$\sigma_{eff}, \text{нм}$
A	W/B ₄ C	20	25.2 ± 0.8	19.6 ± 2.6	0.9 – 1.2	2.39	19.3	0.46
B	W/Si	20	35.3 ± 1.1	25.6 ± 3.2	0.85 – 1.1	2.32	19.1	0.52
C	W/Si	20	24.1 ± 2.2	24.7 ± 4.5		2.31	19.3	0.47
D	W/Si	14	38.2 ± 3.0	35.1 ± 4.2	0.5 – 0.9	2.31	19.2	0.45
E	W/Si	12	31.7 ± 1.1	30.1 ± 2.1		2.20	19.3	0.48

Конструирование зеркал основывалось на описанном выше подходе с использованием простейшей модели многослойной структуры. Во-первых, мы пренебрегали окисным слоем на поверхности W/Si зеркал, поскольку оптические константы Si и SiO₂ очень близки на рабочей длине волны. Во-вторых, при конструировании зеркал интерслои, образуемые между соседними материалами, не учитывались в явном виде, а их влияние на коэффициент отражения описывалось таким же образом, что и влияние межслоевых шероховатостей, а именно, введением эффективной толщины интерфейса (раздела соседних слоев) σ_{eff} в выражение для фактора Неве-Кроса, описывающего изменение амплитудного коэффициента отражения от каждой границы раздела. В первом приближении толщина интерфейса равна $\sigma_{eff} = (\sigma^2 + L^2)^{1/2}$, где σ - среднеквадратичная шероховатость границы раздела, а L - толщина интерслоя. Наконец, предполагалось, что толщина интерфейса одна и та же для разных границ раздела W-Si (B₄C) и Si (B₄C)-W и не меняется по глубине структуры.

Образцы А, В, и D были сконструированы в предположении $\sigma_{eff} = 0$, т.е. в пренебрежении эффектами интерслоев и межслоевых шероховатостей, в то время как при конструировании образцов С и Е эти эффекты учитывались за счет выбора $\sigma_{eff} = 0.5$ нм. Плотности всех пленок предполагались такими же, как и плотности массивных материалов. Рассчитанные кривые отражения от сконструированных зеркал показаны пунктиром на рис.3.27. Найденные распределения толщины слоев представлены закрашенными символами на рис.3.28. Плато на кривых отражения сконструированных зеркал не абсолютно плоское, но изменяется в определенных пределах относительно среднего значения. В соответствии с полученными выше результатами амплитуда этих осцилляций может быть уменьшена до сколь угодно малого значения, но за счет увеличения числа слоев и усложнения распределения их толщины по глубине, что нежелательно с технологической точки зрения.

Многослойные структуры были изготовлены в университете Тонгжи (Шанхай, КНР)

методом прямого магнетронного распыления на идентичные полированные кремниевые подложки. Среднеквадратичная шероховатость подложек, равная 0.27 нм в диапазоне пространственных частот от 0.03 мкм^{-1} до 3 мкм^{-1} , была измерена в ИК РАН по рассеянию рентгеновского излучения. Экспериментальные зависимости коэффициента отражения от угла скольжения, измеренные в ИК РАН, показаны кружками на рис.3.27. Приведенные на этом рисунке и в таблице 3.5 данные демонстрируют различие между рассчитанными и измеренными коэффициентами отражения. В частности, на экспериментальных кривых наблюдаются искажения в области плато отражения.

Чтобы количественно описать экспериментальные данные и понять причины, вызвавшие деформации плато на кривой отражения, уточненная синтезированная структура находилась путем решения обратной задачи, где в качестве целевой функции служила измеренная угловая зависимость коэффициента отражения на длине волны $\lambda = 0.154 \text{ нм}$. Подгонка к измеренным кривым проводилась с использованием стандартной функции невязки

$$MF_2 = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\frac{R_{calc}(\theta_j; \rho_W, \rho_S, \sigma_{eff}, \vec{d}) - R_{exp}(\theta_j)}{R_{exp}(\theta_j)} \right]^2 \quad (3.42)$$

где в качестве подгоночных параметров выступают плотности вольфрама и легкого материала (ρ_W и ρ_S), ширина интерфейса (σ_{eff}), а также толщины всех слоев $\vec{d} \equiv (d_1, d_2, \dots, d_{2N})$, которые могут отличаться от желаемых значений, в частности, из-за образования интерслоев и случайных флуктуаций во время напыления.

Процедура подгонки состояла из двух этапов. На первом этапе мы пренебрегали случайными флуктуациями толщины слоев, но учитывали систематические (детерминистские) их изменения. Для этого толщина каждого слоя представлялась в следующем виде $d_j = \alpha d_j^{id} + \Delta d$, где d_j^{id} - это идеальная (рассчитанная при конструировании) толщина слоя j , а параметры α и Δd не зависят от номера слоя. Эти параметры (вообще говоря, разные для слоев тяжелого и легкого материалов) описывают изменение толщины слоев, например, из-за ошибок в определении потока падающих частиц и некорректном учете интерслоев при конструировании зеркал. Таким образом, на первом этапе функция невязки минимизировалась по отношению к плотностям тяжелого и легкого материала (ρ_W и ρ_S), ширине интерфейса (σ_{eff}) и систематическим изменениям толщины слоев (параметры $\alpha_W, \alpha_S, \Delta d_W, \Delta d_S$).

Пример, демонстрирующий точность подгонки на первом этапе, дан сплошной линией на рис.3.27 для образца А. Как можно видеть, согласие между сплошной линией и данными эксперимента довольно хорошее, хотя некоторое различие между ними все еще имеется.

На втором этапе подгонки найденные значения $\rho_W, \rho_S, \sigma_{eff}$ были фиксированы, а минимизация функции невязки проводилась по отношению к случайным изменениям толщины

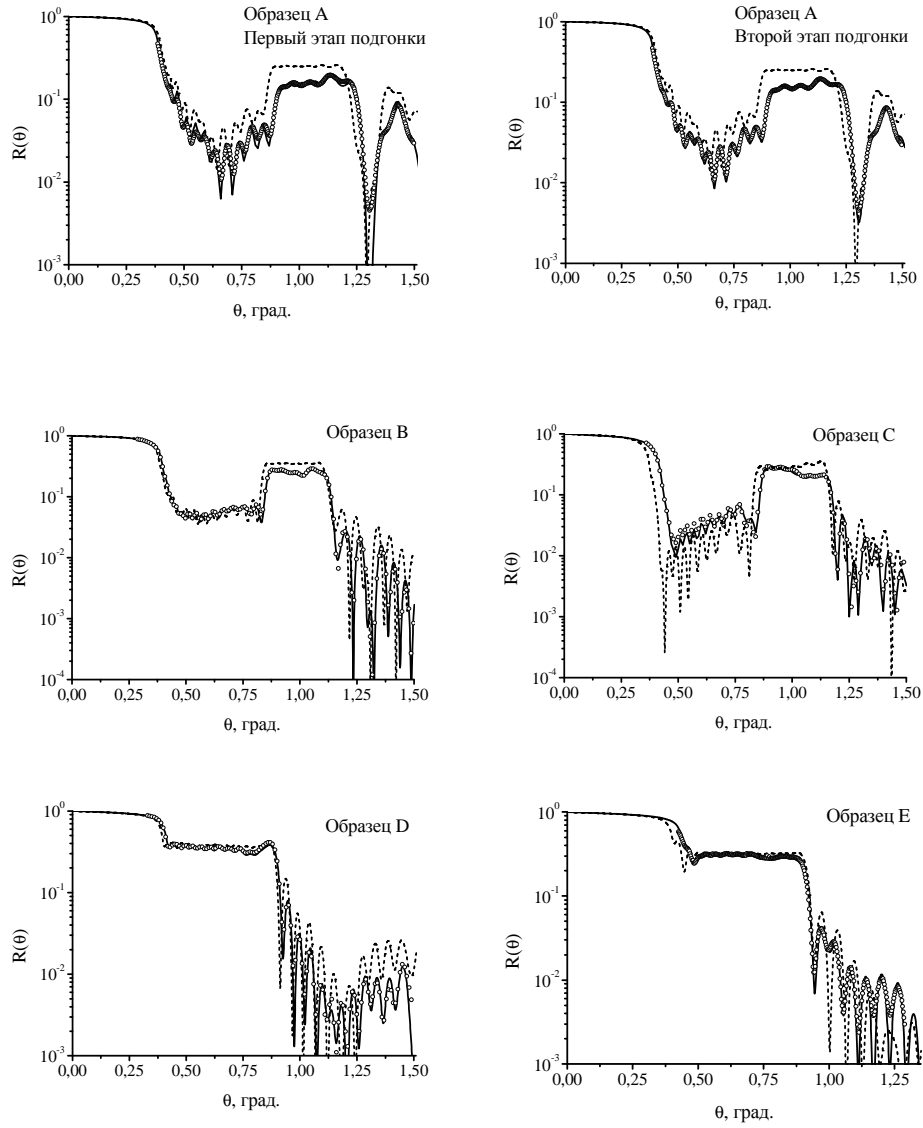


Рис. 3.27. Измеренный коэффициент отражения R градиентных зеркал на длине волны $\lambda = 0.154$ нм (кружки) в зависимости от угла скольжения. Представлены рассчитанные кривые отражения от идеальных структур (пунктир) и результат подгонки экспериментальных данных (сплошная линия). Для образца А приведены результаты обоих этапов подгонки, а для других образцов - только окончательный результат. (Из [А38]).

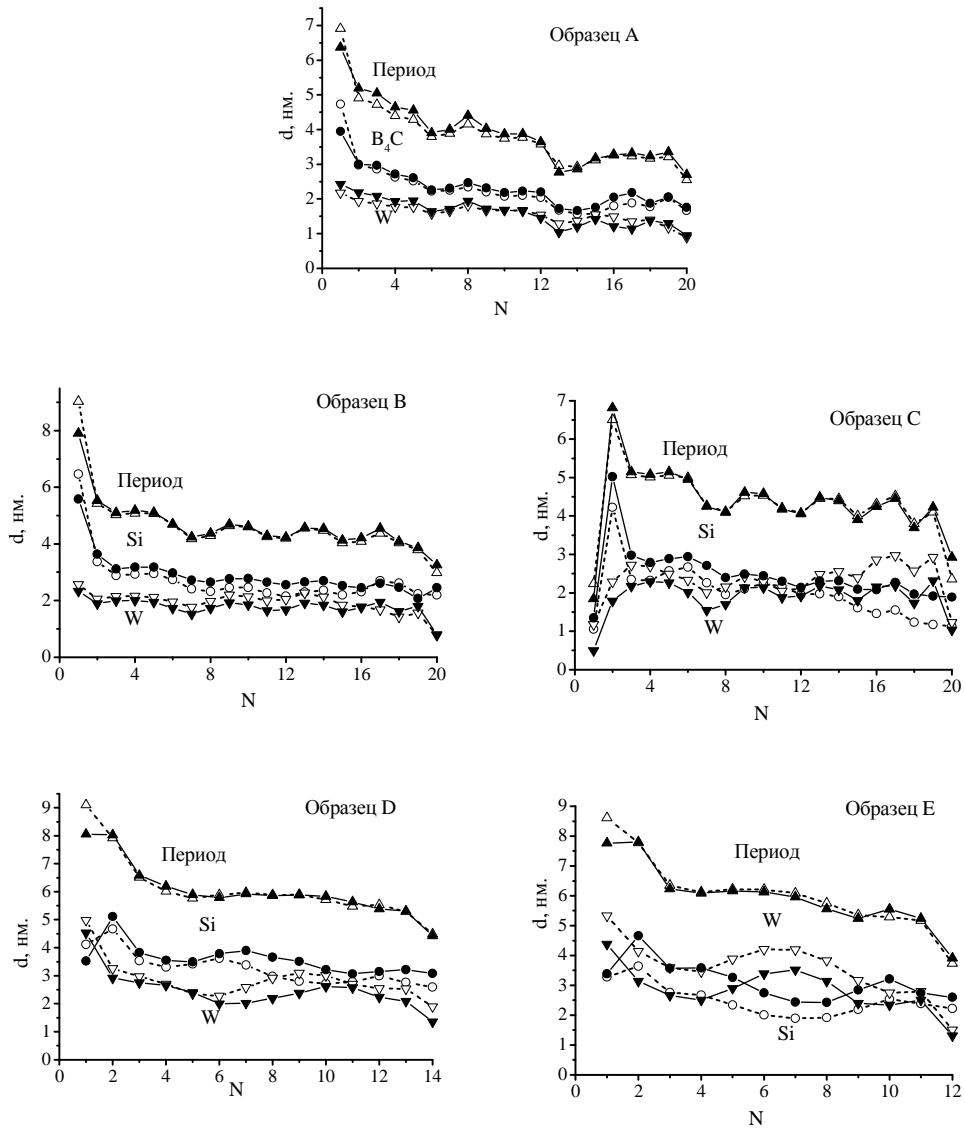


Рис. 3.28. Распределения толщины слоев по глубине зеркал, сконструированных для получения постоянного коэффициента отражения на длине волны $\lambda = 0.154$ нм в широком интервале углов скольжения (закрашенные символы). Периоды отсчитываются от вершины структуры. Уточненные распределения толщины слоев, найденные из измеренных кривых отражения (не закрашенные символы). (Из [A26]).

всех слоев $\delta d_1, \dots, \delta d_{2N}$, которые обычно не превышают нескольких процентов от значений толщины, найденных на первом этапе. Тем не менее, введение малых случайных флуктуаций толщины в процедуру подгонки приводит к практически полному согласию между рассчитанными и экспериментальными кривыми отражения во всем измеренном угловом диапазоне. Результаты подгонки, представленные в табл. 3.5 и рис. 3.27- 3.28, позволяют сделать ряд заключений.

1. Найденные плотности пленок W, W_4C и Si близки к плотности массивных материалов, а ширина интерфейса составляет около 0.5 нм, как это и предполагалось при конструировании многослойных структур.
2. Толщины би-слоев зеркала W/ W_4C (образец А) несколько меньше желаемых значений, что определяет сдвиг кривой отражения в область больших углов скольжения.
3. Толщины би-слоев всех зеркал W/Si (образцы В-Е) соответствуют ожидаемым значениям, хотя толщина самого верхнего би-слоя обычно несколько больше. Вероятно, этот факт объясняется окислением верхнего слоя кремния, что приводит к утолщению пленки, а также, возможно, наличием адгезионного слоя, образующегося на любой поверхности и состоящего, главным образом, из молекул воды и углеводов. В качестве иллюстрации отметим, что окисление слоя кремния толщиной 1 нм приводит к образованию слоя SiO_2 толщиной около 2 нм, т.е. к увеличению общей толщины верхнего слоя примерно на 1 нм. Такое же увеличение толщины может быть объяснено и прилипанием четырех монослоев молекул воды к поверхности зеркала.
4. В отличие от би-слоев, толщины индивидуальных слоев вольфрама и кремния значительно отличаются от ожидаемых значений. По нашему мнению дело в том, что использованная модель многослойной структуры слишком упрощенная и не учитывает интерслои в явном виде. В действительности, каждый би-слой зеркала W/Si состоит из четырех слоев: вольфрама, кремния и двух интерслоев WSi_x , причем химический состав интерслоев точно не известен и, более того, меняется с глубиной от чистого вольфрама до чистого кремния. Тем самым, толщины слоев W и Si, найденные как результат подгонки, представляют собой некоторые эффективные, а не реальные значения и, конечно, могут существенно отличаться от ожидаемых значений, рассчитанных в рамках упрощенной модели.
5. Экспериментальные значения отражения на плато для образцов А и В в 1.4-1.5 раза меньше рассчитанных. Такое различие понятно, поскольку при конструировании этих

зеркал мы пренебрегли эффектами, обусловленными наличием интерслоев и межслоевых шероховатостей. Наоборот, измеренный коэффициент отражения от зеркала С в среднем соответствует предсказанному значению, поскольку при конструировании этого зеркала было учтено наличие интерфейса толщиной 0.5 нм. Тем не менее, все еще наблюдается существенное искажение кривой отражения на плато. Эти искажения вызваны отличием толщины слоев W и Si от рассчитанных значений, что, в свою очередь, связано с упрощенной моделью многослойной структуры.

6. Те же самые выводы можно сделать и для образцов D и E, хотя влияние интерслоев и межслоевых шероховатостей менее заметно, поскольку эти зеркала работают при меньших скользящих углах.

Рассмотрим теперь результаты исследования многослойного Mo/Si зеркала с широкой угловой полосой отражения, работающее в ЭУФ диапазоне на длине волны $\lambda = 13.5$ нм. Зеркало должно обеспечить постоянный коэффициент отражения $R_0 = 60\%$ в диапазоне угла падения $[0, 16^\circ]$. Структура состоит из 49.5 пар слоев, причем верхним и нижним слоем являются пленки Si. При конструировании в явном виде учитывались интерслои толщиной 0.8 нм, состоящие из смеси силицидов Mo_5Si_3 и $MoSi_2$, как это было показано в [212, 213]. Окисный слой толщиной 2 нм тоже был принят во внимание при конструировании. Предполагалось, что плотности всех слоев соответствуют плотности массивных материалов и, наконец, были учтены дельта-коррелированные межслоевые шероховатости высотой 0.2 нм, которые приводят к некоторому увеличению “эффективной” толщины интерслоев. Рассчитанное распределение толщин слоев показано на рис.3.29 (закрашенные символы). Желаемый профиль кривой отражения показан на рис.3.30.

Зеркало было изготовлено в Институте физики плазмы (Ньювихайн, Голландия) методом электронно-лучевого распыления с ионной полировкой каждого слоя Si. Измерения кривой отражения проведены на синхротроне BESSY II (Берлин, Германия). Экспериментальная кривая отражения показана на рис.3.30, кружки. Угловая ширина плато на кривой отражения близка к желаемому значению 16° , демонстрируя хорошее согласие между рассчитанными и реальными толщинами слоев структуры. В то же время плато на экспериментальной кривой отражения несколько деформировано: измеренный коэффициент отражения меняется на плато от 50% до 60%. Этот факт, равно как и различие между кривыми 1 и 2 в области больших углов падения, показывает, что внутренняя структура изготовленного зеркала все же несколько отличается от расчетной.

Прежде всего отметим, что правая часть экспериментального плато (при $\varphi \sim 16^\circ$) сдви-

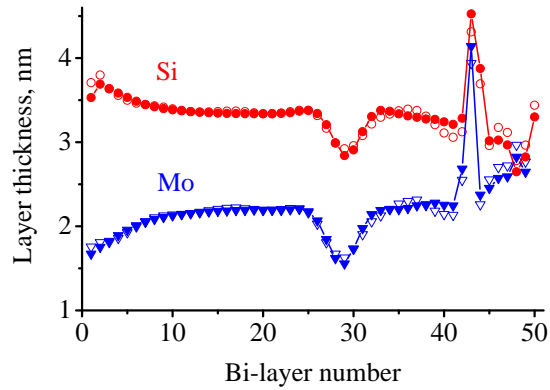


Рис. 3.29. Рассчитанное распределение толщин слоев Mo и Si многослойного Mo/Si зеркала ($N = 49.5$), обеспечивающего постоянный коэффициент отражения $R_0 = 60\%$ в интервале углов падения от 0 до 16° на длине волны $\lambda = 13.5$ нм (закрашенные символы). Интерслои толщиной 0.8 нм и окисный слой (2 нм) на рисунке не показаны. Незакрашенные символы показывают результат подгонки к измеренной кривой отражения. Номер би-слоя отсчитывается от вершины МИС.

нута в сторону больших углов падения примерно на 0.6° по сравнению с расчетом. В соответствии с условием Брэгга этот сдвиг может быть вызван постоянной систематической ошибкой в толщине всех би-слоев на $\Delta d = d\Delta\varphi \tan\varphi \simeq 0.021$ нм. Эта ошибка, в свою очередь, может быть связана с неточностью толщины интерслоев, использованной при расчетах, а также с недостаточным знанием тонкой структуры интерслоев, т.е. изменения плотности и химического состава по толщине интерслоя. Отметим, что такая ошибка в толщине интерслоев приведет к сдвигу точки $\varphi = 0$ на рассчитанной кривой отражения на существенную величину $\Delta\varphi \sim 3.1^\circ$ и к уменьшению коэффициента отражения до 50% при $\varphi = 0$, что и наблюдается в эксперименте (см. рис.3.30).

Наконец, все особенности экспериментальной кривой отражения могут быть объяснены и в предположении случайного разброса толщин слоев. Результат подгонки с использованием (3.42) показан кривой 3 на рис.3.30. Полученное распределение толщин слоев показано на рис.3.29, незакрашенные символы. Хотя обратная задача имеет, как правило, не одно решение, полученный результат свидетельствует, что введение малых случайных флуктуаций в толщине слоев позволяет количественно описать экспериментальные данные.

3.3.7. Широкополосные МИС с минимально возможным изменением толщины слоев

Проведенный выше анализ экспериментальных данных по отражению ЖР и МР излучения от широкополосных многослойных зеркал, позволяет заключить, что одним из воз-

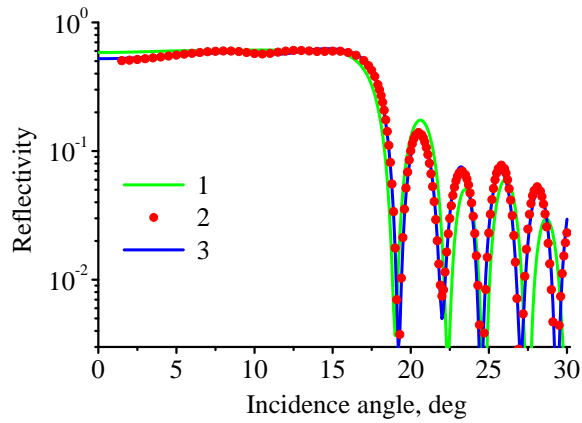


Рис. 3.30. Желаемая (1) и измеренная (2) кривые отражения на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в зависимости от угла падения излучения. Кривая 3 - результат подгонки, учитывающей случайный разброс толщины слоев. (Из [A53]).

можных факторов, приводящих к наблюдаемой деформации кривых отражения, являются малые отклонения толщин слоев от идеальных значений. Обсудим более подробно, с чем это может быть связано.

В настоящее время наиболее широко распространенным методом изготовления МИС является магнетронное распыление материалов, хотя электронно-лучевое испарение тоже используется на практике. Метод магнетронного распыления является очень стабильным процессом, так что толщина слоев МИС контролируется с очень высокой точностью просто по времени напыления. Электронно-лучевое испарение является значительно менее стабильным процессом, так что не только значение потока падающих частиц, но и его направление в пространстве может меняться во времени. Чтобы учесть флуктуации потока и обеспечить требуемую толщину слоев с высокой точностью, применяется система хорошо откалиброванных кварцевых резонаторов, расположенных по периметру быстро вращающейся подложки. Этот метод позволяет контролировать толщину слоев с очень высокой точностью для периодических МИС, по крайней мере. Поэтому, на наш взгляд, случайные отклонения толщины слоев от идеальных, возникающие в любом методе из-за статистического характера процесса напыления, вряд ли могут объяснить обсуждаемые выше вариации толщины слоев по глубине МИС.

Дело заключается в том, что в упомянутых выше методах контролируется не толщина слоя непосредственно, а масса напыленного вещества. В то же время, внутренняя структура тонких пленок может зависеть от ее толщины. Например, как мы обсуждали выше в разделе 2.2.6, плотность вольфрамовой пленки не постоянна по глубине, а увеличивается от подложки к поверхности примерно на 15% в слое толщиной около 2 нм (см. рис.2.23 на стр.178).

Даже если пленка на начальной стадии роста является аморфной, то по мере увеличения ее толщины она может кристаллизоваться. Например, пленка молибдена является аморфной лишь до толщины порядка 2 нм [214], после чего начинается процесс кристаллизации, причем степень кристаллизации, вообще говоря, может увеличиваться при росте пленки. При этом, во-первых, может меняться плотность пленки и, во-вторых, может измениться и структура интерслоев между соседними материалами, поскольку ясно, что процесс диффузии происходит по-разному на границе раздела между двумя аморфными материалами (Si и Mo) или между аморфным (Si) и поликристаллическим (Mo) веществом. В последнем случае диффузия атомов кремния происходит, в основном, вдоль границ раздела между микроструктурами молибдена. Тем самым, точное измерение массы напыленного вещества вовсе не гарантирует корректного определения толщины слоя. Можно ожидать, что чем меньше изменяется толщина слоев по глубине МИС, тем меньше будет различий в их внутренней структуре и тем меньше будут отклонения толщины слоев от идеальных значений.

Отметим, что *in-situ* рентгеновская рефлектометрия в настоящее время почти не используется для контроля толщины слоев при изготовлении МИС. Во-первых, это сильно усложняет конструкцию напылительной камеры и практически невозможно в напылительных устройствах, где подложка двигается от одного магнетрона к другому, что типично при изготовлении рентгенооптических элементов большого размера. Во-вторых, точное определение толщины слоя по зависимости коэффициента отражения от времени напыления при фиксированном угле падения излучения подразумевает, что внутренняя структура МИС точно известна, что, естественно, не соответствует реальности. Реконструкция же внутренней структуры растущей МИС на основе решения обратной задачи рефлектометрии, т.е. на *in-situ* измерениях всей кривой отражения в зависимости от угла скольжения зондирующего пучка в каждый момент времени напыления, невозможна без использования СИ в качестве источника зондирующего излучения.

Тем самым возникает вопрос: насколько можно уменьшить вариацию толщины слоев по глубине широкополосной МИС и насколько при этом ухудшатся ее оптические свойства? Рассмотрение будем проводить на основе МИС, состоящей из 50.5 пар слоев и имеющей следующий состав: $\text{SiO}_2/[\text{Si}/\text{V}_4\text{C}/\text{Mo}/\text{V}_4\text{C}]_{50}/\text{Si}/\text{подл.}(\text{SiO}_2)$, где между слоями Mo и Si введены буферные слои V_4C постоянной толщины 0.3 нм для предотвращения диффузии молибдена и кремния [215, 216]. Толщина естественного окисла SiO_2 на поверхности МИС предполагалась равной 1.5 нм. Шероховатости границ раздела не учитывались.

Поставим задачу следующим образом: требуется сконструировать МИС так, чтобы получить ровное плато отражения $R_0(\varphi) = 50\%$ в диапазоне углов падения от $\varphi_{min} = 0$ до

Таблица 3.6. Оптические характеристики многослойных структур, оптимизированных на получение постоянного коэффициента отражения R_0 в диапазоне углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$ на длине волны $\lambda = 13.5$ нм.

МИС	$R_0, \%$	Q	$\langle R \rangle, \%$	$RD, \%$	$\Delta R, \%$
A1	50.	0.	50.0	0.16	0.27
A2	50.	0.01	50.0	0.28	0.55
A3	50.	1.	50.0	0.55	1.10
A4	50.	20.	49.7	2.76	7.6
B1 \equiv A1	50.	0.	50.0	0.16	0.27
B2	51.	0.	51.0	0.17	0.38
B3	52.	0.	52.0	0.33	0.77
B4	53.	0.	53.0	0.40	0.83
B5	54.	0.	54.0	0.56	1.27
B6	55.	0.	54.9	0.69	1.54
C1 \equiv A3	50.	1.	50.0	0.55	1.10
C2	51.	1.	51.0	0.64	1.39
C3	52.	1.	52.0	0.78	1.64
C4	53.	1.	52.9	0.85	1.70
C5	54.	1.	53.8	1.03	2.04
C6	55.	1.	54.7	1.32	2.46

$\varphi_{max} = 18^\circ$ на длине волны $\lambda = 13.5$ нм. Параметрами оптимизации являются толщины слоев Mo и Si. При оптимизации наложим дополнительные ограничения на толщину слоев: $d_{min} = 2.2$ нм с тем, чтобы все слои Mo были бы поликристаллическими и, кроме того, положим $d_{max} = 6$ нм. Оптическое качество МИС, как и выше, будем характеризовать средним коэффициентом отражения $\langle R \rangle$, относительной дисперсией RD (3.40) и максимальной вариацией коэффициента отражения на плато ΔR (3.41). Оптические характеристики структур, рассмотренных в настоящем разделе, сведены в таблицу 3.6.

Прежде всего сконструируем МИС с требуемыми параметрами, используя, как и выше, функцию невязки стандартного вида (3.38). Полученную в результате оптимизации структуру назовем A1. Распределение толщин слоев МИС A1 и профиль коэффициента отражения показаны на рис.3.31. Плато на кривой отражения идеально ровное. Вариация коэффициен-

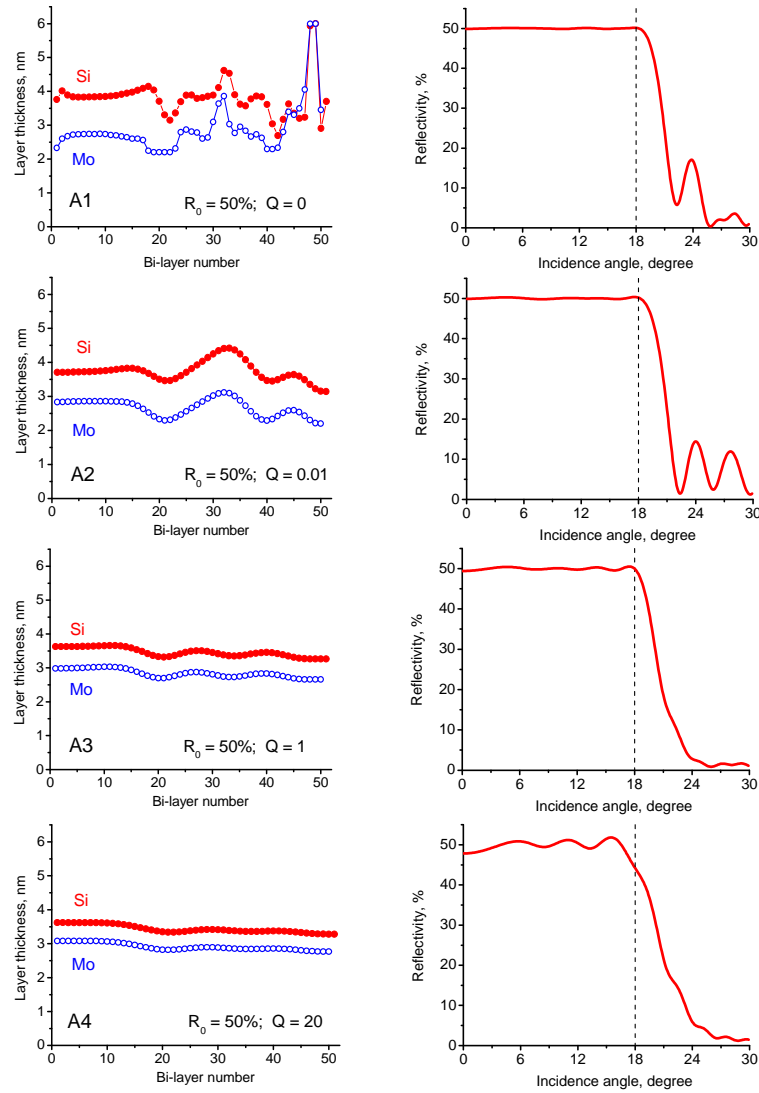


Рис. 3.31. Распределения толщины слоев по глубине и коэффициент отражения от МИС А1...А4, сконструированных для получения постоянного коэффициента отражения $R_0 = 50\%$ в диапазоне углов скольжения от 0 до 18° на длине волны $\lambda = 13.5$ нм. Номер би-слоя отсчитывается от вершины МИС.

та отражения составляет всего лишь $\Delta R = 0.27\%$. В то же время, распределение толщины слоев МИС А1 представляет собой сложную и быстро изменяющуюся функцию глубины, причем толщина слоев Мо изменяется в максимально широком допустимом диапазоне от $d_{min} = 2.2$ нм до $d_{max} = 6$ нм.

Для того, чтобы сконструировать МИС с меньшим изменением толщины слоев, введем вместо (3.38) новую функции невязки

$$MF_3 = \sum_{m=1}^M \left[R_0 - R(\varphi_m, \vec{d}) \right]^2 + \frac{Q}{(\Delta d)^2} \sum_j \left[(d_{2j+1} - d_{2j-1})^2 + (d_{2j+2} - d_{2j})^2 \right] \quad (3.43)$$

где Q - дополнительный параметр оптимизации, а второе суммирование происходит по всем би-слоям структуры. Смысл этой суммы состоит в том, чтобы после оптимизации все тол-

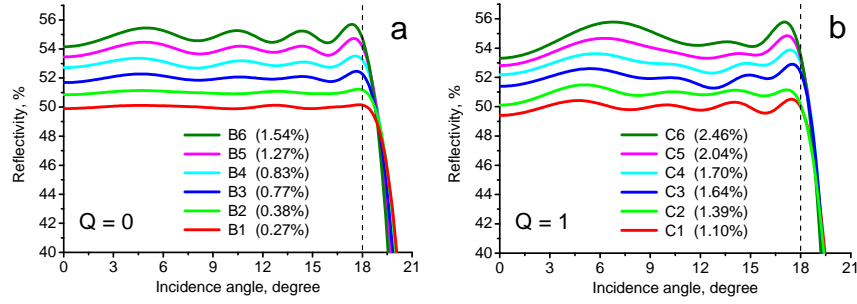


Рис. 3.32. Плато коэффициента отражения для МИС типа В и С. Структуры оптимизированы на получение постоянного коэффициента отражения R_0 в диапазоне углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$ с использованием стандартной невязки функции (3.38) (В) или (3.43) при $Q = 1$ (С). Значение R_0 увеличивается от 50% для В1 и С1 до 56% для В6 и С6 с шагом 1%. В скобках указаны значения максимального изменения R на плато.

