**Multifitting**

**v.2.0.0**

**Руководство пользователя**

обновлено 31 октября 2022

Михаил Свечников

[svechnikovmv@gmail.com](mailto:svechnikovmv@gmail.com)

Данное руководство предназначено для пользователей программы Multifitting. Здесь сказано о назначении программы, о том, как начать ей пользоваться, а также исчерпывающая информация о доступной функциональности и пользовательском интерфейсе. Этот документ будет обновляться вместе с обновлением программы (или даже чаще), чтобы всегда отражать актуальное состояние дел. Интерфейс программы представлен только на английском языке, а данное руководство – на двух языках: русском и английском. Если вы нашли ошибку или вам что-то непонятно – пишите мне на электронную почту [svechnikovmv@gmail.com](mailto:svechnikovmv@gmail.com).

**Оглавление**

[1 Введение 5](#_Toc118926355)

[2 Установка и запуск 6](#_Toc118926356)

[2.1 Windows 6](#_Toc118926357)

[2.2 Linux 6](#_Toc118926358)

[3 Быстрый старт 7](#_Toc118926359)

[3.1 Создание структуры 7](#_Toc118926360)

[3.2 Сохранение и загрузка 7](#_Toc118926361)

[3.3 Вычисление кривой отражения 7](#_Toc118926362)

[3.4 Работа со структурной таблицей 7](#_Toc118926363)

[3.5 Обратная задача 7](#_Toc118926364)

[3.6 Дополнительные экспериментальные кривые 7](#_Toc118926365)

[4 Пользовательский интерфейс 8](#_Toc118926366)

[4.1 Командная строка 8](#_Toc118926367)

[4.2 Главное окно 9](#_Toc118926368)

[4.2.1 Меню 10](#_Toc118926369)

[4.2.2 Вкладки со структурами 12](#_Toc118926370)

[4.2.3 Слоистая структура 13](#_Toc118926371)

[4.2.4 Панель инструментов 13](#_Toc118926372)

[4.2.5 Редактирование элемента структуры 14](#_Toc118926373)

[4.2.6 Панель доступа к другим окнам 25](#_Toc118926374)

[4.2.7 Независимые кривые 25](#_Toc118926375)

[4.2.8 Экспериментальные кривые 33](#_Toc118926376)

[4.3 Structure table 41](#_Toc118926377)

[4.3.1 Меню 42](#_Toc118926378)

[4.3.2 Содержимое таблицы 42](#_Toc118926379)

[4.3.3 Regular aperiodic 56](#_Toc118926380)

[4.4 Profile plot 58](#_Toc118926381)

[4.5 1D graphs 60](#_Toc118926382)

[4.5.1 Настройки 61](#_Toc118926383)

[4.5.2 Настройка цвета кривой 63](#_Toc118926384)

[4.5.3 Дополнительные кривые 63](#_Toc118926385)

[4.6 2D graphs 65](#_Toc118926386)

[4.6.1 Настройки 66](#_Toc118926387)

[4.6.2 Настройка цветовой схемы 68](#_Toc118926388)

[4.7 Roughness spectrum 69](#_Toc118926389)

[4.8 Particles spectrum 70](#_Toc118926390)

[4.9 Calculation settings 71](#_Toc118926391)

[4.9.1 Параметры модели структуры 72](#_Toc118926392)

[4.9.2 Настройки окна 72](#_Toc118926393)

[4.9.3 Зеркальная кривая с экспериментальной сеткой 73](#_Toc118926394)

[4.9.4 Независимая зеркальная кривая 75](#_Toc118926395)

[4.9.5 Рассеяние 76](#_Toc118926396)

[4.10 General settings 76](#_Toc118926397)

[4.10.1 Input/Output 77](#_Toc118926398)

[4.10.2 Calculation 78](#_Toc118926399)

[4.10.3 Interface 79](#_Toc118926400)

[4.11 Fitting settings 80](#_Toc118926401)

[4.12 Fits selector 84](#_Toc118926402)

[5 Задание слоистой структуры 86](#_Toc118926403)

[5.1 Слой 86](#_Toc118926404)

[5.1.1 Материал 87](#_Toc118926405)

[5.1.2 Толщина 87](#_Toc118926406)

[5.1.3 Интерфейс/диффузность 87](#_Toc118926407)

[5.2 Периодическая многослойка 88](#_Toc118926408)

[5.2.1 Перераспределение толщин слоёв внутри периода 89](#_Toc118926409)

[5.2.2 Дрейф толщин по глубине 90](#_Toc118926410)

[5.3 Общая апериодика 91](#_Toc118926411)

[5.4 Регулярная апериодика 92](#_Toc118926412)

[5.5 Шероховатость 94](#_Toc118926413)

[5.5.1 Приближение 94](#_Toc118926414)

[5.5.2 Шероховатость подложки 95](#_Toc118926415)

[5.5.3 Модель репликации 97](#_Toc118926416)

[5.6 Внутрислоевые частицы 99](#_Toc118926417)

[6 Расчёт кривых и загрузка экспериментальных данных 102](#_Toc118926418)

[6.1 Specular scan 103](#_Toc118926419)

[6.1.1 Независимая кривая 103](#_Toc118926420)

[6.1.2 Экспериментальная кривая 104](#_Toc118926421)

[6.2 Detector scan 105](#_Toc118926422)

[6.3 Rocking scan 105](#_Toc118926423)

[6.4 Offset scan 105](#_Toc118926424)

[6.5 GISAS map 106](#_Toc118926425)

[6.5.1 Независимая кривая 106](#_Toc118926426)

[6.5.2 Экспериментальная кривая 106](#_Toc118926427)

[6.6 Визуализация результатов расчёта 107](#_Toc118926428)

[7 Оптимизация и подгонка 109](#_Toc118926429)

[7.1 <……………..> **Error! Bookmark not defined.**](#_Toc118926430)

[8 Экспорт и импорт данных 116](#_Toc118926431)

[8.1 Экспериментальные кривые 116](#_Toc118926432)

[8.1.1 Формат данных 117](#_Toc118926433)

[8.1.2 Импорт 118](#_Toc118926434)

[8.1.3 Экспорт ранее загруженных данных 119](#_Toc118926435)

[8.2 Экспорт симулированных данных 120](#_Toc118926436)

[8.3 Импорт PSD шероховатости 123](#_Toc118926437)

[8.4 Структура 124](#_Toc118926438)

[8.4.1 Экспорт всей структуры 124](#_Toc118926439)

[8.4.2 Апериодика 125](#_Toc118926440)

[8.5 Профиль структуры 128](#_Toc118926441)

[9 Оптические константы материалов 132](#_Toc118926442)

[9.1 Библиотека материалов «nk» 132](#_Toc118926443)

[9.2 Библиотека атомных факторов «f1f2» 134](#_Toc118926444)

[10 Модели и методы 136](#_Toc118926445)

[10.1 Поле в слоистой структуре 136](#_Toc118926446)

[10.2 Переходные области на интерфейсах 139](#_Toc118926447)

[11 История версий 140](#_Toc118926448)

[12 Список сокращений 142](#_Toc118926449)

[13 Список цитируемой литературы 143](#_Toc118926450)

# Введение

Программа Multifitting предназначена для численного моделирования отражения и пропускания коротковолнового излучения планарной многослойной структурой, а также расчёт распределения интенсивности излучения в структуре, расчёт интенсивности излучения, рассеянного на межслоевых шероховатостях и на внутрислоевых отклонениях диэлектрической проницаемости (встроенные частицы или флуктуации плотности). Подобные расчёты требуются для диагностики структур рентгеновскими методами, оценки эффективности отражающих покрытий и пропускающих абсорбционных фильтров, а также для разработки покрытий с максимальным интегральным отражением. Многослойная структура может включать, подложку, отдельные слои, периодические участки произвольной степени вложенности, апериодические участки. Каждый слой структуры характеризуется материалом, плотностью, толщиной, интерфейсом на верхней границе данного слоя, шероховатостью, параметрами внутрислоевых неоднородностей. При расчёте учитывается ряд аппаратных эффектов, влияющих на наблюдаемую величину, таких как конечное угловое и энергетическое разрешение, поляризация, конечные размеры зондирующего пучка и образца, размер детектора и другие. Multifitting использует базу оптических констант программы IMD [1] с небольшими добавлениями. Материалы могут быть заданы по названию файла (как правило, химическая формула) при наличии подходящего вещества в базе данных или составлены из отдельных химических элементов с произвольными стехиометрическими соотношениями.

Подобные программы для численного моделирования оптических свойств слоистых структур создаются регулярно, как бесплатные так коммерческие. Часть можно увидеть здесь <http://gisaxs.com/index.php/Software> и здесь <https://www.reflectometry.org/information/software>. Одна из наиболее известных и наиболее массово используемых программ для разработки и диагностики рентгенооптических покрытий и свободновисящих структур – это IMD [1]. За более чем 20 лет она стала фактически стандартным инструментом в рентгеновской оптике. Именно её интерфейс и функциональные возможности я взял за эталон и адаптировал для ряда задач.

Multifitting обладает графическим интерфейсом, специально предназначенным для быстрого изменения параметров структуры и мгновенного отображения результатов вычисления. Это особенно важно при диагностике образцов, когда модель структуры или параметры измерения известны не точно, и требуется *вручную* рассмотреть множество вариантов. При частом решении подобных задач вопросы эргономики интерфейса выходят на передний план (при наличии требуемой функциональности, разумеется), поэтому Multifitting рекомендуется всем, кто занимается рентгеновской диагностикой тонких пленок, и в особенности – тем, кто делает это регулярно.

Базовая информация о Multifitting опубликована в журнале Journal of Applied Crystallography [2]: M. Svechnikov, "Multifitting : software for the reflectometric reconstruction of multilayer nanofilms," J. Appl. Crystallogr. **53**(1), 244–252 (2020). При публикации ваших результатов, полученных с помощью Multifitting, просьба ссылаться на эту статью.

# Установка и запуск

Multifitting доступен для Windows (начиная с Windows 7) и Linux. Скачать его можно с сайта Лаборатории рентгеновской оптики Института физики микроструктур Российской академии наук. Страница на русском: <http://xray-optics.ru/products/software-multifitting/> и на английском: <http://xray-optics.org/products/software-multifitting/>. Программа бесплатна для всех пользователей.

## Windows

Установки как таковой не требуется, достаточно скачать архив, распаковать его и запустить исполняемый файл. В зависимости от разрядности операционной системы следует запускать файл из соответствующей папки: «Multifitting\_v.X.Y.Z/windows\_x64/Multifitting.exe» или «Multifitting\_v.X.Y.Z/windows\_x86/Multifitting.exe», где «X.Y.Z» – номер версии. Рекомендую запускать Multifitting из командной строки, т.к. в случае возникновения ошибки и аварийного закрытия программы можно будет прочитать код ошибки, чтобы в дальнейшем сообщить о нём.

Если при запуске программы вы получаете следующее сообщение:

1. Сообщение от Windows

то это означает отсутствие «стандартных» системных библиотек в системе. Исправить это можно, скачав установочный пакет «Microsoft Visual C++ 2015 Redistributable» (<https://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=53840>) и установив его в соответствии с разрядностью вашей операционной системы.

## Linux

В распространяемом архиве находятся все необходимые библиотеки и исполняемый файл. Исполняемый файл «Multifitting\_v.X.Y.Z/linux\_x64/Multifitting».

# Быстрый старт

Хороший способ познакомиться с программой и оценить её возможности – это начать сразу с ней работать. Здесь приведена пошаговая инструкция по созданию модельной структуры в Multifitting, основам работы с ней, сопоставлению структуре внешних “экспериментальных” данных и решению задачи диагностики – нахождения параметров структуры по кривой отражения.

## Создание структуры

## Сохранение и загрузка

## Вычисление кривой отражения

## Работа со структурной таблицей

## Обратная задача

## Дополнительные экспериментальные кривые

# Пользовательский интерфейс

Multifitting имеет многооконный интерфейс, это даёт возможность иметь одновременно большое количество необходимых в данный момент параметров перед глазами на ограниченном пространстве экрана. Многооконность позволяет с бо́льшим удобством пользоваться программой при работе с несколькими мониторами. Положение и размер окон запоминается автоматически: при следующем открытии программы окна будут открываться в тех же позициях, что и в предыдущий раз. Сохранение геометрии окон происходит при штатном завершении, т.е. при закрытии главного окна, но не происходит при нештатном, т.е. при вылетах в результате ошибки, закрытии командной строки, из которой запущена программа, или при принудительном закрытии средствами операционной системы.

## Командная строка

Командная строка одновременно служит для вывода текстовой информации о текущем состоянии программы и сообщений о внутрипрограммных ошибках. Командная строка запустится автоматически при запуске исполняемого файла Multifitting, но я рекомендую сначала отдельно открыть командную строку, а затем уже в ней запустить Multifitting; таким образом при аварийном завершении программы вывод не будет потерян и можно будет установить причину вылета.

1. Text

   Description automatically generatedПример информации в командной строке

В командной строке выводится информация о фактах открытия и сохранения проектов, о времени расчёта, о величине невязки между измеренными и рассчитанными кривыми. При подгонке в консоль выводятся номер итерации, значение полной невязки и текущие значения подгоняемых параметров, что позволяет следить за прогрессом операции.

## Главное окно

1. Структура основного окна

Меню

Слоистая структура

Панель инструментов

Доступ к остальным окнам

Экспериментальные данные

Кривые без экспериментальных данных

Вкладки со структурами



Основное окно появляется при запуске программы и во многом повторяет основное окно IMD. Различные зоны расположены в главном окне по вертикали. Первая сверху область – главное меню.

### Меню

#### File

Меню «File» содержит в основном действия по загрузке и сохранению данных. Почти все они имеют соответствующие сочетания клавиш. Сопутствующие настройки также находятся в окне «[General settings](#_General_settings)». Подробности, касающиеся названий и содержимого файлов описаны в главе [**Экспорт и импорт данных**](#_Экспорт_и_импорт_1).

1. Главное меню «File»

* «Open last» – точное действие зависит от настроек. Основной смысл – сразу после запуска программы начать работу с последним проектом. Если в окне «General settings» включена опция «Always open last file», то будет открыт последний проект. Если нет – в рабочей директории будет открыт файл с названием «save\_v.X.Y.Z.fit», где X.Y.Z – номер версии Multifitting. Если такого файла не существует, будет показано соответствующее уведомление. Рабочая директория также устанавливается в окне «General settings».
* «Open» открывает диалоговое окно для выбора файла проекта.
* «Save» сохраняет текущий проект. Если проект новый, то он будет сохранён под именем «save\_v.X.Y.Z.fit» в рабочей директории.
* «Save as» открывает диалоговое окно для сохранения проекта.
* «Export structures» сохраняет информацию о слоистой структуре в текстовом файле «structure\_<struct\_name>.txt», где <struct\_name> – название конкретной структуры (вкладки). Если вкладок несколько – файлов тоже будет несколько.
* «Export curves» вычисляет и сохраняет все вычисленные кривые в текстовых файлах с названием «<struct\_name>\_target\_<N>\_<curve\_name>.txt» или «<struct\_name>\_independent\_<curve\_name>.txt». «target» или «independent» означает, что кривая рассчитана по независимой или экспериментальной сетке. «<N>» – порядковый номер экспериментальной кривой, считая от 1. «<curve\_name>» – редактируемое имя кривой.
* «Export profile» экспортирует профиль многослойной структуры в файл. В зависимости от настроек, экспортируется диэлектрическая проницаемость, относительная плотность материала, концентрации химических элементов.

#### Calculate

1. Главное меню «Calculate»

* «Calculate curves» запускает единичное вычисление. Результаты вычислений при этом могут автоматически сохраняться в текстовый файл в зависимости от настроек «[General settings](#_General_settings)».
* «Start fitting» запускает автоматическую подгонку.
* «Calculate confidence intervals» запускает серию фитов при разных значениях оцениваемых параметров для определения доверительных интервалов. Результат сохраняется в файле «confidence.txt»
* «Abort calculation» останавливает текущую подгонку.

#### Optical constants

1. Главное меню «Optical constants»

* «Reload optical constants» заново считывает базу оптических констант из папок «nk» и «f1f2». Это позволяет применять изменения, внесённые в базу, без перезапуска программы.

#### Help

1. Главное меню «Help»



* «Multifitting (Russian).pdf» открывает руководство на русском языке.
* «Multifitting (English).pdf» открывает руководство на английском языке.
* «About Multifitting» показывает информационное окно.

### Вкладки со структурами

1. Добавление структуры: дублирование существующей или создание новой



Главное окно содержит одну или несколько вкладок, каждая из которых посвящена одной структуре. Изменить название вкладки можно двойным кликом по ней.

*На заметку*: Рекомендуется всегда присваивать уникальные имена моделируемым структурам. Если структура соответствует реальному образцу – давать имя этого образца. Так впоследствии всегда можно будет видеть с чем именно вы работаете и не зависеть от названия файла проекта. Особенно это важно, если в одном проекте несколько структур.

Также каждую вкладку со всем её содержимым можно продублировать, вызвав контекстное меню правой кнопкой мыши. Уничтожить структуру можно, нажав красную кнопку с крестом на вкладке. Чтобы добавить новую «пустую» вкладку, следует нажать на кнопку «+» в правом верхнем углу. Перетаскивая вкладки, можно менять их порядок. Если параллельно открыто хотя бы одно из окон «Structure table», «Profile plot», «1D graphs», «2D graphs», «Roughness spectrum», «Particles spectrum», «Calculation settings», то возможность добавлять, убирать и двигать вкладки блокируется. Все перечисленные окна содержат столько же вкладок, сколько и главное окно.

### Слоистая структура

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedДревовидный список, описывающий структуру

Под названием вкладки располагается окно с древовидным списком, иллюстрирующим общий вид многослойной структуры и показывающим основную информацию о её параметрах. Для слоёв это материал, толщина «z», разброс толщин (если слой в составе «регулярной» апериодики), относительная или абсолютная плотность «ρ», среднеквадратичная толщина переходной области на верхней границе данного слоя «s». Для подложки это материал, плотность и толщина переходной области. Для периодической многослойки это число периодов N, толщина периода d, толщинный фактор γ – отношение толщины верхнего слоя к толщине периода (если в периоде 2 слоя).

### Панель инструментов

Под структурой находится панель инструментов, позволяющих добавлять, удалять, копировать, вставлять и перемещать компоненты структуры.

1. Панель инструментов



Добавить слой

Добавить многослойку

Добавить апериодику

Редактировать

Удалить

Вырезать

Скопировать

Вставить

Переместить вверх

Переместить

вниз

Разгруппировать

Удалить все слои

*  «Add layer» вставляет новый слой с параметрами по умолчанию.
*  «Add multilayer» вставляет периодическую структуру с 2 слоями в ячейке и 1 периодом по умолчанию. Можно добавлять новые слои в ячейку после создания.
*  «Add aperiodic multilayer» добавляет апериодическую структуру, считанную из текстового файла. Подробности – в главе [**Импорт и экспорт данных**](#_Импорт_общей_апериодики).
*  «Edit» открывает окно с основными свойствами слоя/многослойки. Эквивалентное действие – двойной клик по соответствующему элементу структуры. Настройки описаны в главе [**Редактирование элемента структуры**](#_Редактирование_элемента_структуры)**.**
*  «Remove» удаляет элемент структуры. Эквивалент – клавиша «Delete».
*  «Cut» вырезает элемент структуры и помещает его в буфер обмена. Комбинация клавиш: «Ctrl+X»
*  «Copy» помещает элемент структуры в буфер обмена. Комбинация клавиш: «Ctrl+С»
*  «Paste» вставляет элемент структуры из буфера обмена. Комбинация клавиш: «Ctrl+V»
*  «Move up» перемещает элемент вверх по структуре.
*  «Move down» перемещает элемент вниз по структуре.
*  «Ungroup» удаляет многослойку и вставляет на её место, элементы, бывшие в её составе. Понижает вложенность структуры.
*  «Remove all layers» удаляет все элементы, кроме подложки и внешней среды.

### Редактирование элемента структуры

При двойном клике по элементу структуры или при нажатии «Edit» открывается окно, в котором задаются основные характеристики. Существует несколько типов элементов: слой (layer), подложка (substrate), внешняя среда (ambient), периодическая многослойка (multilayer), общая апериодическая многослойка (general aperiodic), регулярная апериодическая многослойка (regular aperiodic). Закрыть окно можно кнопкой «Close», нажатием клавиши «Enter» или «Escape».

