

Multifitting

v.2.0.0

Руководство пользователя

обновлено 31 октября 2022

Михаил Свечников

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.

Оглавление

1	Введение.....	5
2	Установка и запуск.....	6
2.1	Windows.....	6
2.2	Linux.....	6
3	Быстрый старт	7
3.1	Создание структуры	7
3.2	Сохранение и загрузка	7
3.3	Вычисление кривой отражения.....	7
3.4	Работа со структурной таблицей.....	7
3.5	Обратная задача	7
3.6	Дополнительные экспериментальные кривые.....	7
4	Пользовательский интерфейс	8
4.1	Командная строка.....	8
4.2	Главное окно.....	9
4.2.1	Меню	10
4.2.2	Вкладки со структурами.....	12
4.2.3	Слоистая структура.....	13
4.2.4	Панель инструментов.....	13
4.2.5	Редактирование элемента структуры	14
4.2.6	Панель доступа к другим окнам	25
4.2.7	Независимые кривые	25
4.2.8	Экспериментальные кривые.....	33
4.3	Structure table.....	40
4.3.1	Меню	41
4.3.2	Содержимое таблицы.....	41
4.3.3	Regular aperiodic	55
4.4	Profile plot	58

4.5	1D graphs.....	60
4.5.1	Настройки	61
4.5.2	Настройка цвета кривой	63
4.5.3	Дополнительные кривые	63
4.6	2D graphs.....	65
4.6.1	Настройки	66
4.6.2	Настройка цветовой схемы	68
4.7	Roughness spectrum	69
4.8	Particles spectrum.....	70
4.9	Calculation settings	71
4.9.1	Параметры модели структуры	72
4.9.2	Настройки окна.....	72
4.9.3	Зеркальная кривая с экспериментальной сеткой	73
4.9.4	Независимая зеркальная кривая	75
4.9.5	Рассеяние.....	76
4.10	General settings	76
4.10.1	Input/Output	77
4.10.2	Calculation	78
4.10.3	Interface.....	79
4.11	Fitting settings	80
4.12	Fits selector.....	84
5	Задание слоистой структуры.....	86
5.1	<.....>.....	86
5.2	Сохранение состояния структуры.....	86
6	Визуализация параметров структуры.....	Error! Bookmark not defined.
6.1	<.....>.....	Error! Bookmark not defined.
7	Расчёт кривых и загрузка экспериментальных данных.....	86
7.1	<.....>.....	86
8	Визуализация результатов расчёта	86
8.1	<.....>.....	86
9	Оптимизация и подгонка.....	86
9.1	<.....>.....	86
10	Экспорт и импорт данных	87
10.1	Экспериментальные кривые.....	87
10.1.1	Формат данных.....	88
10.1.2	Импорт.....	89

10.1.3	Экспорт ранее загруженных данных.....	90
10.2	Экспорт симулированных данных.....	91
10.3	Структура	94
10.3.1	Экспорт всей структуры.....	94
10.3.2	Апериодика.....	95
10.4	Профиль структуры.....	98
11	Оптические константы материалов.....	101
11.1	Библиотека материалов «nk».....	101
11.2	Библиотека атомных факторов «f1 f2».....	103
12	Советы и рекомендации.....	Error! Bookmark not defined.
12.1	<.....>.....	Error! Bookmark not defined.
13	Модели и методы	105
13.1	Поле в слоистой структуре.....	105
13.2	Переходные области на интерфейсах.....	108
14	История версий.....	109
15	Список сокращений	111
16	Список цитируемой литературы.....	112

1 Введение

Для чего предназначена эта программа? Основная задача – 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). Это требуется 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, аperiodические 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 плёнок, 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.

2 Установка и запуск

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

2.1 Windows

Установки как таковой не требуется, достаточно скачать архив, распаковать его и запустить исполняемый файл. В зависимости от разрядности операционной системы следует запускать файл из соответствующей папки: «Multifitting_v.X.Y.Z/windows_x64/Multifitting.exe» или «Multifitting_v.X.Y.Z/windows_x86/Multifitting.exe», где «X.Y.Z» – номер версии. Рекомендую запускать Multifitting из командной строки, т.к. в случае возникновения ошибки и аварийного закрытия программы можно будет прочитать код ошибки, чтобы в дальнейшем сообщить о нём.

Если при запуске программы вы получаете следующее сообщение:

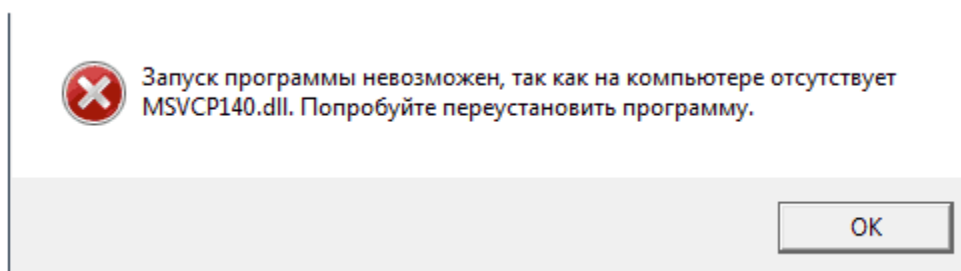


Рисунок 1. Сообщение от Windows

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

2.2 Linux

В распространяемом архиве находятся все необходимые библиотеки и исполняемый файл. Исполняемый файл «Multifitting_v.X.Y.Z/linux_x64/Multifitting».

3 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.

3.1 Создание структуры

3.2 Сохранение и загрузка

3.3 Вычисление кривой отражения

3.4 Работа со структурной таблицей

3.5 Обратная задача

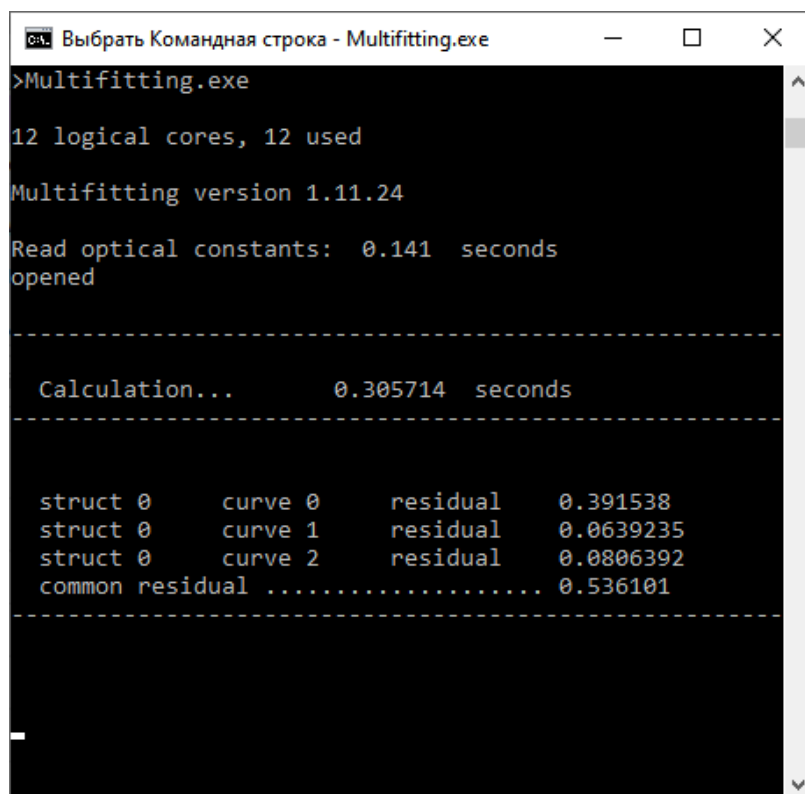
3.6 Дополнительные экспериментальные кривые

4 Пользовательский интерфейс

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

4.1 Командная строка

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



```
>Multifitting.exe

12 logical cores, 12 used

Multifitting version 1.11.24

Read optical constants: 0.141 seconds
opened

-----

Calculation...      0.305714 seconds

-----

struct 0    curve 0    residual    0.391538
struct 0    curve 1    residual    0.0639235
struct 0    curve 2    residual    0.0806392
common residual ..... 0.536101

-----
```

Рисунок 2. Пример информации в командной строке

В командной строке выводится информация о фактах открытия и сохранения проектов, о времени расчёта, о величине невязки между измеренными и рассчитанными кривыми. При

подгонке в консоль выводятся номер итерации, значение полной невязки и текущие значения подгоняемых параметров, что позволяет следить за прогрессом операции.

4.2 Главное окно

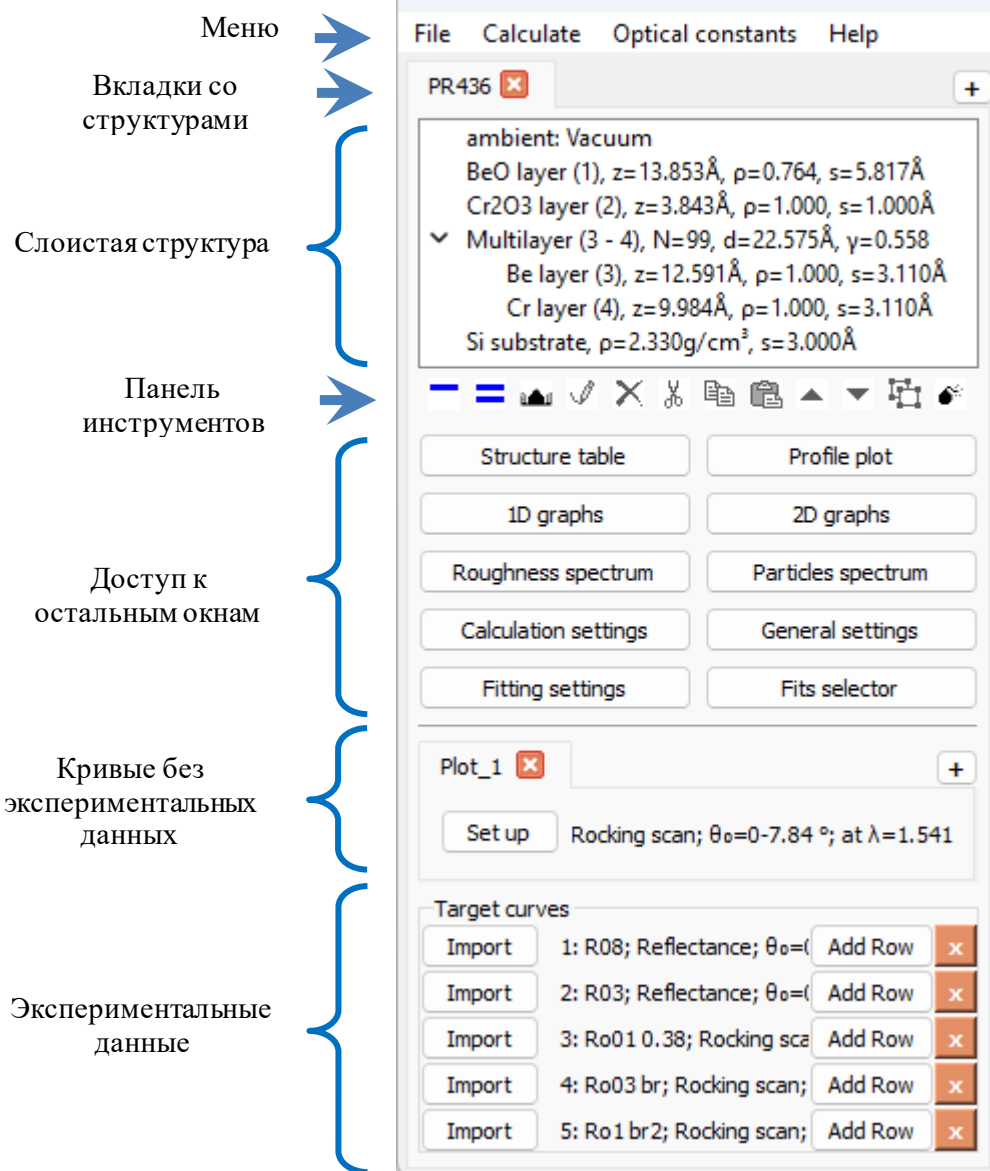


Рисунок 3. Структура основного окна

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

4.2.1 Меню

4.1.1.1 File

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

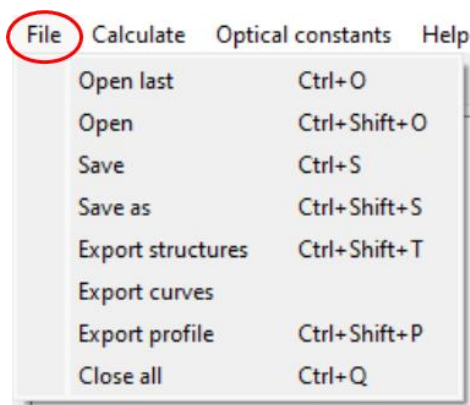


Рисунок 4. Главное меню «**File**»

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

- «**Export profile**» экспортирует профиль многослойной структуры в файл. В зависимости от настроек, сохраняется поляризуемость, относительная плотность материала, концентрации химических элементов.

4.1.1.2 Calculate

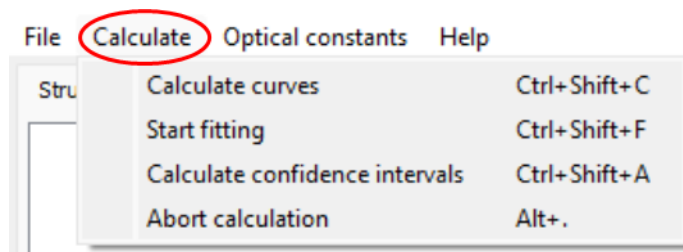


Рисунок 5. Главное меню «**Calculate**»

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

4.1.1.3 Optical constants

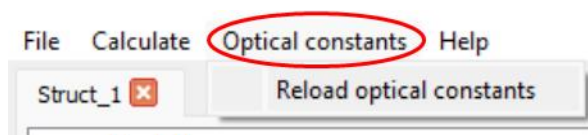


Рисунок 6. Главное меню «**Optical constants**»

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

4.1.1.4 Help

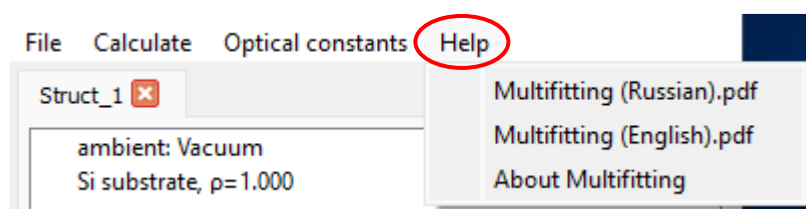


Рисунок 7. Главное меню «Help»

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

4.2.2 Вкладки со структурами

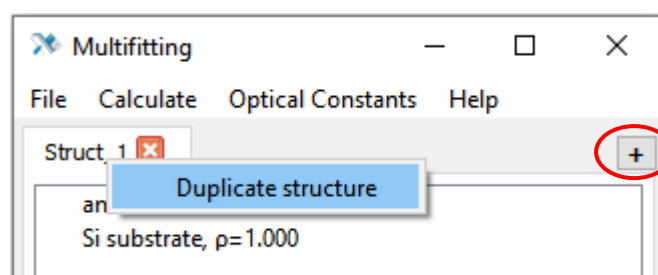


Рисунок 8. Добавление структуры: дублирование существующей или создание новой

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

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

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

4.2.3 Слоистая структура

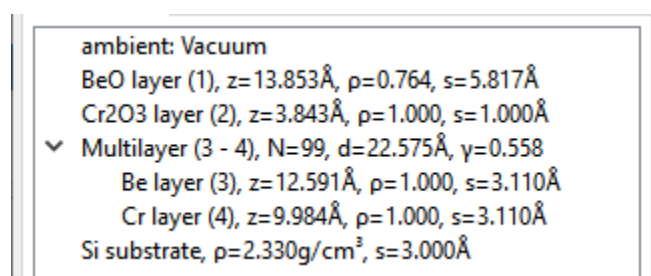


Рисунок 9. Древоподобный список, описывающий структуру

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

4.2.4 Панель инструментов

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



Рисунок 10. Панель инструментов

- «Add layer» вставляет новый слой с параметрами по умолчанию.
- «Add multilayer» вставляет периодическую структуру с 2 слоями в ячейке и 1 периодом по умолчанию. Можно добавлять новые слои в ячейку после создания.
- «Add aperiodic multilayer» добавляет апериодическую структуру, считанную из текстового файла. Подробности – в главе [Задание слоистой структуры](#).
- «Edit» открывает окно с основными свойствами слоя/многослойки. Эквивалентное действие – двойной клик по соответствующему элементу структуры. Настройки описаны в главе [Редактирование элемента структуры](#).

- ✕ «**Remove**» удаляет элемент структуры. Эквивалент – клавиша «Delete».
- ✂ «**Cut**» вырезает элемент структуры и помещает его в буфер обмена. Комбинация: «Ctrl+X»
- 📄 «**Copy**» помещает элемент структуры в буфер обмена. Комбинация: «Ctrl+C»
- 📄 «**Paste**» вставляет элемент структуры из буфера обмена. Комбинация: «Ctrl+V»
- ▲ «**Move up**» перемещает элемент вверх по структуре.
- ▼ «**Move down**» перемещает элемент вниз по структуре.
- 🗑 «**Ungroup**» удаляет многослойку и вставляет на её место, элементы, бывшие в её составе. Понижает вложенность структуры.
- 🗑 «**Remove all layers**» удаляет все элементы, кроме подложки и внешней среды.

4.2.5 Редактирование элемента структуры

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

4.2.5.1 Layer

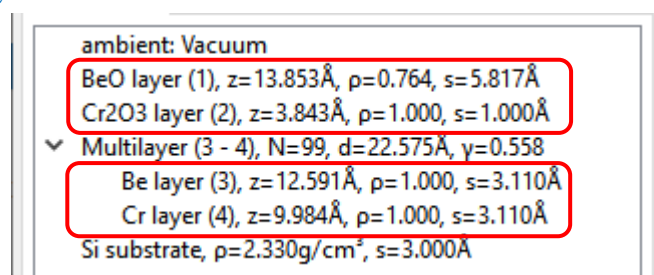


Рисунок 11. Слои на схеме структуры

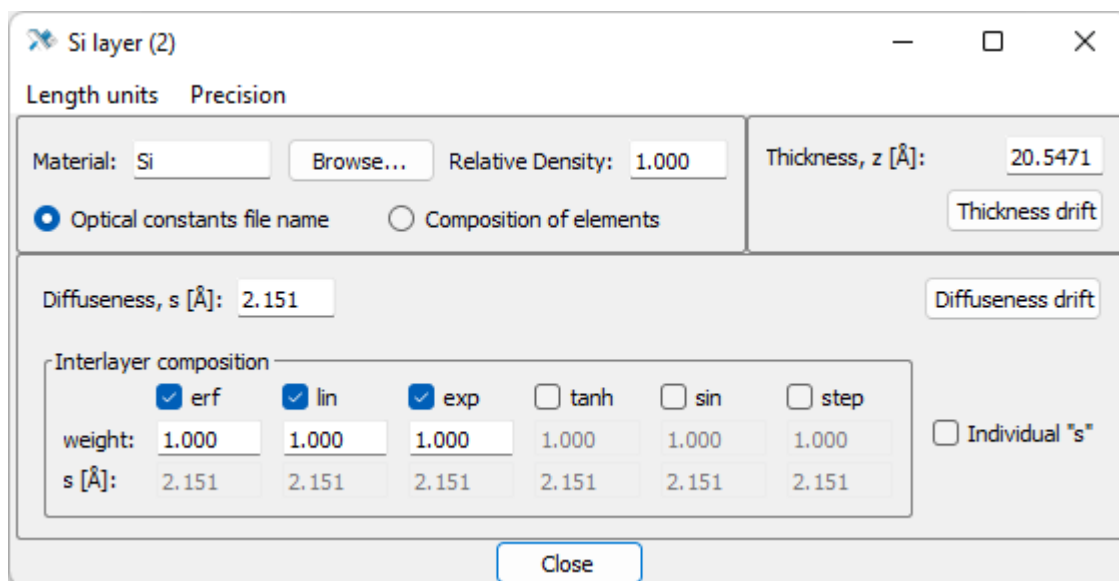


Рисунок 12. Окно «Layer»

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

4.2.5.1.1 Заголовок

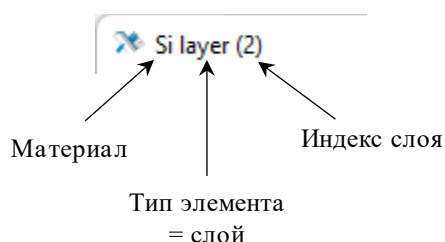


Рисунок 13. Заголовок окна «Layer»

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

4.2.5.1.2 Меню

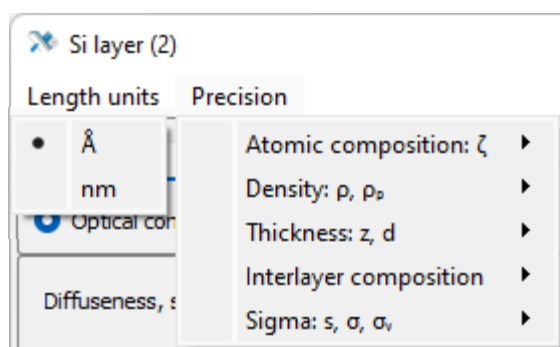
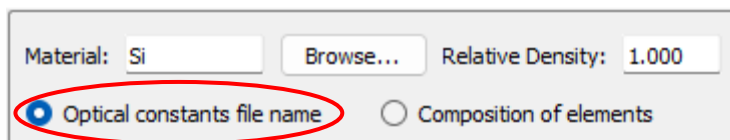


Рисунок 14. Меню окна «Layer»

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

4.2.5.1.3 Material



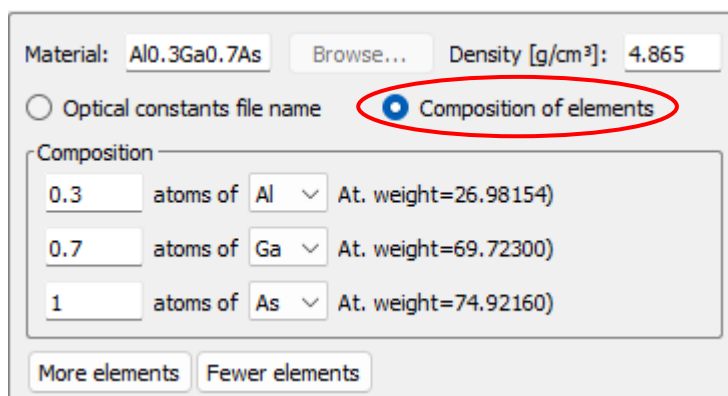
The screenshot shows a dialog box with the following fields and controls:

- Material:
- Relative Density:
- ☒ Optical constants file name
- ☐ Composition of elements

Рисунок 15. Блок «**Material**» с табулированным материалом

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

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



The screenshot shows a dialog box with the following fields and controls:

- Material:
- Density [g/cm³]:
- ☐ Optical constants file name
- ☒ Composition of elements
- Composition section:
 - atoms of At. weight=26.98154)
 - atoms of At. weight=69.72300)
 - atoms of At. weight=74.92160)
-

Рисунок 16. Блок «**Material**» с материалом, сконструированным из отдельных химических элементов

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

4.2.5.1.4 Thickness

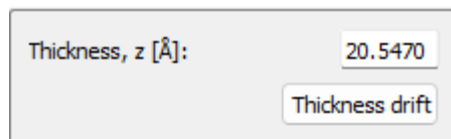


Рисунок 17. Блок «Thickness»

Здесь можно задать толщину слоя.

