**Multifitting**

**v.2.0.0**

**User's manual**

updated 13 ноября 2022

Mikhail Svechnikov

[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).

**Table of contents**

[1 Введение 5](#_Toc118643965)

[2 Установка и запуск 6](#_Toc118643966)

[2.1 Windows 6](#_Toc118643967)

[2.2 Linux 6](#_Toc118643968)

[3 Быстрый старт 7](#_Toc118643969)

[3.1 Создание структуры 7](#_Toc118643970)

[3.2 Сохранение и загрузка 7](#_Toc118643971)

[3.3 Вычисление кривой отражения 7](#_Toc118643972)

[3.4 Работа со структурной таблицей 7](#_Toc118643973)

[3.5 Обратная задача 7](#_Toc118643974)

[3.6 Дополнительные экспериментальные кривые 7](#_Toc118643975)

[4 User interface 8](#_Toc118643976)

[4.1 Command line 8](#_Toc118643977)

[4.2 Main window 9](#_Toc118643978)

[4.2.1 Menu 10](#_Toc118643979)

[4.2.2 Structure tabs 12](#_Toc118643980)

[4.2.3 Layered structure 13](#_Toc118643981)

[4.2.4 Toolbar 13](#_Toc118643982)

[4.2.5 Editing a structure element 14](#_Toc118643983)

[4.2.6 Window access bar 25](#_Toc118643984)

[4.2.7 Independent curves 25](#_Toc118643985)

[4.2.8 Experimental curves 33](#_Toc118643986)

[4.3 Structure table 40](#_Toc118643987)

[4.3.1 Menu 41](#_Toc118643988)

[4.3.2 Table content 41](#_Toc118643989)

[4.3.3 Regular aperiodic 55](#_Toc118643990)

[4.4 Profile plot 57](#_Toc118643991)

[4.5 1D graphs 59](#_Toc118643992)

[4.5.1 Settings 60](#_Toc118643993)

[4.5.2 Curve color setting 62](#_Toc118643994)

[4.5.3 Additional curves 62](#_Toc118643995)

[4.6 2D graphs 64](#_Toc118643996)

[4.6.1 Settings 65](#_Toc118643997)

[4.6.2 Setting the color scheme 67](#_Toc118643998)

[4.7 Roughness spectrum 68](#_Toc118643999)

[4.8 Particles spectrum 69](#_Toc118644000)

[4.9 Calculation settings 70](#_Toc118644001)

[4.9.1 Structure model parameters 71](#_Toc118644002)

[4.9.2 Windows settings 71](#_Toc118644003)

[4.9.3 Specular curve with experimental grid 72](#_Toc118644004)

[4.9.4 Independent specular curve 74](#_Toc118644005)

[4.9.5 Scattering 75](#_Toc118644006)

[4.10 General settings 75](#_Toc118644007)

[4.10.1 Input/Output 76](#_Toc118644008)

[4.10.2 Calculation 77](#_Toc118644009)

[4.10.3 Interface 78](#_Toc118644010)

[4.11 Fitting settings 79](#_Toc118644011)

[4.12 Fits selector 83](#_Toc118644012)

[5 Задание слоистой структуры 85](#_Toc118644013)

[5.1 Слой 85](#_Toc118644014)

[5.1.1 Материал 86](#_Toc118644015)

[5.1.2 Толщина 86](#_Toc118644016)

[5.1.3 Интерфейс/диффузность 86](#_Toc118644017)

[5.2 Периодическая многослойка 87](#_Toc118644018)

[5.2.1 Перераспределение толщин слоёв внутри периода 88](#_Toc118644019)

[5.2.2 Дрейф толщин по глубине 89](#_Toc118644020)

[5.3 Общая апериодика 90](#_Toc118644021)

[5.4 Регулярная апериодика 91](#_Toc118644022)

[5.5 Шероховатость 93](#_Toc118644023)

[5.5.1 Приближение 93](#_Toc118644024)

[5.5.2 Шероховатость подложки 94](#_Toc118644025)

[5.5.3 Модель репликации 96](#_Toc118644026)

[5.6 Внутрислоевые частицы 98](#_Toc118644027)

[6 Расчёт кривых и загрузка экспериментальных данных 101](#_Toc118644028)

[6.1 <……………..> 101](#_Toc118644029)

[7 Визуализация результатов расчёта 101](#_Toc118644030)

[7.1 <……………..> 101](#_Toc118644031)

[8 Оптимизация и подгонка 101](#_Toc118644032)

[8.1 <……………..> 101](#_Toc118644033)

[9 Экспорт и импорт данных 102](#_Toc118644034)

[9.1 Экспериментальные кривые 102](#_Toc118644035)

[9.1.1 Формат данных 103](#_Toc118644036)

[9.1.2 Импорт 104](#_Toc118644037)

[9.1.3 Экспорт ранее загруженных данных 105](#_Toc118644038)

[9.2 Экспорт симулированных данных 106](#_Toc118644039)

[9.3 Импорт PSD шероховатости 109](#_Toc118644040)

[9.4 Структура 110](#_Toc118644041)

[9.4.1 Экспорт всей структуры 110](#_Toc118644042)

[9.4.2 Апериодика 111](#_Toc118644043)

[9.5 Профиль структуры 114](#_Toc118644044)

[10 Оптические константы материалов 118](#_Toc118644045)

[10.1 Библиотека материалов «nk» 118](#_Toc118644046)

[10.2 Библиотека атомных факторов «f1f2» 120](#_Toc118644047)

[11 Модели и методы 122](#_Toc118644048)

[11.1 Поле в слоистой структуре 122](#_Toc118644049)

[11.2 Переходные области на интерфейсах 125](#_Toc118644050)

[12 История версий 126](#_Toc118644051)

[13 Список сокращений 128](#_Toc118644052)

[14 Список цитируемой литературы 129](#_Toc118644053)

# Введение

Программа Multifitting предназначена для численное моделирование 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](http://xray-optics.ru/products/software-multifitting/) и на английском: [http://xray-optics.org/products/software-multifitting](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\_X.Y.Z/x64/Multifitting.exe» или «Multifitting\_X.Y.Z/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. Graphical user interface

   Description automatically generatedСообщение 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\_X.Y.Z/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

## СЛОВАРЬ

(Штатное) завершение работы программы

Закрытие средствами операционной системы

Диалоговое окно – dialog // dialog window // dialog box ?

**Элементарная ячейка структуры – unit cell**

**Многослойка – multilayer**

**Поляризуемость - dielectric permittivity**

Дрейф толщины – thickness drift?

Шапка – «header», а не «cap»

Зеркальное направление – specular direction, а не mirror

Угол скольжения – grazing angle, хотя glancing тоже можно

Оптическая схема – optical layout, а не circuit

Кавычки «», а не “” ??

# User interface

**Multifitting** has a multi-window interface, which makes it possible to see a large number of currently required parameters. Multi-window allows you to use the program more conveniently when working with multiple monitors. The position and size of windows is saved automatically: the next time you open the program, the windows will open in the same positions as the previous time. The window geometry is saved during normal completion, i.e. when the main window is closed, but does not occur during an abnormal, i.e. during crashes as a result of an error, closing the command line from which the program was launched, or when forced closing by means of the operating system.

## Command line

The command line serves to display both text information about the current state of the program and messages about internal program errors. It will start automatically when you run the Multifitting executable, but I recommend that you first open the command line separately, and then run Multifitting in it; thus, if the program crashes, the output will not be lost and the reason for the crash can be determined.

1. Example information on the command lineText

   Description automatically generated

The command line displays information about the facts of opening and saving projects, about the calculation time, about the discrepancy between the measured and calculated curves. When fitting, the iteration number, the value of the total residual and the current values of the adjusted parameters are displayed in the console, which allows you to monitor the progress of the operation.

## Main window

1. Main window structure

Menu

Layered structure

Toolbar

Access to other windows

Measured and target curves

Curves without measured data

Tabs with structures



The main window appears when you start the program and largely repeats the main IMD window. The various zones are arranged vertically in the main window. The first area from the top is the main menu.

### Menu

#### File

Menu «File» contains mainly actions for loading and saving data. Almost all of them have corresponding keyboard shortcuts. Related settings are also in window «[General settings](#_General_settings)». Details regarding file names and contents are described in chapter [**Importing and exporting data**](#_Импорт_общей_апериодики)**.**

1.  Menu «File»

* «Open last» – the exact action depends on the settings. The main point is to start working with the last project immediately after starting the program. If the «Always open last file» option is enabled in the «General settings» window, the last project will be opened. If not, a file «save\_v.X.Y.Z.fit» will be opened in the working directory, where X.Y.Z is the version number of Multifitting. If such a file does not exist, a corresponding notification will be shown. The working directory is also set in the «General settings» window.
* «Open» opens a dialog box for selecting a project file.
* «Save» saves the current project. If the project is new, it will be saved under the name «save\_v.X.Y.Z.fit» in the working directory.
* «Save as» opens a dialog for saving the project.
* «Export structures» saves information about the layered structure in the text file «structure\_<struct\_name>.txt» where <struct\_name> is the name of a specific structure (tab). If there are several tabs, there will also be several files.
* «Export curves» calculates and saves all calculated curves in text files named «<struct\_name>\_target\_<N>\_<curve\_name>.txt» or «<struct\_name>\_independent\_<curve\_name>.txt». «target» or «independent» means that the curve is calculated on an independent or experimental grid. «<N>» is the serial number of the experimental curve, counting from 1. «<curve\_name>» is the editable name of the curve.
* «Export profile» exports a layered structure profile to a file. Depending on the settings, the profile describes dielectric permittivity, the relative density of the material, the concentration of chemical elements.

#### Calculate

1. Menu «Calculate»

* «Calculate curves» starts a single calculation. Calculation results can be automatically saved to a text file, depending on the «[General settings](#_General_settings)».
* «Start fitting» starts automatic fitting.
* «Calculate confidence intervals» runs a series of fits at different values of the estimated parameters to determine confidence intervals. The result is saved in the file «confidence.txt».
* «Abort calculation» stops the current fit.