#### Layer

1. Слои на схеме структуры



1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Layer»

Структурно окно состоит из следующих частей: заголовок, меню, блок настройки материала, блок настройки толщины, блок настройки межслоевого интерфейса.

##### Заголовок

1. Заголовок окна «Layer»



Материал

Тип элемента = слой

Индекс слоя

Заголовок окна позволяет однозначно идентифицировать с каким элементом структуры вы сейчас имеете дело. Каждый слой имеет индекс – уникальный порядковый номер в структуре, который указывается в скобках. Индексируются только слои структуры. Также в заголовке указывается материал слоя.

##### Меню

1. Меню окна «Layer»



Меню «Length units» позволяет переключить единицы длины для структурных параметров. Изменения применяются ко всей программе. В меню «Precision» можно менять количество знаков после запятой, используемое для представления значений параметров.

##### Material

1. Блок «Material» с табулированным материалом



В Multifitting есть два способа задать материал. Первый – воспользоваться библиотекой показателей преломления, расположенной в папке «nk». Для этого нужно установить переключатель в положение «Optical constants filename». В поле «Material» указывается название текстового файла «\*.nk» которое служит и названием материала. Также можно указать файл вне библиотеки, нажав кнопку «Browse…». Настоящая плотность материала не обязательно известна, т.к. задан именно показатель преломления. Но эту плотность можно изменять, задавая параметр «Relative density». Это фактор, на который умножается номинальная поляризуемость вещества.

Другой способ определить материал – сконструировать его из химических элементов с указанием стехиометрии и плотности.

1. Блок «Material» с материалом, сконструированным   
   из отдельных химических элементов



Для этого нужно установить переключатель в положение «Composition of elements». Поле «Material» станет нередактируемым. В блоке «Composition» можно добавлять и убирать химические элементы кнопками «More elements» и «Fewer elements». Каждый из элементов выбирается из выпадающего списка. Элементы можно также прокручивать колесом мыши, а нажатием буквы на клавиатуре можно перейти к элементу, начинающемуся на эту букву. Если число элементов больше одного, то можно задавать стехиометрическое соотношение между ними. Это именно соотношение количества атомов между собой, т.е. «WSi2» – то же самое, что «W2Si4». Абсолютная концентрация атомов задаётся абсолютной же плотностью материала, в г/см3.

##### Thickness

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Блок «Thickness»

Здесь можно задать толщину слоя.

Если слой является частью периодической многослойки, то он при расчёте он дублируется N раз, где N – число периодов. В этом случае помимо базовой толщины можно указать и изменение толщины слоя от периода к периоду. Для этого присутствует кнопка «Thickness drift». Если её нажать, то откроется окно:

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Thickness drift»

«Linear drift» задаёт изменение толщины слоя по глубине структуры, пропорциональное номеру периода. Дрейф задаётся в процентах от номинальной толщины за один период. Средняя толщина слоя по всем периодам равна номинальной толщине, т.е. с одной стороны слои будут тоньше, а с другой стороны толще.

«Sine drift» задаёт изменение периодическое изменение толщины по глубине, описываемое синусоидой. Амплитуда задаётся в процентах от номинальной толщины. Частота задаётся в «обратных периодах», т.е. значение 0.3333 означает, что толщина слоя повторяется каждые три периода. Фаза определяет начальное положение модулирующей синусоиды, задаётся в диапазоне от 0 до 1.

«Random drift» определяет случайное отклонение толщины слоя от номинала. Указывается среднеквадратическое отклонение в процентах от номинальной толщины, сами толщины генерируются случайным образом с гауссовой статистикой при каждом вычислении.

##### Diffuseness

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Блок «Diffuseness»

Diffuseness – это величина взаимопроникновения материалов слоёв друг в друга, их перемешивание на границе. Её можно понимать и как предел шероховатости с латеральной корреляцией, стремящейся к нулю. Толщина переходной области задаётся в среднеквадратичном смысле (параметр «s»), а вид распределения можно выбрать из нескольких вариантов. Распределение вещества в переходной области составляется из нескольких функций с соответствующими весами [3]. По умолчанию среднеквадратичная толщина одинакова для всех функций, но если включить «Individual “s”», то для каждой функции профиля можно установить и индивидуальную толщину.

Если слой является частью периодической многослойки, то как и в случае с толщиной слоя, можно указать и изменение толщины межслоевого интерфейса от периода к периоду. Для этого служит кнопка «Diffuseness drift». Окно настройки дрейфа интерфейса [точно такое же](#Thickness_drift), как и для толщины.

#### Substrate

1. Подложка на схеме структуры



1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedОкно «Substrate»

Окно «Substrate» такое же, как и окно «Layer», но не содержит толщину. Толщина подложки считается бесконечной. В заголовке также указан материал и написано, что это подложка. [Меню](#_Меню), [блок настройки материала](#_Material), [блок настройки межслоевого интерфейса](#_Diffuseness) – такие же, как и для слоя.

#### Ambient

1. Внешняя среда на схеме структуры



1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedОкно «Ambient»

Окно «Ambient» такое же, как и окно «Layer», но не содержит толщину и интерфейс. [Меню](#_Меню), [блок настройки материала](#_Material) – такие же, как и для слоя.

#### Multilayer

1. Периодическая многослойка на схеме структуры



1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Multilayer»

Структурно окно «Multilayer» состоит из следующих частей: заголовок, меню, блок настройки параметров, блок управления типом структуры.

##### Заголовок

1. Заголовок окна «Multilayer»



Тип элемента = многослойка

Индексы слоёв внутри многослойки

Заголовок окна указывает, что вы имеете дело с периодической многослойкой. В скобках указан диапазон индексов слоёв, находящихся внутри этой структуры.

##### Меню

1. Меню окна «Multilayer»



Меню «Length units» позволяет переключить единицы длины. В меню «Precision» можно менять количество знаков после запятой, используемое для представления значений параметров. Изменения применяются ко всей программе.

##### Параметры

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Блок настройки параметров

Первый параметр периодической многослойки – число периодов N = 0, 1, 2 …

Второй параметр – период, т.е. толщина элементарной ячейки, состоящей из нескольких слоев.

Третий параметр – толщинный фактор γ. Это отношение толщины верхнего слоя элементарной ячейки к периоду. Толщинный фактор указывается только при числе слоёв в периоде, равном двум. При большем числе слоёв он теряет смысл.

##### Управление типом структуры

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Блок управления типом структуры

Периодическая многослойка может быть превращена в регулярную или общую апериодику выбором соответствующей опции. При этом число слоёв в апериодике будет соответствовать полному числу слоёв в периодической структуре с учётом количества периодов. Исключение – если в периодической структуре 0 периодов, то количество периодов будет сначала увеличено до 1 и только потом периодика будет превращена в апериодику.

«Invert order of layers» позволяет быстро изменить порядок следования слоёв в элементарной ячейке на противоположный.

#### Regular aperiodic

1. Регулярная апериодика на схеме структуры



1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Regular aperiodic»

Структурно окно «Regular aperiodic» состоит из следующих частей: заголовок, блок ограничения параметров, блок управления типом структуры.

Кнопка «Layers» открывает [детальную таблицу слоёв](#_Regular_aperiodic).

##### Заголовок

1. Заголовок окна «Regular aperiodic»



Тип элемента = регулярная апериодика

Индексы слоёв внутри апериодики

Заголовок окна указывает, что вы имеете дело с регулярной апериодикой. В скобках указан диапазон индексов слоёв, находящихся внутри этой структуры.

##### Параметры

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Блок настройки параметров

В этом окне нельзя напрямую работать с параметрами слоёв, но можно накладывать связи и ограничения на толщины и интерфейсы «одинаковых» слоёв в разных элементарных ячейках апериодики. У каждого слоя указывается материал, а также является ли этот материал скомпонованным из химических элементов – «(composed)» – или взятым из библиотеки готовых материалов – «(tabular)».

«Common “z”» указывает, что все слои с данным индексом будут иметь одинаковую толщину во всех элементарных ячейках.

«Common “s”» указывает, что все слои с данным индексом будут иметь одинаковое перемешивание на интерфейсах во всех элементарных ячейках.

Если для всех слоёв включены «Common “z”» и «Common “s”», то структура является периодической.

«Restrict z: {±Δ, p, Q}» указывает, что при автоматической оптимизации/подгонке толщин будет применяться «мягкое» ограничение: если толщина любого слоя будет отличаться больше, чем на величину Δ от средней толщины слоёв данного типа, то к величине минимизируемой функции будет прибавляться «штраф», а именно следующая величина: , где z – толщина слоя, <z> - средняя толщина слоёв данного типа, p – показатель степени, отвечающей за скорость нарастания штрафа с увеличением отклонения, а Q – весовой фактор. Таким образом, толщинам «невыгодно» далеко выходить за указанные пределы ±Δ.

##### Управление типом структуры

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Блок управления типом структуры

Регулярная апериодика может быть превращена в периодическую структуру или общую апериодику выбором соответствующей опции.

«Invert order of layers» позволяет быстро изменить порядок следования слоёв в элементарной ячейке на противоположный.

#### General aperiodic

1. Общая апериодика на схеме структуры



1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedОкно «General aperiodic»

Структурно окно «General aperiodic» состоит из следующих частей: заголовок, блок ограничения параметров, блок управления типом структуры.

##### Заголовок

1. Заголовок окна «General aperiodic»



Тип элемента = общая апериодика

Индексы слоёв внутри апериодики

Заголовок окна указывает, что вы имеете дело с общей апериодикой. В скобках указан диапазон индексов слоёв внутри этой структуры. В отличие от периодической структуры или регулярной апериодики, здесь все слои присутствуют в качестве отдельных элементов. Структура «развёрнута».

##### Параметры

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generated Блок настройки параметров

Общая апериодика не управляет параметрами содержащихся в ней слоёв, но она позволяет массово накладывать и снимать связи между толщинами/интерфейсами слоёв и массово включать и выключать их подгонку. В отличие от регулярной апериодики здесь нет понятия элементарной ячейки; слои могут быть абсолютно произвольными. Поэтому различные «типы» слоёв, перечисленные в этом блоке, определяются исключительно по материалу слоя. При этом учитывается использование табличных данных для готового материала «(tabular)» или композиции отдельных химических элементов «(composed)».

«Link “z”» указывает, что все толщины всех слоёв с данным материалом будут зависимыми от толщины верхнего из них. Функция, определяющая связь, может быть задана индивидуально в таблице параметров. Аналогично, «Link “s”» связывает интерфейсы слоёв.

«Fit “z”» включает/выключает подгонку толщины для всех слоёв из соответствующего материала. «Fit “s”» делает то же самое для интерфейсов.

##### Управление типом структуры

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generated Блок управления типом структуры

Общая апериодика может быть превращена в регулярную или периодическую структуру выбором соответствующей опции. Если при этом в апериодике содержится периодическая подпоследовательность материалов, то эта подпоследовательность и станет элементарной ячейкой. В противном случае структура не может быть «свёрнута» и элементарная ячейка будет размером со всю общую апериодику.

«Invert order of layers» позволяет быстро изменить порядок следования слоёв в элементарной ячейке на противоположный.

### Панель доступа к другим окнам

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedДоступ к другим инструментам

Следующими идут кнопки доступа к вспомогательным инструментам, позволяющим детально управлять параметрами структуры, строить графики, делать автоматическую подгонку и менять различные настройки. Их особенности описаны частично здесь, в подразделах главы [**Пользовательский интерфейс**](#_Пользовательский_интерфейс)**,** частично – в тематических главах.

### Независимые кривые

1. Вкладки с кривыми для расчёта без экспериментальной сетки

Далее расположены средства управления «независимыми» кривыми. Для задания и расчёта независимых кривых не нужно привлекать никаких внешних данных, достаточно указать тип измерения, инструментальные параметры, задать тип и диапазон значений аргумента, количество точек для расчёта.

Каждой независимой кривой соответствует вкладка. Создавать новые, дублировать, удалять можно точно так же, как [**Вкладки со структурами**](#_Вкладки_со_структурами). Двойной клик по вкладке позволяет задать имя кривой. Справа от кнопки «Set up» написана основная информация: тип измерения, диапазоны/значения углов и длин волн.

Кнопка «Set up» открывает окно настроек кривой. Если это происходит в новой вкладке, где тип измерения ещё не задан, то откроется окно с выбором вариантов:

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedВыбор типа измерения

После задания типа кривой откроется соответствующее окно настроек.

#### Specular scan

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedНастройки рефлектометрической кривой

Все настройки разделены на несколько групп, расположенных по вертикали: «Units», «Argument», «Beam», «Detector», «Footprint and distortion». Закрыть окно можно, нажав «Close» или клавишей «Escape».

##### Units

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Units»

Здесь задаются угловые и спектральные единицы. При изменении единиц отображаемые значения параметров пересчитываются. Этот блок одинаковый для всех типов кривых.

##### Argument

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Argument»

Задаётся тип аргумента (угол скольжения пучка или длина волны), число точек и диапазон.

##### Beam

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Beam»

Если аргумент – угол скольжения пучка, то здесь задаётся фиксированная длина волны. Если аргумент – длина волны, то здесь задаётся фиксированный угол скольжения. Также можно указать спектральную ширину пучка и угловую расходимость в плоскости падения. Задаётся величина FWHM – полная ширина на половинной высоте.

Дополнительно можно указать поляризацию падающего пучка: 1 – это s-поляризация, -1 – это p-поляризация, а промежуточные значения соответствуют их вмеси в соответствующей пропорции.

Фон – это величина интенсивности, которая прибавляется ко всем точкам расчётной кривой. На вычисления и на процесс автоматической подгонки не влияет. Предназначен для удобства сравнения расчётной и измеренной кривых.

##### Detector

1. Блок «Detector» с щелевым (a) или кристаллическим (b) типом детектора



(a)



(b)

Здесь указываются тип и параметры детектора. Параметрами являются расстояние образец-детектор, азимутальный размер окна детектора («Slit length»). Если детектор щелевой, то полярный размер детектора задаётся шириной щели. Если детектор содержит кристалл-анализатор – то шириной пика и его формой. Этот блок одинаковый для всех одномерных кривых (кроме GISAS).

##### Footprint and distortion

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Footprint and distortion»

Этот блок одинаковый для всех типов кривых. Здесь указываются геометрические параметры пучка и образца. У пучка задаётся ширина в плоскости падения, профиль («Profile smoothing»), размер в направлении, перпендикулярном плоскости падения («Lateral width»). Помимо основной колоколообразной формы, сечение пучка может иметь дополнительный «пьедестал» малой интенсивности («Wings»). Профиль пучка в плоскости падения показан на графике в линейном или логарифмическом масштабе.

Образец обладает размером в направлении пучка, смещением вдоль пучка («X-position»), смещением по вертикали к поверхности («Z-position»), кривизной. Эти параметры иллюстрируются изображением образца относительной пучка.

#### Detector scan

Блоки [«Units](#_Units)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии.

##### Argument

1. Блок «Argument»



Аргументом является полярный угол детектора, для которого задаётся число точек и диапазон.

##### Beam

1. Блок «Beam»



Почти все параметры те же самые, что и в [зеркальной геометрии](#_Beam). Дополнительный параметр – фиксированный угол скольжения пучка (или зеркальный угол).

#### Rocking scan

Блоки [«Units](#_Units)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии.

##### Argument

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Argument»

При вычислении кривой качания меняются и угол скольжения пучка, и угол рассеяния. В качестве аргумента можно выбрать или угол скольжения пучка или отклонение образца от зеркального положения. Аргументом является полярный угол детектора, для которого задаётся число точек и диапазон.

##### Beam

1. Блок «Beam»



Почти все параметры те же самые, что и в [зеркальной геометрии](#_Beam). Дополнительный параметр – зеркальное положение, т.е. угол скольжения падающего пучка, при котором в детектор приходит отражённый пучок.

#### Offset scan

Блоки [«Units](#_Units)», «[Argument](#_Argument)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии.

##### Beam

1. Блок «Beam»



Почти все параметры те же самые, что и в [зеркальной геометрии](#_Beam). Дополнительный параметр – постоянный угловой сдвиг детектора от зеркального положения.

#### GISAS map

Блоки [«Units](#_Units)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии.

##### Argument

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Argument»

Рассеяние двумерное, поэтому аргументов здесь два: полярный и азимутальный угол детектора. Каждый задаётся количеством точек и диапазоном значений.

##### Beam

1. Блок «Beam»



Почти все параметры те же самые, что и в [зеркальной геометрии](#_Beam). Дополнительно указывается угол скольжения пучка и азимутальная угловая расходимость пучка.

##### Detector

1. Блок «Detector» со сферическим (a) или пиксельным (b) типом детектора



(b)



(a)

Здесь указываются расстояние образец-детектор и, при необходимости, угловые или линейные размер пикселя и приёмная функция.

### Экспериментальные кривые

1. Список загруженных данных

В самом низу главного окна содержится перечень загруженных экспериментальных кривых с кратким описанием. Краткая информация в строке включает: порядковый номер, имя (если есть), тип измерения, диапазоны углов и длин волн. Строки также можно дублировать, вызвав контекстное меню на тексте с описанием кривой. Кнопки «Add row» и  соответственно добавляют и удаляют строку. Экспериментальную кривую со всеми её настройками можно продублировать, вызвав контекстное меню правой кнопкой мыши.

Для загрузки данных и/или изменения параметров измерения нужно нажать кнопку «Import». Как и для независимой кривой, если это новая кривая, у которой тип измерения ещё не задан, то откроется окно с выбором вариантов:

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedВыбор типа измерения

После задания типа кривой откроется соответствующее окно настроек.

#### Specular scan

1. Chart

   Description automatically generatedНастройки экспериментальной рефлектометрической кривой

В верхней части показывается график загруженной кривой с учётом единиц измерения, масштабирования, сдвигов аргумента и значения функции, заданных в данном окне. При включённой опции «Fit only data between argument» в блоке «Argument» область, исключенная из подгонки обозначается сиреневым цветом. В блоке «Plot options» можно переключаться между линейным и логарифмическим масштабом по вертикальной оси.

##### Measurement

1. Chart

   Description automatically generatedБлок «Measurement»

В левой части блока можно задать имя кривой, это может быть полезно в дальнейшей работе, особенно если кривых несколько. В оставшейся части можно указать файл с данными для загрузки. Путь можно написать вручную или вставить, можно воспользоваться файловым диалоговым окном, нажав кнопку «Browse…». Или можно мышью перетащить нужный файл в окно настроек.

##### Argument

1. Graphical user interface

   Description automatically generated Блок «Argument»

Задаётся тип аргумента: угол скольжения пучка или длина волны. Следующий пункт – единицы измерения. Именно здесь следует указать, в каких единицах должны быть считаны значения аргумента. Параметр «Shift» – это величина, добавляемая ко всем значениям аргумента, сдвиг всей кривой по горизонтальной оси. В свою очередь, «Factor» – это множитель, на который умножается каждое значение аргумента; масштабирование кривой по горизонтали.

Опцией «Fit only data between argument» можно задать область, исключаемую из автоматической подгонки. Включение «Fit outer area» исключает не внешнюю область между указанными аргументами, а внутреннюю. На графике сиреневым цветом показывается исключённая область.

##### Value

1. Graphical user interface

   Description automatically generated Блок «Value»

Задаётся тип значения: отражение или прохождение. Как и для аргумента, «Shift» – это постоянная добавка к кривой, а «Factor» – масштабирование кривой по вертикальной оси. Значения «min» и «max» ограничивают параметр «Factor» при автоматической подгонке.

Опция «Divide on beam intensity» позволяет нормировать измерение на интенсивность зондирующего пучка и время экспозиции. Если интенсивность пучка менялась в процессе измерения, то это в простейшем (линейном) случае это можно учесть, включив галочку «Final» и указав кроме начальной величины ещё и конечную.

*Внимание*: Хотя нормировочный параметр «Factor» можно подгонять автоматически, не следует это делать без веских причин. Это может быть допустимо в случаях, когда измерения не были нормированы на интенсивность пучка, но относиться к полученному результату следует с большой осторожностью.

##### Beam

1. Chart

   Description automatically generatedБлок «Beam»

Почти все параметры те же самые, что и у [независимой кривой](#_Beam). Единицы длины волны/угла скольжения указываются здесь же, в выпадающем меню.

##### Detector

1. Graphical user interface, chart

   Description automatically generatedБлок «Detector»

Почти все параметры те же самые, что и у [независимой кривой](#_Detector). Но поскольку здесь мы имеем дело с фиксированным набором данных, добавлена опция «Merge points». Она позволяет кратно уменьшать массив точек, объединяя их (биннинг). Указывается число точек для объединения. Результат сразу отражается на графике.

