

# **Multifitting**

**v.2.0.0**

## **Руководство пользователя**

обновлено 15 апреля 2023

Михаил Свечников

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

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

## Оглавление

1	Введение.....	6
2	Установка и запуск.....	7
2.1	Windows.....	7
2.2	Linux.....	7
3	Быстрый старт .....	8
3.1	Создание структуры .....	8
3.2	Сохранение и загрузка .....	11
3.3	Вычисление кривой отражения .....	12
3.4	Работа со структурной таблицей.....	15
3.5	Обратная задача .....	17
3.6	Дополнительные экспериментальные кривые.....	31
4	Пользовательский интерфейс .....	35
4.1	Консоль.....	35
4.2	Главное окно .....	36
4.2.1	Меню .....	36
4.2.2	Вкладки со структурами .....	39
4.2.3	Слоистая структура .....	39
4.2.4	Панель инструментов.....	40
4.2.5	Редактирование элемента структуры .....	41
4.2.6	Панель доступа к другим окнам .....	51
4.2.7	Независимые кривые .....	52
4.2.8	Экспериментальные кривые.....	58
4.3	Structure table.....	67
4.3.1	Меню .....	68
4.3.2	Содержимое таблицы.....	68
4.3.3	Regular aperiodic .....	82
4.4	Profile plot .....	84

4.5	1D graphs.....	86
4.5.1	Настройки .....	87
4.5.2	Настройка цвета кривой .....	89
4.5.3	Дополнительные кривые .....	89
4.6	2D graphs.....	91
4.6.1	Настройки .....	92
4.6.2	Настройка цветовой схемы .....	94
4.7	Roughness spectrum.....	95
4.8	Particles spectrum.....	96
4.9	Calculation settings.....	97
4.9.1	Параметры модели структуры .....	98
4.9.2	Настройки окна.....	98
4.9.3	Зеркальная кривая с экспериментальной сеткой .....	99
4.9.4	Независимая зеркальная кривая.....	101
4.9.5	Рассеяние.....	102
4.10	General settings .....	102
4.10.1	Input/Output .....	103
4.10.2	Calculation .....	104
4.10.3	Interface.....	105
4.11	Fitting settings .....	107
4.12	Fits selector.....	110
5	Задание слоистой структуры.....	112
5.1	Слой .....	112
5.1.1	Материал .....	113
5.1.2	Толщина .....	113
5.1.3	Диффузность.....	113
5.2	Периодическая многослойка .....	114
5.2.1	Перераспределение толщин слоёв внутри периода .....	115
5.2.2	Дрейф толщин по глубине.....	116
5.3	Общая апериодика .....	117
5.4	Регулярная апериодика .....	118
5.5	Шероховатость.....	120
5.5.1	Приближение .....	120
5.5.2	Шероховатость подложки .....	121
5.5.3	Модель репликации .....	123
5.6	Внутрислоевые частицы .....	125

6	Расчёт кривых и загрузка экспериментальных данных.....	128
6.1	Specular scan .....	129
6.1.1	Независимая кривая .....	129
6.1.2	Экспериментальная кривая .....	130
6.2	Detector scan .....	131
6.3	Rocking scan.....	131
6.4	Offset scan .....	131
6.5	GISAS map.....	132
6.5.1	Независимая кривая .....	132
6.5.2	Экспериментальная кривая .....	132
6.6	Визуализация результатов расчёта .....	133
7	Оптимизация и подгонка .....	135
7.1	Выбор целевых кривых.....	135
7.2	Параметры структуры .....	137
7.2.1	Включение параметра.....	137
7.2.2	Регулярная апериодика.....	137
7.2.3	Связанные параметры .....	138
7.3	Настройка алгоритма.....	138
7.4	Запуск.....	139
7.5	После завершения.....	140
7.6	Доверительный интервал.....	141
8	Экспорт и импорт данных .....	144
8.1	Экспериментальные кривые .....	144
8.1.1	Формат данных .....	145
8.1.2	Импорт.....	146
8.1.3	Экспорт ранее загруженных данных .....	148
8.2	Экспорт симулированных данных .....	148
8.3	Импорт PSD шероховатости.....	152
8.4	Структура .....	153
8.4.1	Экспорт всей структуры .....	153
8.4.2	Апериодика .....	154
8.5	Профиль структуры .....	157
9	Оптические константы материалов .....	161
9.1	Библиотека материалов «nk» .....	161
9.2	Библиотека атомных факторов «f1f2» .....	163

10	История версий.....	165
11	Список сокращений .....	167
12	Список цитируемой литературы.....	168

# 1 Введение

Программа Multifitting предназначена для численного моделирования отражения и пропускания коротковолнового излучения планарной многослойной структурой, а также расчёта распределения интенсивности излучения в структуре, расчёта интенсивности излучения, рассеянного на межслоевых шероховатостях и на внутрислоевых отклонениях диэлектрической проницаемости (встроенные частицы или флуктуации плотности). Подобные расчёты требуются для диагностики структур рентгеновскими методами, оценки эффективности отражающих покрытий и пропускающих абсорбционных фильтров, а также для разработки покрытий с максимальным интегральным отражением. Многослойная структура может включать подложку, отдельные слои, периодические участки произвольной степени вложенности, апериодические участки. Каждый слой структуры характеризуется материалом, плотностью, толщиной, интерфейсом на верхней границе 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 определёнными стехиометрическими соотношениями.

Подобные программы для численного моделирования оптических свойств слоистых структур создаются регулярно, как бесплатные так коммерческие. Некоторые 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 эргonomики интерфейса становятся особенно важны поэтому Multifitting будет полезен всем, кто занимается рентгеновской диагностикой тонких пленок, и в особенности – тем, кто делает это регулярно.

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

## 2 Установка и запуск

Multifitting доступен для Windows (начиная с Windows 7) и Linux. Скачать его можно из репозитория GitHub <https://github.com/svech/Multifitting/releases> и 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, соответствующий разрядности операционной системы (x64 или x86), распаковать его и запустить исполняемый файл «`Multifitting_X.Y.Z/bin/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:

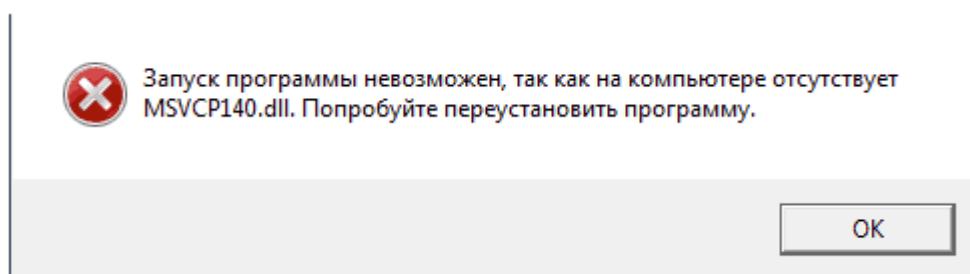


Рисунок 1. Сообщение от Windows

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: «`Multifitting_X.Y.Z/bin/multifitting`». Версии 1.10.2 и 2.0.0 имеют по два архива, обозначенные как «`linux-old`» и «`linux-new`», совместимые с различными дистрибутивами. «`linux-old`» проверялся на Debian 11 и Ubuntu 20.04. «`linux-new`» проверялся на Debian 12 (testing), Ubuntu 22.04, Fedora 37, OpenSUSE Leap 15.4, Arch Linux, Manjaro.

### 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, по основам работы с ней, сопоставлению структуре внешних «экспериментальных» данных и решению задачи диагностики – нахождения параметров структуры по кривой отражения. Если при следовании данному мини-руководству у вас возникли проблемы, или какие-то переходы вызывают вопросы – пожалуйста, сообщите об этом, и инструкция будет дополнена.

#### 3.1 Создание структуры

Запускаем программу.