#### Optical constants

1. Menu «Optical constants»

* «Reload optical constants» re-reads the database of optical constants from the folders «nk» and «f1f2». This allows you to apply changes made to the database without restarting the program.

#### Help

1. Menu «Help»



* «Multifitting (English).pdf» opens the manual in English.
* «Multifitting (Russian).pdf» opens the manual in Russian.
* «About Multifitting» shows an information window.

### Structure tabs

1. Adding a structure: duplicating an existing one or creating a new one



The main window contains one or more tabs, each dedicated to one structure. You can change the name of a tab by double-clicking on it.

*Note*: It is recommended that you always assign unique names to your modeled structures. If the structure corresponds to a real sample, give the name of this sample. So later you will always be able to see what exactly you are working with and not depend on the name of the project file. This is especially important if there are several structures in one project.

Also, each tab with all its contents can be duplicated by calling the context menu with the right mouse button. You can destroy the structure by pressing the red button with a cross on the tab. To add a new "blank" tab, click on the "+" button in the upper right corner. By dragging the tabs, you can change their order. If at least one of the windows «Structure table», «Profile plot», «1D graphs», «2D graphs», «Roughness spectrum», «Particles spectrum», «Calculation settings» is open in parallel, then the ability to add, remove and move tabs are blocked. All listed windows contain as many tabs as the main window.

### Layered structure

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedTree-like list describing the structure

Under the name of the tab there is a window with a tree-like list illustrating the general view of the multilayer structure and showing basic information about its parameters. For layers, this is the material, the thickness "z", the spread of thicknesses (if the layer is part of a "regular" aperiodic), the relative or absolute density "ρ", the root-mean-square thickness of the transition region at the upper boundary of the given layer "s". For a substrate, this is the material, density, and thickness of the transition region. For a periodic multilayer, this is the number of periods N, the thickness of the period d, the thickness factor γ is the ratio of the thickness of the upper layer to the thickness of the period (if there are 2 layers in the period).

### Toolbar

Below the structure tree there is a toolbar that allows you to add, remove, copy, paste and move structure components.

1. Toolbar



Add layer

Add multilayer

Add aperiodic multilayer

Edit

Remove

Cut

Copy

Paste

Move up

Move down

Ungroup

Remove all layers

*  «Add layer» inserts a new layer with default settings.
*  «Add multilayer» inserts a periodic structure with 2 layers per cell and 1 period by default. You can add new layers to a cell after it has been created.
*  «Add aperiodic multilayer» adds an aperiodic structure read from a text file. See the chapter [**Importing and exporting data**](#_Импорт_общей_апериодики) for details.
*  «Edit» opens a window with the basic properties of the layer/multilayer. An equivalent action is a double click on the corresponding element of the structure. The settings are described in the chapter [**Editing a structure element**](#_Редактирование_элемента_структуры)**.**
*  «Remove» removes a structure element. The equivalent is the «Delete» key.
*  «Cut» cuts the structure element and places it on the clipboard. Key combination: «Ctrl+X».
*  «Copy» places the structure element on the clipboard. Key combination: "Ctrl + C"
*  «Paste» pastes a structure element from the clipboard. Key combination: "Ctrl+V"
*  «Move up» moves the element up in the structure.
*  «Move down» moves the element down in the structure.
*  «Ungroup» removes the multi-layer and inserts in its place, the elements that were in its composition. Reduces the nesting of a structure.
*  «Remove all layers» removes all elements except for the background and environment.

### Editing a structure element

Double-clicking on a structure element or pressing «Edit» opens a window in which the main characteristics are set. There are several types of elements: layer, substrate, external environment (ambient), periodic multilayer (multilayer), general aperiodic multilayer (general aperiodic), regular aperiodic multilayer (regular aperiodic). You can close the window with the «Close» button, by pressing the «Enter» or «Escape» key.

#### Layer

1. Layers in the structure tree



1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedWindow «Layer»

Structurally, the window consists of the following parts: header, menu, material setting block, thickness setting block, interlayer interface setting block.

##### Header

1. «Layer» window title



Material

Element type = layer

Layer index

The title of the window allows you to uniquely identify which element of the structure you are currently dealing with. Each layer has an index – a unique serial number in the structure, which is indicated in brackets. Only structure layers are indexed. The title also indicates the material of the layer.

##### Menu

1. «Layer» window menu



The «Length units» menu allows you to switch the length units for structural parameters. Changes apply to the entire program. In the «Precision» menu, you can change the number of decimal places used to represent parameter values.

##### Material

1. Block «Material» with tabulated material



There are two ways to set a material in **Multifitting**. The first is to use the refractive index library located in the «nk» folder. To do this, set the switch to the «Optical constants filename» position. In the «Material» field, the name of the text file «\*.nk» is indicated, which also serves as the name of the material. You can also specify a file outside the library by clicking the «Browse…» button. The actual density of the material is not necessarily known, as given the refractive index. But this density can be changed by setting the «Relative density» parameter. This is the factor by which the nominal polarizability of the substance is multiplied.

Another way to define a material is to construct it from chemical elements, specifying stoichiometry and density.

1. Block «Material» with material composed from chemical elements



To do this, set the switch to the «Composition of elements» position. The «Material» field will become uneditable. In the «Composition» block, you can add and remove chemical elements using the «More elements» and «Fewer elements» buttons. Each item is selected from a dropdown list. Elements can also be scrolled with the mouse wheel, and by pressing a letter on the keyboard, you can jump to an element starting with that letter. If the number of elements is more than one, then you can set the stoichiometric ratio between them. This is precisely the ratio of the number of atoms to each other, i.e. "WSi2" is the same as "W2Si4". The absolute concentration of atoms is given by the absolute density of the material, in g/cm3.

##### Thickness

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Block «Thickness»

Here you can set the thickness of the layer. If a layer is part of a periodic multilayer, then it is duplicated N times during the calculation, where N is the number of periods. In this case, in addition to the base thickness, you can specify the change in the layer thickness from period to period. To do this, there is a button «Thickness drift». If you click it, a window will open:

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Window «Thickness drift»

«Linear drift» sets the change in the layer thickness along the depth of the structure, proportional to the number of the period. The drift is given as a percentage of the nominal thickness in one period. The average layer thickness over all periods is equal to the nominal thickness, i.e. on one side the layers will be thinner, and on the other side thicker.

«Sine drift» sets the change in the periodic change in thickness with depth, described by a sinusoid. The amplitude is set as a percentage of the nominal thickness. The frequency is set in "reverse periods", i.e. a value of 0.3333 means that the layer thickness is repeated every three periods. The phase determines the initial position of the modulating sinusoid, it is set in the range from 0 to 1.

«Random drift» "Random drift" determines the random deviation of the layer thickness from the nominal value. The standard deviation is indicated as a percentage of the nominal thickness, the thicknesses themselves are generated randomly with Gaussian statistics on each calculation.

##### Diffuseness

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Block «Diffuseness»

Diffuseness is the amoun­t of interpenetration of the materials of the layers into each other, their mixing at the boundary. It can also be understood as a roughness limit with a lateral correlation tending to zero. The thickness of the transition region is specified in the mean square sense (parameter "s"), and the type of distribution can be selected from several options. The distribution of matter in the transition region is composed of several functions with appropriate weights [3]. By default, the RMS thickness is the same for all functions, but if you enable «Individual “s”», then an individual thickness can be set for each profile function.

If the layer is part of a periodic multilayer, then, as in the case of the layer thickness, one can also indicate the change in the thickness of the interlayer interface from period to period. To do this, use the «Diffuseness drift» button. The interface drift setting window is [exactly the same](#FOR_LINK_thickness_drift) as for thickness.

#### Substrate

1. Substrate in the structure tree



1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedWindow «Substrate»

The «Substrate» window is the same as the «Layer» window, but does not contain the thickness. The thickness of the substrate is assumed to be infinite. The title also indicates the material and says that it is a substrate. The [menu](#_Меню), [material settings bock](#_Material), [interlayer interface settings block](#_Diffuseness) are the same as for the layer.

#### Ambient

1. Ambient in the structure tree



1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedWindow «Ambient»

The «Ambient» window is the same as the «Layer» window, but does not contain the thickness and interface. The [menu](#_Меню), the [material settings block](#_Material) are the same as for the layer.

#### Multilayer

1. Periodic stack in the structure tree



1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedWindow «Multilayer»

Structurally, the «Multilayer» window consists of the following parts: header, menu, parameter setting block, structure type control block.

##### Header

1. «Multilayer» window header



Element type = multilayer

Layers indices inside multilayer

The title of the window indicates that you are dealing with a periodic multilayer. The range of indexes of layers inside this structure is indicated in brackets.

##### Menu

1. «Multilayer» window menu



The «Length units» menu allows you to switch the length units. In the «Precision» menu, you can change the number of decimal places used to represent parameter values. Changes apply to the entire program.

##### Parameters

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedParameter setting block

The first parameter of the periodic multilayer is the number of periods N = 0, 1, 2…  
The second parameter is the period, i.e. thickness of an unit cell consisting of several layers.

The third parameter is the thickness factor γ. This is the ratio of the thickness of the upper layer of the unit cell to the period. The thickness factor appears only when the number of layers in a period is two. With more layers, it loses its meaning.

##### Structure type management

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedStructure type control block

A periodic multilayer can be turned into a regular or general aperiodic by selecting the appropriate option. In this case, the number of layers in the aperiodic will correspond to the total number of layers in the periodic structure, taking into account the number of periods. An exception is if there are 0 periods in the periodic structure, then the number of periods will first be increased to 1 and only then the periodicals will be turned into aperiodic.

«Invert order of layers» allows you to quickly change the order of the layers in the unit cell to the opposite.

#### Regular aperiodic

1. Regular aperiodic in the structure tree



1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedWindow «Regular aperiodic»

Structurally, the «Regular aperiodic» window consists of the following parts: header, parameter limit block, structure type control block.

The «Layers» button opens the [detailed layer table](#_Regular_aperiodic).

##### Header

1. «Regular aperiodic» window header



Element type = regular aperiodic

Layers indices inside aperiodic

The title of the window indicates that you are dealing with a regular aperiodic. The range of indexes of layers inside this structure is indicated in brackets.