щины нечетных слоев (Si), равно как и все толщины четных слоев (Mo) как можно меньше отличались бы друг от друга. Если $Q = 0$, то получим стандартную функцию невязки (3.38). Если устремить Q к бесконечности, то в результате оптимизации получим периодическую структуру. В (3.43) введен постоянный параметр $\Delta d \equiv d_{max} - d_{min} = 3.8$ нм просто для того, чтобы параметр Q был безразмерным.

Если положить $Q = 0.01$ (МИС А2), то после минимизации функции невязки (3.43) получим структуру с заметно более гладким распределением толщин, чем у А1, и практически постоянным плато отражения. Увеличение параметра Q до 1 (МИС А3) позволяет получить удивительную структуру с очень плавным изменением толщин слоев, причем плато отражения все еще плоское. Изменение толщины слоев по всей глубине структуры А3 не превышает 0.39 нм, т.е. в 10 раз меньше, чем для МИС А1, а изменение периода не превышает 0.76 нм. Отметим, что если написать условие Брэгга для отражения от периодической структуры при минимальном $\varphi = 0$ и максимальном $\varphi = 18^\circ$ углах падения, то получим изменение периода около 0.35 нм. Иными словами, структура А3 близка к предельной, какую только можно вообразить для решения поставленной выше проблемы. Действительно, дальнейшее увеличение параметра Q слабо меняет распределение толщины слоев, но приводит к существенному росту осцилляций на плато отражения. Примером может служить МИС А4, оптимизированная при $Q = 20$. Для этой структуры $\Delta R = 7.6\%$, что вряд ли приемлемо для практики. Тем самым, структуру А3 можно рассматривать как близкую к оптимальной.

В то же время, коэффициент отражения на плато $R_0 = 50\%$, на получение которого оптимизированы все МИС типа А, еще далек от максимально достижимого. Действительно, рассмотрим последовательность МИС, оптимизированных с использованием стандартной це-

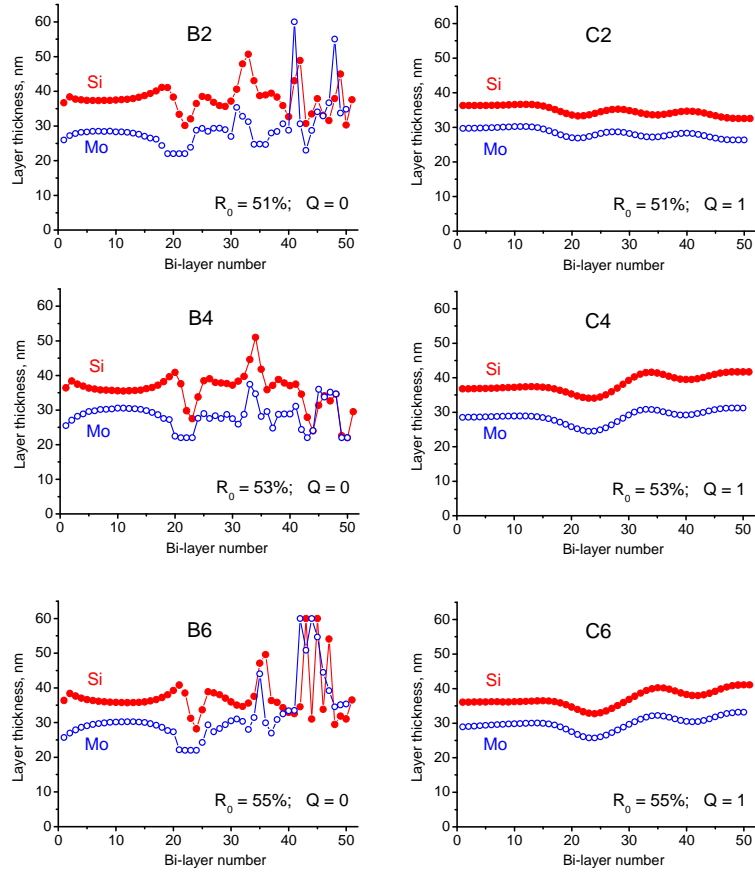


Рис. 3.33. Сравнение распределения толщины слоев по глубине для МИС типа В и С. Структуры оптимизированы на получение постоянного коэффициента отражения R_0 в диапазоне углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$ с использованием стандартной невязки функции (3.38) (В) или (3.43) при $Q = 1$ (С). Номер би-слоя отсчитывается от вершины МИС.

левой функции (3.38) на получение все большего значения R_0 в одном и том же диапазоне углов падения $\varphi \in [0, 18^\circ]$. Эти структуры обозначены символом В в таблице 3.6. Коэффициенты отражения на плато показаны на рис.3.32а, причем значения R_0 увеличиваются от 50% для МИС В1, совпадающей с А1, до 55% для МИС В6. Максимальная вариация коэффициента отражения на плато ΔR увеличивается от 0.27% для В1 до 1.54% для В6. Более того, для МИС В6 среднее значение коэффициента отражения $\langle R \rangle$ начинает заметно отличаться от желаемого R_0 . Поэтому мы не рассматривали МИС, сконструированных на достижение более высоких значений R_0 . Распределения толщины слоев для МИС типа В, показанные на рис.3.33, левая колонка, представляют собой, как обычно, быстро изменяющиеся функции глубины с большой амплитудой осцилляций.

Сконструируем теперь МИС типа С с теми же желаемыми оптическими характеристиками как и для МИС В, но используя функцию невязки (3.43) и положив, для определенности, параметр $Q = 1$, т.е. МИС С1 совпадает с рассмотренной выше МИС А3. Найденные распределения толщины слоев показаны на рис.3.33, правая колонка, а соответствующие

им профили кривых отражения - на рис.3.32b. Хотя максимальная вариация коэффициента отражения на плато несколько увеличилась, полученные распределения толщины слоев по глубине МИС типа С существенно более гладкие, чем для МИС типа В даже при предельно высоких значениях коэффициента отражения R_0 . Интересно, что распределения толщины слоев для МИС С1 и С2, равно как и для МИС С3 - С6 очень похожие, хотя в среднем период МИС С1 - С2 слегка уменьшается с глубиной, в то время как для МИС С3 - С6, наоборот, несколько увеличивается.

Таким образом, проведенное рассмотрение показало, что выбрав компромисс между желаемым значением коэффициента отражения и его вариацией на плато и используя целевую функцию в форме (3.43), возможно сконструировать МИС, распределение толщины слоев которой является очень гладкой функцией глубины, причем максимальное изменение толщины во много раз меньше, чем для МИС, сконструированной с использованием традиционной функции невязки.

3.4. Многослойные зеркала с максимальной интегральной эффективностью

3.4.1. Конструирование зеркал с максимальной эффективностью на основе формализма Эйлера-Лагранжа

Как обсуждалось в разделе 3.1, проблема синтеза МИС применительно к зеркалам Гёбеля может быть сформулирована следующим образом: необходимо сконструировать многослойное зеркало с максимально возможным значением эффективности (3.2). Ниже для определенности будем предполагать, что $\lambda = 0.071$ нм (характеристическая K_α линия Mo, широко используемая при исследованиях материалов), а функция источника имеет гауссову форму (3.3) где $\Delta\theta = 0.024^\circ$, а $\theta_0 = 0.685^\circ$. Функция $G(\theta)$ показана на рис.3.34, кривая 1. Кривая 2 на рисунке показывает коэффициент отражения от периодического $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала. При расчетах предполагалось, что границы раздела соседних слоев характеризуются наличием мелкомасштабных шероховатостей среднеквадратичной высоты $\sigma = 0.25$ нм. Значения толщин слоев внутри периода выбраны так, чтобы получить максимальное значение эффективности (3.2). Тем не менее, ширина пика отражения составляет лишь 0.01° , что почти в 6 раз меньше ширины функции $G(\theta)$. В результате эффективность периодического зеркала составляет всего лишь 19.6%. При использовании других комбинаций материалов возможно несколько увеличить эффективность периодического зеркала до 25%, что не является прин-

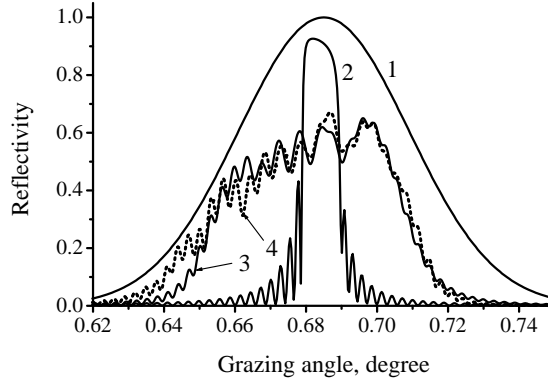


Рис. 3.34. Функция источника $G(\theta)$ (1) и коэффициент отражения от периодического $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала (2). Кривые 3 и 4 показывают коэффициент отражения от градиентных зеркал, причем зеркало 3 было сконструировано с использованием аналитического формализма Эйлера-Лагранжа, а зеркало 4 найдено как результат численного уточнения предыдущей конструкции. Для всех зеркал значения $N = 220$, $\Gamma = 0.45$ и $\sigma = 0.25$ нм одни и те же. Эффективность составляет 19.6% (2), 41.6% (3) и 42.0% (4).

ципальным. Ясно, что существенного увеличения эффективности можно достичь лишь при использовании градиентных многослойных зеркал, характеризующихся широкой полосой отражения.

Как и выше, для конструирования МИС с максимальной интегральной эффективностью, будем использовать подход, основанный на комбинации численного и аналитического методов. В качестве функции невязки естественно использовать обратную эффективность $1/E$. Для того, чтобы найти начальное распределение толщины слоев по глубине, воспользуемся выведенным выше приближенным аналитическим выражением (3.25) для коэффициента отражения от широкополосной МИС, которое запишем в следующем виде:

$$R(\theta) = \frac{4y}{(1+y)^2} e^{-4\kappa_2(\theta)z(\theta)}, \quad y = \frac{\pi k^2 B^2 P}{32\kappa_1 \sin(2\theta)} \frac{dz}{d\theta}, \quad B = 2\text{Re}(\varepsilon_A - \varepsilon_S) \frac{\sin(\pi\Gamma)}{\pi} \quad (3.44)$$

$$\kappa = \kappa_1 + \kappa_2 = k\sqrt{\mu - \cos^2 \theta}, \quad k = 2\pi/\lambda, \quad \mu = \Gamma\varepsilon_A + (1 - \Gamma)\varepsilon_S$$

где ε_A и ε_S - диэлектрические проницаемости тяжелого и легкого материалов МИС, Γ - толщинный фактор, который предполагается постоянным по глубине, а μ - средняя по периоду диэлектрическая проницаемость. Функция $z(\theta)$ однозначно связана с периодом структуры $1/q(z)$ условием Брэгга $q(z) = \kappa_1(\theta)/\pi$ и определяет положение точки в глубине МИС, от которой отражается волна, падающая на МИС под углом скольжения θ . Параметр P в (3.44) равен +1 или -1 в зависимости от того, уменьшается или увеличивается период МИС по глубине, так что $y > 0$ в любом случае. Напомним, что выражение (3.44) было получено в

предположении (а) достаточно быстрого изменения периода по глубине, так что $y < 1$, (б) монотонного изменения периода и (в) достаточно малого поглощения излучения в веществе, а именно, $|\operatorname{Re}\varepsilon_A - \varepsilon_S| \gg \operatorname{Im}\varepsilon_A$, что как правило выполняется в ЖР диапазоне. Для того, чтобы определить изменение периода по глубине необходимо найти функцию $z(\theta)$.

Экстремум интеграла (3.2) достигается, если функция $z(\theta)$ удовлетворяет уравнению Эйлера-Лагранжа

$$\frac{d}{d\theta} \left[G(\theta) \frac{\partial R}{\partial z'_\theta} \right] - G(\theta) \frac{\partial R}{\partial z} = 0, \quad z'_\theta \equiv \frac{dz}{d\theta} \quad (3.45)$$

После некоторых алгебраических вычислений из (3.44)-(3.45) находим следующее нелинейное дифференциальное уравнение для функции $Z(\theta)$, справедливое для произвольной функции источника $G(\theta)$ [A48]:

$$\frac{dy}{d\theta} = \frac{1-y^2}{2(2-y)} \left\{ \frac{d \ln G}{d\theta} - \frac{2}{\tan(2\theta)} + \frac{k^2 \sin(2\theta)}{2\kappa_1^2} (4\kappa_2 z - 1) \right\} + \frac{128\kappa_1\kappa_2 P \sin(2\theta) y^2 (1+y)}{\pi k^2 B^2 (2-y)} \quad (3.46)$$

При выводе (3.46) использовались следующие упрощенные формулы

$$\frac{d\kappa_1}{d\theta} \approx \frac{k^2 \sin(2\theta)}{2\kappa_1(\theta)}; \quad \frac{d\kappa_2}{d\theta} \approx -\frac{k^2 \kappa_2(\theta) \sin(2\theta)}{2\kappa_1^2(\theta)}$$

которые справедливы для слабопоглощающих материалов и углов θ , превышающих критический угол ПВО. Уравнение (3.46) должно быть решено совместно с граничными условиями (а) или $z(\theta_{min}) = 0$, или $z(\theta_{max}) = 0$ в зависимости от того, уменьшается или увеличивается период с глубиной и (б) или фиксирована полная толщина структуры, или заданы значения $y(\theta_{min})$ или $y(\theta_{max})$. Кроме того, должен быть определен интервал углов $[\theta_{min}, \theta_{max}]$, где мы хотим найти решение уравнения (3.46). Ниже мы будем рассматривать зеркала с увеличивающимся по глубине периодом, поскольку их эффективность оказывается выше, чем для зеркал с уменьшающимся периодом.

Как и в разделе 3.3.1, перейдя от непрерывных переменных z и θ к числовым последовательностям $\{z_j\}$ и $\{\theta_j\}$, получаем простые рекуррентные соотношения, позволяющие найти распределение толщин слоев по глубине

$$\begin{aligned} z_{2j+2} &= z_{2j} + \frac{\pi}{\kappa_1(\theta_{2j})}, & z_0 &= 0, & j &= 0, 1, 2, \dots \\ z_{2j+1} &= z_{2j} + \Gamma \cdot (z_{2j+2} - z_{2j}) \\ \theta_{2j+2} &= \theta_{2j} - \frac{(\pi k B)^2}{32 \kappa_1^2(\theta_{2j}) \sin(2\theta_{2j}) y_{2j}} \\ y_{2j+2} &= y_{2j} + F(\theta_{2j}, y_{2j}, z_{2j}) \cdot (\theta_{2j+2} - \theta_{2j}) \end{aligned} \quad (3.47)$$

где толщина би-слоя j определена как $d_j = z_{2j+2} - z_{2j}$, би-слои отсчитываются от внешней поверхности многослойной структуры, функция $F(\theta, y, z)$ соответствует правой части уравнения (3.46) при $P = -1$, а $y_0 \equiv y(\theta_{max})$ - параметр задачи, определяющий общую толщину

(число би-слоев) структуры. Решение ищется в конечном интервале углов $[\theta_{min}, \theta_{max}]$, где

$$\theta_{min} = \theta_0 - \alpha\Delta\theta, \quad \theta_{max} = \theta_0 + \alpha\Delta\theta \quad (3.48)$$

$\Delta\theta$ - угловая ширина функции $G(\theta)$, а α - еще один параметр задачи. После того как толщины всех слоев найдены с помощью (3.47), коэффициент отражения рассчитывается с использованием точного метода рекуррентных соотношений (алгоритма Паратта).

Если многослойная структура не обладает поглощением (например, в нейтронной оптике), то $\kappa_2 \equiv 0$, а уравнение (3.46) интегрируется аналитически:

$$\frac{[1 + y(\theta)]^3}{1 - y(\theta)} = C \frac{k}{\kappa_1(\theta)} \frac{G(\theta)}{\sin(2\theta)} \quad (3.49)$$

где C - постоянная интегрирования, выражаемая в терминах $y(\theta_{max})$. Изменяя значение C , получим многослойные структуры с различным числом би-слоев. На рис.3.35 показаны кривые отражения от гипотетического $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала, не обладающего поглощением, при различном числе би-слоев. Кривая 1 - это функция источника, а кривые 2 и 3 были рассчитаны при значении параметра $\alpha = 1$ в (3.48). Эволюция формы кривой отражения при увеличении числа би-слоев абсолютно понятна с физической точки зрения. При малом числе би-слоев N (кривая 2) пик отражения довольно узкий и расположен вблизи максимума функции $G(\theta)$. При увеличении N увеличивается пиковое значение коэффициента отражения и уширяется кривая отражения (в соответствии с выбранным значением параметра α), приближаясь к прямоугольной форме (кривая 3). Дальнейшее увеличение числа би-слоев почти не сказывается на значении эффективности E . Чтобы увеличить значение E , необходимо увеличить параметр α , т.е. ширину кривой отражения (кривая 4). Увеличивая одновременно параметр α и число би-слоев, возможно получить эффективность сколь угодно близкую к единице, но, конечно, только в отсутствие поглощения излучения в веществе. Например, если $N = 900$, а $\alpha = 2$, то эффективность достигает 96.6% (кривая 4). Полученное распределение толщины би-слоя по глубине показано на рис.3.36, кривая 1, для зеркала с $N = 250$ и $\alpha = 1$.

Эффект поглощения иллюстрируется рис.3.37. Кривая 1, как обычно, показывает функцию источника. Кривая 2 - коэффициент отражения от зеркала, сконструированного с использованием уравнений (3.47) в отсутствие поглощения, а кривая 3 - коэффициент отражения от зеркала с теми же самыми значениями N , Γ и α , но при учете поглощения. Этот пример наглядно демонстрирует, что поглощение существенно уменьшает значение эффективности от 69.8% до 48.2%. Дополнительный фактор, приводящий к уменьшению эффективности, это эффект шероховатостей. В качестве примера, кривая 4 на рис.3.37 показывает коэффициент отражения от того же самого зеркала, что и для кривой 3, но при учете как

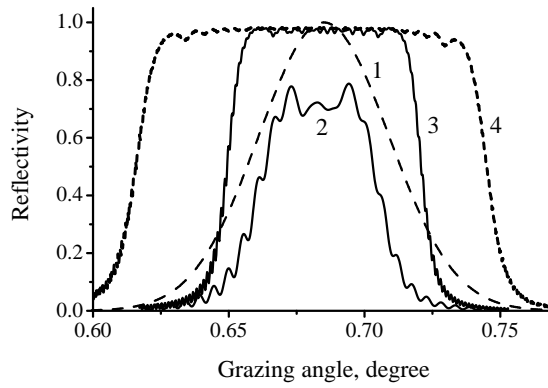


Рис. 3.35. Коэффициент отражения $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала в гипотетическом случае отсутствия поглощения. Расчеты проведены для $\alpha = 1$ и для различного числа би-слоев $N = 125$ (2) и $N = 500$ (3). Кривая 4 - расчет при $N = 900$ и $\alpha = 2.0$. Кривая 1 - функция источника. Эффективность составляет 49.0% (2), 84.1% (3) и 96.6% (4). Значение $\Gamma = 0.5$ во всех случаях.

поглощения, так и влияния шероховатостей границ раздела со среднеквадратичной высотой $\sigma = 0.25$ нм. Эффективность снизилась до 42.0% в этом случае. Для определенности, здесь и ниже предполагаем, что шероховатости границ раздела дельта-коррелированы и характеризуются одной и той же среднеквадратичной высотой $\sigma = 0.25$ нм. Распределение толщины би-слоев по глубине показано на рис.3.36, кривая 3. Видно, что учет поглощения привел к изменению распределения толщин по сравнению с кривой 1, хотя распределение осталось очень гладкой и монотонной функцией глубины.

Проанализируем теперь более детально проблему конструирования $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала, учитывая как поглощение, так и шероховатость границ раздела. Как отмечалось выше, эффективность является функцией двух дополнительных параметров: отношения толщин внутри би-слоя Γ , которое предполагается одним и тем же для всех би-слоев, и шириной углового интервала, в котором мы хотим найти решение уравнения (3.46) (параметр α). На рис.3.38 показана зависимость эффективности от фактора Γ для решений с различным числом пар слоев, которое определяется начальным условием $y(\theta_{max})$. Видно, что эта зависимость очень слабая, хотя увеличение числа слоев приводит к некоторому сдвигу в оптимальном значении толщинного фактора Γ .

На рис.3.39 показана зависимость эффективности от числа пар слоев для различных значений ширины интервала интегрирования уравнения (3.46) (т.е. для различных α). Эта зависимость довольно сложная, что отражает сложность нелинейного дифференциального уравнения (3.46) особенно при учете поглощения. Оказывается, что физически обоснованные решения, гарантирующие выполнения неравенства $y(\theta) < 1$ для всех $\theta \in [\theta_{min}, \theta_{max}]$,

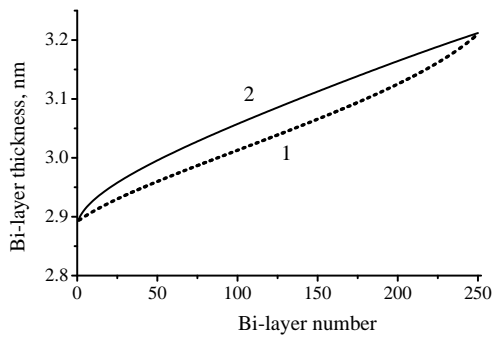


Рис. 3.36. Распределение толщины би-слоев по глубине $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала, оптимизированного на максимальную эффективность при фиксированных значениях $N = 250$, $\Gamma = 0.5$ и $\alpha = 1.0$. Поглощение излучения не принималось во внимание (1) или было учтено при расчетах (2). Би-слои отсчитываются от внешней поверхности зеркала.

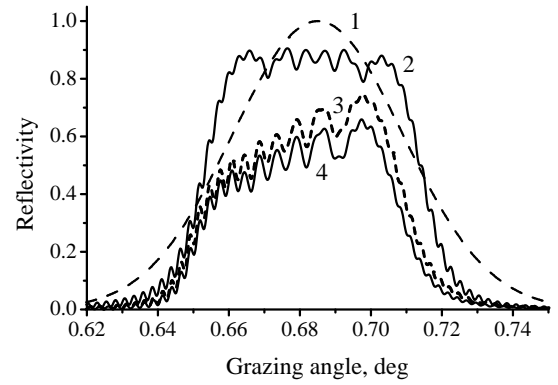


Рис. 3.37. Коэффициент отражения от $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала ($N = 250$, $\Gamma = 0.5$; $\alpha = 1.0$) в зависимости от угла скольжения. Поглощением излучения пренебрегалось (2) или оно было принято во внимание (3). При расчете кривой 4 учитывались как эффект поглощения, так и влияние шероховатостей границ раздела ($\sigma = 0.25$ нм). Кривая 1 - функция источника. Эффективность составляет 69.8% (2), 48.2% (3) и 42.0% (4).

существуют в ограниченном диапазоне значений $y_0 \equiv y(\theta_{max})$. Например, если $\alpha = 1$ (закрашенные кружки на рис.3.39), то минимальное возможное значение $y_0 \approx 0.004$, для которого число пар слоев оказывается равным $N = 193$, а эффективность $E \approx 38.3\%$. Увеличение y_0 до 0.01 характеризуется монотонным уменьшением числа пар слоев вплоть до $N = 164$. Дальнейшее увеличение y_0 вплоть до 0.088 приводит к монотонному увеличению эффективности до 43.4% при одновременном увеличении числа би-слоев до 276. Если $y_0 > 0.088$, то функция $y(\theta)$ становится больше 1 в том или ином интервале углов θ , что противоречит исходному уравнению (3.44).

Тем не менее, эффективность может быть увеличена, если увеличить интервал интегрирования уравнения (3.46), т.е. параметр α (незакрашенные кружки на рис.3.39. Рассчитав эффективность как функцию N для разных α , мы убеждаемся, что все точки на графике, исключая нижние части кривых, где $dN/dy_0 < 0$, лежат на одной кривой, демонстрируя универсальную зависимость максимально достижимой эффективности от числа би-слоев структуры. Следует отметить, что для заданного N интервал интегрирования уравнения (3.46) ограничен как снизу, так и сверху. В частности, если реалистическое для практики число би-

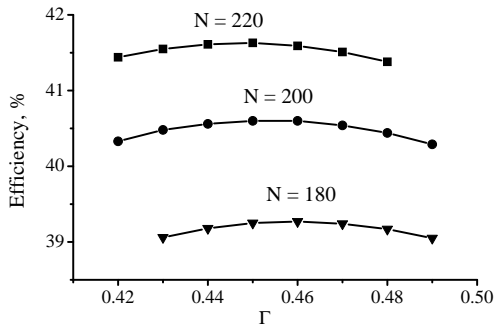


Рис. 3.38. Эффективность $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала в зависимости от параметра Γ для различного числа би-слоев N .

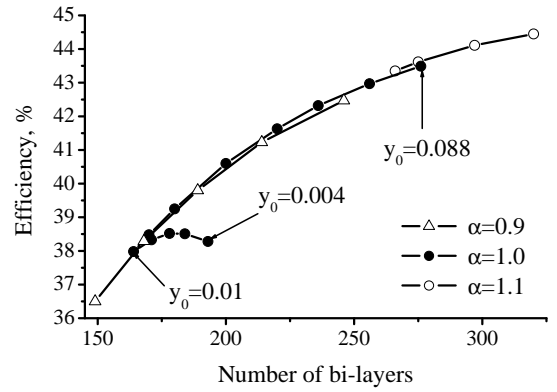


Рис. 3.39. Эффективность $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала в зависимости от числа би-слоев N для различных значений параметра α , определяющего интервал интегрирования уравнения (3.46).

слоев составляет 200-250, то значение параметра α лежит в интервале 0.9-1.0 (см. рис.3.39) для рассматриваемого $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала.

Кривая отражения градиентного многослойного зеркала ($N = 220$, $\Gamma = 0.45$, $\sigma = 0.25$ нм и $\alpha = 1.0$) показана на рис.3.34, кривая 3, для сравнения с коэффициентом отражения от периодической структуры. Эффективность градиентного зеркала составляет 41.6%, что более чем в два раза превышает эффективность периодического зеркала. Как обсуждалось выше, это значение ограничено, главным образом, поглощением излучения в многослойной структуре, хотя увеличение числа пар слоев может привести к дополнительному увеличению эффективности вплоть до 45% (см. рис.3.39). Найденное распределение толщины би-слоев по глубине показано на рис.3.40, кривая 1, причем толщинный фактор Γ один и тот же для всех би-слоев.

3.4.2. Численное уточнение аналитического решения

Найденное аналитическое решение (кривая 1 на рис.3.40) было использовано в качестве начального распределения толщин слоев для последующего численного уточнения конструкции зеркала. Толщина каждого слоя рассматривалась как независимый подгоночный параметр. Для минимизации функции невязки $1/E$ использовался стандартный квази-Ньютоновский алгоритм. Уточненное распределение толщин слоев показано на рис.3.40, кривая 2, а соответствующая кривая отражения - на рис.3.34, кривая 4. Численная оптимизация

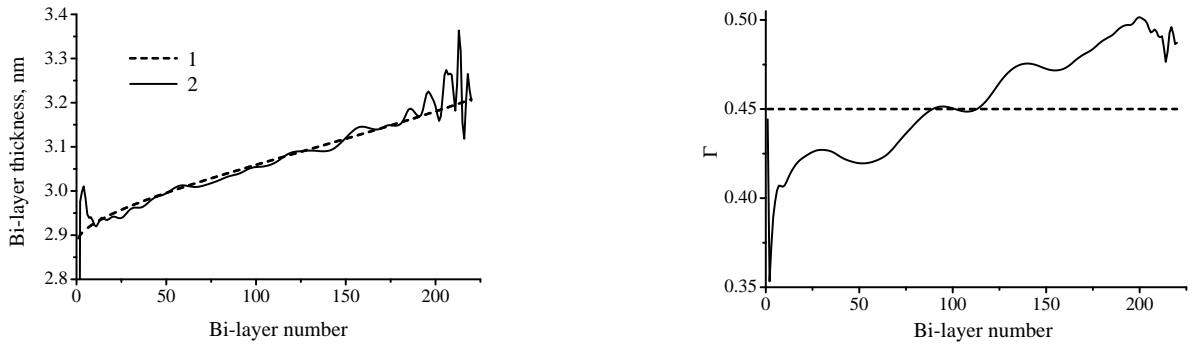


Рис. 3.40. Распределение толщины би-слоев и толщинного фактора по глубине $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала ($N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм), оптимизированного на максимальную эффективность с помощью уравнения Эйлера-Лагранжа (1) и после дополнительного численного уточнения конструкции зеркала (2). Би-слои отсчитываются от внешней поверхности структуры.

привела к незначительному увеличению эффективности на 0.4%. В то же время распределение толщин слоев по глубине стало значительно более сложным. Тем самым, мы заключаем, что численное уточнение аналитического решения не имеет практического смысла.

Значения эффективности, найденных с использованием различных методов, представлены в табл.3.7.

Подход, обсуждаемый в этом разделе, основан на точном уравнении Эйлера-Лагранжа (3.45), физически обоснованном выражении (3.44) и справедлив для произвольной функции источника. В этом смысле подход является очень общим. Для иллюстрации, на рис.3.41 показана кривая отражения от $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала (кривая 2), сконструированного с использованием уравнения (3.47) для достижения максимальной эффективности в экзотическом случае функции источника в виде двух гауссовых пиков (кривая 1).

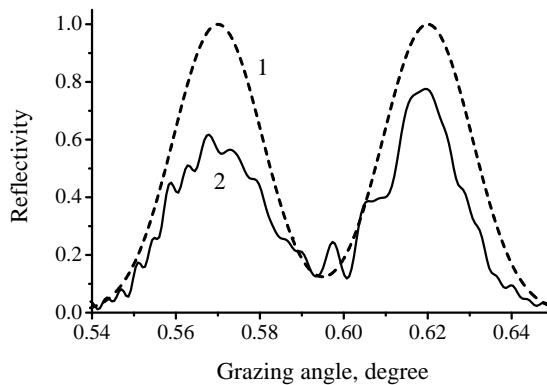


Рис. 3.41. Кривая отражения (1) от $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала ($N = 150$, $\Gamma = 0.45$, $\sigma = 0.25$ нм), оптимизированного на максимальную эффективность (около 45%) для функции источника в виде двух гауссовых пиков (1).

Таблица 3.7. Эффективность Mo₂C/Si многослойных зеркал ($N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм, $\lambda = 0.071$ нм), сконструированных с использованием различных подходов

Периодическая структура	19.6%	
Уравнение Эйлера-Лагранжа	41.6%	
Численное уточнение	42.0%	
Полиномиальное приближение (M - степень полинома)	$M=1$	41.5%
	$M=3$	41.5%
	$M=5$	41.6%
	$M=7$	41.8%
Стопка периодических структур (M - число структур)	$M=3$	38.5%
	$M=4$	41.1%
	$M=6$	41.5%
	$M=10$	41.5%

3.4.3. Упрощенные подходы к оптимизации зеркал с максимальной эффективностью

Выше было показано, что очень гладкое и монотонное распределение толщины слоев по глубине приводит к значению эффективности, которое очень близко к максимально возможному. Поэтому можно попытаться применить существенно более простой подход к оптимизации структуры, который вообще не основывается на физическом анализе проблемы. Представим распределение толщины би-слоев в виде полинома степени M

$$d_j = \sum_{m=0}^M a_m \cdot \left(\frac{j}{N}\right)^m, \quad j = 1, \dots, N \quad (3.50)$$

где $M + 1$ подгоночный параметр a_m находится численно из условия минимизации функции невязки $1/E$. Дополнительным параметром является толщинный фактор Γ , который, как и выше, предполагается одним и тем же для всех би-слоев. Найденное распределение толщины би-слоев Mo₂C/Si многослойного зеркала показано на рис.3.49) для полиномов степени $M = 1$ и $M = 7$ (кривые 1 и 2, соответственно). Для сравнения показано распределение

толщин, найденное выше с использованием уравнения Эйлера-Лагранжа (кривая 3). Распределения толщин, равно как и кривые отражения (рис.3.43), полученные с использованием двух совершенно разных методов, очень похожи друг на друга. Значения эффективности для разных степеней M полинома (3.50) представлены в табл.3.7. Видно, что уже простейшем случае $M = 1$ эффективность близка к найденному ранее значению. Увеличение степени полинома M приводит к незначительному увеличению эффективности.

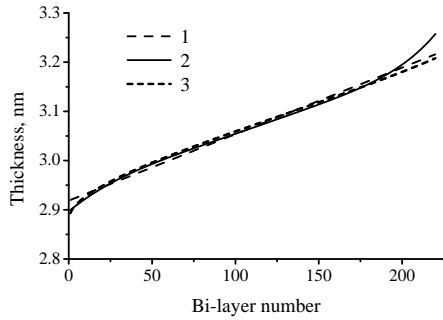


Рис. 3.42. Распределение толщины би-слоев по глубине для $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала ($N = 220$), оптимизированного с использованием полиномиальной аппроксимации при $M = 1$ (1) и $M = 7$ (2). Для сравнения показано распределение толщин, найденного на основе уравнения Эйлера-Лагранжа (3). Би-слои отсчитываются от вершины структуры.