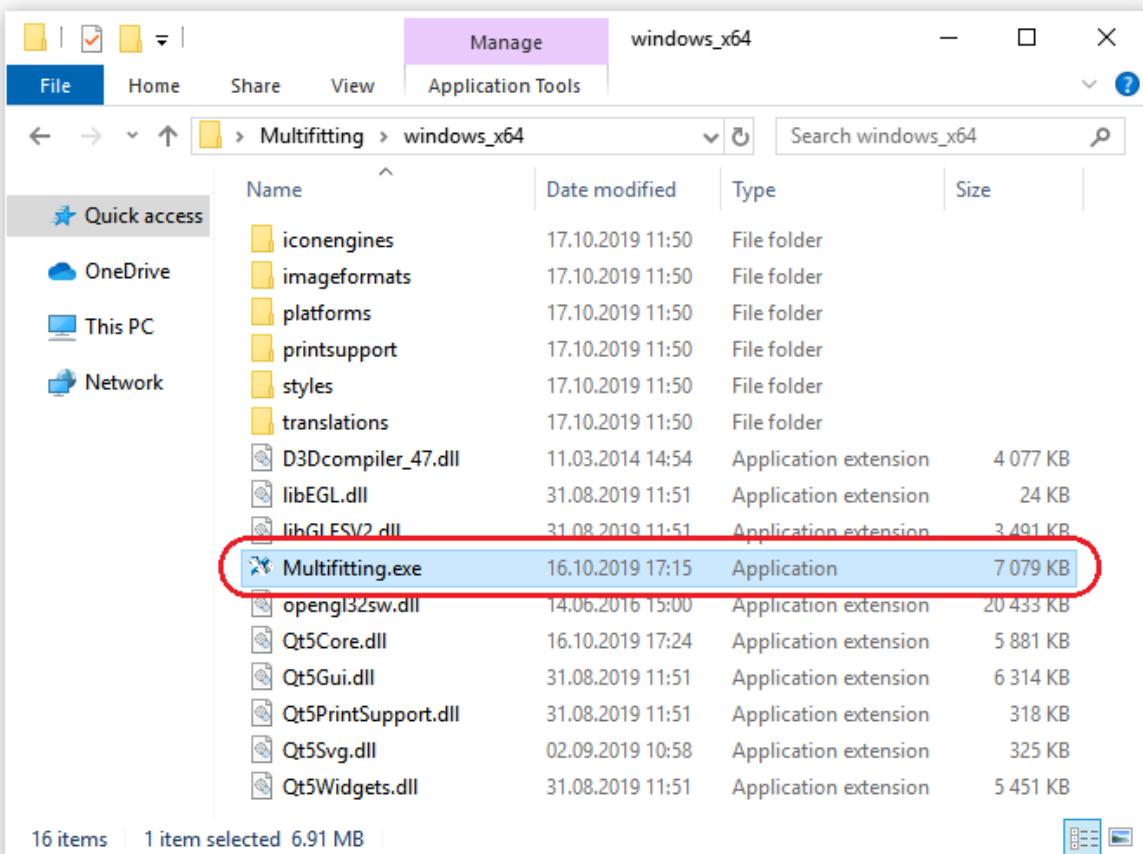


Рисунок 2. Исполняемый файл

Откроется [главное окно](#) Multifitting и [окно консоли](#). Консоль используется программой для вывода текстовой информации по ходу работы. Главное окно позволяет задавать слоистую структуру и даёт доступ ко всем остальным средствам визуализации, расчёта и изменения параметров. Интерфейс главного окна хорошо знаком пользователям IMD – он во многом воспроизведён.

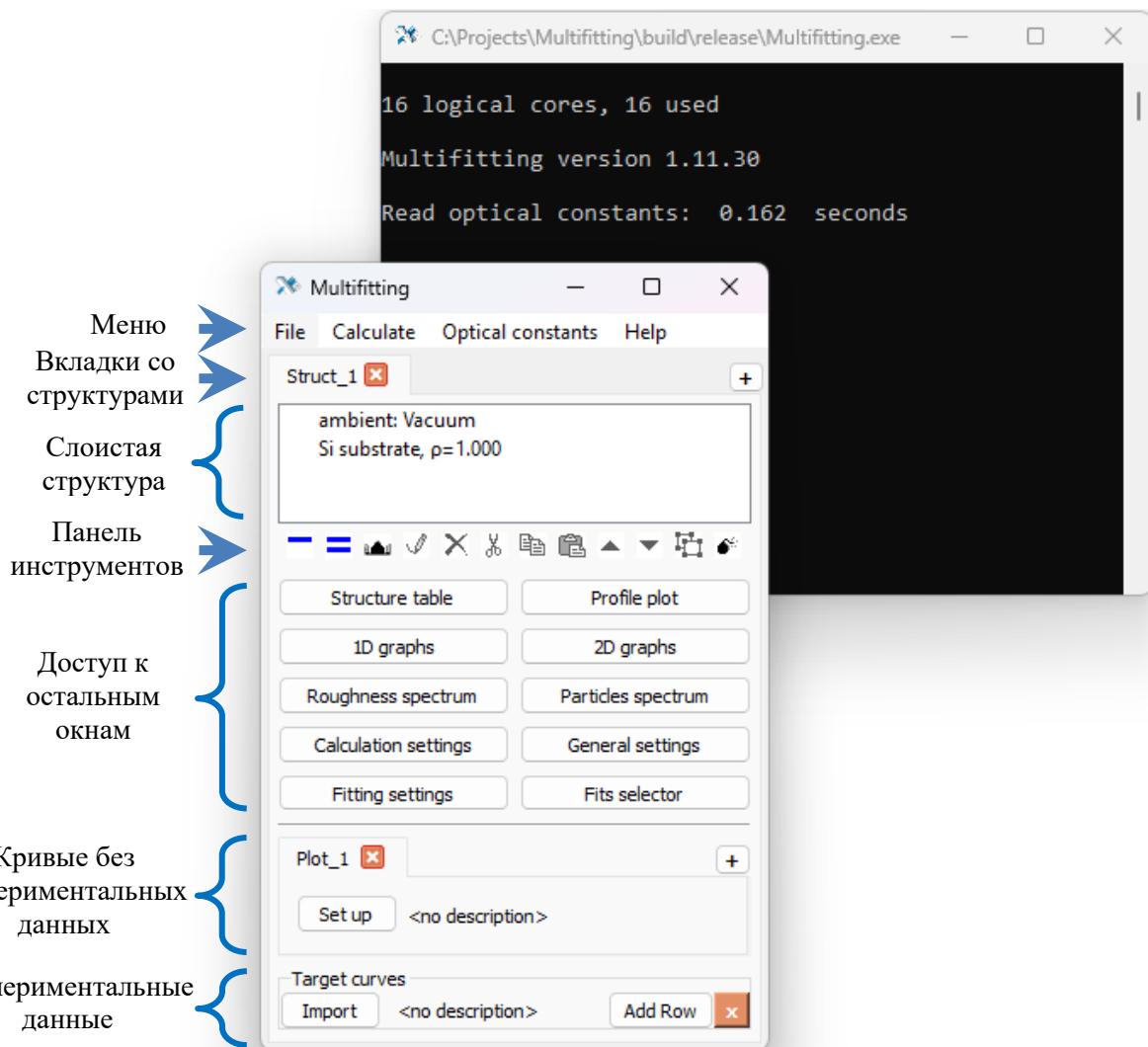


Рисунок 3. Главное окно и консоль

Изначально существует минимальная структура из двух полупространств: среда и подложка. Добавим периодическое Mo/Be зеркало на Si подложку. Для этого на [панели инструментов](#) нужно нажать кнопку «**Add multilayer**» .



Рисунок 4. Кнопка «**Add multilayer**»

Теперь структура выглядит так:

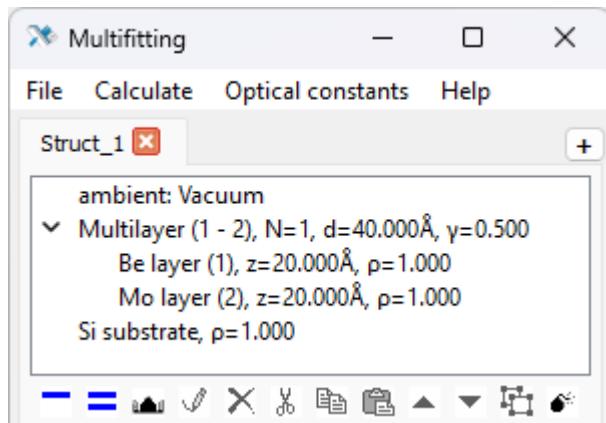


Рисунок 5. Периодическая Mo/Be структура

Структура представлена в виде [древовидного списка](#) с основной информацией о каждом элементе. По умолчанию стек содержит один период с двумя слоями в ячейке. Слои также имеют материал, плотность, толщину и интерфейс по умолчанию. Значения по умолчанию могут быть изменены в конфигурационном файле настроек. Изменить текущие параметры [элемента структуры](#) можно двойным кликом по элементу или выделив элемент и нажав иконку «Edit»