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

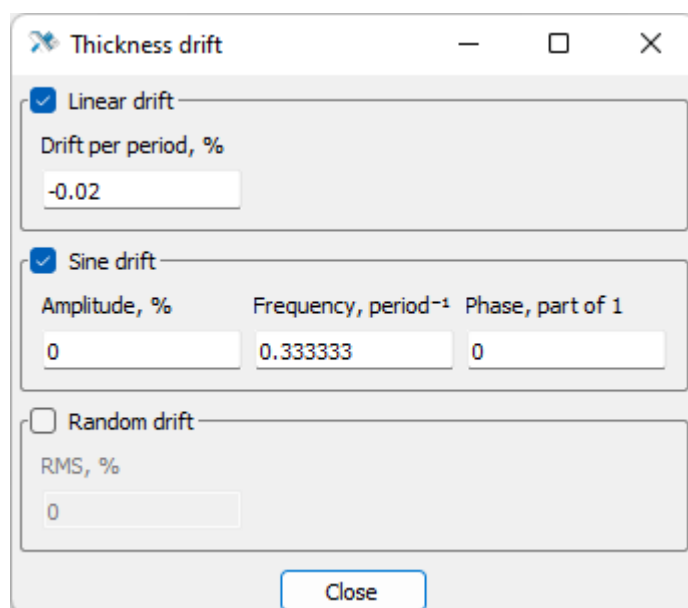


Рисунок 18. Окно «Thickness drift»

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

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

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

4.2.5.1.5 Diffuseness

Interlayer composition					
<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input checked="" type="checkbox"/> lin	<input checked="" type="checkbox"/> exp	<input type="checkbox"/> tanh	<input type="checkbox"/> sin	<input type="checkbox"/> step
weight:	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
s [Å]:	2.1510	2.1510	2.1510	2.1510	2.1510

Рисунок 19. Блок «Diffuseness»

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

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

4.2.5.2 Substrate

```
ambient: Vacuum
BeO layer (1), z=13.853Å, ρ=0.764, s=5.817Å
Cr2O3 layer (2), z=3.843Å, ρ=1.000, s=1.000Å
✓ Multilayer (3 - 4), N=99, d=22.575Å, γ=0.558
  Be layer (3), z=12.591Å, ρ=1.000, s=3.110Å
  Cr layer (4), z=9.984Å, ρ=1.000, s=3.110Å
Si substrate, ρ=2.330g/cm³, s=3.000Å
```

Рисунок 20. Подложка на схеме структуры

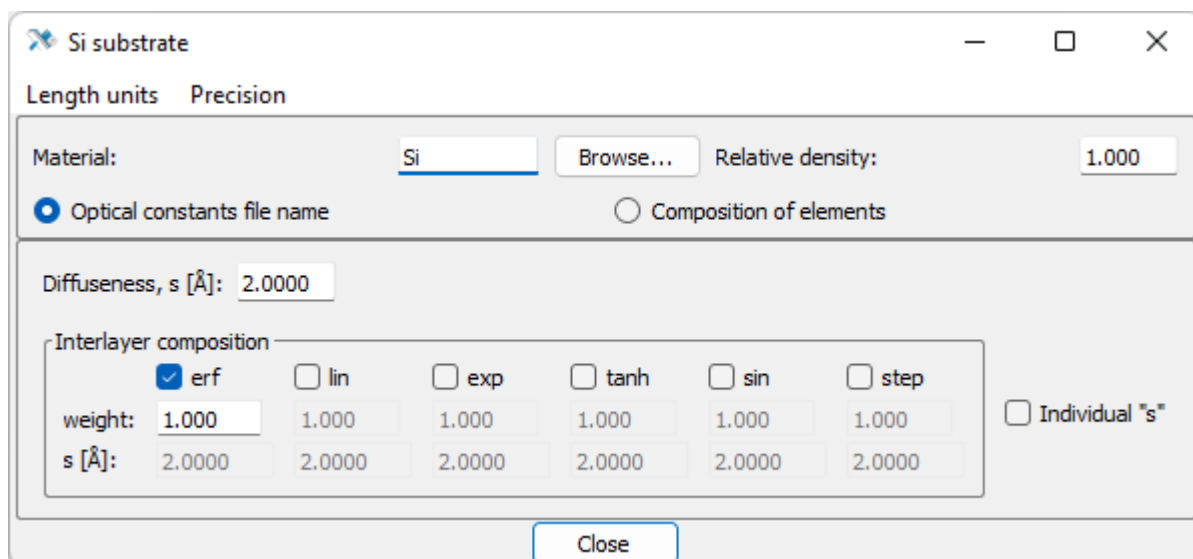


Рисунок 21. Окно «Substrate»

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

4.2.5.3 Ambient

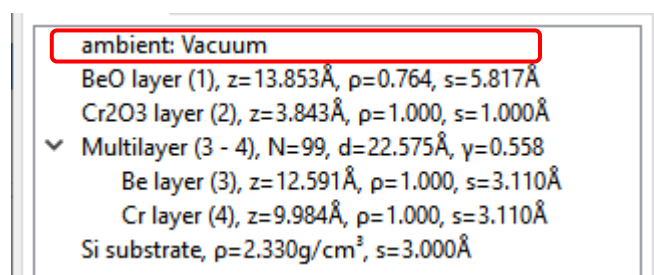


Рисунок 22. Внешняя среда на схеме структуры

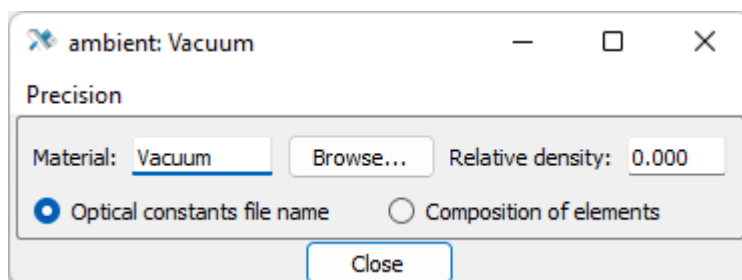


Рисунок 23. Окно «Ambient»

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

4.2.5.4 Multilayer

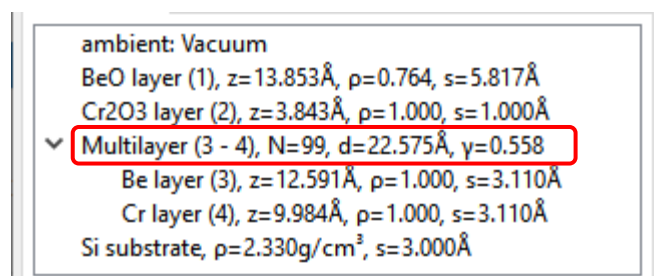


Рисунок 24. Периодическая многослойка на схеме структуры

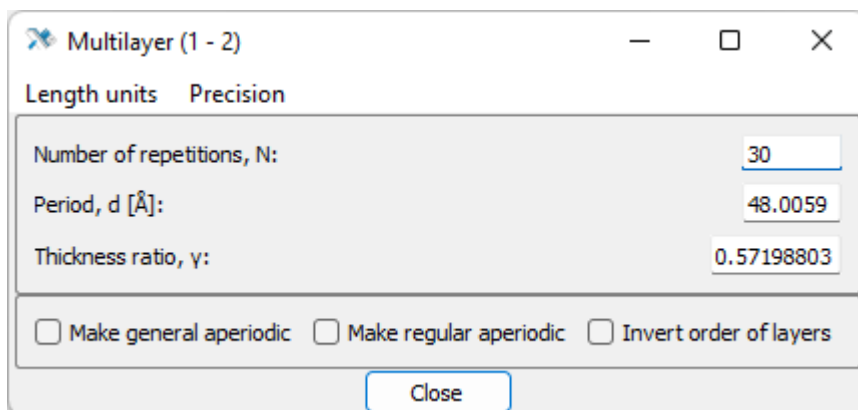


Рисунок 25. Окно «Multilayer»

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

4.2.5.4.1 Заголовок

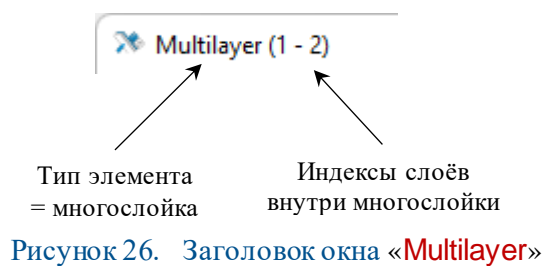


Рисунок 26. Заголовок окна «Multilayer»

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

4.2.5.4.2 Меню

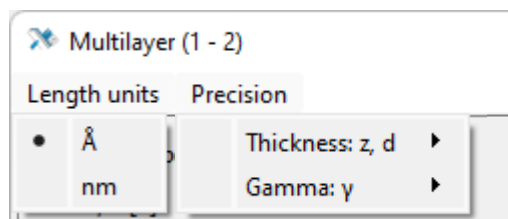


Рисунок 27. Меню окна «Multilayer»

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

4.2.5.4.3 Параметры

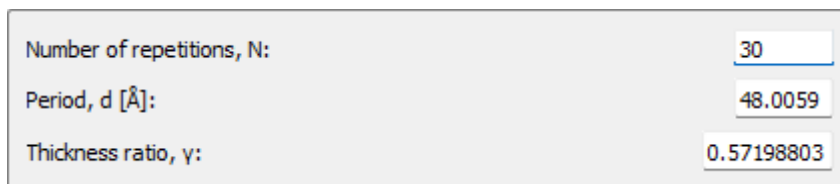


Рисунок 28. Блок настройки параметров

Первый основной параметр периодической многослойки – число периодов $N = 0, 1, 2 \dots$

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

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

4.2.5.4.4 Управление типом структуры

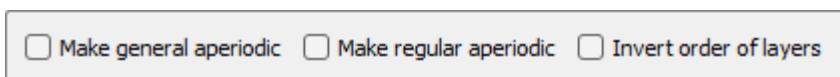


Рисунок 29. Блок управления типом структуры

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

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

4.2.5.5 Regular aperiodic

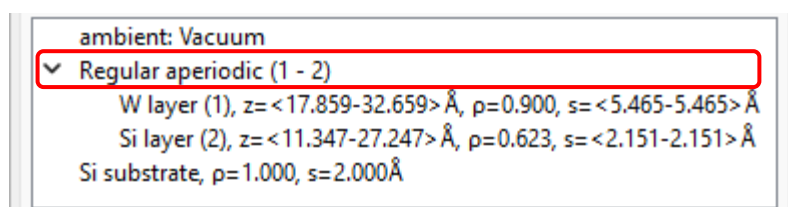


Рисунок 30. Регулярная аперодика на схеме структуры

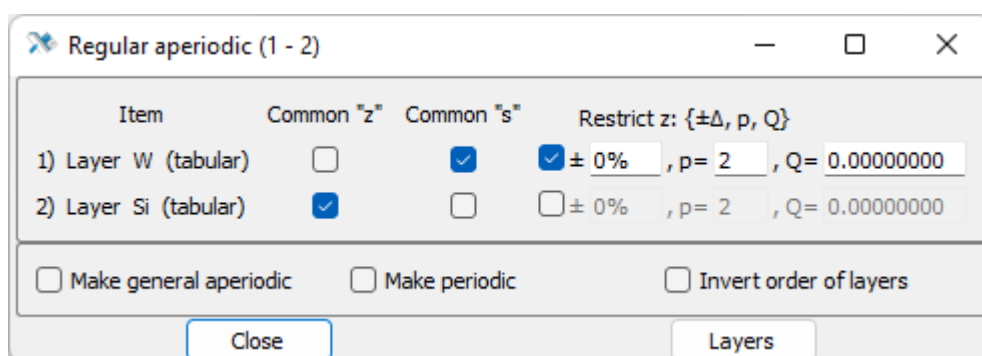


Рисунок 31. Окно «Regular aperiodic»

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

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

4.2.5.1 Заголовок

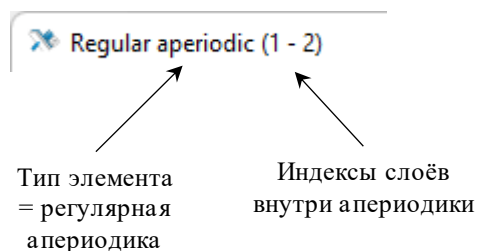


Рисунок 32. Заголовок окна «Regular aperiodic»

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

4.2.5.2 Параметры

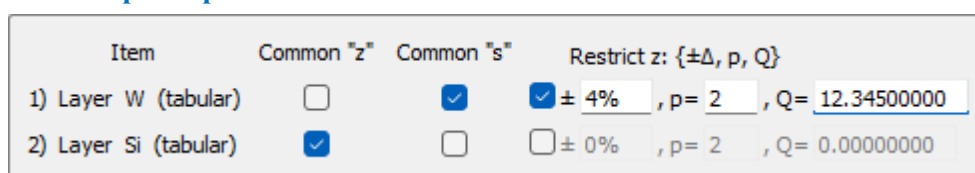


Рисунок 33. Блок настройки параметров

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

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

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

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

«Restrict z: $\pm\Delta$, p, Q» указывает, что при автоматической оптимизации/подгонке толщин будет применяться «мягкое» ограничение: если толщина любого слоя будет отличаться больше, чем на величину Δ от средней толщины слоёв данного типа, то к величине минимизируемой функции будет прибавляться «штраф», а именно следующая величина: $Q \times (|z - \langle z \rangle| - \Delta)^p$, где z – толщина слоя, $\langle z \rangle$ – 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 $\pm\Delta$.

4.2.5.3 Управление типом структуры

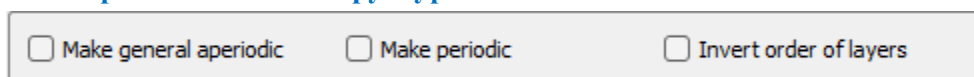


Рисунок 34. Блок управления типом структуры

Регулярная аперiodика может быть превращена в периодическую структуру или общую аперiodику выбором соответствующей опции.

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

4.2.5.6 General aperiodic

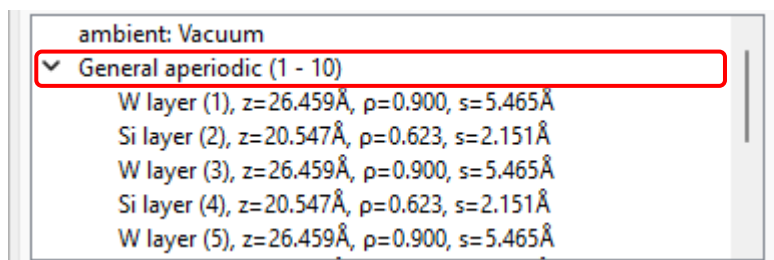


Рисунок 35. Общая аперiodика на схеме структуры

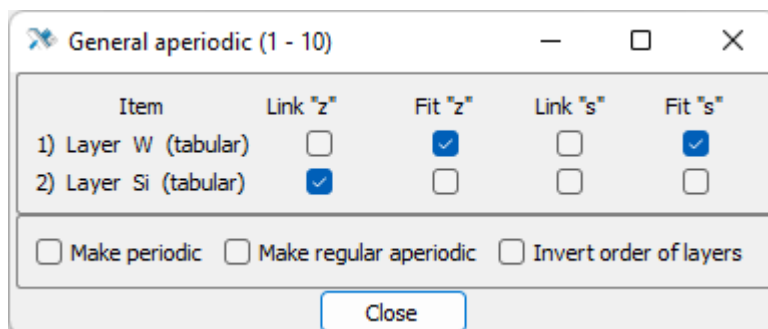
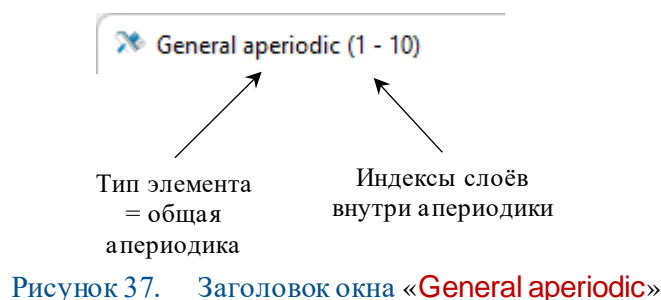


Рисунок 36. Окно «General aperiodic»

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

4.2.5.6.1 Заголовок



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

4.2.5.6.2 Параметры

Item	Link "z"	Fit "z"	Link "s"	Fit "s"
1) Layer W (tabular)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
2) Layer Si (tabular)	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Рисунок 38. Блок настройки параметров

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

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

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

4.2.5.6.3 Управление типом структуры

☐ Make periodic
 ☐ Make regular aperiodic
 ☐ Invert order of layers

Рисунок 39. Блок управления типом структуры

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

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

4.2.6 Панель доступа к другим окнам

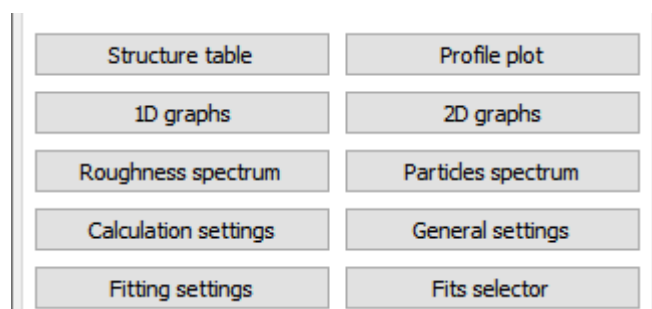


Рисунок 40. Доступ к другим инструментам

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

4.2.7 Независимые кривые

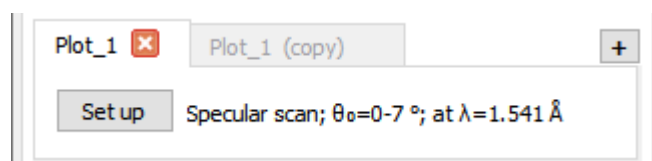


Рисунок 41. Вкладки с кривыми для расчёта без экспериментальной сетки

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

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

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

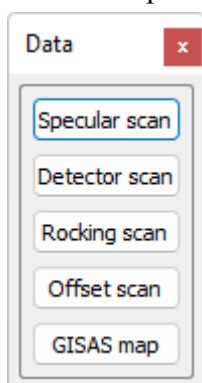


Рисунок 42. Выбор типа измерения

После задания типа кривой откроется соответствующее окно настроек.

4.2.7.1 Specular scan

The 'Specular scan' dialog box is organized into several sections:

- Units:** Angular units (°) and Spectral units (Å).
- Argument:** Beam grazing angle θ_0 (°) set to 1000 points, from 0.0000 to 7.0000.
- Beam:** At fixed wavelength (1.5405620 Å), Spectral width, FWHM, $\Delta\lambda/\lambda$ (0.0000000), Polarization (1.000), Angular divergence, FWHM, $\Delta\theta_0$ (°) (0.0000000), and Background (0.0000000000). A 'Set up distribution' button is present.
- Detector:** Detector type (Slit), Distance from detector to sample (300.0 mm), Slit length (10.000 mm), and Slit width (0.800 mm).
- Footprint and distortion:** Contains two sub-sections:
 - Beam:** Width, FWHM (0.050 mm), Profile smoothing (0.50), Lateral width (5.000 mm), Wings full width (0.250 mm), Wings intensity (0.00000) with a 'Log' checkbox.
 - Sample:** Size (21.00 mm), X-position (0.00 mm), Z-position (0.0000 mm), Curvature (0.0000 m⁻¹), and Radius of curvature (= ∞).

At the bottom, there are two plots: a green curve representing the reflectometric profile and a blue rectangular footprint with orange arrows indicating dimensions. A 'Close' button is at the bottom center.

Рисунок 43. Настройки рефлектометрической кривой

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

4.2.7.1.1 Units

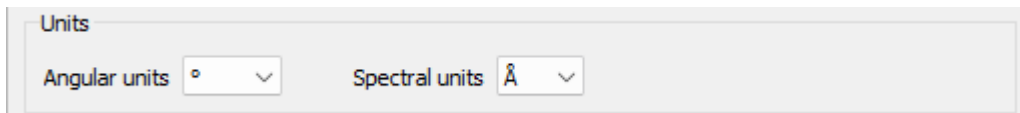


Рисунок 44. Блок «Units»

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

4.2.7.1.2 Argument

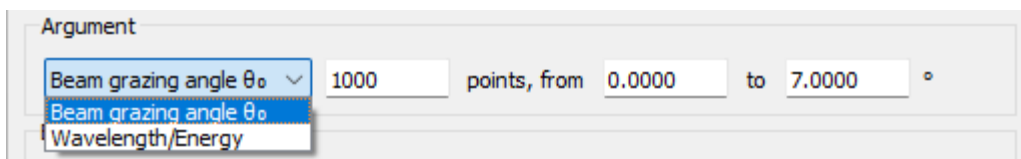


Рисунок 45. Блок «Argument»

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

4.2.7.1.3 Beam

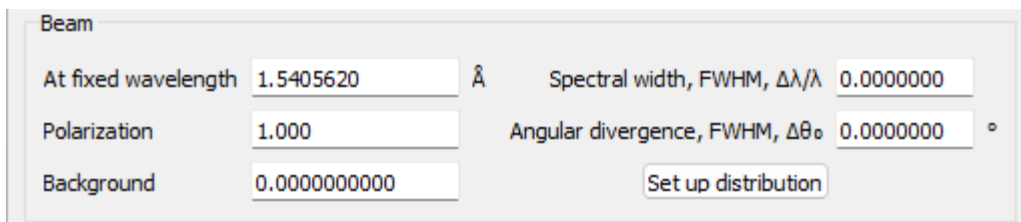


Рисунок 46. Блок «Beam»

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

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

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

4.2.7.1.4 Detector

The image shows two panels of the 'Detector' control interface. Panel (a) is for a 'Slit' detector type, with a distance of 300.0 mm, a slit length of 10.000 mm, and a slit width of 0.800 mm. Panel (b) is for a 'Crystal' detector type, with the same distance, a slit length of 10.000 mm, an angular resolution (FWHM, $\Delta\theta$) of 0.000000 degrees, and a 'Gaussian' profile. Both panels have a red label (a) or (b) in the top right corner.

Рисунок 47. Блок «Detector» с щелевым (a) или кристаллическим (b) типом детектора

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

4.2.7.1.5 Footprint and distortion

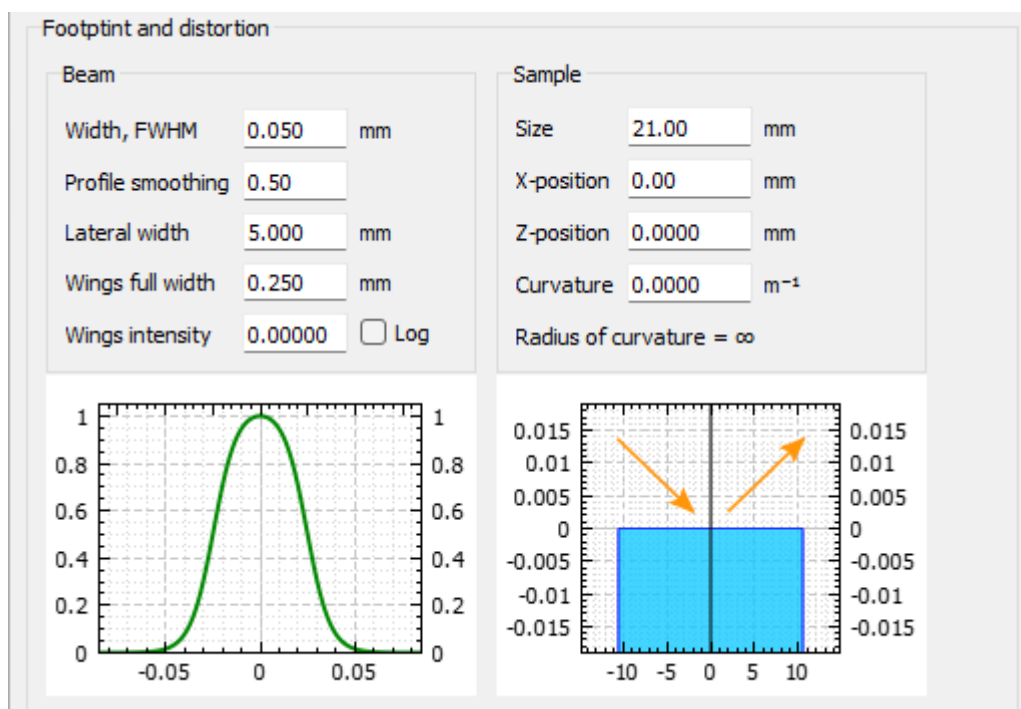


Рисунок 48. Блок «Footprint and distortion»

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

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

4.2.7.2 Detector scan

Блоки «Units», «Detector», «Footprint and distortion» в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии.

4.2.7.2.1 Argument

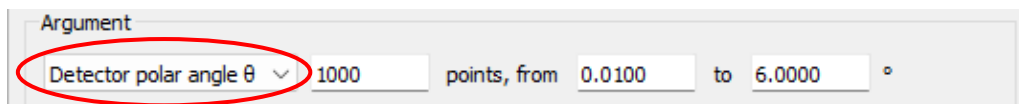


Рисунок 49. Блок «Argument»

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

4.2.7.2.2 Beam

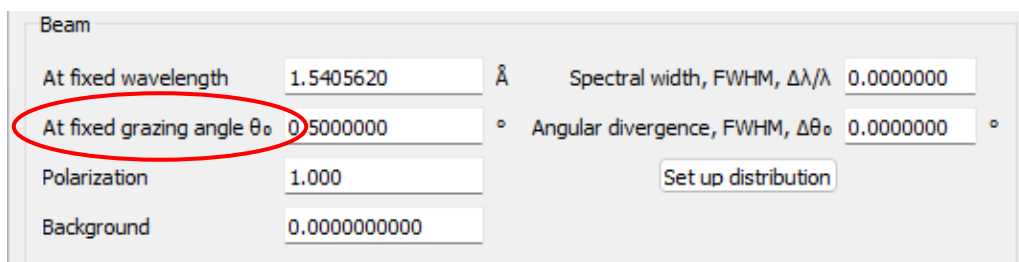


Рисунок 50. Блок «Beam»

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

4.2.7.3 Rocking scan

Блоки «Units», «Detector», «Footprint and distortion» в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии.

4.2.7.3.1 Argument

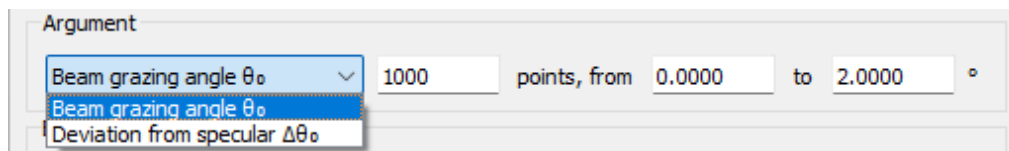
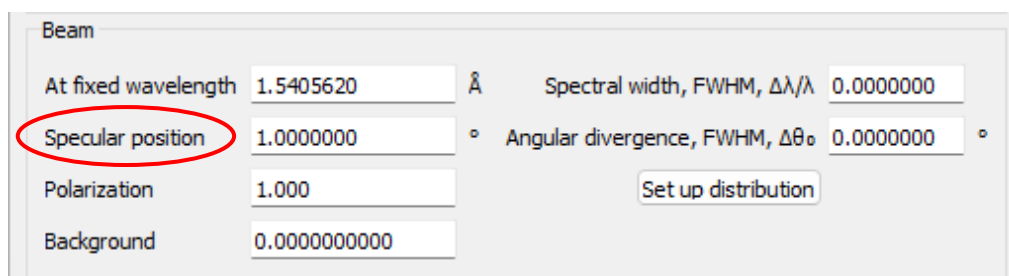


Рисунок 51. Блок «Argument»

При вычислении кривой качания меняются и угол скольжения пучка, и угол рассеяния. В качестве аргумента можно выбрать или угол скольжения пучка или отклонение образца от

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

4.2.7.3.2 Beam



The screenshot shows a software interface for configuring a beam. It includes several input fields and a button. The 'Specular position' field is highlighted with a red circle.