##### Parameters

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedParameter setting block

In this window you cannot work directly with the parameters of the layers, but it is possible to impose connections and restrictions on the thicknesses and interfaces of “same” layers in different unit cells of the aperiodic. For each layer, the material is indicated, as well as whether this material is composed of chemical elements – «(composed)» – or taken from a library of ready-made materials – «(tabular)».

«Common “z”» indicates that all layers with the given index will have the same thickness in all unit cells.

«Common “s”» indicates that all layers with the given index will have the same mixing at the interfaces in all unit cells.

If «Common “z”» and «Common “s”» are enabled for all layers, then the structure is periodic.

«Restrict z: {±Δ, p, Q}» indicates that a “soft” restriction will be applied during automatic optimization of thicknesses: if the thickness of any layer differs by more than Δ from the average thickness of layers of this type, then to the value a “penalty” will be added to the minimized function, namely the following value: , where z is the layer thickness, <z> is ​​the average thickness of layers of this type, p is the exponent responsible for the rate of increase of the penalty with increasing deviation, and Q is the weight factor. Thus, it is “unfavorable” for thicknesses to go far beyond the indicated limits ±Δ.

##### Structure type management

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Structure type control block

A regular aperiodic can be turned into a periodic structure or a general aperiodic by selecting the appropriate option.

«Invert order of layers» allows you to quickly change the order of the layers in the unit cell to the opposite.

#### General aperiodic

1. General aperiodic in the structure tree



1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedWindow «General aperiodic»

Structurally, the «General aperiodic» window consists of the following parts: header, parameter restriction block, structure type control block.

##### Header

1. «General aperiodic» window header

Element type = general aperiodic

Layers indices inside aperiodic



The title of the window indicates that you are dealing with general aperiodics. The parentheses indicate the range of layer indices within this structure. In contrast to a periodic structure or regular aperiodics, here all layers are present as separate elements. The structure is "expanded".

##### Parameters

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedParameter setting block

The general aperiodic does not control the parameters of the layers contained in it, but it allows you to massively apply and remove links between the thicknesses / interfaces of the layers and massively turn their fitting on and off. Unlike regular aperiodics, there is no concept of an unit cell; layers can be absolutely arbitrary. Therefore, the various "types" of layers listed in this box are determined solely by the material of the layer. This takes into account the use of tabular data for the finished material «(tabular)» or compositions of individual chemical elements «(composed)».

«Link “z”» indicates that all the thicknesses of all layers with this material will be dependent on the thickness of the top layer. The linking function can be set individually in the parameter table. Likewise, «Fit “s”» links layer interfaces.

«Fit “z”» turns on/off the thickness adjustment for all layers of the corresponding material. «Fit “s”» does the same for interfaces.

##### Structure type management

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generated Structure type control block

A general aperiodic can be turned into a regular or periodic structure by selecting the appropriate option. If, in addition, the aperiodic contains a periodic subsequence of materials, then this subsequence will become an unit cell. Otherwise, the structure cannot be "folded" and the unit cell will be the size of the entire common aperiodic.

«Invert order of layers» allows you to quickly change the order of the layers in the unit cell to the opposite.

### Window access bar

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedAccess to other instruments

Next are the buttons for accessing auxiliary tools that allow you to control the structure parameters in detail, build graphs, make automatic fitting and change various settings. Their features are described partly here, in the subsections of the [**User interface**](#_Пользовательский_интерфейс) chapter, partly in the thematic chapters.

### Independent curves

1. Tabs with curves for calculations without an experimental grid

Next are the controls of so-called "independent" curves. To set and calculate independent curves, you do not need to involve any external data, just specify the type of measurement, instrumental parameters, set the type and range of argument values, and the number of points for calculation.

Each independent curve corresponds to a tab. You can create new, duplicate, delete in the same way as [**Structure tabs**](#_Вкладки_со_структурами). Double clicking on the tab allows you to set the name of the curve. To the right of the «Set up» button, the basic information is written: the type of measurement, ranges / values ​​of angles and wavelengths.

The «Set up» button opens the curve settings window. If this happens in a new tab where the measurement type has not yet been set, then a window will open with a choice of options:

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedScan type selection

After setting the curve type, the corresponding settings window will open.

#### Specular scan

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedReflectometric curve settings

All settings are divided into several groups arranged vertically: «Units», «Argument», «Beam», «Detector», «Footprint and distortion». You can close the window by clicking «Close» or pressing the «Escape» key.

##### Units

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedBlock «Units»

Angular and spectral units are set here. When the units are changed, the displayed parameter values are recalculated. This block is the same for all types of curves.

##### Argument

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedBlock «Argument»

The argument type (beam grazing angle or wavelength), number of points, and range are specified.

##### Beam

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedBlock «Beam»

If the argument is the beam grazing angle, then a fixed wavelength is specified here. If the argument is the wavelength, then a fixed grazing angle is specified here. You can also specify the spectral width of the beam and the angular divergence in the plane of incidence. The FWHM value is set – full width at half maximum.

Additionally, you can specify the polarization of the incident beam: 1 is the s-polarization, -1 is the p-polarization, and intermediate values correspond to their mixture in the appropriate proportion.

Background is the amount of intensity that is added to all points of the calculated curve. It does not affect the calculations and the automatic fitting process. It is intended for the convenience of comparing the calculated and measured curves.

##### Detector

1. Block «Detector» with slit (a) or crystal (b) detector type



(a)



(b)

The type and parameters of the detector are specified here. The parameters are the sample-detector distance, the azimuth size of the detector window («Slit length»). If the detector is slit, then the polar size of the detector is given by the width of the slit. If the detector contains an analyzer crystal, then the peak width and shape. This block is the same for all one-dimensional curves (except GISAS).

##### Footprint and distortion

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedBlock «Footprint and distortion»

This block is the same for all types of curves. Here the geometrical parameters of the beam and the sample are specified. The width in the plane of incidence, profile («Profile smoothing»), the size in the direction perpendicular to the plane of incidence («Lateral width») is set for the beam. In addition to the main bell-shaped form, the profile section may have an additional wide elevation of low intensity («Wings»). The beam profile in the plane of incidence is shown on the graph in a linear or logarithmic scale.

The sample has a size in the direction of the beam, a displacement along the beam («X-position»), a vertical displacement towards the surface («Z-position»), curvature. These parameters are illustrated by the image of the relative beam sample.

#### Detector scan

Blocks [«Units](#_Units)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» are exactly the same as for specular geometry.

##### Argument

1. Block «Argument»



The argument is the polar angle of the detector, for which the number of points and the range are specified.

##### Beam

1. Block «Beam»



Almost all parameters are the same as in [specular geometry](#_Beam). An additional parameter is a fixed beam grazing angle (or specular angle).

#### Rocking scan

Blocks [«Units](#_Units)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» are exactly the same as for specular geometry.

##### Argument

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedBlock «Argument»

When calculating the rocking curve, both the beam grazing angle and the scattering angle change. As an argument, one can choose either the beam grazing angle or the deviation of the sample from the specular position. The argument is the polar angle of the detector, for which the number of points and the range are specified.

##### Beam

1. Block «Beam»



Almost all parameters are the same as in [specular geometry](#_Beam). An additional parameter is the specular position, i.e. the angle of incidence of the incident beam at which the reflected beam arrives at the detector.

#### Offset scan

Blocks [«Units](#_Units)», «[Argument](#_Argument)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» are exactly the same as for specular geometry.

##### Beam

1. Block «Beam»



Almost all parameters are the same as in [specular geometry](#_Beam). An additional parameter is a constant angular shift of the detector from the specular position.

#### GISAS map

Blocks [«Units](#_Units)», «[Detector](#_Detector)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion)» are exactly the same as for specular geometry.

##### Argument

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedBlock «Argument»

Scattering is two-dimensional, so there are two arguments here: the polar and azimuth angles of the detector. Each is given by a number of points and a range of values.

##### Beam

1. Block «Beam»



Almost all parameters are the same as in [specular geometry](#_Beam). Additionally, the beam grazing angle and the azimuthal angular divergence of the beam are indicated.

##### Detector

1. Block «Detector» with spherical (a) or pixel (b) detector type



(b)



(a)

Here the sample-detector distance and, if necessary, the angular or linear size of the pixel and the receiving function are specified.

### Experimental curves

1. List of loaded data

At the very bottom of the main window there is a list of loaded experimental curves with a brief description. Brief information in the line includes: serial number, name (if any), measurement type, angle and wavelength ranges. Lines can also be duplicated by calling the context menu on the text describing the curve. The «Add row» and  buttons respectively add and remove a row. The experimental curve with all its settings can be duplicated by calling the context menu with the right mouse button.

To load data or change measurement parameters, click the «Import» button. As for an independent curve, if this is a new curve for which the measurement type has not yet been set, then a window will open with a choice of options:

1. Graphical user interface, text

   Description automatically generatedScan type selection

After setting the curve type, the corresponding window will open.

#### Specular scan

1. Chart

   Description automatically generatedExperimental reflectometric curve settings

The upper part shows a graph of the loaded curve, taking into account the units of measurement, scaling, argument shifts and function values specified in this window. When the «Fit only data between argument» option is enabled in the «Argument» block, the area excluded from the fit is indicated in purple. In the «Plot options» block, you can switch between linear and logarithmic scale along the vertical axis.

##### Measurement

1. Chart

   Description automatically generatedBlock «Measurement»

In the left part of the block, you can set the name of the curve, this can be useful in further work, especially if there are several curves. In the remaining part, you can specify the data file to be loaded. The path can be written manually or pasted, you can use the file dialog box by clicking the «Browse…». button. Or you can drag and drop the desired file into the settings window with the mouse.

##### Argument

1. Graphical user interface

   Description automatically generated Block «Argument»

The argument type is set: beam grazing angle or wavelength. The next item is the units of measurement. It is here that you should specify in what units the values ​​of the argument should be read. The «Shift» parameter is a value added to all argument values, the shift of the entire curve along the horizontal axis. In turn, «Factor» is the factor by which each value of the argument is multiplied; scaling the curve horizontally.

The «Fit only data between argument» option allows you to set the area excluded from automatic fitting. Enabling «Fit outer area» does not exclude the outer area between the specified arguments, but the inner one. The excluded area is shown in purple on the graph.