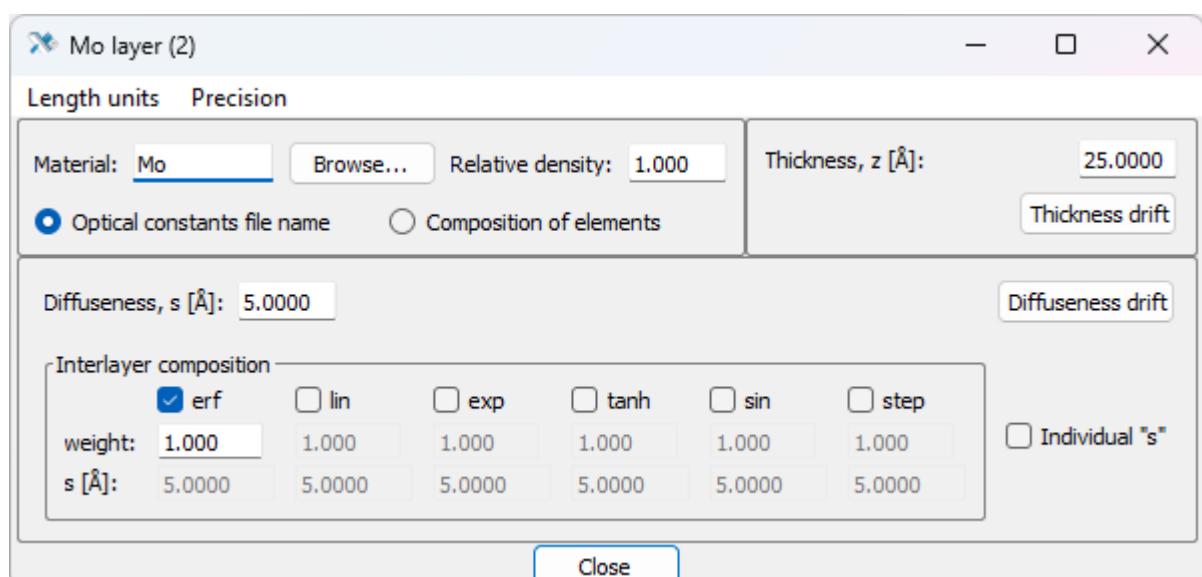


Рисунок 6. Окно свойств слоя

Открывшееся окно позволяет задавать различные параметры слоя. Зададим следующие: первый слой: «Material» – Be, «Thickness» – 35 Å, «Diffuseness» – 5 Å. Второй слой: «Material» – Mo, «Thickness» – 25 Å, «Diffuseness» – 5 Å. Аналогично редактируются свойства подложки. Материал подложки оставим Si, а интерфейс «Diffuseness» зададим 3 Å.

Опять же, аналогично двойным кликом или кнопкой открывается окно параметров стека.

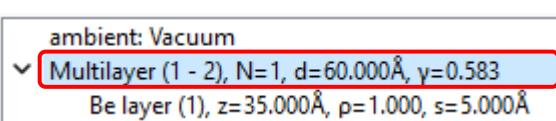


Рисунок 7. Доступ к свойствам стека

Установим число периодов 110. Величина периода «**d**» и толщинное соотношение «**y**» (отношение толщины первого (верхнего) слоя к периоду в двухкомпонентных зеркалах) уже рассчитаны в соответствии с заданными толщинами слоёв.

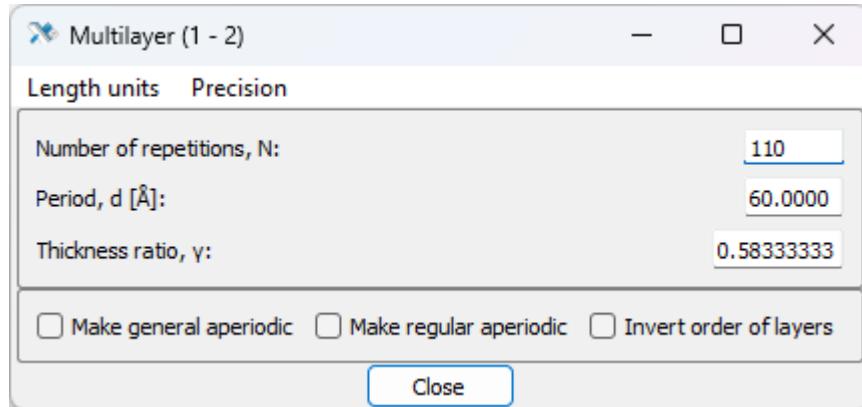


Рисунок 8. Параметры стека

Всё, структура периодического Mo/Be зеркала задана!

### 3.2 Сохранение и загрузка

Multifitting сохраняет данные в бинарном формате, файлы имеют расширение «**.fit**». Сохранить проект можно, выбрав пункт в меню «**File**» или нажав соответствующую комбинацию клавиш. «**Save**» (=«**Ctrl+S**») сохраняет в последний открытый файл. Если проект новый, то есть предыдущего открытия не было, то появится диалоговое окно, как для опции «**Save as**».

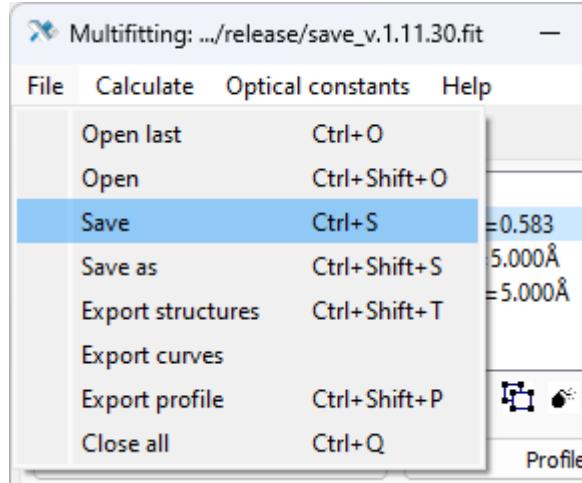


Рисунок 9. Меню «File»

«**Open last**» (=«**Ctrl+O**»), как следует из названия, открывает последний файл, с которым велась работа. Если такого нет, то появится диалоговое окно, как для опции «**Open**». Открыть файл также можно, просто перетащив его (drag-and-drop) в главное окно Multifitting.

Сохраните проект и продолжим.

### 3.3 Вычисление кривой отражения

Теперь рассчитаем кривую отражения рентгеновского излучения от данного зеркала. Для этого нужно указать, какую величину следует вычислять (отражение/прохождение/поглощение) и задать свойства зондирующего пучка, тип и диапазон значений аргумента.

В блоке [«независимых» кривых](#) (т.е. без экспериментальных данных) нужно добавить новую кривую. Вкладка для неё уже есть, но надпись «**<no description>**» говорит о том, что параметры не заданы.

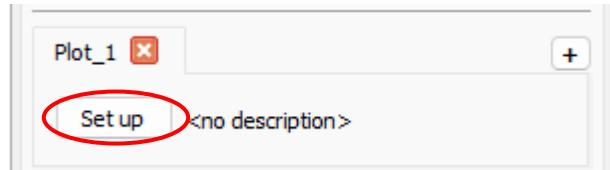


Рисунок 10. Параметры стека

Жмём кнопку «**Set up**» и выбираем тип кривой «**Specular scan**».

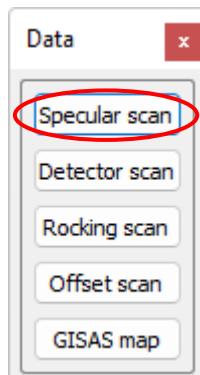


Рисунок 11. Выбор геометрии кривой

После задания типа кривой откроется соответствующее [окно настроек](#). Значения по умолчанию соответствуют угловому скану из 1000 точек от 0 до 7 градусов на длине волны  $\text{CuK}_\alpha$ . Увеличим число точек в скане до 5000. Теперь окно настроек кривой можно закрыть.