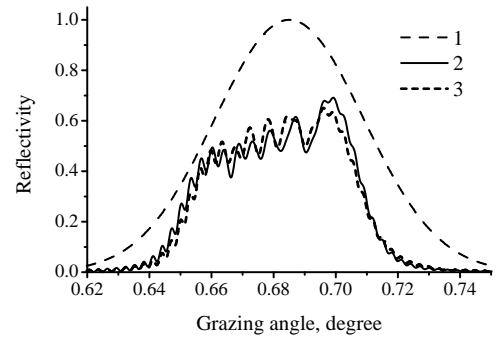


Рис. 3.43. Коэффициент отражения от $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала ($N = 220$), оптимизированного с использованием полиномиальной аппроксимации при $M = 1$ (2) и на основе уравнения Эйлера-Лагранжа (3). Кривая 1 - функция источника

Основываясь на полиномиальном представлении распределения толщины слоев, рассмотрим кратко зависимость эффективности от среднего угла скольжения θ_0 и ширины функции источника $\Delta\theta$, входящих в (3.3). На рис.3.44 показаны кривые отражения $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала в зависимости от θ_0 при фиксированном числе би-слоев $N = 220$. Как пиковое значение коэффициента отражения, так и угловая ширина пика уменьшаются при увеличении θ_0 , приводя к резкому падению эффективности (рис.3.45). Такое поведение эффективности объясняется, во-первых, увеличивающимся влиянием шероховатости границ раздела и, во-вторых, быстрым возрастанием числа би-слоев, необходимого для достижения максимального коэффициента отражения, о чем подробно говорилось в разделе 3.3.2. На рис.3.46 показано изменение профиля кривой отражения от $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала при увеличении ширины $\Delta\theta$ функции источника. Наконец, рис.3.47 демонстрирует экспоненциальное падение эффективности при увеличении $\Delta\theta$. Зависимости эффективности от среднего угла скольжения и ширины

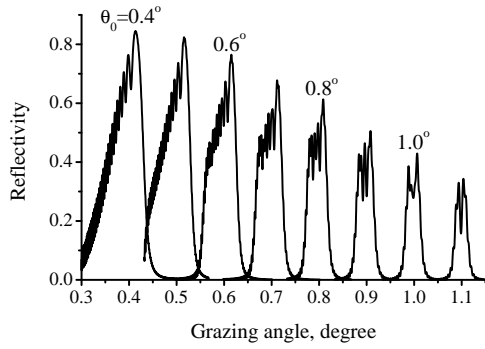


Рис. 3.44. Кривые отражения от $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала, оптимизированного на максимум эффективности при различном среднем угле скольжения θ_0 , изменяющемся от 0.4° до 1.1° и при фиксированной ширине функции источника $\Delta\theta = 0.024^\circ$. Во всех случаях число би-слоев $N = 220$ и среднеквадратичная шероховатость $\sigma = 0.25$ нм. Оптимизация проведена с использованием линейной аппроксимации толщины би-слоев ($M=1$).

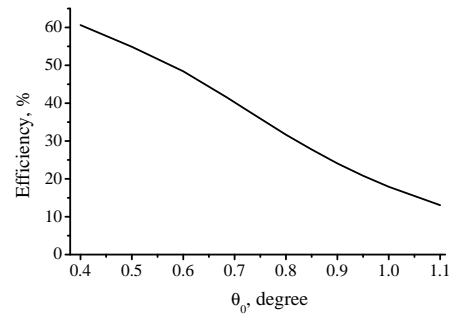


Рис. 3.45. Эффективность $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала в зависимости от среднего угла θ_0 . Число би-слоев $N = 220$ и среднеквадратичная шероховатость $\sigma = 0.25$ нм фиксированы. Оптимизация проведена с использованием линейной аппроксимации толщины би-слоев ($M=1$).

функции источника, показанные на рис.3.45 и 3.47, должны быть приняты во внимание при конструировании рентгеновских коллиматоров и концентраторов с многослойными покрытиями.

Рассмотрим, наконец, еще более простой подход к оптимизации зеркал с максимальной эффективностью, а именно, предположим, что многослойное зеркало состоит из стопки нескольких периодических структур с различными периодами. Подход основан на том обстоятельстве, что уже линейное изменение толщины би-слоя по глубине позволяет получить эффективность, близкую к максимальной. Поэтому при оптимизации стопки периодических структур мы введем только три подгоночных параметра, независимо от числа M этих структур: (1) период d_{min} структуры, расположенной на вершине, (2) период d_{max} структуры, расположенной вблизи подложки и (3) один и тот же для всех структур толщинный фактор Γ , а также предположим, что периоды всех промежуточных структур увеличиваются линейно с глубиной следующим образом:

$$d_j = d_{min} + (d_{max} - d_{min}) \frac{j-1}{M-1}, \quad j = 1, \dots, M \quad (3.51)$$

Общее число периодов $N = 220$ фиксировано и почти равномерно распределено между M периодическими структурами. Результат оптимизации показан на рис.3.48 и 3.49 для $M = 6$. Кривая отражения и распределение толщин по глубине похожи на те, которые были

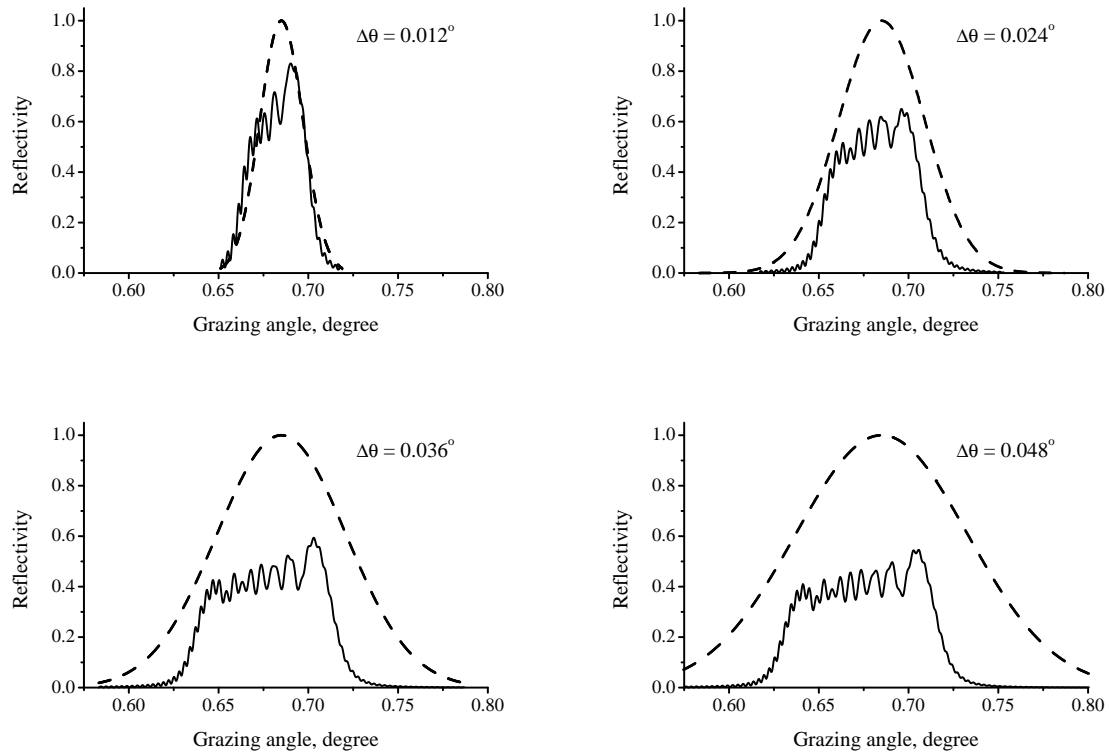


Рис. 3.46. Кривые отражения (сплошные кривые) от $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала, оптимизированного на максимум эффективности при различной ширине $\Delta\theta$ функции источника (штриховые кривые) и фиксированном среднем угле скольжения $\theta_0 = 0.685^\circ$. Во всех случаях число би-слоев $N = 220$ и среднеквадратичная шероховатость $\sigma = 0.25$ нм. Оптимизация проведена с использованием линейной аппроксимации толщины би-слоев ($M=1$).

получены при использовании формализма Эйлера-Лагранжа. Оптимальное значение толщинного фактора $\Gamma \simeq 0.45$ практически такое же. Эффективность $E = 41.5\%$ лишь на 0.1% меньше по сравнению со значением, найденным выше. Наконец, зависимость эффективности от числа периодических структур, представленная в табл.3.7, показывает, что многослойное зеркало, состоящее из стопки четырех периодических структур показывает эффективность близкую к максимальной.

3.4.4. О выборе материалов для многослойных зеркал с максимальной эффективностью

До сих пор мы анализировали конструкцию и оптические свойства $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойных зеркал. Хотя границы раздела между Mo_2C и Si достаточно гладкие, резкие и стабильные при комнатной температуре [208, 217], мы не доказали, что именно эта структура обеспечивает максимальную эффективность и является наилучшей для практических применений. В этом разделе мы рассмотрим возможность дальнейшего увеличения эффективности при

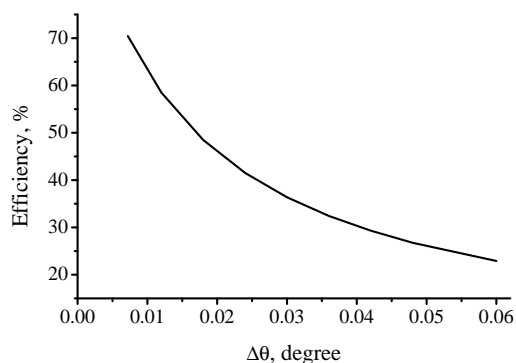


Рис. 3.47. Эффективность $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала ($N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм) в зависимости от ширины функции источника. Оптимизация проведена с использованием линейной аппроксимации толщины би-слоев ($M=1$).

использовании других пар материалов, составляющих многослойную структуру. Результаты анализа суммированы в табл.3.8. Расчеты основаны на полиномиальной аппроксимации распределения толщин слоев при $M = 5$.

Основные принципы по выбору пар материалов для широкополосных зеркал были сформулированы выше в разделе 3.3.2. Выбор легкого компонента структуры с оптической точки зрения совершенно очевиден: это должно быть вещество с минимальной поляризуемостью (обычно такое вещество обеспечивает и минимальное поглощение в ЖР диапазоне), чтобы обеспечить максимальный контраст $|\delta_A - \delta_S|$ между материалами. Выбор тяжелого компонента структуры не столь очевиден. Прежде всего, следует рассмотреть одноатомные материалы, поскольку, как правило, они обладают большей поляризуемостью (из-за существенно большей плотности) по сравнению с химическими соединениями. В то же время, с физической и технологической точек зрения они могут и не обеспечивать наилучшую структуру из-за нестабильности границ раздела, прежде всего. В нашем случае, когда мы рассматриваем K_α линию Mo, именно молибден является хорошим кандидатом для тяжелого компонента структуры, поскольку его поляризуемость довольно высока, а поглощение относительно мало. Расчеты показывают, что эффективность Mo/Si и Mo/C структур составляет 46.8% и 49.2%, соответственно (при $N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм), что выше эффективности $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ зеркала (41.6%), подробно исследованного выше. В то же время, границы раздела Mo-Si и Mo-C значительно менее стабильные по сравнению с границей $\text{Mo}_2\text{C}-\text{Si}$ из-за химических реакций между соседними материалами и появления интерслоев, состоящих из карбидов или силицидов, толщина которых зачастую превышает 0.5 нм. Интерслои приводят, как правило, к уменьшению эффективности, причем их влияние особенно велико для многослойных зеркал

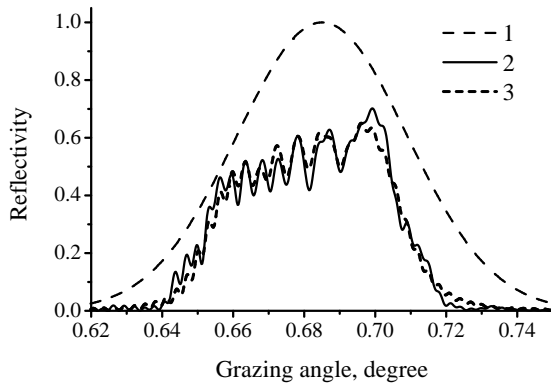


Рис. 3.48. Коэффициент отражения от $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала ($N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм), представляющего собой стопку из шести периодических структур с различным периодом и фиксированным толщинным фактором (2). Для сравнения показан коэффициент отражения от зеркала, оптимизированного с использованием уравнения Эйлера-Лагранжа (3). Кривая 1 - функция источника.

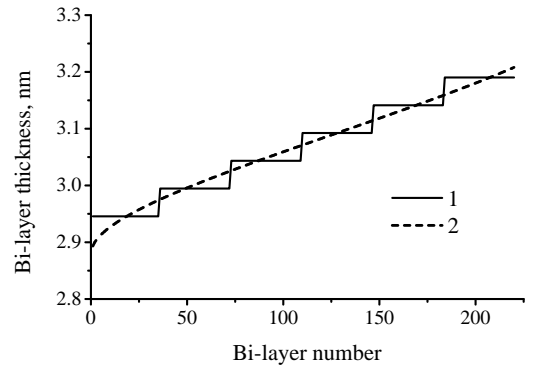


Рис. 3.49. Распределение толщины би-слоев для $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ многослойного зеркала ($N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм), представляющего собой стопку из шести периодических структур (1). Для сравнения показано распределение толщин для зеркала, оптимизированного с использованием уравнения Эйлера-Лагранжа (2).

с малым периодом, как в нашем случае. Например, расчеты показывают, что эффективность Mo/Si зеркала упадет ниже 40%, если толщина MoSi_2 интерслоев превысит 0.5 нм (см. рис.3.50).

Поэтому имеет смысл проанализировать использование соединений молибдена, поскольку обычно они обеспечивают более стабильную границу раздела между соседними слоями. Помимо $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ ($E = 41.6\%$) мы рассмотрели MoSi_2/Si МИС с очень устойчивыми границами раздела даже при высоких температурах [218], поскольку MoSi_2 и Si являются соседями на фазовой диаграмме бинарных сплавов и, тем самым, близки к термодинамическому равновесию друг с другом. К сожалению, такое зеркало имеет очень низкую расчетную эффективность $E = 25\%$ (при $N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм). После этого мы рассмотрели $\text{Mo}/\text{V}_4\text{C}$ МИС, поскольку поглощение V_4C меньше поглощения Si на рабочей длине волны, и нашли что эффективность этой МИС (48.5%) на 1.7% больше, чем у Mo/Si МИС (46.8%), не имеющих интерслоев. Литературные данные свидетельствуют о том, что $\text{Mo}/\text{V}_4\text{C}$ МИС не имеет интерслоев при комнатной температуре, хотя при нагреве на границах раздела образуются карбиды и бориды молибдена [219].

Одной из интересных структур является Mo/C МИС, чья эффективность достигает 49.2%, хотя, конечно, на ее границах раздела будут образовываться интерслои MoC и/или

Таблица 3.8. Эффективность градиентных многослойных зеркал ($N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм, $\lambda = 0.071$ нм), состоящих из различных пар материалов

Состав	Эффективность, %
MoSi ₂ /Si	25.0
W/C	40.3
MoC/C	40.4
Mo ₂ C/Si	41.6
Mo ₂ C/C	43.1
Mo/Si	46.8
Mo/B ₄ C	48.5
Mo/C	49.2
Mo/BN	49.5
Ru/B ₄ C	54.9
Rh/B ₄ C	55.1
Ru/BN	55.6
Rh/BN	55.8

Mo₂C. В то же время расчеты показывают (см. табл.3.8), что сами MoC/C и Mo₂C/C МИС характеризуются довольно высокой эффективностью 40.4% и 43.1%, соответственно. Тем самым, даже в худшем случае, образование интерслоев в Mo/C МИС не ухудшит эффективность ниже 40.4%. Тем не менее, необходимо подчеркнуть, что при практическом изготовлении МИС нестабильность границ раздела усугубляется тем обстоятельством, что структура интерслоев (их толщина и химический состав), как правило, плохо известна. Поэтому МИС с резкими и стабильными границами раздела выглядят более предпочтительными. В этой связи отметим еще одну интересную МИС, а именно, Mo/BN, чья эффективность (49.5%) наибольшая среди всех Mo-содержащих структур. Можно ожидать, что границы раздела этой МИС характеризуются высокой стабильностью, хотя это предположение требует экспериментальной проверки.

Рассмотрим теперь МИС, основанные на других тяжелых материалах и, в первую очередь, W/C структуру. Вольфрам характеризуется очень высокой поляризуемостью, превышающей в 2.1 раза поляризуемость молибдена. В результате необходимое число периодов

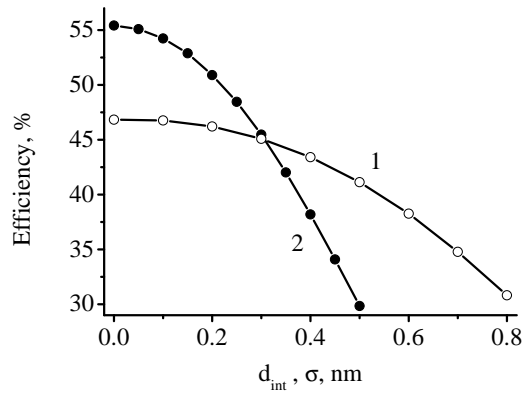


Рис. 3.50. Эффективность Mo/Si МИС ($N = 220$, $\sigma = 0.25$ нм) в зависимости от толщины MoSi₂ интерслоев (1) и Mo/B₄C ($N = 220$, интерслои не учитывались) в зависимости от среднеквадратичной шероховатости границ раздела (2).

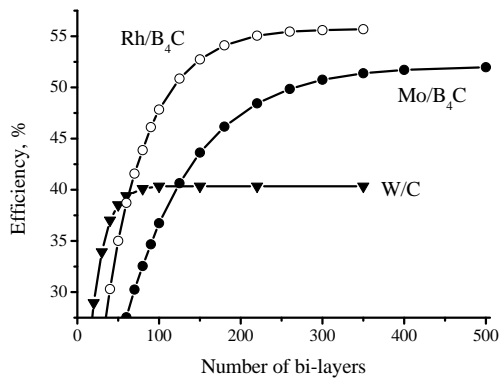


Рис. 3.51. Эффективность в зависимости от числа би-слоев для трех разных МИС ($\sigma = 0.25$ нм). Интерслои не принимались во внимание при расчетах.

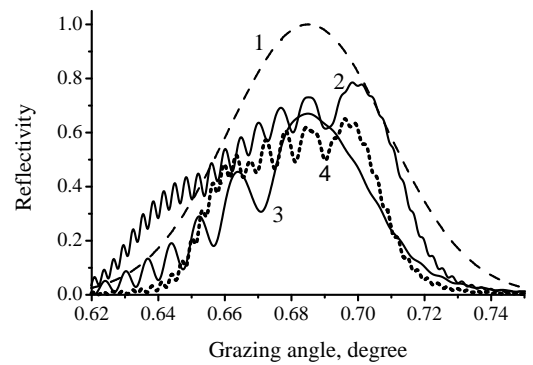


Рис. 3.52. Коэффициент отражения в зависимости от угла скольжения для следующих МИС: Rh/B₄C ($N = 220$, кривая 2), W/C ($N = 100$, кривая 3) и Mo₂C/Si ($N = 220$, кривая 4). Кривая 1 - функция источника.

W/C МИС в 4.4 раза по сравнению с Mo/B₄C зеркалом. Действительно, рис.3.51 показывает, что для достижения максимальной эффективности необходимо лишь 100 периодов для W/C МИС вместо 450 периодов для Mo/B₄C МИС. В то же время, поглощение вольфрама в 10 раз больше, чем у молибдена, и предельная эффективность W/C МИС намного меньше, чем у Mo/B₄C МИС. Малое число периодов может быть полезным на практике, поскольку, если не по другим причинам, шероховатость границ раздела МИС, как правило, возрастает при увеличении числа периодов. В качестве примера отметим (см. рис.3.50), что увеличение среднеквадратичной шероховатости от 0 до 0.5 нм приводит к уменьшению эффективности Mo/B₄C МИС от 55.4% до 29.8%.

В качестве интересных материалов для широкополосных МИС отметим Ru и Rh. Эти

металлы расположены рядом с Мо в периодической таблице элементов и характеризуются похожими оптическими свойствами: довольно большой поляризуемостью и относительно малым поглощением на рабочей длине волны $\lambda = 0.071$ нм. Из-за более высокой плотности поляризуемость, например, Rh в 1.3 раза больше, чем у Мо. В результате необходимое число периодов уменьшается в 1.7 раза от 450 для Мо/V₄C МИС до 270 для Rh/V₄C МИС. В то же время, поглощение излучения в Rh только в 1.5 раза больше, чем в Мо. Тем самым, уменьшение числа периодов не только компенсирует увеличение поглощения, но и приводит к увеличению предельно достижимой эффективности на 3.7%. Это различие еще более выражено (6.6%) при ограниченном числе периодов $N = 220$.

Сравнение кривых отражения от трех из рассмотренных МИС показаны на рис.3.52. Мо₂C/Si МИС была выбрана в качестве базовой в нашем рассмотрении. Эффективность этого зеркала достигает 41.6% при $N = 220$. Rh/V₄C МИС характеризуется очень высокой эффективностью (55.1% при $N = 220$), близкой к предельно достижимой. Наконец, W/C МИС, хотя и имеет меньшую эффективность (40.3%), но требуемое число периодов ($N = 100$) очень мало по сравнению с другими структурами.

3.5. Отражение МР излучения от ламеллярной многослойной структуры

Ниже мы будем рассматривать зависимость коэффициента отражения и эффективности дифракции в зависимости от угла скольжения θ_0 падающей волны, т.е. мы будем анализировать использование ЛМС как обычного зеркала в стандартной $\theta - 2\theta$ геометрии, которая и представляет интерес для РФА. Под разрешением ЛМС будем понимать обратную ширину пика отражения на половине его высоты $1/\Delta\theta$, а угловое расстояние между дифракционными пиками понимается в терминах угла скольжения падающего излучения.

3.5.1. Основные уравнения метода связанных волн

Начнем рассмотрение с ЛМС, имеющей прямоугольную форму ламелл. Основные геометрические параметры ЛМС показаны на рис.3.53. ЛМС образована в двух-компонентной МИС, состоящей из слоев тяжелого (А) и легкого (S) материалов. Для определенности будем рассматривать отражение и дифракцию s - поляризованного излучения в плоскости падения перпендикулярной ламеллам. Особенности отражения p - поляризованного излучения будут рассмотрены ниже. Кусочно-постоянная периодическая функция U описывает профиль ламелл вдоль оси X. Ось Z направлена в глубь подложки, а толщина всей МИС равна L .

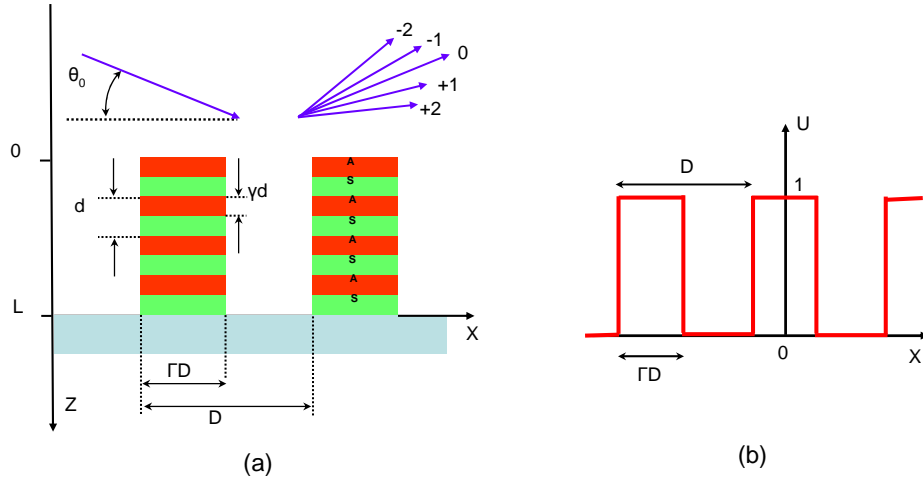


Рис. 3.53. (а) Схема отражения волны от ЛМС. Многослойная структура (МИС) состоит из чередующихся слоев двух материалов А (толщиной γd) и S (толщиной $(1 - \gamma d)$). Период МИС равен d , число периодов N , общая толщина МИС $L = Nd$. Решеточная структура характеризуется периодом D и шириной ламели ΓD . (б) Функция $U(x)$, описывающая профиль ламелл.

Пространственное распределение диэлектрической проницаемости запишем в виде:

$$\varepsilon(x, 0 \leq z \leq L) = 1 - \chi(z)U(x; \Gamma, D), \quad \varepsilon(x, z \leq 0) = 1, \quad \varepsilon(x, z \geq L) = \varepsilon_{sub} \quad (3.52)$$

где $\chi(z)$ - комплексная поляризуемость МИС, изменяющаяся с глубиной, а $\varepsilon_{sub} \equiv 1 - \chi_{sub}$ - диэлектрическая проницаемость подложки. Функцию U , описывающую профиль ламелл, разложим в ряд Фурье:

$$U(x; \Gamma, D) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} U_m \exp(2i\pi n x / D), \quad U_0 = \Gamma, \quad U_{n \neq 0} = \frac{\sin(\pi n \Gamma)}{\pi n} \quad (3.53)$$

Решение двумерного волнового уравнения $\nabla^2 E(x, z) + k^2 \varepsilon(x, z) E(x, z) = 0$ представим в виде разложения Рэлея [220]

$$E(x, z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_n(z) \exp(iq_n x), \quad q_n = q_0 + \frac{2\pi n}{D}, \quad q_0 = k \cos \theta_0; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (3.54)$$

где θ_0 - угол скольжения падающей плоской монохроматической волны, q_n - X-компонента волнового вектора дифрагированной волны n-ного порядка, а k - волновое число в вакууме. Граничные условия нашей задачи состоят в том, что волновое поле в вакууме и внутри подложки представляет дискретную суперпозицию плоских волн, распространяющихся под различными углами к оси X.

Подставив (3.52)-(3.54) в волновое уравнение, получим бесконечную систему связанных дифференциальных уравнений

$$F_n''(z) + \kappa_n^2 F_n(z) = k^2 \chi(z) \sum_n U_{n-m} F_m(z), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.55)$$

с граничными условиями

$$F'_n(0) + i\kappa_n F_n(0) = 2i\kappa_n \delta_{n,0}; \quad F'_n(L) - i\kappa_n^{(s)} F_n(L) = 0 \quad (3.56)$$

где $\kappa_n = (k^2 - q_n^2)^{1/2}$ и $\kappa_n^{(s)} = (k^2 \varepsilon_{sub} - q_n^2)^{1/2}$ - Z-компоненты волнового вектора волны n-ного порядка дифракции в вакууме и подложке, соответственно, а $\delta_{n,0}$ - символ Кронекера. Амплитуды волн, дифрагировавших в вакуум r_n и в глубь подложки t_n , могут быть найдены после решения уравнений (3.55)-(3.56) как $r_n = F_n(0) - \delta_{n,0}$ и $t_n = F_n(L)$.

Если положить $\Gamma = 1$, то ЛМС превращается в обычное многослойное зеркало. При этом все коэффициенты U_{n-m} обращаются в нуль, исключая коэффициент $U_0 = 1$. Уравнения (3.55) преобразуются тогда к одномерному волновому уравнению, которое описывает отражение волны от обычной МИС

$$F''_0(z) + \kappa_0^2 F_0(z) = k^2 \chi(z) F_0(z) \quad (3.57)$$

Ясно, что для практических расчетов число порядков дифракции в бесконечной системе (3.55) должно быть ограничено. Покажем, что система (3.55) удовлетворяет закону сохранения энергии для непоглощающей среды для любого числа учтенных дифракционных порядков. Вместо (3.55) рассмотрим систему уравнений

$$F''_n(z) + \kappa_n^2 F_n(z) = k^2 \chi(z) \sum_{m=-M_1}^{+M_2} U_{n-m} F_m(z), \quad n = -M_1, \dots, M_2 \quad (3.58)$$

с теми же самыми граничными условиями (3.56), а число учтенных дифракционных порядков $M_1 + M_2 + 1$ может быть как конечным, так и бесконечным. Если дифракционный порядок $|n|$ достаточно велик, то Z-компоненты волновых векторов κ_n и $\kappa_n^{(s)}$ становятся чисто мнимыми. Такие волны, называемые эванесцентными, экспоненциально затухают как в вакуум, так и в глубь подложки.

Введем следующую функцию

$$G_n \equiv F_n^* \frac{d^2 F_n}{dz^2} - F_n \frac{d^2 F_n^*}{dz^2} \equiv \frac{d}{dz} \left(F_n^* \frac{dF_n}{dz} - F_n \frac{dF_n^*}{dz} \right) \quad (3.59)$$

Используя (3.58) и учитывая, что $U_{n-m}^* = U_{m-n}$, а $\kappa_n^2 = (\kappa_n^*)^2$ как для чисто вещественных, так и для чисто мнимых κ_n , находим, что

$$G_n = k^2 \chi \sum_{m=-M_1}^{+M_2} (U_{n-m} F_n^* F_m - U_{m-n} F_n F_m^*)$$

и, следовательно, $\sum_{n=-M_1}^{+M_2} G_n = 0$. Учитывая крайнее правое равенство в (3.59), заключаем, что функция

$$Q \equiv \sum_{n=-M_1}^{+M_2} \left(F_n^* \frac{dF_n}{dz} - F_n \frac{dF_n^*}{dz} \right) = \text{const}$$

не зависит от z . Вычисляя значения Q при $z = 0$ и $z = L$ с использованием (3.56) и приравняв их, находим окончательное выражение

$$\sum_{n=-M_1}^{+M_2} \left(|r_n|^2 \frac{\operatorname{Re} \kappa_n}{\kappa_0} + |t_n|^2 \frac{\operatorname{Re} \kappa_n^{(s)}}{\kappa_0} \right) \equiv 1 \quad (3.60)$$

которое и демонстрирует выполнение закона сохранения энергии, даже если в системе (3.58) учтено лишь конечное число дифракционных порядков.

Действительно, поток излучения через площадку S , расположенной перпендикулярно к оси Z , равен $Q = \operatorname{Im}(E^* \partial E / \partial z) S / k$. Падающий поток равен $Q_0 = \kappa_0 S / k$, а дифракционные потоки n -го порядка в вакуум и в глубь подложки равны $Q_n = -|r_n|^2 \operatorname{Re} \kappa_n S / k$ и $Q_n^{(s)} = |t_n|^2 \operatorname{Re} \kappa_n^{(s)} S / k$, соответственно. Тем самым, выражение (3.60) означает, что падающий поток распределяется по всем дифракционным порядкам, учтенным в системе (3.58), независимо от их числа. Ясно, что эванесцентные волны, для которых $\operatorname{Re} \kappa_n = 0$, не дают вклада в потоки.

Представим поле дифрагированной волны n -ного порядка как суперпозицию двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях вдоль оси Z :

$$F_n(z) = A_n(z) \exp(i\kappa_n z) + C_n(z) \exp(-i\kappa_n z) \quad (3.61)$$

Для однозначного определения функций $A_n(z)$ и $C_n(z)$ наложим дополнительное условие

$$A_n'(z) \exp(i\kappa_n z) + C_n'(z) \exp(-i\kappa_n z) = 0 \quad (3.62)$$

Подставив (3.61)-(3.62) в (3.55), получим систему дифференциальных уравнений первого порядка для амплитуд отраженных и прошедших волн $A_n(z)$ и $C_n(z)$ [A52]:

$$\begin{aligned} \frac{dA_n(z)}{dz} &= -\frac{ik^2}{2\kappa_n} \chi(z) \sum_m U_{n-m} [A_m(z) e^{i(\kappa_m - \kappa_n)z} + C_m(z) e^{-i(\kappa_m - \kappa_n)z}] \\ \frac{dC_n(z)}{dz} &= +\frac{ik^2}{2\kappa_n} \chi(z) \sum_m U_{n-m} [A_m(z) e^{i(\kappa_m + \kappa_n)z} + C_m(z) e^{-i(\kappa_m + \kappa_n)z}] \end{aligned} \quad (3.63)$$

с граничными условиями

$$A_n(0) = \delta_{n,0}; \quad C_n(L) = 0 \quad (3.64)$$

В (3.64) диэлектрическая проницаемость подложки положена равной единице, т.е. мы пренебрегли ее влиянием на отражение и дифракцию падающей волны. Представление дифрагированного поля в виде (3.61)-(3.62) оказывается особенно полезным в МР диапазоне длин волн, где поляризуемость всех материалов $\chi = 1 - \varepsilon$ очень мала, так что амплитуды $A_n(z)$ и $C_n(z)$ оказываются медленно меняющимися функциями z по сравнению с быстро осциллирующими экспонентами в (3.61), если угол скольжения падающей волны лежит вне области ПВО. Решив систему (3.63)-(3.64), находим амплитуды волн, дифрагированных в вакуум ($r_n = C_n(0)$) и в глубь подложки ($t_n = A_n(L)$).

3.5.2. Численные расчеты эффективности дифракции от ЛМС

Автором создана специальная компьютерная программа для численного решения системы уравнений (3.63)-(3.64) методом Рунге-Кутты (см., например, [221]). Программа применима для любого распределения диэлектрической проницаемости по глубине МИС, т.е. для периодических и аperiodических структур с резким или плавным изменением диэлектрической проницаемости на границах раздела соседних материалов, двух-компонентных или многокомпонентных МИС, любого числа слоев МИС, а также для любого значения периодов МИС и ЛМС. Более того, программа применима для любой формы ламелл и учитывает наличие пассивирующего слоя на стенках ламелл, о чем подробнее будет сказано ниже при обсуждении экспериментальных результатов.