##### Value

1. Graphical user interface

   Description automatically generated Block «Value»

The value type is set: reflection or transmission. As with the argument, «Shift» is a constant addition to the curve, and «Factor» is the scaling of the curve along the vertical axis. The «min» and «max» values limit the «Factor» parameter in automatic fitting.

The «Divide on beam intensity» option allows you to normalize the measurement to the probing beam intensity and exposure time. If the beam intensity changed during the measurement, then in the simplest (linear) case this can be taken into account by turning on the «Final» checkbox and indicating, in addition to the initial value, also the final one.

*Attention*: Although the normalization parameter «Factor» can be adjusted automatically, you should not do this without good reasons. This may be acceptable in cases where the measurements have not been normalized to the beam intensity, but the result obtained should be treated with great care.

##### Beam

1. Chart

   Description automatically generatedBlock «Beam»

Almost all parameters are the same as for the [independent curve](#_Beam). Wavelength/grazing angle units are specified here, in the drop-down menu.

##### Detector

1. Graphical user interface, chart

   Description automatically generatedBlock «Detector»

Almost all parameters are the same as for the [independent curve](#_Beam). But since we are dealing with a fixed dataset here, the «Merge points» option has been added. It allows you to multiply the array of points by combining them (binning). Specifies the number of points to merge. The result is immediately reflected in the graph.

##### Footprint and distortion

1. Chart

   Description automatically generatedBlock «Footprint and distortion»

The parameters are exactly the same as for the [independent curve](#_Beam).

##### Bottom panel

1. Bottom panel

The «Close» button closes the window (you can also close the window with the «Escape» key).

«Read data» re-reads data from the file specified in the «File path» field of the «[Measurement](#_Measurement)» block.

«Export data» allows you to save the previously loaded curve to a file. The data is stored in the project file and can be exported even if the source file (specified in the «File path» field) no longer exists.

#### Detector scan

The [«Measurement](#_Measurement)», «[Detector](#_Detector_1)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» blocks and the [bottom panel](#_Нижняя_панель) are exactly the same as for the specular geometry. The «[Value](#_Value)» block differs only in the immutable function type: «Scattering».

##### Argument

1. Block «Argument»



The argument is the polar angle of the detector. The rest of the parameters are the same as for the [specular measurement](#_Argument_1).

##### Beam

1. Block «Beam»



Almost all parameters are the same as in the [specular measurement](#_Argument_1). An additional parameter is a fixed beam grazing angle (or specular angle).

#### Rocking scan

The [«Measurement](#_Measurement)», «[Detector](#_Detector_1)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» blocks and the [bottom panel](#_Нижняя_панель) are exactly the same as for the specular geometry. The «[Value](#_Value)» block differs only in the immutable function type: «Scattering».

##### Argument

1. Application, table

   Description automatically generated with medium confidenceBlock «Argument»

The argument can be the grazing angle of the incident beam or the deviation of the sample from the specular position. The rest of the parameters are the same as for the [specular measurement](#_Argument_1).

##### Beam

1. Block «Beam»



Almost all parameters are the same as in the [specular measurement](#_Argument_1). An additional parameter is the specular position, i.e. the grazing angle of the incident beam at which the reflected beam arrives at the detector.

#### Offset scan

The [«Measurement](#_Measurement)», «[Detector](#_Detector_1)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» blocks and the [bottom panel](#_Нижняя_панель) are exactly the same as for the specular geometry. The «[Value](#_Value)» block differs only in the immutable function type: «Scattering».

##### Argument

1. Block «Argument»



The argument is the grazing angle of the incident beam. Other parameters are the same as in the [specular measurement](#_Argument_1).

##### Beam

1. Block «Beam»



Almost all parameters are the same as in the [specular measurement](#_Argument_1). An additional parameter is the offset of the detector from the specular direction. A positive offset means that the angle from the plane of the sample to the detector is greater than the grazing angle of the beam. If it is equal to zero, then measurements are made in the specular direction, but, unlike the reflectometric curve, here you can get a plot of the amount of scattering in the specular direction.

#### GISAS map

1. Graphical user interface

   Description automatically generatedGISAS measurement settings

The top part shows a color map of the loaded data. When the опции «Fit only data between argument» option is enabled in the «Argument» block, the area excluded from the fit is displayed in a darker color. In the «Plot options» block, you can switch between linear and logarithmic scale along the vertical axis, turn interpolation on and off - these are the display settings. There are also buttons to rotate the image counterclockwise  and clockwise . With their help, you should orient the data relative to the coordinate axes. This is where the data is linked to the coordinate axes for further use in calculations.

The [«Measurement](#_Measurement)», «[Footprint and distortion](#_Footprint_and_distortion_1)» blocks and the [bottom panel](#_Нижняя_панель) are exactly the same as for the specular geometry. The device of the rest is written below.

##### Argument

1. Graphical user interface

   Description automatically generatedBlock «Argument»

Here the units and range of values ​​for each axis are determined. Unlike the case of one-dimensional curves, here the data is a matrix of numbers without information about the coordinates, so the argument here is not read, but set. Specifies the range of azimuth angles and polar angles of the detector. The pixel grid is assumed to be uniform.

The «Fit only data between argument» allows you to set the rectangular area involved in the automatic fit. Enabling «Fit outer area» leaves not the outer area, but the inner one. In the image, the excluded area is shown in a darker color.

##### Value

1. Graphical user interface

   Description automatically generatedBlock «Value»

The scatter value is read from the file and can be modified by adding a shift and scaling. «Shift» is a constant addition to the values, and «Factor» is a scaling. There was a [methodological note](#_Value) concerning the automatic adjustment of the normalization factor.

The «Divide on beam intensity» option allows you to normalize the measurement to the probing beam intensity and exposure time.

##### Beam



1. Блок «Beam»

The parameters are the same as for the [independent curve](#_Beam).

##### Detector

1. Block «Detector» with spherical (a) or pixel (b) detector type



(b)



(a)

Here you can specify the distance from the sample to the detector, the angular or linear size of the pixel, and the receiving function of the pixel. The «Merge» option allows you to reduce the image resolution by merging pixels (binning). Specifies the number of points to merge along each coordinate. The result is immediately reflected in the figure.

## Structure table

1. Structure table

For convenient work with the structure, all its parameters are summarized in one table, and this table is the main way to change these parameters. In addition to the current value, for each parameter, the upper and lower limits for automatic fitting, participation or non-participation of the parameter in fitting, as well as the relationship with other parameters of this or another structure (if there are several structure tabs in one project) can be specified.

### Menu

The «[File](#_File)» and «[Calculate](#_Calculate)» menus are exactly the same as in the main window. «Length units» allows you to change the main units of length, including the thickness of layers and interfaces and particle sizes. «Other units» allows you to change other units used in the table. In the «Precision» menu, you can change the number of decimals used to represent parameter values.

### Table content

#### Header

The top three lines show the color designations used, as well as the tools for setting the restrictions on the adjusted parameters as a percentage of the current value. The latter can be convenient to set the range of values for several layers at once, if, for example, it is known that the error in the thickness of the layers can be ±30% of the nominal value. By pressing the «Reset» button, the parameters in the corresponding column for which fitting is enabled will update the limits.

1. Table header



Legend

Setting the limits for variables:

density

thickness of

layer/period

transitional region

#### Modifiers

The underlying block of the table is also heterogeneous. On the left are the modifier checkboxes.

1. Modifiers and the choice of the imperfections model of the structure

The «Mouse wheel» modifier determines the ability to change values ​​in numeric fields by scrolling the mouse wheel. You can always change values ​​by entering numbers or using the keyboard arrows ↑ and ↓.

If the «Recalculate» modifier is enabled, then any change in the current parameter values ​​immediately recalculates the curves and displays a new result.

The «Change dependent» modifier blocks the possibility of manually changing dependent parameters, instead they are immediately recalculated as a function of the master parameter. Dependent parameters are always recalculated during automatic fitting, regardless of this modifier.

The «Set model» button opens the window for setting the structure imperfection model.

#### Set imperfections model

In «Set imperfections model» window, it is indicated which “imperfections” should be included in the structure model: the presence of interlayer transition regions, the presence of thickness drift in a periodic multilayer, the roughness model and intralayer inhomogeneities (particles).

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generated Structure imperfections models

Enabling and disabling blocks and their parameters affects which parameters will be shown in the main table.

##### Transitional layer

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedBlock «Use transitional layer»

The block determines which transition layer profile functions to display in the table. If the function is disabled, then it is hidden from the table and is not used in calculations. If enabled, the feature is visible in the table, but is disabled by default for use in a calculation. It can be finally enabled and configured from the table.

##### Drifts

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedBlock «Use drifts»

The block determines which drift models of layer thicknesses and transition regions to show in the table: linear drift, random deviation, harmonic modulation. Drift can only be shown for layers that are part of a periodic multilayer. If the model is disabled, then it is hidden from the table and is not used in calculations. If enabled, the feature is visible in the table, but is disabled by default for use in a calculation. It can be finally enabled and configured from the table.

##### Roughness

1. Block «Use roughness»

The block determines which roughness models are used in the calculations and which parameters can be changed in the table.

«Approximation» determines the kind of approximation used in the scattering calculation. For «PT» (Perturbation Theory), the largest selection of options is available.

«Vertical correlation» determines the presence or absence of interlayer roughness correlation.

* «Full» – the roughness is fully replicated from layer to layer, the scattering is completely coherent. Roughness parameters are the same for all layers.
* «Partial» – the roughness is not fully inherited, depending on the parameters of the «Inheritance» column.
* «Zero» – roughness is not inherited, scattering on different interfaces is incoherent. Interfaces can have different roughness parameters.

«Model» determines the type of lateral correlation function.

* «[ABC](#_Основная_модель)» – ABC-model or K-correlation function.
* «[Stretched exp](#_Основная_модель)» – another fractal roughness model.
* «External PSD 1D» – the ability to load an arbitrary one-dimensional PSD function from a file. Beyond the uploaded data, the PSD continues as a model.
* «External PSD 2D» – the ability to load an arbitrary two-dimensional isotropic PSD function from a file. Beyond the uploaded data, the PSD continues as a model.
* «[Add Gauss peak](#_Гауссов_пик)» – in addition to the main model, add a Gaussian peak to the PSD function in the vicinity of the specified spatial frequency.