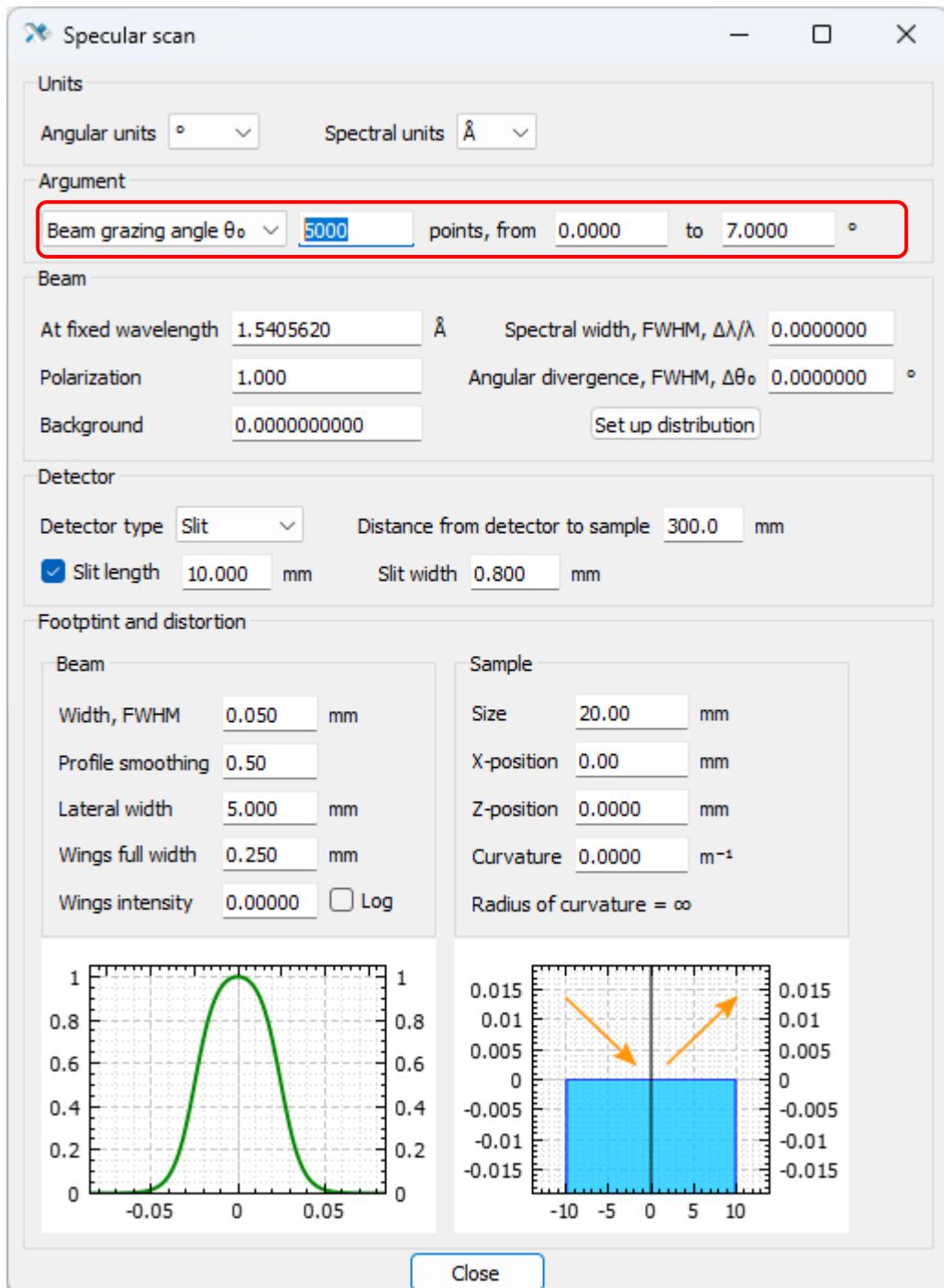


Рисунок 12. Настройки рефлектометрической кривой

Далее нужно запустить расчёт. Для этого можно нажать «Ctrl+Shift+C» или выбрать пункт «**Calculate curves**» в меню «**Calculate**» главного окна.

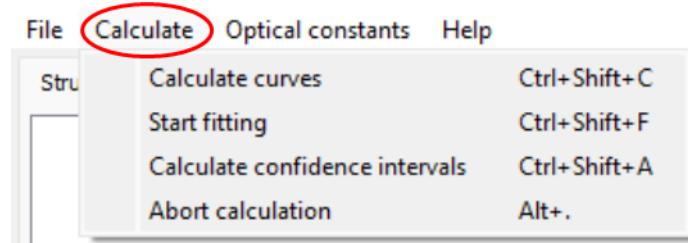


Рисунок 13. Главное меню «Calculate»

Кривая рассчитана! Время, потраченное на вычисление, выводится в консоль.

```
C:\Projects\Multifitting\build\release\Multifitting.exe
16 logical cores, 16 used
Multifitting version 1.11.30
Read optical constants: 0.158 seconds
saved
-----
Calculation... 0.012957 seconds
-----
```

Рисунок 14. Информация в консоли

Чтобы увидеть график, нужно открыть [окно](#) с графиками одномерных кривых. Кнопка для его открытия расположена в главном окне:

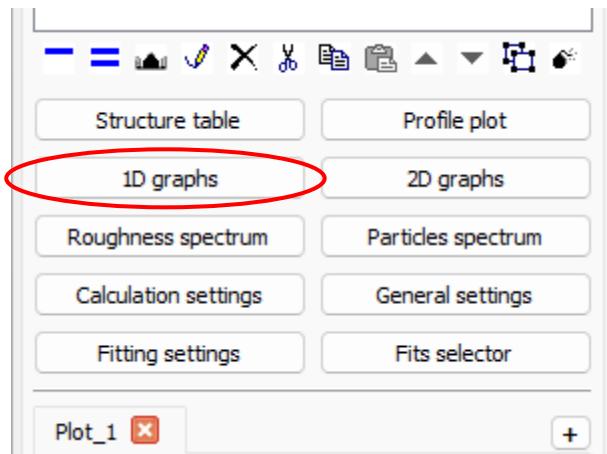


Рисунок 15. Кнопка окна «1D graphs»

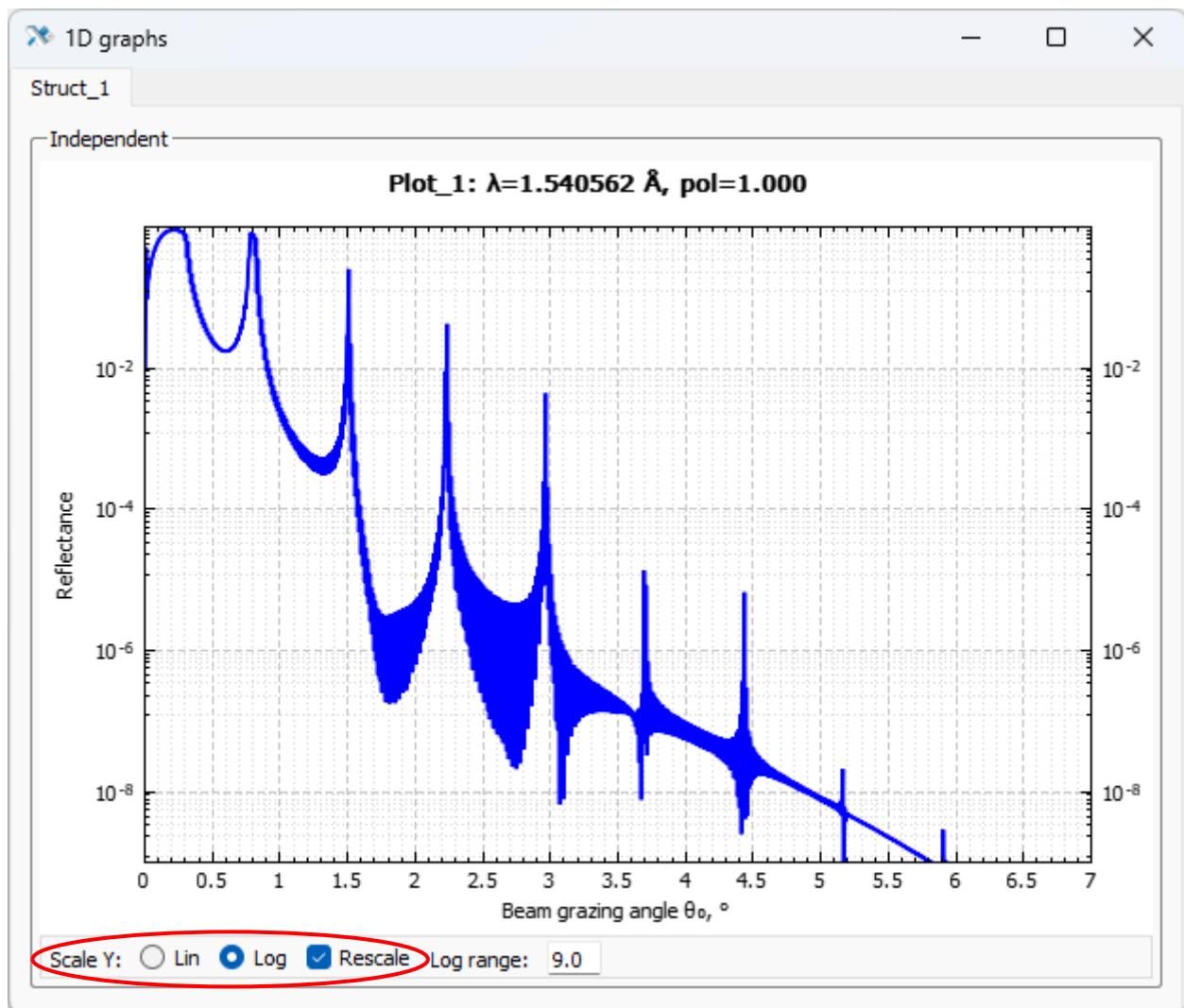


Рисунок 16. Окно «1D graphs»

Это окно можно держать открытым, тогда при изменении и пересчете структуры график также будет обновляться. Графики могут отображаться в линейном и логарифмическом масштабе; по умолчанию масштаб логарифмический. С помощью колеса мыши можно увеличивать или уменьшать масштаб, причем отдельно по каждой оси. Чтобы вернуть исходный масштаб, при котором видна вся кривая одновременно, следует снова нажать на переключатель масштабов. Это работает при включенной опции «Rescale», также при этой опции масштаб возвращается к исходному при каждом пересчёте структуры. При отключенной опции «Rescale» масштаб не изменяется автоматически при пересчёте и всё время остаётся пользовательским. В названии каждого графика указывается имя кривой и основные параметры скана.