Единственная проблема численного решения системы дифференциальных уравнений первого порядка (3.63)-(3.64) состоит в том, что для функций $A_n(z)$ граничные условия наложены при $z = 0$, а для $C_n(z)$ - при $z = L$. Поэтому пошаговое численное решение системы не может быть начато ни с вершины ЛМС, ни с подложки. Для преодоления проблемы использована следующая процедура. Обозначим искомое решение, удовлетворяющее граничным условиям (3.64), в виде вектора

$$\mathbf{Y}(z) \equiv \{A_{-M_1}(z), \dots, A_{M_2}(z), C_{-M_1}(z), \dots, C_{M_2}(z)\},$$

где $M_1 + M_2 + 1 = M$ - число учитываемых порядков дифракции. Рассмотрим теперь $M + 1$ других решений системы (3.63)

$$\mathbf{X}_j(z) \equiv \{A_{-M_1}^{(j)}(z), \dots, A_{M_2}^{(j)}(z), C_{-M_1}^{(j)}(z), \dots, C_{M_2}^{(j)}(z)\}; \quad j = 0, \dots, M \quad (3.65)$$

для которых граничные условия наложены при $z = 0$, а именно,

$$\text{Для функции } \mathbf{X}_0 : \quad A_m^{(0)}(0) = \delta_{m,0}; \quad C_m^{(0)}(0) = 0 \quad (3.66)$$

$$\text{Для функций } \mathbf{X}_{j \neq 0} : \quad A_m^{(j)}(0) = 0; \quad C_m^{(j)}(0) = \delta_{m,j}$$

Представим искомое решение в виде линейной комбинации функций (3.65): $\mathbf{Y}(z) = \sum_{j=0}^M \beta_j \mathbf{X}_j(z)$, где β_j - неизвестные параметры, подлежащие определению. Используя граничные условия для функций \mathbf{Y} и \mathbf{X}_j при $z = 0$, немедленно получаем, что

$$\beta_0 = 1; \quad \beta_j = r_{j-M_1-1}, \quad j = 1, \dots, M = M_1 + M_2 + 1 \quad (3.67)$$

Из граничных условий при $z = L$ получаем систему линейных уравнений для определения параметров β_j :

$$\sum_{j=1}^M \beta_j B_m^{(j)}(L) = -B_m^{(0)}(L); \quad m = -M_1, \dots, M_2 \quad (3.68)$$

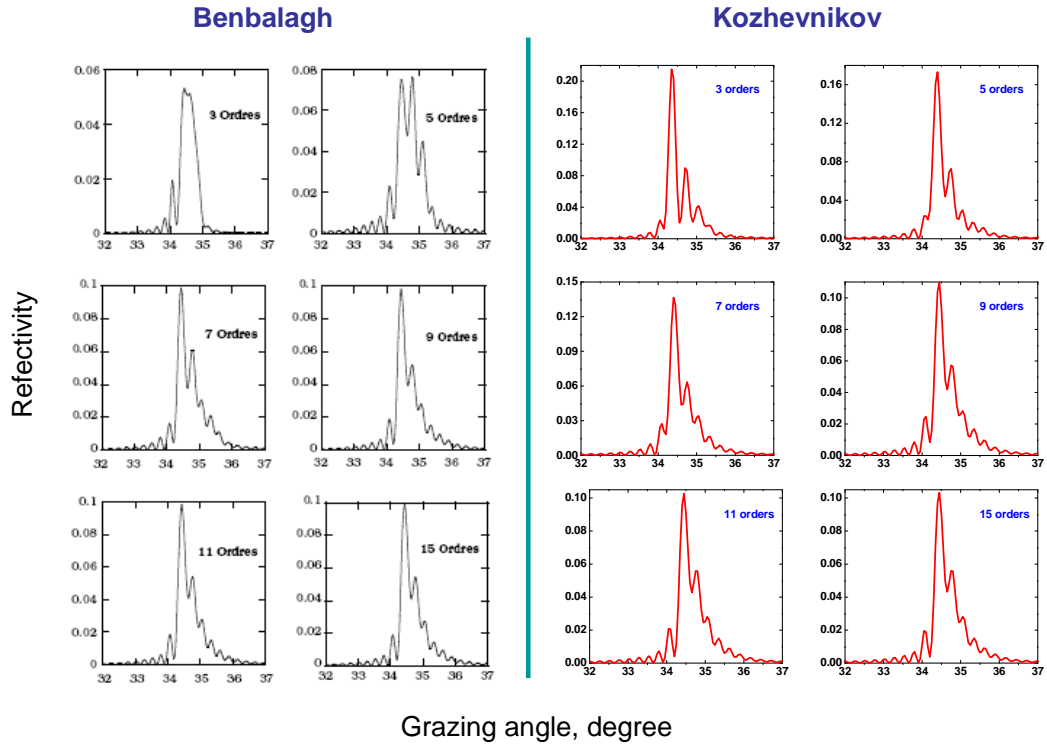


Рис. 3.54. Коэффициент отражения МР излучения ($E = 183.4$ эВ) в зависимости от угла скольжения падающего излучения от Mo/V₄C ЛМС ($D = 2$ мкм, $\Gamma = 0.3$, $N = 150$, $d = 6$ нм, $\gamma = 0.33$) при разном числе учтенных порядков дифракции. Справа показаны наши расчеты, выполненные с использованием МСВ [A52], слева - расчеты Venbalagh [222] с использованием модального подхода.

Таким образом, решая систему дифференциальных уравнений (3.63) для функций (3.65) - (3.66), находим значения амплитуд прошедших волн $B_m^{(j)}(L)$, после чего из системы линейных алгебраических уравнений (3.68) определяем параметры β_j и, в силу (3.67), - амплитуды волн r_n , дифрагированных в вакуум.

Прежде всего, мы сравним наши расчеты коэффициента отражения (эффективности дифракции 0-го порядка) МР излучения ($E = 183.4$ эВ) от Mo/V₄C ЛМС ($D = 2$ мкм, $\Gamma = 0.3$, $N = 150$, $d = 6$ нм, $\gamma = 0.33$) с результатами, полученными Venbalagh в работе [222] с использованием модального подхода [198]. Коэффициент отражения показан на рис.3.54 в зависимости от угла скольжения θ_0 падающего излучения и для различного числа порядков дифракции, учтенных при расчетах. Наши результаты показаны в правой части рисунка, а результаты Venbalagh - в левой его части.

В наших расчетах пиковое значение коэффициента отражения сначала падает с увеличением числа дифракционных порядков, учтенных при решении системы уравнений (3.55)-(3.56), а затем выходит на постоянный уровень, начиная с 11 учтенных порядков дифракции. Такое поведения пика отражения вполне понятно, поскольку, как отмечалось выше, падающая

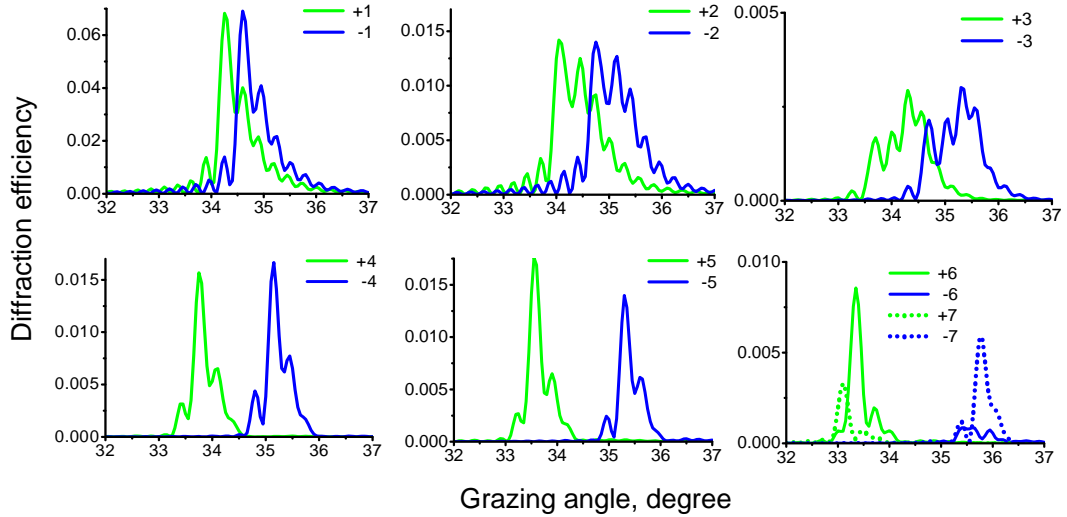


Рис. 3.55. Эффективность дифракции различного порядка (при $E = 183.4$ эВ) в зависимости от угла скольжения падающего излучения от $\text{Mo}/\text{V}_4\text{C}$ ЛМС. Параметры ЛМС те же самые, что и на рис.3.54. При расчетах учтены 15 порядков дифракции.

мощность распределяется между всеми принятыми во внимание порядками дифракции.

В расчетах, проведенных Venbalagh et al модальным методом (левая часть рис.3.54), наоборот, пиковое значение коэффициента отражения монотонно увеличивается при увеличении числа учтенных порядков дифракции. Тем не менее, если число учтенных дифракционных порядков достаточно велико, то оба метода дают идентичные результаты. Так, пики отражения практически неразличимы, если при расчетах учтены 15 порядков дифракции. В частности, пиковое значение коэффициента отражения оказалось равным 10.3% в наших расчетах и 10.0% в расчетах Venbalagh et al.

На рис.3.55 показаны эффективности дифракции более высоких порядков в зависимости от угла скольжения падающей волны. Расчеты проведены при учете 15-ти дифракционных порядков в системе (3.55)-(3.56). Видно, что дифракционные пики низких порядков $|n| \leq 4$ расположены внутри пика отражения $\theta \sim 34 - 35^\circ$, хотя и слегка сдвинуты относительно него. Это означает сильную связь дифрагированных волн с падающей, в результате чего значительная доля падающей интенсивности распределяется по дифракционным порядкам, а коэффициент отражения ($\sim 10\%$) уменьшается почти в четыре раза по сравнению с обычной МИС ($\sim 38\%$). В то же время дифракционные пики более высоких порядков $|n| \geq 6$ расположены вне пика отражения, т.е. практически не связаны с зеркально отраженной волной и слабо влияют на ее интенсивность, что и демонстрируется рис.3.54.

При уменьшении периода решетки D угловое расстояние между дифракционными пиками $\delta\theta \approx d/D$ увеличивается. Поэтому можно ожидать, что влияние дифракционных поряд-

ков на коэффициент зеркального отражения будет уменьшаться и, в конце концов, станет пренебрежимо малым. Такой режим работы ЛМС ниже будем называть одномодовым. В этом режиме мы можем пренебречь всеми дифракционными порядками кроме нулевого и свести систему (3.55) к единственному уравнению

$$F_0''(z) + \kappa_0^2 F_0(z) = k^2 \Gamma \chi(z) F_0(z) \quad (3.69)$$

Это уравнение отличается от (3.57), описывающего отражение от обычной МИС, только параметром $\Gamma < 1$, стоящим в виде сомножителя перед поляризуемостью $\chi(z)$. Поскольку поляризуемость вещества в МР диапазоне пропорциональна его плотности, мы можем заключить, что отражение МР волны от одномодовой ЛМС эквивалентно отражению от обычной МИС, плотность обоих материалов которой уменьшена на фактор Γ . Поскольку ширина пика отражения обычной МИС $\Delta\theta$ определяется разницей в поляризуемостях материалов, составляющих структуру (см. (3.4)), ширина пика отражения от ЛМС тоже уменьшится на фактор Γ . Для одномодового режима необходимо, чтобы эта ширина была бы значительно меньше углового расстояния между пиками $\delta\theta \approx d/D$. Тогда получаем окончательное условие одномодового режима

$$\Gamma D \cdot \Delta\theta \ll d \quad (3.70)$$

которое определяется толщиной ламеллы ΓD , но не периодом решетки.

Как известно (см., например, [192]), максимально достижимый коэффициент отражения от МИС полностью определяется двумя параметрами

$$f = \frac{\operatorname{Re}(\chi_A - \chi_S)}{\operatorname{Im}(\chi_A - \chi_S)} \quad \text{и} \quad g = \frac{\operatorname{Im}\chi_S}{\operatorname{Im}(\chi_A - \chi_S)} \quad (3.71)$$

где χ_A и χ_S - поляризуемость материалов, составляющих МИС. Ясно, что пропорциональное изменение плотности обоих материалов не изменяет значения этих параметров. Тем самым, в отличие от обычной МИС, ширина полосы отражения от одномодовой ЛМС может быть сколь угодно малой при сохранении его пикового значения, соответствующего обычной МИС. Естественно, что для достижения такого разрешения число периодов многослойной структуры должно быть увеличено в $1/\Gamma$ раз. Сравнив пики отражения от Мо/В₄С ЛМС с различной шириной ламелл, мы нашли, что "много меньше" в (3.70) означает меньше, чем в 3 раза, по крайней мере. При этом разница в пиковых значениях коэффициента отражения от ЛМС и от обычной МИС не превышает 1%.

Рисунки 3.56 и 3.57 иллюстрируют эти выводы. На рис.3.56 показаны эффективности дифракции нулевого и ± 1 порядков от Мо/В₄С ЛМС, параметры которой те же самые, что и на рис.3.54, за тем исключением, что ширина ламелл уменьшена до $\Gamma D = 100$ нм, а период

ЛМС уменьшен до $D = 0.3$ мкм, т.е. $\Gamma = 1/3$. В результате угловое расстояние между дифракционными пиками увеличилось почти в 7 раз, так что условие (3.70) одномодового режима оказывается выполненным, а интенсивность дифрагированных волн очень мала внутри пика зеркального отражения. Рисунок демонстрирует, что коэффициент отражения увеличился почти в 4 раза по сравнению с длиннопериодной ЛМС на рис.3.54, поскольку падающая волна возбуждает лишь единственную дифракционную нулевого порядка и ее интенсивность более не распределяется по разным дифракционным порядкам. Точечная кривая соответствует коэффициенту отражения от обычной МИС, плотность веществ которой уменьшена на фактор $\Gamma = 1/3$. Как видно, согласие между сплошной и точечной кривыми превосходное. Тем самым, для расчета коэффициента отражения от ЛМС, работающих в одномодовом режиме, сложные дифракционные теории оказываются вообще не нужны.

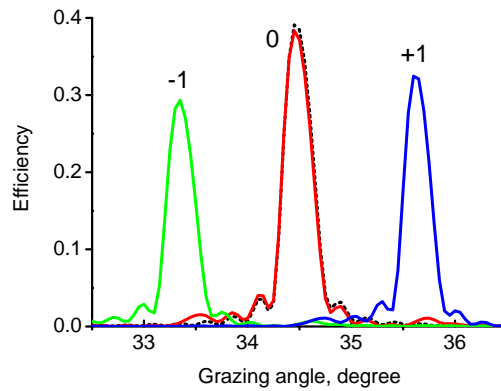


Рис. 3.56. Эффективность дифракции нулевого и ± 1 порядков от $\text{Mo}/\text{V}_4\text{C}$ ЛМС с периодом $D = 0.3$ мкм ($E = 183.4$ эВ, сплошные кривые) в зависимости от угла скольжения падающего излучения. Остальные параметры ЛМС те же самые, что и на рис.3.54. При расчетах учтены 11 порядков дифракции. Точечная кривая - коэффициент отражения от обычной МИС, но с плотностью вещества, уменьшенной на фактор Γ .

На рис.3.57 показана кривая отражения от обычной $\text{Mo}/\text{V}_4\text{C}$ МИС с теми же параметрами, что и на рис.3.54, но при числе периодов $N = 100$. Угловая ширина Брэгговского пика $\Delta\theta = 0.82^\circ$. Три другие кривые показывают коэффициент отражения от ЛМС с различными значениями Γ и D , но при фиксированной ширине ламелл $\Gamma D = 70$ нм, так что условие (3.70) выполнено. Число периодов структуры N выбиралось достаточно большим, чтобы обеспечить максимально достижимое значение пикового коэффициента отражения, и изменялось как $N = 100/\Gamma$. Сравнивая кривые 2-4, заключаем, что действительно, разрешение ЛМС увеличивается как $1/\Gamma$. Угловая ширина кривой 4 составляет всего лишь 0.083° , что примерно в 1.5 раза меньше, чем минимально возможная ширина пика отражения от

Mo/V₄C МИС при $E = 183.4$ эВ (кривая 4 на рис.3.2). В то же время, пиковое значение коэффициента отражения остается тем же самым, что и для обычной МИС.

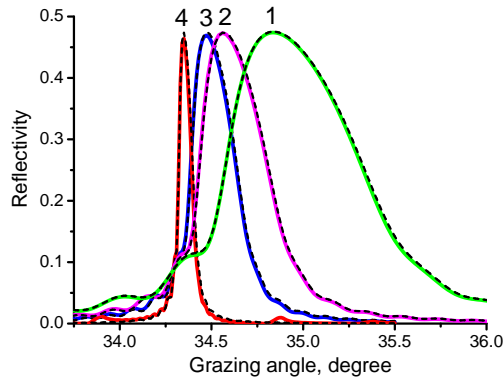


Рис. 3.57. Коэффициент отражения от обычной Mo/V₄C МИС при $E = 183.4$ эВ в зависимости от угла скольжения падающего излучения (1) и от трех ЛМС (2-4) с одной и той шириной ламелл $GD = 70$ нм, но различными значениями параметров Γ и D и разным числом периодов МИС N : $\Gamma = 1/2$, $N = 200$, $D = 140$ нм (2); $\Gamma = 1/3$, $N = 300$, $D = 210$ нм (3); $\Gamma = 1/10$, $N = 1000$, $D = 700$ нм (4). Остальные параметры ЛМС те же самые, что и на рис.3.54. Сплошные кривые рассчитаны по методу связанных волн с учетом 11 порядков дифракции, а пунктирные - с использованием простых аналитических выражений (3.77)-(3.78).

Теперь мы можем сформулировать аналитические принципы конструирования ЛМС [A55]:

1. Многослойная структура, включая составляющие ее материалы и геометрические параметры, выбирается, исходя из достижения максимального коэффициента отражения на рабочей длине волны в соответствии с принципами, изложенными в [192].
2. Параметр Γ выбирается из условия требуемого разрешения ЛМС.
3. Число периодов многослойной структуры N должно быть увеличено на фактор $1/\Gamma$ по сравнению с обычной МИС.
4. Период ЛМС D выбирается таким, чтобы было выполнено условие одномодового режима (3.70).

Если параметры ЛМС выбраны в соответствии с этими принципами, то ее разрешение будет увеличено на фактор $1/\Gamma$ по сравнению с обычной МИС, а пиковое значение коэффициента отражения не изменится. Конечно, на практике разрешение ЛМС будет ограничено технологическими факторами и, прежде всего, возможностями по напылению и травлению МИС с очень большим числом периодов и малой шириной ламелл.

3.5.3. Аналитическое решение для коэффициента отражения от одномодовой ЛМС

Поскольку одномодовый режим работы ЛМС представляется наиболее важным с практической точки зрения, проанализируем его более детально. Оставим в системе уравнений (3.63) только падающую и зеркально отраженные волны

$$\begin{aligned}\frac{dA_0(z)}{dz} &= -\frac{ik^2}{2\kappa_0}\Gamma\chi(z) [A_0(z) + C_0(z)e^{-2i\kappa_0z}] \\ \frac{dC_0(z)}{dz} &= +\frac{ik^2}{2\kappa_0}\Gamma\chi(z) [A_0(z)e^{2i\kappa_0z} + C_0(z)]\end{aligned}\quad (3.72)$$

где $A_0(0) = 1$ и $C_0(L) = 0$. Предположим, что МИС состоит из двух веществ, причем границы раздела между ними резкие. Тогда

$$\chi(z) = \chi_S + (\chi_A - \chi_S) \cdot u(z) \quad (3.73)$$

где кусочно-постоянная функция u схожа с функцией U и может быть разложена в ряд Фурье:

$$u(z; \Gamma, D) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} u_m \exp(2i\pi n z/D), \quad u_0 = \gamma, \quad u_{n \neq 0} = \frac{1 - \exp(-2i\pi n \Gamma)}{2i\pi n} \quad (3.74)$$

Ограничимся наиболее важным случаем падения волны внутри или поблизости от Брэгговского резонанса порядка j , т.е. предположим, что $j\lambda \approx 2d \sin \theta_0$ или, что то же самое, $\kappa_0 \approx \pi j/d$. Подставляя (3.73)-(3.74) в систему уравнений (3.72), получим

$$\begin{aligned}\frac{dA_0(z)}{dz} + \frac{ik^2}{2\kappa_0}\Gamma [\bar{\chi}A_0(z) + (\chi_A - \chi_S)u_j C_0(z)e^{2i(\pi j/d - \kappa_0)z}] &= \Delta A(z) \\ \frac{dC_0(z)}{dz} - \frac{ik^2}{2\kappa_0}\Gamma [\bar{\chi}C_0(z) + (\chi_A - \chi_S)u_{-j}A_0(z)e^{-2i(\pi j/d - \kappa_0)z}] &= \Delta C(z)\end{aligned}\quad (3.75)$$

где $\bar{\chi} = \chi_A \gamma + \chi_S(1 - \gamma)$ - средняя поляризуемость МИС. Левая часть уравнений (3.75) содержит все слагаемые, медленно меняющиеся по z . Функции $\Delta A(z)$ и $\Delta C(z)$ обозначают все другие быстро осциллирующие члены, которые практически не влияют на амплитуды $A_0(z)$ и $C_0(z)$. Чтобы убедиться в этом, мы можем усреднить уравнения (3.75) по интервалу Δz , который существенно больше периода осцилляций функций $\Delta A(z)$ и $\Delta C(z)$, но значительно меньше характерного масштаба изменения амплитуд $A_0(z)$ и $C_0(z)$.

Если ввести $a_0(z) \equiv A_0(z) \cdot \exp[-i(\pi j/d - \kappa_0)z]$ и $c_0(z) \equiv C_0(z) \cdot \exp[i(\pi j/d - \kappa_0)z]$, то получим систему связанных уравнений с постоянными коэффициентами

$$\frac{da_0(z)}{dz} + i \left(\frac{\pi j}{d} - \kappa_0 + \frac{k^2}{2\kappa_0}\Gamma\bar{\chi} \right) a_0(z) + i \frac{k^2}{2\kappa_0}(\chi_A - \chi_S)\Gamma u_j c_0(z) = 0 \quad (3.76)$$

$$\frac{dc_0(z)}{dz} - i \left(\frac{\pi j}{d} - \kappa_0 + \frac{k^2}{2\kappa_0} \Gamma \bar{\chi} \right) c_0(z) - i \frac{k^2}{2\kappa_0} (\chi_A - \chi_S) \Gamma u_j a_0(z) = 0$$

с теми же самыми граничными условиями $a_0(0) = 1$ и $c_0(L) = 0$, как в (3.72). Решая (3.76), получаем выражение для коэффициента отражения от ЛМС [А55]:

$$R_0 = \left| \frac{B_- \tanh(SNd)}{b \tanh(SNd) - i \sqrt{B_+ B_-} b^2} \right|^2 \quad (3.77)$$

$$b = \bar{\chi} \Gamma + 2 \sin \theta_0 \left(\frac{j\lambda}{2d} - \sin \theta_0 \right); \quad B_{\pm} = (\chi_A - \chi_S) u_{\pm j} \Gamma; \quad S = \frac{k}{2 \sin \theta_0} \sqrt{B_+ B_- - b^2} \quad (3.78)$$

где параметры b , B_{\pm} и S характеризуют, соответственно, отклонение от Брэгговского резонанса, модуляцию структуры, и типичный масштаб изменения амплитуд $A_0(z)$ и $C_0(z)$, т.е. глубину эстинкции.

Уравнение (3.77) было впервые получено Виноградовым и Зельдовичем [223, 224] для обычной МИС. Однако они использовали несколько иной математический подход и, в отличие от нашего, пренебрегали второй производной по z от медленно меняющихся амплитуд. В результате, выражение для Брэгговского параметра b несколько отличается от нашего. На рис.3.58 представлено сравнение кривых отражения от Мо/В₄С МИС (т.е. при $\Gamma = 1$), рассчитанных с использованием трех разных подходов. Кривая 1 - точный расчет по методу Паррата, кривая 2 рассчитана по формулам (3.77)-(3.78) и, наконец, кривая 3 - расчет по формулам Виноградова и Зельдовича. Видно, что расчет с использованием Брэгговского параметра b , полученным выше, лучше согласуется с точным расчетом вне Брэгговского пика, по крайней мере.

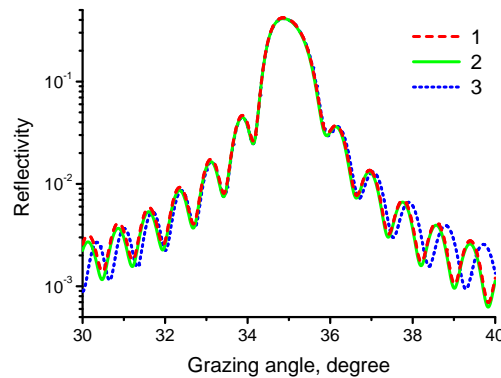


Рис. 3.58. Коэффициент отражения от обычной Мо/В₄С МИС ($d = 6$ нм, $\gamma = 0.34$, $N = 50$) в зависимости от угла скольжения падающего излучения при $E = 183.4$ эВ. Расчеты проведены с использованием точного алгоритма (1), простых аналитических формул (3.77)-(3.78), полученных выше, (2) и по формулам, полученным в работах [223, 224] (3).

Из (3.77) легко получить обобщенное Брэгговское условие отражения для полубесконечной МИС ($N \rightarrow \infty$), включающего эффекты поглощения и преломления

$$\frac{j\lambda}{2d} = \sin \theta_0 - \frac{\Gamma}{2 \sin \theta_0} \left[\operatorname{Re} \bar{\chi} - \operatorname{Re}(\chi_A - \chi_S) \cdot \frac{\operatorname{Im}(\chi_A - \chi_S)}{\operatorname{Im} \bar{\chi}} \cdot \frac{\sin^2(\pi j \gamma)}{(\pi j)^2} \right] \quad (3.79)$$

Если условие Брэгга выполнено, то коэффициент отражения достигает своего пикового значения, которое может быть записано очень простым образом [192]:

$$R_{peak} = \frac{1-w}{1+w}; \quad w = \sqrt{\frac{1-y^2}{1+f^2y^2}}; \quad y = \frac{\operatorname{Im}(\chi_A - \chi_S)}{\operatorname{Im} \bar{\chi}} \cdot \frac{\sin(\pi j \gamma)}{\pi j} \quad (3.80)$$

где f определено в (3.71).

Уравнение (3.80) наглядно показывает, что пиковый коэффициент отражения не зависит от параметров одномодовой решетки и соответствует обычному многослойному зеркалу. Напротив, глубина проникновения волны в глубь структуры H , а следовательно, и разрешение ЛМС обратно пропорционально параметру Γ

$$H \sim \frac{1}{S} = \frac{\lambda \sin \theta_0}{\pi \Gamma \bar{\chi} \cdot \sqrt{(1-y^2)(1+f^2y^2)}} \quad (3.81)$$

Тем самым, ЛМС позволяет значительно увеличить разрешение по сравнению с обычной МИС без потерь в пиковом коэффициенте отражения, о чем уже говорилось выше. Как и для обычных МИС [223, 224], пиковый коэффициент отражения (3.80) достигает максимально возможного значения, если толщинный фактор МИС γ удовлетворяет уравнению

$$\tan(\pi j \gamma) = \pi j [\gamma + \operatorname{Im} \chi_S / \operatorname{Im}(\chi_A - \chi_S)] \quad (3.82)$$

Рисунок 3.58, где сплошные кривые были рассчитаны выше с использованием строгой дифракционной теории, демонстрирует точность простых аналитических выражений (3.77)-(3.78) для описания коэффициента отражения от одномодовой ЛМС (пунктирные кривые). Согласие между кривыми превосходное, а различие в пиковом значении коэффициента отражения не превышает 0.6%. Отметим, что сдвиг в положении пика отражения объясняется зависимостью от фактора Γ Брэгговского условия (3.79), поскольку "эффективные" поляризуемости обоих материалов ЛМС ему пропорциональны.

3.5.4. Аналитическое решение для эффективности дифракции от одномодовой ЛМС

В предыдущем разделе мы проанализировали коэффициент отражения от одномодовой ЛМС применительно к ее использованию в качестве обычного зеркала, например, в РФА.

В то же время, ЛМС может использоваться и как обычная дифракционная решетка, раскладывая падающее излучение в спектр, поскольку угол дифракции m -ного порядка θ_m зависит от длины волны излучения и связан с углом скольжения θ_0 падающей волны через уравнение решетки $\cos \theta_m = \cos \theta_0 + m\lambda/D$. В этом разделе мы проанализируем эффективность дифракции произвольного порядка m , ограничиваясь, как и выше, диапазоном углов и длин волн близких к квази-брэгговскому резонансу, так что $j\lambda \approx d(\sin \theta_0 + \sin \theta_m)$ или, эквивалентно, $\kappa_0 + \kappa_m \approx 2\pi j/d$. Здесь индекс j относится к порядку Брэгговского отражения от МИС, а индекс m - к порядку дифракции от решетки. Квази-брэгговский резонанс означает положительную интерференцию волн, дифрагированных от всех слоев МИС, т.е. высокую дифракционную эффективность, и эквивалентен условию блеска в теории обычных дифракционных решеток скользящего падения. Кроме того, ограничим рассмотрение случаем одномодовых ЛМС.

Непосредственно из уравнений (3.63) можно увидеть, что только амплитуды $A_0(z)$ и $C_m(z)$ резонансно взаимодействуют друг с другом. Поэтому мы можем пренебречь всеми другими уравнениями в системе и, введя

$$a_0(z) \equiv A_0(z) \exp \left[-i \left(\frac{\pi j}{d} - \frac{\kappa_0 + \kappa_m}{2} \right) z \right]; \quad c_m(z) \equiv C_m(z) \exp \left[i \left(\frac{\pi j}{d} - \frac{\kappa_0 + \kappa_m}{2} \right) z \right]$$

получить систему дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами

$$\frac{da_0(z)}{dz} + i \left(\frac{\pi j}{d} - \frac{\kappa_0 + \kappa_m}{2} + \frac{k^2}{2\kappa_0} \Gamma \bar{\chi} \right) a_0(z) + i \frac{k^2}{2\kappa_0} (\chi_A - \chi_S) u_j U_{-m} c_m(z) = 0 \quad (3.83)$$

$$\frac{dc_m(z)}{dz} - i \left(\frac{\pi j}{d} - \frac{\kappa_0 + \kappa_m}{2} + \frac{k^2}{2\kappa_0} \Gamma \bar{\chi} \right) c_m(z) - i \frac{k^2}{2\kappa_m} (\chi_A - \chi_S) u_{-j} U_m a_0(z) = 0$$

где $a_0(0) = 1$ и $c_m(L) = 0$.

Решив систему (3.83), находим выражение для эффективности дифракции $R_n \equiv |r_n|^2 \text{Re} \kappa_n / \kappa_0$, которое имеет тот же вид, что и (3.77), но параметры b , B_{\pm} , S несколько отличаются от (3.78) [A55]:

$$B_{\pm} = (\chi_A - \chi_S) u_{\pm j} U_{\mp}; \quad S = \frac{k}{2\sqrt{\sin \theta_0 \sin \theta_m}} \sqrt{B_+ B_- b^2}; \quad (3.84)$$

$$b = \frac{\sin \theta_0 + \sin \theta_m}{2\sqrt{\sin \theta_0 \sin \theta_m}} \bar{\chi} \Gamma + 2\sqrt{\sin \theta_0 \sin \theta_m} \left(\frac{j\lambda}{2d} - \frac{\sin \theta_0 + \sin \theta_m}{2} \right)$$

где угол дифракции θ_m не является независимой переменной, а связан с θ_0 уравнением решетки.

Подобно (3.79), условие квази-брэгговского резонанса записывается в виде

$$\frac{j\lambda}{2d} = \frac{\sin \theta_0 + \sin \theta_m}{2} - \frac{\sin \theta_0 + \sin \theta_m}{4 \sin \theta_0 \sin \theta_m} \Gamma \text{Re} \bar{\chi} + \quad (3.85)$$

$$+ \frac{\operatorname{Re}(\chi_A - \chi_S)}{\sin \theta_0 + \sin \theta_m} \cdot \frac{\operatorname{Im}(\chi_A - \chi_S)}{\operatorname{Im} \bar{\chi}} \cdot \frac{\sin^2(\pi j \gamma)}{(\pi j)^2} \cdot \frac{\sin^2(\pi m \Gamma)}{(\pi m)^2 \Gamma}$$

Пиковое значение эффективности дифракции имеет тот же вид, что и (3.80), но параметр y более сложный:

$$y = \frac{\operatorname{Im}(\chi_A - \chi_S)}{\operatorname{Im} \bar{\chi}} \cdot \frac{\sin(\pi j \gamma)}{\pi j} \cdot \frac{2\sqrt{\sin \theta_0 \sin \theta_m}}{\sin \theta_0 + \sin \theta_m} \cdot \frac{\sin(\pi m \Gamma)}{\pi m \Gamma} \quad (3.86)$$

Если положить $m = 0$ в (3.83)-(3.86), то получим выражения (3.76)-(3.79) для коэффициента зеркального отражения.