«Common PSD» – make the roughness and replication model the same for all layers or leave the ability to customize each layer.

«Inheritance» determines the type of inheritance of roughness from the underlying interface to the overlying interface with the type of vertical correlation «Partial».

* «[Replication factor](#_Replication_factor)» – the roughness PSD is the same for all interfaces, but some part is inherited coherently and some – incoherently.
* «[Linear growth, alpha](#_Linear_growth,_alpha)» – a linear growth model with a single power law is used.
* «[Linear growth, n=1-4](#_Linear_growth,_n=1-4)» – a linear growth model with the sum of several power laws is used.

##### Particles

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedBlock «Use particles»

The block determines which particle models and their correlations are used in the calculations and which parameters can be changed in the table.

«Vertical correlation» determines the presence or absence of interlayer particle correlation. Material, particle geometry, vertical displacement can be different for each layer.

* «Full» – particles in different layers are located strictly one above the other, the scattering is completely coherent. The parameters of the lateral distribution are common to all layers.
* «Partial» – particles in different layers are located not strictly one above the other, but with some random shift, the same for the whole layer. The parameters of the lateral distribution, except for the individual displacement, are common to all layers.
* «Zero» – particles in different layers are not connected with each other, scattering between layers is incoherent. The parameters of the lateral distribution are individual for each layer.

«Lateral order» determines the lateral correlation of particles in the layer. In the table, you can set the lateral order of particles individually for each layer with a vertical correlation of «Zero».

* «Disorder» – particles in the layer are located randomly, there is no correlation.
* «Radial paracrystal» – particles in the layer are located in a paracrystal averaged over orientations.

«Specify material» – sets the material of the particle or use the material of the layer.

«Common parameters for all layers» – makes the parameters of particles and their distribution the same for all layers or leave the possibility of setting each layer. The particle material density can be set for each layer anyway.

«Lattice type» sets the basic geometry (before statistical and directional averaging) of the lateral arrangement of particles. It also affects the density of particles in the layer. In the table, you can set the grating type individually for each layer with a vertical correlation of «Zero».

* «Hexagonal» – the particles in the layer are arranged in a paracrystal with a hexagonal lattice.
* «Square» – particles in the layer are arranged in a paracrystal with a square lattice.

«Particle shape» sets the particle shape. When you change the shape of particles here, the result is applied to all layers. In the table, you can set the shape of the particles individually for each layer. Particles are made up of a homogeneous substance.

* «Spheres» – particles – spheres.
* «Spheroids» – particles – spheroids, ie. ellipsoids of revolution around a vertical axis.
* «Cylinder» – particles – vertical cylinders with a round base.

#### Parameter change step

In the right part of the block there are fields for setting the step for changing parameters when they are changed using the keyboard arrows or the mouse wheel. The step is set in the same units as the parameter values themselves. Some parameters of roughness and intralayer particles do not have a fixed step, in which case the step is adaptive: when scrolling, changes occur in the second sign.

1. Parameter change step for the underlying part of the table

*Note*: While holding down the «Ctrl» key, the parameters change in x10 increments.

#### Parameters of the layered structure

Next comes the layered structure with its own parameters. To set the material of the layer, you need to write in the text field the appropriate name of the file with the refractive index or select the file by clicking «Browse». If the material is composed of individual chemical elements, then you should select the necessary ones in the drop-down menu and set the stoichiometry.

1.  Materials of layers

*Note:* To find the element faster, you can press the letter on the keyboard that begins the name of the chem. element. Elements can also be scrolled with the mouse wheel or the ↑ and ↓ arrows

Most of the table is occupied by vertical boxes corresponding to specific parameters. Parameters are mainly indicated by symbols, next to them the units of measurement are indicated in square brackets. For most parameters, you can call up the context menu by right-clicking on the light blue header. It is also a way to see the full name of a given parameter. The figure below shows the purpose of the fields in the block.

1. Field block for one parameter



fitting on/off

min

max

context menu

current value

*Attention:* For stoichiometry parameters «ζ» and periodic drift «sine drift» the context menu is called up on the «fit» field. The «N» (number of periods) parameter does not have a context menu.

Optional parameters that have a checkbox in the header can be turned on and off with it:

1. Table

   Description automatically generatedLayer thickness harmonic modulation parameters: A, υ, φ

An exception is the thickness of the interlayer transition region. It can be set by a single parameter «s» or thicknesses of individual profile functions. In the second case, the effective thickness is calculated as the mean square of the individual values, taking into account the weight. You can switch between these views with the flag marked in the figure:

1. Switch between a single transition region thickness and individual for each profile



The particles in the structure can be turned on and off individually for each layer. You can also customize the particle shape, lateral correlation and geometry model.

1. Table

   Description automatically generatedManaging particles in a layer

Separately, it is worth mentioning the possibility of [uploading from file](#_Импорт_PSD_шероховатости) the external PSD in addition to the model one. Instead of the light blue "header" of the parameter, here is the download button. If the external PSD is not loaded, then the button is white, if it is loaded, then it is green.

1. Table

   Description automatically generated with medium confidenceExternal roughness PSD

The parameter to be changed is the "roughness factor": «rf 1D» or «rf 2D», which is the multiplier for the RMS roughness. Accordingly, the PSD depends on rf 1D»/«rf 2D» quadratically. The resulting roughness in the frequency range of the loaded PSD is displayed in the «σe» field.

##### Parameter list

Мultilayer:

number of periods in the multilayer

period thickness

the ratio of the thickness of the upper layer to the period

Layer:

 chemical element and its stoichiometric index

 material (file name)

 absolute density of material

relative density of material

 layer thickness

 r.m.s. diffuse interface thickness

Diffuse interface profile features:

error function *erf* and weighting factor

linear profile *lin* and weighting factor

exponential profile *exp* and weighting factor

hyperbolic tangent *tanh* and weighting factor

sinusoidal profile *sin* and weighting factor

step profile *step* and weighting factor

r.m.s. profile thickness *erf*

r.m.s. profile thickness *lin*

r.m.s. profile thickness *exp*

r.m.s. profile thickness tanh *tanh*

r.m.s. profile thickness *sin*

r.m.s. thickness profile *step*

Layer thickness drift:

linear thickness drift

random fluctuations in thickness

sinusoidal thickness modulation

Diffuse interface thickness drift:

linear drift of interface thickness

random fluctuations in interface thickness

sinusoidal modulation of interface thickness

Roughness:

 root mean square height

correlation radius

fractal parameter

 r.m.s. roughness peak height

central spatial frequency of the roughness peak

width of roughness peak in spatial frequency

correlation depth at the base frequency

base frequency for correlation depth

exponent of the frequency exponent in the correlation factor PSD

particle volume in the linear growth model

coefficient at the first power of frequency in the linear growth model

coefficient at the second power of frequency in the linear growth model

coefficient at the third power of frequency in the linear growth model

coefficient at the fourth power of frequency in the linear growth model

"roughness factor", coefficient when one-dimensional outer PSD is loaded

"roughness factor", coefficient when 2D outer PSD is loaded

Particles:

absolute density of particle material

relative density of particle material

particle lateral radius

particle height

average distance between particles

particle spacing variation

domain size – size of particle correlation region

random shift of particles in a layer relative to an adjacent layer

vertical shift of all particles relative to the center of the layer

random scattering of particles in a layer vertically

#### Coupling editor

If you click on the only item of the parameter's context menu, the «Coupling editor» window will open, which is intended for setting relationships between parameters, as well as for estimating the confidence interval of parameter values based on the residual.

1.  Window «Coupling editor»

Parameters can be linked to each other by a functional dependency. In this case, in the process of fitting, the values ​​of the dependent parameters are calculated in accordance with the given function. The hierarchy of related parameters is displayed in color according to the legend: the red parameter is dependent, while no one depends on it; the green parameter is independent, but other parameters depend on it; the yellow parameter is dependent, but other parameters also depend on it. Each parameter can have no more than one "master" and as many "subordinates" as desired. To assign a new parameter as "master" or "slave" in relation to the given parameter for which this window is open, you need to put the cursor in the corresponding field in the «Master» or «Slaves» block and right-click in the table (as a call to context menu) by the target parameter.

The figure above shows an example where the thickness of the Al layer depends on the thickness of the W layer, and determines the thicknesses of the Be and Mo layers. The function written in the editable field can be not only linear. The ExprTk library used in **Multifitting** (<https://www.partow.net/programming/exprtk/>) can parse and recognize a wide range of mathematical expressions. For example, following can be used:

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

In the notation of expressions, the master parameter is denoted by the letter "x", and the dependent parameter is the function f(x).

*Note*: You can link parameters not only within the same structure, but also between structures of the same project located in different tabs.

*Attention*: Consider the dimension and current units indicated in the table! Both the value of the function and the argument "x" are calculated in *angstroms* for all parameters that have the length units, or *Ån* for the units of [length]n. The internal value of the remaining parameters corresponds to their value displayed in the table.

The dependency mechanism can be useful, for example, for linking the stoichiometry of a structure and its density, or for linking the parameters of several initially identical structures, with which various technological operations were then carried out.

**Multifitting** does not limit you in writing expressions, but you yourself must monitor the correctness and physical relevance of the resulting values, for example, avoiding negative thicknesses, division by zero, calculating the root of a negative number, etc. Otherwise, you will get an incorrect result or a program crash.

Also in this window, you can configure data acquisition for further calculation of the confidence interval for a specific parameter. The principle here is as follows: for each fixed value of a parameter from a given grid, all other fitting parameters of the structure are adjusted. As a result, a set of points "parameter value - the best residual value found" is obtained, saved in the file «confidence.txt». If we build a graph from these points, then we will see the dynamics of the increase in the value of the discrepancy when the value of the studied parameter deviates from the optimal one.