### 3.4 Работа со структурной таблицей

Менять параметры структуры можно, кликнув на отдельные слои и в открывшемся окне выставляя нужные значения. Но это неудобно и неэффективно, если нужно повторить процедуру хотя бы несколько раз. Более правильный способ – использовать [общую таблицу](#), в которой представлены все численные параметры, описывающие структуру. Открыть её можно кнопкой «**Structure table**»:

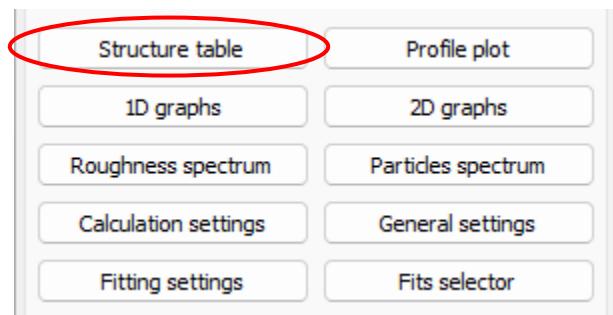


Рисунок 17. Кнопка окна «Structure table»

Таблица содержит множество полей, поэтому занимает немалую площадь на экране. Верхняя её часть содержит цветовую легенду для параметров и опции, позволяющие более удобным образом менять значения параметров.

The screenshot shows the 'Structure table' window with the following details:

- Top Bar:** File, Calculate, Length units, Other units, Precision.
- Legend Row:** pure slave (red), confidence interval (purple), active fit (pink), ρ (grey), z/d (grey), s (grey).
- Parameter Change Steps:**
  - Mouse wheel (checkbox checked), Change dependent (checkbox checked).
  - Recalculate (checkbox checked), Set model (button).
  - Buttons for ρ, z/d [Å], s [Å], γ, interl with values 0.100, 0.1000, 0.100, 0.0100000, 0.100 respectively.
- Struct\_1 Layer:**

		N	d [Å]	γ
Multilayer (1 - 2)	110	60.0000	0.5833333	
	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	
	1	20.0000	0.0000000	
	100	60.0000	1.0000000	
- Be layer (1) Parameters:**

Be	ρ [r.u.]	z [Å]	s [Å]	erf
Browse	1.000	35.0000	5.000	1.000
<input type="checkbox"/> fit				
0.700	10.0000	1.000	<input type="checkbox"/> erf	<input type="checkbox"/> erf
1.000	30.0000	20.000	5.000	5.000
- Mo layer (2) Parameters:**

Mo	ρ [r.u.]	z [Å]	s [Å]	erf
Browse	1.000	25.0000	5.000	1.000
<input type="checkbox"/> fit				
0.700	10.0000	1.000	<input type="checkbox"/> erf	<input type="checkbox"/> erf
1.000	30.0000	20.000	5.000	5.000
- Si substrate Parameters:**

Si	ρ [r.u.]	s [Å]	erf
Browse	1.000	3.000	1.000
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
0.700	1.000	20.000	3.000
1.000	20.000	3.000	3.000

Рисунок 18. Структурная таблица

Модификатор «**Recalculate**»  Recalculate по умолчанию включён, это значит, что при каждом изменении любого параметра кривые автоматически пересчитываются. Это можно видеть, если окно графиков открыто и находится перед глазами. Менять значения можно как вводом с клавиатуры, так и «прокруткой» значений с помощью колеса мыши или клавиатурных стрелок  $\uparrow$  и  $\downarrow$ . Шаг изменения параметра задаётся в секции «[Parameter change steps](#)».

### 3.5      Обратная задача

Теперь попробуем решить обратную задачу: найти параметры структуры по измеренной кривой отражения от Mo/Be зеркала. Файл с кривой называется «[Sample\\_D364\\_Mo\\_Be\\_angular\\_0.154nm.txt](#)», он прилагается к программе. Чтобы загрузить его в Multifitting и сопоставить модельной структуре, нужно нажать на кнопку «**Import**» внизу главного окна в разделе «[Target curves](#)». Надпись «<no description>» означает, что на данный момент никакая кривая не загружена.

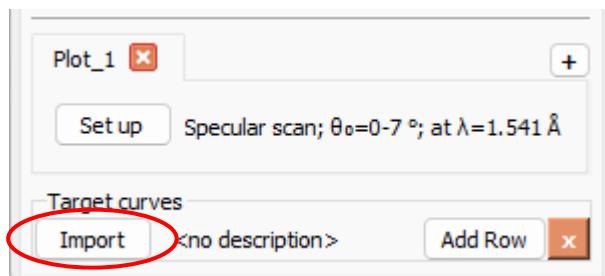


Рисунок 19. Загрузка экспериментальной кривой

Как и для независимой кривой, нужно указать тип скана. Выбираем «**Specular scan**».

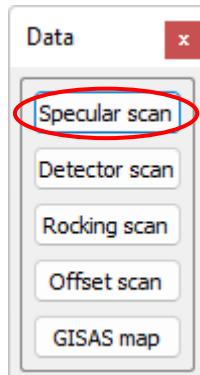


Рисунок 20. Выбор геометрии кривой

Открывшееся [окно](#) служит для импорта данных и задания параметров измерения, таких как измеряемая величина, аргумент, единицы измерения, нормировка, поляризация, фон, параметры аппаратной функции. Чтобы загрузить данные, достаточно перетащить текстовый файл с данными в это окно (drag-and-drop). Альтернатива – выбрать файл, нажав кнопку «**Browse**», или ввести путь к файлу и нажать «**Read data**».