Чтобы убедиться в правильности полученных выражений, сравним их с результатами расчета по строгой дифракционной теории. В качестве примера сравнения рассмотрим рис.3.59, где показаны дифракционные пики от нулевого до -5 порядка в зависимости от угла скольжения падающего излучения. Сплошные кривые - результат расчета по строгой дифракционной теории (МСВ), где 9 порядков дифракции от +2-го до -6-го были приняты во внимание. Пунктирные кривые рассчитаны с помощью простых аналитических выражений (3.77) и (3.84). Параметры МИС те же самые, что и на рис.3.54, за исключением числа периодов $N = 300$. Период ЛМС $D = 210$ нм, а ширина ламелл $\Gamma D = 70$ нм. Согласие между кривыми превосходное с разницей в пиках эффективности, не превышающей 0.6%. Исключение составляет чрезвычайно малый дифракционный пик -3-го порядка. В аналитическом подходе его эффективность равна 0, поскольку $\Gamma = 1/3$ и, следовательно, $B_{\pm} = 0$. Появление пика в точных численных расчетах объясняется взаимодействием дифракционной волны -3-го порядка с другими дифракционными волнами, но не с падающей волной, т.е. быстро осциллирующими членами, которыми мы пренебрегли при выводе (3.76). Ясно, что на практике этим пиком можно пренебречь и, как и в случае зеркального пика отражения, можно заключить, что строгие дифракционные подходы не нужны для расчета эффективности дифракции от одномодовых ЛМС.

Хотя выражения для коэффициента отражения и эффективности дифракции ненулевого порядка очень похожи, между ними имеется ряд отличий. Основное из них - зависимость пикового значения эффективности дифракции от параметра решетки Γ , проявляющаяся в явном виде через параметр y (3.86). Чем больше y , тем выше эффективность дифракции. Поэтому эффективность дифракции всегда меньше пика зеркального коэффициента отражения, хотя и приближается к ней при стремлении Γ к нулю. Отметим, что значение толщинного фактора γ , обеспечивающего максимальное значение эффективности, то же самое, что и для коэффициента отражения, и определяется уравнением (3.82).

Зависимость эффективности дифракции -1-го порядка от Γ иллюстрируется рис.3.60. Параметры МИС те же самые, что и на рис.3.59. Ширина ламелл фиксирована $\Gamma D = 70$ нм,

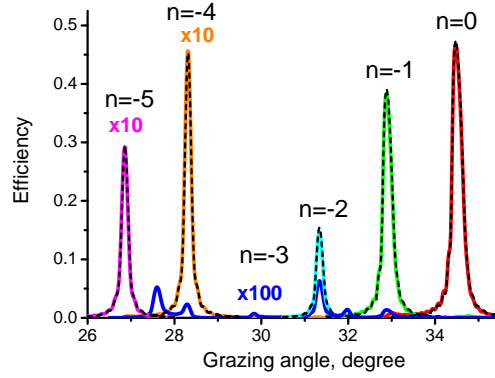


Рис. 3.59. Эффективность дифракции R_n (для $n = -5, \dots, 0$) от Mo/W₄C ЛМС в зависимости от угла скольжения падающего излучения при $E = 183.4$ эВ. Расчеты проведены с использованием строгой дифракционной теории при учете 9 порядков дифракции от -6 до +2 (сплошные кривые) и с помощью простых аналитических формул (3.77), (3.84) (пунктирные кривые). Параметры ЛМС: $D = 210$ нм, $\Gamma = 1/3$. Параметры МИС: $d = 6$ нм, $\gamma = 0.34$, $N = 300$.

а параметр Γ меняется. Число слоев выбрано достаточно большим $N = 100/\Gamma$, чтобы получить максимально возможную эффективность дифракции. Сплошные кривые были получены с использованием строгой дифракционной теории (МСВ) с учетом 5-ти дифракционных порядков, в то время как пунктирные кривые рассчитаны с помощью простых аналитических выражений (3.77), (3.84). Согласие между кривыми превосходное для всех значений Γ . Из сравнения рис.3.60 и рис.3.59 видно, что эффективность дифракции -1-го порядка приближается к пиковому значению коэффициента зеркального отражения так, что различие составляет лишь 0.85% при $\Gamma = 1/20$.

3.5.5. Дифракция р-поляризованного излучения от ЛМС

В предыдущих разделах мы записывали распределение диэлектрической проницаемости внутри ЛМС в виде разложения Фурье

$$\varepsilon(x, z) = 1 - \bar{\chi} \cdot \sum_m U_m e^{2i\pi m x/D} - (\chi_A - \chi_S) \cdot \sum_m \sum_{j \neq 0} U_m u_j e^{2i\pi(m x/D + j z/d)} \quad (3.87)$$

В случае одномодовой ЛМС в ряду (3.87) достаточно сохранить слагаемое с $m = 0$ в первой сумме, которое описывает прохождение волны через однородную среду с усредненной диэлектрической проницаемостью, и единственную гармонику во второй, которая обеспечивает резонансное взаимодействие волны дифракции с падающей волной, т.е. выполнение условия $j\lambda \approx d(\sin \theta_0 + \sin \theta_m)$. Иными словами, для решения волнового уравнения в случае одномодовой ЛМС, вместо (3.87) достаточно использовать следующее укороченное

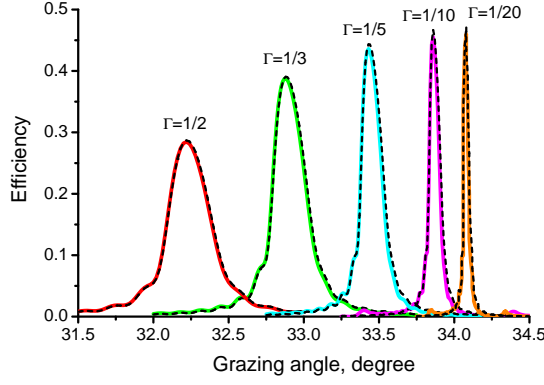


Рис. 3.60. Эффективность дифракции -1-го порядка от Мо/В₄С ЛМС в зависимости от угла скольжения падающего излучения при $E = 183.4$ эВ и для разных значений Γ . Ширина ламелл $\Gamma D = 70$ нм фиксирована, а число периодов МИС изменяется как $N = 100/\Gamma$. Остальные параметры МИС те же самые, что и на рис.3.59. Расчеты проведены с использованием строгой дифракционной теории при учете 5 порядков дифракции (сплошные кривые) и с помощью простых аналитических формул (3.77), (3.84) (пунктирные кривые).

выражение для диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon(x, z) \approx 1 - \Gamma \bar{\chi} - (\chi_A - \chi_S) U_m u_j e^{2i\pi(mx/D + jz/d)} \quad (3.88)$$

После этих предварительных замечаний рассмотрим отражение и дифракцию р-поляризованного излучения от ЛМС. В этом случае двумерное волновое уравнение $\nabla^2 H + k^2 \varepsilon H - \text{grad}(\ln \varepsilon) \cdot \text{grad} H = 0$ содержит первые производные от ненулевой компоненты магнитного поля, перпендикулярной плоскости рис.3.53. Если перенормировать функцию поля следующим образом $\tilde{H}(x, z) \equiv H(x, z)/\sqrt{\varepsilon(x, z)}$, то получим обычную форму волнового уравнения без первых производных $\nabla^2 \tilde{H} + k^2 \tilde{\varepsilon} \tilde{H} = 0$, в которое входит перенормированная диэлектрическая проницаемость

$$\tilde{\varepsilon}(x, z) \equiv \varepsilon(x, z) + \frac{1}{2k^2} \frac{\nabla^2 \varepsilon(x, z)}{\varepsilon(x, z)} - \frac{3}{4k^2} \frac{[\text{grad} \varepsilon(x, z)]^2}{\varepsilon^2(x, z)} \quad (3.89)$$

Разлагая (3.89) в ряд Фурье и сохраняя только линейные по малым поляризуемостям χ_A и χ_S члены, получим вместо (3.87)

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}(x, z) = 1 - \bar{\chi} \cdot \sum_m U_m e^{2i\pi mx/D} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{m\lambda}{D} \right)^2 \right] - \\ - (\chi_A - \chi_S) \cdot \sum_m \sum_{j \neq 0} U_m u_j e^{2i\pi(mx/D + jz/d)} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{j\lambda}{d} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(\frac{m\lambda}{D} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.90)$$

Интересуясь, как и выше, отражением и дифракцией МР излучения от одномодовой ЛМС поблизости от Брэгговского или квази-брэгговского резонанса, сохраним в (3.90) только

необходимые члены и получим укороченное выражение

$$\tilde{\varepsilon}(x, z) \approx 1 - \Gamma\bar{\chi} - (\chi_A - \chi_S)U_m u_j e^{2i\pi(mx/D + jz/d)} \cos(\theta_0 + \theta_m) \quad (3.91)$$

при выводе которого были приняты во внимание как резонансное условие отражения/дифракции $j\lambda/d \approx \sin \theta_0 + \sin \theta_m$, так и уравнение решетки $m\lambda/D = \cos \theta_m - \cos \theta_0$. Сравнение (3.91) и (3.88) показывает, что все полученные выше формулы для s-поляризованного излучения остаются справедливыми и для р-поляризации, если модуляцию диэлектрической проницаемости внутри МИС $\chi_A - \chi_S$ заменить на $(\chi_A - \chi_S) \cos(\theta_0 + \theta_m)$. Главное отличие отражения р-поляризованного излучения от ЛМС состоит в том, что коэффициент отражения обращается в ноль при падении волны под углом Брюстера $\theta_0 = \pi/4$, а эффективность дифракции стремится к нулю, если дифрагированная волна распространяется перпендикулярно к падающей, т.е. $\theta_0 + \theta_m = \pi/2$.

3.5.6. Дифракция МР излучения от неидеальных ЛМС.

Экспериментальные образцы ЛМС были изготовлены в Институте нанотехнологий MESA+ (университет Твенте, Энчедэй, Нидерланды) на основе W/Si МИС со следующими параметрами: период $d = 2.53$ нм, толщинный фактор $\gamma = 0.29$, число периодов $N = 400$, так что толщина всей МИС равнялась $L \simeq 1$ мкм. Подобные решетки могут быть использованы в РФА легких элементов от кислорода до кремния включительно.

Сначала в слое резиста, нанесенного на поверхность МИС, формировалась маска методом механического впечатывания структуры (решетки), расположенной на поверхности штампа. Затем методом глубокого реактивно-химического ионного (F^+) травления образовывалась ламеллярная структура в толще МИС. Процесс травления проходил циклически. После определенного времени травления на боковые стенки ламелл наносился пассивирующий слой состава C_nF_{2n} , чтобы предохранить стенки от излишнего утончения. Был изготовлен целый ряд ЛМС с периодом решетки D от 200 нм до 2 мкм и шириной ламелл ΓD от 60 нм до 1.35 мкм. Параметр Γ варьировался от 0.2 до 0.8. На рис.3.61а показано электронно-микроскопическое изображение среза W/Si ЛМС с уникальными параметрами: период ЛМС $D = 200$ нм, а ширина ламелл всего лишь $\Gamma D = 60$ нм при их высоте $L \simeq 1$ мкм.

По сравнению с идеальными ЛМС, рассмотренными выше, реальные структуры характеризуются различными типами несовершенств. Основные два из них хорошо видны на электронно-микроскопическом изображении вершины ламеллы толщиной около 80 нм (рис.3.61b): (1) отклонение формы ламелл от прямоугольной, включая наличие квази-периодических неоднородностей на боковых стенках ламелл, возникающих из-за циклического

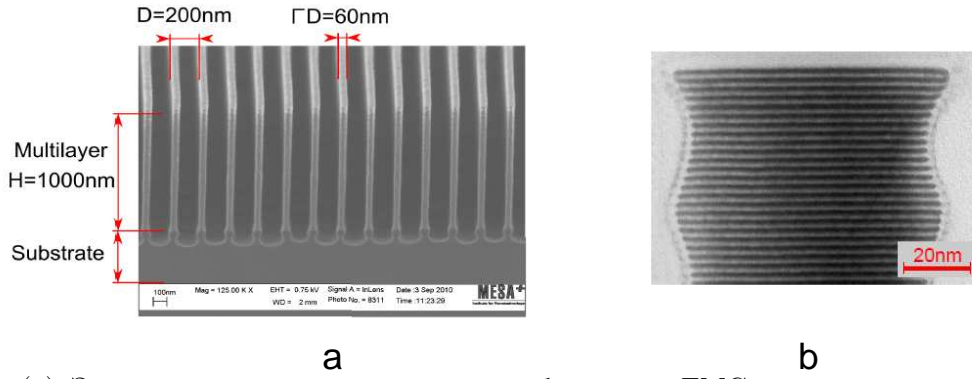


Рис. 3.61. (а) Электронно-микроскопическое изображение ЛМС, протравленной в W/Si МИС, с уникальными параметрами: период решетки $D = 200$ нм, ширина ламеллы $\Gamma D = 60$ нм при общей толщине МИС около 1 мкм. (б) Изображение вершины ламеллы толщиной около 80 нм, полученное с существенно лучшим разрешением и наглядно показывающее образование квази-периодических неоднородностей на боковых стенках ламелл, а также остатки пассивирующего слоя. (Из [A54]).

характера травления и (б) наличие на боковых стенках ламелл остатков пассивирующего слоя. Эти неоднородности следует учесть в расчетах, во-первых, для корректного сравнения с экспериментом и, во-вторых, для анализа условий, при которых влияние неоднородностей на оптические параметры ЛМС становится пренебрежимо малым.

Рассмотрим ламеллу произвольной формы, схематично изображенную на рис.3.62. Кривые 1 и 2 показывают боковые стенки ламеллы, так что пространство между ними заполнено МИС. Кроме того, мы ввели пассивирующие слои толщиной h , чьи внешние поверхности показаны кривыми 3 и 4. Для определенности будем считать, что кривые 1 и 3 эквидистантны, в то время как кривые 2 и 4 являются их зеркальным отражением, причем правая стенка ламеллы описывается однозначной функцией $x = \eta(z)$, а суммарная толщина ламеллы и двух пассивирующих слоев $2\eta(z) + 2h$ не превышает периода решетки D при любых z .

Пространственное распределение диэлектрической проницаемости записывается следующим образом:

$$\varepsilon(x, z < 0) = 1; \quad \varepsilon(x, z > L) = 1 - \chi_{sub}; \quad \varepsilon(x, 0 \leq z \leq L) = 1 - \chi(z)U(x, z) - \chi_{pl}V(x, z)$$

где, как и выше, функция $\chi(z)$ представляет собой изменяющуюся по глубине поляризуемость МИС, а χ_{sub} и χ_{pl} - (постоянные) поляризуемости подложки и пассивирующего слоя, соответственно.

Разложим периодические по x функции U и V в ряды Фурье

$$U(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} U_n(z) \exp(2i\pi nx/D), \quad V(x, z) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} V_n(z) \exp(2i\pi nx/D) \quad (3.92)$$

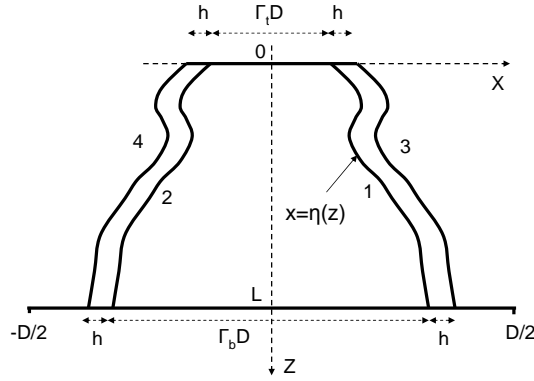


Рис. 3.62. Схема, поясняющая модель ламеллы произвольной формы с пассивирующим слоем на боковых стенках.

$$U_n(x, z) = \frac{1}{\pi n} \sin\left(\frac{2\pi n \eta(z)}{D}\right), \quad V_n(z) = \frac{2}{\pi n} \sin\left(\frac{\pi n h}{D}\right) \cos\left(\pi n \frac{2\eta(z) + h}{D}\right)$$

где, в частности, $U_0(z) = 2\eta(z)/D$ и $V_0 = 2h/D$. Если функция $\eta(z) = \Gamma D/2 = \text{const}$, то ламелла имеет прямоугольную форму, а функции U_n и V_n превращаются в постоянные числа.

Используя представление Рэля для поля (3.54) и подставляя (3.92) в волновое уравнение, получим вместо (3.55) следующую систему уравнений связанных волн:

$$F_n''(z) + \kappa_n^2 F_n(z) = k^2 \sum_m [\chi(z) U_{n-m}(z) + \chi_{pl} V_{n-m}(z)] F_m(z), \quad n = 0, \pm 1, \dots \quad (3.93)$$

которая, как и (3.55), может быть решена численно.

Интересуясь коэффициентом отражения от одномодовой ЛМС, оставим в системе (3.93) единственное уравнение с $n = 0$ и пренебрежем взаимодействием падающей волны с диффракционными. Тогда получим обычное одномерное волновое уравнение

$$F_0''(z) + k^2 (\sin^2 \theta_0 - \chi_{eff}(z)) F_0(z) = 0 \quad (3.94)$$

где введена "эффективная" поляризуемость вещества, изменяющаяся по глубине

$$\chi_{eff}(z) = \chi(z) \cdot \frac{2\eta(z)}{D} + \chi_{pl} \frac{2h}{D} \quad (3.95)$$

Выражения (3.94)-(3.95) очень удобны для предварительного анализа, хотя при расчетах, проведенных ниже, мы используем точные уравнения МСВ (3.93) с учетом 5-ти порядков дифракции.

Прежде всего, проанализируем влияние пассивирующего слоя на коэффициент отражения и эффективность дифракции ЛМС с прямоугольной формой ламелл ($\eta(z) = \Gamma D/2$).

"Эффективная" поляризуемость обоих материалов МИС увеличивается на одно и то же постоянное значение $\chi_{eff}(z) = \Gamma\chi(z) + \chi_{pl} \cdot 2h/D$. Следовательно, разница в поляризуемостях соседних слоев, отвечающая за интерференцию волн, отраженных от границ раздела МИС, равно как и параметр f в (3.71) остаются неизменными. В то же время, среднее поглощение, а также параметр $g = \text{Im}(\chi_S + \chi_{pl} \cdot 2h/D) / \text{Im}(\chi_A - \chi_S)$ в (3.71) увеличиваются, приводя к уменьшению коэффициента отражения. Последнее выражение показывает, что влиянием пассивирующего слоя можно пренебречь, если его толщина достаточно мала:

$$h \ll \frac{\Gamma D}{2} \cdot \frac{\text{Im}\chi_S}{\text{Im}\chi_{pl}} \quad (3.96)$$

Разрешение ЛМС, в первом приближении, обратно пропорционально усредненному поглощению $\text{Im}\bar{\chi}_{eff} = \text{Im}(\Gamma\bar{\chi} + 2h/D \cdot \chi_{pl})$, которое слегка увеличивается из-за наличия пассивационного слоя. Влияние пассивирующего слоя на разрешения пренебрежимо мало, если

$$h \ll \frac{\Gamma D}{2} \cdot \gamma \frac{\text{Im}\chi_A}{\text{Im}\chi_{pl}} \quad (3.97)$$

Поскольку, как правило, в качестве одного из компонентов МИС используется тяжелое вещество, то $\text{Im}\chi_A \gg \text{Im}\chi_{pl}$. Наоборот, поскольку в качестве второго компонента МИС выбирается вещество с минимальным поглощением, то обычно $\text{Im}\chi_S < \text{Im}\chi_{pl}$. Тем самым, условие (3.96) намного более жесткое по сравнению с (3.97) и можно ожидать, что влияние пассивирующего слоя на разрешение ЛМС будет намного слабее, чем на пиковое значение коэффициента отражения.

Для иллюстративных расчетов будем рассматривать ЛМС на основе W/Si МИС с параметрами, соответствующими реальному эксперименту: $d = 2.53$ нм, $\gamma = 0.28$, $N = 400$, $D = 300$ нм и $\Gamma = 0.25$. Эффект пассивирующего слоя на оптические параметры ЛМС иллюстрируется рис.3.63, где показаны кривые отражения и дифракционные пики ± 1 -го порядков при разных значениях толщины C_nF_{2n} пассивирующего слоя плотностью 2.3 г/см³ и для двух энергий МР излучения $E = 525$ эВ (K_α -линия излучения кислорода) и $E = 1041$ эВ (K_α -линия излучения натрия). Отметим, что поглощение кремния довольно большое при $E = 525$ эВ, что и объясняет низкие значения пика отражения $\sim 20\%$ даже в отсутствие пассивирующего слоя. Рисунок показывает, что при толщине пассивирующего слоя, не превышающего 10 нм, его влияние на коэффициент отражения мало во всем спектральном диапазоне, где может быть использована W/Si ЛМС. Как и ожидалось, влияние пассивирующего слоя на разрешение ЛМС крайне незначительно, так что ширина Брэгговского пика увеличивается от 0.048° при $h = 0$ до 0.050° при $h = 20$ нм для энергии МР излучения $E = 1041$ эВ.

Проанализируем теперь влияние профиля ламеллы на оптические параметры ЛМС. Для определенности рассмотрим трапецевидную форму ламелл, причем будем считать, что

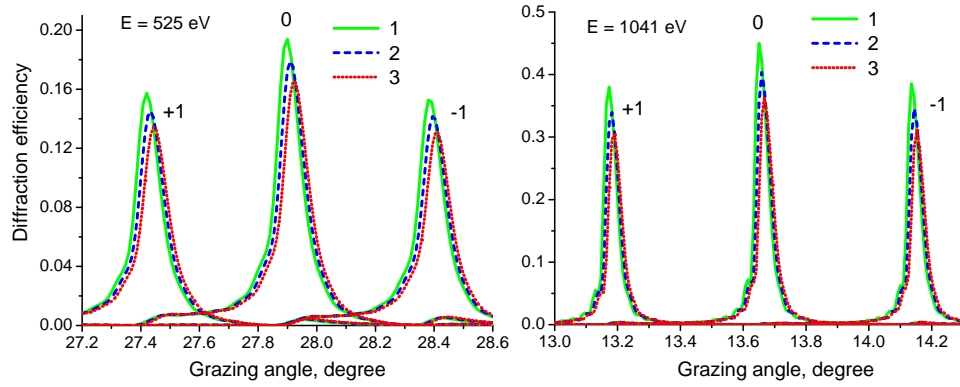


Рис. 3.63. Коэффициент отражения и дифракционные пики ± 1 -го порядков от W/Si ЛМС ($d = 2.53$ нм, $\gamma = 0.28$, $N = 400$, $D = 300$ нм и $\Gamma = 0.25$) для двух значений энергии МР излучения ($E = 525$ и 1041 эВ) при разной толщине пассивирующего слоя: 0 (1), 10 (2) и 20 нм (3). (Из [A62]).

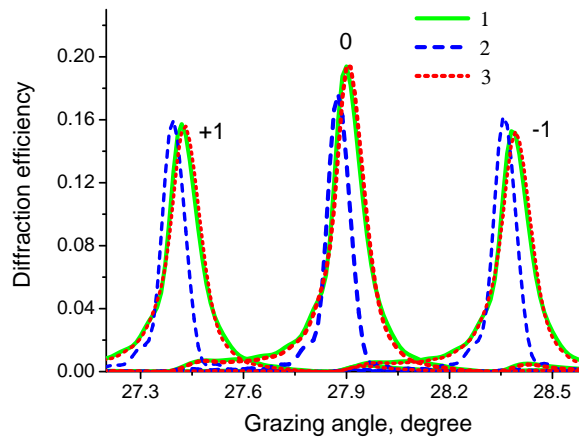


Рис. 3.64. Коэффициент отражения и эффективность дифракции ± 1 -го порядков от W/Si ЛМС при $E = 525$ эВ. Расчеты проведены для ламелл прямоугольной формы при $\Gamma = 0.25$ (кривые 1), а также для ламелл трапецевидной формы с $\Gamma_t = 0.1$ и $\Gamma_b = 0.25$ (кривые 2) или с $\Gamma_t = 0.22$ и $\Gamma_b = 0.37$ (кривые 3). Остальные параметры ЛМС те же, что и на рис.3.63. (Из [A62]).

вблизи внешней поверхности ширина ламеллы стала уже из-за эффектов травления. В этом случае функция $\eta(z) = D\Gamma_t/2 + D(\Gamma_b - \Gamma_t)z/2L$, где $D\Gamma_t$ и $D\Gamma_b$ - ширина ламеллы на поверхности МИС и подложки, соответственно. Для одномодовой ЛМС это эквивалентно монотонному уменьшению плотности МИС от подложки к внешней поверхности структуры. В результате глубина проникновения волны и, следовательно, разрешение ЛМС увеличивается. Иллюстрацией может служить рис.3.64, где показаны пики отражения и дифракции ± 1 -го порядков от W/Si ЛМС при $E = 525$ эВ. Расчеты проведены для прямоугольной формы ламелл при $\Gamma = 0.25$ (кривые 1) и для трапецевидной формы при различных значениях $\Gamma_t = 0.1$ на вершине и $\Gamma_b = 0.25$ внизу ламеллы (кривые 2). Действительно, ширина Брэгговского пика отражения уменьшилась от 0.114° до 0.076° из-за образования трапецевидной

формы ламелл. Ясно, что это обстоятельство может быть полезным при использовании ЛМС в МР спектроскопии и РФА. В то же время, пик отражения несколько уменьшился из-за того, что число периодов $N = 400$ недостаточно велико для достижения максимально возможного пикового значения коэффициента отражения. Отметим, что если необходимо, то эффект стравливания боковых стенок ламелл может быть учтен при конструировании ЛМС. В качестве примера рассмотрим ламеллы трапецевидной формы, положив $\Gamma_t = 0.22$ и $\Gamma_b = 0.37$ и предполагая, тем самым, что толщина стравленного слоя со стенок ламелл точно такая же как и в предыдущем примере. Тогда получим, что как пик отражения, так и дифракционные пики (кривые 3 на рис.3.64) практически совпадают с кривыми 1, рассчитанными для прямоугольной формы ламелл. Тем самым, можно заключить, что искажение формы ламелл из-за травления не является критичным и, более того, утончение ламелл иногда может быть полезным для практики.

Рассмотрим, наконец, наиболее интересный случай наличия квази-периодических неоднородностей на боковых стенках ламелл, которые ясно видны на рис.3.61b. Для определенности предположим, что боковая стенка ламеллы описывается периодической функцией следующего вида: $\eta(z) = \Gamma D/2 + a/2 \cdot \sin(2\pi z/l)$, где a и l - это, соответственно, ширина и длина неоднородностей. В этом случае "эффективная" поляризуемость (3.95) $\chi_{eff}(z) = \chi(z) \cdot 2\eta(z)/D$ представляет собой произведение двух периодических функций с периодами d и l . Если отношение d/l - иррациональное число, то функция $\chi_{eff}(z)$ не является периодической. Разложив $\eta(z)$ и $\chi(z)$ в ряды Фурье, находим, что функция $\chi_{eff}(z)$ содержит слагаемые с четырьмя основными периодами $d_1 = d$, $d_2 = l$, $d_3 = d/(1 + d/l)$, $d_4 = d/(1 - d/l)$, а также высшие гармоники с периодами d_j/n , $n = 2, 3, \dots$. Отметим, что похожие структуры, диэлектрическая проницаемость которых содержит слагаемые с различными периодами, были теоретически рассмотрены в [225] применительно к проблеме одновременного отражения двух произвольных (некратных) длин волн от МИС.

Как и выше, мы интересуемся Брэгговским отражением первого порядка от однододовой ЛМС. Тогда укороченное выражение для "эффективной" поляризуемости имеет следующий вид:

$$\chi_{eff}(z) \approx \Gamma \bar{\chi} + \frac{a}{D} \bar{\chi} \sin\left(\frac{2\pi z}{l}\right) + \quad (3.98)$$

$$+ (\chi_A - \chi_S) \frac{\sin(\pi\gamma)}{\pi} \left[2\Gamma \cos\left(\frac{2\pi z}{d} - \pi\gamma\right) + \frac{a}{D} \sin\left(\frac{2\pi z}{d_3} - \pi\gamma\right) - \frac{a}{D} \sin\left(\frac{2\pi z}{d_4} - \pi\gamma\right) \right]$$

Изменяя угол скольжения падающего пучка, мы будем наблюдать Брэгговское отражение от каждого из четырех периодических слагаемых, содержащихся в (3.98). Период неоднородностей l обычно много больше периода МИС d . Поэтому, отражение от периода l , если

и будет наблюдаться, то при очень малых углах скольжения и ниже мы им пренебрежем. Периоды d_3 и d_4 могут быть близки к периоду d , если длина неоднородностей l достаточно велика. Однако, поскольку обычно $a \ll 2\Gamma D$, амплитуда этих гармоник мала и можно ожидать, что соответствующие им пики отражения также малы. Более того, амплитуда гармоники с периодом d не зависит от параметров неоднородностей, которые, тем самым, если и будут приводить к деформации основного пика отражения, то очень незначительному.

Иллюстрацией к этим выводам служит рис.3.65, где точечные кривые показывают зеркальный пик отражения и дифракционные пики ± 1 -го порядков от идеальной W/Si ЛМС ($D = 300$ нм, $\Gamma = 0.25$) с прямоугольным профилем ламелл. Предположим теперь, что на боковых стенках ламелл имеются неоднородности с длиной $l = 100$ нм и (для иллюстративных целей) очень большой шириной $a = 50$ нм. Результаты расчета показаны сплошными кривыми. В соответствии с (3.98) на кривой отражения наблюдаются два дополнительных пика, указанных стрелками и соответствующих отражению от периодов d_3 и d_4 . Несмотря на очень большую ширину неоднородностей, амплитуды гармоник с этими периодами все еще в три раза меньше амплитуды основной гармоники с периодом d . В результате, высота дополнительных пиков мала по сравнению с высотой основного пика. Как и ожидалось, ни высота, ни форма основного пика практически не изменилась из-за присутствия неоднородностей. Похожие дополнительные пики возникают и на дифракционных кривых, хотя в отличие от зеркального пика, эффективность дифракции заметно уменьшилась из-за наличия неоднородностей.

Появление дополнительных пиков отражения значительной высоты может оказаться неприемлемым для практических применений ЛМС в МР спектроскопии и РФА, поскольку они могут существенно затруднить или даже сделать невозможным анализ спектрального состава излучения. Однако расчеты показывают, что уменьшение ширины неоднородностей от 50 нм до 10 нм приводит к уменьшению высоты дополнительных пиков в 10 раз, так что эти пики оказываются вообще не видны на рисунке. Отметим, что существующая технология изготовления ЛМС позволяет получить неоднородности на стенках ламелл высотой менее 5 нм.

Выражение (3.98) показывает, что периодические неоднородности на стенках ламелл эквивалентны образованию нескольких дифракционных решеток, как бы "погруженных" друг в друга, причем эти решетки имеют одинаковые D и Γ , но разную периодичность МИС d_j по оси Z . Поскольку угловая ширина пиков отражения и дифракции мала, то связь волн, отраженных или дифрагированных от разных одномодовых решеток обычно слабая, исключая специфическую ситуацию, когда угол Брэгга зеркального отражения МР излучения от

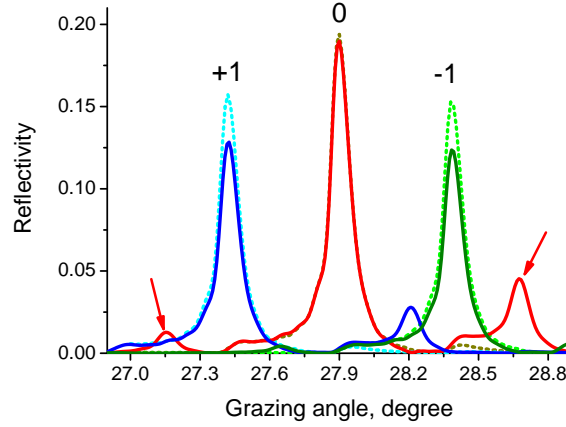


Рис. 3.65. Пик зеркального отражения и дифракционные пики ± 1 -го порядков от W/Si ЛМС (при $E = 525$ эВ). Расчеты проведены для ЛМС, не имеющих неоднородностей (точечные кривые) и при наличии неоднородностей шириной $a = 50$ нм и длиной $l = 100$ нм на боковых стенках ламелл (сплошные кривые). Остальные параметры ЛМС те же, что и на рис.3.63. Стрелки указывают положение дополнительных Брэгговских пиков, возникающих из-за периодических неоднородностей на стенках ламелл. (Из [A62]).

решетки с периодом МИС d совпадает с углом дифракции от решетки с другим периодом МИС d_j . Обсудим эту ситуацию более подробно.

В соответствии с (3.98) резонансное отражение от трех решеток с близкими периодами будет наблюдаться при трех разных углах Брэгга, так что $\lambda = d_j \sin \theta_{m=0}^{(j)}$, где нижний индекс $m = 0$ указывает 0-й порядок дифракции (зеркальное отражение), а верхний индекс $j = 0, 2, 3$ соответствует периоду МИС. Аналогичным образом, будут наблюдаться три дифракционных пика порядка m в соответствие с условием квази-брэгговского резонанса (условием блеска) $\lambda = d_j(\sin \theta_m^{(j)} + \sin \phi_m^{(j)})$, где угол дифракции $\phi_m^{(j)}$, т.е. угол скольжения дифрагированной выходящей волны, связан с углом скольжения падающей волны через уравнение решетки $m\lambda = D(\cos \theta_m^{(j)} - \cos \phi_m^{(j)})$. Связь волн, дифрагированных на разных решетках, может быть сильной, если угол Брэгга для МИС с периодом d совпадает с углом квази-брэгговского резонанса от решеток с периодом МИС равным d_2 или d_3 , т.е. когда $\theta_0^{(0)} = \theta_{+m}^{(2)}$ или $\theta_0^{(0)} = \theta_{-m}^{(3)}$. В этих случаях падающая волна эффективно возбуждает, по крайней мере, две волны: зеркально отраженную волну и дифрагированную волну порядка $+m$ или $-m$. При этом ЛМС не работает более в одномодовом режиме, хотя условие (3.70) выполняется. Чтобы понять условия, при которых такой эффект наблюдается, рассмотрим для определенности ситуацию одновременного возбуждения зеркально отраженной волны (от МИС с периодом d) и волны $+1$ -го порядка дифракции (от МИС с периодом d_2), т.е. случай, когда $\theta_0^{(0)} = \theta_{+1}^{(2)}$.