1. Grid setting for confidence interval

#### Elements of the layered structure

The left part of the table shows the elements of the structure with their degree of nesting. All elements, except for the substrate and layers as part of a regular aperiodic, can be "switched on and off". A disabled element is not taken into account in the calculations, as if it simply does not exist. For a periodic multilayer, you can call the context menu if it does not contain layers with a dependent thickness (red or yellow).

1. Structure elements that can be disabled

#### Redistribution of layer thicknesses within a period

The only item of the context menu allows you to open a window where you can redistribute the thickness between the layers of the elementary cell without changing the thickness of the period.

1. Redistribution of thickness between layers of periodic structure

In the case of a two-component multilayer, this can also be done in the main table by changing the parameter γ. Here you can redistribute the thickness for any number of layers in the period.

### Regular aperiodic

The creation of a regular aperiodic is described in the section [**Defining a layered structure**](#_Регулярная_апериодика). Defining a Layered Structure. A regular aperiodic can contain an integer number of elementary cells, as in a periodic structure. Layers of the same type can have different thicknesses and different transition regions. In this regard, the layers have new parameters and conditions: the ability to set all layers of a given type to the same thickness («common z» checkbox) and the same transition area («common s» checkbox). Also, when optimizing the aperiodic stack, you can impose a “soft” limit on the spread of layer thicknesses. If the thickness of some layer differs from the average value of the thickness of this type of layers in the structure by more than ∆, then the quantity величина is added to the discrepancy. Thus, the magnitude of the spread and the need to fit into this value can be varied over a wide range, depending on the practical restrictions on the synthesis of a multilayer mirror. And of course, the absolute values ​​of the thicknesses are also limited by the minimum and maximum specified for the layer in the main table.

1. Special parameters of regular aperiodic

For detailed work with a large number of individual layers of aperiodics, there is a special table. To open it, call the context menu and click the only item:

1. Context menu of regular aperiodic

A table will open in which you can see and change the thicknesses and interfaces of the layers. Density can only be changed for all layers of a given type. Interface fitting can only be collective, for all layers of this type, and thickness fitting can be individual or collective. You can enable the «Fit z» checkbox for all thicknesses by holding down the «Shift» key or from the main table. The limits of variation are set in the main table. Depending on the parameters «common z» and «common s», the corresponding layers will have the color according to the legend. Changes between the main table and the table for aperiodic are synchronized.

1. Table of layers of regular aperiodic

## Profile plot

1. Chart

   Description automatically generatedReal part profile of permittivity

In this window, you can see the profile of the real or imaginary part of the permittivity at a given wavelength, the distribution of a particular material, or the concentration of atoms of different kinds. The profile is based on: materials and densities of layers and substrates, layer thicknesses, thickness and shape of interlayer transition regions. Roughness and particles do not affect the profile. The displayed profile is automatically changed when the mentioned parameters in the «Structure table» are changed, regardless of the «Recalculate» modifier. You can shift the visible area by dragging the pointer, and the display scale can be changed using the mouse wheel. If the pointer is in the inner area of ​​the graph, then the scaling on both axes changes synchronously. If the pointer is located near the left axis or the lower axis, then only its scale changes.

On the left side there is a panel with chart display options. In the first block, the displayed value is selected. If you select «Materials» or «Elements», different components will be shown in different colors according to the legend. A single click on one of the profiles will make it fatter, and a double click will remove all materials from the chart, except for this one. You can return them by double-clicking again, or by changing any parameter of the structure, or by recalculating it.

The permittivity depends on the wavelength/energy of the photon. You can change it, as well as the units of measurement, in the corresponding field.

1. Chart, histogram

   Description automatically generatedDistribution of materials in the structure

If you select «Materials», the relative density of each material will be plotted along the vertical axis. It depends on the density given in the table and on the smearing of the material over adjacent layers. When selecting «Elements», the vertical axis will be the absolute concentration of atoms per 1 cm3. It depends not only on the parameters of the structure, but also on the internal properties of the element.

The second block allows you to show additional information on the chart. «Show sharp profile» shows what the profile would look like if there was no mixing of materials at the interfaces. «Show discretization» shows the splitting of the profile into thin homogeneous sublayers, if discretization is enabled for the structure and its step is specified. The sampling setting is located in the «[Calculation settings](#_Calculation_settings)» window. «Show cursor position» shows near the cursor its coordinates.

The third block contains scaling settings. The options «Rescale X» and «Rescale Y» indicate automatic scaling along the corresponding axes when recalculating curves or when changing the structure. If there are many layers in the structure, then it makes sense to turn off horizontal scaling and manually change the scale to see the details of the profile. The type of scaling, linear or logarithmic, can be chosen for obviously non-negative values, that is, all but the real part of the polarizability.

In the last block, you can change the units of depth plotted along the horizontal axis.

All display settings, including the current coordinates of the axes (if there is no autoscaling) are saved for the structure. When closing and opening the «Profile plot» window, they are played back automatically. For this to happen when you reopen the project, you need to save the project.

## 1D graphs

1.  Window «1D graphs»: calculation on experimental grid and independent calculation

The «1D graphs» window is designed to visualize the calculation results. Here you can see one-dimensional curves: reflection, transmission, diffuse scattering. The number of curves to display is determined by how many of them are set (see the figure with the [structure of the main window](#_Главное_окно)) and how many are “enabled” in the «[Calculation settings](#_Calculation_settings)» window. The window contains two sections. The upper one, «Measured», is for loaded experimental data and calculation on the same experimental grid. The lower one, «Independent», is for calculations on a uniform grid, which is set directly in **Multifitting**.

If one of the sections is empty, it is hidden. Between the sections there is an invisible horizontal separator, which allows you to manually redistribute the height between the sections in the window using the mouse.

Each section can have multiple curves. By default, they are arranged in a line, but if there are more than two curves, then this is very inconvenient, because requires huge screen width. You can arrange charts in several rows by specifying the appropriate number in the window settings called through the context menu. The settings are discussed below.

1. Arranging multiple curves in a section

There are also separators between the graphs, with which you can distribute the window space along individual curves. Horizontal separators adjust the height of the rows, while vertical separators control the space within the row.

### Settings

The context menu can be called in the area outside the graphs (including the title and labels of the axes), i.e. outside the outer frame of the section or in the free space of the control panel of each graph. There is only one item in the menu - the «Settings» window.

1. Graphical user interface, application

   Description automatically generatedContext menu «1D graphs»

The upper block of settings allows you to arrange charts in several lines, separately for the «Measured» and «Independent» sections.

1. «1D graphs» settings

A further list of options concerns the display of controls in a row below each graph. Permanently displayed options below each chart are:

«Scale Y» allows you to select a linear or logarithmic scale for the vertical axis.

«Rescale» enables rescaling the plot on both axes with each curve calculation to show the full curves.

«Show plot symbol size» shows the «Scatter» option to change the size of the experimental curve symbols. The experimental curve must first be selected by clicking on it with the pointer. It has no effect on the calculated curve.

«Show plot line thickness» shows the «Line» option to change the line thickness. The desired curve must first be selected by clicking on it with the pointer. Applies to any curve.

«Show X scale» shows the «Scale X» option to select linear or logarithmic scale on the horizontal axis.

«Show max calc value» writes the maximum value and its position on the calculated curve. In the case of a spectral reflection curve, the spectral width of the peak is also indicated.

«Show Y range» shows the «Log range» option, in which you can specify the number of magnitude order displayed on the vertical axis during automatic rescaling. Those. this parameter is in addition to the «Rescale» option and only works with the «Scale Y» logarithmic scale.

«Show cursor position» shows the coordinates of the cursor on the chart.

«Show plot title» shows the title and basic information about the plot.

### Curve color setting

By default, the experimental curves are red, the calculated curves are blue. Double clicking on a curve allows you to change its color. Changes are saved with the project.

1. Change the color of the curve by double clicking

### Additional curves

Sometimes it is convenient to compare the calculated curve not only with the only loaded experimental curve, but also with several others. This can be done by dragging the text file with the additional curve onto the plot area. Additional curves will be displayed along with the main ones. You can also customize the line color and thickness for them. The argument will be read in the same units that are specified on the axes at the time the file is dragged.

1. Additional curves on the graph

These additional curves are not saved with the project and disappear when the project is reopened. You can remove them by reopening the project, or by calling the context menu in the graph area and clicking «Remove additional curves».

## 2D graphs

1. Graphical user interface, chart

   Description automatically generatedGISAS: measurement and calculation

There are two types of data in **Multifitting**, calculated from two coordinates at once. These are GISAS, depending on the polar and azimuth angles, and the field intensity distribution, depending on the depth coordinate and the angle of incidence/wavelength of the probing radiation. As in the one-dimensional case, the window is divided into «Measured» and «Independent sections, and only GISAS can be in the experimental section. The number of graphs is determined by how many of them are set in the main window and how many are “enabled” in the «[Calculation settings](#_Calculation_settings)» window. From a practical point of view, it makes sense to simultaneously include 1-2 charts, no more. The redistribution of space between graphs is done in the same way as in the «1D graphs» window.

### Settings

Similarly, the context menu can be called in the area outside the plots, i.e. outside the outer frame of the section or in the free space of the control panel of each chart. There is only one item in the menu - the «Settings» window.

1. Context menu «2D graphs»

The upper block of settings allows you to arrange charts in several lines, separately for the «Measured» and «Independent» sections. There are two options in the bottom block:

«Show value near cursor» shows the value near the cursor.

«Show plot title» shows the title and basic information about the plot.

1. «2D graphs» settings

All other controls are located on the panel below each plot.

The graphs themselves are color maps with a scale of displayed values and additional blocks on which you can see the current coordinates and values, as well as one-dimensional section plots.

The sections displayed in the left and bottom blocks are shown for the current cursor position, as well as for a fixed point, which can be selected with a single left mouse button click. You can clear a fixed section by right-clicking anywhere on the map. If there is an experimental and calculated map, the experimental profile is red, and the calculated profile is blue.

1. Field intensity in the structure

The controls should be considered in more detail. Some of them are completely similar to those for one-dimensional graphs:

«Scale» allows you to select a linear or logarithmic scale for the color scale.

«Rescale» enables chart rescaling on all axes with each calculation.

«Range to show, orders» allows you to specify the number of orders displayed on the value axis during automatic rescaling. This parameter is in addition to the «Rescale» option and only works with the «Scale» logarithmic scale.