Beam	
At fixed wavelength	1.5405620 Å
Spectral width, FWHM, $\Delta\lambda/\lambda$	0.0000000
Specular position	1.0000000 °
Angular divergence, FWHM, $\Delta\theta$	0.0000000 °
Polarization	1.000
Background	0.0000000000

Buttons: Set up distribution

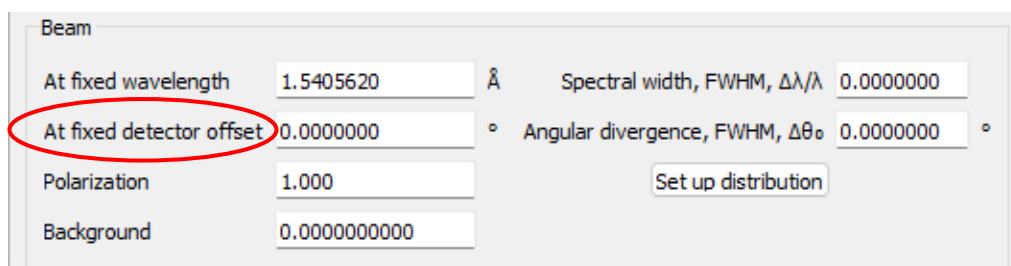
Рисунок 52. Блок «Beam»

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

4.2.7.4 Offset scan

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

4.2.7.4.1 Beam



The screenshot shows a software interface for configuring a beam. The 'At fixed detector offset' field is highlighted with a red circle.

Beam	
At fixed wavelength	1.5405620 Å
Spectral width, FWHM, $\Delta\lambda/\lambda$	0.0000000
At fixed detector offset	0.0000000 °
Angular divergence, FWHM, $\Delta\theta$	0.0000000 °
Polarization	1.000
Background	0.0000000000

Buttons: Set up distribution

Рисунок 53. Блок «Beam»

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

4.2.7.5 GISAS map

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

4.2.7.5.1 Argument

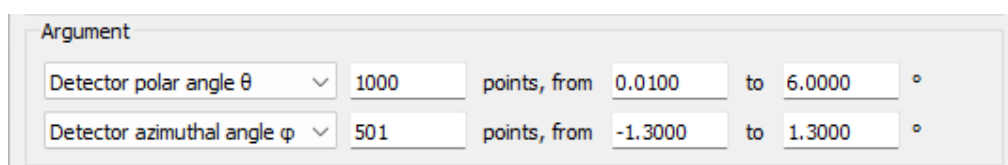


Рисунок 54. Блок «Argument»

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

4.2.7.5.2 Beam

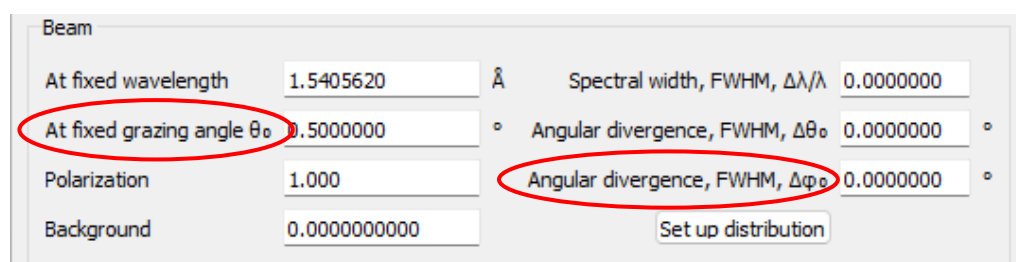


Рисунок 55. Блок «Beam»

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

4.2.7.5.3 Detector

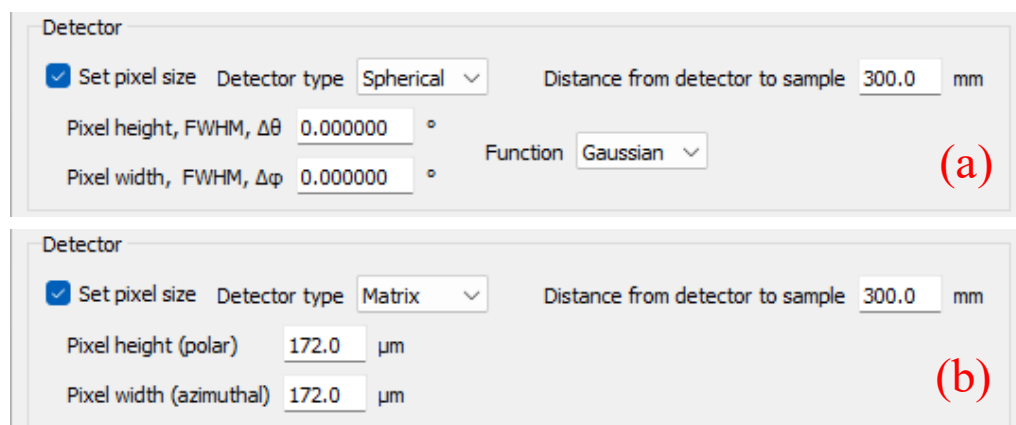


Рисунок 56. Блок «Detector» со сферическим (a) или пиксельным (b) типом детектора

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

4.2.8 Экспериментальные кривые

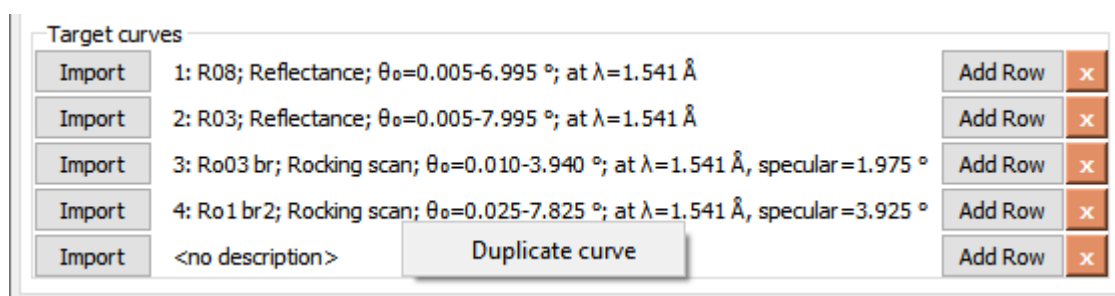


Рисунок 57. Список загруженных данных

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

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

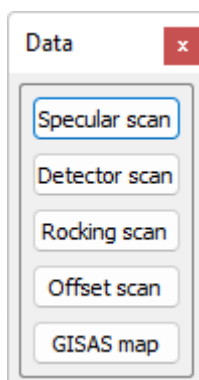


Рисунок 58. Выбор типа измерения

После задания типа кривой откроется соответствующее окно настроек.

4.2.8.1 Specular scan

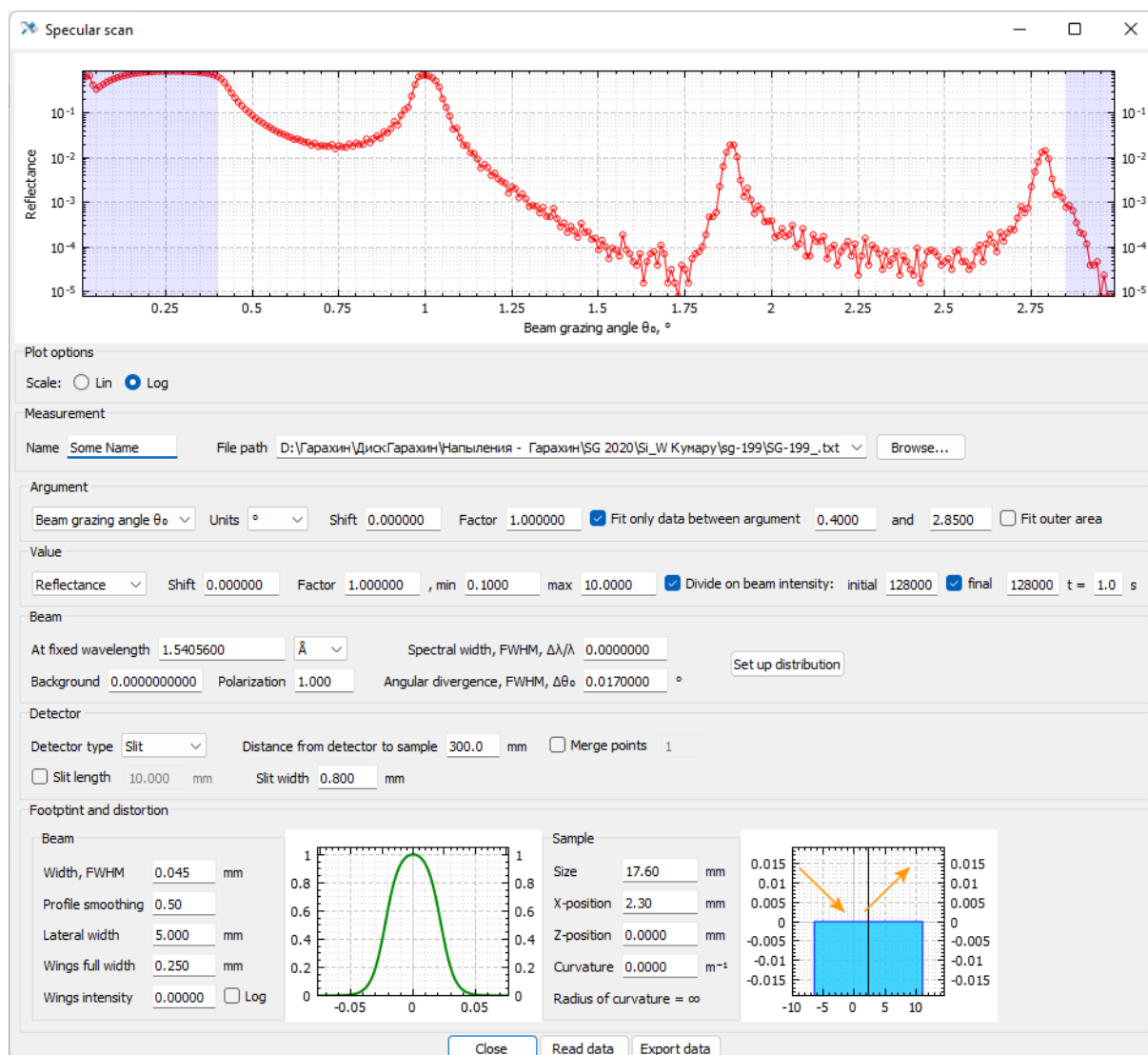


Рисунок 59. Настройки экспериментальной рефлектометрической кривой

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

4.2.8.1.1 Measurement

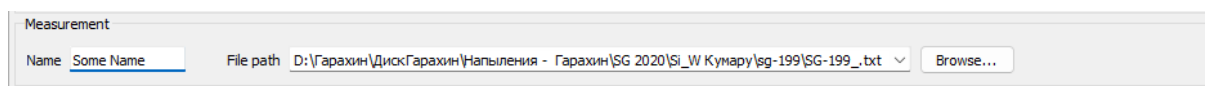


Рисунок 60. Блок «Measurement»

В левой части блока можно задать имя кривой, это может быть полезно в дальнейшей работе, особенно если кривых несколько. В оставшейся части можно указать файл с данными для загрузки. Путь можно написать вручную/вставить, можно воспользоваться файловым

диалоговым окном, нажав кнопку «Browse...». Или можно мышью перетащить нужный файл в окно настроек.

4.2.8.1.2 Argument

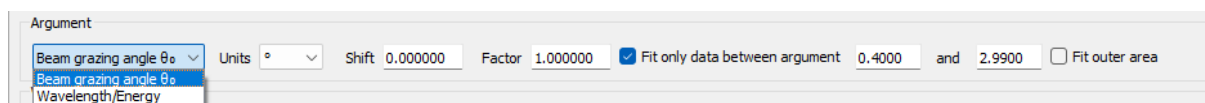


Рисунок 61. Блок «Argument»

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

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

4.2.8.1.3 Value

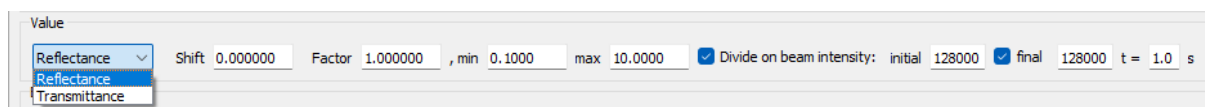


Рисунок 62. Блок «Value»

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

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

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

4.2.8.1.4 Beam

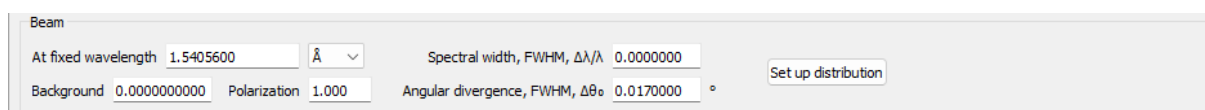


Рисунок 63. Блок «Beam»

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

4.2.8.15 Detector

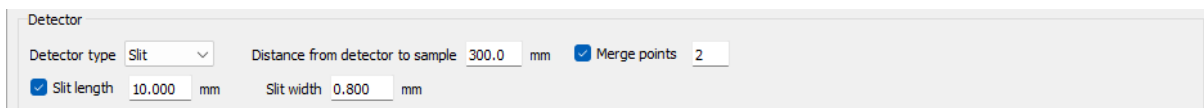


Рисунок 64. Блок «Detector»

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

4.2.8.16 Footprint and distortion

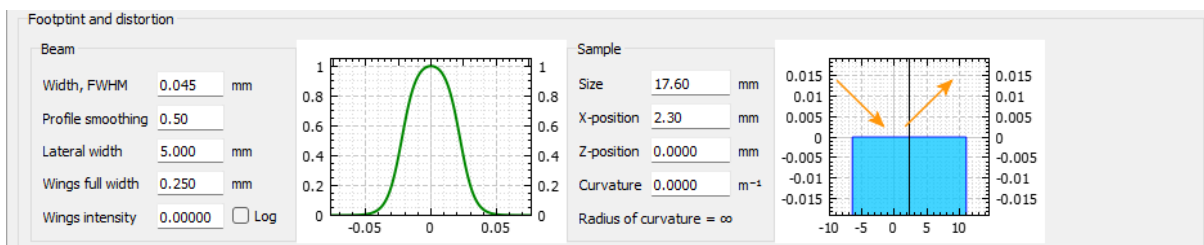


Рисунок 65. Блок «Footprint and distortion»

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

4.2.8.17 Нижняя панель

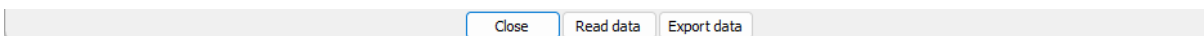


Рисунок 66. Нижняя панель окна

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

«Read data» заново считывает данные из файла, указанного в поле «File path» блока «Measurement».

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

4.2.8.2 Detector scan

Блоки «Measurement», «Detector», «Footprint and distortion» и нижняя панель в точности те же самые, что и для зеркальной геометрии. Блок «Value» отличается только неизменяемым типом функции: «Scattering».

4.2.8.2.1 Argument

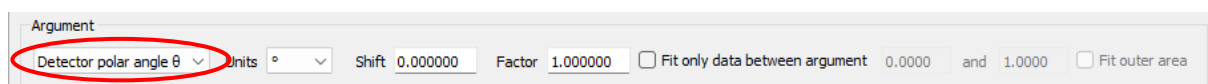


Рисунок 67. Блок «Argument»

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

4.2.8.2.2 Beam

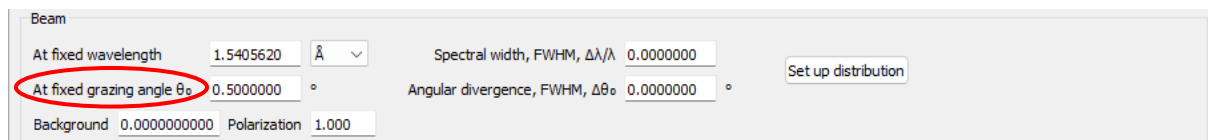


Рисунок 68. Блок «Beam»

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

4.2.8.3 Rocking scan

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

4.2.8.3.1 Argument

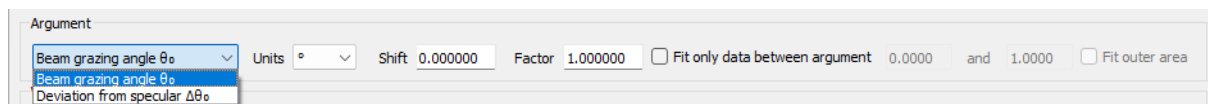


Рисунок 69. Блок «Argument»

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

4.2.8.3.2 Beam

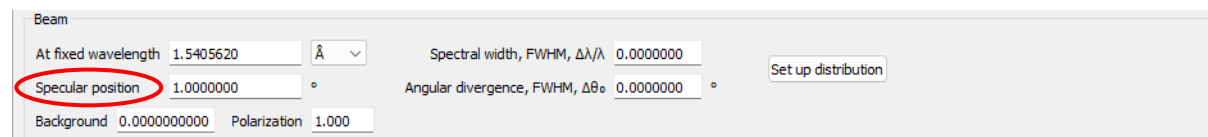


Рисунок 70. Блок «Beam»

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

4.2.8.4 GISAS map

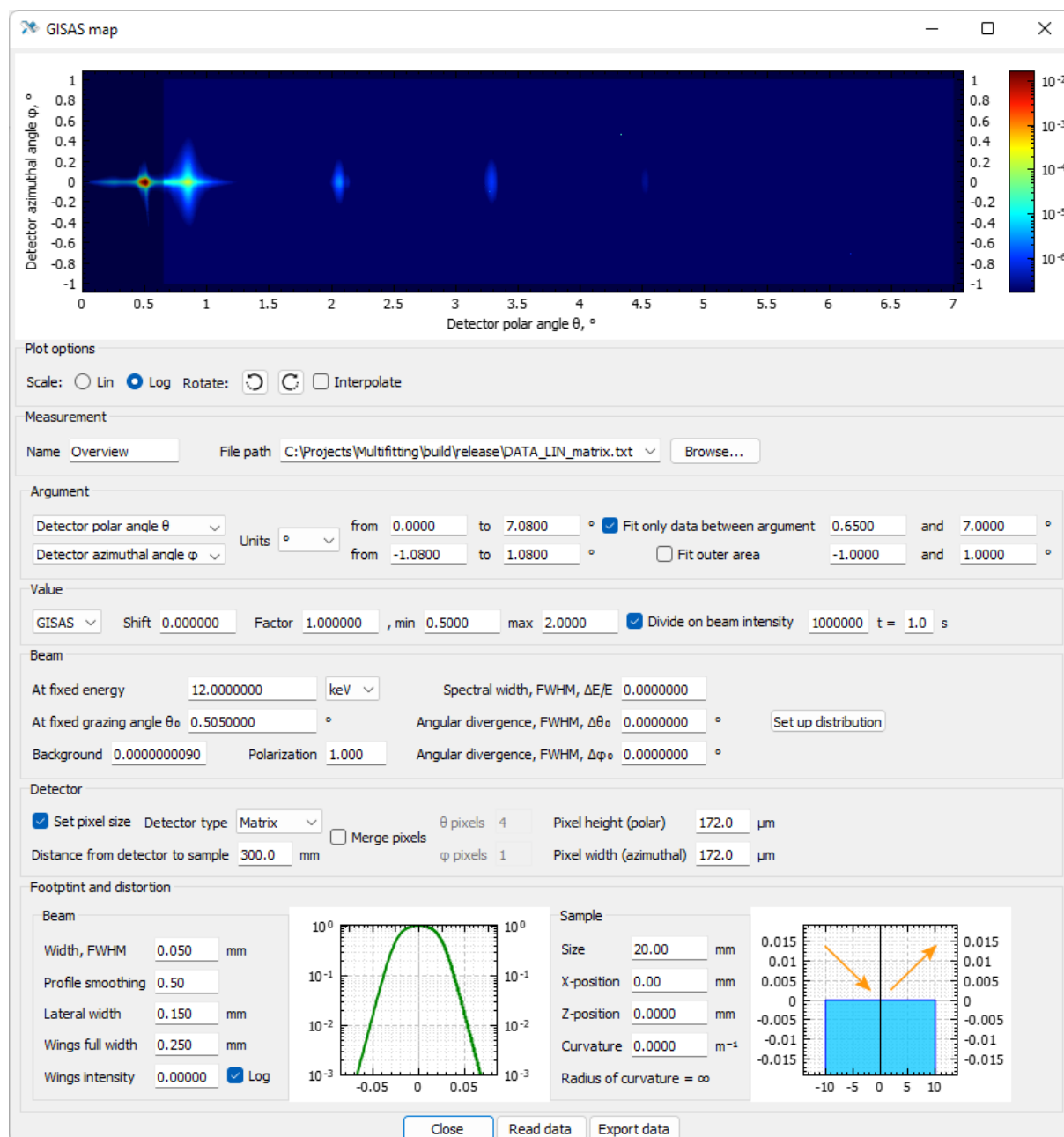




Рисунок 71. Настройки GISAS измерения

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

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

4.2.8.4.1 Argument

Рисунок 72. Блок «Argument»

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

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

4.2.8.4.2 Value

Рисунок 73. Блок «Value»

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

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

4.2.8.4.3 Beam

Рисунок 74. Блок «Beam»

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

4.2.8.4 Detector

Detector

☒ Set pixel size
 Detector type Spherical
☒ Merge pixels
 θ pixels 2
Pixel height, FWHM, $\Delta\theta$ 0.000000 °
 Distance from detector to sample 300.0 mm
 φ pixels 2
Pixel width, FWHM, $\Delta\varphi$ 0.000000 °
 Function Gaussian

Detector

☒ Set pixel size
 Detector type Matrix
☒ Merge pixels
 θ pixels 2
Pixel height (polar) 172.0 μm
Distance from detector to sample 300.0 mm
 φ pixels 2
Pixel width (azimuthal) 172.0 μm

Рисунок 75. Блок «Detector» со сферическим (а) или пиксельным (b) типом детектора

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

4.3 Structure table

Structure table

File Calculate Length units Other units Precision

D364

pure slave	confidence interval	active fit		ρ , -%	z/d , $\pm\%$	s , $\pm\%$				
master/slave	master/confidence	use particles		Reset	Reset	Reset				
pure master	free parameter	not parameter		10.000	20.000	10.000				

Set increase/decrease steps

<input checked="" type="checkbox"/> Mouse Wheel	<input checked="" type="checkbox"/> Change dependent	ζ	ρ	z/d [Å]	s [Å]	γ	interl		dz lin
<input checked="" type="checkbox"/> Recalculate	Set model	0.100	0.010	0.0100	0.010	0.0010000	0.100		0.0010

D364

				N	d [Å]		γ		
				109	56.8090		0.6073474		
<input checked="" type="checkbox"/> Multilayer (1 - 2)				<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit		<input type="checkbox"/> fit		
				1	10.0000		0.0000000		
				100	30.0000		1.0000000		

		Be	O	ρ [g/cm ³]	z [Å]	<input checked="" type="checkbox"/> s [Å]	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input checked="" type="checkbox"/> lin	<input checked="" type="checkbox"/> dz lin
		1.000	0.000	1.848	34.5028	6.684	0.001	0.223	-0.0183
<input checked="" type="checkbox"/> BeO layer (1)		<input type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit
		0.500	0.000	1.349	26.9330	1.000	s erf	s lin	-0.6000
		1.500	1.000	4.048	40.3994	20.000	6.684	6.684	0.6000

		Mo	O	ρ [g/cm ³]	z [Å]	<input checked="" type="checkbox"/> s [Å]	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input checked="" type="checkbox"/> lin	<input checked="" type="checkbox"/> dz lin
		1.000	0.000	9.700	22.3062	3.433	1.000	0.000	-0.0183
<input checked="" type="checkbox"/> MoO layer (2)		<input type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
		0.500	0.000	1.349	5.0000	1.000	s erf	s lin	-0.6000
		1.500	1.000	10.000	25.0000	20.000	3.433	3.433	0.6000

		Si		ρ [g/cm ³]		<input checked="" type="checkbox"/> s [Å]	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input type="checkbox"/> lin	
				2.330		4.000	1.000	1.000	
				<input type="checkbox"/> fit		<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	
				1.165		1.000	s erf	s lin	
				3.495		20.000	4.000	4.000	

Si substrate

Рисунок 76. Структурная таблица

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

4.3.1 Меню

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

4.3.2 Содержимое таблицы

4.3.2.1 Шапка

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

Установка пределов варьирования:

Легенда			плотности	толщины слоя/периода	переходной области
			↓	↓	↓
pure slave	confidence interval	active fit	$\rho, -\%$	$z/d, \pm\%$	$s, \pm\%$
master/slave	master/confidence	use partides	Reset	Reset	Reset
pure master	free parameter	not parameter	10.000	20.000	10.000

Рисунок 77. Шапка таблицы

4.3.2.2 Модификаторы

Нижележащий блок таблицы также неоднороден. Слева находятся галочки модификаторов.