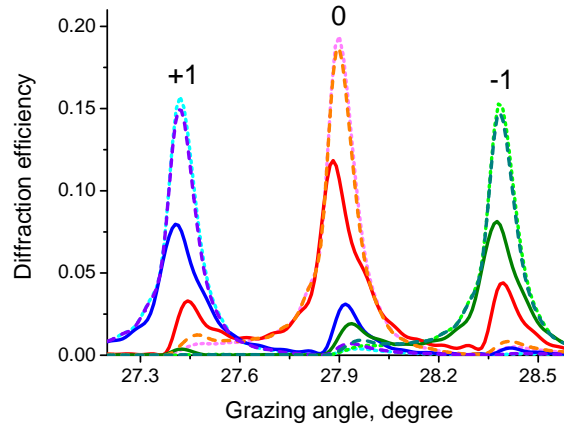


Рис. 3.66. То же, что и на рис.3.65 при наличии неоднородностей длиной $l = 165$ нм и шириной $a = 0$ (точечные кривые), 10 нм (пунктирные кривые) и 50 нм (сплошные кривые). (Из [A62]).

Тогда имеем следующую систему уравнений

$$\begin{aligned}\lambda &= d_0 \sin \theta_0^{(0)} \\ \lambda &= d_2(\sin \theta_0^{(0)} + \sin \phi_{+1}^{(2)}) \\ \lambda &= D(\cos \theta_0^{(0)} - \cos \phi_{+1}^{(2)})\end{aligned}\quad (3.99)$$

Принимая во внимание, что $\lambda \ll D$, т.е. угол $\phi_{+1}^{(2)}$ близок к $\theta_0^{(0)}$, находим, что уравнения (3.99) не противоречат друг другу, если только длина неоднородностей на боковых стенках ламелл удовлетворяет условию

$$l \approx D \tan \theta_0^{(0)} \quad (3.100)$$

которое соответствует наихудшей ситуации для отражения МР волны от ЛМС. Иллюстрация эффекта представлена на рис.3.66 для периода неоднородностей на боковых стенках ламелл $l = 165$ нм, соответствующему условию (3.100). Видно, что интенсивность дифрагированных волн внутри зеркального Брэгговского пика велика. В результате, из-за перераспределения интенсивности между различными порядками дифракции, коэффициент отражения резко уменьшается (сплошная кривая). Тем не менее, если уменьшить ширину неоднородностей до 10 нм, их влияние на коэффициент зеркального отражения становится существенно менее выраженным. Тем самым, при практическом изготовлении ЛМС следует стремиться к тому, чтобы период неоднородностей на стенках ламелл был бы значительно меньше наихудшего значения (3.100), а ширина неоднородностей не превышала бы 10 нм. Современная технология изготовления ЛМС может обеспечить выполнение этих условий, что наглядно иллюстрируется рис.3.61а.

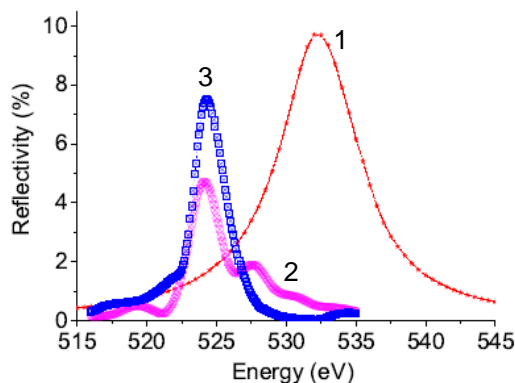


Рис. 3.67. Измеренные коэффициенты отражения s-поляризованного излучения в зависимости от энергии падающих фотонов (угол скольжения $\theta = 27.1^\circ$) от исходной МИС (1) и двух ЛМС с одним и тем же параметром $\Gamma = 0.4$, но имеющими разные периоды $D = 1$ мкм (2) или $D = 0.3$ мкм (3). (Из [A63]).

3.5.7. Анализ экспериментальных результатов.

Измерения коэффициента отражения изготовленных ЛМС в зависимости от энергии и угла падения МР излучения были проведены на канале РТВ синхротрона BESSYII. Измерения проведены при энергиях МР излучения около 525 эВ (K_α -линия излучения кислорода) и 1255 эВ (K_α -линия излучения магния), которые представляют значительный интерес для РФА. На рис.3.67 показаны экспериментальные коэффициенты отражения в зависимости от энергии падающих фотонов (угол скольжения $\theta = 27.1^\circ$) от исходной W/Si МИС (1) и двух ЛМС с одним и тем же параметром $\Gamma = 0.4$, но имеющими разные периоды $D = 1$ мкм (2) или $D = 0.3$ мкм (3). Параметр $\eta \equiv \Gamma D \Delta\theta/d$, определяющий, в соответствии с (3.70), режим работы ЛМС, равен 0.69 или 0.21 для ЛМС с большим или меньшим периодом, соответственно. Тем самым, рассматриваемые ЛМС работают или в многомодовом (2), или в одномодовом (3) режиме.

Спектральная полоса отражения составила $\Delta E \approx 2.8$ эВ для обеих ЛМС, что в 2.5 раза меньше по сравнению с исходной МИС, для которой $\Delta E \approx 7.0$ эВ. Этот факт находится в полном соответствии с предсказанной выше зависимостью $\Delta E/E \sim \Gamma$ для одномодовых ЛМС. В то же время пиковый коэффициент отражения одномодовой ЛМС в 1.5 раза выше, чем многомодовой (7.5% и 4.7%, соответственно), хотя и несколько ниже, чем для исходной МИС (9.8%). Кроме того, кривая отражения многомодовой ЛМС характеризуется дополнительным пиком, примыкающим к основному и появляющемуся из-за сильной связи различных порядков дифракции, что может служить серьезным препятствием для наблюдения характеристических линий низкой интенсивности в РФА и других спектроскопических применениях. Тем самым, рис.3.67 подтверждает сделанный выше вывод о неоспоримых преимуществах

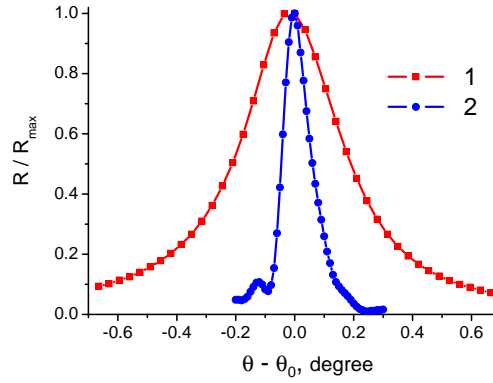


Рис. 3.68. Нормированные экспериментальные коэффициенты s-поляризованного отражения в зависимости от угла скольжения падающего излучения ($E = 525$ эВ) для исходной МИС (1) и ЛМС (2) со следующими параметрами: $D = 600$ нм, $\Gamma = 0.22$. Абсолютные значения пиковых коэффициентов отражения составляют 9.8% (1) и 5.0% (2). (Из [А63]).

одномодового режима работы ЛМС.

Сравнительно невысокий коэффициент отражения исходной МИС объясняется несколькими факторами. Во-первых, кремний характеризуется довольно большим поглощением на рабочей длине волны, так что даже для идеальной W/Si МИС коэффициент отражения не превышает 20%. Во-вторых, влияние межплоскостных шероховатостей на коэффициент отражения очень велико из-за крайне малого периода МИС. Исходя из простейших оценок, можно заключить, что пиковый коэффициент отражения уменьшается в 2 раза при высоте шероховатостей всего лишь в 0.3 нм. Наконец, чрезвычайно тонкие слои поглощающего материала (толщиной порядка 0.73 нм) из-за диффузии и химических реакций представляют собой не чистый вольфрам, а смесь его различных силицидов, что приводит к дополнительному уменьшению коэффициента отражения из-за уменьшения амплитуды модуляции диэлектрической проницаемости при сохранении среднего поглощения излучения в веществе.

На рис.3.68 представлено сравнение формы кривых отражения, измеренных в зависимости от угла скольжения ($E = 525$ эВ), для исходной МИС (1) и одномодовой ЛМС (2) с малым значением параметра $\Gamma = 0.22$. Полоса отражения ЛМС составляет 0.105° , т.е. сузилась в 3.8 раза по сравнению с исходной ЛМС (0.40°), но несколько больше значения, предсказываемого теорией (0.088°). Кроме того, пиковый коэффициент отражения ЛМС (5.0%) почти в два раза меньше, чем у исходной МИС. Одним из факторов, приводящим к падению коэффициента отражения и уширению полосы пропускания ЛМС, является конечное число периодов многослойной структуры, которое может быть недостаточным для достижения предельно возможных значений отражения и разрешения.

Проанализируем этот вопрос более детально. Ниже будем рассматривать отражение из-

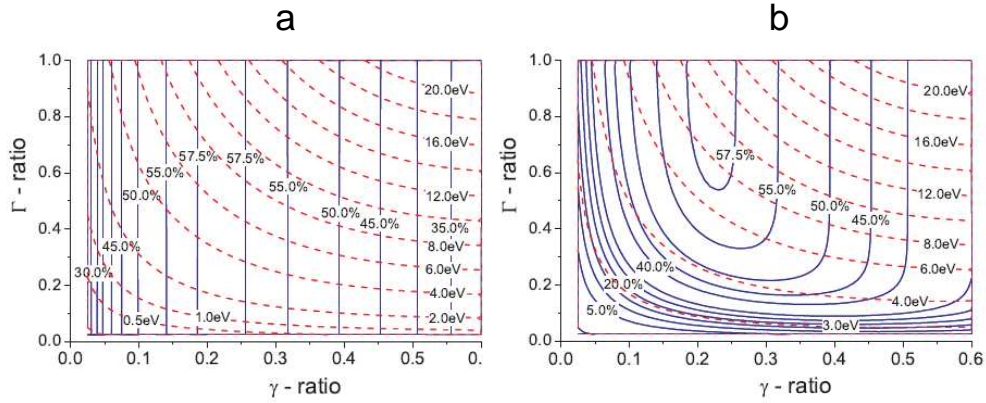


Рис. 3.69. Кривые постоянных значений пикового коэффициента отражения s-поляризованного излучения (сплошные кривые) и ширины Брэгговского пика (пунктирные кривые) на плоскости $\Gamma - \gamma$, т.е. в зависимости от толщинных факторов решетки и МИС. Расчеты проведены для средней энергии фотонов $E = 1255$ эВ от одномодовых W/Si ЛМС ($d = 2.53$ нм) в предположении бесконечного (а) и конечного $N = 400$ (б) числа периодов МИС. Межплоскостные шероховатости и диффузия материалов не учитывались. Период ЛМС выбран равным $D = 300$ нм, чтобы обеспечить одномодовый режим для всех приведенных на рисунке значений Γ .

лучения с энергией $E = 1255$ эВ, просто потому, что для этой энергии имелось намного больше ЛМС, работающих в одномодовом режиме, поскольку левая часть выражения (3.70) (введенный выше параметр η) уменьшается пропорционально длине волны излучения. На рис.3.69а показаны кривые постоянных значений пикового коэффициента отражения (сплошные кривые) и ширины Брэгговского пика (пунктирные кривые) для одномодовых W/Si ЛМС на плоскости $\Gamma - \gamma$ в случае полубесконечной МИС. В этом случае пик отражения R_{max} от параметров ЛМС (т.е. Γ) не зависит, а линии постоянного значения R_{max} являются прямыми, параллельными оси ординат. Тем самым, выбирая нужное γ многослойной структуры, обеспечиваем максимально возможное пиковое значение коэффициента отражения. Затем, выбирая то или иное значение Γ решетки, получаем требуемое значение разрешения ЛМС.

Если же число периодов МИС конечно ($N = 400$ в рассматриваемом случае), то ситуация совершенно иная (см. рис.3.69б). Пиковое значение и полуширина кривой отражения связаны друг с другом и не могут рассматриваться по отдельности. Например, если мы хотим сузить полосу отражения ЛМС до 3 эВ, т.е. в 4 раза по сравнению с исходной МИС, то коэффициент отражения не может быть больше 20%, что почти в 3 раза меньше, чем у исходной МИС, а толщинные факторы МИС и ЛМС должны лежать в диапазоне $\gamma = 0.3 - 0.15$ и $\Gamma = 0.08 - 0.12$, соответственно. Единственная возможность увеличения разрешения ЛМС при сохранении пикового коэффициента отражения или, наоборот, увеличения R_{max} при со-

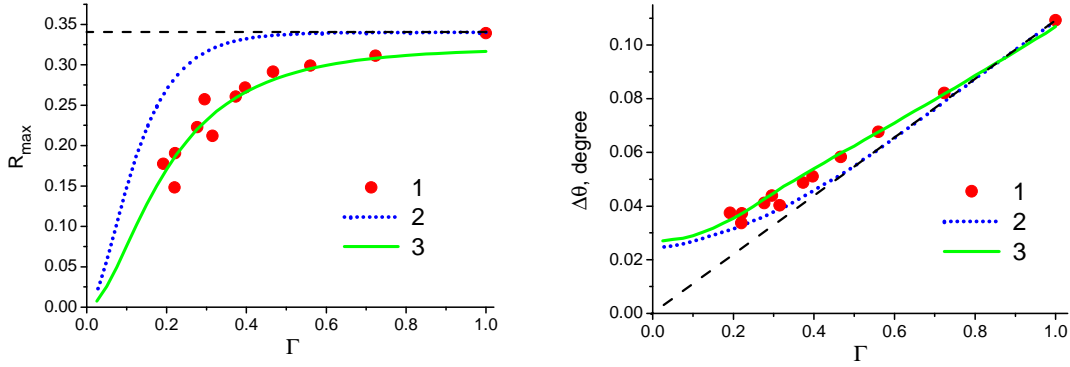


Рис. 3.70. Измеренное пиковое значение коэффициента отражения R_{max} и ширины Брэгговского пика $\Delta\theta$ ($E = 1255$ эВ) от нескольких одномоновых W/Si ЛМС с различными параметрами Γ (1). Кривые 2 и 3 - результаты расчета для идеальной периодической МИС (2) и для МИС с изменяющимся по глубине периодом (3). Пунктирные прямые показывают значения R_{max} и $\Delta\theta$ для полубесконечной структуры. (Из [А63]).

хранении ΔE состоит в увеличении числа периодов МИС. Тем самым, при практическом изготовлении МИС следует выбирать компромисс между желаемым разрешением ЛМС и пиковым значением ее отражения, а кроме того, учитывать технологические возможности по изготовлению ЛМС с предельно малой шириной ламелл, очень малой толщиной поглощающего вещества МИС и ее большой общей толщиной.

На рис.3.70 показаны измеренные (при $E = 1255$ эВ) значения пикового коэффициента отражения R_{max} и ширины Брэгговского пика $\Delta\theta$ от нескольких одномоновых W/Si ЛМС в зависимости от параметра Γ (кружки). Для полубесконечной МИС, когда пиковый коэффициент отражения от Γ не зависит, а ширина пика отражения пропорциональна Γ , мы бы получили зависимости, показанные пунктирными прямыми. В рассматриваемом случае конечного числа периодов МИС $N = 400$, мы ожидали получить зависимости, показанные точечными кривыми 2. При расчетах использовались параметры МИС (плотности слоев, среднеквадратичная шероховатость границ раздела), найденные путем подгонки экспериментальных кривых отражения, измеренных в МР диапазоне в зависимости от угла скольжения. Рисунок 3.70 показывает, что экспериментальные значения коэффициента отражения лежат существенно ниже точечных кривых. В частности, при $\Gamma = 0.4$ значения коэффициента отражения от полубесконечной ЛМС и от ЛМС с конечным числом периодов практически не должны отличаться, что находится в противоречии с рис.3.67. Более того, поскольку изготовленные ЛМС были очень высокого качества (см. рис.3.61), ни отклонение формы ламелл от прямоугольной, ни остатки пассивационного слоя на стенках ламелл не могут объяснить различия между экспериментальными точками и рассчитанными кривыми на рис.3.70.

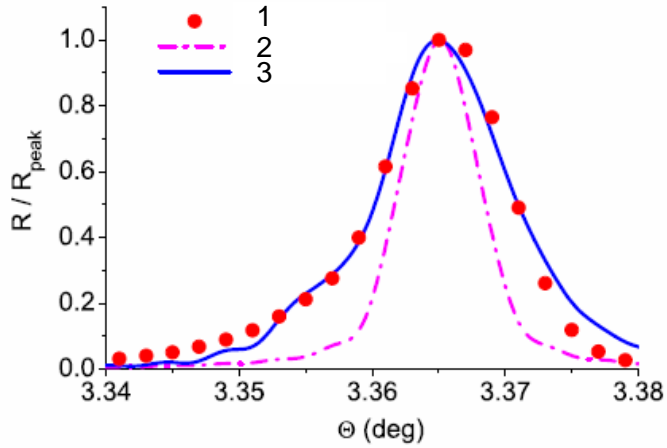


Рис. 3.71. Измеренный коэффициент отражения R_{max} исходной МИС ($E = 8052$ эВ) во втором Брэгговском пике (1). Кривые 2 и 3 - результаты расчета для идеальной периодической МИС (2) и для МИС с изменяющимся по глубине периодом (3). (Из [А63]).

На следующем шаге мы более подробно исследовали структуру исходной МИС на основе анализе кривой отражения, измеренной в ЖР диапазоне на длине волны $\lambda = 0.154$ нм. Второй Брэгговский пик представлен на рис.3.71 (кружки). Кривая 2 показывает расчетный коэффициент отражения для идеальной периодической МИС ($d = 2.54$ нм, $\gamma = 0.29$), причем при расчетах принималась во внимание расходимость падающего излучения путем усреднения коэффициента отражения по угловому интервалу ± 20 угл. сек. Видно, что экспериментальная кривая отражения существенно шире теоретической. Тогда мы предположили, что имеется некоторый градиент периода по глубине. Если принять, что период увеличивается в глубь структуры на 0.5%, что в абсолютных цифрах означает изменение периода всего лишь на 0.013 нм на всей толщине МИС в 1 мкм, то получим кривую 3, которое качественно согласуется с результатами эксперимента. После этого мы пересчитали зависимость пикового коэффициента отражения и ширины Брэгговского пика в МР диапазоне ($E = 1255$ эВ) в зависимости от параметра Γ и получили кривые 3 на рис.3.70, хорошо соответствующие экспериментальным данным. Отметим, что столь малый градиент периода практически не влияет на Брэгговский пик исходной МИС, поскольку он широкий и лишь 200 верхних периодов дают сколько-нибудь значительный вклад в отражение. В случае же ЛМС глубина проникновения МР волны увеличивается в $1/\Gamma$ раз, т.е. все периоды дают вклад в отражение и, кроме того, ширина Брэгговского пика уменьшается во столько же раз. Поэтому эффект даже малого градиента периода на пик отражения становится заметным. Тем самым, можно заключить, что основным фактором, ограничивающим на сегодняшний день предельные параметры ЛМС и, в первую очередь, пиковое значение коэффициента отражения, является

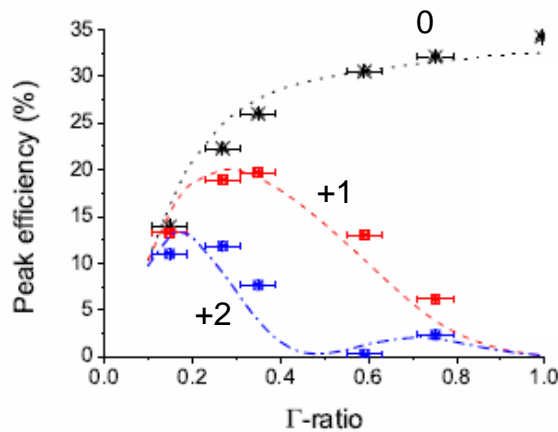


Рис. 3.72. Измеренная пиковая эффективность в 0, 1 и 2 порядках дифракции от ЛМС с одним и тем же периодом $D = 600$ нм, но с разными значениями параметра Γ (символы). Кривые показывают расчетные значения эффективности в предположении, что период МИС изменяется по глубине на 0.5%. (Из [A63]).

несовершенство (градиент периода) исходной многослойной структуры.

Дополнительным подтверждением этого вывода может служить рис.3.72, где показаны экспериментальные пиковые значения эффективности дифракции МР излучения ($E = 1255$ эВ) в 0, 1 и 2 порядки от нескольких ЛМС с одним и тем же периодом $D = 600$ нм, но разными значениями Γ , и рис.3.73, где представлены экспериментальные значения спектрального разрешения и пикового коэффициента отражения в зависимости от энергии падающих квантов для трех одномодовых ЛМС с одинаковым значением параметра $\Gamma \approx 0.28$. Результаты расчетов, проведенных в рамках предложенной выше модели, т.е. в предположении градиента периода МИС по глубине, и показанных кривыми на этих рисунках, достаточно хорошо согласуются с данными эксперимента.

3.6. Основные результаты главы 3

- Построена аналитическая теория отражения рентгеновского излучения от произвольной МИС с монотонно изменяющимся периодом. Разработан новый подход к решению обратной задачи синтеза широкополосных многослойных зеркал рентгеновского диапазона. Задача синтеза состоит в определении последовательности толщин слоев, составляющих МИС, которая обеспечивает наперед заданную спектральную или угловую зависимость коэффициента отражения. Получена аналитическая итерационная процедура, позволяющая определить необходимое распределение толщины слоев МИС по глубине. Аналитическое решение проблемы используется как начальное приближе-

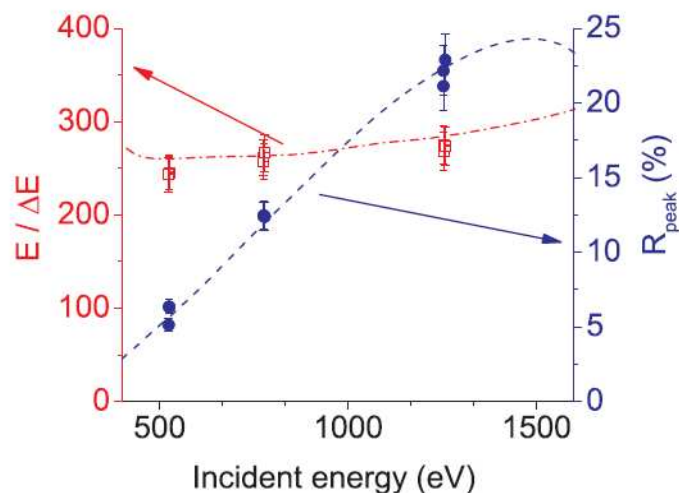


Рис. 3.73. Измеренное спектральное разрешение и пиковое значение коэффициента отражения в зависимости от энергии падающего излучения для трех одномодовых ЛМС с одним и тем же значением $\Gamma \approx 0.28$. Кривые были рассчитаны в предположении, что период МИС изменяется по глубине на 0.5%. (Из [А63]).

ние для прямой компьютерной оптимизации. Это позволяет преодолеть проблему глобальной минимизации, поскольку аналитическое решение оказывается очень хорошим начальным приближением даже в случае очень сложного профиля кривой отражения.

- Проведен анализ конструкции и оптических свойств широкополосных градиентных зеркал применительно к задаче управления пучками СИ. Проведен выбор пар материалов для создания широкополосных зеркал с точки зрения максимально достижимого коэффициента отражения и минимального числа слоев структуры. Показано, что основным фактором, определяющим необходимое число слоев, является поляризуемость тяжелого (поглощающего) вещества, входящего в состав структуры. Правильный выбор тяжелого компонента структуры позволяет уменьшить требуемое число слоев более, чем в 10 раз. Коэффициент отражения и число слоев структуры слабо зависят от слабопоглощающего компонента, что существенно расширяет класс материалов, пригодных для изготовления широкополосных зеркал.
- Продемонстрирована возможность создания ЭУФ зеркал с постоянным коэффициентом отражения в широком интервале углов падения. Коэффициент отражения достигает 60% на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в интервале углов падения $[0, 18^\circ]$. Показано сильное влияние интерслоев на максимально достижимый коэффициент отражения на плато. Поэтому структуры со стабильными и контролируемыми границами раздела (такие как $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ и $\text{Mo}/\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}/\text{Mo}_2\text{C}$) выглядят более предпочтительными для практики.
- Исследованы факторы, ухудшающие оптическое качество широкополосных зеркал. Сре-

ди них: неточность оптических констант материалов и их плотностей, использованных при расчетах; влияние межплоскостных шероховатостей; невозможность нанесения сверхтонких слоев толщиной менее 0,6-0,8 нм; случайный разброс толщин слоев во время напыления структуры. Разработанный подход был успешно использован при практическом изготовлении широкополосных многослойных зеркал.

- Разработан общий подход для конструирования МИС, обеспечивающей максимальную интегральную эффективность отражения для произвольной функции источника. Подход основан на применении уравнения Эйлера-Лагранжа для нахождения экстремалей функционала и аналитическом уравнении для отражения рентгеновского излучения от широкополосной МИС. Получена аналитическая итерационная процедура, позволяющая определить распределение толщин слоев МИС по глубине. Показано, что численное уточнение конструкции МИС не имеет смысла, т.к. приводит к крайне незначительному увеличению эффективности за счет драматического усложнения распределения толщин слоев.
- Разработана строгая теория дифракции рентгеновского излучения от ламеллярных многослойных структур, основанная на методе связанных волн (МСВ). Создана компьютерная программа для численного решения системы уравнений МСВ. Программа применима для любого распределения диэлектрической проницаемости по глубине МИС, т.е. для периодических и аperiodических структур с резким или плавным изменением диэлектрической проницаемости на границах раздела соседних материалов, двух-компонентных или многокомпонентных МИС, любого числа слоев МИС, а также для любого значения периодов МИС и ЛМС. Более того, программа применима для любой формы ламелл и учитывает наличие пассивирующего слоя на стенках ламелл.
- Идентифицирован одномодовый режим работы ЛМС, когда падающая волна эффективно возбуждает единственную волну одного или другого порядка дифракции. Разработана простая аналитическая теория отражения и дифракции МР излучения от одномодовых ЛМС, результаты которой полностью совпадают с результатами строгой теории. Показано, что кривая отражения МР излучения от одномодовой ЛМС такая же как от обычного многослойного зеркала, но с уменьшенной плотностью материалов, составляющих структуру. В результате пиковый коэффициент отражения от одномодовой ЛМС точно такая же как от обычного многослойного зеркала, а спектральное или угловое разрешение ЛМС может быть сколь угодно велико. Сформулированы принци-

пы конструирования одномоновых ЛМС.

- Проанализировано влияние различных технологических факторов на эффективность ЛМС, среди которых отличие формы ламелл от идеальной прямоугольной, включая наличие квази-периодических неоднородностей на боковых стенках ламелл, и наличие остатков пассивирующего слоя на стенках ламелл. Рассмотрено влияние конечного числа периодов МИС на оптические характеристики ЛМС. Разработанная теория была использована при практическом изготовлении ЛМС и позволила количественно описать экспериментальные результаты исследования отражения и дифракции МР излучения от ЛМС.

Основные результаты и выводы

1. Предложен и разработан модельно независимый подход к исследованию шероховатостей поверхностей и границ раздела, основанный на измерениях углового распределения рассеяния ЖР и МР излучения или холодных нейтронов и на применении теории возмущений по высоте шероховатостей для анализа экспериментальных данных. Впервые из данных экспериментов по рентгеновскому рассеянию извлечены PSD-функции границ раздела, включая кросс-корреляционные PSD-функции, а также скэйлинговые экспоненты и соответствующие им уравнения роста/эрозии поверхностей в in-situ рефлектотрии растущих или эродирующих слоистых сред.
2. Показано, что теория возмущений по высоте шероховатостей является наиболее естественным и корректным подходом к анализу данных по рентгеновскому рассеянию, поскольку эта теория (а) позволяет определить параметры шероховатостей (PSD-функции) безо всяких априорных предположений о функции распределения их высот и о виде корреляционной функции, (б) зачастую лучше согласуется с точным борновским приближением с искаженными волнами по сравнению с упрощенным подходом Синха, наиболее часто используемым в литературе, и (в) позволяет объяснить все явления, наблюдаемые при дифракции РИ от слабошероховатых поверхностей. Продемонстрировано, что теория возмущений применима в случае, когда параметр Рэлея $\eta_R = 4\pi\sigma \sin \theta_0/\lambda$ не превышает единицу, т.е. среднеквадратичная высота шероховатостей σ не превышает 1.5 - 3 нм (значения σ больше для легких материалов), если угол скольжения зондирующего пучка θ_0 равен критическому углу ПВО.
3. Предложен и разработан модельно независимый подход к решению обратной задачи рентгеновской рефлектотрии, т.е. реконструкции профиля диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z)$, который основан на измерениях коэффициента отражения в зависимости от угла скольжения зондирующего пучка и предположении о существовании особых точек, где функция $\varepsilon(z)$ не является аналитической. Показано, что число физически обоснованных решения обратной задачи равно двум, если все расстояния между особыми точками различны. Подход был успешно применен к исследованию внутренней структуры пленок различных материалов, включая тонкую структуру границ раздела, образующихся из-за диффузии, химических реакций или имплантации, и адгезионного слоя на поверхности образцов. Показано, что минимальный размер особенности на распределении $\varepsilon(z)$, которая еще может быть корректно реконструирована,

составляет $(0.3 - 0.5)\lambda / \sin \theta_{max}$, где θ_{max} - максимальный измеряемый угол скольжения, что соответствует $0.4 - 0.7$ нм в условиях наших экспериментов.

4. Предложен и разработан самосогласованный подход к исследованию трехмерной структуры слоисто - неоднородных сред, который позволяет одновременно определить как профиль диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z)$, так и статистические параметры шероховатостей (PSD-функции) границ раздела, включая кросс - корреляционные PSD-функции. Подход основан на совместном анализе угловой зависимости коэффициента отражения и набора индикатрис рассеяния, измеренных при разных углах скольжения зондирующего пучка, и был успешно применен на практике, в частности, для сравнительных исследований внутренней структуры и шероховатости пленок вольфрама после их напыления, ионного травления и окисления.
5. Найдено точное решение фазовой проблемы применительно к in-situ рентгеновской рефлектометрии растущих слоистых структур. Доказано следующее утверждение: если в какой-то момент времени t известен коэффициент отражения $R(t)$ и его производная $dR(t)/dt$, то и вещественная $\text{Re}r(t)$, и мнимая $\text{Im}r(t)$ части амплитудного коэффициента отражения $r(t)$ в этот же момент времени находятся однозначно, причем для определения фазы нет необходимости знать предисторию процесса роста структуры.
6. Разработана аналитическая теория отражения РИ от произвольной многослойной интерференционной структуры (МИС) с монотонно изменяющимся периодом и основанная на ней аналитическая итерационная процедура, позволяющая определить такое распределение толщины слоев МИС по глубине, которое обеспечивает наперед заданную спектральную (угловую) зависимость коэффициента отражения или максимальное значение интегрального коэффициента отражения. Показано, что аналитическое решение задачи синтеза оказывается настолько хорошим начальным приближением для прямой компьютерной оптимизации широкополосных МИС, что позволяет преодолеть проблему поиска глобального минимума целевой функции даже в случае очень сложного профиля кривой отражения. Разработанный подход был использован при практическом изготовлении широкополосных МИС, работающих в ЖР и ЭУФ диапазонах длин волн.
7. На основе разработанной строгой теории дифракции РИ от ламеллярных многослойных структур (ЛМС) идентифицирован одномодовый режим работы ЛМС, когда падающая волна эффективно возбуждает единственную волну одного или другого порядка

дифракции, и найдены условия существования этого режима, а именно: $\Gamma D \Delta\theta_{MS} < d/3$, где ΓD - ширина ламеллы, а $\Delta\theta_{MS}$ и d - ширина брэгговского пика и период исходной МИС. Получено аналитическое решение задачи об отражении и дифракции МР излучения от одномодовых ЛМС. Показано, что пиковое значение коэффициента отражения от одномодовой ЛМС точно такое же как у исходной МИС, в то время как угловое или спектральное разрешение ЛМС может быть каким угодно большим. Разработанная теория использовалась при практическом изготовлении ЛМС и позволила количественно описать экспериментальные результаты по отражению и дифракции МР излучения от ЛМС.