Other options are specific to 2D maps:

«Interpolate» enables 2D interpolation for a smoother picture. Disabled option allows to estimate the sufficiency of points density to describe intensity gradients.

Switch «Measured» – «Calculated» allows you to show the corresponding map. This option is only present in the «Measured» section.

«Orientation» swaps the axes and allows you to rotate the map to the appropriate orientation, horizontal or vertical.

«Left panel» and «Bottom panel» open the left and bottom blocks, respectively, where sections of the map are shown. The left box shows only the vertical section, while the bottom box allows you to choose between the «Horizontal» and «Vertical» tabs. If both panels are open, then a block with information about the coordinates, cell number and value at the current cursor position also appears in the lower left corner.

### Setting the color scheme

You can shift the visible area by dragging it with the pointer, and you can scale the axes using the mouse wheel. If the pointer is in the inner area of the graph, then the scaling on both axes changes synchronously. If the pointer is located near the left axis or the lower axis, then only its scale changes. To adjust the value axis, you need to move the pointer to the color scale.

1. Working with the color scale



Drag color scale up or down to move range of displayed values

Use the mouse wheel for zooming the range of displayed values

Double-clicking on the scale will allow you to change the color scheme

To change the color scheme, double-click on the right side of the color scale.

1. Change color scheme

## Roughness spectrum

1. Graphical user interface, chart

   Description automatically generatedRoughness PSD on interfaces

Like the «Profile plot», the «Roughness spectrum» window is designed to visualize structural parameters, in this case roughness. Here you can see the PSD function of the roughness in the selected model, given by several parameters in the structure table, and the effective roughness, i.e. integral of PSD over the specified spatial frequency range.

The PSD is automatically resized when changing the roughness parameters in the «Structure table» regardless of the «Recalculate» modifier. You can shift the visible area by dragging it with the pointer, and the display scale can be changed using the mouse wheel. If the pointer is in the inner area of ​​the graph, then the scaling on both axes changes synchronously. If the pointer is located near the left axis or the lower axis, then only its scale changes.

On the left side is a panel with display options. In the first block, the displayed function is selected - one-dimensional or two-dimensional PSD.

The second block allows you to select the interfaces to display. If the PSD is the same throughout the depth of the structure, then interface selection is not available. In other cases, you can see up to three PSDs at the same time: substrates, surfaces, and any intermediate boundary. Interfaces are numbered starting from the substrate.

The third block contains scaling settings. The options «Rescale X» and «Rescale Y» indicate automatic scaling along the corresponding axes when recalculating curves or when changing the structure. The axes have only a logarithmic scale. For for the vertical axis, you can specify the dynamic range – «PSD range», and for the horizontal axis – the minimum and maximum value of the spatial frequency υ.

In the last block, you can specify the units of the argument and separately the units of PSD1D and PSD2D. The «Show cursor position» option shows the numerical coordinates of the cursor on the chart. The units of effective roughness correspond to the units of length in the «Structure table» (angstroms or nanometers).

All these settings are saved for the structure. When you close and open the «Roughness spectrum» window, they are played automatically. For this to happen when you reopen **Multifitting**, you need to save the project.

## Particles spectrum

1. Interference function of particles

The «Particles spectrum» window performs the same role as the «Roughness spectrum», but for the distribution of particles in layers. The analogue of PSD here is the interference function of particles, which is specified by the parameters in the structure table. The interference function shows the ordering of the particles; in the absence of an order, it is a constant and is not shown.

The interference function is automatically changed when changing the particle distribution parameters in the «Structure table» regardless of the «Recalculate» modifier. You can shift the visible area by dragging it with the pointer, and the display scale can be changed using the mouse wheel. If the pointer is in the inner area of the graph, then the scaling on both axes changes synchronously. If the pointer is located near the left axis or the lower axis, then only its scale changes.

On the left side is a panel with display options. The first block allows you to select layers to display. If the distribution of particles is the same in all layers of the structure, then the layer selection is not available. In other cases, you can see up to two graphs at the same time.

The second block contains scaling settings. The options «Rescale X» and «Rescale Y» indicate automatic scaling along the corresponding axes when recalculating curves or when changing the structure. Both axes can be scaled linearly or logarithmically. For the vertical axis, you can specify the dynamic range «Y range», and for the horizontal axis – the minimum and maximum value of the spatial frequency.

In the last block, you can specify the units of the argument and the value. The «Show cursor position» option shows the numerical coordinates of the cursor on the chart.

All these settings are saved for the structure. When closing and opening the «Particles spectrum» window, they are played automatically. For this to happen when you reopen **Multifitting**, you need to save the project.

## Calculation settings

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedWindow «Calculation settings»

In the main window of the program, many curves can be created, one way or another related to the structure, but not all of them are needed at the same time. To “turn on” and “off” individual curves, as well as to select curves to participate in the fitting and their individual parameters, **Multifitting** has a special window – «Calculation settings».

The number of curves to display is determined by how many of them are set in the main window. As in the «1D graphs» and «2D graphs» windows, there are «Measured» and «Independent» sections. «Measured» is for loaded experimental data and the lower one, «Independent» is for calculations on a uniform grid, set directly in **Multifitting**. By clicking on the section heading, you can turn it on and off in its entirety. The corresponding sections will immediately turn on or off in the «1D graphs» and «2D graphs» windows. In the same way, you can enable and disable curves individually.

### Structure model parameters

In the upper part of the window there are two blocks related to the computational model of the structure, and not to specific curves: «Profile discretization» and «Roughness».

1. Additional model parameters for calculations

In the «Profile discretization» block, the partitioning of the permittivity profile into thin homogeneous layers is set to calculate the field in the structure by the method of recurrence relations. You can turn this mode on and off by clicking on the block header. The sampling step can be changed by entering a value from the keyboard or by scrolling with the mouse wheel. The actual discretization step is individual for each layer and is made in such a way that an integer number of “sublayers” fit in this layer, but not exceeding a given value. You can observe the actual discretization of the profile in the «[Profile plot](#_Profile_plot)» window with the «Show discretization» checkbox on.

In the «Roughness» block, two parameters are set. «Max spatial frequency» is an upper limit on the spatial frequency of roughness. It should be set from general physical considerations or from external data on the high-frequency part of the roughness spectrum. This constraint is needed so that for models with a slowly falling PSD to the high-frequency region, the integral over frequencies converges. In calculations, it will be assumed that . «Num terms for DWBA/SA/CSA» is the number of terms in the power series of the correlation function, which is taken into account when using the appropriate approximation. The approximation itself is selected in the «Structure table», the «[Set imperfections model](#_Set_imperfections_model)» window.

### Windows settings

The location of the blocks within each section can also be customized. To do this, in any free area of the window, you need to right-click the context menu and select the only item «Settings». In the window that opens, specify the number of lines in the «Measured» и «Independent» sections.

1. «Calculation settings» window settings

### Specular curve with experimental grid

Now let’s see what parameters should be set for each curve. In the case of reflection or transmission of radiation, this is:

1. Parameters for calculating the experimental reflection curve

«Fit» determines whether the curve participates in automatic fitting. Non-participation in automatic fitting does not mean non-participation in one-time calculations! Even if the checkbox is unchecked, the calculated curve is updated with manual changes in the structure parameters and recalculations.

«Weight» is the factor by which the residual value for this particular curve is multiplied. It needs to be changed to increase or decrease the relative weight of this curve in the total residual in order for this particular curve to fit better, even to the detriment of other curves. The current residual values ​​can be seen on the command line when manually recalculating («Ctrl+Shift+C»).

«Divide by N» – the residual of this curve is divided by the number of points in it. It is used so that the residuals of the curves are determined primarily by the actual mismatch between the measurement and calculation, and not by the different number of points in them.

«Mesh density factor» – an option that allows you to reduce the moiré effect on the calculated curve. It can arise if the frequency of interference oscillations is significantly higher than the density of points on the experimental grid, but is not a multiple of it. Then, “slow” oscillations are observed on the calculated curve, which significantly distort the real character of the curve.

To eliminate the effect, the number and density of points for calculation are increased by the specified number of times, the curve is calculated, the instrumental function is applied, and only after that the result is projected onto the original grid. The «Shift» parameter, which can be changed from 0 to 1, allows you to put additional points between the initial points of the grid not equidistantly, but with a shift by the corresponding fraction of a step. The figure below schematically shows the arrangement of points of the densified mesh with «Mesh density factor» = 3 and «Shift» >0.

1. Method for arranging additional points in a densified grid

i-1

i

i+1

∆0

∆1

∆2

∆1=

∆2=

i-1

i

i+1

arg points

«Adjust scale factor» – includes the factor «[Factor](#_Value)» in the list of fitting parameters when the curve is loaded. Variation limits are set in the import/instrument settings window for each curve. Can be used in cases where there is no absolute calibration of the measured data.

«Maximize integral» – changes the purpose of the automatic fitting from the best match between the loaded and calculated curve to maximizing the integral of the loaded curve with a given function from the calculated curve. This is an option for reflection/transmission only. Used to find the structure with the maximum energy efficiency (including for a multimirror layout) for a given source spectrum.

«Function» и «Power» set the type of user-defined function of the residual, which in general is arranged as follows: . Accordingly, the function is given as a mathematical expression of the argument R (although we are talking not only about reflection, but also about transmission and scattering). The ExprTk library (<https://www.partow.net/programming/exprtk/>) is used to interpret the formula. In particular, one can use:

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

«Use χ2» switches between the residual described in the previous paragraph and the residual of the form ,where N is the number of points, p is the number of fitting parameters, and *beam\_counts\_per\_s* is the intensity of the probing beam, which affects the noise level and, accordingly, the reliability of the final signal.

### Independent specular curve

For an "independent" specular scan, the settings are different. Here you can select the type of quantity to be calculated: reflection R, transmission T and absorption A, which is calculated as A = 1-R-T. You can also see the field functions: the field intensity distribution in the F structure and the absorption distribution in the J structure, which is simply the product of the intensity and the imaginary part of the permittivity J=F\*Im(ε).

1. Independent specular scan settings

Selecting a field function opens additional options.