<input checked="" type="checkbox"/> Mouse wheel	<input checked="" type="checkbox"/> Change dependent
<input checked="" type="checkbox"/> Recalculate	Set model

Рисунок 78. Модификаторы и выбор модели «несовершенства» структуры

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

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

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

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

4.3.2.3 Set imperfections model

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

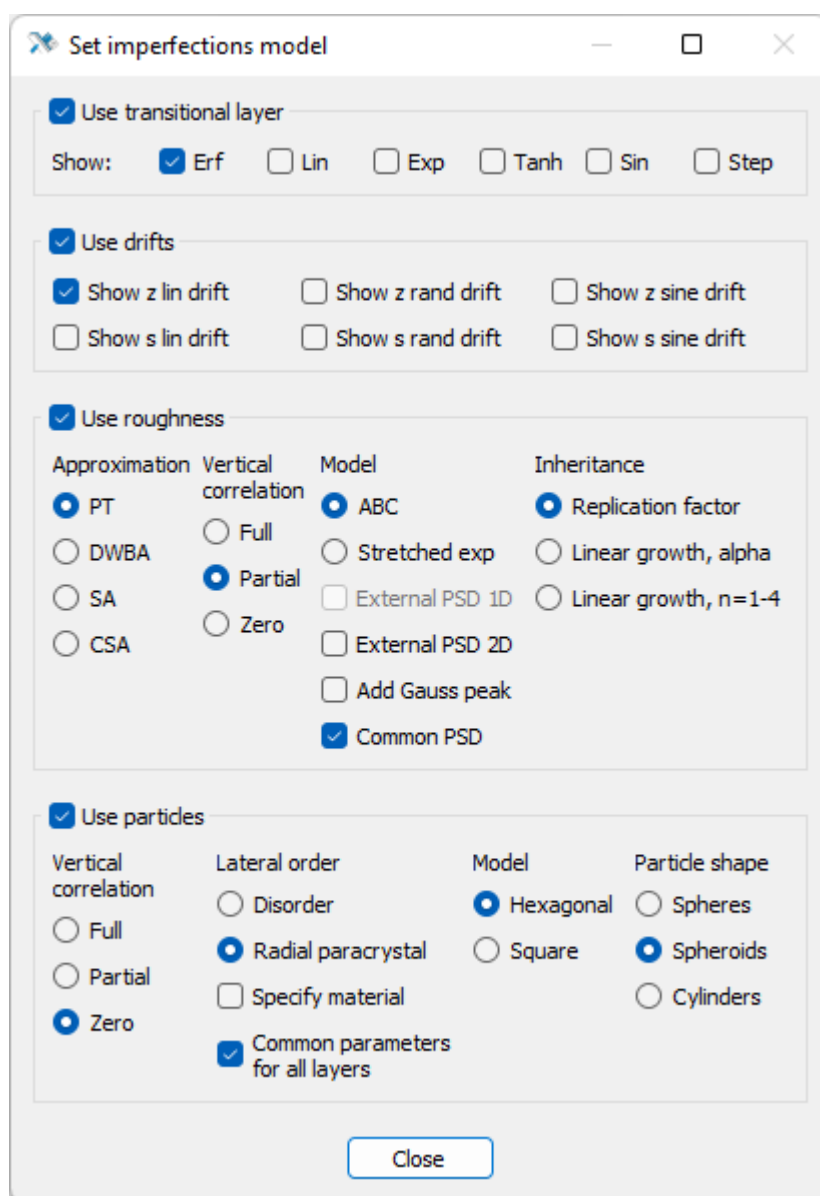


Рисунок 79. Модели «несовершенства» структуры

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

4.3.2.3.1 Transitional layer

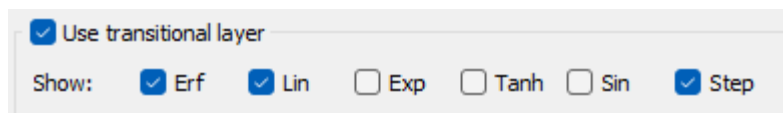


Рисунок 80. Блок «Use transitional layer»

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

4.3.2.3.2 Drifts

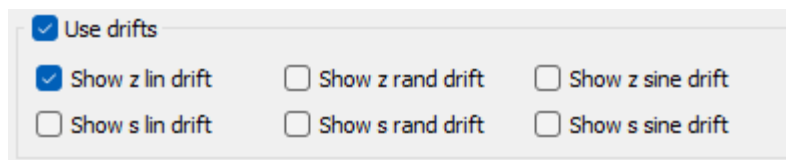


Рисунок 81. Блок «Use drifts»

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

4.3.2.3.3 Roughness

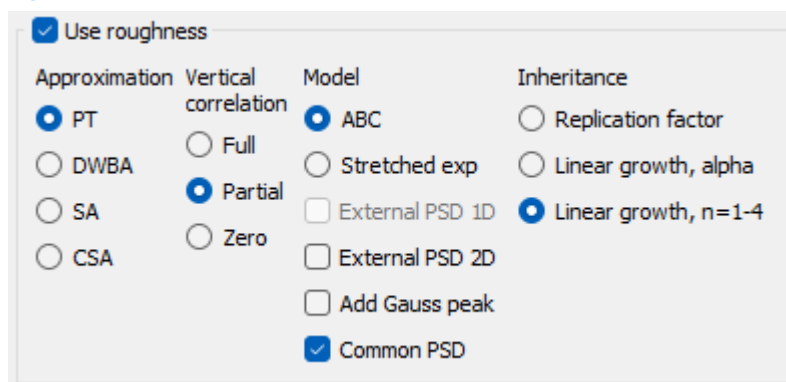


Рисунок 82. Блок «Use roughness»

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

«**Approximation**» определяет вид приближения, используемого при расчёте рассеяния. Для «**PT**» (Perturbation Theory) доступен наибольший выбор опций. Подробнее о приближениях можно прочитать в главе [Модели и методы](#).

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

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

«**Model**» определяет вид латеральной корреляционной функции.

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

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

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

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

4.3.2.3.4 Particles

The screenshot shows a configuration panel titled 'Use particles' with a checked checkbox. It contains four columns of settings:

Vertical correlation	Lateral order	Model	Particle shape
<input type="radio"/> Full	<input type="radio"/> Disorder	<input checked="" type="radio"/> Hexagonal	<input type="radio"/> Spheres
<input checked="" type="radio"/> Partial	<input checked="" type="radio"/> Radial paracrystal	<input type="radio"/> Square	<input checked="" type="radio"/> Spheroids
<input type="radio"/> Zero	<input type="checkbox"/> Specify material		<input type="radio"/> Cylinders
	<input checked="" type="checkbox"/> Common parameters for all layers		

Рисунок 83. Блок «**Use particles**»

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

«**Vertical correlation**» определяет наличие или отсутствие межслоевой корреляции частиц. Материал, геометрия частиц, вертикальное смещение являются индивидуальными для каждого слоя.

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

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

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

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

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

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

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

«**Particle shape**» устанавливает форму частиц. При изменении формы здесь частиц здесь, результат применяется ко всем слоям. В таблице можно установить форму частиц индивидуально для каждого слоя. Частицы однородны по объёму

- «**Spheres**» – частицы – сферы.

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

4.3.2.4 Шаг изменения параметров

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

Set increase/decrease steps								
	ρ	z/d [Å]	s [Å]	γ	interl			dz lin
	0.010	0.0100	0.010	0.0010000	0.100			0.0010

Рисунок 84. Шаг изменение значения параметров в нижележащей части таблицы

На заметку: При зажатой клавише Ctrl параметры меняются с шагом $\times 10$.

4.3.2.5 Параметры слоистой структуры

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

<input checked="" type="checkbox"/> Be layer (1)		Be		
		Browse		

<input checked="" type="checkbox"/> GaAl0.3As0.7 layer (2)		Ga ▾	Al ▾	As ▾
		1.000	0.300	0.700
		<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
		0.000	0.000	0.000
		1.000	1.000	1.000

Рисунок 85. Материалы слоёв

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

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

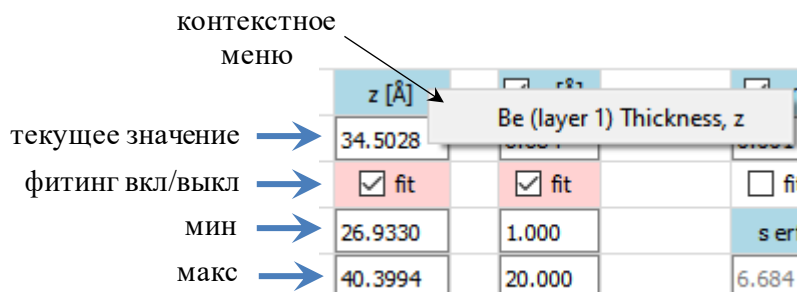


Рисунок 86. Блок полей для одного параметра

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

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

<input checked="" type="checkbox"/> dz sin : A*sin(2 π nv+ ϕ)		
1.0000	0.3433	0.3433
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
0.0000	0.1667	0.0000
0.0000	0.5000	1.0000

Рисунок 87. Параметр гармонической модуляции толщины слоя: величины A, ν , ϕ

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

<input type="checkbox"/> s [Å]	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input checked="" type="checkbox"/> lin
2.7386	0.300	0.700
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
1.0000	s erf	s lin
5.0000	2.0000	3.0000

Рисунок 88. Переключатель между единой толщиной переходной области и индивидуальной для каждой функции профиля

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



Рисунок 89. Управление частицами в слое

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

PSD 1D	PSD 2D
σ_z [Å]	σ_z [Å]
3.8707	0.0000
rf 1D	rf 2D
0.800	1.000

Рисунок 90. Внешняя 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.

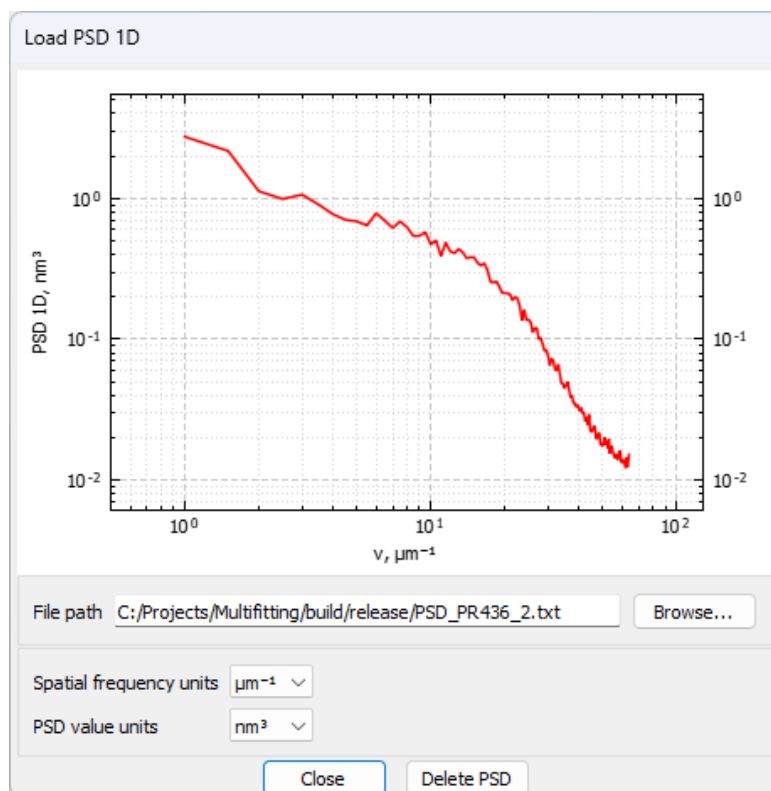


Рисунок 91. Загрузка одномерной PSD

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

4.3.2.5.1 Список параметров

Многослойка:

N	число периодов в многослойке
d [Å]	толщина периода
γ	отношение толщины верхнего слоя к периоду

Слой:

Al	химический элемент и его стехиометрический индекс
Si	материал (имя файла)
ρ [g/cm ³]	абсолютная плотность вещества
ρ [r.u.]	относительная плотность материала
z [Å]	толщина слоя
<input checked="" type="checkbox"/> s [Å]	среднеквадратическая толщина диффузного интерфейса

Функции профиля диффузного интерфейса:

<input checked="" type="checkbox"/> erf	функция ошибок <i>erf</i> и весовой коэффициент
<input checked="" type="checkbox"/> lin	линейный профиль <i>lin</i> и весовой коэффициент
<input checked="" type="checkbox"/> exp	экспоненциальный профиль <i>exp</i> и весовой коэффициент
<input checked="" type="checkbox"/> tanh	гиперболический тангенс <i>tanh</i> и весовой коэффициент
<input checked="" type="checkbox"/> sin	синусоидальный профиль <i>sin</i> и весовой коэффициент
<input checked="" type="checkbox"/> step	ступенчатый профиль <i>step</i> и весовой коэффициент
s erf	среднеквадратическая толщина <i>erf</i> профиля

<input type="checkbox"/> s lin	среднеквадратическая толщина <i>lin</i> профиля
<input type="checkbox"/> s exp	среднеквадратическая толщина <i>exp</i> профиля
<input type="checkbox"/> s tanh	среднеквадратическая толщина <i>tanh</i> профиля
<input type="checkbox"/> s sin	среднеквадратическая толщина <i>sin</i> профиля
<input type="checkbox"/> s step	среднеквадратическая толщина <i>step</i> профиля

Дрейф толщины слоя:

<input checked="" type="checkbox"/> dz lin	линейный дрейф толщины
<input checked="" type="checkbox"/> dz ran	случайные флуктуации толщины
<input checked="" type="checkbox"/> dz sin : $A \cdot \sin(2\pi n v + \varphi)$	синусоидальная модуляция толщины

Дрейф толщины диффузного интерфейса:

<input checked="" type="checkbox"/> ds lin	линейный дрейф толщины интерфейса
<input checked="" type="checkbox"/> ds ran	случайные флуктуации толщины интерфейса
<input checked="" type="checkbox"/> ds sin : $A \cdot \sin(2\pi n v + \varphi)$	синусоидальная модуляция толщины интерфейса

Шероховатость:

σ [Å]	среднеквадратическая высота
ξ [μm]	корреляционный радиус
α	фрактальный параметр
σ_v [Å]	среднеквадратическая высота пика шероховатости
v [μm ⁻¹]	центральная пространственная частота пика шероховатости
δv [μm ⁻¹]	ширина пика шероховатости по пространственной частоте
L_v [Å]	глубина корреляции на базовой частоте

ν_0 [μm^{-1}]	базовая частота для глубины корреляции
β	показатель частотной экспоненты в факторе корреляции PSD
Ω [\AA^3]	объём частицы в модели линейного роста
a_1	коэффициент при первой степени частоты в модели линейного роста
a_2 [nm]	коэффициент при второй степени частоты в модели линейного роста
a_3 [nm^2]	коэффициент при третьей степени частоты в модели линейного роста
a_4 [nm^3]	коэффициент при четвёртой степени частоты в модели линейного роста
rf 1D	«roughness factor», коэффициент при загруженной одномерной внешней PSD
rf 2D	«roughness factor», коэффициент при загруженной двумерной внешней PSD

Частицы:

ρ_o [g/cm^3]	абсолютная плотность вещества частицы
ρ_o [r.u.]	относительная плотность материала частицы
R [\AA]	латеральный радиус частицы
H [\AA]	высота частицы
r [\AA]	среднее расстояние между частицами
δr [\AA]	вариация расстояния между частицами
D [μm]	размер домена – области корреляции частиц
Δ [\AA]	случайный сдвиг частиц в слое относительно соседнего слоя
z_o [\AA]	вертикальный сдвиг всех частиц относительно центра слоя
δz_o [\AA]	случайный разброс частиц в слое по вертикали

4.3.2.6 Coupling editor

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

<D364> Al (layer 2) Thickness, z

☐ Calculate confidence interval

5 points, from 10.0000 to 30.0000 Å step size 5.0000 Å

Master

<D364> W (layer 1) Thickness, z Clear

Slaves

<D364> Be (layer 3) Thickness, z Clear Add

<D364> Mo (layer 4) Thickness, z Clear Add

Close

Рисунок 92. Окно «Coupling editor»

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

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

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

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

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

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

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

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

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

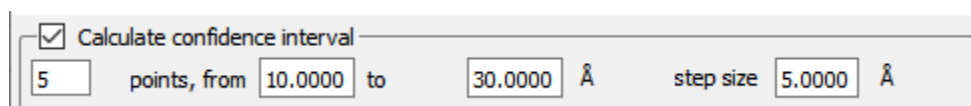


Рисунок 93. Настройка сетки для доверительного интервала

4.3.2.7 Элементы слоистой структуры

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

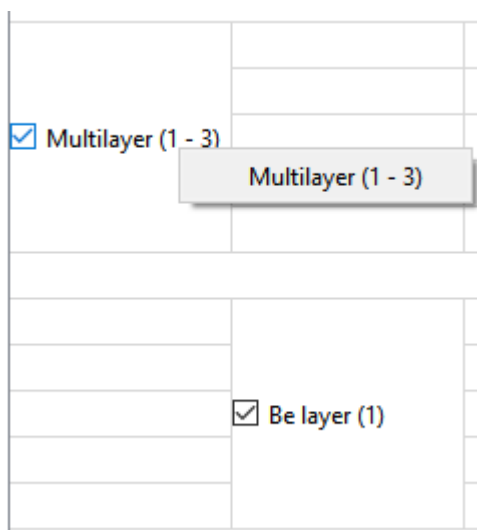


Рисунок 94. Элементы структуры с возможностью отключения

4.3.2.8 Перераспределение толщин слоёв внутри периода

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

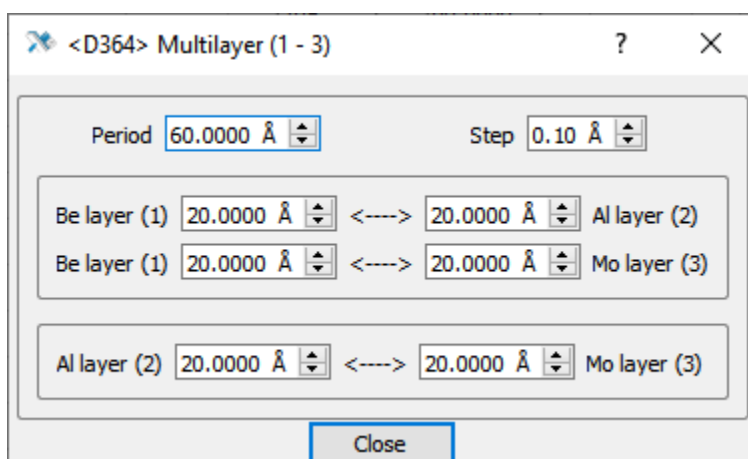


Рисунок 95. Перераспределение толщины между слоями периодической структуры

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

4.3.3 Regular aperiodic

Создание регулярной аперииодики описано в разделе [Задание слоистой структуры](#). В составе регулярной аперииодики может находиться целое число элементарных ячеек, как в периодической структуре. Слои одного типа могут иметь различающиеся толщины и различающиеся переходные области. В связи с этим у слоёв возникают новые параметры и условия: возможность установить всем слоям данного типа одинаковую толщину (галочка «common z») и одинаковую переходную область (галочка «common s»). Также при оптимизации аперииодического стека

можно наложить «мягкое» ограничение на разброс толщин слоёв. Если толщина какого-то слоя отличается от среднего значения толщины этого типа слоёв в структуре на величину больше Δ , то к невязке добавляется величина $Q \times (|z - \langle z \rangle| - \Delta)^p$. Таким образом, величину разброса и необходимость укладываться в эту величину можно менять в широких пределах в зависимости от практических ограничений по синтезу многослойного зеркала. И конечно, абсолютные значения толщин также ограничены минимумом и максимумом, указанным для слоя в основной таблице.

<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input checked="" type="checkbox"/> lin	<input type="checkbox"/> exp	<input type="checkbox"/> tanh	<input type="checkbox"/> sin	<input type="checkbox"/> step
0.004	0.996	0.001	0.001	0.695	0.081
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
<input checked="" type="checkbox"/> common z		<input checked="" type="checkbox"/> restrict z: { $\pm\Delta$, p, Q}			
<input checked="" type="checkbox"/> common s		$\pm 0\%$	p = 2	Q = 0.00000000	

Рисунок 96. Особые параметры регулярной аперииодики

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

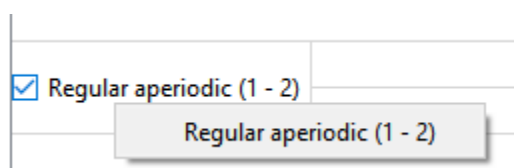


Рисунок 97. Контекстное меню регулярной аперииодики

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

Regular aperiodic (1 - 2)

File Length units Precision

common s		common z		active fit	common z and s
<input checked="" type="checkbox"/> Mouse wheel		z step		s step	
<input checked="" type="checkbox"/> Recalculate	0.10 Å			0.10 Å	
Cell #	Material	z [Å]	Fit z	s [Å]	ρ
1	1 Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
2	1 Mo	39.3360	<input type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
3	2 Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
4	2 Mo	39.3360	<input type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
5	3 Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
6	3 Mo	39.3360	<input type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
7	4 Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
8	4 Mo	39.3360	<input type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
9	5 Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]
10	5 Mo	39.3360	<input type="checkbox"/>	0.000	1.000 [r.u.]

Close

Рисунок 98. Таблица слоёв регулярной аперииодики

4.4 Profile plot

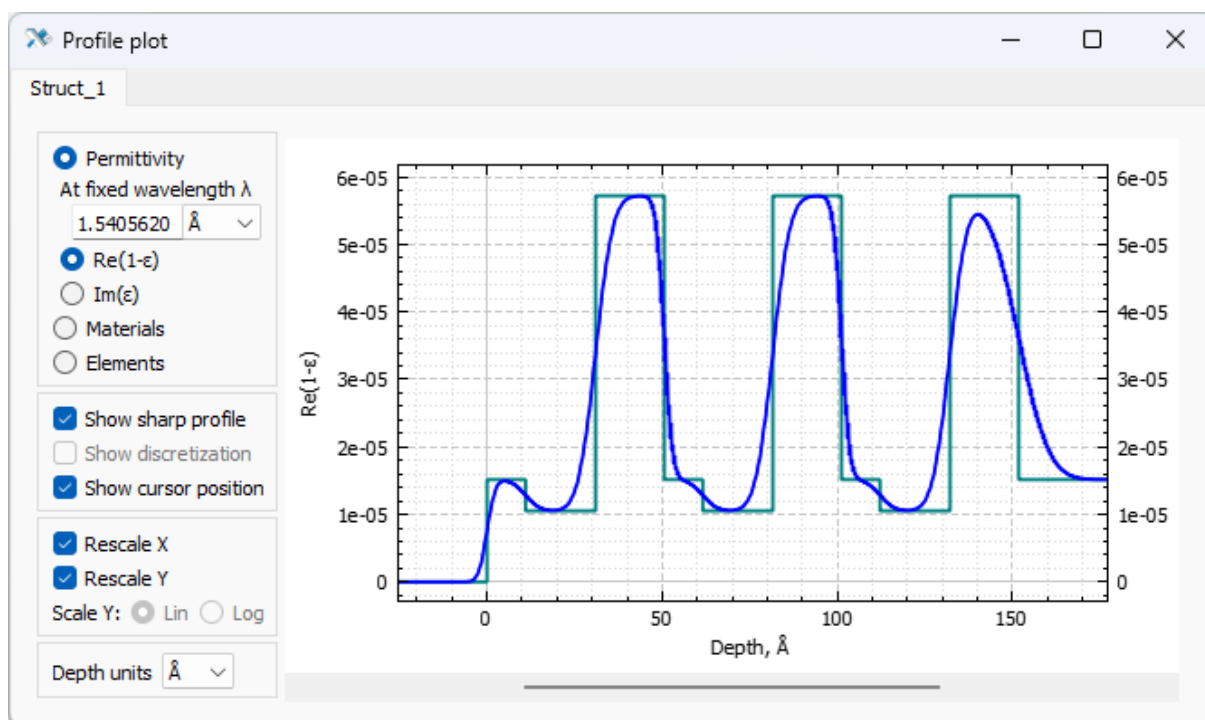


Рисунок 99. Профиль действительной части диэлектрической проницаемости

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

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

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

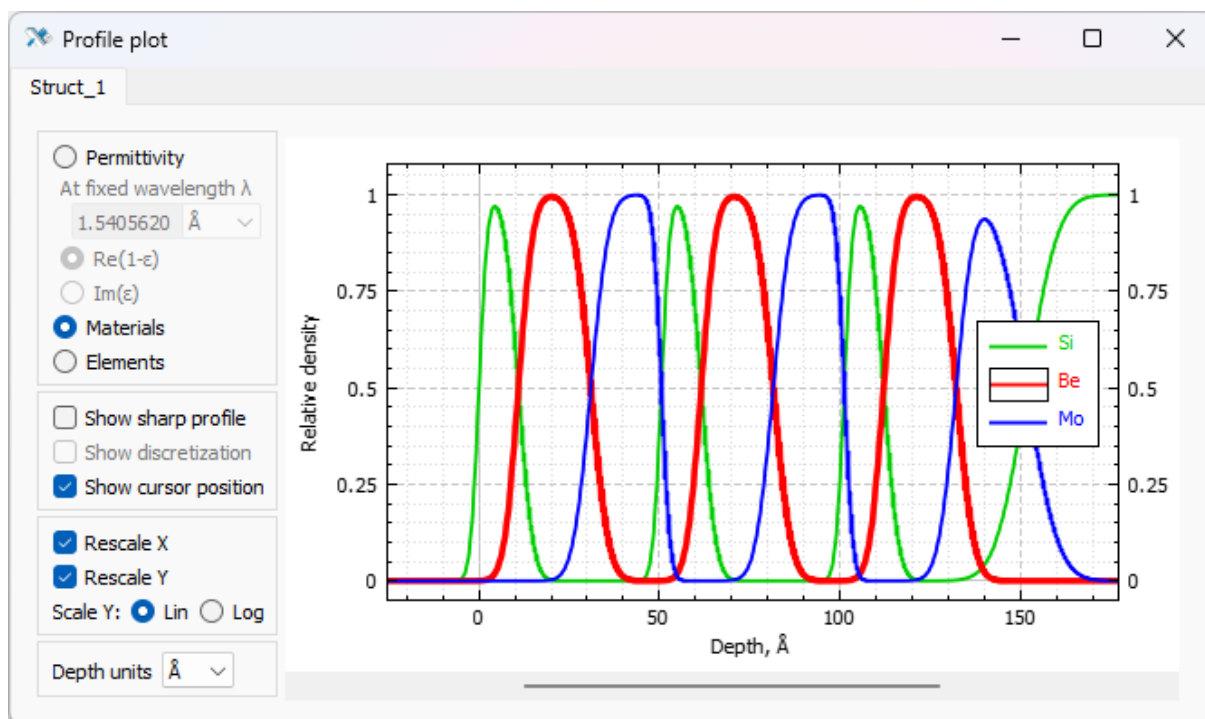


Рисунок 100. Распределение материалов в структуре

При выборе «**Materials**» по вертикальной оси будет откладываться относительная плотность каждого материала. Она зависит от плотности, заданной в таблице, и от размазывания материала по соседним слоям. При выборе «**Elements**» по вертикальной оси будет абсолютная концентрация атомов на 1 см^3 . Она зависит не только от параметров структуры, но и от внутренних свойств элемента.