##### Footprint and distortion

1. Chart

   Description automatically generatedБлок «Footprint and distortion»

Параметры полностью те же самые, что и у [независимой кривой](#_Footprint_and_distortion).

##### Нижняя панель

1. Нижняя панель окна

Кнопка «Close» закрывает окно (закрыть окно можно также клавишей «Escape»).

«Read data» заново считывает данные из файла, указанного в поле «File path» блока «[Measurement](#_Measurement)».

«Export data» позволяет сохранить в файл загруженную ранее кривую. Данные хранятся в файле проекта и могут быть экспортированы даже если исходный файл (указанный в поле «File path») уже не существует.

#### Detector scan

Блоки [«Measurement](#_Measurement)», «[Detector](#_Detector_1)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» и [нижняя панель](#_Нижняя_панель) в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии. Блок «[Value](#_Value)» отличается только неизменяемым типом функции: «Scattering».

##### Argument

1. Блок «Argument»



Аргументом является полярный угол детектора. Остальные параметры как для [зеркального измерения](#_Argument_1).

##### Beam

1. Блок «Beam»



Почти все параметры те же самые, что и y [зеркального измерения](#_Beam_1). Дополнительный параметр – фиксированный угол скольжения пучка (или зеркальный угол).

#### Rocking scan

Блоки [«Measurement](#_Measurement)», «[Detector](#_Detector_1)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» и [нижняя панель](#_Нижняя_панель) в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии. Блок «[Value](#_Value)» отличается только неизменяемым типом функции: «Scattering».

##### Argument

1. Application, table

   Description automatically generated with medium confidenceБлок «Argument»

Аргументом может быть угол скольжения падающего пучка или отклонение образца от зеркального положения. Остальные параметры как для [зеркального измерения](#_Argument_1).

##### Beam

1. Блок «Beam»



Почти все параметры те же самые, что и y [зеркального измерения](#_Beam_1). Дополнительный параметр – зеркальное положение, т.е. угол скольжения падающего пучка, при котором в детектор приходит отражённый пучок.

#### Offset scan

Блоки [«Measurement](#_Measurement)», «[Detector](#_Detector_1)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» и [нижняя панель](#_Нижняя_панель) в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии. Блок «[Value](#_Value)» отличается только неизменяемым типом функции: «Scattering».

##### Argument

1. Блок «Argument»



Аргументом является угол скольжения падающего пучка. Остальные параметры как для [зеркального измерения](#_Argument_1).

##### Beam

1. Блок «Beam»



Почти все параметры те же самые, что и в y [зеркального измерения](#_Beam_1). Дополнительный параметр – отстройка детектора от зеркального положения. Положительная отстройка означает, что угол от плоскости образца до детектора больше, чем угол скольжения пучка.. Если она равна нулю, то измерения производятся в зеркальном направлении, но, в отличие от рефлектометрической кривой, здесь можно получить график величины рассеяния в зеркальном направлении.

#### GISAS map

1. Graphical user interface

   Description automatically generatedНастройки GISAS измерения

В верхней части показывается цветовая карта загруженных данных. При включённой опции «Fit only data between argument» в блоке «Argument» область, исключенная из подгонки, отображается более тёмным цветом. В блоке «Plot options» можно переключаться между линейным и логарифмическим масштабом по вертикальной оси, включать и выключать интерполяцию – это настройки отображения. Также здесь расположены кнопки поворота изображения против часовой  и по часовой стрелке . С их помощью нужно сориентировать данные относительно осей координат. Именно здесь данные привязываются к осям координат для дальнейшего использования в расчётах.

Блоки [«Measurement](#_Measurement)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» и [нижняя панель](#_Нижняя_панель) в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии. Об устройстве остальных написано ниже.

##### Argument

1. Graphical user interface

   Description automatically generated Блок «Argument»

В этом блоке задаются единицы измерения и диапазон значений каждой оси. В отличие от одномерных кривых, здесь данные – это матрица чисел без информации о координатах, поэтому аргумент здесь не считывается, а задаётся. Указывается диапазон азимутальных углов и полярных углов детектора. Сетка пикселей предполагается равномерной.

Опцией «Fit only data between argument» можно задать прямоугольную область, участвующую в автоматической подгонке. Включение «Fit outer area» оставляет не внешнюю область, а внутреннюю. На изображении исключённая область показывается более тёмным цветом.

##### Value

1. Graphical user interface

   Description automatically generated Блок «Value»

Величина рассеяния считывается из файла и её можно модифицировать, добавляя сдвиг и масштабирование. «Shift» – это постоянная добавка к значениям, а «Factor» – масштабирование. Ранее приводилось [методологическое замечание](#_Value) касательно автоматической подгонке нормировочного множителя.

Опция «Divide on beam intensity» позволяет нормировать измерение на интенсивность зондирующего пучка и время экспозиции.

##### Beam



1. Блок «Beam»

Параметры те же самые, что и у [независимой кривой](#_Beam_2).

##### Detector

1. Блок «Detector» со сферическим (a) или пиксельным (b) типом детектора



(b)



(a)

Здесь можно указать расстояние от образца до детектора, угловые или линейные размер пикселя и приёмную функцию пикселя. Опция «Merge» позволяет кратно уменьшать разрешение картинки, объединяя пиксели (биннинг). Указывается число точек для объединения по каждой координате. Результат сразу отражается на рисунке.

## Structure table

1. Структурная таблица

Для удобной работы со структурой все её параметры сведены в одну таблицу и именно эта таблица является основным способом эти параметры менять. Кроме текущего значения для каждого параметра могут быть указаны верхний и нижний предел для автоматической подгонки, участие или неучастие параметра в подгонке, а также связь с другими параметрами этой или другой структуры (при наличии нескольких вкладок структур в одном проекте).

### Меню

Меню «[File](#_File)» и «[Calculate](#_Calculate)» точно такие же как и в главном окне. «Length units» позволяет менять основные единицы длины, в том числе толщины слоёв и интерфейсов и размеры частиц. «Other units» позволяет изменить другие единицы, используемые в таблице. В меню «Precision» можно менять количество знаков после запятой, используемое для представления значений параметров.

### Содержимое таблицы

#### Шапка

В верхних трёх строках показаны используемые цветовые обозначения, а также инструментарий выставления ограничений подгоняемых параметров в процентах от текущего значения. Последнее может быть удобным чтобы выставить диапазон значений сразу для нескольких слоёв, если, например, известно, что ошибка в толщине слоёв может составлять ±30% от номинальной величины. По нажатию кнопки «Reset» параметры в соответствующем столбце, для которых включена подгонка, обновят пределы.

1. Шапка таблицы



Легенда

Установка пределов варьирования:

плотности

толщины

слоя/периода

переходной области

#### Модификаторы

Под легендой находится следующий блок таблицы. Слева находятся галочки модификаторов.

1. Модификаторы и выбор модели «несовершенства» структуры

Модификатор «Mouse wheel» определяет возможность менять значения в числовых полях, прокручивая колесо мыши. Менять значения вводя числа или стрелками на клавиатуре ↑ и ↓ можно всегда.

Если включён модификатор «Recalculate», то при любом изменении текущих значений параметров сразу же происходит пересчёт кривых и отображение нового результата.

Модификатор «Change dependent» блокирует возможность ручного изменения зависимых параметров, вместо этого они сразу пересчитываются как функция мастер-параметра. В процессе автоматической подгонки зависимые параметры всегда пересчитываются, независимо от этого модификатора.

Кнопка «Set model» открывает окно настройки модели несовершенств структуры:

#### Set imperfections model

В окне «Set imperfections model» указывается какие именно «несовершенства» следует включить в модель структуры: наличие межслоевых переходных областей, наличие дрейфа толщин в периодической многослойке, модели шероховатости и внутрислоевых неоднородностей (частиц).

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generated Модели «несовершенства» структуры

Включение/выключение блоков и их параметров влияет на то, какие параметры будут показаны в основной таблице.

##### Transitional layer

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Use transitional layer»

Блок определяет, какие функции профиля переходного слоя показывать в таблице. Если функция отключена, то она скрыта из таблицы и не используется при вычислениях. Если функция включена, то она видна в таблице, но отключена по умолчанию для использования в вычислении. Окончательно включена и настроена она может быть из таблицы.

##### Drifts

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Use drifts»

Блок определяет, какие модели дрейфа толщин слоёв и переходных областей показывать в таблице: линейный дрейф, случайное отклонение, гармоническая модуляция. Дрейф может быть показан только для слоев, входящих в состав периодической многослойки. Если модель отключена, то она скрыта из таблицы и не используется при вычислениях. Если функция включена, то она видна в таблице, но отключена по умолчанию для использования в вычислении. Окончательно включена и настроена она может быть из таблицы.

##### Roughness

1. Блок «Use roughness»

Блок определяет, какие модели шероховатости используются при вычислениях и какие параметры можно менять в таблице.

«Approximation» определяет вид приближения, используемого при расчёте рассеяния. Для «PT» (Perturbation Theory) доступен наибольший выбор опций.

«Vertical correlation» определяет наличие или отсутствие межслоевой корреляции шероховатости.

* «Full» – шероховатость полностью воспроизводится от слоя к слою, рассеяние полностью когерентное. Параметры шероховатости одинаковы для всех слоёв.
* «Partial» – шероховатость наследуется не полностью, в зависимости от параметров колонки «Inheritance».
* «Zero» – шероховатость не наследуется, рассеяние на разных интерфейсах некогерентно. Интерфейсы могут иметь разные параметры шероховатости.

«Model» определяет вид латеральной корреляционной функции.

* «[ABC](#_Основная_модель)» – ABC-модель или K-корреляционная функция.
* «[Stretched exp](#_Основная_модель)» – другая фрактальная модель шероховатости.
* «External PSD 1D» – возможность загрузки произвольной одномерной PSD функции из файла. За пределами загруженных данных PSD продолжается в виде модели.
* «External PSD 2D» – возможность загрузки произвольной двумерной изотропной PSD функции из файла. За пределами загруженных данных PSD продолжается в виде модели.
* «[Add Gauss peak](#_Гауссов_пик)» – в дополнение к основной модели прибавить к PSD функции гауссов пик в окрестности указанной пространственной частоты.

«Common PSD» – сделать модель шероховатости и репликации одинаковой для всех слоёв или оставить возможность настройки каждого слоя.

«Inheritance» определяет тип наследования шероховатости от нижележащего интерфейса к вышележащему при типе вертикальной корреляции «Partial».

* «[Replication factor](#_Replication_factor)» – PSD шероховатости одинакова для всех интерфейсов, но часть наследуется когерентно, а часть – некогерентно.
* «[Linear growth, alpha](#_Linear_growth,_alpha)» – используется модель линейного роста с единым степенным законом.
* «[Linear growth, n=1-4](#_Linear_growth,_n=1-4)» – используется модель линейного роста с суммой нескольких степенных законов.

##### Particles

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedБлок «Use particles»

Блок определяет, какие модели частиц и их корреляции используются при вычислениях и какие параметры можно менять в таблице.

«Vertical correlation» определяет наличие или отсутствие межслоевой корреляции частиц. Материал, геометрия частиц, вертикальное смещение могут быть разными для каждого слоя.

* «Full» – частицы в разных слоях расположены строго друг над другом, рассеяние полностью когерентное. Параметры латерального распределения общие для всех слоёв.
* «Partial» – частицы в разных слоях расположены нестрого друг над другом, а с некоторым случайным смещением, единым для целого слоя. Параметры латерального распределения, кроме индивидуального смещения, общие для всех слоёв.
* «Zero» – частицы в разных слоях не связаны друг с другом, рассеяние между слоями некогерентное. Параметры латерального распределения индивидуальные для каждого слоя.

«Lateral order» определяет латеральную корреляцию частиц в слое. В таблице можно установить латеральный порядок частиц индивидуально для каждого слоя при вертикальной корреляции «Zero».

* «Disorder» – частицы в слое расположены случайно, корреляции нет.
* «Radial paracrystal» – частицы в слое расположены в паракристалле, усреднённом по ориентациям.

«Specify material» – задавать материал частицы или использовать материал слоя.

«Common parameters for all layers» – сделать параметры частиц и их распределения одинаковыми для всех слоёв или оставить возможность настройки каждого слоя. Плотность материала частиц можно задавать для каждого слоя в любом случае.

«Lattice type» устанавливает базовую геометрию (до статистического усреднения и усреднения по направлениям) латерального расположения частиц. Влияет на также на плотность расположения частиц в слое. В таблице можно установить тип решётки индивидуально для каждого слоя при вертикальной корреляции «Zero».

* «Hexagonal» – частицы в слое располагаются в паракристалле с гексагональной решёткой.
* «Square» – частицы в слое располагаются в паракристалле с квадратной решёткой.

«Particle shape» устанавливает форму частиц. При изменении формы здесь частиц здесь, результат применяется ко всем слоям. В таблице можно установить форму частиц индивидуально для каждого слоя. Частицы состоят из однородного вещества.

* «Spheres» – частицы – сферы.
* «Spheroids» – частицы – сфероиды, т.е. эллипсоиды вращения вокруг вертикальной оси.
* «Cylinder» – частицы – вертикальные цилиндры с круглым основанием.

#### Шаг изменения параметров

В правой части блока находятся поля для установления шага изменения параметров при их изменении стрелками клавиатуры или колесом мыши. Шаг выставляется в тех же самых единицах, что и сами значения параметров. Некоторые параметры шероховатости и внутрислоевых частиц не имеют фиксированного шага, в таком случае шаг адаптивный: при скроллинге изменения происходят во втором знаке.

1. Шаг изменение значения параметров в нижележащей части таблицы

*На заметку*: При зажатой клавише Ctrl параметры меняются с шагом х10.

#### Параметры слоистой структуры

Далее идёт слоистая структура со своими параметрами. Чтобы задать материал слоя, нужно написать в текстовом поле соответствующее название файла с показателем преломления или выбрать файл, нажав «Browse». Если материал составлен из отдельных химических элементов, то следует выбрать нужные в выпадающем меню и задать стехиометрию.

1.  Материалы слоёв

*На заметку*: Для более быстрого нахождения элемента можно нажать на клавиатуре букву, с которой начинается название хим. элемента. Элементы можно также прокручивать колесом мыши или стрелками ↑ и ↓

Бо́льшая часть таблицы занята вертикальными блоками, соответствующими конкретным параметрам. Параметры, в основном, обозначены символами, рядом в квадратных скобках указаны единицы измерения. Для большей части параметров можно вызвать контекстное меню, щёлкнув правой кнопкой мыши по светло-голубой «шапке». Также это способ увидеть полное название данного параметра. Рисунок ниже показывает назначение полей в блоке.

1. Блок полей для одного параметра

*Внимание*: У параметров стехиометрии ζ и периодического дрейфа «sine drift» контекстное меню вызывается на поле «fit». У параметра «N» (число периодов) контекстного меню нет.



фитинг вкл/выкл

мин

макс

контекстное меню

текущее значение

Опциональные параметры, имеющие флажок в заголовке, могут быть с помощью него быть включены и выключены:

1. Table

   Description automatically generatedГармоническая модуляция толщины слоя: величины A, υ, φ

Исключением является толщина межслоевой переходной области. Она может быть задана единым параметром «s» или толщинами отдельных функций профиля. Во втором случае эффективная толщина считается как среднее квадратическое индивидуальных значений с учётом веса. Переключаться между этими представлениями можно флажком, отмеченным на рисунке:

1. Переключатель между единой толщиной переходной области и индивидуальной для каждой функции профиля



Частицы, входящие в состав структуры, можно включать и выключать индивидуально для каждого слоя. Также индивидуально можно настроить форму частицы, латеральную корреляцию и геометрическую модель.

1. Table

   Description automatically generatedУправление частицами в слое

Отдельно стоит упомянуть возможность [загрузки из файла](#_Импорт_PSD_шероховатости) внешней PSD в дополнение к модельной. На месте светло-голубой «шапки» параметра здесь расположена кнопка загрузки. Если внешняя PSD не загружена, то кнопка белая, если загружена, то зелёная.

1. Table

   Description automatically generated with medium confidenceВнешняя PSD шероховатости

Изменяемым параметром является множитель «roughness factor»: «rf 1D» или «rf 2D», являющийся множителем при среднеквадратичной шероховатости. Соответственно, PSD зависит от «rf 1D»/«rf 2D» квадратично. Результирующая шероховатость в частотном диапазоне загруженной PSD отображена в поле «σe».

##### Список параметров

Многослойка:

число периодов в многослойке

толщина периода

отношение толщины верхнего слоя к периоду

Слой:

 химический элемент и его стехиометрический индекс

 материал (имя файла)

абсолютная плотность вещества

относительная плотность материала

 толщина слоя

среднеквадратическая толщина диффузного интерфейса

Функции профиля диффузного интерфейса:

функция ошибок *erf* и весовой коэффициент

линейный профиль *lin* и весовой коэффициент

экспоненциальный профиль *exp* и весовой коэффициент

гиперболический тангенс *tanh* и весовой коэффициент

синусоидальный профиль *sin* и весовой коэффициент

ступенчатый профиль *step* и весовой коэффициент

среднеквадратическая толщина *erf* профиля

среднеквадратическая толщина *lin* профиля

среднеквадратическая толщина *exp* профиля

среднеквадратическая толщина *tanh* профиля

среднеквадратическая толщина *sin* профиля

среднеквадратическая толщина *step* профиля

Дрейф толщины слоя:

линейный дрейф толщины

случайные флуктуации толщины

синусоидальная модуляция толщины

Дрейф толщины диффузного интерфейса:

линейный дрейф толщины интерфейса

случайные флуктуации толщины интерфейса

синусоидальная модуляция толщины интерфейса

Шероховатость:

среднеквадратическая высота

корреляционный радиус

фрактальный параметр

среднеквадратическая высота пика шероховатости

центральная пространственная частота пика шероховатости

ширина пика шероховатости по пространственной частоте

глубина корреляции на базовой частоте

базовая частота для глубины корреляции

показатель частотной экспоненты в факторе корреляции PSD

объём частицы в модели линейного роста

коэффициент при первой степени частоты в модели линейного роста

коэффициент при второй степени частоты в модели линейного роста

коэффициент при третьей степени частоты в модели линейного роста

коэффициент при четвёртой степени частоты в модели линейного роста

«roughness factor», коэффициент при загруженной одномерной внешней PSD

«roughness factor», коэффициент при загруженной двумерной внешней PSD

Частицы:

абсолютная плотность вещества частицы

относительная плотность материала частицы

латеральный радиус частицы

высота частицы

среднее расстояние между частицами

вариация расстояния между частицами

размер домена – области корреляции частиц

случайный сдвиг частиц в слое относительно соседнего слоя

вертикальный сдвиг всех частиц относительно центра слоя

случайный разброс частиц в слое по вертикали

#### Coupling editor

Если нажать на единственный пункт контекстного меню параметра, то откроется окно «Coupling editor», предназначенное для задания связей между параметрами, а также для оценки доверительного интервала значений параметра на основе невязки.

1.  Окно «Coupling editor»

Параметры можно связывать друг с другом функциональной зависимостью. При этом в процессе подгонки значения зависимых параметров вычисляются в соответствии с заданной функцией. Иерархия связанных параметров отображается цветом согласно легенде: красный параметр зависим, при этом от него никто не зависит; зелёный параметр независимый, но от него зависят другие параметры; желтый параметр зависимый, но от него также зависят другие параметры. У каждого параметра может быть не более одного «хозяина» и сколько угодно «подчинённых». Чтобы назначить новый параметр в качестве «master» или «slave» по отношению к данному параметру, для которого открыто это окно, нужно поставить курсор в соответствующее поле в блоке «Master» или «Slaves» и в таблице щёлкнуть правой кнопкой мыши (как вызов контекстного меню) по целевому параметру.

На рисунке выше приведён пример, когда толщина слоя Al зависит от толщины слоя W, и определяет толщины слоёв Be и Mo. Функция, записанная в редактируемом поле, может быть не только линейной. Используемая в Multifitting библиотека ExprTk (<https://www.partow.net/programming/exprtk/>) может анализировать и распознавать широкий спектр математических выражений. Например, могут быть использованы

* Математические операторы (+, -, \*, /, %, ^)
* Функции (min, max, avg, sum, abs, ceil, floor, round, roundn, exp, log, log10, logn, pow, root, sqrt, clamp, inrange, swap)
* Тригонометрические функции (sin, cos, tan, acos, asin, atan, atan2, cosh, cot, csc, sec, sinh, tanh, d2r, r2d, d2g, g2d, hyp)

В записи выражений мастер-параметр обозначается буквой «x», а зависимый параметр – функция f(x).