Литература

1. Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis / B. Beckhoff, B. Kanngiesser, N. Langhoff, R. Wedell, H. Wolff, Eds. - Berlin: Springer, 2006. - 863 p.
2. Watts, J.F. An Introduction to Surface Analysis by XPS and AES /J.F. Watts, J. Wolstenholme. - Chichester: John Wiley & Sons Ltd. , 2003. - 212 p.
3. Фелдман, Л. Основы анализа поверхности и тонких пленок / Л. Фелдман, Д.М. Майер. - М.: Мир, 1989. - 344 с.
4. Ковальчук, М.В. Рентгеновские стоячие волны - новый метод исследования структуры кристаллов / М.В. Ковальчук, В.Г. Кон // Успехи физических наук. - 1986. - Т.149. - Вып. 1 - С.
5. Бушуев, В.А. Вторичные процессы в рентгеновской оптике / В.А. Бушуев В.А., Р.Н. Кузьмин. - М.: Изд-во Московского университета, 1990. - 113 с.
6. Walker, A.B., Jr. Soft X-ray images of the Solar corona with a normal-incidence Casserian multilayer telescope / A.B. Walker, Jr., T.W. Barbee, Jr., R.B. Hoover, J.F. Lindblom // Science, 241 (1988) 1781-1785.
7. Москаленко, Е.И. Методы внеатмосферной астрономии / Е.И. Москаленко. - М.: Наука, 1984. - 280 с.
8. Рентгеновская оптика и микроскопия / Под ред. Г. Шмаля, Д. Рудольфа. - М.: Мир, 1987. - 464 с.
9. Artioukov, I.A. Schwarzschild soft X-ray microscope for imaging of nonradiating objects / I.A.Artioukov, A.V.Vinogradov, V.E.Asadchikov, Yu.S.Kas'yanov, R.V.Serov, A.I.Fedorenko, V.V.Kondratenko, S.A.Yulin // Optics Letters. 1995. - V. 20. - P. 1-3.
10. Асадчиков, В.Е. Рентгенооптические методы - полное внешнее отражение с учетом рассеяния и микроскопия - в анализе границ раздела конденсированных фаз: дис... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.18 / Асадчиков Виктор Евгеньевич. - М., 2003. - 305 с.
11. Бузмаков, А.В. Рентгеновская микротомография с использованием увеличивающих рентгенооптических элементов: дис... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07; 01.04.01 / Бузмаков Алексей Владимирович. - М., 2009. - 131 с.

12. Золотов, Д.А. Абсорбционная микротомография и топо-томография слабопоглощающих кристаллов с использованием лабораторных рентгеновских источников: дис... канд. физ.-мат. наук: 01.04.18 / Золотов Денис Александрович. - М., 2011. - 132 с.
13. Tolan, M. X-Ray Scattering from Soft-Matter Thin Films / M. Tolan. Berlin: Springer, 1999. - 197 p.
14. Pietsch, U. High-Resolution X-ray Scattering from Thin Films and Multilayers / U. Pietsch, V. Holy, T. Baumbach. - New-York: Springer, 2004. - 408 p.
15. Рощин, Б.С. Структура поверхностей аморфных и монокристаллических материалов, отличающихся по типу химической связи, и нанесенных на них многослойных покрытий по данным рентгеновской рефлектометрии: дис... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Рощин Борис Сергеевич. - М., 2009. - 136 с.
16. Свергун, Д. И., Фейгин Л. А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние / Д.И. Свергун, Л.А. Фейгин. - М.: Наука, 1986. - 280 с.
17. Bakshi, V. EUV Lithography / V. Bakshi. - Bellingham: SPIE Press, 2009. - 673 p.
18. Сейсян, Р. П. Нанолитография СБИС в экстремально дальнем вакуумном ультрафиолете (Обзор) / Р.П. Сейсян // Журнал технической физики. - 2005. - Т. 75. - Вып. 5. - С. 1-13.
19. Meiling, H. Progress of the EUVL alpha tool/ H. Meiling, J. Benschop, U.Dinger, P.Kurz // Proceedings of SPIE. - 2001. - V. 4344. - P. 38-50.
20. Фетисов, Г.В. Синхротронное излучение / Г.В. Фетисов. - М.: Физматлит, 2007. - 672 с.
21. Ковальчук, М.В. Синхротронное излучение - перспективы использования в науке и технологии / В кн.: М.В. Ковальчук. Наука и жизнь: моя конвергенция. Т.2. Избранные научные труды. - М.: ИКЦ "Академкнига", 2011. - С.394-408.
22. Kovalchuk, M.V. X-ray instrumentation for SR beamlines / M.V. Kovalchuk, Yu.N. Shilin, S.I. Zheludeva, O.P. Aleshko-Ozevsky, E.H. Arutyunyan, D.M. Kheker, A.Ya. Kreines, V.V. Lider, E.M. Pashaev, N.Yu. Shilina, V.A. Shiskov // Nuclear Instruments and Methods A. - 2000. - V. 448. - P.

23. The European X-ray free electron laser Technical Design Report / M. Altarelli, Ed. - Hamburg: DESY 2006-091, 2006.
24. Sinn, H. X-Ray Optics and Beam Transport / H. Sinn, M. Dommach, X. Dong, D. La Civita, L. Samoylova, R. Villaneuva, F. Yang // The European XFEL Technical Design Report. - Hamburg: XFEL, 2012. - 35 p.
25. Chapman, H. N. 2006 Femtosecond diffractive imaging with a soft-x-ray free-electron laser / H. N. Chapman // Nature Physics. - V. 2. - P. 839–843.
26. Элтон, Р. Рентгеновские лазеры / Р.Элтон. - М.: Мир, 1994. - 335 с.
27. Spiller, E., Soft X-ray Optics / E.Spiller. - Washington: SPIE Optical Engineering Press, 1994. - 280 p.
28. Attwood, D. Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation / D. Attwood. - Cambridge: Cambridge University Press, 1999. - 470 p.
29. Kumakhov optics and application / M.A. Kumakhov, Ed. // Proceedings of SPIE. - 2000. - V. 4155.
30. Кожевников, И.В. Системы скользящего падения с большим числом отражений / И.В. Кожевников // Труды ФИАН. - 1989. - Т. 196. - С. 143-167.
31. Bukreeva, I.N. Whispering gallery mirrors for the soft X-ray region: properties and applications /I.N. Bukreeva, I.V. Kozhevnikov, A.V. Vinogradov // Journal of X-Ray Science and Technology. - 1995. - V. 5. - P. 396-419.
32. Аристов, В.В. Рентгеновская оптика / В.В.Аристов, А.И.Ерко. - М.: Наука, 1991. - 152 с.
33. Snigirev A. A compound refractive lens for focusing high-energy X-rays / A. Snigirev, V. Kohn, I. Snigireva, B. Lengeler // Nature. - 1996. - V. 384. - P. 49-51.
34. Underwood, J.H. The renaissance of X-ray optics / J.H. Underwood, D.T. Attwood // Physics Today. - 1984. - V. 37. - April - P. 44-50.
35. Ceglio, M.M. Revolution in X-ray optics / M.M. Ceglio // Journal of X-Ray Science and Technology. - 1989. - V. 1. - P. 7-78.

36. Басс Ф.Г. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности / Ф.Г.Басс, И.М.Фукс. - М.: Наука, 1972. - 424 с.
37. Yoneda, Y. Anomalous surface reflection of X-rays / Y.Yoneda // Physical Review. - 1963. - V. 131. - P. 2010-2013.
38. Смирнов, Л.А. Диффузное рассеяние при полном внешнем отражении рентгеновских лучей от шероховатой поверхности / Л.А. Смирнов, Т.Д. Сотникова, Ю.И. Коган // Оптика и спектроскопия. - 1985. - Т. 58. С. 400-405.
39. Zombeck, M.V. High resolution X-ray scattering measurements / M.V. Zombeck, H. Brauning, A. Ondruch, P. Predehl // Proceedings of SPIE. 1981. - V. 316. - P. 174-186.
40. Bilderback, D.H. X-ray mirror reflectivities from 3.8 to 50 keV (3.3 Å to 0.25 Å). Part I - Float glass / D.H.Bilderback, S.Hubbard // Nuclear Instruments and Methods A. - 1982. - V. 195. P. 85-89.
41. Benbalagh, R. Lamella multilayer amplitude gratings as soft X-ray Bragg monochromator / R. Benbalagh, J.-M. André, R. Barchewitz, P. Jonnard, G. Gulié, L. Mollard, G. Rolland, C. Rémond, P. Troussel, R. Marmoret, E.O. Filatova // Nuclear Instruments and Methods. - 2005. - V. 541. - P. 590-597.
42. Lord Rayleigh. On the dynamical theory of gratings / Lord Rayleigh // Proceedings of Roy. Soc. A. - 1907. - V. 79. P. 399-416.
43. Мандельштам, Л.И. О шероховатости свободной поверхности жидкости / Л.И.Мандельштам. // Полн.собр.трудов. Т.1. - М.: Изд-во АН СССР, 1948. - С. 246-260; Ann. Phys. - 1913. - V. 41. - P. 609-624.
44. Андронов, А.А. К теории молекулярного рассеяния света на поверхности жидкости / А.А.Андронов, М.А.Леонтович // Собр. трудов А.А.Андропова. - М.: Изд-во АН СССР, 1956.- С. 5-18; Z. Phys. - 1926. - V. 38. - P. 485.
45. Beckmann, P. The scattering of electromagnetic waves from rough surfaces / P.Beckmann, A.Spizzichino. - Oxford: Pergamon, 1963.
46. Рытов С.М. Введение в статистическую радиофизику. Т.2. Случайные поля / С.М.Рытов, Ю.А.Кравцов, В.И.Татарский. - М.: Наука, 1978. - 464 с.

47. Исимару, А. Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах. Т.2 / А. Исимару. - М.: Мир, 1981. - 246 с.
48. Bennett, J.M. Introduction to surface roughness and scattering / J.M. Bennett, L. Mattsson. - Optical Society of America, 1989.
49. Stover, J.C. Optical scattering: measurement and analysis / J.C.Stover. - New York: McGraw-Hill, 1990.
50. Bennett, J.M. Surface finish and its measurement / J.M.Bennett. - Washington: Optical Society of America, 1992.
51. Ogilvy, J.A. Theory of wave scattering from random rough surfaces / J.A. Ogilvy. - Bristol: IOP Publishing, 1991. - 277 p.
52. Бреховских, Л.М. Дифракция электромагнитных волн на неровной поверхности / Л.М.Бреховских // Доклады АН СССР. - 1951. - Т. 81. С. 1023-1026.
53. Бреховских, Л.М. Дифракция волн на неровной поверхности / Л.М.Бреховских // ЖЭТФ. - 1952. - Т. 23. - С. 275-304.
54. Исакович, М.А. Рассеяние волн от статистически шероховатой поверхности / М.А.Исакович // ЖЭТФ. - 1952. - Т. 23. - С. 305-314.
55. Bennett, H.E. Relation between surface roughness and specular reflectance at normal incidence / H.E.Bennett, J.O.Porteus // Journal of Optical Society of America. - 1961. - V. 51. - P. 123-129.
56. Bennett, H.E. Scattering characteristics of optical materials / H.E.Bennett // Optical Engineering. - 1978. -V. 17. - P. 48-488.
57. Elson, J.M. Vector scattering theory / J.M. Elson, J.M. Bennett // Optical Engineering. - 1979. - V. 18. - P. 116-124.
58. Elson, J.M. Relation between the angular dependence of scattering and the statistical properties of optical surfaces / J.M.Elson, J.M.Bennett // Journal of Optical Society of America. - 1979. - V. 69. - P. 31-47.
59. Maradudin, A.A. Scattering and absorption of electromagnetic radiation by a semi-infinite medium in the presence of surface roughness / A.A.Maradudin, D.L.Mills // Physical Review B. - 1975. - V. 11. - P. 1392-1415.

60. Church, E.L. Relationship between surface scattering and microtopographic features / E.L. Church, H.A. Jenkinson, J.M. Zavada // *Optical Engineering*. - 1979. - V. 18. - P. 125-136.
61. Ландау, Л.Д. Теория поля / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. - М.: Наука, 1973. - 504 с.
62. Борн, М. Основы оптики / М. Борн, Э. Вольф. - М.: Наука, 1970. -
63. Ландау, Л.Д. Электродинамика сплошных сред / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. - М.: Наука, 1982. - 624 с.
64. Barabâsi, A.-L. Fractal concepts in surface growth / A.-L. Barabâsi, H.E. Stanley. - Cambridge: Cambridge University Press, 1995. - 371 p.
65. Brown, G. Resonant light scattering from a randomly rough surface / G. Brown, V. Cell, M. Haller, A.A. Maradudin, A. Marvin // *Physical Review B*. - 1985. - P. 4993-5005.
66. Марадудин, А. Взаимодействие поверхностных поляритонов и плазмонов с шероховатыми поверхностями / А.Марадудин // Поверхностные поляритоны. Под ред. В.М. Аграновича, Д.Л. Миллса. - М.: Наука, 1985. - С. 279-360.
67. Goray, L.I. Application of the rigorous method to x-ray and neutron beam scattering on rough surfaces / L.I. Goray // *Journal of Applied Physics*. - 2010. - V. 108. - P. 033516-10.
68. Ehrenberg, W. X-ray optics: Imperfections of optical flats and their effect on the reflection of X-rays / W. Ehrenberg // *Journal of Optical Society of America*. - 1949. - V. 39. - P. 746-750.
69. Parratt, L.G. Surface studies of solids by total reflection of X-rays / L.G. Parratt // *Physical Review*. - 1954. - V. 95. - P. 359-369.
70. Elliot, S.B. Effects of polishing imperfections on specular reflection of X-rays/ S.B. Elliot // *Proceedings of the 3rd Intern. Symp. "X-ray optics and X-ray microanalysis"*. - 1963. - P. 215-228.
71. Zhou, X.-L. Theoretical foundation of X-ray and neutron reflectometry / X.-L. Zhou , S.-H. Chen // *Physics Reports*. - 1995. - V. 257. - P. 223-348.
72. Wriston, R.S. The scattering of soft X-rays with optical surface / R.S. Wriston, J.F. Froechtenight // *Applied Optics*. - 1973. - V. 12. - P. 25-29.
73. de Korte, P.A.J. Assessment of surface roughness by X-ray scattering and differential interference contact microscopy / P.A.J. de Korte, R. Laine // *Applied Optics*. - 1979. - V. 18. - P. 236-242.

74. Брытов, И.А. О влиянии шероховатости поверхности зеркала на рассеяние ультрамягкого рентгеновского излучения / И.А.Брытов, А.Я.Грудский, В.А.Слемзин // Краткие сообщения по физике ФИАН. 1980. - № 5. - С. 16-21.
75. Ровинский, М.В. Об эффекте аномального отражения рентгеновских лучей / М.В. Ровинский, В.М. Синайский, В.И. Сиденко // Физика твердого тела. - 1972. - Т. 14. - С. 409-412.
76. Croce, P. Sur l'étude de la diffusion de rayons X sous angles rasants / P. Croce, L. Nevot, V. Pardo // C. R. Acad. Sci. Ser. - 1972. - V. 274. - P. 855.
77. Croce, P. Etude par diffusion lumineuse de la nature des surfaces de verre poli / P. Croce, L. Prod'homme // Nouv. Rev. Opt. (Paris). - 1976. - V. 7. P. 121.
78. Киселева, К.В. Исследование природы аномального отражения рентгеновских лучей / К.В. Киселева, А.Г. Турьянский // Препринт ФИАН. - 1979. - № 34. 14 с.
79. Hogrefe, H. Soft x-ray scattering from rough surfaces: Experimental and theoretical analysis / H. Hogrefe, C. Kunz // Applied Optics. - 1987. - V. 26. - P. 2851.
80. Филатова, Е.О. Эффект Йонеды в области ультрамягкого рентгеновского излучения / Е.О. Филатова, Т.А. Благовещенская // Письма в ЖЭТФ. - 1990. - Т. 52. - С. 1005-1007.
81. Filatova, E.O. Regularities of the Yoneda effect in the region of ultrasoft x-ray radiation / E.O. Filatova // Proceedings of SPIE. - 1995. - V. 2453. P. 130-140.
82. Nigam, A.N. Origin of anomalous surface reflection of x-rays / A.N. Nigam // Physical Review. - 1965. - V. 138. P. 1189.
83. Warren, B.E. Interpretation of anomalous surface reflection of x-rays / B.E. Warren, J.S. Clarke // Journal of Applied Physics. - 1965. V. 36. - P. 324.
84. Андреев, А.В. Рентгеновская оптика поверхности. (Отражение и дифракция при скользких углах падения) / А.В.Андреев // Успехи физических наук. - 1985. - Т. 145. С. 113-136.
85. Alehyane, N. Extreme UV and x-ray scattering measurements from a rough LiF crystal surface characterized by electron micrography / N. Alehyane, M. Arbaoui, R. Barchewitz, J.-M. André, F.E. Christensen, A. Hornstrup, J. Palmari, M. Rassigni, R. Rivoira, G. Rassigni // Applied Optics. - 1989. - V. 28. - P. 1763-1772.

86. Aschenbach, B. Measurements of X-ray scattering from Wolter type telescopes and various flat zerodur mirrors / B.Aschenbach, H.Brauninger, G.Hasinger, J.Trumper // Proceedings of SPIE. - 1980. - V. 257. - P. 223-229.
87. Sinha, S.K. X-ray and neutron scattering from rough surfaces / S.K. Sinha, E.B. Sirota, S. Garoff, H.B. Stanley // Physical Review B. - 1988. - V. 38. - P. 2297-2311.
88. Pynn, R. Neutron scattering by rough surfaces at grazing incidence / R. Pynn // Physical Review B. - 1992. - V. 45. P. 602-611.
89. Sinha, S.K. X-ray diffuse scattering as a probe for thin film and interface structure / S.K. Sinha // Journal de Physique III France. - 1994. V. 4. - P. 1543-1557.
90. Weber, W. Diffuse scattering of hard x-rays from rough surfaces / W. Weber, B. Lengeler // Physical Review B. - 1992. - V. 46. - P. 7953-7956.
91. de Boer, D.K.G. Influence of the roughness profile on the specular reflectivity of x-rays and neutrons / D.K.G. de Boer // Physical Review B. - 1994. - V. 49. - P. 5817-5820.
92. de Boer, D.K.G. X-ray reflection and transmission by rough surfaces / D.K.G. de Boer // Physical Review B. - 1995. -V. 51. - P. 5297-5305.
93. Holý, V. X-ray reflection from rough layered systems / V.Holý, J.Kuběna, I.Ohlídál, K.Lischka, W.Plotz // Physical Review B. - 1993. V. 47. - P. 15896-15903.
94. Holý, V. Nonspecular x-ray reflection from rough multilayers / V.Holý, T.Baumbach // Physical Review B, 1994. - V. 49. P. 10668-10676.
95. Смирнов, Л.А. Интерпретация кривых полного внешнего отражения рентгеновских лучей от поверхности напыленных в вакууме металлических пленок / Л.А. Смирнов, С.Б. Анохин // Оптика и спектроскопия. - 1980. Т. 48. - С. 574-577.
96. Nevot, L. Caracterisation des surfaces par réflexion rasante de rayons X. Application à l'étude du polissage de verres silicates / L. Nevot, P. Croce // Revue de Physique Appliquee. - 1980. - V. 15. - P. 761-779.
97. Chkalo, N.I. Status of X-ray mirror optics at the Siberian SR Centre / N.I. Chkalo, M.V. Fedorchenko, N.V. Kovalenko, E.P. Kruglyakov, A.I. Volokhov, V.A. Chernov, S.V. Mytnichenko // Nuclear Instruments and Methods A. - 1995. - V. 359. - P. 121.

98. Протопопов, В.В. Сравнительные измерения шероховатости подложек рентгеновских зеркал методами рентгеновской рефлектометрии и сканирующей зондовой микроскопии / В.В. Протопопов, К.А. Валиев, Р.М. Имамов // Кристаллография. -1997. - Т. 42. С. 747-754.
99. Гапонов, С.В. Рассеяние нейтронного и рентгеновского излучения в диапазоне 10-300 Å на периодических структурах с шероховатыми границами / С.В. Гапонов, В.М. Генкин, Н.Н. Салашенко, А.А. Фраерман // Письма в ЖЭТФ. - 1985. - Т. 41. С. 53-55.
100. Гапонов, С.В. Рассеяние мягкого рентгеновского излучения и холодных нейтронов на многослойных структурах с шероховатыми границами / С.В. Гапонов, В.М. Генкин, Н.Н. Салашенко, А.А. Фраерман // Журнал технической физики. - 1986. - Т. 56. - С. 708-714.
101. Fraerman, A.A. The effect of the interfacial roughness on the reflection properties of multilayer X-ray mirrors/ A.A. Fraerman, S.V. Gaponov, V.M. Genkin, N.N. Salachenko // Nuclear Instruments and Methods A. 1987. - V. 261. - P. 91-98.
102. Andreev, A.V. Theory of X-ray scattering by rough surfaces without distorted wave approximation / A.V. Andreev // Physics Letters A. - 1996. - V. 219. - P. 349-354.
103. Андреев, А.В. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей на многослойной структуре с шероховатыми границами раздела / А.В. Андреев, И.Р. Прудников // Кристаллография. 1996. - Т. 41. - С. 220-229.
104. Leskova, T.A. X-ray scattering from a randomly rough surface / T.A. Leskova, A.A. Maradudin // Waves in Random Media. - 1997. - V. 7. - P. 395-434.
105. Виноградов, А. В. Оптическая теорема для рассеяния в присутствии границы раздела / А.В. Виноградов А. В., Н.Н. Зорев // Доклады АН СССР. - 1986. - Т. 286. - С. 1377-1379.
106. Мессиа, А. Квантовая механика. Т. 1 / А. Мессиа. - М.: Наука, 1978. - 480 с.
107. Бейтмен, Г. Высшие трансцендентные функции. Т. 2 / Г. Бейтмен, А. Эрдейи. - М.: Наука, 1974. - 296 с.
108. Church, E.L. Fractal surface finish / E.L. Church // Applied Optics. - 1988. - V. 27. - P. 1518-1526.

109. Mandelbrodt, B.B. The Fractal Geometry of Nature / B.B. Mandelbrodt. - New York: Freeman, 1982.
110. Зосимов, В.В. Фракталы в волновых процессах / В.В. Зосимов, Л.М. Лямшев // Успехи физических наук. - 1994. - Т.165. - С. 361-401.
111. Федорюк, М.В. Асимптотика: Интегралы и ряды / М.В.Федорюк. - М.: Наука, 1987. - 544 с.
112. Marconi, M.C. Measurement of the Spatial Coherence Buildup in a Discharge Pumped Table-Top Soft X-Ray Laser / M.C.Marconi, J.L.Chillo, C.H.Moreno, B.Benwareand, J.J.Rocca // Physical Review Letters. -1997. - V. 79. P. 2799-2802.
113. Benwar, B. Demonstration of a High Average Power Tabletop Soft X-Ray Laser / B. Benware, C.D. Macchietto, C.H. Moreno, J.J. Rocca // Physical Review Letters. - 1998. - V. 81. P. 5804-5807.
114. Handbook of Optics. Vol. 1 / M. Bass, Ed. - New York: McGraw-Hill, 1995. - P. 7.1–7.14.
115. Church, E.L. Specification of surface figure and finish in terms of system performance / E.L. Church, P.Z. Takacs // Applied Optics. - 1993. - V. 32. - P. 3344-3353.
116. Church, E.L. Specification of glancing- and normal-incidence x-ray mirrors / E.L. Church, P.Z. Takacs // Optical Engineering. - 1995. - V. 34. - P. 353-360.
117. Ландау, Л.Д. Квантовая механика / Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. - М.: Наука. 1974. - 752 с.
118. K.Oyoshi, T.Tagami, S.Tanaka, Smoothing of silica glass surfaces by ion implantation / K.Oyoshi, T.Tagami, S.Tanaka // Japan. Jornal of Applied Physics. - 1991. - V. 30. - P. 1854-1859.
119. Headrick, R.L. Ripple formation and smoothening on insulating surfaces / R.L. Headrick, H. Zhou // J. Phys.: Condensed Matter. - 2009. - V. 21. - P. 224005-12.
120. Andreev, A.V. Reflectivity and Roughness of X-ray Multilayer Mirrors. Specular Reflection and Angular Spectrum of Scattered Radiation / A.V. Andreev, A.G. Michette, A. Renwich // Journal of Modern Optics. - 1988. - V. 35. - P. 1667-1687.

121. Stearns, D.G. Nonspecular x-ray scattering in a multilayer-coated imagnie system / D.G. Stearns, D.P. Gaines, D.W. Sweeney, E.M. Gullikson // *Jornal of Applied Physics*. - 1998. - V. 84. - P. 1003-1028.
122. Stearns, D.G. Nonspecular scattering from extreme ultraviolet multilayer coatings / D.G. Stearns, E.M. Gullikson // *Physica B*. - 2000. - V. 283. - P. 84-91.
123. Kortright, J.B. Nonspecular x-ray scattering from multilayer structures / J.B. Kortright // *Jornal of Applied Physics*. - 1991. - V. 70. - P. 3620-3625.
124. Bruson, A. Interference effect in non-specular scattering from multilayers. Interpretation of the rocking curves / A.Bruson, C.Dufour, B.George, M.Vergnat, G.Marchal, Ph.Mangin // *Solid State Communications*. - 1989. - V. 71. P. 1045-1050.
125. Lodha, G. Study of Pt/C x-ray multilayer structure as a function of layer period using x-ray scattering / G.Lodha, A.Paul, S.Vitta, A.Gupta, R.Nandedkar, K.Yamashita, H.Kunieda, Y.Tawara, K.Tamura, K.Haga, T.Okajima // *Japan. Journal of Applied Physics*. - 1999. - V. 38-1. - P. 289-292.
126. Jiang, X. Nonspecular x-ray scattering from the amorphous state in W/C multilayers / X.Jiang, T.H.Metzger, J.Peisl // *Applied Physics Letters*. - 1992. - V. 61. - P. 904-906.
127. Kaganer, V.M. Bragg diffraction peaks in x-ray diffuse scattering from multilayers with rough interfaces / V.M. Kaganer, S.A. Stepanov, R. Kohler // *Physical Review B*. - 1995. - V. 52. - P. 16369-16372.
128. Schlomka, J.-P. X-ray diffraction from Si/Ge layers: Diffuse scattering in the region of total external reflection / J.-P. Schlomka, M. Tolan, L. Schwalowsky, O.H. Seeck, J. Stettner, W. Press // *Physical Review B*. - 1995. - V. 51. P. 2311-2321.
129. Jergel, M. X-ray scattering study of interface roughness correlation in Mo/Si and Ti/Si multilayers for X-UV optics / M.Jergel, V.Holý, E.Majková, S.Luby, R.Senderák, H.J.Stock, D.Menke, U.Kleineberg, U.Heinzmann // *Physica B*. - 1998. - V. 253. - P. 28-39.
130. Бушуев, В.А. Влияние корреляции межслойных шероховатостей на дифракцию рентгеновских лучей в многослойных структурах / В.А. Бушуев, В.В. Козак // *Кристаллография*. - 1997. - Т. 42. - С. 809-817.

131. Бушуев, В.А. Статистическая теория формирования межслойных шероховатостей и диффузного рассеяния рентгеновских лучей / В.А. Бушуев, В.В. Козак // Поверхность. - 1999. - № 2. - С. 96-100.
132. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике. Т.1 / З. Флюгге. - М.: Мир. - 1974. С. 75-78.
133. Bukreeva, I.N. Vertical synchrotron radiation beamline for proximity X-ray lithography: Theoretical analysis / I.N. Bukreeva, I.V. Kozhevnikov // Nuclear Instruments and Methods A. - 1997. - V. 395. - P. 244-258.
134. Artyukov I.A. On the efficiency of grazing incidence optics. The spiral collimator / I.A. Artyukov, A.V. Vinogradov, I.V. Kozhevnikov // Applied Optics. - 1991. - V. 30. P. 4154-4157.
135. Дуванов Б.Н. Многоэлементный рентгеновский коллиматор / Б.Н. Дуванов, И.В. Кожевников, А.Г. Федорец // Журнал технической физики. - 1993. - Т. 63. - С. 138-144.
136. Feldhaus, J. Photon ring multi-user distribution system for soft X-ray SASE FEL laboratory / J. Feldhaus, E.L. Saldin, E.A. Schneidmiller, M.V. Yurkov // Nuclear Instruments and Methods A. - 2003. - V. 507. - P. 510-514.
137. Stearns, D.G. Stochastic model for thin film growth and erosion / D.G.Stearns // Applied Physics Letters. - 1993. - V. 62. - P. 1745-1747.
138. Виноградов, А.В. О свойствах волноводов рентгеновского диапазона / А.В. Виноградов, И.В. Кожевников // Журнал технической физики. - 1984. - Т. 54. - С. 1755-1762.
139. Оруджалиев, М.Н. Распространение рентгеновского излучения в изогнутых капиллярах / М.Н. Оруджалиев, В.А. Бушуев // Журнал технической физики. - 1991. - Т. 61. - С. 51-57.
140. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. - М.: Наука. 1979. - 288 с.
141. Family, F. Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model / F. Family, T. Viscek // Journal of Physics A. - 1985. - V. 18. P. L75-L81.
142. Kardar, M. Dynamic scaling of growing interfaces / M. Kardar, G. Parisi, Y.-C. Zhang // Physical Review Letters. - 1986. - V. 56. - P. 889-892.

143. Drotar, J.T. Numerical analysis of the noisy Kuramoto-Sivashinsky equation in 2+1 dimensions / J.T. Drotar, Y.-P. Zhao, T.-M. Lu, G.-C. Wang // Physical Review E. - 1999. - V. 59. - P. 177-185.
144. Thompson, C. X-ray-reflectivity study of the growth kinetics of vapor-deposited silver films / C. Thompson, G. Palazantzas, Y. P. Feng, S. K. Sinha, J. Krim // Physical Review B. - 1994. - V. 49. - p. 4902-4907.
145. Palazantzas, G. Scanning tunneling microscopy study of the thick film limit of kinetic roughening / G. Palazantzas, J. Krim // Physical Review Letters. - 1994. - V. 73. - P. 3564-3567.
146. Yang, J. Effect of substrate on surface morphology evolution of Cu thin films deposited by magnetron sputtering / J. Yang, Y. Huang, K. Xu // Surface & Coatings Technologies. - 2007. - V. 201. - P. 5574-5577.
147. Liu, Z.-J. Surface evolution and dynamic scaling of sputter-deposited Al thin films on Ti(100) substrates / Z.-J. Liu, Y.G. Shen, L.P. He, T. Fu // Applied Surface Science. - 2004. - V. 226. - P. 371-377.
148. Klemradt, U. Growth-induced interface roughness of GaAs/AlAs-layers studied by X-ray scattering under grazing angles / U. Klemradt, M. Funke, M. Fromm, B. Lengeler, J. Peisl, A. Forster // Physica B. - 1996. - V. 221. - P. 27-33.
149. Majaniemi, S. Kinetic roughening of surfaces: Derivation, solution, and application of linear growth equations / S. Majaniemi, T. Ala-Nissila, J. Krug // Physical Review B. - 1996. - V. 53. P. 8071-8082.
150. Левитан, Б. М. . Обратные задачи Штурма-Лиувилля / Б. М. Левитан. М.: Наука. 1984. - 240 с.
151. Рамм, А.Г. Многомерные обратные задачи рассеяния / А.Г. Рамм. - М.: Мир. 1994. - 496 с.
152. Gesztesy, F., Inverse spectral analysis with partial information on the potential, II. The case of discrete spectrum / F. Gesztesy, B. Simon // Transactions of the American Mathematical Society. - 1999. - V. 352. - P. 2765-2787.
153. Horvath, M. Inverse spectral problems and closed exponential systems / M. Horvath // Annals of Mathematics. 2005. - V. 162. - P. 885-918.

154. Horvath, M. On the inverse spectral theory of Schrodinger and Dirac operators / M. Horvath // Transactions of the American Mathematical Society. - 2001. - V. 353. - P. 4155-4171.
155. Самойленко, И.И. О числе независимых структурных параметров тонких пленок по данным рентгеновской рефлектометрии / И.И. Самойленко, Л.А. Фейгин, Б.М. Щедрин, Л.Г. Янусова // Поверхность. 2000. № 9. С. 17-20.
156. Янусова, Л.Г. Восстановление структуры тонких многослойных пленок по данным рефлектометрии с помощью поэтапного уточнения модели / Л.Г. Янусова, С.Ф. Борисова, В.В. Волков, С.Б. Астафьев, Б.М. Щедрин // Кристаллография. - 2003. - Т. 48. - № 5. - С. 921-929.
157. Волков, Ю.О. Модельный подход к решению обратной задачи рефлектометрии и его применение для исследования внутренней структуры пленок оксида гафния / Ю.О. Волков, И.В. Кожевников, Б.С. Рощин, Е.О. Филатова, В.Е. Асадчиков // Кристаллография. - 2013. - Т. 58. - С. 113-121.
158. Sivia, D.S. Analysis of neutron reflectivity data: maximum entropy, Bayesian spectral analysis and speckle holography / D.S. Sivia, W.A. Hamilton, G.S. Smith // Physica B. - 1991. - V. 173. - P. 121-138.
159. Pedersen, J.S. Analysis of neutron and X-ray reflectivity data. II. Constrained least-squares methods / J.S Pedersen, I.W. Hamley // Journal of Applied Crystallography. - 1994. - V. 27. - P. 36-49.
160. Sammar, A. Profile determination of a stratified medium from reflectivity measurements: a regularized inverse problem / A. Sammar, J.-M. Andre // Journal of Modern Optics. - 1996. - V. 43. - P. 67-79.
161. Hohage, T. Iterative reconstruction of a refractive-index profile from x-ray or neutron reflectivity measurements / T. Hohage, K. Giewekemeyer, T. Salditt // Physical Review E. - 2008. - V. 77. P. 051604-9.
162. Подоров, С.Г. Итерационное решение обратной задачи динамической дифракции в неоднородных кристаллах / С.Г. Подоров, В.И. Пунегов // Журнал технической физики. - 1999. - Т. 69. - № 3. - С. 39-42.