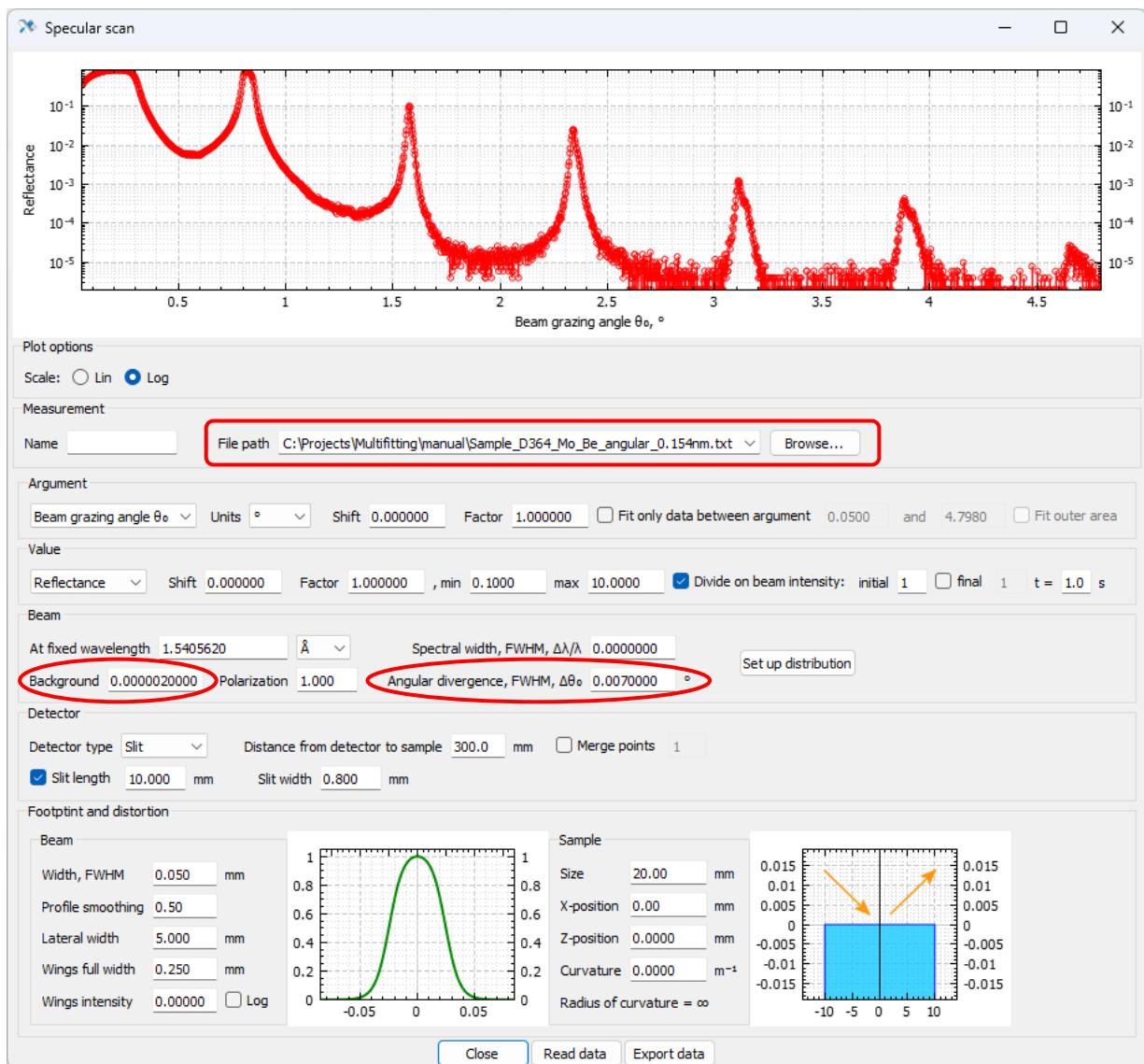


Рисунок 21. Настройка экспериментальной кривой

Выставляем значение «Background» равным  $2 \times 10^{-6}$ . Фон прибавляется к вычисленному коэффициенту отражения. Фон не повлияет на процесс подгонки, но позволит графикам выглядеть более эстетично. Угловую расходимость пучка указываем  $0.007^\circ$ . Значения остальных параметров оставляем по умолчанию и закрываем окно. Теперь краткая информация о загруженной кривой отображается в главном окне в области «Target curve».

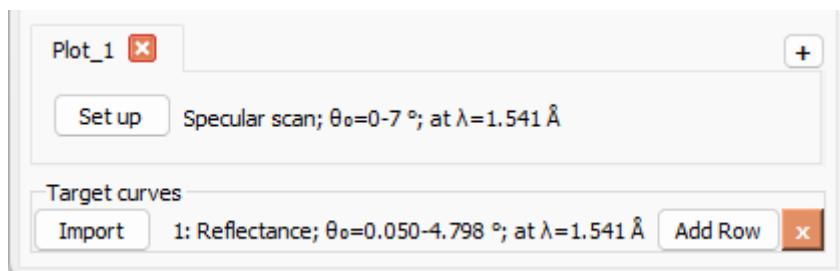


Рисунок 22. Краткая информация о кривых

Если теперь открыть заново окно графиков, то там в секции «Measured» появится загруженная кривая. При нажатии «Ctrl+Shift+C» появится также расчёчная кривая, наложенная на экспериментальную.

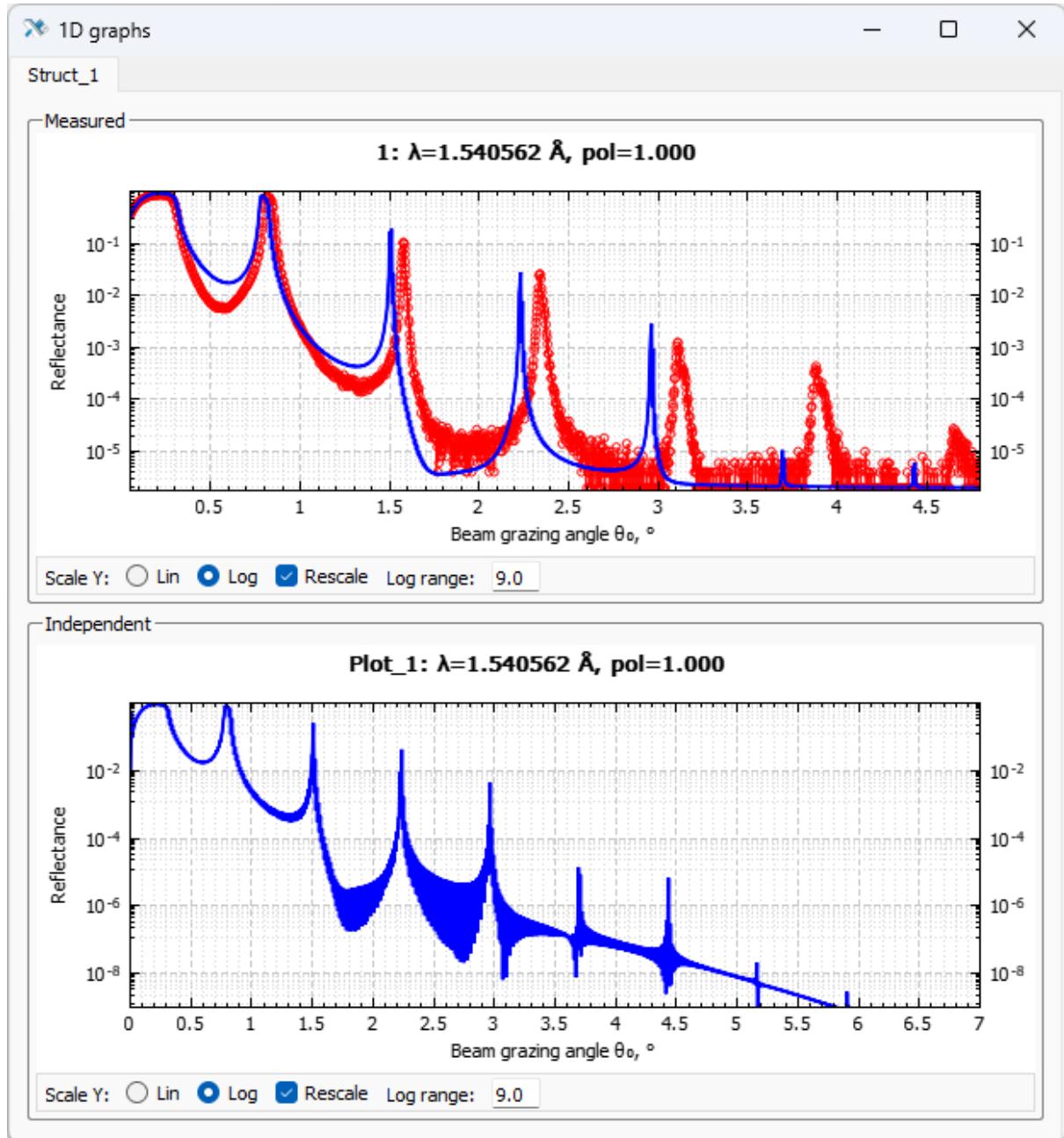


Рисунок 23. Графики всех кривых

При этом кривая в секции «Independent» никуда не исчезнет. Но нам она больше не нужна, поэтому её можно удалить или отключить, чтобы расчёт шёл быстрее. Удалить её можно, нажав на крестик на вкладке.

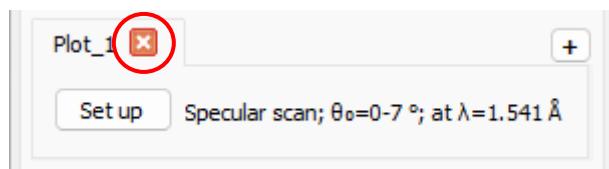


Рисунок 24. Удаление независимой кривой

Отключить кривую можно в окне «[Calculation settings](#)».

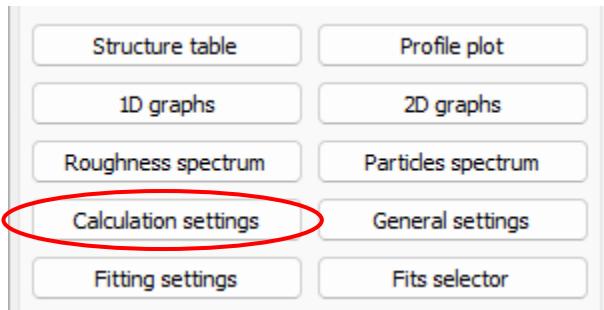


Рисунок 25. Кнопка окна «[Calculation settings](#)»

Отсюда можно управлять всеми кривыми, рассчитываемыми по «экспериментальным» и «независимым» сеткам. Отключаем галочку «[Independent](#)» или конкретную кривую.