*На заметку*: Можно связывать параметры не только внутри одной структуры, но и между структурами одного проекта, находящимися в разных вкладках.

*Внимание*: Учитывайте размерность и текущие единицы, указанные в таблице! И значение функции, и аргумент «x» считаются в *ангстремах* для всех параметров, имеющих размерность длины, или *Ån* при размерности [длина]n. Размерность остальных параметров соответствует их значению, отображаемому в таблице.

Механизм зависимостей может быть полезен, например, для связывания стехиометрии структуры и её плотности или для связи параметров нескольких исходно идентичных структур, с которыми потом проводились различные технологические операции.

Multifitting не ограничивает вас в записи выражений, но вы сами должны следить за корректностью и физичностью получаемых значений, например, избегать отрицательных толщин, деления на ноль, вычисления корня из отрицательного числа и т.д. В противном случае вы получите неправильный результат или аварийное завершение программы.

Также в этом окне можно настроить получение данных для дальнейшего вычисления доверительного интервала для конкретного параметра. Принцип здесь такой: для каждого фиксированного значения параметра из заданной сетки производится подгонка всех остальных фитуемых параметров структуры. В результате получается набор точек «значение параметра – наилучшее найденное значение невязки», сохраняемых в файл «confidence.txt». Если построить из этих точек график, то будет видна динамика возрастания значения невязки при отклонении значения изучаемого параметра от оптимального.

1. Настройка сетки для доверительного интервала

#### Элементы слоистой структуры

В левой части таблицы показаны элементы структуры со степенью их вложенности. Все элементы, кроме подложки и слоёв в составе регулярной апериодики можно включать и отключать. Отключенный элемент при расчётах не учитывается, как будто его просто нет. Для регулярной многослойки можно вызвать контекстное меню, если в её составе нет слоёв с зависимой толщиной (красный или жёлтый цвет).

1. Элементы структуры с возможностью отключения

#### Перераспределение толщин слоёв внутри периода

Единственный пункт контекстного меню позволяет открыть окно, в котором можно перераспределять толщину между слоями элементарной ячейки без изменения толщины периода.

1. Перераспределение толщины между слоями периодической структуры

В случае двухкомпонентной многослойки это можно делать и в основной таблице, меняя параметр γ. Здесь можно перераспределять толщину при любом количестве слоёв в периоде.

### Regular aperiodic

Создание регулярной апериодики описано в разделе [**Задание слоистой структуры**](#_Регулярная_апериодика). В составе регулярной апериодики может находиться целое число элементарных ячеек, как в периодической структуре. Слои одного типа могут иметь различающиеся толщины и различающиеся переходные области. В связи с этим у слоёв возникают новые параметры и условия: возможность установить всем слоям данного типа одинаковую толщину (галочка «common z») и одинаковую переходную область (галочка «common s»). Также при оптимизации апериодического стека можно наложить «мягкое» ограничение на разброс толщин слоёв. Если толщина какого-то слоя отличается от среднего значения толщины этого типа слоёв в структуре на величину больше ∆, то к невязке добавляется величина. Таким образом, величину разброса и необходимость укладываться в эту величину можно менять в широких пределах в зависимости от практических ограничений по синтезу многослойного зеркала. И конечно, абсолютные значения толщин также ограничены минимумом и максимумом, указанным для слоя в основной таблице.

1. Особые параметры регулярной апериодики

Для детальной работы с большим количеством индивидуальных слоёв апериодики существует специальная таблица. Чтобы её открыть, вызовите контекстное меню и нажмите единственный пункт:

1. Контекстное меню регулярной апериодики

Откроется таблица, в которой можно видеть и менять толщины и интерфейсы слоёв. Плотность можно менять только для всех слоёв данного типа. Подгонка интерфейсов может быть только коллективной, для всех слоёв этого типа, а подгонка толщин может быть индивидуальной или коллективной. Включить галочку «Fit z» для всех толщин можно зажав клавишу Shift или из главной таблицы. Пределы варьирования задаются в главной таблице. В зависимости от параметров «common z» и «common s» соответствующие слои будут иметь цвет согласно легенде. Изменения между основной таблицей и таблицей апериодики синхронизированы.

1. Таблица слоёв регулярной апериодики

## Profile plot

1. Chart

   Description automatically generatedПрофиль действительной части диэлектрической проницаемости

В этом окне можно видеть профиль действительной или мнимой части диэлектрической проницаемости на заданной длине волны, распределение конкретного материала или концентрации атомов разных сортов. Профиль основан на: материалах и плотностях слоёв и подложки, толщинах слоёв, толщине и форме межслоевых переходных областей. Шероховатость и внутрислоевые частицы не влияют на профиль. Отображаемый профиль автоматически изменяется при изменении упомянутых параметров в «Structure table» независимо от модификатора «Recalculate». Смещать видимую область можно «перетаскиванием» указателем, а масштаб отображения можно менять с помощью колеса мыши. Если указатель находится во внутренней области графика, то масштабирование по обеим осям меняется синхронно. Если указатель находится возле левой оси или нижней оси, то меняется только её масштаб.

В левой части находится панель с параметрами отображения графика. В первом блоке выбирается отображаемая величина. При выборе пункта «Materials» или «Elements» разные компоненты будет показаны разным цветом согласно легенде. Одиночный клик по одному из профилей сделает его жирнее, а двойной клик уберёт с графика все материалы, кроме данного. Вернуть их можно, сделав двойной щелчок ещё раз, или изменив какой-либо параметр структуры, или пересчитав её.

Диэлектрическая проницаемость зависит от длины волны/энергии фотона. Изменить её, а также единицы измерения можно в соответствующем поле.

1. Chart, histogram

   Description automatically generatedРаспределение материалов в структуре

При выборе «Materials» по вертикальной оси будет откладываться относительная плотность каждого материала. Она зависит от плотности, заданной в таблице, и от размазывания материала по соседним слоям. При выборе «Elements» по вертикальной оси будет абсолютная концентрация атомов на 1 см3. Она зависит не только от параметров структуры, но и от внутренних свойств элемента.

Второй блок позволяет показать дополнительную информацию на графике. «Show sharp profile» показывает, как выглядел бы профиль, если бы перемешивание материалов на интерфейсах отсутствовало. «Show discretization» показывает разбиение профиля на тонкие однородные подслои, если для структуры включена дискретизация и указан её шаг. Настройка дискретизации находится в окне «[Calculation settings](#_Calculation_settings)». «Show cursor position» показывает около курсора его координаты.

В третьем блоке находятся настройки масштабирования. Опции «Rescale X» и «Rescale Y» указывают на автоматическое масштабирование по соответствующим осям при перевычислении кривых или при изменении структуры. Если в структуре много слоёв, то имеет смысл отключить горизонтальное масштабирование и вручную изменить масштаб, чтобы видеть детали профиля. Вид масштабирования, линейный или логарифмический можно выбирать для заведомо неотрицательных величин, то есть всех, кроме действительной части поляризуемости.

В последнем блоке можно изменить единицы глубины, откладываемой по горизонтальной оси.

Все настройки отображения, включая текущие координаты осей (при условии отсутствия автомасштабирования) сохраняются для структуры. При закрытии и открытии окна «Profile plot» они воспроизводятся автоматически. Чтобы подобное произошло при переоткрытии проекта Multifitting, нужно предварительно сохранить проект.

## 1D graphs

1.  Окно «1D graphs»: расчёт по экспериментальной сетке и независимый расчёт

Окно «1D graphs» предназначено для визуализации результатов расчёта. Здесь можно видеть одномерные кривые: отражение, прохождение, диффузное рассеяние. Количество кривых для отображения определяется тем, сколько их задано (см. рисунок со [структурой главного окна](#_Главное_окно)) и сколько «включено» в окне «[Calculation settings](#_Calculation_settings)». Окно содержит две секции. Верхняя, «Measured», для загруженных экспериментальных данных и расчёта по этой же экспериментальной сетке. Нижняя, «Independent», для расчётов по равномерной сетке, задаваемой непосредственно в Multifitting.

Если одна из секций пуста, она скрывается. Между секциями находится невидимый горизонтальный разделитель, который позволяет вручную перераспределить высоту между секциями в окне с помощью мыши.

В каждой секции может быть несколько кривых. По умолчанию они располагаются в строку, но если кривых больше двух, то это очень неудобно, т.к. требует огромной ширины экрана. Можно расположить графики в несколько рядов, указав соответствующее число в настройках окна, вызываемых через контекстное меню. О настройках сказано чуть ниже.

1. Расположение нескольких кривых в секции

Между графиками также расположены разделители, с помощью которых можно распределить оконное пространство по отдельным кривым. Горизонтальные разделители регулируют высоту строк, а вертикальные – пространство внутри строки.

### Настройки

Контекстное меню можно вызвать в области вне графиков (включая заголовок и подписи осей), т.е. за пределами внешней рамки секции или на свободном месте панели управления каждого графика. В меню только один пункт – окно «Settings».

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedКонтекстное меню «1D graphs»

Верхний блок настроек позволяет расположить графики в несколько строк, отдельно для «Measured» и «Independent» секций.

1. Настройки окна «1D graphs»

Дальнейший список опций касается отображения органов управления в строке под каждым графиком. Постоянно отображаемые опции под каждым графиком:

«Scale Y» позволяет выбрать линейный или логарифмический масштаб вертикальной оси.

«Rescale» включает перемасштабирование графика по обеим осям при каждом вычислении кривой, чтобы показать кривые полностью.

«Show plot symbol size» показывает опцию «Scatter» для изменения размера символов экспериментальной кривой. Экспериментальную кривую нужно предварительно выделить, щёлкнув по ней указателем. Для расчётной кривой не имеет эффекта.

«Show plot line thickness» показывает опцию «Line» для изменения толщины линии. Нужную кривую нужно предварительно выделить, щёлкнув по ней указателем. Применяется для любой кривой.

«Show X scale» показывает опцию «Scale X» для выбора линейного или логарифмического масштаба по горизонтальной оси.

«Show max calc value» пишет максимальное значение и его положение на вычисленной кривой. В случае спектральной кривой отражения указывается также спектральная ширина пика.

«Show Y range» показывает опцию «Log range», в которой можно указать количество порядков, отображаемых по вертикальной оси при автоматическом перемасштабировании. Т.е. этот параметр является дополнительным к опции «Rescale» и работает только при логарифмическом масштабе «Scale Y».

«Show cursor position» показывает координаты курсора на графике.

«Show plot title» показывает название и базовую информацию о графике.

### Настройка цвета кривой

По умолчанию экспериментальные кривые – красные, расчётные – синие. Двойной клик по кривой позволяет изменить её цвет. Изменения сохраняются вместе с проектом.

1. Изменение цвета кривой двойным кликом

### Дополнительные кривые

Иногда удобно сравнивать расчётную кривую не только с единственной загруженной экспериментальной кривой, но и с несколькими другими. Это можно сделать, перетащив текстовый файл с дополнительной кривой на область графика. Дополнительные кривые будут отображаться наравне с основными. Для них также можно настроить цвет и толщину линии. Аргумент будет считан в тех же единицах, что указаны на осях в момент перетаскивания файла.

1. Дополнительные кривые на графике

Эти дополнительные кривые не сохраняются вместе с проектом, при переоткрытии они исчезают. Убрать их можно переоткрытием проекта, или вызвав контекстное меню в области графика и нажав «Remove additional curves».

## 2D graphs

1. Graphical user interface, chart

   Description automatically generatedGISAXS: измерение и расчёт

В Multifitting есть два вида данных, рассчитываемых сразу от двух координат. Это GISAXS, зависящий от полярного и азимутального углов, и распределение интенсивности поля, зависящее от координаты глубины и угла падения/длины волны зондирующего излучения. Как и в одномерном случае, окно разделено на «Measured» и «Independent» секции, причём в экспериментальной секции может быть только GISAXS. Количество графиков определяется тем, сколько их задано в главном окне и сколько «включено» в окне «[Calculation settings](#_Calculation_settings)». С практической точки зрения имеет смысл одновременно включать 1-2 графика, не больше. Перераспределение пространства между графиками делается также, как и в окне «1D graphs».

### Настройки

Точно так же контекстное меню можно вызвать в области вне графиков, т.е. за пределами внешней рамки секции или на свободном месте панели управления каждого графика. В меню только один пункт – окно «Settings».

1. Контекстное меню «2D graphs»

Верхний блок настроек позволяет расположить графики в несколько строк, отдельно для «Measured» и «Independent» секций. В нижнем блоке две опции:

«Show value near cursor» показывает значение возле курсора.

«Show plot title» показывает название и базовую информацию о графике.

1. Настройки окна «2D graphs»

Все остальные элементы управления расположены на панели под каждым графиком.

Сами графики представляют собой цветовые карты со шкалой отображаемых значений и дополнительными блоками, на которых можно видеть текущие координаты и значения, а также одномерные графики-сечения.

Сечения, отображаемые в левом и нижнем блоках, показываются для текущего положения курсора, а также для фиксированной точки, выбрать которую можно одинарным кликом левой кнопки мыши. Очистить фиксированное сечение можно, кликнув в любое место карты правой кнопкой. При наличии экспериментальной и расчётной карт экспериментальный профиль имеет красный цвет, а расчётный – синий.

1. Интенсивность поля в структуре

Элементы управления стоит рассмотреть поподробнее. Некоторые из них полностью аналогичны таковым для одномерных графиков:

«Scale» позволяет выбрать линейный или логарифмический масштаб цветовой шкалы.

«Rescale» включает перемасштабирование графика по всем осям при каждом вычислении.

«Range to show, orders» позволяет указать количество порядков, отображаемых по оси значений при автоматическом перемасштабировании. Т.е. этот параметр является дополнительным к опции «Rescale» и работает только при логарифмическом масштабе «Scale».

Другие настройки специфичны именно для двумерных карт:

«Interpolate» включает двумерную интерполяцию для более сглаженной картинки. Отключенная опция позволяет оценить достаточность плотности точек для описания градиентов интенсивности.

Переключатель «Measured» – «Calculated» позволяет показывать соответствующую карту. Эта опция присутствует только в секции «Measured».

«Orientation» меняет местами оси и позволяет поворачивать карту в соответствующую ориентацию, горизонтальную или вертикальную.

«Left panel» и «Bottom panel» открывают левый и нижний блок соответственно, где показаны сечения карты. В левом блоке показывается только вертикальное сечение, а в нижнем блоке можно выбрать между вкладками «Horizontal» и «Vertical». Если обе панели открыты, то в левом нижнем углу также появляется блок с информацией о координатах, номере ячейки и значении в текущем положении курсора.

### Настройка цветовой схемы

Смещать видимую область можно её «перетаскиванием» указателем, а масштабировать оси можно с помощью колеса мыши. Если указатель находится во внутренней области графика, то масштабирование по обеим осям меняется синхронно. Если указатель находится возле левой оси или нижней оси, то меняется только её масштаб. Для подстройки оси значений нужно перевести указатель на цветовую шкалу.

1. Работа со шкалой значений



Перетащите цветовую шкалу вверх или вниз для подстройки диапазона значений

Колесом мыши можно расширить или сузить диапазон отображаемых значений

Двойной клик по шкале позволит сменить цветовую схему

Для смены цветовой схемы нужен двойной клик по правой части цветовой шкалы.

1. Смена цветовой схемы

## Roughness spectrum

1. Graphical user interface, chart

   Description automatically generatedPSD шероховатостей на интерфейсах

Подобно «Profile plot», окно «Roughness spectrum» предназначено для визуализации структурных параметров, в данном случае шероховатости. Здесь можно увидеть PSD функцию шероховатостей в выбранной модели, задаваемую несколькими параметрами в структурной таблице и эффективную шероховатость, т.е. интеграл от PSD в указанном диапазоне пространственных частот.

PSD автоматически изменяется при изменении параметров шероховатости в «Structure table» независимо от модификатора «Recalculate». Смещать видимую область можно её «перетаскиванием» указателем, а масштаб отображения можно менять с помощью колеса мыши. Если указатель находится во внутренней области графика, то масштабирование по обеим осям меняется синхронно. Если указатель находится возле левой оси или нижней оси, то меняется только её масштаб.

В левой части находится панель с параметрами отображения. В первом блоке выбирается отображаемая функция – одномерная или двумерная PSD.

Второй блок позволяет выбрать интерфейсы для отображения. Если PSD одна и та же по всей глубине структуры, то выбор интерфейса недоступен. В остальных случаях можно одновременно видеть до трёх PSD: подложки, поверхности и любой промежуточной границы. Нумерация интерфейсов ведётся от подложки.

Третий блок содержит настройки масштабирования. Опции «Rescale X» и «Rescale Y» указывают на автоматическое масштабирование по соответствующим осям при перевычислении кривых или при изменении структуры. Оси имеют только логарифмический масштаб. Для вертикальной оси можно указать динамический диапазон – «PSD range», а для горизонтальной оси – минимальное и максимальное значение пространственной частоты υ.

В последнем блоке можно указать единицы аргумента и отдельно единицы PSD1D и PSD2D. Опция «Show cursor position» показывает численные координаты курсора на графике. Единицы эффективной шероховатости соответствуют единицам длины в «Structure table» (ангстремы или нанометры).

Все эти настройки сохраняются для структуры. При закрытии и открытии окна «Roughness spectrum» они воспроизводятся автоматически. Чтобы подобное произошло при переоткрытии Multifitting, нужно сохранить проект.

## Particles spectrum

1. Интерференционная функция частиц

Окно «Particles spectrum» выполняет такую же роль, как и «Roughness spectrum», но для распределения частиц в слоях. Аналогом PSD здесь является интерференционная функция частиц, задаваемая параметрами в структурной таблице. Интерференционная функция показывает упорядоченность частиц; при отсутствии порядка она является константой и не показывается.

Интерференционная функция автоматически изменяется при изменении параметров распределения частиц в «Structure table» независимо от модификатора «Recalculate». Смещать видимую область можно её «перетаскиванием» указателем, а масштаб отображения можно менять с помощью колеса мыши. Если указатель находится во внутренней области графика, то масштабирование по обеим осям меняется синхронно. Если указатель находится возле левой оси или нижней оси, то меняется только её масштаб.

В левой части находится панель с параметрами отображения. Первый блок позволяет выбрать слои для отображения. Если распределение частиц одно и то же во всех слоях структуры, то выбор слоя недоступен. В остальных случаях можно одновременно видеть до двух графиков.

Второй блок содержит настройки масштабирования. Опции «Rescale X» и «Rescale Y» указывают на автоматическое масштабирование по соответствующим осям при перевычислении кривых или при изменении структуры. Масштаб обеих осей может быть выбран линейным или логарифмическим. Для вертикальной оси можно указать динамический диапазон «Y range», а для горизонтальной оси – минимальное и максимальное значение пространственной частоты.

В последнем блоке можно указать единицы аргумента и значения. Опция «Show cursor position» показывает численные координаты курсора на графике.

Все эти настройки сохраняются для структуры. При закрытии и открытии окна «Particles spectrum» они воспроизводятся автоматически. Чтобы подобное произошло при переоткрытии Multifitting, нужно сохранить проект.

## Calculation settings

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Calculation settings»

В главном окне программы может быть создано множество кривых, так или иначе относящихся к структуре, но не все из них нужны одновременно. Для «включения» и «выключения» отдельных кривых, а также для выбора кривых для участия в подгонке и их индивидуальных параметров в Multifitting есть специальное окно – «Calculation settings».

Количество кривых для отображения определяется тем, сколько их задано в главном окне. Как и в окнах «1D graphs» и «2D graphs», здесь есть секции «Measured» и «Independent». «Measured» для загруженных экспериментальных данных и нижняя, «Independent» для расчётов по равномерной сетке, задаваемой непосредственно в Multifitting. Кликнув по заголовку секции можно включить и выключить её целиком. Соответствующие секции сразу же включатся или выключатся в окнах «1D graphs» и «2D graphs». Точно таким же образом можно включать и отключать кривые по отдельности.

### Параметры модели структуры

В верхней части окна есть два блока, касающиеся вычислительной модели структуры, а не конкретных кривых: «Profile discretization» и «Roughness».