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

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

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

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

4.5 1D graphs

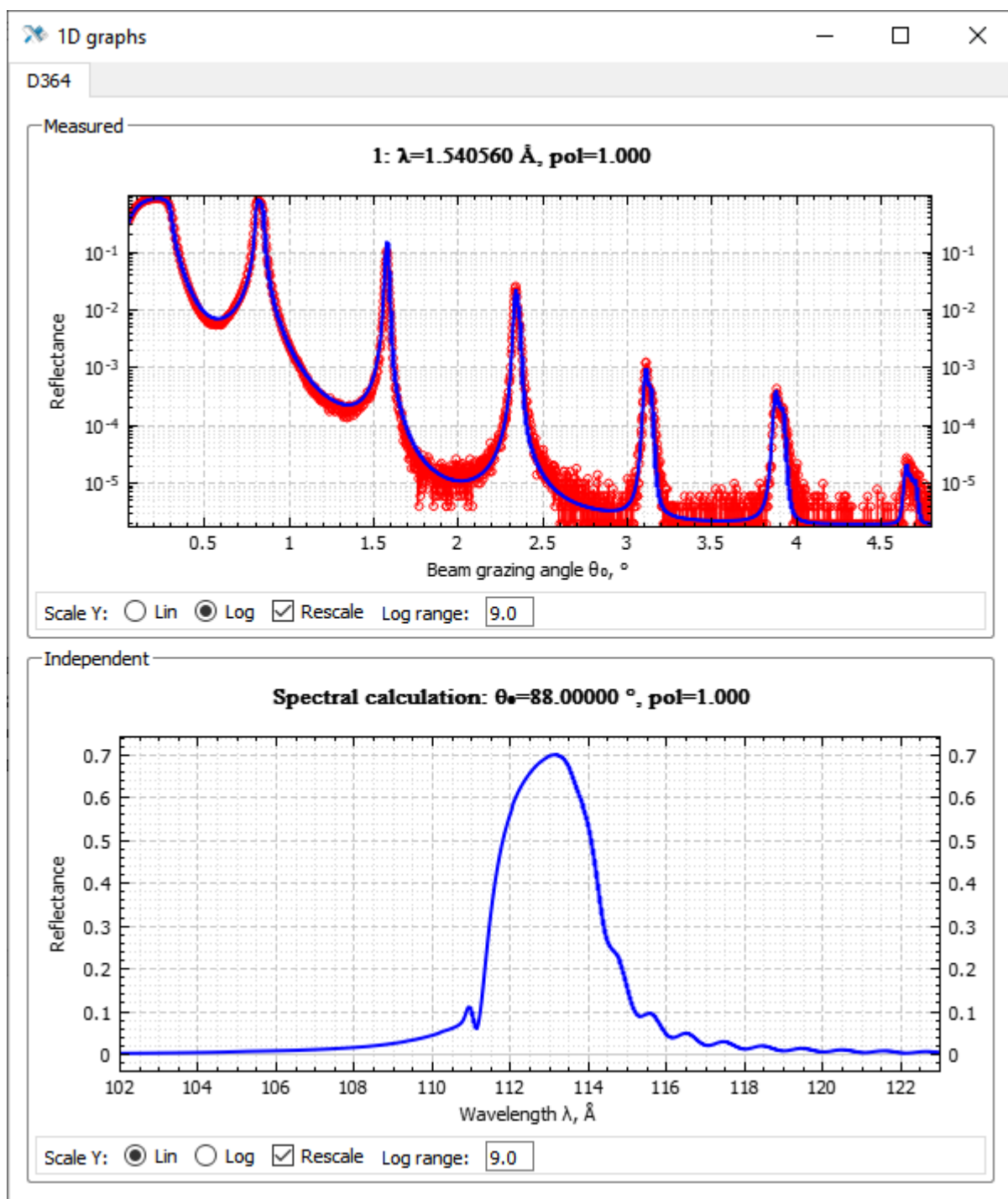


Рисунок 101. Окно «1D graphs»: расчёт по экспериментальной сетке и независимый расчёт

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

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

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

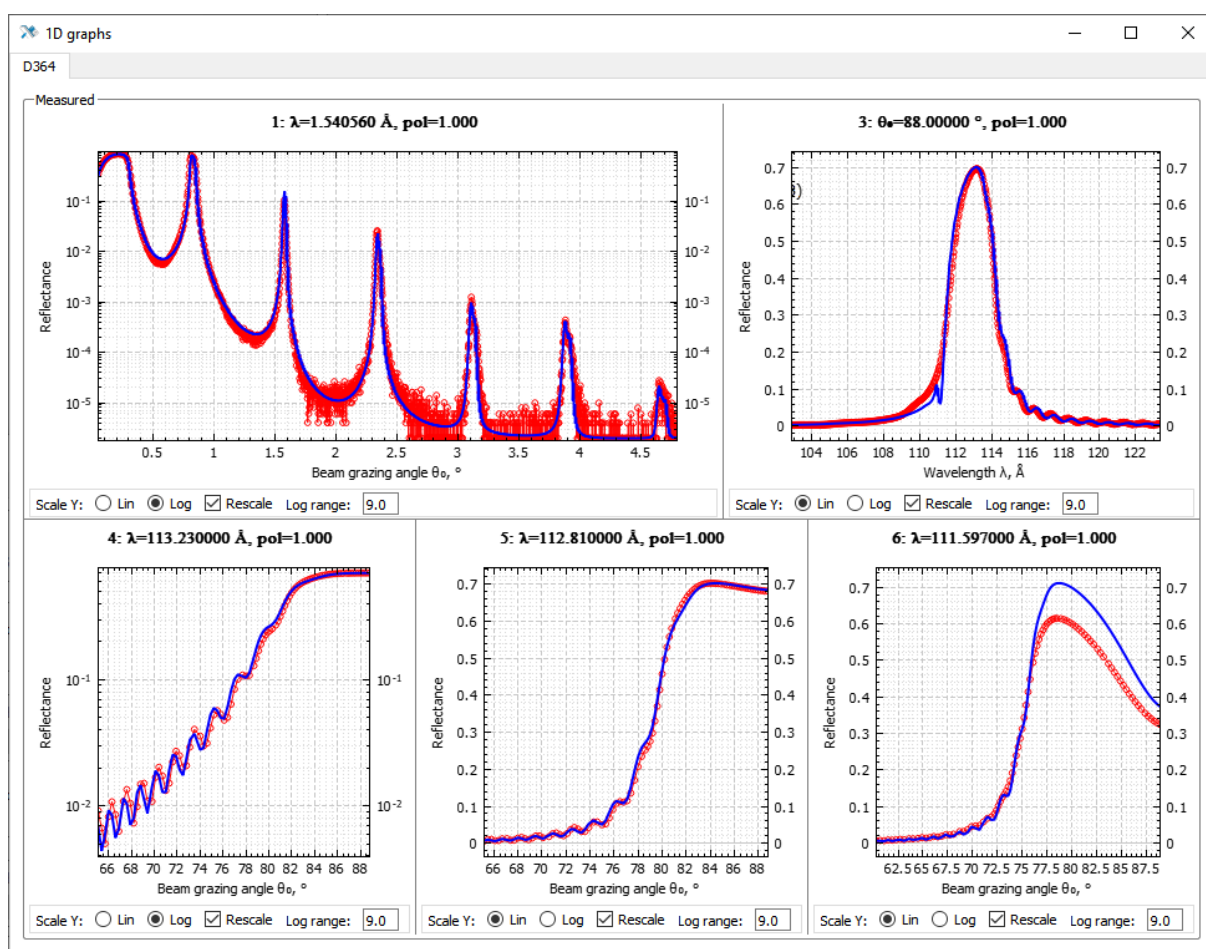


Рисунок 102. Расположение нескольких кривых в секции

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

4.5.1 Настройки

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

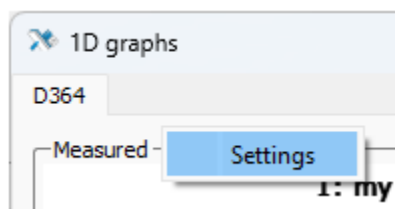


Рисунок 103. Контекстное меню «1D graphs»

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

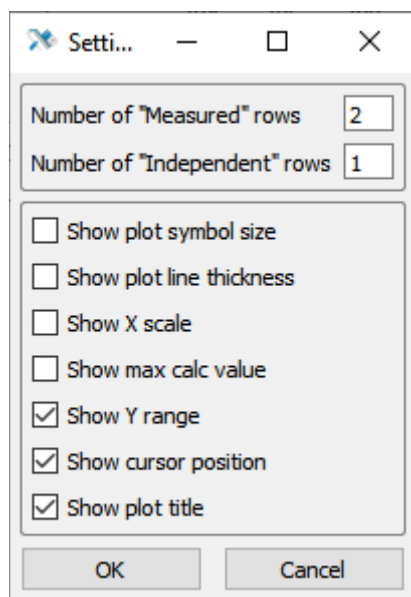


Рисунок 104. Настройки окна «1D graphs»

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

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

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

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

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

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

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

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

«**Show cursor position**» показывает координаты курсора на графике.

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

4.5.2 Настройка цвета кривой

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

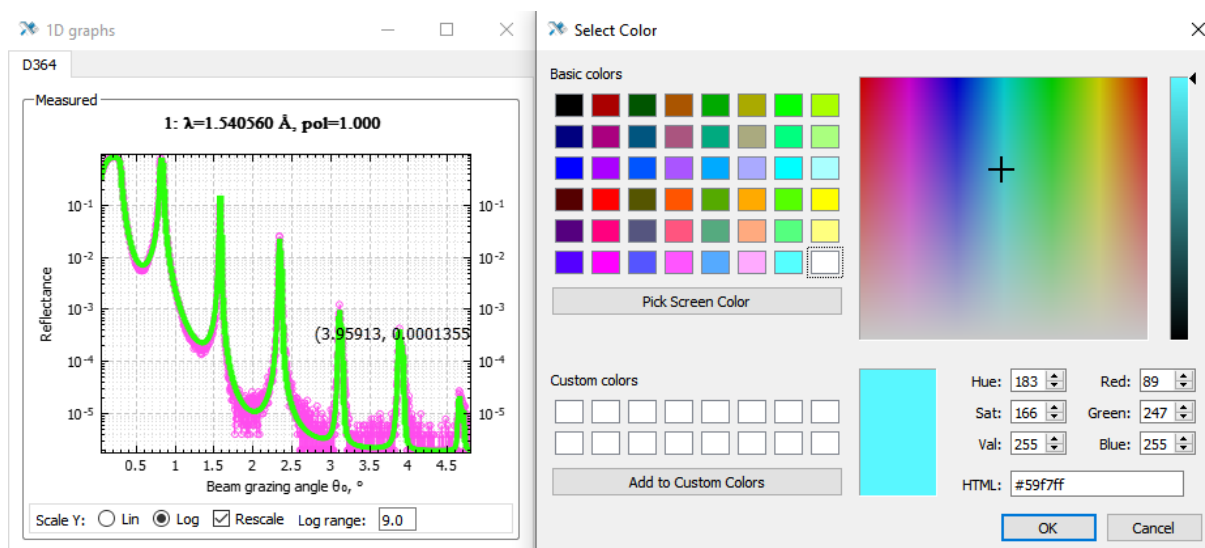


Рисунок 105. Изменение цвета кривой двойным кликом

4.5.3 Дополнительные кривые

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

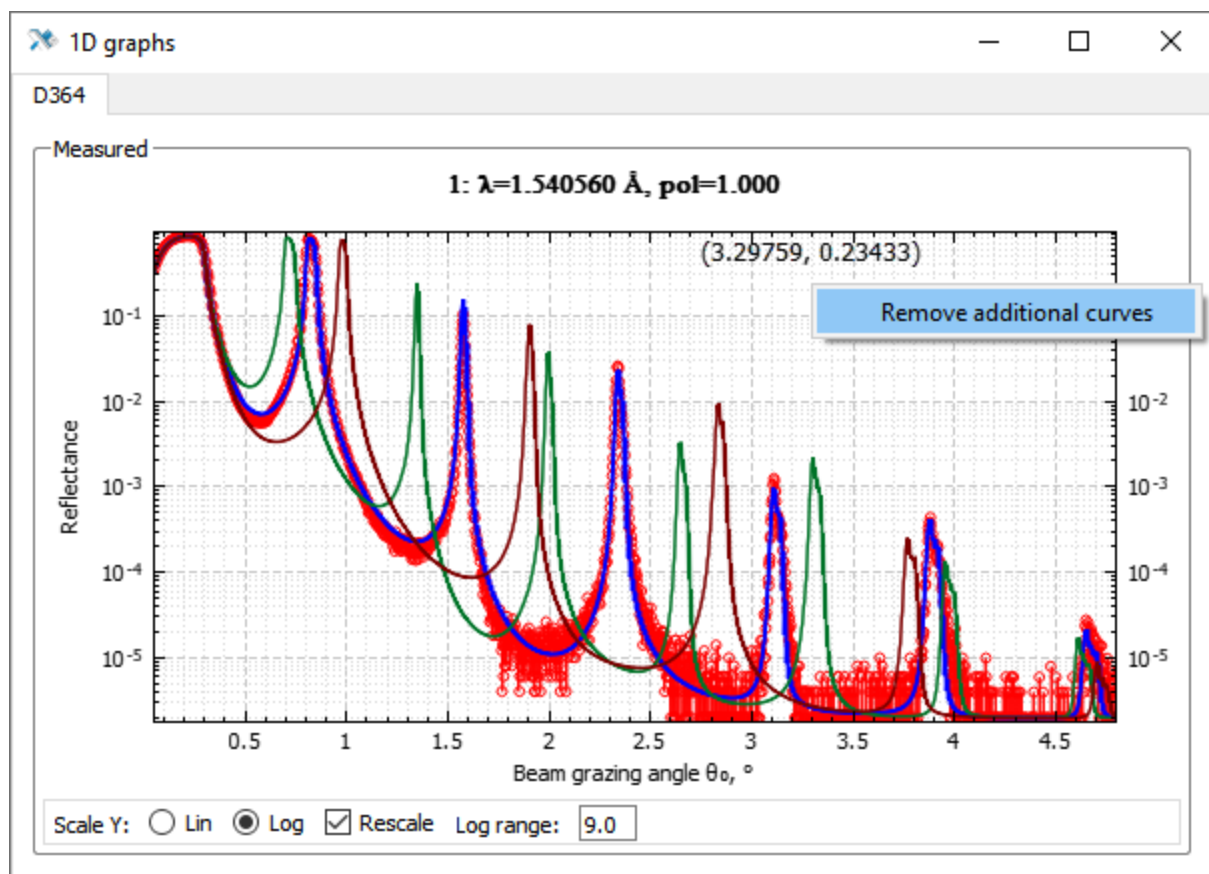


Рисунок 106. Дополнительные кривые на графике

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

4.6 2D graphs

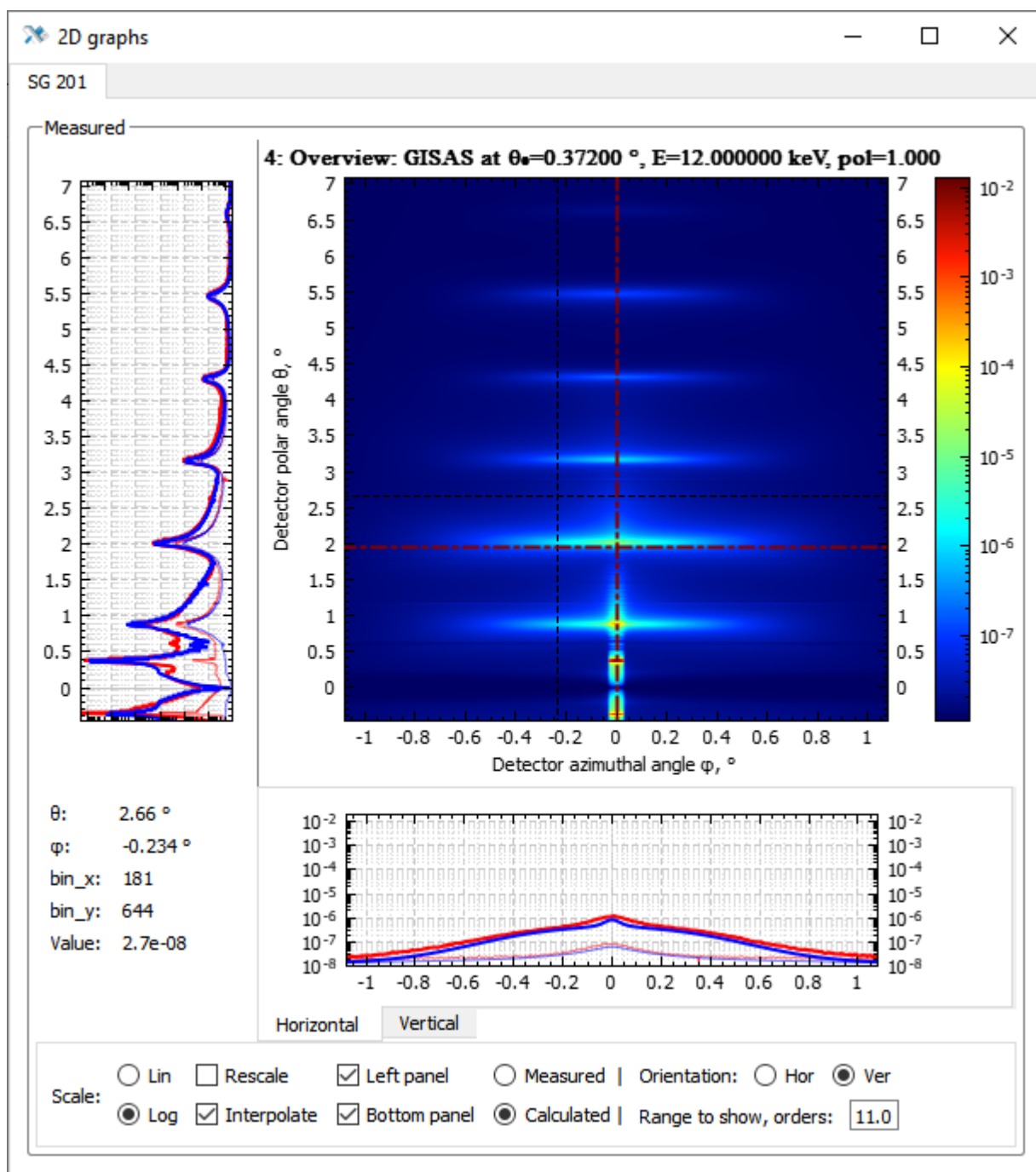


Рисунок 107. GISAXS: измерение и расчёт

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

4.6.1 Настройки

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

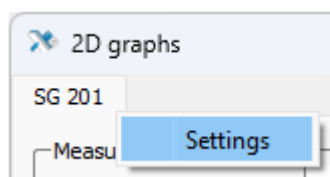


Рисунок 108. Контекстное меню «2D graphs»

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

«**Show value near cursor**» показывает значение возле курсора.

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

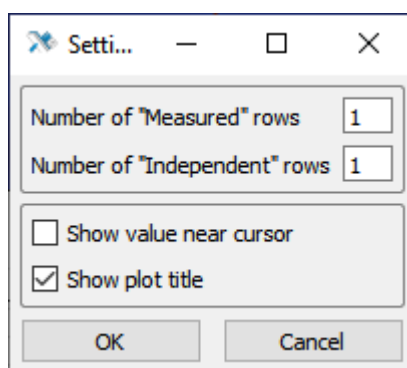


Рисунок 109. Настройки окна «2D graphs»

Все остальные органы управления расположены на панели под каждым графиком.

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

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

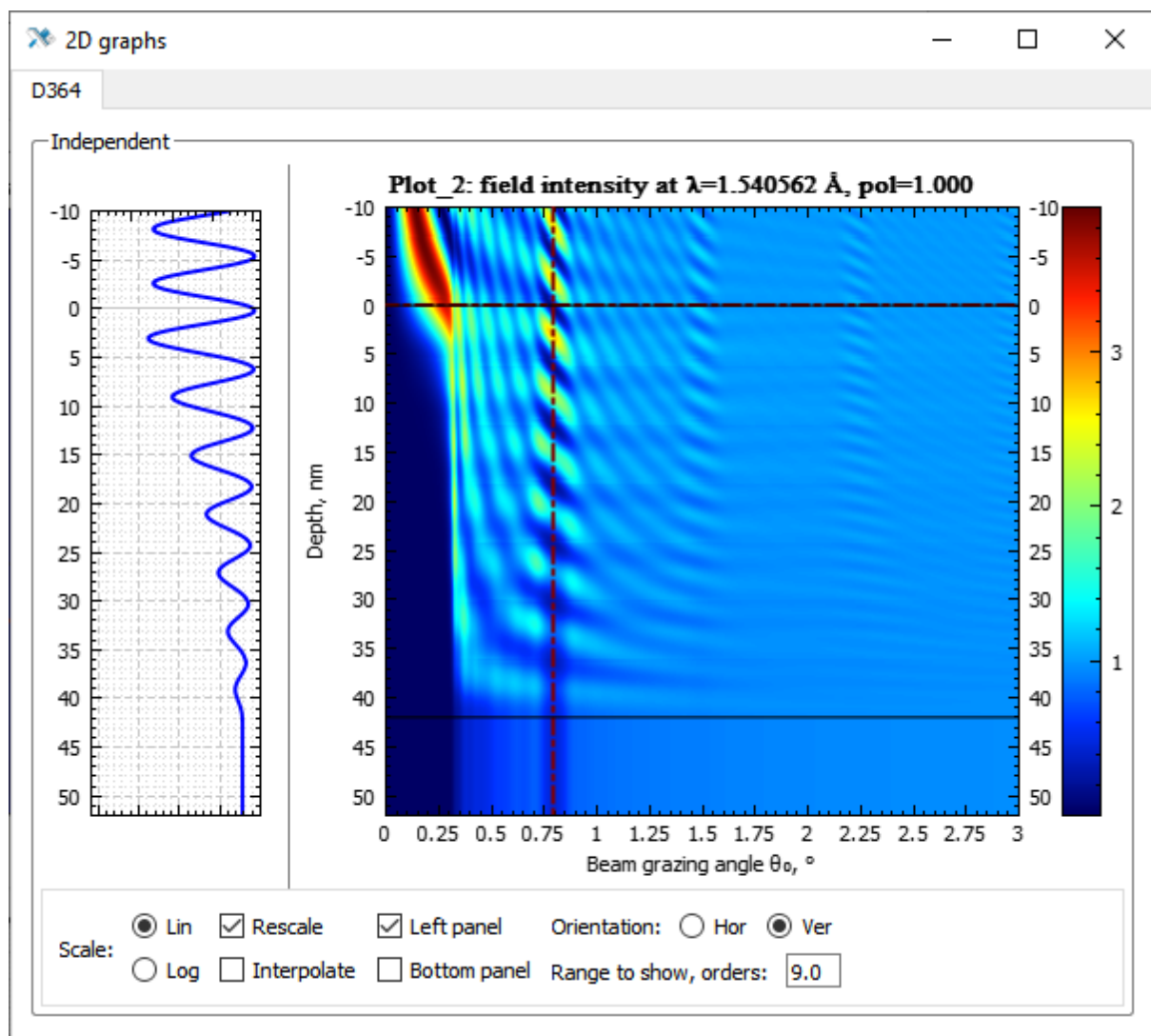


Рисунок 110. Интенсивность поля в структуре

Органы управления стоит рассмотреть подробнее. Некоторые из них полностью аналогичны таковым для одномерных графиков:

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

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

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

Другие специфичны именно для двумерных карт:

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

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

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

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

4.6.2 Настройка цветовой схемы

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

Перетащите цветовую шкалу
вверх или вниз для подстройки
диапазона значений

Колесом мыши можно
расширить или сузить диапазон
отображаемых значений

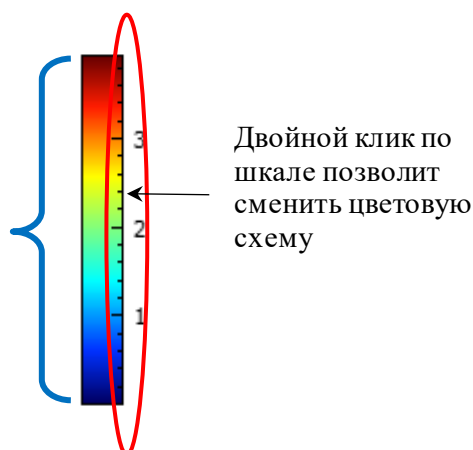


Рисунок 111. Работа со шкалой значений

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

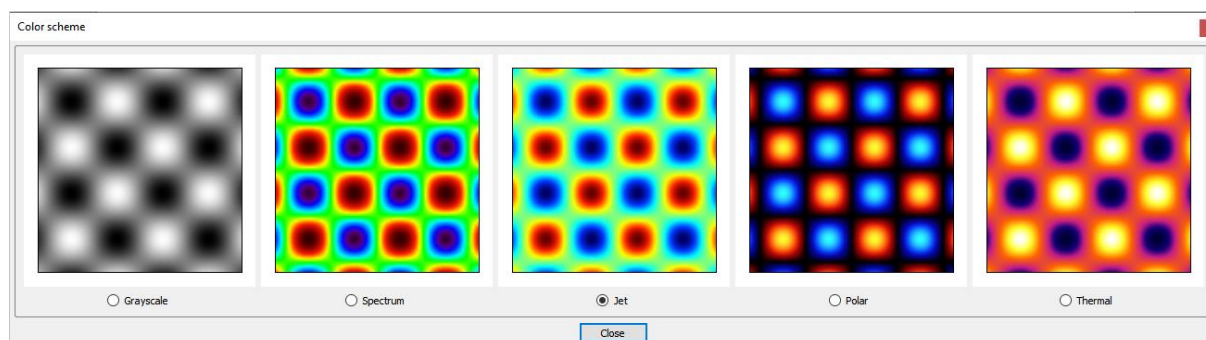


Рисунок 112. Смена цветовой схемы

4.7 Roughness spectrum

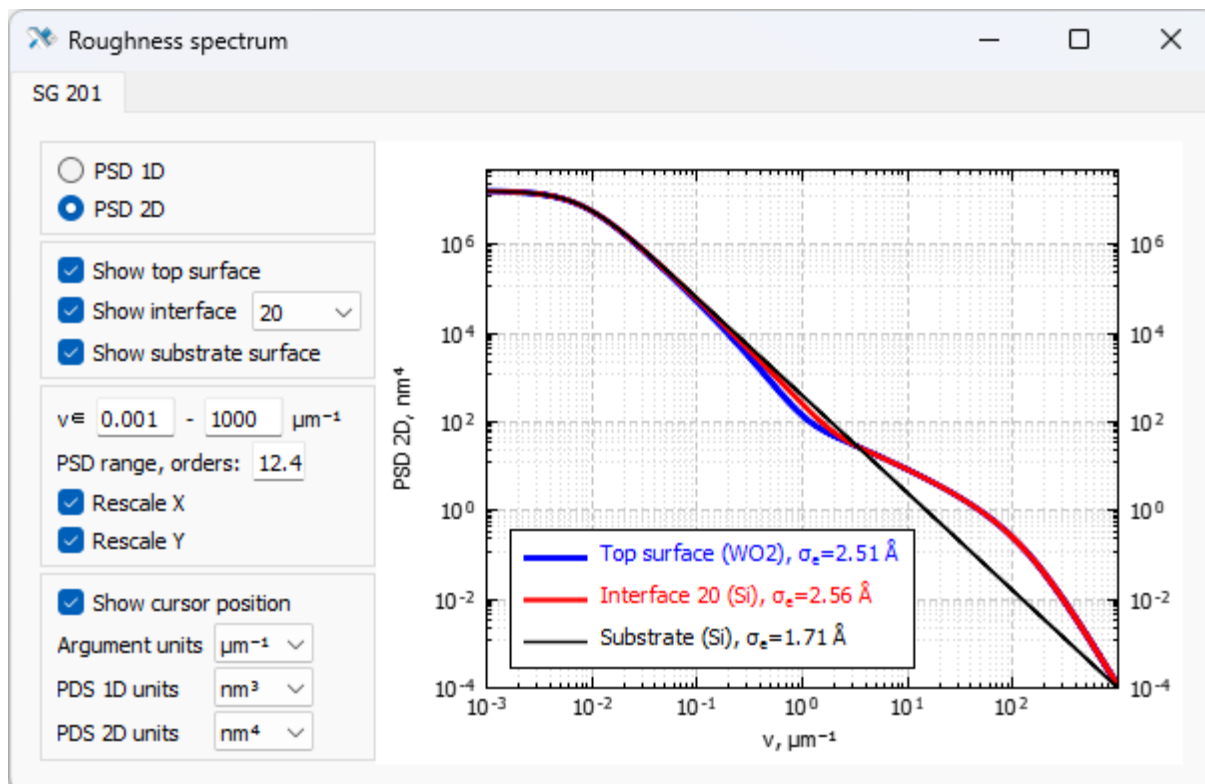


Рисунок 113. PSD шероховатостей на интерфейсах

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

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

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

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

Третий блок содержит настройки масштабирования. Опции «**Rescale X**» и «**Rescale Y**» указывают на автоматическое масштабирование по соответствующим осям при перевычислении

кривых или при изменении структуры. Оси имеют только логарифмический масштаб. Для вертикальной оси можно указать динамический диапазон – «**PSD range**», а для горизонтальной оси – минимальное и максимальное значение пространственной частоты ν .

В последнем блоке можно указать единицы аргумента и отдельно единицы PSD_{1D} и PSD_{2D} . Опция «**Show cursor position**» показывает численные координаты курсора на графике. Единицы эффективной шероховатости соответствуют единицам длины в «**Structure table**» (ангстремы или нанометры).

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

4.8 Particles spectrum

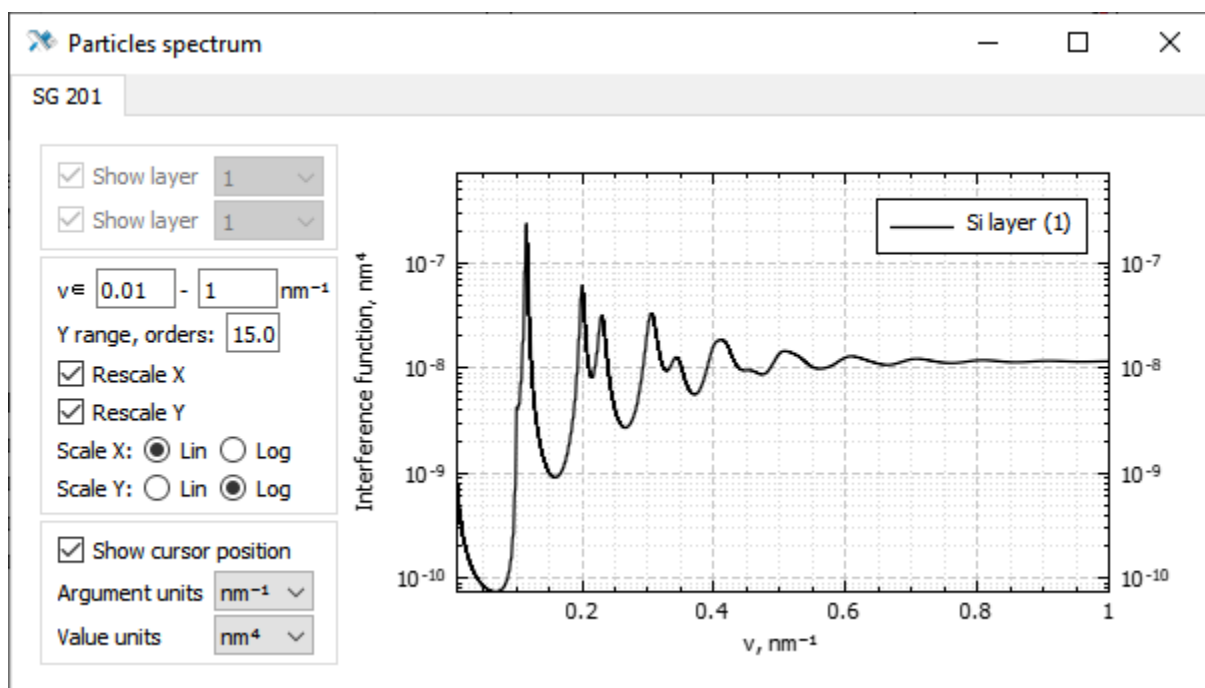


Рисунок 1 14. Интерференционная функция частиц

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

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

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

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

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

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

4.9 Calculation settings

Calculation Settings

SG 201

☒ Profile discretization
Discretization step: 2.00 Å

Roughness
Max spatial frequency: 1.00 nm⁻¹
Num terms for DWBA/SA/CSA: 5

☒ Measured

☒ Reflectance; $\theta_0=0.010-3.990^\circ$; at $\lambda=1.541 \text{ \AA}$
☒ Fit
Weight: 1
☒ Divide by N
Function: $\log(R+1E-5)$
Mesh density factor: 1 Shift: 0.50
☐ Adjust scale factor
☐ Maximize integral
Power: 2.0 ☐ Use χ^2

☒ Reflectance; $\theta_0=4.750-6.751^\circ$; at $\lambda=9.850 \text{ \AA}$
☒ Fit
Weight: 10
☒ Divide by N
Function: $\log(R+1E-5)$
Mesh density factor: 1 Shift: 0.50
☐ Adjust scale factor
☐ Maximize integral
Power: 2.0 ☐ Use χ^2

☒ Reflectance; $\theta_0=8.801-11.801^\circ$; at $\lambda=17.640 \text{ \AA}$
☒ Fit
Weight: 10
☒ Divide by N
Function: $\log(R+1E-5)$
Mesh density factor: 1 Shift: 0.50
☐ Adjust scale factor
☐ Maximize integral
Power: 2.0 ☐ Use χ^2

☒ GISAS map; $\theta=-0.464-7.08^\circ$; $\varphi=-1.08-1.08^\circ$; at $E=12.000 \text{ keV}$ and $\theta_0=0.372$
☒ Fit
Weight: 10
☒ Divide by N
Function: $\log(R+6E-9)$
☒ Adjust scale factor
☐ Maximize integral
Power: 2.0 ☐ Use χ^2
☒ Instrumental smoothing
☒ Add specular peak
☐ Integrate PSD in detector

☐ GISAS map; $\theta=-0.717-3.515^\circ$; $\varphi=-0.65-0.65^\circ$; at $E=12.000 \text{ keV}$ and $\theta_0=0.370$
☒ Fit
Weight: 1
☒ Divide by N
Function: $\log(R+1E-5)$
☐ Adjust scale factor
☐ Maximize integral
Power: 2.0 ☐ Use χ^2
☒ Instrumental smoothing
☒ Add specular peak
☐ Integrate PSD in detector

☒ Independent

☒ Plot_1
☒ Reflectance ☐ Transmittance ☐ Absorptance
☐ Field intensity ☐ Absorption map

☒ Plot_2
Scattering (Detector scan)
☐ Apply instrumental smoothing
☐ Integrate PSD in detector
☐ Add specular peak

Рисунок 115. Окно «**Calculation settings**»

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

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

4.9.1 Параметры модели структуры

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



The image shows a software interface with two panels. The left panel, titled 'Profile discretization', contains a checked checkbox and a text input field labeled 'Discretization step' with the value '2.00' and a unit 'Å'. The right panel, titled 'Roughness', contains two text input fields: 'Max spatial frequency' with the value '1.00' and unit 'nm⁻¹', and 'Num terms for DWBA/SA/CSA' with the value '5'.

Рисунок 116. Дополнительные параметры модели для вычислений

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

В блоке «**Roughness**» задаются два параметра. «**Max spatial frequency**» – это ограничение сверху на пространственную частоту шероховатостей. Её следует задавать из общефизических соображений или из внешних данных о высокочастотной части спектра шероховатостей. Это ограничение нужно, чтобы при в моделях с медленно спадающей PSD в область высоких частот интеграл по частотам сходился. При расчётах будет считаться, что $PSD(\nu > \nu_{\max}) = 0$. «**Num terms for DWBA/SA/CSA**» – это количество членов ряда по степеням корреляционной функции, которое учитывается при использовании соответствующего приближения. Само приближение выбирается в «**Structure table**», окно «**Set imperfections model**».

4.9.2 Настройки окна

Расположение блоков внутри каждой секции также можно настроить. Для этого в любой свободной области окна нужно вызвать правой кнопкой мыши контекстное меню и выбрать

единственный пункт «**Settings**». В открывшемся окне указать количество строк в секциях «**Measured**» и «**Independent**».

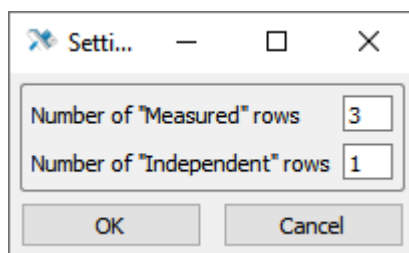


Рисунок 117. Настройки окна «**Calculation settings**»

4.9.3 Зеркальная кривая с экспериментальной сеткой

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

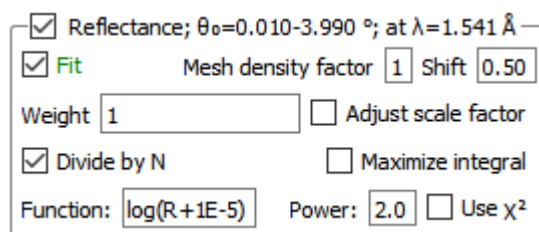


Рисунок 118. Параметры вычисления экспериментальной кривой отражения

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

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

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

«**Mesh density factor**» – опция, позволяющая уменьшить муаровый эффект на расчётной кривой. Он может возникнуть если частота интерференционных осцилляций будет значительно выше, чем плотность точек на экспериментальной сетке, но не кратна ей. Тогда на расчётной кривой наблюдаются «медленные» осцилляции, значительно искажающие реальный характер кривой. Для устранения эффекта количество и плотность точек для расчёта увеличивается в указанное число раз, кривая рассчитывается, применяется инструментальная функция и только после этого

результат проецируется на исходную сетку. Параметр «Shift», изменяемый от 0 до 1, позволяет ставить дополнительные точки между исходными точками сетки не эквидистантно, а со сдвигом на соответствующую долю шага. На рисунке ниже схематически показана расстановка точек уплотнённой сетки при «Mesh density factor» = 3 и «Shift» > 0

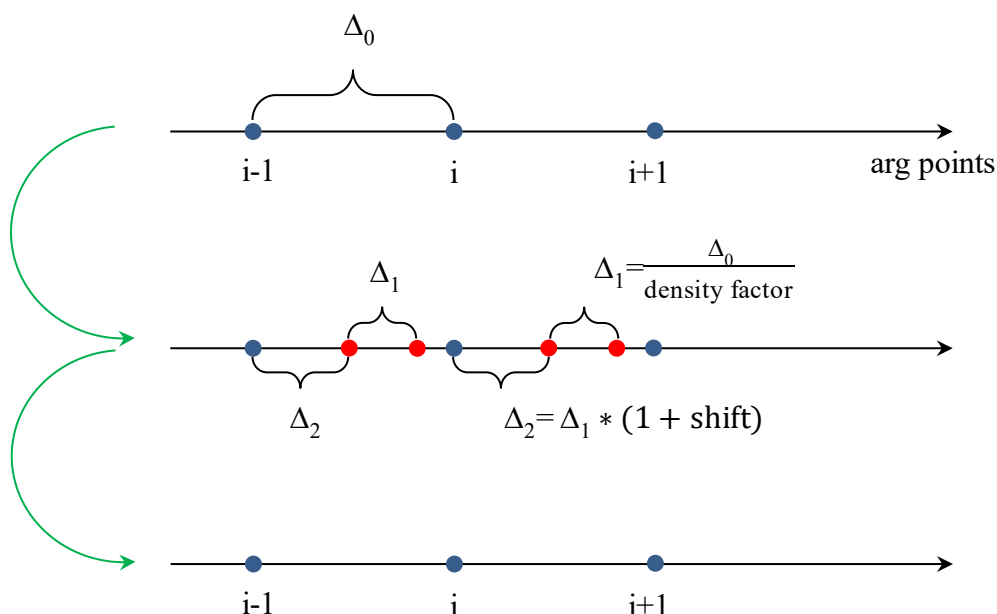


Рисунок 119. Способ расстановки дополнительных точек в уплотнённой сетке

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

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

«Function» и «Power» – задают вид пользовательской функции невязки, которая в общем виде устроена так:
$$residual = \sum_i |f(calc_value_i) - f(meas_value_i)|^{power}$$
. Соответственно,

функция задаётся в виде математического выражения от аргумента R (хотя речь идёт не только об отражении, но и прохождении и рассеянии). Для интерпретации формулы используется библиотека ExprTk (<https://www.partow.net/programming/exprtk/>). В частности, могут быть использованы

- Математические операторы (+, -, *, /, %, ^)
- Функции (min, max, avg, sum, abs, ceil, floor, round, roundn, exp, log, log10, logn, pow, root, sqrt, clamp, inrange, swap)

- Тригонометрические функции (*sin, cos, tan, acos, asin, atan, atan2, cosh, cot, csc, sec, sinh, tanh, d2r, r2d, d2g, g2d, hyp*)

«Use χ^2 » – переключает между невязкой, описанной в предыдущем абзаце и невязкой вида

$$residual = \frac{beam_counts_per_s}{N - p} \sum_{i=1}^N \left(\frac{calc_value_i - meas_value_i}{calc_value_i} \right)^2, \text{ где } N - \text{число точек, } p$$

– число подгоночных параметров, а *beam_counts_per_s* – интенсивность зондирующего пучка, влияющая на зашумлённость и, соответственно, надёжность итогового сигнала.

4.9.4 Независимая зеркальная кривая

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

Рисунок 120. Настройки «независимого» зеркального скана

При выборе полевой функции открываются дополнительные опции.

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

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

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

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

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

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

4.9.5 Рассеяние

Для рассеяния есть дополнительные параметры, помимо перечисленных.

☒ GISAS map; $\theta = -0.464-7.08^\circ$; $\varphi = -1.08-1.08^\circ$; at $E = 12.000$ keV and $\theta_0 = 0.372^\circ$

☒ Fit

Weight:

☒ Divide by N

Function:

☒ Instrumental smoothing

☐ Integrate PSD in detector

☒ Adjust scale factor

☐ Maximize integral

Power: ☐ Use χ^2

☒ Add specular peak

Рисунок 121. Параметры вычисления экспериментальной кривой рассеяния

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

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

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

4.10 General settings

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

4.10.1 Input/Output

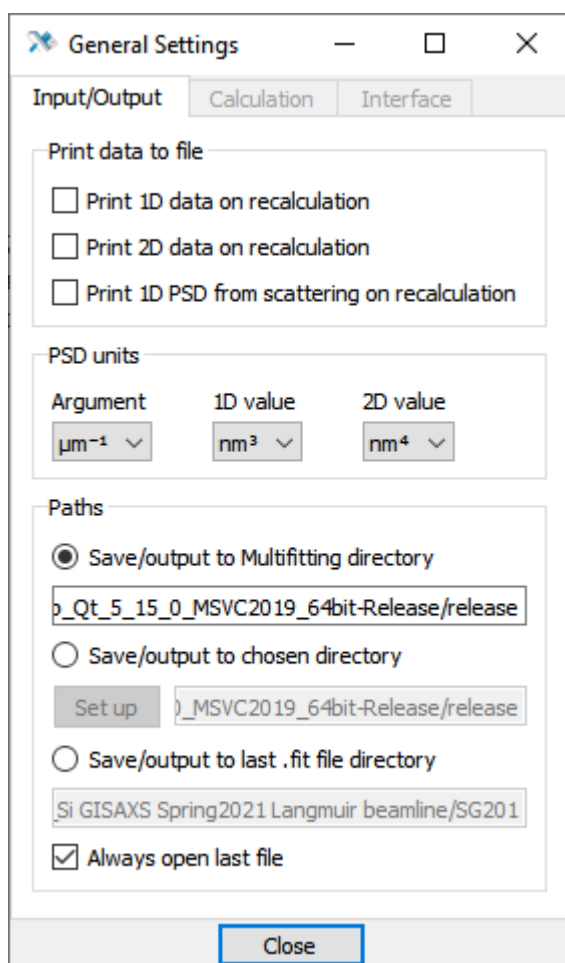


Рисунок 122. Вкладка «Input/Output»

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

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

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

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

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

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

«Save/output to last .fit file directory» – рабочая директория не является постоянной, сохранение идёт в директорию, в которой лежит последний загруженный файл проекта.

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

4.10.2 Calculation

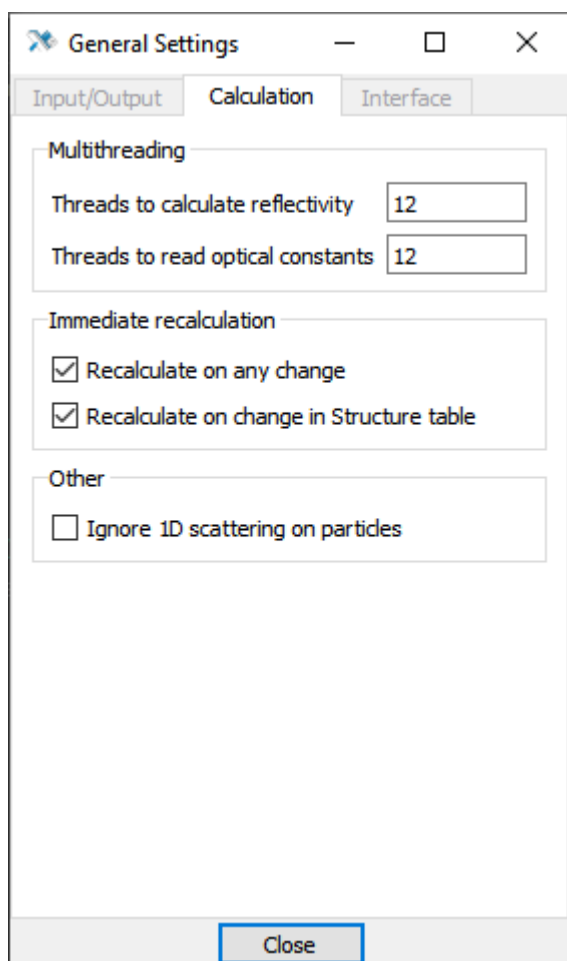


Рисунок 123. Вкладка «Calculation»

Здесь находятся настройки глобальных параметров вычисления.

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

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

Второй блок касается реакции Multifitting на изменение параметров.

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

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

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

4.10.3 Interface

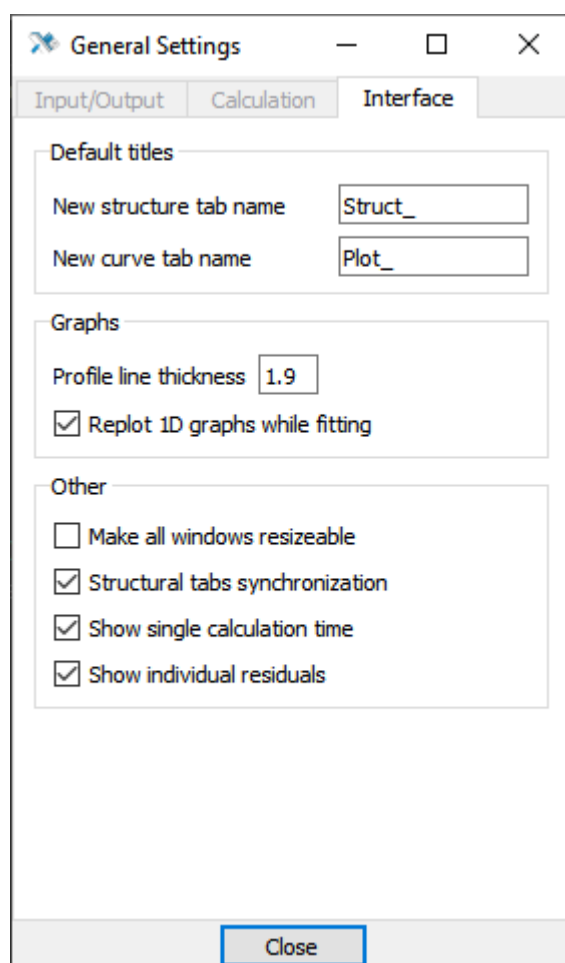


Рисунок 124. Вкладка «**Interface**»

Здесь находятся некоторые настройки внешнего вида и поведения окон.

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

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

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

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

Оставшиеся пункты:

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

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

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

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

4.11 Fitting settings

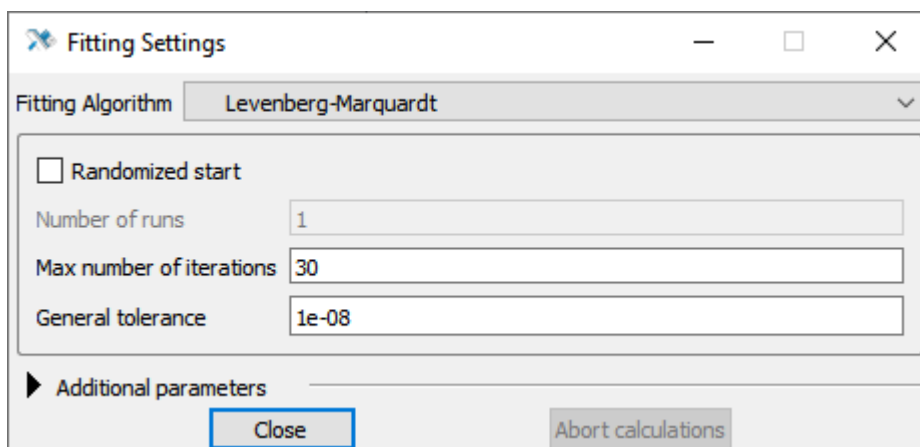


Рисунок 125. Окно «**Fitting settings**»

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

Алгоритм выбирается из выпадающего списка. Две основные группы алгоритмов выделены по библиотекам, из которых они взяты. Из библиотеки GSL (GNU Scientific Library) задействованы градиентные алгоритмы, из библиотеки SwarmOps – преимущественно стохастические. Подробно сами алгоритмы и их внутренние параметры описаны в разделе «[Оптимизация и подгонка](#)».