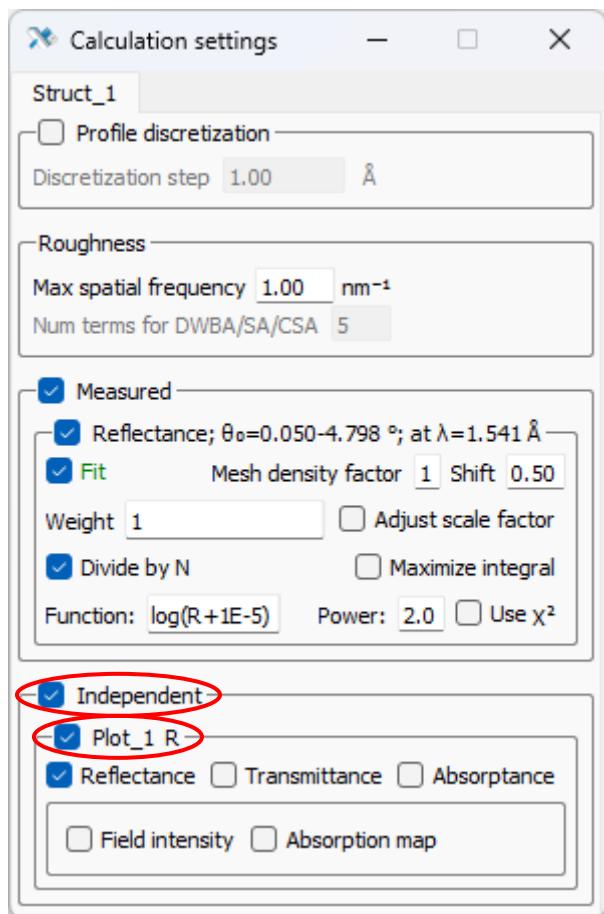


Рисунок 26. Окно «[Calculation settings](#)»

Дальше работаем только с экспериментально заданной сеткой и сопоставляем две кривые – модельную и измеренную. Имея перед глазами открытую таблицу и графики, можно начинать подбор параметров модели. Цель – найти такие физически разумные значения, при которых кривые отражения будут максимально похожи. Начать подбор можно, вручную меняя в таблице (прокручивая с подходящим шагом) значения периода, толщинного отношения «Y» или толщин слоёв по отдельности и диффузный интерфейс. Но можно видеть, что даже при неплохом визуальном совпадении положения и высоты пиков мы получим отличие в форме и ширине пиков. На картинке ниже пример подобного «совпадения», полученного ручным способом.

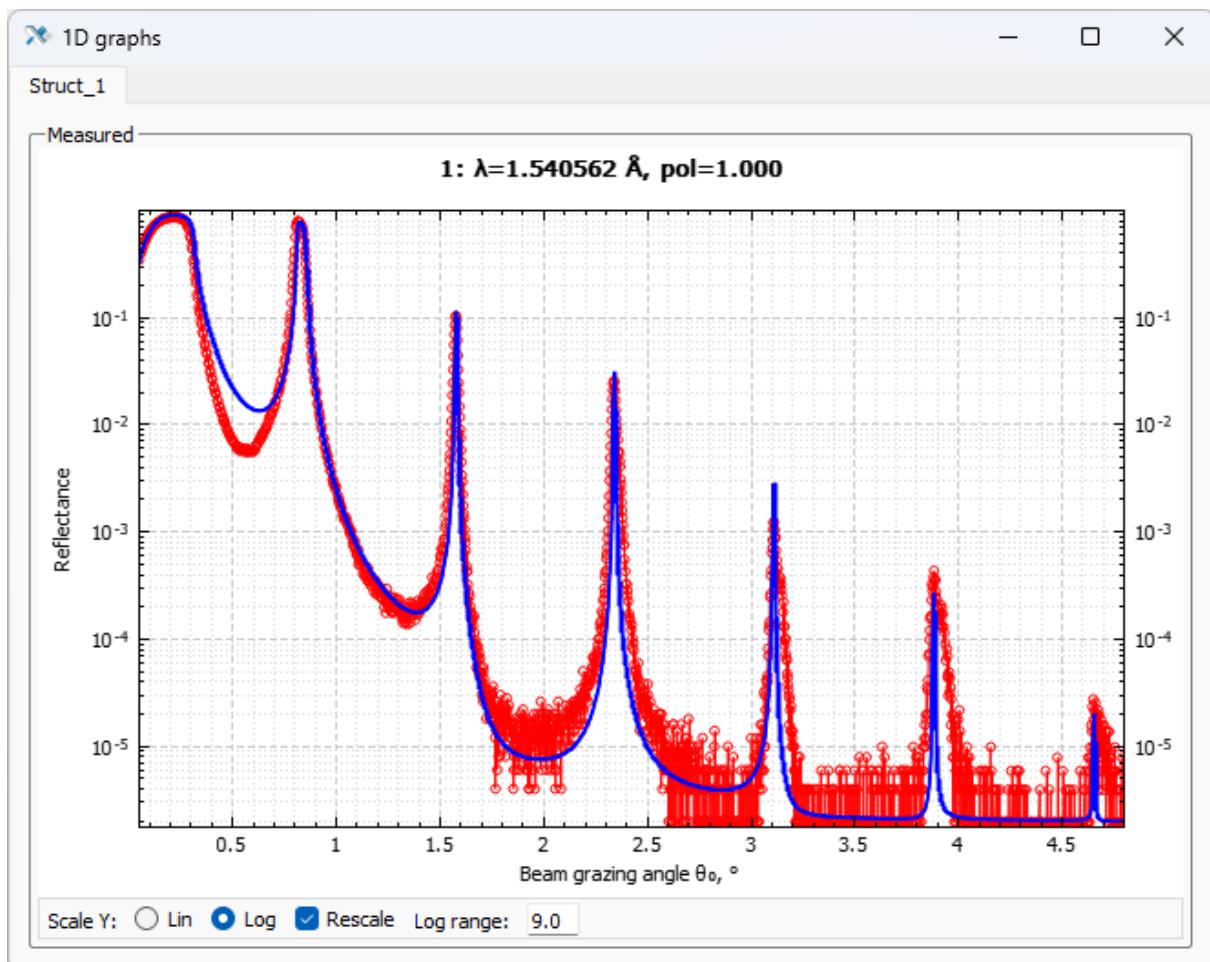


Рисунок 27. Первичная ручная подгонка кривых

Параметры представленной на графике модельной структуры следующие:

ambient: Vacuum
▼ Multilayer (1 - 2), N=110, d=57.100 Å, γ=0.550
Be layer (1), z=31.405 Å, ρ=1.000, s=7.100 Å
Mo layer (2), z=25.695 Å, ρ=0.951, s=3.900 Å
Si substrate, ρ=1.000, s=3.000 Å

Рисунок 28. Параметры первичной подгонки

Какие рассогласования между кривыми мы наблюдаем? Первое – это отличие в области между критическим углом и первым брэгговским пиком. Здесь сказывается упрощенность нашей модели: отражение в этой области углов в значительной степени определяется поверхностным слоем структуры, который на воздухе окисляется и покрывается адгезионным слоем из воды, углеводородов и т.д. В первую очередь на кривую отражения на длине волны 0.154 нм оказывает влияние толщина поверхностного слоя, а не точный химический состав. Чтобы учесть эти эффекты, хотя бы в первом приближении, следует поверх слоя Be добавить слой BeO. Для этого нужно закрыть структурную таблицу, выделить мышкой самый верхний элемент структуры (это внешняя среда) и нажать иконку «Add layer» — на панели инструментов. Слои всегда добавляются ниже выделенного элемента, но выше подложки. Изменить положение уже существующего выделенного слоя структуры можно с помощью кнопок «Move up» ▲ и «Move down» ▼ на панели инструментов.

При открытой таблице панель инструментов неактивна! Это сделано чтобы упростить синхронизацию структуры в главном окне и в таблице. Поэтому если вы не можете добавить слой – проверьте, закрыта ли таблица.

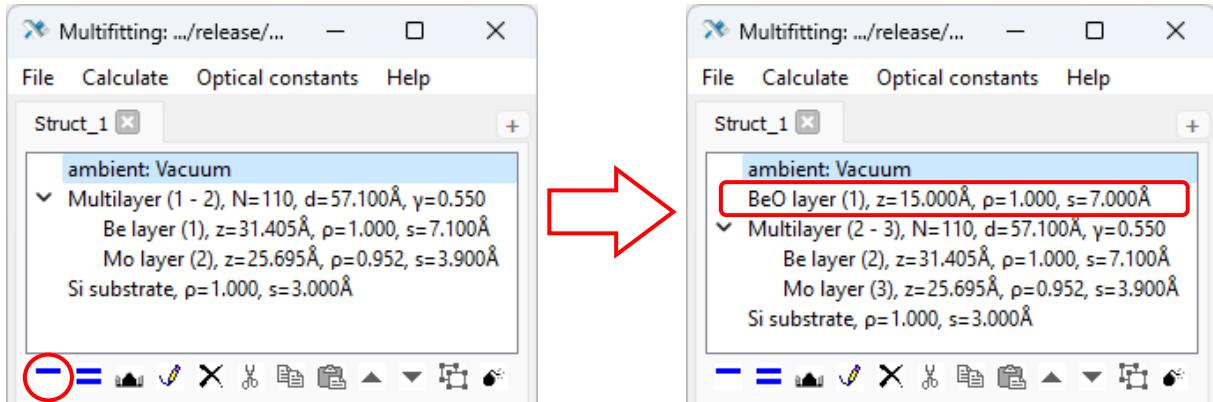


Рисунок 29. Добавление поверхностного слоя

Отличаются также брэгговские пики. Первый пик смещён по углу, а модельные 4,5,6 пики гораздо уже, чем измеренные. Резонансы определяются периодической частью структуры, и поэтому они должны адекватно описываться представленной моделью. Что же мы не учли? То, что реальная структура не является идеально периодической. В процессе магнетронного напыления меняется давление газов, происходит эрозия мишени, и вместе с этим меняется скорость роста плёнок. Легче всего обнаруживается эффект монотонного увеличения или уменьшения толщины периода по всей глубине структуры. Величина этого эффекта зависит от величины дрейфа, числа периодов и порядкового номера брэгговского пика. Multifitting позволяет задавать такие отклонения от строгой периодичности, поэтому добавим их в стек.