1. Дополнительные параметры модели для вычислений

В блоке «Profile discretization» задаётся разбиение профиля диэлектрической проницаемости на тонкие однородные слои для вычисления поля в структуре методом рекуррентных соотношений. Включить и выключить этот режим можно, кликнув по заголовку блока. Шаг дискретизации можно менять, вводя значение с клавиатуры или прокручивая колесом мыши. Реальный шаг разбиения является индивидуальным для каждого слоя и делается таким, чтобы в этом слое укладывалось целое число «субслоёв», но не превышающим заданное значение. Наблюдать фактическое разбиение профиля можно в окне «[Profile plot](#_Profile_plot)» при включенной галочке «Show discretization».

В блоке «Roughness» задаются два параметра. «Max spatial frequency» – это ограничение сверху на пространственную частоту шероховатостей. Её следует задавать из общефизических соображений или из внешних данных о высокочастотной части спектра шероховатостей. Это ограничение нужно, чтобы при в моделях с медленно спадающей PSD в область высоких частот интеграл по частотам сходился. При расчётах будет считаться, что . «Num terms for DWBA/SA/CSA» – это количество членов ряда по степеням корреляционной функции, которое учитывается при использовании соответствующего приближения. Само приближение выбирается в «Structure table», окно «[Set imperfections model](#_Set_imperfections_model)».

### Настройки окна

Расположение блоков внутри каждой секции также можно настроить. Для этого в любой свободной области окна нужно вызвать правой кнопкой мыши контекстное меню и выбрать единственный пункт «Settings». В открывшемся окне указать количество строк в секциях «Measured» и «Independent».

1. Настройки окна «Calculation settings»

### Зеркальная кривая с экспериментальной сеткой

Теперь о том, какие именно параметры следует задавать для каждой кривой. В случае отражения или прохождение излучения это:

1. Параметры вычисления экспериментальной кривой отражения

«Fit» – определяет, участвует ли кривая в автоматической подгонке. Неучастие в автоматической подгонке не означает неучастие в разовых вычислениях! Даже если галочка снята, то при ручных изменениях параметров структуры и перевычислениях расчётная кривая обновляется.

«Weight» – коэффициент, на который умножается значение невязки для этой конкретной кривой. Его нужно менять, чтобы увеличить или уменьшить относительный вес данной кривой в общей невязке для того, чтобы именно эта кривая стала лучше подгоняться, даже в ущерб другим кривым. Текущие значения невязки можно увидеть в командной строке при ручном перевычислении («Ctrl+Shift+C»).

«Divide by N» – невязка этой кривой делится на количество точек в ней. Используется, чтобы невязки кривых определялись в первую очередь реальным рассогласованием измерения и расчёта, а не разным количеством точек в них.

«Mesh density factor» – опция, позволяющая уменьшить муаровый эффект на расчётной кривой. Он может возникнуть если частота интерференционных осцилляций будет значительно выше, чем плотность точек на экспериментальной сетке, но не кратна ей. Тогда на расчётной кривой наблюдаются «медленные» осцилляции, значительно искажающие реальный вид кривой. Для устранения эффекта количество и плотность точек для расчёта увеличивается в указанное число раз, кривая рассчитывается, применяется инструментальная функция и только после этого результат проецируется на исходную сетку. Параметр «Shift», изменяемый от 0 до 1, позволяет ставить дополнительные точки между исходными точками сетки не эквидистантно, а со сдвигом на соответствующую долю шага. На рисунке ниже схематически показана расстановка точек уплотнённой сетки при «Mesh density factor» = 3 и «Shift» >0.

1. Способ расстановки дополнительных точек в уплотнённой сетке

i-1

i

i+1

∆0

∆1

∆2

∆1=

∆2=

i-1

i

i+1

arg points

«Adjust scale factor» – включает в список подгоночных параметров множитель «[Factor](#_Value)» при загруженной кривой. Пределы варьирования устанавливаются в окне импорта/инструментальных настроек для каждой кривой. Может использоваться в случаях отсутствия абсолютной калибровки измеренных данных.

«Maximize integral» – изменяет цель автоматического фитинга с наилучшего соответствия загруженной и рассчитанной кривой на максимизацию интеграла загруженной кривой с заданной функцией от расчётной кривой. Это опция только для зеркального отражения/прохождения. Используется для нахождения структуры, имеющей максимальную энергоэффективность (в т.ч. для многозеркальной схемы) для заданного спектра источника.

«Function» и «Power» – задают вид пользовательской функции невязки, которая в общем виде устроена так: . Соответственно, функция задаётся в виде математического выражения от аргумента R (хотя речь идёт не только об отражении, но и прохождении и рассеянии). Для интерпретации формулы используется библиотека ExprTk (<https://www.partow.net/programming/exprtk/>). В частности, могут быть использованы

* Математические операторы (+, -, \*, /, %, ^)
* Функции (min, max, avg, sum, abs, ceil, floor, round, roundn, exp, log, log10, logn, pow, root, sqrt, clamp, inrange, swap)
* Тригонометрические функции (sin, cos, tan, acos, asin, atan, atan2, cosh, cot, csc, sec, sinh, tanh, d2r, r2d, d2g, g2d, hyp)

«Use χ2» – переключает между невязкой, описанной в предыдущем абзаце и невязкой вида , где N – число точек, p – число подгоночных параметров, a *beam\_counts\_per\_s* – интенсивность зондирующего пучка, влияющая на зашумлённость и, соответственно, надёжность итогового сигнала.

### Независимая зеркальная кривая

Для «независимого» зеркального скана настройки отличаются. Здесь можно выбрать тип рассчитываемой величины: отражение R, прохождение T и поглощение A, которое считается как A = 1-R-T. Также можно увидеть полевые функции: распределение интенсивности поля в структуре F и распределение поглощения в структуре J, которое является просто произведением интенсивности на мнимую часть диэлектрической проницаемости J=F\*Im(ε).

1. Настройки «независимого» зеркального скана

При выборе полевой функции открываются дополнительные опции.

«Z-spacing» – шаг по глубине структуры, между точками, в которых рассчитывается поле.

«Calculation depth into ambient» – рассчитать поле над структурой вплоть до заданной высоты.

«Calculation depth from surface» – до какой глубины от поверхности рассчитывать поле.

«Calculation depth into substrate» – рассчитать поле по всей глубине слоистой структуры + ещё на указанную глубину в подложку.

«Show surface» – показать линией на двумерном графике положение поверхности.

«Show substrate» – показать линией на двумерном графике положение подложки.

### Рассеяние

Часть параметров точно такие же, как и для [зеркальной кривой](#_Зеркальная_кривая_с). Для рассеяния есть дополнительные параметры, помимо перечисленных.

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedПараметры вычисления экспериментальной кривой рассеяния

«Instrumental smoothing» – включает учёт конечной угловой и спектральной ширины пучка и конечного разрешения детектора.

«Integrate PSD in detector» – приближение, позволяющее в части случаев избежать явно нефизичной величины рассеяния в зеркальном направлении в ситуации, когда PSD имеет очень острый пик на нулевой пространственной частоте. Умножение значения PSD на ширину угловой размер детектора заменяется на интеграл PSD по пространственным частотам, приводящим к рассеянию в пределах детектора.

«Add specular peak» – показать на расчётной кривой не только рассеяние, но и зеркально отражённое пятно, размер и форма которого определяются размером и формой пучка, расстоянием от образца до детектора, угловой расходимостью, размером детектора.

## General settings

В окне «General settings» собраны настройки, общие для не только для открытого проекта, но для Multifitting в целом. Они применяются немедленно, а при закрытии одного проекта и открытии другого не изменяются. Настройки сгруппированы в несколько тематических вкладок.

### Input/Output

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Вкладка «Input/Output»

Здесь находятся настройки, связанные с загрузкой и сохранением проектов, а также выводом структурных данных и результатов вычислений целевых функций: отражения, прохождения, рассеяния.

В первом блоке указывается, какие результаты вычислений будут выводиться в файл при каждом ручном перевычислении, т.е. при нажатии «Ctrl+Shift+C»: одномерные кривые, двумерные кривые и PSD, найденная непосредственно из интенсивности. Последнее работает только для одномерных кривых рассеяния и в предположении, что PSD одинаковая для всех интерфейсов.

Во втором блоке выбираются единицы аргумента и значения PSD, которые используются при экспорте или как единицы по умолчанию при импорте внешней PSD из файла в структурной таблице.

В третьем блоке настраивается рабочая директория для ввода и вывода. При быстром сохранении («Ctrl+S») нового проекта, т.е. проекта, который не был ранее загружен, файл c названием вида «save\_v.X.Y.Z.fit», где X.Y.Z – номер версии Multifitting, сохраняется в эту директорию. Вывод программы в текстовые файлы сохраняется туда же. Также рабочая директория является стартовой в диалоговом окне при нажатии «Ctrl+Shift+O».

«Save/output to Multifitting directory» – устанавливает в качестве рабочей директории расположение исполняемого файла Multifitting.

«Save/output to chosen directory» – можно выбрать любую директорию в качестве рабочей, введя адрес вручную или выбрав кнопкой «Set up».

«Save/output to last .fit file directory» – сохранение идёт в директорию, из которой последний раз был загружен файл проекта.

«Always open last file» – опция, позволяющая сразу же после запуска Multifitting быстрым открытием («Ctrl+O») загружать последний загруженный файл независимо от выбранной рабочей директории. Если опция отключена, то нажатие «Ctrl+O» сразу после запуска попытается открыть файл «save\_v.X.Y.Z.fit» из рабочей директории. Если такого нет, Multifitting предупредит об этом и ничего не произойдёт.

### Calculation

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedВкладка «Calculation»

Здесь находятся настройки глобальных параметров вычисления.

В первом блоке указывается параллелизация вычислений. Число потоков можно задать от одного до количества логических ядер процессора. Рутинные вычисления определяются пунктом «Threads to calculate reflectivity», именно это влияет на скорость расчёта кривых.

«Threads to read optical constants» влияет на скорость загрузки в оперативную память базы оптических констант в момент запуска Multifitting или при ручной перезагрузке базы из меню главного окна («Optical constants» → «[Reload optical constants](#_Optical_constants)»).

Второй блок касается реакции Multifitting на изменение параметров.

«Recalculate on any change» – если включено, то при изменении любого параметра (кроме окна «Structure table») кривые сразу же пересчитываются.

«Recalculate on change in Structure table» – дублирует модификатор «Recalculate» в окне «Structure table». Кривые пересчитываются при изменении любого параметра в таблице.

Последняя опция «Ignore 1D scattering on particles» позволяет не учитывать рассеяние на частицах в одномерных кривых даже если частицы присутствуют и влияют на двумерное рассеяние.

### Interface

1. Вкладка «Interface»

Здесь находятся некоторые настройки внешнего вида и поведения окон.

В первом блоке указывается заголовки по умолчанию, которые присваиваются новым вкладкам при добавлении структуры или добавлении независимой кривой в главном окне.

Второй блок касается графиков. Здесь находятся некоторые настройки внешнего вида и поведения окон.

«Replot 1D graphs while fitting» – если включено, то при в процессе автоматической подгонки расчётные кривые в окне «[1D graphs](#_1D_graphs)», для которых выставлен параметр «Fit», будут автоматически обновляться, иллюстрируя путь, который проходит алгоритм.

«Profile line thickness» задаёт толщины всех линий профиля структуры в окне «[Profile plot](#_Profile_plot)». Этот параметр вынесен в глобальные настройки для удобства его быстрого изменения, когда нужно получить чёткую, хорошо различимую картинку профиля и сделать скриншот.

Пункты в блоке «Other»:

«Make all windows resizable» – делает размер всех окон нефиксированным и даёт возможность сделать размер окна меньше размера содержимого. Нужно для экономии экранного места.

«Structural tabs synchronization» – если в вашем проекте несколько вкладок со структурами, то при переключении между вкладками в одном окне, во всех остальных открытых окнах вкладки также переключаются. Нужно, чтобы не перепутать, какая структура в каком окне открыта.

«Show single calculation time» – показывает в командной строке время расчёта кривых при ручном перевычислении («Ctrl+Shift+C»).

«Show individual residuals» – показывает в командной строке невязки по каждой кривой и суммарную невязку при ручном перевычислении («Ctrl+Shift+C»).

## Fitting settings

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Fitting settings»

Выбор алгоритма автоматической подгонки и изменение его параметров делается в окне «Fitting settings».

Алгоритм выбирается из выпадающего списка. Две основные группы алгоритмов выделены по библиотекам, из которых они взяты. Из библиотеки GSL (GNU Scientific Library) задействованы градиентные алгоритмы (<https://www.gnu.org/software/gsl/doc/html/nls.html#nonlinear-least-squares-fitting>), из библиотеки SwarmOps – преимущественно стохастические (<https://github.com/Hvass-Labs/swarmops-other/blob/master/SwarmOpsC1_1.pdf>)

1. Список алгоритмов

Основных параметров подгонки немного, и они находятся на виду. Для алгоритмов из GSL это:

«Randomized start» – запускает поочерёдно серию подгонок со случайными начальными значениями подгоняемых параметров. Число таких стартов определяется параметром «Number of runs», а результаты записываются в файл «fits.txt». Такой подход используется, чтобы охватить бо́льшую часть параметрического пространства и с большей вероятностью найти достаточной глубокий минимум невязки.

«Number of iterations» – количество итераций в каждой индивидуальной процедуре подгонки, после которых алгоритм принудительно останавливается.

«General tolerance» – задаёт одновременно минимальный градиент, минимальное значение невязки и минимальный шаг параметров, ниже которых алгоритм останавливается.

Для алгоритмов из SwarmOps часть параметров отличается, а именно:

1. Окно «Fitting settings»

«Initialize by current state» – первое вычисление невязки будет сделано для структуры в её состоянии перед запуском, чтобы гарантированно включить изначальное состояние в сравнение со всеми другими наборами параметров, возникающими в процессе подгонки.

«Max number of evaluations» – количество вычислений невязки, после которого алгоритм принудительно останавливается.

«Num. evals ∝ num. params» – задаётся коэффициент пропорциональности, который умножается на количество подгоняемых параметров для получения задание максимального количества вычислений невязки. Даже в рамках одного алгоритма количество вычислений, после которого начинается сходимость, может зависеть от числа параметров, поэтому можно использовать этот альтернативный вариант задания ограничения.

Кнопка «Abort calculations» (или «Alt+**.**») прерывает текущую процедуру фитинга.

Помимо описанных основных параметров есть и дополнительные. Их можно видеть и менять, открыв нижний блок нажатием спойлера «Additional parameters»:

1. Дополнительные параметры алгоритмов



Я не рекомендую менять эти параметры без понимания происходящего, однако, разбираясь в принципе работы алгоритма и выясняя, какие параметры за что отвечают, можно найти более оптимальную комбинацию, которая даст лучшую устойчивость и лучшую сходимость для ваших задач.

## Fits selector

1. Окно «Fits selector»

Особое место занимает инструмент для сохранения снимков состояния структуры – окно «Fits selector». В процессе поиска подходящей структуры и подходящих параметров часто требуется сохранять удачные конфигурации, чтобы потом при необходимости к ним вернуться.

*Внимание*: В «Fits selector» сохраняются только модель самой структуры и её параметры, представленные в таблице. Параметры кривых, инструментальные параметры, параметры вычислений не сохраняются в фитах и остаются текущими при переключении между фитами!

Конфигурации автоматически сохраняются перед началом автоматической подгонки и в конце её, в этом случае название записи генерируется в виде «#<number> fit || <date> || <time> || initial/final». Сохранить состояние вручную можно нажатием кнопки «Save», тогда его имя генерируется в виде «#<number> state || <date> || <time>». Номер, присваиваемый записи, всегда только возрастает в рамках одного сохранённого проекта. Записи можно переименовывать, для этого надо выделить запись и нажать «F2» на клавиатуре:

1. Переименование записи

Кнопка «Clear» уничтожает все записи. Чтобы удалить одну запись, нужно выделить её мышкой (или пробежать стрелками на клавиатуре) и нажать клавишу «Delete» на клавиатуре. Записи можно менять местами, для этого надо выделить нужную запись и двигать её вверх или вниз кнопками ▲ или ▼ внизу окна.

*На заметку*: Чтобы разделить фиты на группы, можно вводить «разделители», сохраняя текущее состояние (ненужное само по себе) и переименовывая его во что-нибудь вроде «---------------------» или «- - - one more group started - - -».

Чтобы загрузить сохранённое состояние, нужно дважды кликнуть по нему. Если при этом окно «[Structure table](#_Structure_table)» было открыто, то оно закроется и снова откроется. Другие окна, визуализирующие параметры структуры или расчётные кривые, просто обновят своё содержимое.

*На заметку*: Окно «Structure table» переоткрывается медленно. Если вам не нужно следить за изменениями непосредственно в таблице, а нужно следить, например, за кривыми отражения в разных состояниях и сравнивать их, то имеет смысл закрыть «Structure table». Тогда переключение между состояниями будет более быстрым.

# Задание слоистой структуры

При запуске Multifitting новая структура по умолчанию состоит из двух полупространств: внешней среды (вакуум) и подложки. Поэтому первое, что следует сделать – это добавить в структуру слои и задать их параметры.

## Слой

Добавить новый слой можно кнопкой  «Add layer» на [панели инструментов](#_Панель_инструментов). Слой будет создан под текущим выделенным элементом структуры, но в любом случае между средой и подложкой.

1. Слой в структуре



Слои можно копировать , вырезать , вставлять , удалять , двигать вверх  или вниз  по структуре. Двойной клик по слою или нажатие кнопки  «Edit» для выделенного элемента откроет [окно редактирования базовых свойств](#_Layer). Здесь можно задать толщину, материал и интерфейс.

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Layer»

Все эти параметры могут быть изменены из [главной таблицы](#_Окно_свойств_элемента), кроме использования материала в виде композиции химических элементов или как табулированного файла в базе данных.

### Материал

Материал может быть задан для внешней среды, подложки и слоя. Выбор модели материала – из базы готовых материалов или композиция из отдельных химических элементов – может быть сделан только в вышеприведённом окне. [Здесь](#_Material) подробно описан процесс.

Если модель материала и количество химических элементов в составе заданы, то дальнейшая работа может вестись в [структурной таблице](#_Окно_свойств_элемента): изменение материала, элементного состава, стехиометрии, плотности.

1. Table

   Description automatically generatedПараметры материалов в таблице

### Толщина

Толщина может быть задана в окне слоя или в таблице, где параметр обозначается буквой «z».

1. Table

   Description automatically generatedТолщина слоя в таблице

### Диффузность

Интерфейс, а точнее диффузность, может быть задан для слоя и подложки. Сделать это можно двумя способами: из [окна свойств слоя](#_Diffuseness) или из таблицы. В первом случае нужно просто включить необходимые функции профиля, задать их протяжённость и относительный вес.

Чтобы работать с диффузным интерфейсом в таблице, нужно сначала открыть [окно настройки модели](#_Set_imperfections_model) структуры

1. Доступ к настройкам модели структуры в таблице



и уже там включить [соответствующий блок](#_Transitional_layer) и нужные виды профиля.

Добавление в таблицу не означает автоматического добавления профиля в вычислительную модель. Заголовки параметров позволяют быстро включать и выключать функции профили, влияя на вид переходной области.

Суммарный профиль конструируется как нормированная линейная комбинация [3]:



Параметр с кратким названием «s» отвечает за единую среднеквадратичную толщину переходного слоя.

1. Диффузный интерфейс в таблице



Толщину каждой компоненты также можно задавать индивидуально в нижней строке, но для этого [нужно кликнуть](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_переходные_слои) по заголовку среднеквадратичной толщины «s».

## Периодическая многослойка

Новая периодическая многослойка создаётся кнопкой  «Add multilayer на [панели инструментов](#_Панель_инструментов). Точно так же периодика будет создана под текущим выделенным элементом структуры. Многослойки можно копировать , вырезать , вставлять , удалять , двигать вверх  или вниз  по структуре. Ещё их можно расформировывать кнопкой  «Ungroup» на панели инструментов.

1. Периодическая многослойка в структуре



Двойной клик по многослойке или нажатие кнопки  «Edit» откроет [окно редактирования базовых свойств](#_Multilayer). Здесь можно задать число периодов, толщину периода и, если в составе ровно два слоя, толщинный фактор.

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Multilayer»

Опции в нижнем блоке позволяют инвертировать порядок слоёв в элементарной ячейке и превращать периодический стек в апериодический.

Эти параметры могут быть заданы в окне многослойки или в структурной таблице. «N» – число периодов, «d» – толщина периода, «γ» – толщинный фактор, т.е. отношение толщины верхнего слоя к периоду.