«Z-spacing» is step along the depth of the structure, between the points at which the field is calculated.

«Calculation depth into ambient» calculates the margin over the structure up to the given height.

«Calculation depth from surface» – the depth at which the field is calculated from the surface.

«Calculation depth into substrate» – calculates the field over the entire depth of the layered structure plus the specified depth into the substrate.

«Show surface» shows the position of the surface with a line on a two-dimensional graph.

«Show substrate» shows the position of the substrate with a line on a two-dimensional graph.

### Scattering

Scattering is described by the same parameters as for [specular curve](#_Specular_curve_with), as well as additional ones described below.

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generatedParameters for calculating the scattering curve over the experimental grid

«Instrumental smoothing» includes taking into account the finite angular and spectral width of the beam and the finite resolution of the detector.

«Integrate PSD in detector» is an approximation that makes it possible in some cases to avoid the obviously non-physical amount of scattering in the specular direction in a situation where the PSD has a very sharp peak at zero spatial frequency. Multiplying the PSD value by the width of the angular size of the detector is replaced by the integral of the PSD over the spatial frequencies, resulting in scattering within the detector.

«Add specular peak» shows on the calculated curve not only scattering, but also a specularly reflected spot, the size and shape of which are determined by the size and shape of the beam, the distance from the sample to the detector, the angular divergence, and the size of the detector.

## General settings

The «General settings» window contains settings that are common not only for the open project, but for Multifitting as a whole. They are applied immediately and do not change when you close one project and open another. Settings are grouped into several thematic tabs.

### Input/Output

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Tab «Input/Output»

Here are the settings related to loading and saving projects, as well as the output of structural data and the results of calculating the objective functions: reflection, transmission, scattering.

The first block indicates which calculation results will be output to the file during each manual recomputation, i.e. pressing «Ctrl+Shift+C»: 1D curves, 2D curves and PSD found directly from intensity. The latter only works for 1D scatter curves and assuming that the PSD is the same for all interfaces.

In the second block, the argument units and PSD values are selected, which are used when exporting or as default units when importing an external PSD from a file in the structural table.

In the third block, the working directory for input and output is configured. When quickly saving («Ctrl + S») a new project, i.e. project that has not been previously loaded, a file with a name like «save\_v.X.Y.Z.fit», where X.Y.Z is the version number of **Multifitting**, is saved to this directory. The output of the program to text files is saved there as well. Also, the working directory is the starting directory in the dialog box when you press «Ctrl + Shift + O».

«Save/output to Multifitting directory» sets the working directory to the location of the **Multifitting** executable.

«Save/output to chosen directory» enables selecting an any directory as a working directory by writing the address manually or by selecting the «Set up» button.

«Save/output to last .fit file directory» working directory is the directory from which the project file was last loaded last time.

«Always open last file» is an option that allows immediately after starting **Multifitting**by quick opening («Ctrl+O») to load the last loaded file, regardless of the selected working directory. If the option is disabled, then pressing «Ctrl+O» immediately after launch will try to open the «save\_v.X.Y.Z.fit» file from the working directory. If there is none, **Multifitting** will notify about it and nothing will happen.

### Calculation

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generatedTab «Calculation»

Here are the settings for the global calculation parameters.

The first block indicates the parallelization of calculations. The number of threads can be set from one to the number of logical processor cores. Routine calculations are determined by the «Threads to calculate reflectivity» item, this is what affects the speed of calculating curves.

«Threads to read optical constants» affects the speed of loading the optical constants database into random access memory during the **Multifitting** startup or when manually reloading the database from the main window menu («Optical constants» → «[Reload optical constants](#_Optical_constants)»).

The second block concerns the response of **Multifitting** to changing parameters.

«Recalculate on any change» – if enabled, then when changing any parameter (except for the «Structure table» window), the curves are immediately recalculated.

«Recalculate on change in Structure table» duplicates the «Recalculate» modifier in the «Structure table» window. The curves are recalculated when any parameter in the table is changed.

The last option «Ignore 1D scattering on particles» allows you to ignore particle scattering in 1D curves even if particles are present and affect 2D scattering.

### Interface

1.  Tab «Interface»

Here are some settings for the appearance and behavior of windows.

The first block specifies the default titles that are assigned to new tabs when adding a structure or adding an independent curve in the main window.

The second block concerns charts. Here are some settings for the appearance and behavior of windows.

«Replot 1D graphs while fitting» – if enabled, then during the automatic fitting process, the calculated curves in the «[1D graphs](#_1D_graphs)» window, for which the «Fit» parameter is set, will be automatically updated, illustrating the path that the algorithm goes through.

«Profile line thickness» sets the thickness of all structure profile lines in the «[Profile plot](#_Profile_plot)» window. This parameter has been moved to the global settings for the convenience of quickly changing it when you need to get a clear, well-defined profile picture and take a screenshot.

Items in block «Other»:

«Make all windows resizable» makes the size of all windows unfixed and gives the opportunity to make the window size smaller than the content size. Needed to save screen space.

«Structural tabs synchronization» – if your project has several tabs with structures, then when switching between tabs in one window, the tabs in all other open windows also switch. It is necessary not to confuse which structure is open in which window.

«Show single calculation time» shows in the command line the time of curves calculation on manual recalculation («Ctrl+Shift+C»).

«Show individual residuals» shows in the command line the residuals for each curve and the total residual on manual recalculation («Ctrl+Shift+C»).

## Fitting settings

1. Graphical user interface, text, application, email

   Description automatically generated Window «Fitting settings»

The selection of the automatic fitting algorithm and changing its parameters is done in the «Fitting settings» window.

The algorithm is selected from the drop-down list. The two main groups of algorithms are distinguished by the libraries from which they are taken. Gradient algorithms are used from the GSL library (GNU Scientific Library, <https://www.gnu.org/software/gsl/doc/html/nls.html#nonlinear-least-squares-fitting>), and predominantly stochastic algorithms from the SwarmOps library (<https://github.com/Hvass-Labs/swarmops-other/blob/master/SwarmOpsC1_1.pdf>).

1. Algorithm list

There are few basic fitting parameters, and they are in plain sight. For algorithms from GSL, these are:

«Randomized start» starts a series of fittings in turn with random initial values of the adjusted parameters. The number of such runs is determined by the «Number of runs» parameter, and the results are written to the «fits.txt» file. This approach is used to cover most of the parametric space and more likely to find a sufficiently deep residual minimum.

«Max number of iterations» – the number of iterations in each individual fitting procedure, after which the algorithm is forced to stop.

«General tolerance» simultaneously sets the minimum gradient, the minimum residual value and the minimum parameter step, below which the algorithm stops.

For algorithms from SwarmOps, some of the parameters are different, namely:

1. Window «Fitting settings»

«Initialize by current state» – the first residual calculation will be done on the structure in its state before launch, to ensure that the initial state is included in comparison with all other parameter sets that arise during the fitting process.

«Max number of evaluations» – the number of residual calculations after which the algorithm is forcibly stopped.

«Num. evals ∝ num. params» sets the proportionality coefficient, which is multiplied by the number of adjusted parameters to obtain the maximum number of residual calculations. Even within the same algorithm, the number of calculations after which convergence begins may depend on the number of parameters, so this alternative constraint can be used.

The «Abort calculations» button (or «Alt+**.**») aborts the current fitting procedure.

In addition to the described basic parameters, there are additional ones. You can see and change them by opening the bottom block by pressing the «Additional parameters»:

1. Additional algorithm parameters



I do not recommend changing these parameters without understanding what is happening, however, understanding the principle of the algorithm and finding out which parameters are responsible for what, you can find a more optimal combination that will give better stability and better convergence for your tasks.

## Fits selector

1.  Window «Fits selector»

A special place is occupied by a tool for saving snapshots of the state of the structure – the «Fits selector» window. In the process of finding the right structure and the right parameters, you often need to save successful configurations so that you can return to them later if necessary.

*Attention*: Only the model of the structure itself and its parameters presented in the table are saved in the «Fits selector». Curve settings, instrumental parameters, calculation settings are not saved in fits and remain the same when switching between fits!

The configurations are automatically saved before the start of the automatic fit and at the end of it, in this case the entry name is generated as «#<number> fit || <date> || <time> || initial/final». You can save the state manually by pressing the «Save» button, then its name is generated in the form «#<number> state || <date> || <time>». The number assigned to a record always only increases within a saved project. Records can be renamed by selecting the record and pressing "F2" on the keyboard:

1. Renaming an entry

The «Clear» button clears all entries. To delete one entry, you need to select it with the mouse (or run the arrows on the keyboard) and press the «Delete» key on the keyboard. Entries can be swapped by selecting the desired entry and moving it up or down using the ▲ or ▼ buttons at the bottom of the window.

*Note*: To divide the fits into groups, you can enter "separators" by saving the current state (unnecessary on its own) and renaming it to something like "----------------- ----" or "- - - one more group started - - -".

To load a saved state, double-click on it. If at the same time the «[Structure table](#_Structure_table)» window was open, it will close and reopen. Other windows that display structure parameters or design curves will simply update their contents.

*Note*: The «Structure table» window reopens slowly. If you do not need to track changes directly in the table, but need to track, for example, the reflection curves in different states and compare them, then it makes sense to close the «Structure table». Then switching between states will be faster.

# 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

### Интерфейс/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

## <……………..>

# Визуализация результатов расчёта

## <……………..>

# Оптимизация и подгонка

## <……………..>

# Экспорт и импорт данных

Для вычислений в Multifitting может потребоваться загрузить следующие данные: [рефлектометрические кривые](#_Specular_scan), [диффузное рассеяние](#_Detector_scan), [GISAS](#_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 generated Пример файла с данными

#### 2D данные

Двумерные данные для GISAS 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 confidence Пример файла c двумерными GISAS данными, одна строка – один пиксель.

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

1. Graphical user interface, text, application

   Description automatically generated Пример файла c двумерными GISAS 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 GISAS

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 generated Содержимое файла «GaAs.nk»

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

1. Text

   Description automatically generated Содержимое 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 generated Содержимое 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

GISAS – Grazing Incidence Small-Angle X-ray Scattering / малоугловое 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).