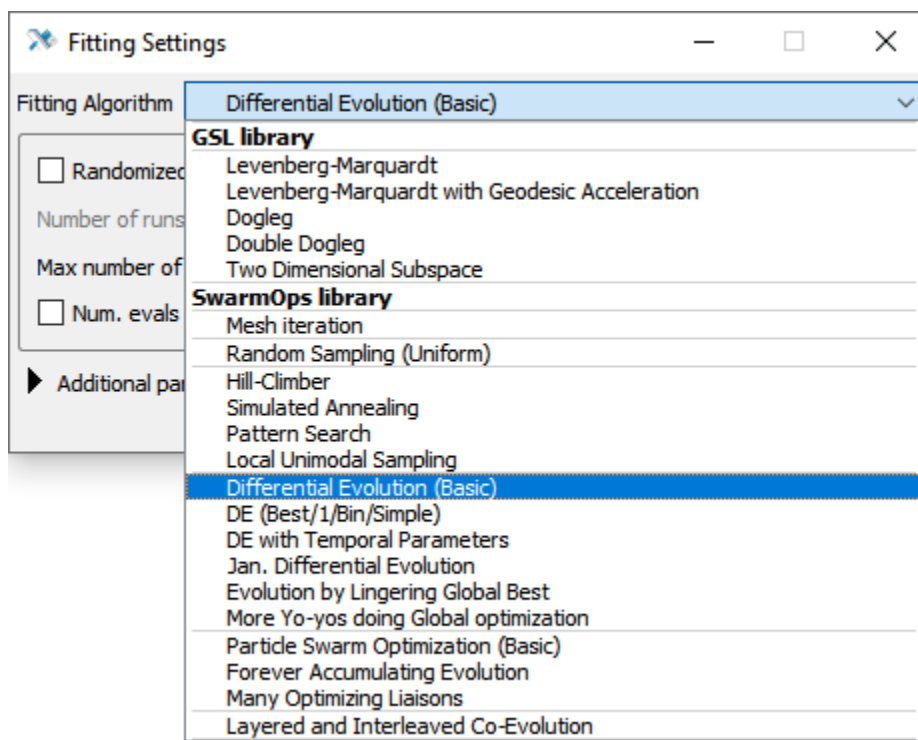


Рисунок 126. Список алгоритмов

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

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

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

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

Для алгоритмов из SwarmOps часть параметров отличается, а именно:

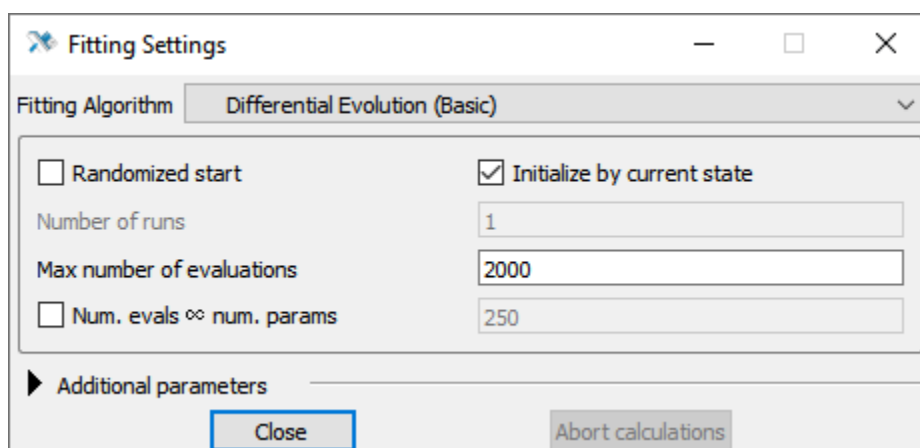


Рисунок 127. Окно «Fitting settings»

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

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

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

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

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

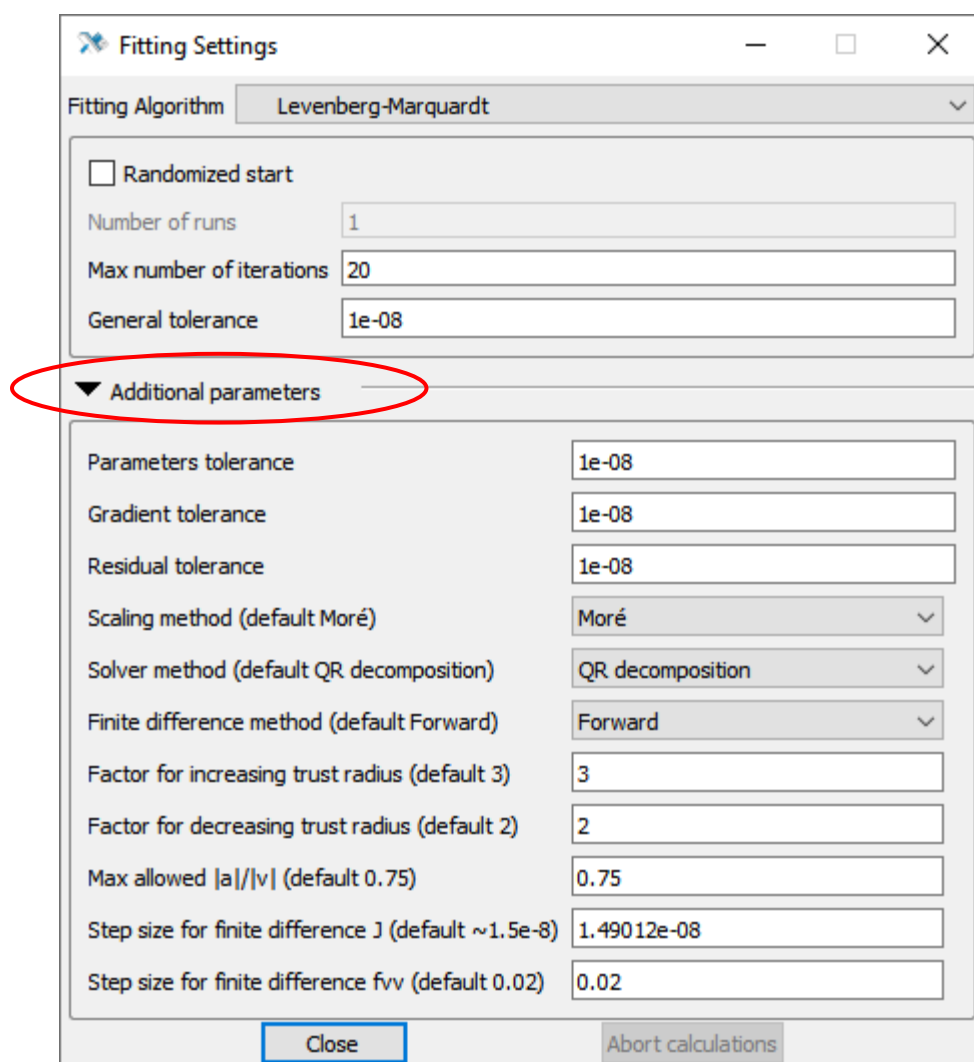


Рисунок 128. Дополнительные параметры алгоритмов

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

4.12 Fits selector

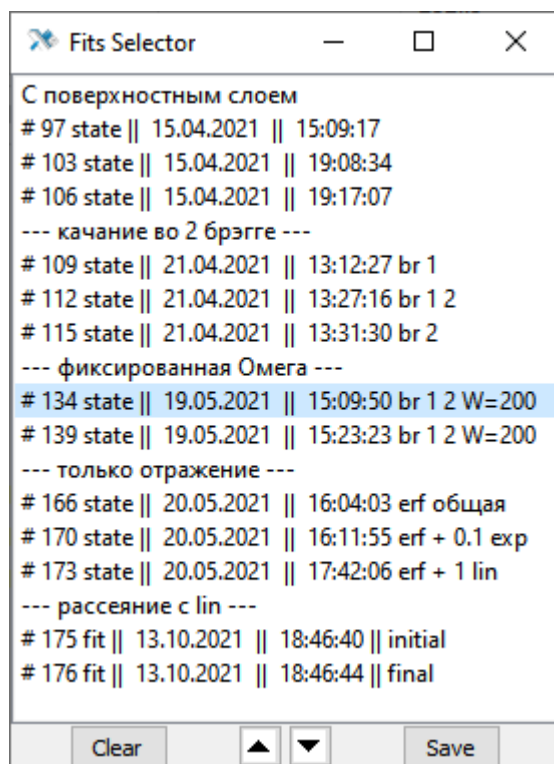


Рисунок 129. Окно «Fits selector»

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

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

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

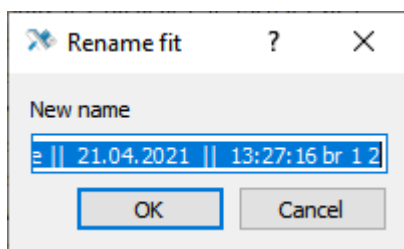


Рисунок 130. Переименование записи

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

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

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

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

5 Задание слоистой структуры

5.1 <.....>

5.2 **Сохранение состояния структуры**

6 Расчёт кривых и загрузка экспериментальных данных

6.1 <.....>

7 Визуализация результатов расчёта

7.1 <.....>

8 Оптимизация и подгонка

8.1 <.....>

9 Экспорт и импорт данных

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

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

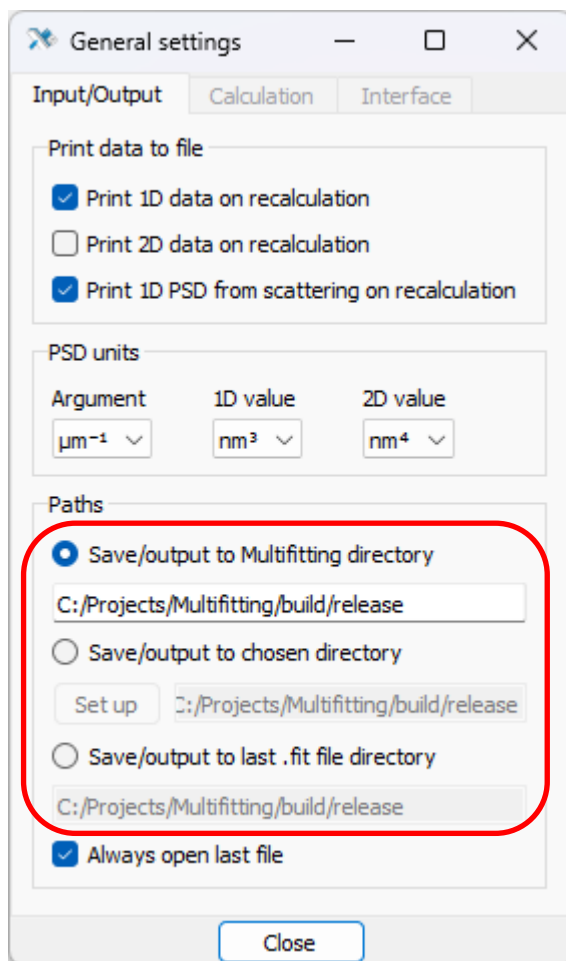


Рисунок 131. Директория для экспорта файлов

9.1 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.

9.1.1 Формат данных

9.1.1.1 1D данные

Формат одномерных данных: два столбца:

- аргумент
- значение

Если столбцов больше двух, то лишние просто игнорируются.

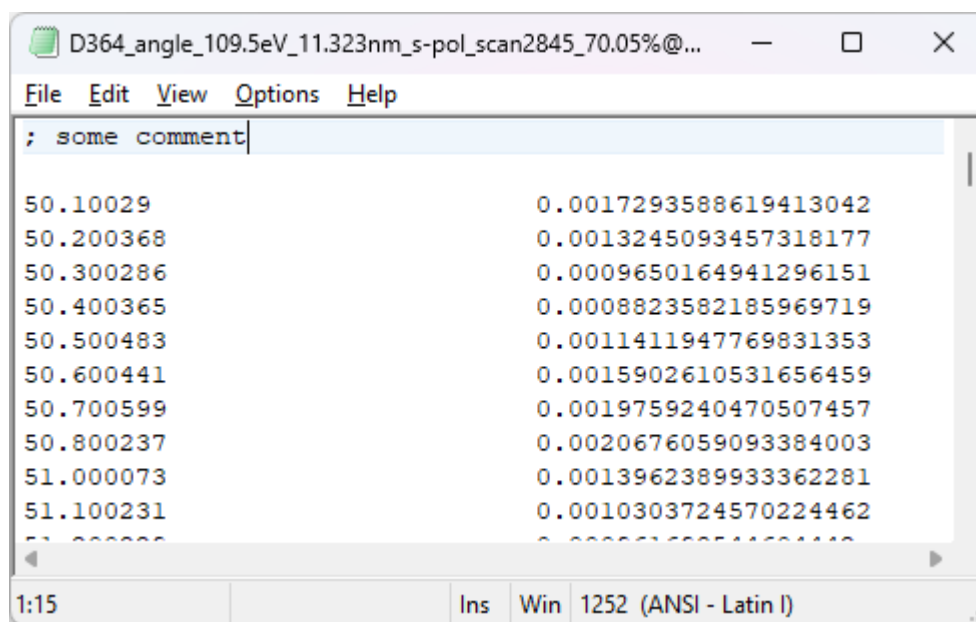


Рисунок 132. Пример файла с данными

9.1.1.2 2D данные

Двумерные данные для GISAXS могут быть прочитаны в двух форматах.

Первый – поточечный. Файл содержит три колонки:

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

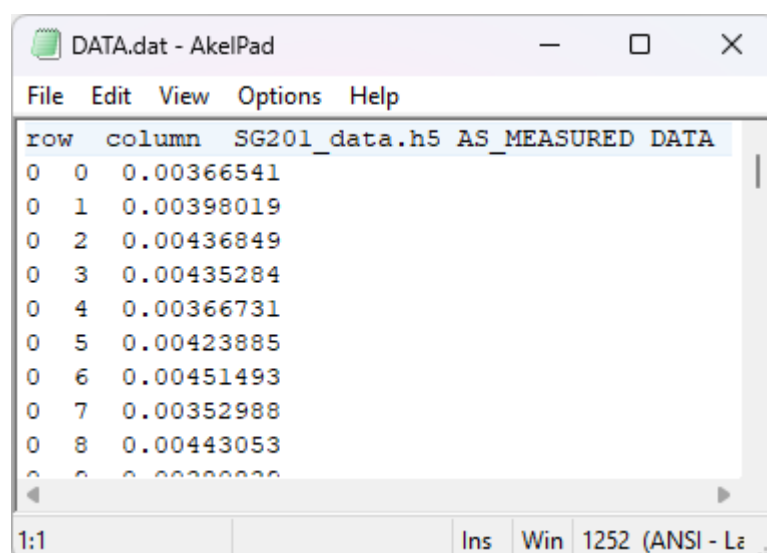


Рисунок 133. Пример файла с двумерными GISAXS данными, одна строка – один пиксель.

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

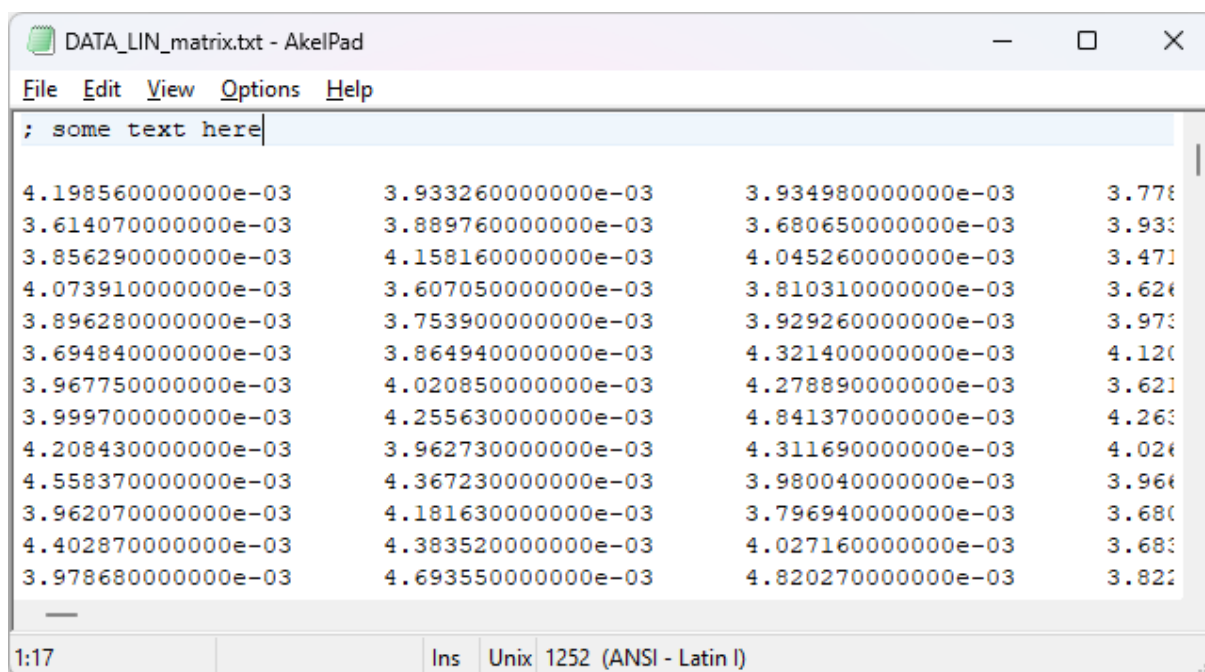


Рисунок 134. Пример файла с двумерными GISAXS данными в виде матрицы.

9.1.2 Импорт

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

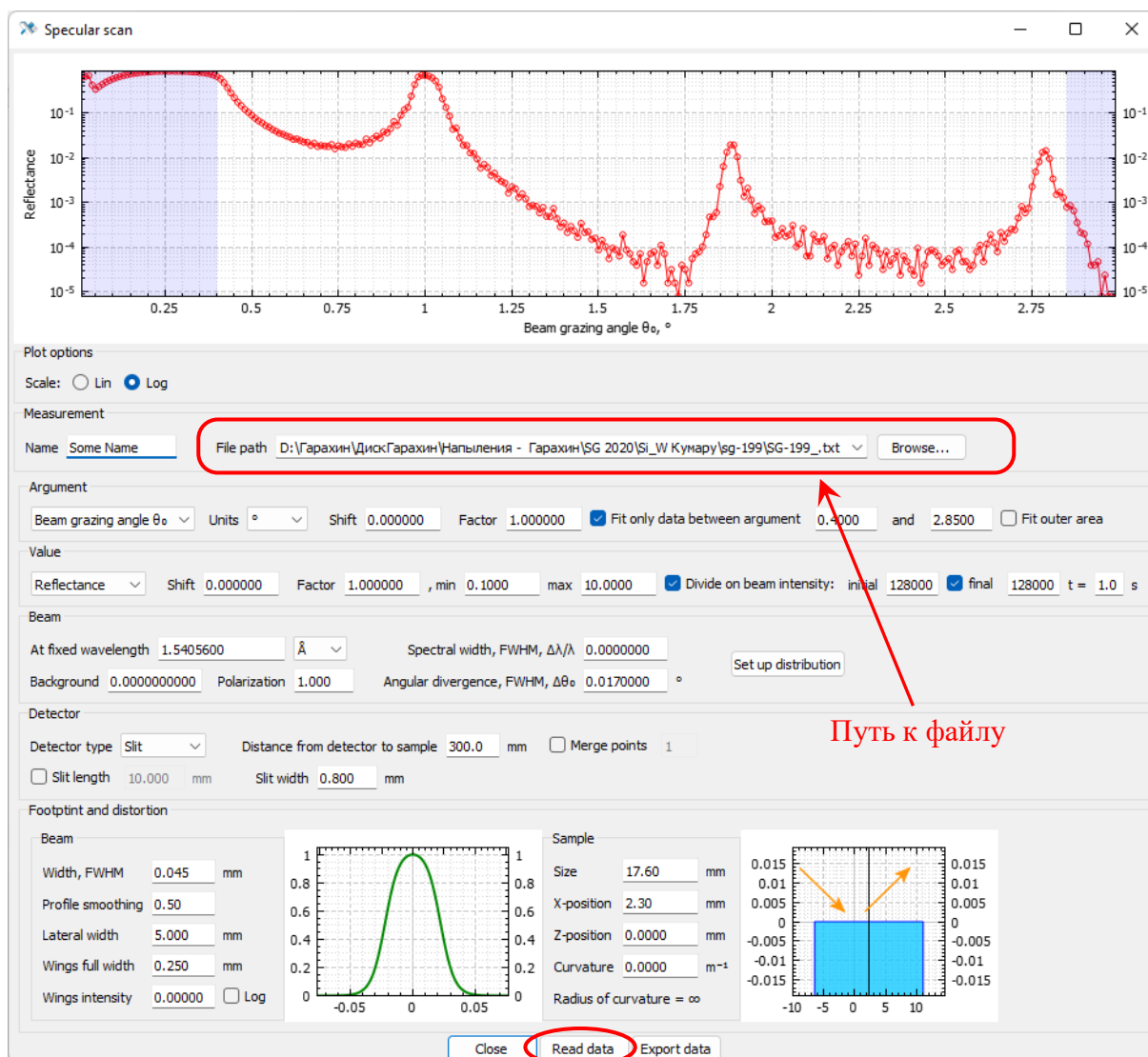


Рисунок 135. Окно экспериментальной рефлектометрической кривой

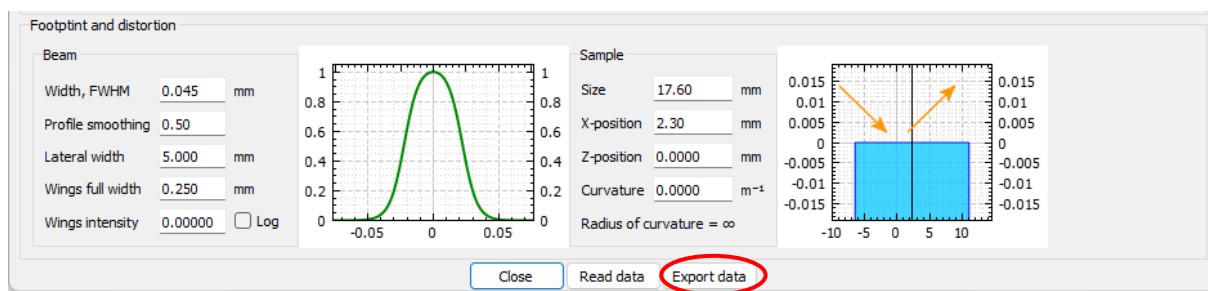
Самый простой и удобный способ – перетащить файл в окно кривой, оп при этом будет считан автоматически.

Альтернатива - в блоке «[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**».

9.1.3 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.



Сохранить всё прочитанное
содержимое обратно в файл

Рисунок 136. Окно экспериментальной кривой

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

9.2 Экспорт симулированных данных

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

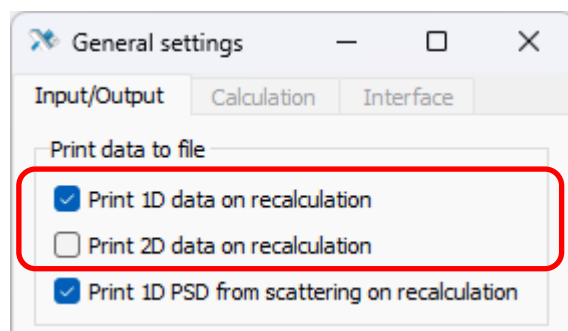


Рисунок 137. Автоматический вывод в файл

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

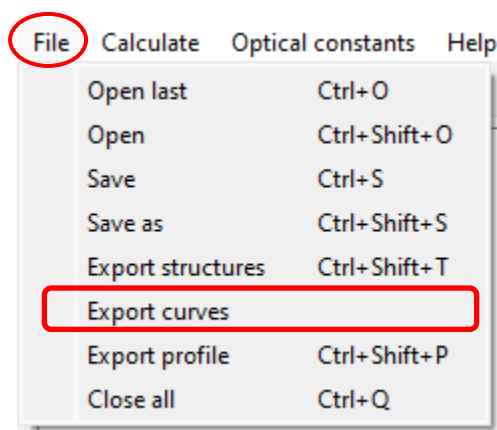


Рисунок 138. Главное меню «[File](#)»

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:

```

Struct_1_target_1_test.txt - AkelPad
File Edit View Options Help
; < 31.10.2022 | 09:49:06 >
; Specular scan

; polarization = 1.000
; wavelength = 1.540562 A

; spectral resolution (FWHM) = 0
; beam divergence (FWHM) = 0 deg

; beam width = 0.05 mm
; sample size = 20 mm

; Grazing angle (deg)      R_mixed      R_s      Phase_R_s
0.0000000000000000      5.000000e-01  1.000000e+00  180.0000
0.0020020020020020      1.370352e-02  9.993951e-01  -175.3984
0.0040040040040040      2.738888e-02  9.987903e-01  -170.7962
0.0060060060060060      4.105451e-02  9.981852e-01  -166.1925
0.0080080080080080      5.469881e-02  9.975797e-01  -161.5867
  
```

Рисунок 139. Вывод в файл рефлектометрического расчёта

```

Struct_1_independent_Plot_1.txt - AkelPad
File Edit View Options Help
; < 31.10.2022 | 09:49:06 >
; Rocking scan

; polarization = 1.000
; wavelength = 1.540562 A
; specular grazing angle position = 1 deg

; spectral resolution (FWHM) = 0
; beam divergence (FWHM) = 0 deg
; detector angular width (FWHM) = 0.01909859317 deg

; beam width = 0.05 mm
; sample size = 20 mm

; Beam grazing angle (deg) S_mixed      S_s
0.000000000000000000      0.000000e+00      0.000000e+00
0.0020020020020020020      0.000000e+00      0.000000e+00
0.0040040040040040040      0.000000e+00      0.000000e+00
0.0060060060060060060      0.000000e+00      0.000000e+00

```

Рисунок 140. Вывод в файл кривой качания

```

Struct_1_independent_Plot_1_intensity.txt - AkelPad
File Edit View Options Help
; < 31.10.2022 | 09:49:06 >
; Field intensity distribution
; (61 x 1000) points

; polarization      : 1.000000
; depth             : (-50.00 , 70.00) angstrom, step = 2.00 angstrom
; wavelength        : 1.540562 A
; beam grazing angle : (0.000000 , 1.000000) deg

0.000000e+00      0.000000e+00      0.000000e+00      0.000000e+00      0.000000e+
6.134631e-05      5.878593e-05      5.631477e-05      5.393065e-05      5.163138e-
2.453843e-04      2.351434e-04      2.252594e-04      2.157234e-04      2.065268e-
5.521670e-04      5.361351e-04      5.208850e-04      5.054208e-04      4.907371e-

```

Рисунок 141. Вывод в файл распределения интенсивности поля в структуре

```

; < 31.10.2022 | 09:49:06 >
; GISAS data
; (1000 x 501) points

; polarization           : 1.000000
; beam grazing angle     : 0.500000 deg
; wavelength             : 1.540562 A
; spectral resolution    : 0.000000
; beam polar divergence  : 0.000000 deg
; beam azimuthal divergence : 0.000000 deg
; beam width             : 0.050000 mm
; sample size            : 20.000000 mm

; detector point size Theta : 0.005996 deg
; detector point size Phi   : 0.005200 deg

; detector Theta range    : (0.010000 , 6.000000) deg
; detector Phi range      : (-1.300000 , 1.300000) deg

0.000000e+00  0.000000e+00  0.000000e+00  0.000000
0.000000e+00  0.000000e+00  0.000000e+00  0.000000
0.000000e+00  0.000000e+00  0.000000e+00  0.000000

```

Рисунок 142. Вывод в файл GISAXS

Для одномерных кривых выводятся значения для каждой из задействованных поляризаций и суммарный результат (R_{mixed} , R_s , R_p). Рефлектометрическая кривая также содержит фазу для отражённой волны для задействованной поляризации ($Phase_{R_s}$, $Phase_{R_p}$) в диапазоне $(-180^\circ, 180^\circ]$.