1. Table

   Description automatically generatedЧисло периодов, толщина периода и толщинный фактор в таблице

По умолчанию период многослойки состоит из двух слоёв. Если нужно больше, то новые слои можно создавать (или удалять) внутри существующей периодики. Более того, внутри периодики можно создавать другую периодику или апериодику, т.е. периодическая структура может быть с несколькими уровнями вложенности.

### Перераспределение толщин слоёв внутри периода

Если в периоде три и более слоя, то чтобы изменять их толщины без изменения толщины периода нужно открыть [отдельное окно](#_Перераспределение_толщин_слоёв). Это можно сделать, вызвав контекстное меню на элементе «Multilayer»:

1. Graphical user interface, application, Word

   Description automatically generatedВызов окна для работы с толщинами слоёв элементарной ячейки

### Дрейф толщин по глубине

В реальности даже в периодических по дизайну структурах параметры слоёв не полностью воспроизводятся. В первую очередь становятся заметны отклонения толщин отдельных слоёв от среднего по всем периодам значения. В Multifitting можно моделировать линейный дрейф по глубине, случайные отклонения и периодическую модуляцию для толщины слоя и толщины интерфейса.

При линейном дрейфе толщины слоёв заменяются 

При случайных отклонения: 

При гармонической модуляции: 

О параметрах дрейфа также можно прочитать [здесь](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_дрейф_толщин). Важный момент: линейный дрейф – кумулятивный, т.е. чем больше периодов, тем сильнее отличаются толщины наверху и внизу стека. Настроить дрейф можно двумя способами.

**Первый** – в [окне редактирования слоя](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_дрейф_толщин), находящегося в составе периодики:

1. Доступ к настройкам дрейфа толщин слоя в составе периодики



**Второй** – в структурной таблице. Для этого нужно открыть «[Structure table](#_Окно_свойств_элемента)», а в ней – [окно настройки модели](#_Set_imperfections_model) структуры и уже там включить [соответствующий блок](#_Drifts) и необходимы виды дрейфа. Добавление в таблицу не означает автоматического добавления дрейфа в вычислительную модель. Нужно включить дрейф, кликнув по заголовку. Точно так же можно быстро выключать дрейф из расчёта.

1. Table

   Description automatically generatedДрейф толщин: линейный, случайный, гармонический
2. Table

   Description automatically generatedДрейф интерфейсов: линейный, случайный, гармонический

## Общая апериодика

Общая апериодика это, по сути, объединение набора элементов в один контейнер, позволяющий некоторые групповые операции. Она может содержать не только отдельные слои, но и другие периодические и апериодические стеки. Создать её можно двумя способами.

**Первый** способ – создать периодическую структуру и сконвертировать её в апериодическую, выбрав [соответствующую опцию](#_Управление_типом_структуры):

1. Блок управления типом структуры



Периодическая структура будет развёрнута в последовательность слоёв, которые теперь можно редактировать независимо друг от друга. Новые слои или многослойки могут быть добавлены в существующую общую апериодику. Общая апериодика может быть расформирована кнопкой  «Ungroup».

1. Общая апериодика в структуре



**Второй** способ – загрузить текстовый файл со списком слоёв. Для этого нажать кнопку  «Add aperiodic multilayer» на [панели инструментов](#_Панель_инструментов) и следовать [инструкции по импорту](#_Импорт_общей_апериодики).

Двойной клик по апериодике или нажатие кнопки  «Edit» откроет [окно редактирования свойств](#_General__aperiodic).

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedОкно «General aperiodic»

Общую апериодику можно превратить в регулярную апериодику или в периодику. Также можно включать и отключать подгонку и накладывать связи на толщины и интерфейсы всех слоёв, сделанных из одного материала. При включении «Link “z”» или «Link “s”» толщины нижележащих слоёв/интерфейсов начинаю зависеть от верхнего слоя из того же материала.

## Регулярная апериодика

Регулярная апериодика это промежуточный тип структуры между периодикой и апериодикой. От периодической многослойки её отличает то, что слои могут иметь индивидуальную толщину и интерфейс. Но в остальном слои сгруппированы в квазипериоды или элементарные ячейки, и имеют повторяющиеся материал, плотность и другие свойства. В отличие от периодики и общей апериодики, регулярная апериодика может содержать только слои, причём слои нельзя добавлять и удалять динамически. Для изменения количества слоёв регулярную апериодику нужно пересоздавать.

Создать регулярную апериодику можно преобразованием из периодической структуры или из общей апериодики. Уже после создания можно [загрузить толщины слоёв из файла](#_Импорт_регулярной_апериодики), если есть такая необходимость.

Двойной клик по апериодике или нажатие кнопки  «Edit» откроет [окно редактирования свойств](#_Regular_aperiodic_1).

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedОкно «Regular aperiodic»

Все описанные ниже действия можно делать как из окна апериодики, так и из основной таблицы.

Кнопка «Layers» открывает [детальную таблицу слоёв](#_Regular_aperiodic), в которой можно работать с отдельными слоями, менять толщины и интерфейсы, включать и выключать фиттинг. Слои промаркированы цветами чтобы показать, могут ли они меняться индивидуально. Фиттинг толщины можно включать для отдельных слоёв или для всех сразу, если кликнуть, зажав «Shift».

1. Table

   Description automatically generatedТаблица слоёв регулярной апериодики

Регулярную апериодику можно превратить в общую апериодику или в периодику. В первом случае параметры слоёв сохранятся, а во втором значения толщин слоёв будут заменены на средние по структуре.

Также можно включать и отключать подгонку и накладывать связи на толщины и интерфейсы всех слоёв одного типа. «Common “z”» или «Common “s”» делает толщины всех слоёв/интерфейсов данного типа строго одинаковыми. То есть если они включены для всех слоёв в ячейке, то это будет эквивалентно периодической структуре.

[Параметры](#_Параметры) в группе «Restrict z: {±Δ, p, Q}» позволяют настроить «мягкое» ограничение разброса толщин слоёв при автоматической оптимизации структуры. Если толщина любого слоя будет отличаться больше, чем на величину Δ от средней толщины слоёв данного типа, то к величине минимизируемой функции будет прибавляться «штраф», а именно следующая величина: , где z – толщина слоя, <z> - средняя толщина слоёв данного типа, p – показатель степени, отвечающей за скорость нарастания штрафа с увеличением отклонения, а Q – весовой фактор. Таким образом, толщинам «невыгодно» далеко выходить за указанные пределы ±Δ.

В главной таблице эти параметры расположены под профилями интерфейса.

1. Graphical user interface, application, table, Excel

   Description automatically generatedПараметры регулярной апериодики

Если какой-то тип слоя имеет одинаковую толщину/интерфейс по всей структуре, то их можно задать напрямую из главной таблицы.

Открыть таблицу слоёв можно через контекстное меню на элементе «Regular aperiodic»

1. Graphical user interface, application, Word

   Description automatically generatedКонтекстное меню для таблицы слоёв

## Шероховатость

Шероховатость, в отличие от перемешанного интерфейса, задаётся исключительно из главной таблицы. Для этого нужно открыть «[Structure table](#_Окно_свойств_элемента)», а в ней – [окно настройки модели](#_Set_imperfections_model) структуры и уже там включить [соответствующий блок](#_Roughness) и в нём настроить модель шероховатости.

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Use roughness»

### Приближение

Основная модель для реальных расчётов – «PT», она не использует конкретный вид статистику высот, но сильнее ограничена по высоте шероховатости. «DWBA», «SA», «CSA» являются референсными, позволяющими проверить корректность метода.

Наличие (межслоевой) корреляции «Full»/«Partial»/«Zero» выбирается из общефизических соображений. Она также определяет, какие именно корреляционные функции можно будет использовать.

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedИнформация о выбранной модели шероховатости в шапке таблицы

Дальше по сути выбираются две модели: модель базовой шероховатости, т.е. шероховатости подложки, и модель наследования. Если межслоевая корреляция полная – задаётся только базовая шероховатость, которая полностью воспроизводится до верха структуры. Если корреляция нулевая – то в зависимости от опции «Common PSD» задаётся либо одна модель на все интерфейсы, либо для каждого интерфейса индивидуально. При частичной корреляции нужно задавать способ репликации PSD.

### Шероховатость подложки

#### Основная модель

Первая – так называемая «ABC» или K-корреляционная модель [4], описывающая большое количество измеренных спектров полированных подложек:



Её PSD вычисляется аналитически:



Вторая – «Stretched exp» модель корреляционной функции [4–6] с теми же тремя параметрами:



При «α» = 0.5 эти модели совпадают.

«ABC» и «Stretched exp» имеют один набор параметров: полная среднеквадратическая высота шероховатостей «σ», для частот от 0 до +∞, фрактальная размерность «α», определяющая скорость спадания спектра в область высоких частот, и корреляционный радиус «ξ», означающий латеральную дистанцию между точками рельефа, ближе которой высоты скоррелированы. Большой «ξ» означает, что основной вклад в шероховатость вносит низкочастотная часть рельефа, малый «ξ» означает больший вклад высокочастотной части.

1. Table

   Description automatically generatedПараметры «ABC» и «Stretched exp» моделей

#### Внешняя PSD

Наравне с модельной шероховатостью можно использовать экспериментально измеренную. Загрузка описана в [другом разделе](#_Импорт_PSD_шероховатости). У закруженной кривой можно регулировать значение «rf 1D» или «rf 2D» – множителя при среднеквадратичной шероховатости.

1. Table

   Description automatically generated with medium confidenceВнешняя PSD шероховатости

Загруженная PSD заменит модельную в своей области пространственных частот. За этими пределами она будет продолжена модельной функцией «ABC» и «Stretched exp». Наглядно видеть эту сшивку PSD можно в окне «[Roughness spectrum](#_Roughness_spectrum)».

#### Гауссов пик

Модельные PSD монотонные, они убывают при увеличении пространственной частоты. Но в реальности может понадобиться симулировать развитие шероховатости с некоторым латеральным масштабом, в окрестности которого может наблюдаться пик PSD. Для этого в Multifitting добавлена модельная PSD в виде гауссова пика:



где *f* – нормировочный фактор, такой, что 

Эта PSD **суммируется** с уже имеющимися основной модельной PSD и загруженной экспериментальной.

У пика три параметра: «σv» – полная среднеквадратичная шероховатость пика, «ν0» – центральная пространственная частота, «δν» – частотная ширина пика на полувысоте.

1. Table

   Description automatically generatedГауссов пик шероховатости

### Модель репликации

Если тип вертикальной корреляции – «Partial», то дополнительно должна быть настроена модель корреляции PSD. Таких моделей три.



1. Модели вертикальной корреляции

#### Replication factor

PSD на всех интерфейсах считается одинаковой, но корреляция между интерфейсами является частотно-зависимой и падает с толщиной слоя. Кросс-корреляционный множитель:



Здесь два основных параметра: «Lv» – глубина корреляции на частоте «νl», «β» – показатель частоты, определяющий скорость спадания корреляции в область высоких частот.

1. Table

   Description automatically generatedПараметры репликации

Параметр «νl» – вспомогательный, он не может быть подогнан автоматически и задаётся сразу для всех интерфейсов. Расположен в таблице он тоже обособленно:

1. Частота, для которой выставляется глубина корреляции



#### Linear growth, alpha

Здесь для моделирования шероховатости многослойной структуры используется модель роста плёнок [7–9]. PSD на последующих интерфейсах частично наследуется от предыдущих, а частично заменяется на ростовую с единым фрактальным параметром «α»:

, где 

Здесь три основных параметра: «Ω» – объём падающих в процессе роста частиц, «Lv» – глубина корреляции на частоте «νl», «α» – фрактальный определяющая скорость спадания спектра (и кросс-корреляции) в область высоких частот.

1. Table

   Description automatically generatedРостовые параметры

Как и в [предыдущей модели](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_частота_корреляции), «νl» – вспомогательный параметр, который не может быть подогнан автоматически и задаётся сразу для всех интерфейсов.

#### Linear growth, n=1-4

Здесь для моделирования шероховатости многослойной структуры также используется модель роста плёнок [7–9]. PSD на последующих интерфейсах частично наследуется от предыдущих, а частично заменяется на ростовую. Но рост здесь происходит одновременно в рамках нескольких процессов, отвечающих собственным степеням частоты:

, где 

Модель содержит пять параметров: «Ω» – объём падающих в процессе роста частиц, «a1», «a2», «a3», «a4» – ростовые коэффициенты.

1. Table

   Description automatically generatedРостовые параметры

## Внутрислоевые частицы

Параметры внутрислоевых частиц задаются в главной таблице. Для этого нужно открыть «[Structure table](#_Окно_свойств_элемента)», а в ней – [окно настройки модели](#_Set_imperfections_model) структуры, там включить [соответствующий блок](#_Particles) и в нём настроить модель частиц.

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Use particles»

Кросс-корреляция частиц, расположенных в разных слоях, может быть выбрана из набора «Full»/«Partial»/«Zero», исходя из общефизических соображений.

Латеральная корреляция может отсутствовать («Disorder») или соответствовать усреднённому по ориентациям двумерному паракристаллу («Radial paracrystal»). «Disorder» также можно понимать как предельный случай паракристалла с бесконечной большими случайными смещениями частиц.

Тип решётки влияет не только на интерференцию частиц, если она есть, но и на плотность расположения частиц в слое, а значит, и на интенсивность рассеяния.

1. Text

   Description automatically generatedИнформация о выбранной модели частиц в шапке таблицы

Опция «Specify material» позволяет выбирать: отличается ли материал частицы от материала слоя. Если нет, то отличаться может плотность.

В отличие от шероховатости, частицы могут индивидуально включаться и отключаться в каждом слое. В зависимости от типа межслоевой корреляции, и опции «Common parameters for all layers» доступны также настройки формы частиц, типа решётки и латерального порядка для отдельных слоёв.

1. Graphical user interface, table

   Description automatically generatedУправление слоем частиц

#### Параметры частиц

Материал частицы задаётся так же, как и материал слоя.

1. Table

   Description automatically generatedУправление слоем частиц

Параметры, определяющие форму частиц: радиус в плоскости слоя и высота в перпендикулярном направлении.

1. Table

   Description automatically generatedУправление слоем частиц

#### Параметры распределения

Если латеральный порядок отсутствует («Disorder»), то задаётся только среднее расстояние между частицами в по базовой решётке.

1. Graphical user interface, table

   Description automatically generatedСреднее расстояние между частицами

Если выбран «Radial paracrystal»: «r» – среднее расстояние между частицами в решётке, «δr» – среднеквадратическая вариация этого расстояния (гауссово распределение), «D» – диаметр паракристаллического домена, определяющий максимальное число частиц, участвующее в интерференции.

1. Table

   Description automatically generatedПараметры решётки

При частичной («Partial») вертикальной корреляции задаётся среднеквадратическое случайное смещение частиц слоя как целого относительно частиц нижележащего слоя. Распределение гауссово.

1. Graphical user interface, table

   Description automatically generatedСлучайный сдвиг частиц в слое относительно нижележащего слоя

По вертикальной координате центр частиц по умолчанию совпадает с центром слоя. Это положение можно сдвигать параметром «zp» – положительное значение поднимает слой частиц к поверхности, отрицательное – опускает к подложке. «δzp» определяет среднеквадратичный разброс частиц по вертикали с гауссовым распределением.

1. Table

   Description automatically generatedВертикальное расположение частиц в слое

Если значения таковы, что частицы начинают выходить за пределы слоя, то расчёт становится неверным, т.к. пересечение частиц границами слоёв не включено в модель.

*Внимание*: При расчёте поля невозмущённой задачи для рассеяния частицы на меняют средней диэлектрической проницаемости слоя. Но при расчёте отражения от системы, содержащей частицы, проницаемость меняется на среднюю с учётом частиц.

*Внимание*: При расчёте поля невозмущённой задачи для рассеяния частицы на меняют средней диэлектрической проницаемости слоя. Но при расчёте отражения от системы, содержащей частицы, проницаемость меняется на среднюю с учётом частиц.

# Расчёт кривых и загрузка экспериментальных данных

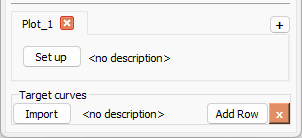
Прежде, чем получить результат расчёта, нужно указать что именно следует рассчитать, т.е. задать геометрию симуляции и инструментальные параметры. Multifitting предлагает пять геометрий:

* Зеркальная геометрия: отражение и прохождение, распределение интенсивности поля в структуре
* Скан детектором: одномерное рассеяние при фиксированном угле падения пучка
* Кривая качания: одномерное рассеяние при фиксированном угле между источником и детектором
* Офсетный скан: одномерное рассеяние с фиксированной угловой отстройкой между направлением на детектор и зеркальным направлением
* GISAS карта: двумерная картина рассеяния при фиксированном угле падения пучка

Каждый вид симуляции может быть использован в одном из двух режимов: расчёт по задаваемой эквидистантной сетке («независимая кривая») или расчёт по сетке загруженных данных («экспериментальная кривая»). Опишем, создать и настроить новую симуляцию.

В соответствии со [структурой главного окна](#_Главное_окно) нужно добавить новую или продублировать существующую кривую, [независимую](#_Независимые_кривые) или [экспериментальную](#_Экспериментальные_кривые).

1. Добавление новой кривой



При нажатии на «Set up» для независимой кривой или «Import» для экспериментальной, откроется окно выбора типа симуляции

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedВыбор типа измерения

## Specular scan

### Независимая кривая

Структура окна зеркальной независимой кривой подробно рассматривается в главе **[Пользовательский интерфейс](#_Specular_scan_1)**. Можно пройти по каждому из блоков «[Units](#_Units_1)», «[Argument](#_Argument)», «[Beam](#_Beam)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» и установить требуемые значения.

Стоит обратить внимание на блок «Argument», т.к. именно здесь можно выбрать тип кривой – спектральную или угловую.

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedБлок «Argument»

В блоке «Beam» указываются угловая и спектральная ширина пучка. Величина указывается прямо с основном окне, а дополнительные параметры можно задать, нажав кнопку «Set up distribution».

1. Блок «Beam» и настройка распределения



Откроется отдельное окно с графиками распределения интенсивности излучения от длины волны или угла. Опции тут следующие:

Величина «Spectral width»/«Angular divergence» – полная ширина на половине высоты распределения (FWHM).

«Distribution» – форма распределения.

«Use sampling» – рассчитать несколько кривых с разными значениями из распределения и просуммировать их с соответствующими весами. Наиболее прямой и «точный» способ учесть немонохроматичность и неколлимированость пучка, но требующий проведения достаточно большого количества вычислений. Опции ниже касаются настройки выбора точек для расчёта:

«Coverage» – указать ширину области, в пределах которой будут выбраны точки.

«Number of samples» – сколько значений угла/длины волны брать для расчёта.

1. Chart

   Description automatically generatedОкно углового и спектрального распределения интенсивности падающего пучка

Если опция «Use sampling» выключена или недоступна, то расходимость учитывается более простым образом: «чистая» кривая заменяется свёрткой с соответствующим распределением. При этом спектральное распределение всё равно влияет на угловую кривую, а угловое распределение – на спектральную кривую. Делается это в соответствии со следующим соображением: при наличии углового уширения берётся спектральное уширение, которое даёт такое же распределение волнового вектора k=2p/l sin(t).

Распределение с включенным семплингом и достаточным числом точек даёт референсную кривую, с которой можно сравнивать результат применения менее точной, но более быстрой свёртки.

### Экспериментальная кривая

Структура окна экспериментальной кривой подробно рассматривается в главе [**Пользовательский интерфейс**](#_Specular_scan). Окно состоит из блоков «[Measurement](#_Measurement)», «[Argument](#_Argument_1)», «[Value](#_Value)», «[Beam](#_Beam_1)», «[Detector](#_Detector_1)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» и [нижнего блока](#_Нижняя_панель) с кнопками загрузки и выгрузки данных.

Процесс загрузки данных описан в разделе «[Import](#_Импорт)» главы «[Экспорт и импорт данных](#_Экспорт_и_импорт)». Формат данных описан [чуть ранее](#_Экспериментальные_кривые_1).

После того, как кривая появилась на графике, обратите внимание на диапазоны осей, проверьте корректность данных.

## Detector scan

Структура окна [независимой](#_Detector_scan_1)  и [экспериментальной](#_Detector_scan) кривой подробно рассматривается в главе **Пользовательский интерфейс**. Подход такой же как в предыдущем разделе, только здесь есть дополнительный параметр – фиксированный угол скольжения пучка, он же зеркальный угол для детектора.