163. Красильников, А.Г. Решение обратной задачи рентгеновской дифракции от периодических $\text{LaGaN}/\text{GaN}/\text{Al}_2\text{O}_3$ наноструктур / А.Г. Красильников, В.И. Пунегов, Н.Н. Фалеев // Письма в журнал технической физики. - 2004. - Т. 30. - № 12. - С.6-15.
164. Bengu, E. Model-independent inversion of x-ray or neutron reflectivity data / E. Bengu, M. Salud, L.D. Marks // Physical Review B. - 2001. - V. 63. - P. 195414-7.
165. Majkrzak, C. F. Exact determination of the phase in neutron reflectometry by variation of the surrounding media / C. F. Majkrzak, N. F. Berk // Physical Review B. - 1998. - V. 58. - P. 15416-15418.
166. Henke, B. L. X-Ray interactions: photoabsorption, scattering, transmission, and reflection at $E = 50\text{-}30,000$ eV, $z=1\text{-}92$ / B.L. Henke, E. M. Gullikson, J. C. Davis // Atomic Data and Nuclear Data Tables. - 1993. - V. 54. - P. 181 – 342.
167. Berry, M.V. Semiclassically weak reflections above analytic and non-analytic potential barriers / M.V.Berry // Journal of Physics A. - 1982. - V. 15. - P. 3693-3704.
168. Dennis, J.E., Jr. Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations / J.E.Dennis, Jr., R.B.Schnabel. - New Jersey: Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1983. - 378 p.
169. Кляцкин, В.И. Метод погружения в теории распространения радиоволн / В.И. Кляцкин. - М.: Наука. - 1986. - 256 с.
170. Underwood, J.H. Effect of contamination and oxide layers on scattering and reflectivity of multilayer mirrors / J.H. Underwood, E.M. Gullikson // OSA Proceedings on Extreme Ultraviolet Lithography. - 1995. - V. 23. - P. 61-66.
171. Livesey, A.K. The determination of depth profiles from angle-dependent XPS using maximum entropy data analysis/ A.K. Livesey, G.S. Smith // J. Electron. Spectrosc. - 1994. - V. 67. - P. 439.
172. Skilling, J. Maximum Entropy and Bayesian Methods / J. Skilling. - Kluwer: Cambridge, 1988.
173. Hoghoj, P. Focusing of hard X-rays using a W/Si supermirror / P. Hoghoj, E. Ziegler, J. Susini, A.K. Freund, K.D. Joensen, P. Corenstein, J. Wood // Nuclear Instruments and Methods B. - 1997. - V. 132. - P. 528-533.

174. Joensen, K.D. Multilayered supermirror structures for hard X-ray synchrotron and astrophysics instrumentation / K.D. Joensen, P. Hoghoj, F.E. Christensen, P. Corenstein, J. Susini, E. Ziegler, A.K.Freund, J.L.Wood // Proceedings of SPIE. 1993. - V. 2011. - P. 360-372.
175. Mezei, F. Novel polarized neutron devices: supermirror and spin component amplifier / F. Mezei // Commun.Phys. - 1976. - V. 1. - P. 81-85.
176. Mezei, F. Corrigendum and first experimental evidence on neutron supermirrors / F.Mezei, P.A.Dagleish // Commun.Phys. - 1977. - V. 2. P. 41-43.
177. Lee, P. Uniform and graded multilayers as X-ray optical elements / P. Lee // Applied Optics. - 1983. - V. 22. - P. 1241-1246.
178. Joensen, K.D. Medium-sized grazing incidence high-energy X-ray telescopes employing continuously graded multilayers / K.D. Joensen, F.E. Christensen, H.W. Schnopper, P. Corenstein, J. Susini, P. Hoghoj, R. Hustache, J. Wood, K. Parker // Proceedings of SPIE. - 1992. - V. 1736. - P. 239-248.
179. Joensen, K.D. Design of grazing-incidence multilayer supermirrors for hard X-ray reflectors / K.D. Joensen, P. Voutov, A. Szentgyorgui, J. Roll, P. Corenstein, P. Hoghoj, F.E. Christensen // Applied Optics. - 1995. - V. 34. - P. 7935-7944.
180. Joensen, K.D. Multilayer supermirrors: Broad-band reflection coatings for the 15 to 100 keV range / K.D.Joensen, P.Corenstein, F.E.Christensen, P.Hoghoj, E.Ziegler, J.Susini, A.Freund, J.Wood // Proceedings of SPIE. - 1994. - V. 2253. - P. 299-309.
181. Joensen, K.D. X-ray supermirrors: Novel multilayer structures for broad-band hard X-ray applications / K.D.Joensen, P.Corenstein, P.Hoghoj, F.E.Christensen. Physics of X-Ray Multilayer Structures // OSA Technical Digest Series. 1994. - V. 6. - P. 159-162.
182. van Loevezijn, P. Numerical and experimental study of distorted multilayers for broadband X-ray reflection / P. van Loevezijn, R.Schlatmann, J.Verhoeven, B.A. van Tigglen, E.M.Gullikson // Applied Optics. - 1996. - V. 35. - P. 3614-3619.
183. Yoo, K.M. Broad bandwidth X-ray mirror using a multilayer of random thicknesses / K.M. Yoo, N. Gue // Physics Letters A. - 1994. - V. 195. - P. 271-275.
184. Wang, Z. Optimization of depth-graded multilayer designs for EUV and X-ray optics / Z. Wang, A.G. Michett // Proceedings of SPIE. - 2001. - V. 4145. - P. 243-253.

185. Cheng, X. Design of X-ray supermirrors using simulated annealing algorithm / X. Cheng, Z. Wang, Z. Zhang, F. Wang, L. Chen // *Optics Communications*. - 2006. - V. 265. - P. 197-206.
186. Protopopov, V.V. X-ray multilayer mirrors with an extended angular range / V.V. Protopopov, V.A. Kalnov // *Optics Communications*. - 1998. - V. 158. - P. 127-140.
187. Sanchez del Rio, M. Global optimization and reflectivity data fitting for x-ray multilayer mirrors by means of genetic algorithm / M. Sanchez del Rio, G. Pareschi // *Proceedings of SPIE*. - 2001. - V. 4145. - P. 88-96.
188. Powell, K. Simulated annealing in the design of broadband multilayers containing more than two materials / K. Powell, J. M. Tait, A. G. Michette // *Proceedings of SPIE*. - 2001. - V. 4145. - P. 254-265.
189. Колачевский, Н.Н. Широкополосные рентгенооптические элементы на основе аперiodических многослойных структур / Н.Н. Колачевский, А.С. Пирожков, Е.Н. Рагозин // *Квантовая электроника*. - 2000. - Т. 30. - С. 428-434.
190. Колачевский, Н.Н. Аперiodические многослойные зеркала для мягкой рентгеновской спектроскопии / Н.Н. Колачевский, А.С. Пирожков, Е.Н. Рагозин // *Краткие сообщения по физике ФИАН*. - 1998. - № 12. - С. 55-65.
191. Suman, M. Aperiodic multilayers with enhanced reflectivity for extreme ultraviolet lithography / M. Suman, M.-G. Pelizzo, P. Nicolosi, D. L. Windt. // *Applied Optics*. -2008. - V. 47. - P. 2906-2914.
192. Kozhevnikov, I.V. Basic formulae of XUV multilayer optics / I.V. Kozhevnikov, A.V. Vinogradov // *Physica Scripta*. 1987. - V. T17. - P. 137-145.
193. Bushuev, V. Application of quasi-forbidden multilayer Bragg reflection for monochromatization of hard X-ray FEL SASE pulses / V. Bushuev, L. Samoylova // *Nuclear Instruments and Methods A*. - 2011. - V. 635. - P. S19-S23.
194. Vidal, B. Thin films and gratings - Theories to optimize the high reflectivity of mirrors and gratings for X-ray optics / B. Vidal, P. Vincent, P. Dhez, M. Nevriere // *Proceedings of SPIE*. - 1985. - V. 563. - P. 142-149.
195. Аристов В.В. Фокусирующие свойства профилированных много слойных рентгеновских зеркал / В. В. Аристов, С. В. Гапонов, В. М. Генкин, Ю.А. Горбатов, А.И. Ерко, В.В.

- Мартынов, Л.А. Матвеева, Н.Н. Салащенко // Письма в ЖЭТФ. - 1986. - Т. 44. - № 4. - С. 207-209.
196. Sammar, A. Diffraction and scattering by lamellar amplitude multilayer gratings in the X-UV region / A. Sammar, J.-M. André, B. Pardo // Optics Communications. - 1991. - V. 86. - P. 245-254.
197. Erko, A. Multilayer gratings efficiency: numerical and physical experiments / A. Erko, B. Vidal, P. Vincent, et al. // Nuclear Instruments and Methods A. - 1993. - V. 333. - P. 599-606.
198. Sammar, A. Theoretical and experimental study of soft X-ray diffraction by a lamellar multilayer amplitude grating / A. Sammar, M. Quahabi, R. Barchewitz, et al. // Journal of Optics. - 1993. - V. 24. - P. 37-41.
199. Goray, L. Numerical analysis of the efficiency of multilayer-coated gratings using integral method / L. Goray // Nuclear Instruments and Methods A. - 2005. - V. 536. - P. 211-221.
200. Каценеленбаум, Б.З. Высокочастотная электродинамика / Б.З. Каценеленбаум. - М.: Наука, 1966. - 240 с.
201. Yariv, A. Coupled-mode theory for guided-wave optics / A. Yariv // IEEE Journal of Quantum Electronics. - 1973. - V. 9. - P. 919-933.
202. Kogelnik, H. Coupled wave theory for thick hologram gratings / H. Kogelnik // The BELL System Technical Journal. - 1969. - V. 48. - P. 2909-2947.
203. Levashov, V.E. Analytical theory of zone plate efficiency / V.E. Levashov, A.V. Vinogradov // Physical Review E. - 1994. - V. 49. - P. 5797-5803.
204. Fechtchenko, R.M. Optical properties of sliced multilayer gratings / R.M. Fechtchenko, A.V. Vinogradov, D.L. Voronov // Optics Communications. - 2002. - V. 210. - P. 179-186.
205. Vinogradov, A. V. An approach to the theory of X-ray multilayers with graded period / A.V. Vinogradov, R. M. Fechtchenko // Nuclear Instruments and Methods A. - 2000. - V. 448. - P. 142-146.
206. Виноградов, А.В. Интегральные характеристики и методы расчета многослойных зеркал мягкого рентгеновского диапазона / А.В.Виноградов, И.В.Кожевников // Препринт ФИАН. - 1986. - № 103. - 30 с.

207. Louis, E. Physics and technology development of multilayer EUV reflective optics: PhD thesis / Eric Louis. - Twente University, The Netherlands. -2012. - 139 p.
208. Kaiser, N. Si-based multilayers with high thermal stability / N.Kaiser, S.Yulin, T.Feigl // Proceedings of SPIE. - 2000. - V. 4146. - P. 91.
209. Akhsakhalyan, A.D. Determination of layered synthetic microstructure parameters / A.D. Akhsakhalyan, A.A. Fraerman, N.I. Polushkin, Yu.Ya. Platonov, N.N. Salashchenko // Thin Solid Films. - 1991. - V. 203. - P. 317-326.
210. Shellan, J.B. Statistical analysis of Bragg reflectors / J.B. Shellan, P. Agmon, P. Yeh, A. Yariv // Journal of Optical Society of America. - 1978. - V. 68(1). - P. 18-27.
211. Spiller, E. Characterization of Multilayer Coatings by X-Ray Reflection / E. Spiller // Revue de Physique Appliquee. - 1988. - V. 23. - P. 1687-1700.
212. Yakshin, A.E. Determination of the layered structure in Mo/Si multilayers by grazing incidence X-ray reflectometry / A.E. Yakshin, E. Louis, P.C. Gorts, E.L.G. Maas, F. Bijkerk // Physica B. - 2000.- V. 283(1-3). - P. 143-148.
213. Kessels, M.J.H. Determination of in-depth density profiles of multilayer structures / M.J.H. Kessels, F. Bijkerk, F.D. Tichelaar, J. Verhoeven // J. Appl. Phys. 97(9 Issue 9), 093513 (2005).
214. Bajt., S. Investigation of the amorphous-to-crystalline transition in Mo/Si multilayers / S. Bajt, D.G. Stearns, P.A. Kearney. J. Appl. Phys. 90 (2001) 1017-1025.
215. Bajt, S. Improved reflectance and stability of Mo-Si multilayers / S. Bajt, J.B. Alameda, T.W. Barbee, W.M. Clift, J.A. Folta, B. Kaufmann, E. Spiller // Optical Engineering. - 2002. - V. 41. - P. 1797-1804.
216. Nedelcu, I. Microstructure of Mo/Si multilayers with B₄C diffusion barrier layers / I. Nedelcu, R.W.E. van der Kruijs, A.E. Yakshin, F. Bijkerk // Applied Optics. - 2009. - V. 48. - P. 155-160.
217. Feigl, T. Magnetron sputtered EUV mirrors with high thermal stability / T. Feigl, S. Yulin, T. Kuhlmann, N. Kaiser // Proceedings of SPIE. - 2000. - V. 3997. - P. 420-430.
218. Kondratenko, V.V. Thermal stability of soft X-ray Mo-Si and MoSi₂-Si multilayer mirrors / V.V. Kondratenko, Yu.P. Pershin, O.L. Poltseva, A.I. Fedorenko, E.N. Zubarev, S.A. Yulin,

- I.V. Kozhevnikov, S.I. Sagitov, V.A. Chirkov, V.E. Levashov, A.V. Vinogradov // Applied Optics. 1993. - V. 32. - P. 1811-1816.
219. Kopelets, I.A. Evolution of structure, phase composition and X-ray reflectivity of multilayer mirrors Mo-(B+C) after annealing at 400-1100° / I.A. Kopelets, V.V. Kondratenko, A.I. Fedorenko, E.N. Zubarev, O.V. Poltseva, A.G. Ponomarenko, I.I. Lyakhovskaya // Proceedings of SPIE. - 1995. - V. 2453. - P. 25-32.
220. Electromagnetic theory of gratings / R. Petit, Ed. - Berlin: Springer, 1980. - 286 p.
221. Корн, Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. - М.: Наука, 1968. - 720 с.
222. Benbalagh, R. Monochromateurs Multicouches à bande passante étroite et à faible fond continu pour le rayonnement X-UV: PhD Thesis / Benbalagh Rabah. - University of Paris VI, Paris. - 2003.
223. Vinogradov, A.V. X-ray and far UV multilayer mirrors: principles and possibilities / A.V. Vinogradov, B.Ya. Zeldovich // Applied Optics. - 1977. - V. 16. - P. 89-93.
224. Виноградов, А.В. О многослойных зеркалах для рентгеновского и далекого ультрафиолетового диапазона / А.В. Виноградов, Б.Я. Зельдович // Оптика и спектроскопия. - 1977. - Т. 42. - С. 709-714.
225. Balakireva, L.L. Two-period multilayer mirrors for the soft X-ray region / L.L. Balakireva, I.V. Kozhevnikov // Journal of X-Ray Science and Technology. - 1996. - V. 6. - P. 150-166.

Список публикаций автора по теме диссертации

- [A1] Виноградов, А.В. Об эффекте полного внешнего отражения рентгеновских лучей / А.В. Виноградов, Н.Н. Зорев, И.В. Кожевников, И.Г. Якушкин // ЖЭТФ. - 1985. - Т. 89. - С. 2124-2132.
- [A2] Виноградов, А.В. Об особенностях диффузного рассеяния при отражении рентгеновского излучения / Виноградов, Н.Н. Зорев, И.В. Кожевников, С.И. Сагитов, А.Г. Турьянский // Препринт ФИАН. - 1986. - № 319. - 31 с.
- [A3] Виноградов, А.В. О рассеянии рентгеновского излучения слабошероховатыми поверхностями / А.В. Виноградов, Н.Н. Зорев, И.В. Кожевников, С.И. Сагитов, А.Г. Турьянский // ЖЭТФ. - 1988. - Т. 94. - С. 203-216.
- [A4] Виноградов, А.В. Зеркальная рентгеновская оптика / А.В. Виноградов, И.А. Брытов, А.Ю. Грудский, М.Т. Коган, И.В. Кожевников, В.А. Слемзин, 1989. - Л.: Машиностроение. - 464 с.
- [A5] Виноградов, А.В. О применимости метода TIS для исследования шероховатости сверхгладких поверхностей по рассеянию рентгеновского излучения / А.В. Виноградов, И.В. Кожевников, М.М. Митропольский, В.А. Слемзин // Краткие сообщения по физике. - 1989. - № 11. - С. 29-31.
- [A6] Виноградов, А.В. Отражение и рассеяние рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей / А.В. Виноградов, И.В. Кожевников, // Рентгеновская оптика. - Труды ФИАН. - Т.196. М.: Наука. - 1989. - С. 18-46.
- [A7] Vinogradov, A.V. Investigation of superpolished surfaces by X-ray scattering / A.V. Vinogradov, I.A. Artyukov, S.S. Borisova, N.N. Zorev, I.V. Kozhevnikov, I.F. Mikhailov, S.I. Sagitov, A.I. Fedorenko // Proceedings of SPIE. - 1989. - V. 1140. - P. 490-499.
- [A8] Borisova, S.S. Determination of the roughness spectrum of superpolished surfaces by measuring X-ray scattering / S.S. Borisova, I.F. Mikhailov, I.V. Kozhevnikov, A.V. Vinogradov // Optical & Acoustical Review. - 1990. - V. 1. - P. 183-195.
- [A9] Mikerov, V.I. Investigation of interfaces with grazing incident neutron radiation / V.I. Mikerov, A.V. Vinogradov, I.V. Kozhevnikov, F.A. Pudonin, V.A. Tukarev, M.P. Yakovlev // Physica B. - 1991. - V. 174. - P. 174-176.
- [A10] Карабеков, А.Ю. Рассеяние рентгеновского излучения шероховатой пленкой / А.Ю. Карабеков, И.В. Кожевников // Препринт ФИАН. - 1993. - № 6. - 47 с.

- [A11] Karabekov, A.Yu. Interference suppression of X-ray scattering under total external reflection from rough surfaces / A.Yu Karabekov, I.V. Kozhevnikov, V.E. Fedyukovich // Journal of X-Ray Science and Technology. - 1993. - V. 4. - P. 37-43.
- [A12] Kozhevnikov, I.V. X-ray investigations of supersmooth surfaces / I.V. Kozhevnikov, V.E. Asadchikov, B.M. Alaudinov, A.Yu. Karabekov, A.V. Vinogradov // Proceedings of SPIE. - 1994. - V. 2253. - P. 679-690.
- [A13] Karabekov, A.Yu. Peculiarities of X-ray scattering by thin film roughness / A.Yu. Karabekov, I.V. Kozhevnikov // Proceedings of SPIE. - 1995. - V. 2453. - P. 176-185.
- [A14] Kozhevnikov, I.V. Reflection and scattering of x-rays from rough surfaces / I.V. Kozhevnikov, A.V. Vinogradov // Journal of Russian Laser Research. - 1995. - V. 16. - P. 229-258.
- [A15] Кожевников, И.В. О рассеянии волн от шероховатой поверхности конечных размеров / И.В. Кожевников // Поверхность. - 1998. - № 11. - С. 18-24.
- [A16] Асадчиков, В.Е. Экспериментальные исследования корреляции шероховатостей пленки и подложки методом рентгеновского рассеяния / В.Е. Асадчиков, А.Ю. Карабеков, В.В. Клечковская, И.В. Кожевников, В.Е. Левашов, С.И. Сагитов // Кристаллография. - 1998. - Т. 43. - С. 119-130.
- [A17] Асадчиков, В.Е. Исследования микрошероховатостей сверхгладких поверхностей методом рассеяния рентгеновского излучения / В.Е. Асадчиков, Е.Е. Андреев, А.В. Виноградов, А.Ю. Карабеков, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривоносов, А.А. Постнов, С.И. Сагитов // Поверхность. - 1998. - № 7. - С. 17-29.
- [A18] Kozhevnikov, I.V. Theoretical study of multilayer x-ray mirrors with a wide spectral band of reflection / I.V. Kozhevnikov, N.I. Bukreeva, E. Ziegler // Proceedings of SPIE. - 1998. - V. 3448. - P. 322-331.
- [A19] Kozhevnikov, I.V. Comparative study of the roughness of optical surfaces and thin films using atomic force microscopy, x-ray scattering and light scattering methods / I.V. Kozhevnikov, V.E. Asadchikov, A. Duparré, O.N. Gilev, N.A. Havronin, Yu.S. Krivonosov, V.I. Ostashev, J. Steinert // Proceedings of SPIE. - 1999. - V. 3739. - P. 348-354.
- [A20] Asadchikov, V.E. X-ray and AFM studies of ultrathin films for EUV and soft X-ray applications / V.E. Asadchikov, A. Duparré, I.V. Kozhevnikov, Yu.S. Krivonosov, S.I. Sagitov // Proceedings of SPIE. - 1999. - V. 3738. - P. 387-393.
- [A21] Ziegler, E. Depth-graded multilayer mirrors for the hard x-ray spectral region: theory, inverse

and direct problems / E. Ziegler, I.N. Bukreeva, I.V. Kozhevnikov, A.S. Pirozhkov, E.N. Ragozin // Proceedings of SPIE. - 1999. - V. 3737. - P. 386-395.

[A22] Asadchikov, V.E. Comparative study of the roughness of optical surfaces and thin films by use of x-ray scattering and atomic force microscopy / V.E. Asadchikov, A. Duparré, S. Jakobs, A.Yu. Karabekov, I.V. Kozhevnikov, Yu.S. Krivonosov // Applied Optics. - 1999. - V. 38. - P. 684-691.

[A23] Асадчиков, В.Е. Изучение микрорельефа поверхности некоторых материалов для микроэлектроники методом рассеяния рентгеновского излучения в условиях полного внешнего отражения / В.Е. Асадчиков, А.Ю. Карабеков, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривonosов, С.И. Сагитов // Известия ВУЗов. Материалы электронной техники. - 1999. - № 1. - С. 65-69.

[A24] Kozhevnikov, I.V. Use of DWBA and perturbation theory in x-ray control of the surface roughness / I.V. Kozhevnikov, M.V. Pyatakhin // Journal of X-Ray Science and Technology. - 2000. - V. 8. - P. 253-275.

[A25] Kozhevnikov, I.V. X-ray study of the roughness of surfaces and interfaces / I.V. Kozhevnikov, V.E. Asadchikov, I.N. Bukreeva, A. Duparré, Yu.S. Krivonosov, C. Morawe, V.I. Ostashev, M.V. Pyatakhin, E. Ziegler // Proceedings of SPIE. - 2000. - V. 4099. - P. 267-278.

[A26] Kozhevnikov, I.V. Design of x-ray supermirrors / I.V. Kozhevnikov, I.N. Bukreeva, E. Ziegler // Nuclear Instruments and Methods A. -2001. - V. 460. - P. 424-443.

[A27] Асадчиков, В.Е. Метод рентгеновского рассеяния в изучении процесса полировки сверхгладких подложек / В.Е. Асадчиков, А.В. Виноградов, В.Н. Зрюев, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривonosов, Р. Мерсье, И. Намба, С.И. Сагитов, М. Ямамото // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. - 2001. - Т. 67. - С. 19-23.

[A28] Duparré, A. Surface characterization of optical components for the DUV, VUV and EUV / A. Duparré, I. Kozhevnikov, S. Gilech, J. Steinert, G. Notni // Microelectronics Engineering. - 2001. - V. 57-58. - P. 65-70.

[A29] Ziegler, E. Wide-band multilayer mirrors for medium to hard x-ray applications / E. Ziegler, C. Morawe, I.V. Kozhevnikov, T. Bigault, C. Ferrero, A. Tallinder // Proceedings of SPIE. - 2002. - V. 4782. P.

[A30] Morawe, C. Design and fabrication of depth-graded x-ray multilayers / C. Morawe, E. Ziegler, J.-C. Peffen, I.V. Kozhevnikov // Nuclear Instruments and Methods A. - 2002. - V. 493. - P. 189-198.

- [A31] Morawe, C. Depth-graded multilayers / C. Morawe, J.-C. Peffen, I.V. Kozhevnikov // *J. Physique IV France*. - 2003. - V. 104. - P. 239-240.
- [A32] Асадчиков, В.Е. Рентгеновские исследования тонких пленок и приповерхностных слоев твердых тел / В.Е. Асадчиков, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривонос // *Кристаллография*. - 2003. - Т. 48. - С. S43-S58.
- [A33] Асадчиков, В.Е. Рентгеновские исследования поверхностных шероховатостей / В.Е. Асадчиков, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривонос // *Кристаллография*. - 2003. - Т. 48. - С. 897-911.
- [A34] Kozhevnikov, I.V. Physical analysis of the inverse problem of X-ray reflectometry / I.V. Kozhevnikov // *Nuclear Instruments and Methods A*. - 2003. - V. 508. - P. 519-541.
- [A35] Kozhevnikov, I.V. Analysis of X-ray scattering from a rough multilayer mirror in the first-order perturbation theory / I.V. Kozhevnikov // *Nuclear Instruments and Methods A*. - 2003. - V. 498. - P. 482-495.
- [A36] Asadchikov, V.E. Application of x-ray scattering technique to the study of supersmooth surfaces / V.E. Asadchikov, I.V. Kozhevnikov, Yu.S. Krivonosov, R. Mercier, T.H. Metzger, C. Morawe, E. Ziegler // *Nuclear Instruments and Methods A*. - 2004. - V. 530. - P. 575-595.
- [A37] Peverini, L. Roughness conformity during tungsten film growth: An in situ synchrotron x-ray scattering study / L. Peverini, E. Ziegler, T. Bigault, I. Kozhevnikov // *Physical Review B*. - 2005. - V. 71. - P. 045445-6.
- [A38] Кожевников, И.В. Конструирование, изготовление и исследование широкополосных рентгеновских зеркал / И.В. Кожевников, А.С. Воронов, Б.С. Роцин, В.Е. Асадчиков, К.Н. Медников, А.С. Пирожков, Е.Н. Рагозин, Дж. Ванг, Дж. Джонг, Ф. Ванг // *Кристаллография*. - 2006. - Т. 51. - С. 1146-1152.
- [A39] Peverini, L. Dynamic scaling of roughness at the early stage of tungsten film growth / L. Peverini, E. Ziegler, T. Bigault, I. Kozhevnikov // *Physical Review B*. - 2007. - V. 76. - P. 045411-5.
- [A40] Peverini, L. Dynamic scaling in ion etching of tungsten films / L. Peverini, E. Ziegler, I. Kozhevnikov // *Applied Physics Letters*. - 2007. - V. 91. - P. 053121-3.
- [A41] Peverini, L. Dynamic scaling in sputter grown tungsten thin films / L. Peverini, E. Ziegler, I. Kozhevnikov // *Thin Solid Films*. - 2007. - V. 515. - P. 5541-5545.
- [A42] Peverini, L. Real-time X-ray reflectometry during thin-film processing / L. Peverini, I. Kozhevnikov, E. Ziegler // *Phys. Stat. Sol. (a)*. - 2007. - V. 204. - P. 2785-2791.

- [A43] Kozhevnikov, I. Exact solution of the phase problem in in-situ X-ray reflectometry of growing layered films / I. Kozhevnikov, L. Peverini, E. Ziegler // *Journal Applied Physics*. - 2008. - V. 104. - P. 054914-6.
- [A44] Kozhevnikov, I. Exact determination of the phase in time-resolved x-ray reflectometry / I. Kozhevnikov, L. Peverini, E. Ziegler // *Optics Express*. - 2008. - V. 14. - P. 144-149.
- [A45] Кожевников, И.В. Влияние поверхностных шероховатостей на эффективность рентгеновских зеркал с шепчущими модами / И.В. Кожевников // *Кристаллография*. - 2009. - Т. 54. - С. 350-355.
- [A46] Filatova, E.O. Investigation of the structure of thin HfO₂ films by soft x-ray reflectometry techniques / E.O. Filatova, A.A. Sokolov, I.V. Kozhevnikov, E.Yu. Taracheva, O.S. Grunsky, F. Schaefer, W. Braun // *Journal of Physics: Condensed Matter*. - 2009. - V. 21. - P. 185012-7.
- [A47] Filatova, E. Atomic ordering in TiO₂ thin films studied by X-ray reflection spectroscopy / E. Filatova, E. Taracheva, G. Shevchenko, A. Sokolov, I. Kozhevnikov, S. Yulin, F. Schaefer, W. Braun // *Phys. Stat. Solidi B*. 2009. - V. 246. - P. 1454-1458.
- [A48] Kozhevnikov, I.V. Design of X-ray multilayer mirrors with maximal integral efficiency / I.V. Kozhevnikov, C. Montcalm // *Nuclear Instruments and Methods A*. - 2010. - V. 624. - P. 192-202.
- [A49] Filatova, E.O. Evolution of surface morphology at the early stage of Al₂O₃ films growth on a rough substrate / E.O. Filatova, L. Peverini, E. Ziegler, I.V. Kozhevnikov, P. Jonnard, J.-M. André // *Journal of Physics: Condensed Matter*. - 2010. - V. 22. - P. 345003-8.
- [A50] Кожевников, И.В. Общие закономерности отражения рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей. I. Закон сохранения энергии / И.В. Кожевников // *Кристаллография*. - 2010. - Т. 55. - С. 581-587.
- [A51] de Rooij-Lohmann, V.I.T.A. Roughness evolution of Si surfaces upon Ar ion erosion / V.I.T.A. de Rooij-Lohmann, I.V. Kozhevnikov, L. Peverini, E. Ziegler, R. Cuerno, F. Bijkerk, A.E. Yakshin // *Applied Surface Science*. - 2010. - V. 256. - P. 5011-5014.
- [A52] Kozhevnikov, I.V. High-resolution, high-reflectivity operation of lamellar multilayer amplitude gratings: identification of the single-order regime / I.V. Kozhevnikov, R. van der Meer, H. J. M. Bastiaens, K.-J. Boller, F. Bijkerk // *Optics Express*. - 2010. - V. 18. - P. 16234-16242.
- [A53] Yakshin, A.E. Broadband depth-graded multilayer mirrors for EUV optical systems / A. E. Yakshin, I. V. Kozhevnikov, E. Zoethout, E. Louis, F. Bijkerk // *Optics Express*. - 2010. - V. 18. - P. 6957-6971.

- [A54] van der Meer, R. Improved resolution for soft-x-ray monochromatization using lamellar multilayer gratings / R. van der Meer, B. Krishnan, I.V. Kozhevnikov, M.J. de Boer, B. Vratzov, H.M.J. Bastiaens, J. Huskens, W.G. van der Wiel, P.E. Hegeman, C.G.S. Brons, K.-J. Boller, F. Bijkerk // Proceedings of SPIE. - 2011. - V. 8139. - P. 81390Q-8.
- [A55] Kozhevnikov, I.V. Analytic theory of soft X-rays diffraction by lamellar multilayer gratings / I.V. Kozhevnikov, R. van der Meer, H.J.M. Bastiaens, K.-J. Boller, F. Bijkerk // Optics Express. - 2011. - V. 19. - P. 9172-9184.
- [A56] Кожевников, И.В. Обратные задачи в теории многослойных рентгеновских зеркал / И.В. Кожевников // Сборник материалов 3-й международной молодежной научной школы-семинара “Современные методы анализа дифракционных данных” (В. Новгород, 12-16 сентября 2011 г.) - С.64-65.
- [A57] Filatova, E.O. Characterization of High-k Dielectrics Internal Structure by X-Ray Spectroscopy and Reflectometry. New Approaches to Inter Layer Identification and Analysis / E.O. Filatova, I.V. Kozhevnikov, A.A. Sokolov // High-k Gate Dielectrics for SMOS Technology, 2012. - Weinheim: Wiley-VCH Verlag. - Gang He, Ed. - Chapter 7. - P. 225-271.
- [A58] Кожевников, И.В. Общие закономерности отражения рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей. II. Конформные шероховатости / И.В. Кожевников // Кристаллография. - 2012. - Т. 57. - С.417-426.
- [A59] Kozhevnikov, I.V. Development of a self-consistent free-form approach for studying the three-dimensional morphology of a thin film / I.V. Kozhevnikov, L. Peverini, E. Ziegler // Physical Review B. - 2012. - V. 85. - P. 125439-15.
- [A60] Ziegler, E. Comparative study of the morphology of tungsten films after deposition, erosion and oxidation treatments / E. Ziegler, I. V. Kozhevnikov, L. Peverini // 11th Biennial Conference of High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (XTOP 2012, S.Petersburg, 15-20 September 2012). Book of abstracts. - 2012. - P.343.
- [A61] Filatova, E.O. Soft X-ray reflectometry, hard X-ray photoelectron spectroscopy and transmission electron microscopy investigations of the internal structure of $\text{TiO}_2(\text{Ti}) / \text{SiO}_2 / \text{Si}$ stacks / E.O. Filatova, I.V. Kozhevnikov, A.A. Sokolov, E.V. Ubiyovok, S. Yulin, M. Gorgoi, F. Schaefer // Science and Technology of Advanced Materials. - 2012. - V. 13. - P. 015001-12.
- [A62] van der Meer, R. Extended theory of soft x-ray reflection for realistic lamella multilayer gratings / R. van der Meer, I.V. Kozhevnikov, H.M.J. Bastiaens, K.-J. Boller, F. Bijkerk // Optics Express. - 2013. V. 21. - P. 13105-13117.

[A63] van der Meer, R. Single-order operation of lamellar multilayer gratings in the soft x-ray spectral range / R. van der Meer, I. Kozhevnikov, B. Krishnan, J. Huskens, W. van der Wiel, P. Hegeman, C. Brons, B. Bastiaens, K. Boller, F. Bijkerk // AIP Advances. - 2013. - V. 3. - P. 012103-7.