9.3 Импорт PSD шероховатости

Процедура загрузки PSD шероховатости из файла описана в [другом разделе](#). Здесь только укажу, что данные должны быть организованы в два столбца: аргумент (пространственная частота) и значение (PSD). И обязательно нужно знать единицы измерения.

9.4 Структура

9.4.1 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](#)» главного окна или нажать «[Ctrl+Shift+T](#)».

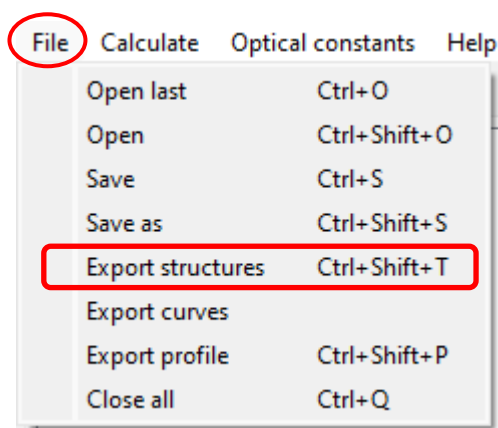


Рисунок 143. Экспорт структуры в главном меню «File»

Результаты сохраняются в файл с названием «`structure_<struct_name>.txt`». «`<struct_name>`» – редактируемое название структуры, написанное на вкладке. Содержимое его примерно следующее:

```

structure_SG 201.txt - AkelPad
File Edit View Options Help
< 31.10.2022 | 17:18:54 >
< Multifitting v.1.11.30 >
< legend: >
    N - number of elementary cells
    d - period or thickness
    s_d - root-mean-square interlayer width (sigma diffuse)
    s_r - root-mean-square roughness (sigma roughness)
    r - material density (rho), absolute or relative
    A - angstroms
    r.u. - relative units

-----

1 WO2 : d= 6.000 A s_d=2.500 A s_r=1.800 A r=1.100 r.u.
2 WSi2 4.000 0.000 1.800 1.100 r.u.
3 Si 33.552 2.512 1.800 0.530 r.u.
4 Periodic Si/W N=29
    4.1 W : d=13.889 A s_d=1.715 A s_r=1.800 A r=0.910 r.u.
    4.2 Si 37.552 2.512 1.800 1.000 r.u.
5 Substrate Si s_d=3.000 A s_r=1.800 A r=1.000 r.u.
  
```

Рисунок 144. Основные параметры структуры в текстовом файле

9.4.2 АперIODИКА

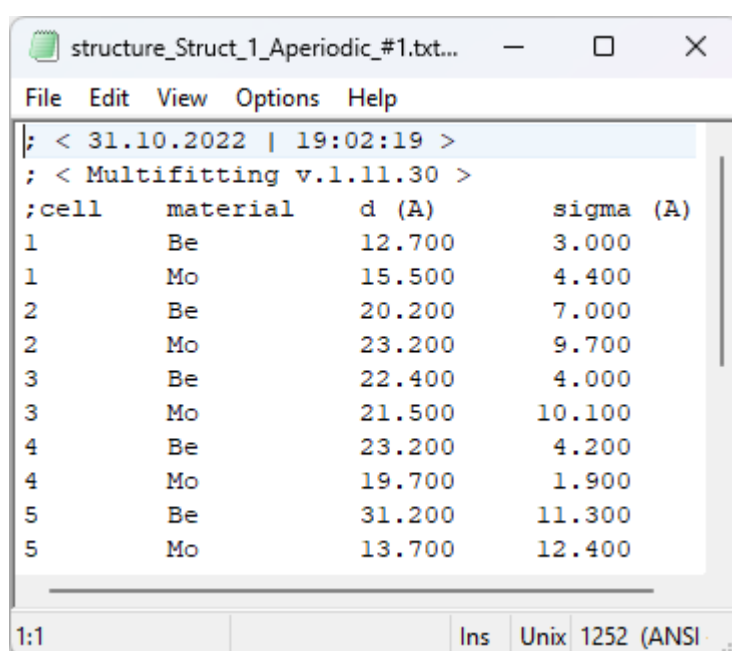
АперIODические стеки сохраняются в файл структуры на общих основаниях. Однако аперIODИКУ можно наполнить значениями, считанными из файла. Для регулярной и общей аперIODИКИ это делается немного по-разному.

9.4.2.1 Экспорт регулярной аперiodики

Если в составе структуры есть регулярная аперiodика, 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 аперiodики 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**»



cell	material	d (Å)	sigma (Å)
1	Be	12.700	3.000
1	Mo	15.500	4.400
2	Be	20.200	7.000
2	Mo	23.200	9.700
3	Be	22.400	4.000
3	Mo	21.500	10.100
4	Be	23.200	4.200
4	Mo	19.700	1.900
5	Be	31.200	11.300
5	Mo	13.700	12.400

Рисунок 145. Параметры слоёв регулярной аперiodики

Файл подобного формата может быть импортирован обратно в Multifitting.

9.4.2.2 Импорт регулярной аперiodики

Создать регулярную аперiodику 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, перетаскив его в предварительно открытую [таблицу слоёв](#) аперiodики:

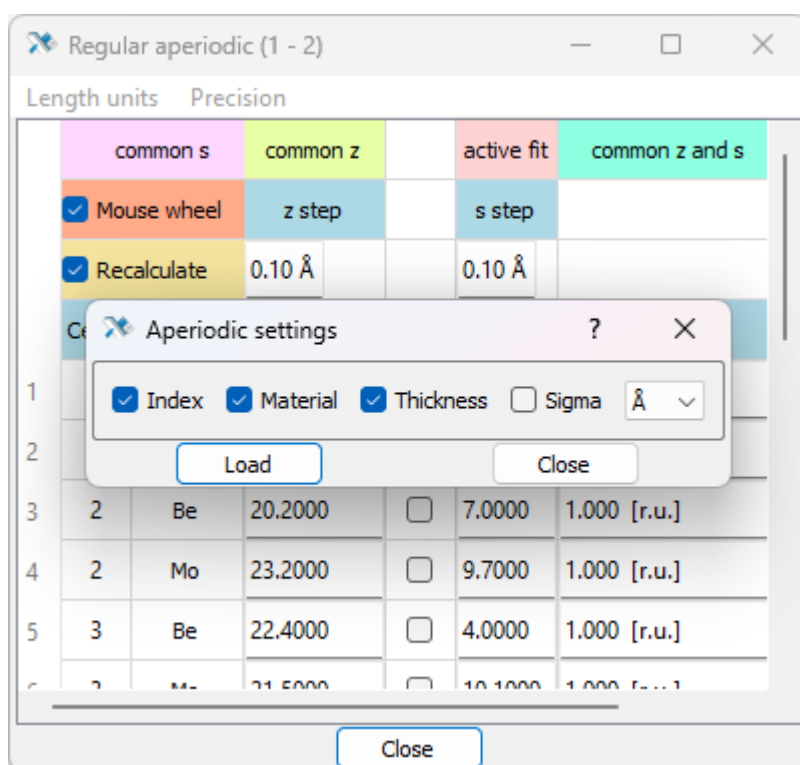


Рисунок 146. Загрузка регулярной аперииодики из файла

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.

9.4.2.3 Импорт общей аперииодики

Общую аперииодику можно создать, загрузив материалы, плотности, толщины и интерфейсы слоёв из файла. Формат файла почти [такой же](#), как для регулярной аперииодики, 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.

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

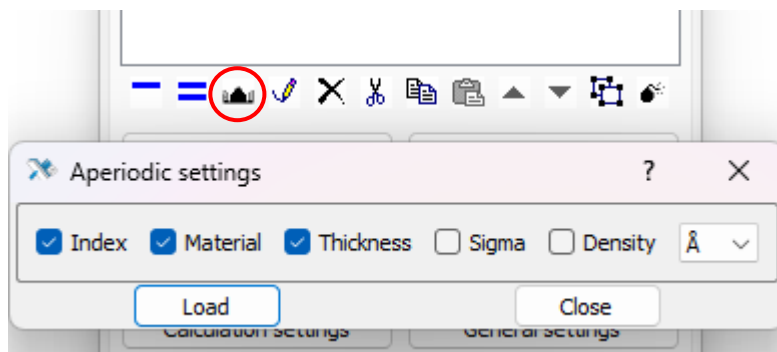


Рисунок 147. Загрузка общей аперииодики из файла

9.5 Профиль структуры

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

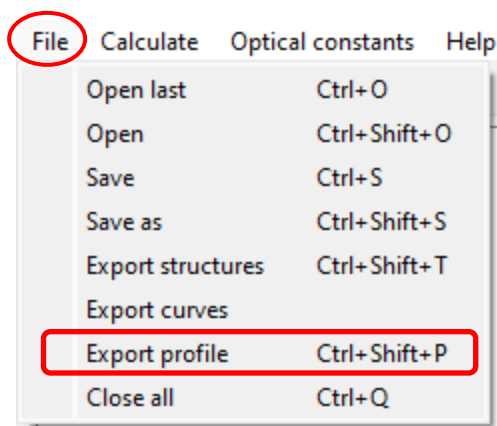


Рисунок 148. Экспорт профиля в главном меню «[File](#)»

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.

```
|; < 31.10.2022 | 23:13:26 >
; < Multifitting v.1.11.30 >

; Sharp profile: arguments correspond to the top layer boundaries
; For visualization please use step line with data point on the left of the step

; Depth (A)      Be      Mo      Si
-28.700000      0.000000e+00      0.000000e+00      0.000000e+00
0.000000      1.234875e+23      0.000000e+00      0.000000e+00
20.000000      0.000000e+00      6.413743e+22      0.000000e+00
40.000000      0.000000e+00      0.000000e+00      4.996026e+22
68.700000      0.000000e+00      0.000000e+00      4.996026e+22
```

Рисунок 149. 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](#)».

```
|; < 31.10.2022 | 23:28:29 >
; < Multifitting v.1.11.30 >

; Discretized profile: arguments correspond to the top slice boundaries
; For visualization please use step line with data point on the left of the step

; Depth (A)      Be      Mo      Si
-29.000000      0.000000e+00      4.141450e-10      0.000000e+00
-28.000000      0.000000e+00      9.115599e-10      0.000000e+00
-27.000000      0.000000e+00      1.975266e-09      0.000000e+00
-26.000000      1.108999e-16      4.213857e-09      0.000000e+00
-25.000000      1.330798e-15      8.850229e-09      0.000000e+00
-24.000000      1.718948e-14      1.830023e-08      0.000000e+00
-23.000000      1.961264e-13      3.725577e-08      0.000000e+00
-22.000000      2.021826e-12      7.467464e-08      0.000000e+00
```

Рисунок 150. 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](#)» была **включена**

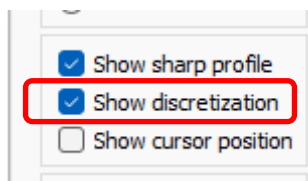


Рисунок 151. Опции представления профиля в окне «[Profile plot](#)»

Отсутствие дополнительных индикаторов в названии файла означает, что это «непрерывный» профиль структуры. Тем 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.

```
; < 31.10.2022 | 23:48:58 >
; < Multifitting v.1.11.30 >

; wavelength = 1.540562 A

; No discretization: arguments correspond to the real positions
; For visualization please use continuous line

; Depth (A)      Re(1-epsilon)      Im(epsilon)
-28.700000      2.019633e-14      1.320501e-15
-28.500000      2.369270e-14      1.549105e-15
-28.300000      2.777696e-14      1.816148e-15
-28.100000      3.254491e-14      2.127892e-15
-27.900000      3.810742e-14      2.491587e-15
-27.700000      4.459276e-14      2.915619e-15
-27.500000      5.214916e-14      3.409681e-15
-27.300000      6.094787e-14      3.984970e-15
```

Рисунок 152. Пример содержимого файла с «непрерывным» профилем диэлектрической проницаемости

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

10 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](#), если какой-то материал был обновлён.

Файлы данных содержат 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.

10.1 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: $\lambda[\text{\AA}]$,
- действительная часть показателя преломления: $\text{Re}(n)$
- мнимая часть показателя преломления или поглощение: $\text{Im}(n)$

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.

```

; Optical constants for GaAs
;
; Concatenation of:
;
; GaAs_llnl_cxro + GaAs_windt + GaAs_palik
;
;   Lambda (A)           n           k
; -----
;   0.12398425         0.99999990    2.0156681e-10
;   0.12460729         0.99999990    2.0567769e-10
;   0.12523662         0.99999990    2.0989399e-10
;   0.12651454         0.99999990    2.1865512e-10
;   0.12848109         0.99999990    2.3267137e-10
;   0.13050974         0.99999989    2.4782712e-10
;   0.13189814         0.99999989    2.5862025e-10
;   0.13331640         0.99999989    2.7000658e-10
;   0.13550191         0.99999988    2.8828555e-10
;   0.13776028         0.99999988    3.0813545e-10
;   0.13930815         0.99999988    3.2229708e-10

```

Рисунок 153. Содержимое файла «GaAs.nk»

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

```

FILE          DESCRIPTION, with [wavelength range in angstroms]
-----
Ac            =Ac_llnl_cxro [.12398425-423.15444]
Ac_llnl_cxro  LLNL + CXRO (1997) 10.07 g/cm3 [.12398425-423.15444]
-----
Ag            =Ag_llnl_xro [.12398425-423.15444]+Ag_palik [428-99190]
Ag_llnl_cxro  LLNL + CXRO (1997) 10.50 g/cm3 [.12398425-423.15444]
Ag_hagemann   Hagemann et al. (Palik + DESY) [1.24-1378]
Ag_leveque    Leveque et al. (Palik) [460-1348]
Ag_palik      Palik (1985) [1.24-99190]
Ag_windt      Windt et al. (1988) evap. Ag [24-1216]
-----
Ag2O          =Ag2O_cllnl_xro [.12398425-423.15444]
Ag2O_llnl_cxro LLNL + CXRO (1997) 7.143 g/cm3 [.12398425-423.15444]
-----
Al            =Al_llnl_xro [.12398425-423.15444]+Al_palik [427-12398]
Al_llnl_cxro  LLNL + CXRO (2013) 2.6989 g/cm3 [.12398425-423.15444]
Al_palik      Palik (1985) [165-12398]
Al_shiles     Shiles et al. (Palik) [12.4-1305]

```

Рисунок 154. Содержимое файла «AAACATALOG.TXT»

10.2 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. <добавить формулу>

$$n_r = 1 - \delta - i\beta = 1 - \frac{r_0}{2\pi} \lambda^2 \sum_q n_q f_q(0),$$

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 $f1 \leq -8888$ 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.

```
; Atomic scattering factors for Si.
;
; Concatenation of data from CXRO <http://www-cxro.lbl.gov>
; and LLNL <http://www-phys.llnl.gov/V Div/scattering/asf.html>
;
; E (eV) f1 f2
;-----
10.0000 -9999. 3.94851
10.1617 -9999. 3.95531
10.3261 -9999. 3.96212
10.4931 -9999. 3.96894
10.6628 -9999. 3.97577
10.8353 -9999. 3.98262
11.0105 -9999. 3.98948
11.1886 -9999. 3.99635
11.3696 -9999. 4.00322
11.5535 -9999. 4.01012
11.7404 -9999. 4.01702
11.9303 -9999. 4.02394
```

1:1 Ins Win 1252 (ANSI - Latin I)

Рисунок 155. Содержимое файла «Si.ff»

11 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.

11.1 Поле в слоистой структуре

При написании этого раздела я ориентировался на материал, изложенный в [5] в разделе 3.1.1.

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

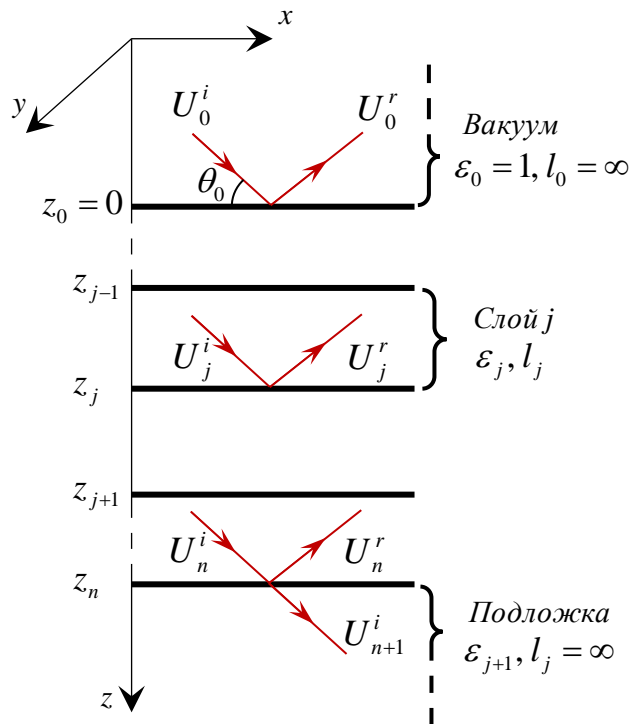


Рисунок 156. Отражение электромагнитной волны от многослойной структуры

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

Волновое уравнение для поля в кусочно-однородной среде имеет вид

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + [k^2\varepsilon(z) - q^2]\psi(z) = 0 \quad (14.1.1)$$

или

$$\psi''(z) + \chi^2\psi(z) = 0; \quad \chi = k\sqrt{\varepsilon - \cos^2\theta} \quad (14.1.2)$$

где

$$\psi = \begin{cases} E_y & \text{для } s\text{-поляризации} \\ H_y & \text{для } p\text{-поляризации} \end{cases} \quad (14.1.3)$$

Внутри каждого слоя решением является

$$\psi(z \in [z_{j-1}, z_j]) = U_j^i e^{i\chi_j(z-z_j)} + U_j^r e^{-i\chi_j(z-z_j)} \quad (14.1.4)$$

В подложке отражённая волна отсутствует:

$$\psi(z \geq z_n) = U_{n+1}^i e^{i\chi_j(z-z_n)} \quad (14.1.5)$$

Граничные условия возьмём следующие: непрерывность E_y (выполняется всегда) и непрерывность H_y (отсутствие поверхностных токов):

$$\begin{cases} \psi(z \rightarrow z_{j-0}) = \psi(z \rightarrow z_{j+0}) \\ \frac{1}{\eta_j} \psi'(z \rightarrow z_{j-0}) = \frac{1}{\eta_{j+1}} \psi'(z \rightarrow z_{j+0}) \end{cases} \quad (14.1.6)$$

где

$$\eta_j = \begin{cases} 1 & \text{для } s\text{-поляризации} \\ \varepsilon_j & \text{для } p\text{-поляризации} \end{cases} \quad (14.1.7)$$

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

$$\begin{cases} U_j^i + U_j^r = U_{j+1}^i e^{-i\chi_{j+1}l_{j+1}} + U_{j+1}^r e^{i\chi_{j+1}l_{j+1}} \\ \frac{\chi_j}{\eta_j} (U_j^i - U_j^r) = \frac{\chi_{j+1}}{\eta_{j+1}} (U_{j+1}^i e^{-i\chi_{j+1}l_{j+1}} - U_{j+1}^r e^{i\chi_{j+1}l_{j+1}}) \\ U_{n+1}^r = 0 \end{cases} \quad (14.1.8)$$

Теперь можно ввести «текущие» коэффициенты отражения $r(z_j)$ и прохождения $t(z_j)$:

$$r(z_j) = \frac{U_j^r}{U_j^i}, \quad t(z_j) = \frac{U_{j+1}^i}{U_j^i}, \quad j = 0 \dots n+1 \quad (14.1.9)$$

Из (14.1.8) и (14.1.9) получаются рекуррентные соотношения для $r(z_j)$ и $t(z_j)$:

$$\begin{aligned}
r(z_j) &= \frac{r_j^F + r(z_{j+1})e^{2i\chi_{j+1}l_{j+1}}}{1 + r_j^F r(z_{j+1})e^{2i\chi_{j+1}l_{j+1}}}, & j = 0 \dots n \\
r(z_{n+1}) &= 0 \\
t(z_j) &= \frac{t_j^F t(z_{j+1})e^{i\chi_{j+1}l_{j+1}}}{1 + r_j^F r(z_{j+1})e^{2i\chi_{j+1}l_{j+1}}}, & j = 0 \dots n \\
t(z_{n+1}) &= 1
\end{aligned} \tag{14.1.10}$$

Величины r_j^F и t_j^F – френелевские амплитудные коэффициенты отражения и прохождения через одиночную границу раздела сред с ε_j и ε_{j+1} :

$$\begin{aligned}
r_j^F &= \frac{\chi_j/\eta_j - \chi_{j+1}/\eta_{j+1}}{\chi_j/\eta_j + \chi_{j+1}/\eta_{j+1}} \\
t_j^F &= \frac{2\chi_j/\eta_j}{\chi_j/\eta_j + \chi_{j+1}/\eta_{j+1}}
\end{aligned} \tag{14.1.11}$$

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

$$\begin{aligned}
R &= |r(z_0)|^2 \\
T &= |t(z_j)|^2 \operatorname{Re} \left(\frac{\chi_{n+1}}{k\eta_{n+1} \sin \theta} \right)
\end{aligned} \tag{14.1.12}$$

Когда «текущие» коэффициенты $r(z_j)$ и $t(z_j)$ найдены, можно найти амплитуды U_j^i и U_j^r в каждом слое:

$$\begin{aligned}
U_j^r &= r(z_j)U_j^i, & j = 1 \dots n \\
U_j^i t(z_j) &= \frac{U_{n+1}^i}{t(z_j)}, & j = 1 \dots n
\end{aligned} \tag{14.1.13}$$

с использованием «граничных» условий

$$\begin{aligned}
U_0^i &= 1 \\
U_0^r &= r(0) \\
U_{n+1}^r &= 0 \\
U_{n+1}^i &= t(0)
\end{aligned} \tag{14.1.14}$$

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 $t(z_j)$ 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

$$U_j^i = (U_{j-1}^i + U_{j-1}^r) \frac{e^{i\chi_j l_j}}{1 + r(z_j) e^{2i\chi_j l_j}}, \quad j = 1 \dots n$$

$$U_j^r = r(z_j) U_j^i, \quad j = 1 \dots n$$
(14.1.15)

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

11.2 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.

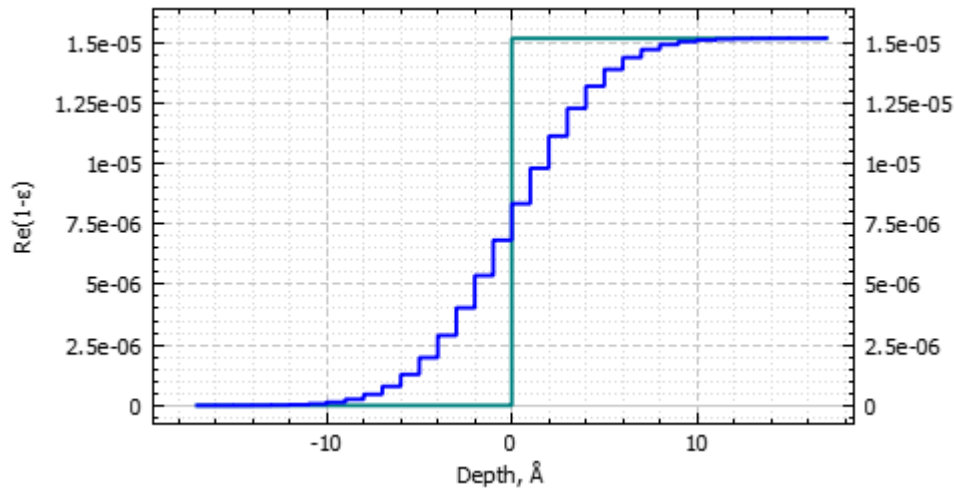


Рисунок 157. Разбиение профиля ϵ на тонкие однородные слои

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

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

12 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 $\leq 1.9.2$, следует умножить на 2. Теперь тонкая линия размывается в широкую с $\text{FWHM} \approx$ 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.
-

13 Список сокращений

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

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

GSL – GNU Scientific Library / научная библиотека GNU

ПВО – полное внешнее отражение

14 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. "CXRO X-Ray database, The Atomic Scattering Factor Files," https://henke.lbl.gov/optical_constants/asf.html.
5. А. В. Виноградов, И. А. Брытов, А. Я. Грудский, М. Т. Коган, И. В. Кожевников, and В. А. Слемзин, *Зеркальная Рентгеновская Оптика* (Машиностроение, 1989).