1. Фиксированный угол скольжения



## Rocking scan

Структура окна [независимой](#_Rocking_scan)  и [экспериментальной](#_Rocking_scan_1) кривой подробно рассматривается в главе **Пользовательский интерфейс**. Почти все параметры такие же как для [зеркальной геометрии](#_Specular_scan_2), но тип аргумента можно выбрать: угол скольжения падающего пучка или отклонение образца от зеркального положения. Дополнительный параметр – угол скольжения пучка, при котором отражённый пучок попадает в детектор.

1. Угол зеркального положения



## Offset scan

Структура окна [независимой](#_Offset_scan)  и [экспериментальной](#_Offset_scan_1) кривой подробно рассматривается в главе **Пользовательский интерфейс**. Почти все параметры такие же как для [зеркальной геометрии](#_Specular_scan_2). Дополнительный параметр – постоянный сдвиг детектора от зеркального направления.

1. Отстройка от зеркального направления



## GISAS map

### Независимая кривая

Структура окна независимого GISAS измерения подробно рассматривается в главе [**Пользовательский интерфейс**](#_GISAS_map).

Данные на детекторе двумерные, но угол скольжения пучка задаётся только для полярной координаты θ0. Азимутальной координаты пучка φ0 нет, она считается равной нулю. Но угловая расходимость Δφ0 в азимутальной плоскости может быть задана.

1. Блок «Beam»



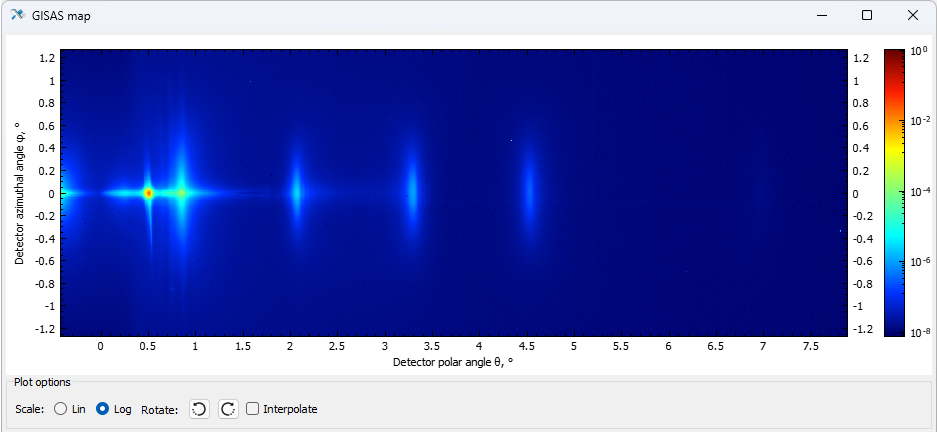
### Экспериментальная кривая

Структура окна экспериментальной кривой подробно рассматривается в главе [**Пользовательский интерфейс**](#_GISAS_map_1).

Процесс загрузки данных такой же, как и для одномерных кривых, и описан в разделе «[Import](#_Импорт)» главы «[Экспорт и импорт данных](#_Экспорт_и_импорт)». То есть нужно просто перетащить файл с данными на окно кривой. Формат двумерных данных описан также в [соответствующем разделе](#_2D_данные).

После загрузки в верхней части будет показана цветовая карта. Ориентируясь на неё следует не только настроить уже описанные инструментальные параметры, но и сориентировать данные по осям с помощью кнопок поворота изображения против часовой  и по часовой стрелке .

1. Настройка ориентации двумерных данных



В отличие от одномерных данных, здесь диапазон аргументов не считывается из файла. Аргумент задаётся отдельно в соответствующем [блоке](#_Argument_2), а сетка значений предполагается равномерной.

1. Graphical user interface

   Description automatically generated Блок «Argument»

## Визуализация результатов расчёта

Когда параметры скана заданы, можно запускать вычисление («Ctrl+Shift+C») и открывать окно «[1D graphs](#_1D_graphs)» или «[2D graphs](#_2D_graphs)» или сразу оба в зависимости от набора кривых.

Часть настроек, касающихся вычисления кривой, расположена в окне «[Calculation settings](#_Calculation_settings)». Для рассеяния можно указать [дополнительные настройки](#_Рассеяние) применения инструментальной функции и учёта зеркальной компоненты.

Для независимого зеркального скана в «Calculation settings» [указывается](#_Независимая_зеркальная_кривая) тип рассчитываемой величины «Reflectance», «Transmittance», «Absorptance», распределение интенсивности поля в структуре «Field intensity» и распределение поглощения в структуре «Absorption map».

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedНастройки «независимого» зеркального скана

При одновременном выборе нескольких галочек «Reflectance», «Transmittance», «Absorptance» на графике одномерной кривой будет отображена только одна величина – самая правая. Аналогично, если одновременно включены «Field intensity» и «Absorption map» – в окне «2D graphs» будет показана «Absorption map».

# Оптимизация и подгонка

Автоматическое или как минимум автоматизированное нахождение подходящих параметров структуры – одно из основных требований к программам, подобным Multifitting. Имеет смысл выделить два класса задач исследователей и технологов, для которые требуется эта функциональность.

Первая – задача **анализа** или задача реконструкции. Дан образец, проведены его измерения на рефлектометре и дифрактометре. Номинальная структура образца известна, требуется найти количественные параметры модели, позволяющие объяснить все существенные особенности экспериментальных данных. В случаях, когда подходящий набор параметров не единственный, крайне желательно найти все такие наборы. Экспериментальными данными здесь являются и рефлектомерия и одномерные сканы рассеяния, и GISAS.

Вторая – задача **синтеза** или задача оптимизации. Требуется получить структуру, с определёнными оптическими характеристиками, например с конкретным спектром отражения. Варьироваться могут только те параметры, которыми технологи могут можно управлять при синтезе структуры. В первую очередь это количество слоёв, их толщины и химический состав. Межслоевые интерфейсы и внутреннюю микроструктуру слоёв контролировать и изменять гораздо сложнее, поэтому они часто фиксируются, полагаясь известными для отработанного технологического процесса. Могут быть дополнительные условия, облегчающие создание структуры: ограничение количества слоёв, ограничение разброса толщин слоёв. На выходе достаточно иметь только один набор параметров, позволяющих решить исходную задачу. Внешние данные, под которые идёт подгонка, здесь могут быть расчётные, например кривая отражения определённой формы, или экспериментальные, например, спектр излучения источника.

Задачу синтеза гораздо проще автоматизировать, чем задачу анализа структуры. При синтезе имеется чёткий набор параметров, подлежащих варьированию, присутствует внятный критерий, по которому мы оцениваем результат. При анализе структуры приходится последовательно усложнять её модель, вводя новые параметры для более тонкой настройки. Почти всегда приходится вручную рассматривать различные варианты и перемежать ручные изменения с автоматической подгонкой.

## Выбор целевых кривых

После того, как все необходимые данные загружены, можно выбрать, какие из них использовать для подгонки. Это делается в окне «[Calculation settings](#_Calculation_settings)». Нужные кривые должны быть 1) включены для расчёта в целом и 2) иметь включённой галочку «Fit»:

1. Участие кривой в подгонке



Если эти две галочки включены, то для данной кривой будет вычисляться значение невязки, которое в свою очередь будет влиять на эволюцию значений параметров структуры. Для того, чтобы подгонка проходила результативнее, следует настроить несколько дополнительных параметров. В разделе «[Зеркальная кривая с экспериментальной сеткой](#_Зеркальная_кривая_с)» дано краткое описание параметров в блоке кривой.

Прежде всего следует обратить внимание на вид функции невязки кривой. Поля «Function» и «Power» задают вид пользовательской функции невязки, которая в общем виде устроена так: . Переключатель «Use χ2» позволяет использовать стандартную функцию .

Если кривых несколько, то в может понадобиться подстроить параметры «Weight» и «Divide by N», чтобы сбалансировать вклад каждой кривой в общую невязку. Увидеть текущие значения невязок можно при каждом перевычислении («Ctrl+Shift+C»), если в окне «General settings» на вкладке «[Interface](#_Interface)» включить флажок «Show individual residuals»:

1. Вкладка «Interface»



Тогда в командной строке выдут выводиться невязка каждой отдельной кривой и суммарная невязка.

1. Text

   Description automatically generatedНевязки: суммарная и по каждой кривой

«Adjust scale factor» позволяет варьировать нормировочный «[Factor](#_Value)» целевой кривой. Это может быть нужно только если экспериментальная кривая не нормирована, в остальных случаях подгонять нормировку не нужно!

Для задачи оптимизации энергетической эффективности зеркала при заданном спектре источника существует переключатель «Maximize integral». С ним будет максимизироваться интеграл загруженной кривой с заданной функцией от расчётной кривой.

## Параметры структуры

### Включение параметра

Подгонка параметров включается и отключается в [главной таблице](#_Окно_свойств_элемента) структуры. Каждый [параметр](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_галочка_fit) под полем с текущим значением имеет флажок «fit». Включение добавляет параметр в подгоночный список и делает редактируемыми поля для выставления верхнего и нижнего предела.

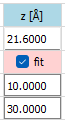
1. Включение подгонки и пределы варьирования

фитинг вкл/выкл

мин

макс

текущее значение



Параметр не будет подгоняться, если он является [зависимым](#_Связанные_параметры). В этом случае его шапка будет не голубая, а красная или жёлтая.

### Регулярная апериодика

В случае регулярной апериодики подгонка всех параметров, кроме толщин может быть включена и выключена только для всех слоёв того же типа одновременно. Толщины слоёв можно подгонять как скопом, так и по отдельности. Включение «fit» из основной таблицы приведёт к включению подгонки для всех слоёв, что можно увидеть, открыв [таблицу слоёв регулярной апериодики](#_Regular_aperiodic).

1. Table

   Description automatically generatedПодгонка слоёв регулярной апериодики

«Fit z» в этой таблице включать подгонку только для отдельных слоёв или, опять же, для всех сразу, если зажать «Shift».

Пределы варьирования одинаковые для всех слоёв одного типа, они задаются в основной таблице. Но кроме этих пределов можно дополнительно [ограничить разброс](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_ограничение_апериодики) толщин вокруг среднего значения. Эта функция включается в главной таблице.

### Связанные параметры

Параметры можно связывать друг с другом функциональной зависимостью. Для этого нужно [вызвать контекстное меню](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_галочка_fit), кликнув правой кнопкой мыши по заголовку параметра. Процесс описан в разделе «[Coupling editor](#_Coupling_editor)».

Зависимые параметры не подгоняются, а рассчитываются из значения «параметра-хозяина» на каждой итерации. В зависимости от модификатора «[Change dependent](#_Модификаторы)» зависимые параметры могут быть блокированы от ручного изменения или нет. Но при автоматической подгонке они пересчитываются в любом случае.

## Настройка алгоритма

Перед стартом подгонки следует выбрать алгоритм в окне «[Fitting settings](#_Fitting_settings)» и выставить базовые настройки.

Для алгоритмов группы GSL параметр «Number of iterations» устанавливает максимальное количество итераций, которое может быть достигнуто, если не будет выполнен критерий сходимости. Для алгоритмов группы SwarmOps это число равно числу итераций.

Табличные параметры используются как начальные значения. При этом для алгоритмов группы SwarmOps можно инициализировать подгонку случайными величинами, сняв галочку «Initialize by current state».

Если вы хотите получить несколько наборов параметров, стартуя не только с начального значения из таблицы, а со случайного величины из разрешённого интервала, то нужно включить «Randomized start» и задать «Number of runs». При этом первый прогон всё равно начнётся со значения из главной таблицы.

## Запуск

Чтобы запустить подгонку нужно нажать «Ctrl+Shift+F» или в меню «[Calculate](#_Calculate)» главного окна выбрать «Start fitting». В командной строке можно следить за прогрессом и результатом подгонки.

1. Text

   Description automatically generatedНабор подгонок в окне «Fits selector»

Процесс можно прервать, нажав «Alt+.» или в меню «[Calculate](#_Calculate)» главного окна выбрать «Abort calculation».

## После завершения

Результаты подгонок сохраняются в «Fits selector» под автоматически сгенерированными названиями. Перед началом подгонки автоматически делается снимок состояния структуры и сохраняется с пометкой «…|| initial». Если результат оказался неудовлетворительным, можно откатиться к предыдущему состоянию.

1. Graphical user interface, text, table

   Description automatically generatedНабор подгонок в окне «Fits selector»

При рандомизированном старте результаты всех прогонов сохраняются под соответствующими именами «… run 1 ||…», «… run 2 ||…» и т.д. Также результаты экспортируются в файл «fits.txt». Столбцы следующие: номер старта, финальное значение невязки, финальные значения подгоняемых параметров.

1. Graphical user interface, text, table

   Description automatically generated with medium confidenceРезультаты прогонов в файле «fits.txt»

Если старт одиночный, то кроме начального состояния будет сохранено и конечное с пометкой «…|| final».

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedНабор подгонок в окне «Fits selector»

По окончании подгонки или при её прерывании возникает диалоговое окно с предложением обновить параметры, заменив начальные значения на конечные (в случае прерывания – имеющиеся на данный момент). Если отказаться, то финальное состояние, как на скриншоте выше, сохранено не будет.

1. Graphical user interface, text, application

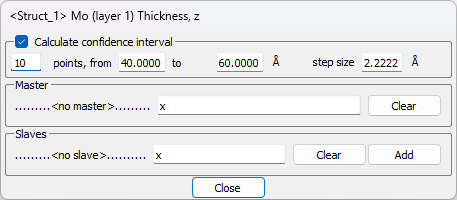
   Description automatically generatedДиалог по окончании подгонки

## Доверительный интервал

В Multifitting можно оценить доверительный интервал параметров структуры. Задача – получить предельные значения выбранного параметра, отклонения до которых ещё могут быть скомпенсированы изменениями всех остальных параметров. Делается это не полностью автоматически, финальное решение о доверительном интервале делает пользователь. Multifitting только предоставляет информацию о том, насколько отклонение параметра ухудшит совпадение расчётной и целевой кривых.

Алгоритм следующий. В главной таблице для нужного параметра нужно через [контекстное меню](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_галочка_fit) вызвать окно «[Coupling editor](#_Coupling_editor)». В этом окне нужно включить верхний блок «Calculate confidence interval». Если параметр зависимый, то включить блок нельзя.

1. Настройка сетки для доверительного интервала



Далее задаётся количество точек и диапазон значений. Шаг вычисляется автоматически, он показан для удобства пользователя. «Coupling editor» можно закрыть. Параметр в таблице будет обозначен сиреневым или фиолетовым цветом:

1. Цветовой обозначение параметра



(a)

(b)

Значения выбранного параметра будут пробегать выбранный диапазон и для каждого значения будет делаться подгонка остальных (вспомогательных) параметров, у которых включен флажок «fit». Поэтому теперь нужно включить «fit» у этих вспомогательных параметров. Наличие «fit» у оцениваемого параметра не играет роли. Если «Calculate confidence interval» включён у нескольких параметров сразу, то они будут брать на себя эту роль по очереди.

Старт вычислений происходит при нажатии «Ctrl+Shift+A» или в меню «[Calculate](#_Calculate)» главного окна выбрать «Calculate confidence intervals». Процесс можно прервать, нажав «Alt+.» или в меню «[Calculate](#_Calculate)» главного окна выбрать «Abort calculation».

Результаты подгонок для каждого значения параметра из сетки сохраняются в «Fits selector» под автоматически сгенерированными названиями.

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedПодгонки при фиксированных значениях оцениваемого параметра

Переключаясь между ними, можно видеть как меняется расчётная кривая относительно целевой и, таким образом, оценивать приемлемость отклонения целевого параметра.

Кроме «Fits selector» результаты сохраняются в файл «confidence.txt». Они записываются в две колонки: значение параметра и наилучшее найденное значение невязки. Если построить из этих точек график, то будет видна динамика возрастания значения невязки при отклонении значения изучаемого параметра от оптимального.

1. Table

   Description automatically generatedНаименьшая невязка для каждого значения параметра   
   в файле «confidence.txt»

Если в окне «[Fitting settings](#_Fitting_settings)» включено «Randomized start», то в «Fits selector» будет записан результат наилучшего из всех прогонов (с наименьшей невязкой). В файл «confidence.txt» будут записаны все итоговые невязки прогонов, отсортированные по величине. Формат следующий: значение параметра – наименьшая невязка – отсортированный список невязок:

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedНаименьшая невязка и весь набор при рандомизированных стартах   
   в файле «confidence.txt»

# Экспорт и импорт данных

Для вычислений в Multifitting может потребоваться загрузить следующие данные: [рефлектометрические кривые](#_Specular_scan), [диффузное рассеяние](#_Detector_scan), [GISAXS](#_GISAS_map), [PSD шероховатости](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_внешняя_PSD), [общую апериодику](#_General__aperiodic), [регулярную апериодику](#_Regular_aperiodic_1).

Сохранить в виде текста можно симулированное распределение интенсивности, а также профили диэлектрической проницаемости и распределения материалов. Файлы будут созданы в директории, указанной на вкладке «[Input/Output](#_Input/Output)» окна «Global settings»:

1. Директория для экспорта файлов



## Экспериментальные кривые

Файлы данных содержать комментарии. Строка с комментарием может начинаться с любого символа, кроме цифры (пробел и табуляция не считаются). Например, **«; , . : ! ? = //»** или любая буква. Такие строки Multifitting игнорирует. Считывание файла происходит построчно, поэтому любая строка может быть закомментирована добавлением соответствующего символа в начало.

### Формат данных

#### 1D данные

Формат одномерных данных: два столбца:

* аргумент
* значение

Если столбцов больше двух, то лишние просто игнорируются.

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedПример файла с данными

#### 2D данные

Двумерные данные для GISAXS могут быть прочитаны в двух форматах.

Первый – поточечный. Файл содержит три колонки:

* строка (целое число, начинается с 0)
* столбец (целое число, начинается с 0)
* значение

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generated with medium confidenceПример файла c двумерными GISAXS данными, одна строка – один пиксель.

Второй – прямоугольная матрица значений. Длина каждой строки = числу столбцов.

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedПример файла c двумерными GISAXS данными в виде матрицы.

### Импорт

Экспериментальные (или симулированные ранее) данные следует загружать в разделе «[Target curves](#_Экспериментальные_кривые)» главного окна. В блоке «[Argument](#_Argument_1)» нужно указать тип аргумента и его единицы.

1. Окно экспериментальной рефлектометрической кривой



Путь к файлу

Перезагрузить тот же файл

Самый простой и удобный способ – перетащить файл в окно кривой, оп при этом будет считан автоматически.

Альтернатива - в блоке «[Measurement](#_Measurement)» указать путь к файлу или выбрать файл в диалоговом окне.

Кнопка «Read data» внизу окна позволяет перечитать уже загруженный файл, указанный в поле «File path».

### Экспорт ранее загруженных данных

Кнопка «Export data» внизу окна позволяет сохранить обратно в файл загруженную ранее кривую. Данные хранятся в файле проекта и могут быть экспортированы даже если исходный файл (указанный в поле «File path») уже не существует.

1. Окно экспериментальной кривой



Сохранить всё прочитанное содержимое обратно в файл

Содержимое файла будет полностью идентично исходнику, со всеми комментариями, дополнительными столбцами и т.д.

## Экспорт симулированных данных

Результаты расчёта отражения или рассеяния сохраняются в текстовом виде автоматически по окончании расчёта, если во вкладке «[Input/Output](#_Input/Output)» окна «Global settings» стоят соответствующие флажки. В этом случае достаточно сделать перерасчёт, нажав «Ctrl+Shift+C».

1. Автоматический вывод в файл



При любых настройках можно сделать разовый экспорт, выбрав пункт меню «[File](#_File)» главного окна. При этом все кривые будут перевычислены.

1. Главное меню «File»



Результаты вычислений сохраняются в текстовых файлах с названием «<struct\_name>\_target\_<N>\_<curve\_name>.txt» или «<struct\_name>\_independent\_<curve\_name>.txt». «independent» или «target» означает, что кривая рассчитана по независимой или экспериментальной сетке. «<N>» – порядковый номер кривой, считая от 1. «<curve\_name>» – редактируемое имя кривой.

Например

* «Struct\_1\_independent\_Plot\_1.txt»
* «Struct\_1\_target\_1\_.txt»

Двумерные данные имеют дополнительную приписку к названию, указывающую на тип данных.

Например

* «Struct\_1\_independent\_Plot\_3\_GISAS.txt»
* «Struct\_1\_independent\_Plot\_1\_intensity.txt»
* «Struct\_1\_independent\_Plot\_1\_absorption.txt»

В шапку файла записывается тип скана и базовая информация о настройках инструмента и геометрии измерения. Примеры:

1. Graphical user interface, text, table

   Description automatically generatedВывод в файл рефлектометрического расчёта

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedВывод в файл кривой качания
2. Graphical user interface, text, table

   Description automatically generatedВывод в файл распределения интенсивности поля в структуре
3. Graphical user interface, table

   Description automatically generatedВывод в файл GISAXS

Для одномерных кривых выводятся значения для каждой из задействованных поляризаций и суммарный результат (R\_mixed, R\_s, R\_p). Рефлектометрическая кривая также содержит фазу для отражённой волны для задействованной поляризации (Phase\_R\_s, Phase\_R\_p) в диапазоне (-180°,180°].

## Импорт PSD шероховатости

Загрузка PSD шероховатости из файла производится в [главной таблице](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_внешняя_PSD). Для этого нужно нажать на кнопку, находящуюся в шапке параметра. Если внешняя PSD не загружена, то кнопка белая, если загружена, то зелёная.

1. Table

   Description automatically generated with medium confidenceКнопка загрузки PSD шероховатости

При нажатии на кнопку «PSD 1D» или «PSD 2D» откроется окно для загрузки данных. Файл с PSD можно перетащить в окно или же указать путь к нему через кнопку «Browse…». Также следует указать единицы измерения. Здесь же можно удалить данные.

1. Chart, line chart

   Description automatically generatedЗагрузка одномерной PSD

Данные должны быть организованы в два столбца: аргумент (пространственная частота) и значение (PSD).

## Структура

### Экспорт всей структуры

Информацию обо всей структуре можно сохранить в текстовом файле в человекочитаемом виде. Автоматически загрузить этот файл обратно в Multifitting нельзя; он предназначен, чтобы быстро поделиться информацией или использовать её для каких-либо других целей.

Чтобы сохранить структуру в файл, можно выбрать пункт меню «[File](#_File)» главного окна или нажать «Ctrl+Shift+T».

1. Экспорт структуры в главном меню «File»



Результаты сохраняется в файл с названием «structure\_<struct\_name>.txt». «<struct\_name>» – редактируемое название структуры, написанное на вкладке. Содержимое его примерно следующее:

1. Graphical user interface

   Description automatically generated with medium confidenceОсновные параметры структуры в текстовом файле

### Апериодика

Апериодические стеки сохраняются в файл структуры на общих основаниях. Однако апериодику можно наполнить значениями, считанными из файла. Для регулярной и общей апериодики это делается немного по-разному.

#### Экспорт регулярной апериодики

Если в составе структуры есть регулярная апериодика, то при экспорте структуры в файл («Ctrl+Shift+T») кроме общего файла структуры создаётся ещё один с названием вида «structure\_<struct\_name>\_Aperiodic\_#<N>.txt». Здесь «<N>» – порядковый номер регулярной апериодики в составе структуры, т.к. их может быть несколько. Отсчёт идёт от поверхности.

В файл включены следующие колонки значений:

* номер элементарной ячейки (от поверхности) «cell»
* вещество слоя «material»
* толщина слоя «d»
* толщина перемешанного слоя на верхнем интерфейсе слоя «sigma»

1. Graphical user interface, table

   Description automatically generatedПараметры слоёв регулярной апериодики

Файл подобного формата может быть импортирован обратно в Multifitting.

#### Импорт регулярной апериодики

Создать регулярную апериодику можно из периодической структуры, указав состав элементарной ячейки и их количество. Но задать толщины и интерфейсы слоёв можно также, загрузив соответствующий файл. Формат и содержимое файла соответствует рисунку выше. При этом колонка №4 является опциональной, т.е. интерфейсы можно не загружать. Первые две колонки играют вспомогательную роль, позволяя не запутаться и проверить данные, но непосредственно информация из них не используется.

Прочитать файл можно, перетащив его в предварительно открытую [таблицу слоёв](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_таблица_апериодики) апериодики:

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedЗагрузка регулярной апериодики из файла

Здесь выбираются единицы толщины, в которых будут прочитаны значения в файле, а также считывать или нет интерфейсы в четвёртой колонке.

Если число слоёв в файле не равно числу слоёв в таблице, будет показано предупреждение. Если вы считаете, что так и должно быть, файл будет прочитан. При этом если в файле меньше слоёв чем в таблице, то последние слои в таблице не будут затронуты. Если в файле больше слоёв – то будет прочитана только соответствующая часть файла.

#### Импорт общей апериодики

Общую апериодику можно создать, загрузив материалы, плотности, толщины и интерфейсы слоёв из файла. Формат файла почти [такой же](#ДЛЯ_ССЫЛКИ_файл_апериодики), как для регулярной апериодики, но может включать ещё плотности материалов:

* номер слоя (от поверхности)
* вещество слоя
* толщина слоя
* толщина перемешанного слоя на верхнем интерфейсе слоя
* относительная плотность материала

Последние две колонки опциональные и могут отсутствовать, если их не предполагается считывать.

1. Table

   Description automatically generatedПараметры слоёв общей апериодики

Чтобы создать апериодику таким образом, нужно нажать на панели инструментов «Add aperiodic multilayer» и настроить импорт. После нажатия кнопки «Load» откроется диалоговое окно для выбора файла.

1. Загрузка общей апериодики из файла



## Профиль структуры

Профиль структуры по глубине, который можно видеть в окне «[Profile plot](#_Profile_plot)» может быть сохранён в текстовый файл для дальнейшей работы или для подготовки к публикации. Экспортировать профиль можно, выбрав пункт меню «[File](#_File)» главного окна или нажать «Ctrl+Shift+P»:

1. Экспорт профиля в главном меню «File»



При этом в соответствующей директории появятся несколько файлов. Их имена выглядят следующим образом:

«profile\_<data\_type>\_<sharpness>\_<struct\_name>.txt». Здесь «<struct\_name>» – название структуры.

«<data\_type>» принимает значения «Permittivity», «Materials», «Elements».

«<sharpness>» принимает значения «Sharp», «Discretized» или остаётся пустым.

Например:

* «profile\_Elements\_Sharp\_Struct\_1.txt»
* «profile\_Permittivity\_Discretized\_Struct\_1.txt»
* «profile\_Materials\_Struct\_1.txt»

Если структура содержит слой/подложку, вещество которого собрано из отдельных химических элементов, тогда будет создан файл с профилем концентрации этих элементов.

Если структура содержит слой/подложку, вещество которого задано по названию файла «.nk», тогда будет создан файл с профилем относительной плотности материалов.

Наличие «Sharp» в названии файла означает, что это профиль структуры с нулевым перемешиванием на границах. Толщины слоёв могут различные, поэтому в качестве аргумента указываются координаты **верхней границы слоя**.

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generated Пример содержимого файла с резким профилем химических элементов

Наличие «Discrete» в названии файла означает, что это профиль структуры с дискретизацией, заданной в окне «[Calculation settings](#_Параметры_модели_структуры)».

1. Graphical user interface, application, table

   Description automatically generated Пример содержимого файла с дискретизованным профилем материалов

Как и для резкого профиля, толщины субслоёв изменяются от слоя к слою, поэтому в качестве аргумента также указываются координаты верхней границы субслоя. Для экспорта дискретизованного профиля необходимо, чтобы галочка «Show discretization» в опциях «[Profile plot](#_Profile_plot)» была **включена**

1. Опции представления профиля в окне «[Profile plot](#_Profile_plot)»



Отсутствие дополнительных индикаторов в названии файла означает, что это «непрерывный» профиль структуры. Теме не менее, чтобы вывести данные в файл нужно получить набор точек. Для непрерывного профиля установлен фиксированный шаг дискретизации 0.2 Å, который меньше, чем физически осмысленный размер какой-либо особенности профиля. Поскольку шаг постоянный, а профиль предназначен для представления в интерполированном виде, здесь аргумент – это координата **центра субслоя**.

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Пример содержимого файла с «непрерывным» профилем   
   диэлектрической проницаемости

Для экспорта дискретизованного профиля необходимо, чтобы галочка «Show discretization» в опциях «[Profile plot](#_Profile_plot)» была **выключена**.

# Оптические константы материалов

Расчёт отражения и рассеяния излучения требует знания диэлектрической проницаемости веществ. Она зависит от длины волны или энергии фотона, поэтому для каждого участвующего материала нужен ряд значений в соответствующем спектральном диапазоне. Multifitting использует базу оптических констант программы IMD [1] с небольшими добавлениями. Эта база состоит из двух директорий: «nk» и «f1f2». В первой содержатся показатели преломления веществ, во второй – атомные факторы химических элементов.

Оптические константы автоматически загружаются при открытии Multifitting, но их можно перезагрузить вручную из [меню главного окна](#_Optical_constants), если какой-то материал был обновлён.

Файлы данных содержать комментарии. Строка с комментарием может начинаться с любого символа, кроме цифры (пробел и табуляция не считаются). Например, **«; , . : ! ? = //»** или любая буква. Такие строки Multifitting игнорирует. Считывание файла происходит построчно, поэтому любая строка может быть закомментирована добавлением соответствующего символа в начало.

## Библиотека материалов «nk»

Каждому материалу соответствует текстовый файл, например «GaAs.nk». Название материала в Multifitting – это название файла до расширения «.nk».

В шапке файла обычно находится комментарий с информацией. Может быть указана вспомогательная информация о веществе: плотность, аллотропная модификация (аморфный, кристаллический материал). Может упоминаться тип данных (измерение, расчёт или смесь). Если данные являются комбинацией, то указываются названия исходных файлов. Почти всегда даётся ссылка на источник данных.

Данные расположены в трёх колонках:

* длина волны в ангстремах: λ[Å],
* действительная часть показателя преломления: Re(n)
* мнимая часть показателя преломления или поглощение: Im(n)

Длина волны должна изменяться монотонно, т.е. либо увеличиваться, либо уменьшаться. Направление изменения аргумента определяется по первым двум строкам. Значения, выпадающие из монотонной зависимости, пропускаются.

Значения между спектральными точками интерполируются. Если расчётная длина волны оказывается за пределами диапазона данных для какого-либо из материалов структуры, то Multifitting предупредит об этом и расчёт сделан не будет! В этом случае нужно использовать файл со свойствами материала в соответствующей части спектра.

1. Graphical user interface, table

   Description automatically generatedСодержимое файла «GaAs.nk»

Список файлов библиотеки с однострочными комментариями приведён в файле «AAACATALOG.TXT».

1. Text

   Description automatically generatedСодержимое файла «AAACATALOG.TXT»

## Библиотека атомных факторов «f1f2»

Материалы можно составлять, комбинируя любые из первых 92 химических элементов. Диэлектрическая проницаемость материала будет зависеть от стехиометрического соотношения элементов и абсолютной плотности вещества, которая пересчитывается в атомную концентрацию. Показатель преломления вычисляется следующим образом



где *r0* – классический радиус электрона, *λ* – дина волны, *Ni* – атомные концентрация, а *fi* – атомный фактор рассеяния *i*-го элемента.

Файлы имеют название, точно соответствующее химическому элементу, плюс расширение «.ff», например «Si.ff».

В шапке файла обычно находится комментарий с информацией, обычно это ссылка на источник данных.

Данные расположены в трёх колонках:

* энергия в электронвольтах: E[eV],
* действительная часть фактора рассеяния: f1
* мнимая часть фактора рассеяния: f2

Энергия должна строго возрастать. Значения, выпадающие из этой зависимости, пропускаются. Если значение действительной части фактора рассеяния равно -9999, то оно не определено. Строки с f1 ≤ -8888 не учитываются.

Значения между спектральными точками интерполируются. Если расчётная длина волны оказывается за пределами диапазона данных для какого-либо из химических элементов, то Multifitting предупредит об этом и расчёт сделан не будет.

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedСодержимое файла «Si.ff»

# Модели и методы

За пользовательским интерфейсом находится численная реализация методов расчёта отражения, прохождения, поля в структуре и интенсивности рассеянного излучения. В этом разделе описываются физические и математические модели, на основе которых производится расчёт, и последовательно излагаются теоретические соображения, лежащие в основе этих моделей.

## Поле в слоистой структуре

При написании этого раздела я ориентировался на материал, изложенный в [10] в разделе 3.1.1.

Рассмотрим многослойную структуру, состоящую из *n* плоскопараллельных однородных и изотропных слоёв.

1. Отражение электромагнитной волны от многослойной структуры

*x*

*y*

*z*



*Слой j*



*Подложка*



*Вакуум*



Параметры *j*-го слоя: диэлектрическая проницаемость , толщина . Подложка и внешняя среда имеют бесконечную толщину.

Волновое уравнение для поля в кусочно-однородной среде имеет вид

 (14.1.1)

или  (14.1.2)

где                                (14.1.3)

Внутри каждого слоя решением является

 (14.1.4)

В подложке отражённая волна отсутствует:

 (14.1.5)

Граничные условия возьмём следующие: непрерывность *Ey* (выполняется абсолютно всегда) и непрерывность *Hy* (отсутствие поверхностных токов):

 (14.1.6)

где  (14.1.7)

Применение граничных условий (14.1.6) к решениям (14.1.5) приводит к рекуррентным соотношениям для амплитуд  и :

 (14.1.8)

Теперь можно ввести «текущие» коэффициенты отражения и прохождения :

 (14.1.9)

Из (14.1.8) и (14.1.9) получаются рекуррентные соотношения для и :

 (14.1.10)

Величины и  – френелевские амплитудные коэффициенты отражения и прохождения через одиночную границу раздела сред с и :

 (14.1.11)

Рекуррентная процедура для отражения и прохождения начинается со стороны подложки, с *j=n*. Энергетические коэффициенты отражения и прохождения для всей структуры равны

 (14.1.12)

Когда «текущие» коэффициенты  и  найдены, можно найти амплитуды  и  в каждом слое:

 (14.1.13)

с использованием «граничных» условий

 (14.1.14)

Если поле в структуре быстро затухает по мере увеличения глубины из-за поглощения, перекачки в отражение или отсутствия распространяющейся моды, как в области полного внешнего отражения (ПВО), то «текущие» коэффициенты  становятся очень малы. Деление малых чисел друг на друга может дать большую ошибку или даже привести к делению на ноль в программной реализации. Поэтому в этих случаях вместо использования (14.1.13) лучше находить амплитуды компонент поля рекуррентным образом, от поверхности к подложке

 (14.1.15)

с использованием тех же соотношений (14.1.14) для крайних индексов.

## Переходные области на интерфейсах

При рассмотрении выше слои, составляющие многослойную структуру, полагались однородными. Именно благодаря этому можно было записать не только явный вид решения (14.1.4), но и само уравнение (14.1.1) в едином для обеих поляризаций виде.

Если среда не является кусочно-однородной по глубине, то нахождение поля в структуре становится гораздо более сложной задачей. В этом случае можно сохранить подход, приблизив произвольный профиль ε кусочно-однородным профилем, как на рисунке ниже. Регулируя толщину слоёв, можно контролировать степень точности приближения.

1. Разбиение профиля *ε* на тонкие однородные слои

Основным негативным побочным эффектом такого подхода является большое количество слоёв, участвующих в расчёте, и связанное в этим время вычисления.

В некоторых случаях задача может быть решена точно. И здесь сразу стоит обозначить разницу между *s* и *p* поляризациями.

# История версий

* Multifitting v.1.9.2 – публикация (*06.07.2019*).
* Multifitting v.1.10.0 (*19.10.2019*):
  + Исправлены различные ошибки.
  + Графический интерфейс теперь поддерживает масштабирование из операционной системы.
  + Обновлено применение углового и спектрального разрешения. Теперь величины разрешения, которые были заданы в версиях ≤1.9.2, следует умножить на 2. Теперь тонкая линия размывается в широкую с FWHM ≈ заданному разрешению.
  + Угловое и спектральное разрешение действуют каждое на оба типа кривых: спектральную и угловую (по упрощенной схеме).
  + Задаётся начальная и конечная интенсивность зондирующего пучка с линейной интерполяцией между ними.
  + Предупреждение при перезаписи файлов из предыдущих версий.
  + Для графиков доступны дополнительные опции: шапка с параметрами измерения, логарифмический масштаб оси X.
  + Информацию можно показывать/скрывать в окне «Settings» контекстного меню окна «Plots».
  + Мгновенный пересчёт при включении/выключении элементов структуры в структурной таблице если включён модификатор «Recalculate».
  + Графикам в окне «Plots/Measured» присвоены порядковые номера, позволяющие соотнести кривую с загруженными данными.
  + Добавлена возможность максимизации интеграла от кривой отражения с функцией источника.
  + Добавлены настройки алгоритмов фитинга.
  + Десятичные разделители в файлах данных – точки и запятые.
  + В базу оптических констант добавлены файлы «Cr\_delmotte.nk», «Pt\_soufli.nk», «Be\_svechnikov.nk».
* Multifitting v.1.10.2 (*21.02.2020*):
  + Исправлены различные ошибки, в том числе ошибка фитинга к отмасштабированной экспериментальной кривой.
  + В базу оптических констант добавлены файлы «Sc\_larruquert.nk», «ScSi.nk», «Sc5Si3.nk», «Sc3Si5.nk», расширен диапазон «MoSi2.nk», расширен диапазон «Sc.nk».
  + Добавлен выбор поддиапазона внутри экспериментальных данных для подгонки.
  + Добавлена возможность дублирования вкладок структур.
  + Добавлена визуализация профиля структуры по глубине.
  + Добавлена возможность расчёта профиля диэлектрической проницаемости с разбиением на тонкие слои.
  + Добавлена возможность экспорта уже загруженной экспериментальной кривой обратно в текстовый файл.
  + Добавлена возможность подгонки масштабирующего множителя интенсивности для экспериментальных кривых.
  + Можно устранять муаровые искажения расчётной кривой, возникающие, когда период осцилляций отражения от толстых структур почти кратен шагу экспериментальной кривой.
  + Добавлено автоматическое вычисление спектральной ширины пика отражения при вычислении соответствующей кривой.

# Список сокращений

GISAXS – Grazing Incidence Small-Angle X-ray Scattering / малоугловое рентгеновское рассеяние при скользящем падении

PSD – Power Spectral Density, roughness spectrum / спектральная плотность мощности, спектр шероховатостей.

GSL – GNU Scientific Library / научная библиотека GNU

ПВО – полное внешнее отражение

# Список цитируемой литературы

1. D. Windt, "IMD—Software for modeling the optical properties of multilayer films," Comput. Phys. **12**(4), 360 (1998).

2. M. Svechnikov, "Multifitting : software for the reflectometric reconstruction of multilayer nanofilms," J. Appl. Crystallogr. **53**(1), 244–252 (2020).

3. M. Svechnikov, D. Pariev, A. Nechay, N. Salashchenko, N. Chkhalo, Y. Vainer, and D. Gaman, "Extended model for the reconstruction of periodic multilayers from extreme ultraviolet and X-ray reflectivity data," J. Appl. Crystallogr. **50**(5), 1428–1440 (2017).

4. G. Palasantzas, "Roughness spectrum and surface width of self-affine fractal surfaces via the K-correlation model," Phys. Rev. B **48**(19), 14472–14478 (1993).

5. P. Siffalovic, E. Majkova, and M. Jergel, "Gisaxs - probe of buried interfaces in multi-layered thin films," in *X-Ray Scattering*, Christopher M. Bauwens, ed. (Nova Science Publishers, 2011), pp. 1–54.

6. S. K. Sinha, E. B. Sirota, and S. Garoff, "X-ray and neutron scattering from rough surfaces," Phys. Rev. B **38**(4), 2297–2311 (1988).

7. D. G. Stearns, "Stochastic model for thin film growth and erosion," Appl. Phys. Lett. **62**(15), 1745–1747 (1993).

8. D. G. Stearns and E. M. Gullikson, "Nonspecular scattering from extreme ultraviolet multilayer coatings," Phys. B Condens. Matter **283**(1–3), 84–91 (2000).

9. V. E. Asadchikov, I. N. Bukreeva, A. Duparre, I. V. Kozhevnikov, Y. S. Krivonosov, C. Morawe, M. V. Pyatakhin, J. Steinert, A. V. Vinogradov, and E. Ziegler, "X-ray study of surfaces and interfaces," in *Proceedings of SPIE 4449, Optical Metrology Roadmap for the Semiconductor, Optical, and Data Storage Industries II* (2001), **4449**, pp. 253–264.

10. А. В. Виноградов, И. А. Брытов, А. Я. Грудский, М. Т. Коган, И. В. Кожевников, and В. А. Слемзин, *Зеркальная Рентгеновская Оптика* (Машиностроение, 1989).