Снова открываем таблицу. По умолчанию таблица содержит некоторый минимальный набор параметров, и чтобы ввести дополнительные, нужно выполнить пару действий. Во-первых, нужно открыть [окно выбора несовершенств модели](#), нажав кнопку «**Set model**» под цветовой легендой:

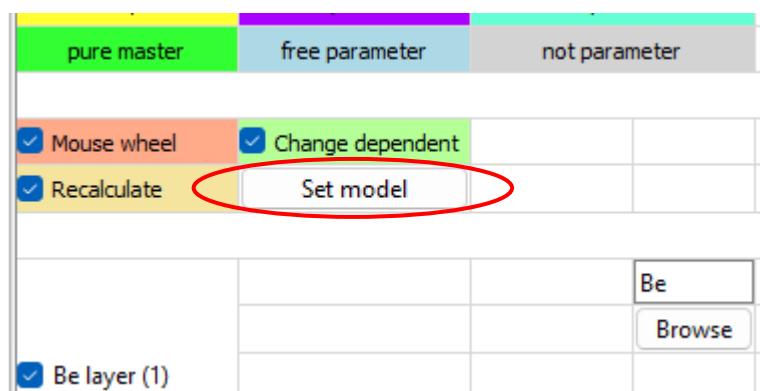


Рисунок 30. Кнопка настройки модели структуры

В открывшемся окне включаем дополнительный профиль переходного слоя и линейный дрейф толщины. Теперь эти параметры появятся в таблице, окно можно закрывать.

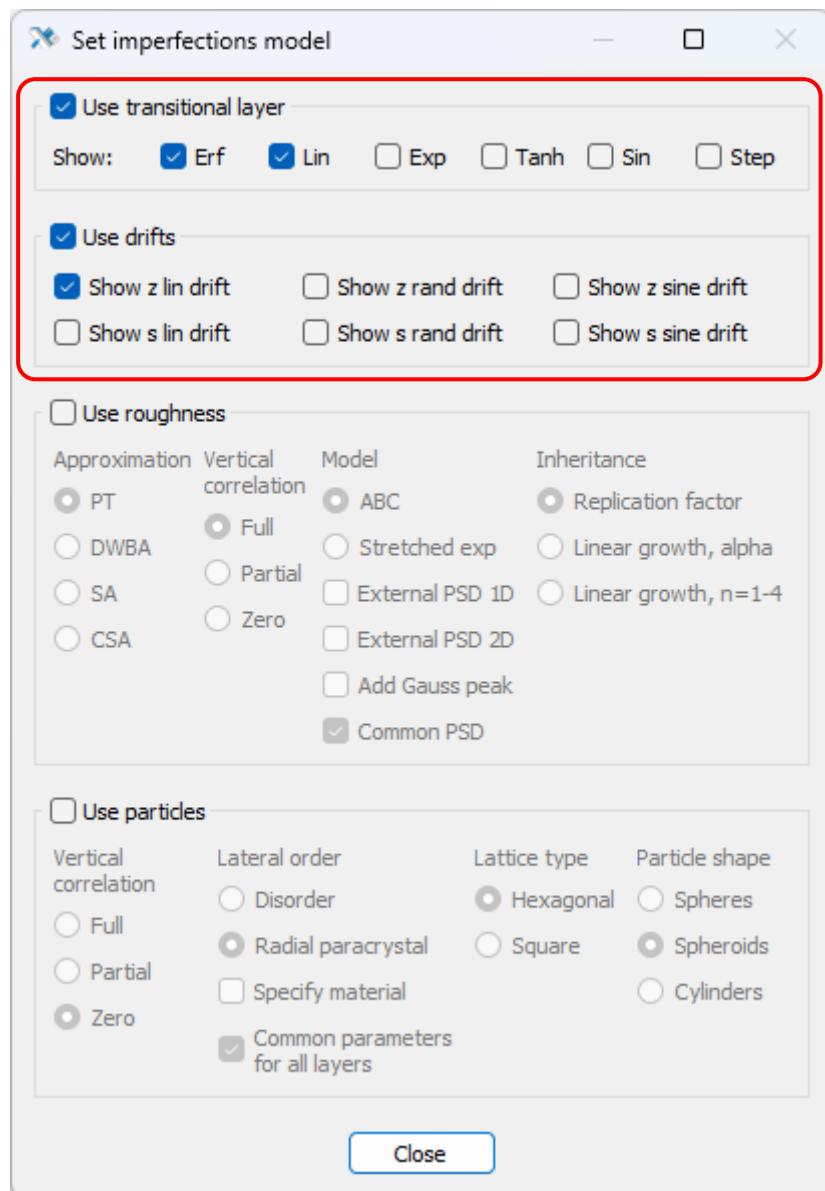


Рисунок 31. Выбираем дополнительные параметры структуры

Линейный дрейф означает линейное изменение толщины слоя с ростом номера периода на единицу, в процентах от номинальной толщины слоя; средняя толщина при этом сохраняется. Этот дрейф может быть как положительной, так и отрицательной величиной, т.е. слои могут становиться толще вглубь стека, а могут – тоньше. В нашем случае из формы экспериментальных пиков следует, что слои у подложки тоньше, чем у поверхности.

Профиль интерфейса между слоями – ещё один фактор, влияющий на высоты пиков и их соотношение между собой. По умолчанию, латерально усреднённый профиль диэлектрической проницаемости описывается функцией ошибок erf (см. галочки в таблице в каждом из слоёв), но в действительности форма может отличаться. Изменить вид профиля можно, включая другие функции (erf, lin, exp, tanh, sin, step). Удельный вес каждой функции задаётся под её названием. Важны только соотношения этих значений между различными функциями; абсолютная величина не важна. Если вес равен нулю, то это эквивалентно отключению данной функции профиля.

Включаем новые параметры, кликнув по их заголовкам.

Рисунок 32. Структурная таблица с новыми параметрами

The screenshot shows the 'Structure table' software interface with a complex multilayer model. The model consists of several layers: BeO, Be, Mo, and Si substrate. Each layer has its own set of parameters such as density ( $\rho$ ), thickness (z), and standard deviation (s). The Be layer is highlighted with a red box, showing its specific parameter settings:  $\rho$  [r.u.] = 1.000, z [ $\text{\AA}$ ] = 31.4050, s [ $\text{\AA}$ ] = 7.100, erf, lin, and dz lin models are selected. The entire screenshot is a screenshot of the software interface.

Итак, теперь модельная структура стала гораздо более сложной и многопараметрической. Можно по-прежнему менять параметры вручную и смотреть на результат в реальном времени (и это всегда полезно делать, на любом этапе рефлектометрической реконструкции), однако шансы обнаружить искомую область параметров весьма малы. На этом этапе автоматизированная подгонка становится необходимой. Прежде чем перейти к автоматической подгонке, следует обратить внимание на следующее обстоятельство. Хотя оптимально подобранныя функция невязки в некоторой мере «выравнивает» вклад разных по интенсивности участков кривой, но она не устраняет дисбаланс полностью. Большое различие в интенсивности разных участков кривой отражения приводит к тому, что алгоритм часто стремится уменьшить невязку в первую очередь за счёт области полного внешнего отражения (углы 0–0.3°), часто в ущерб важным особенностям кривой отражения, таким как брэгговские пики высоких порядков. Чтобы такой конфликт не возникал, следует заранее позаботиться о том, чтобы область полного внешнего отражения, больше зависящая от геометрии измерений, чем от особенностей самой структуры,

не имела слишком больших рассогласований и, что ещё надёжнее, вообще не участвовала в подгонке. Улучшить совпадение расчёта и измерения можно, указав размер образца, ширину и форму зондирующего пучка, смещение образца относительно центра пучка. Пример приведён на картинке ниже.

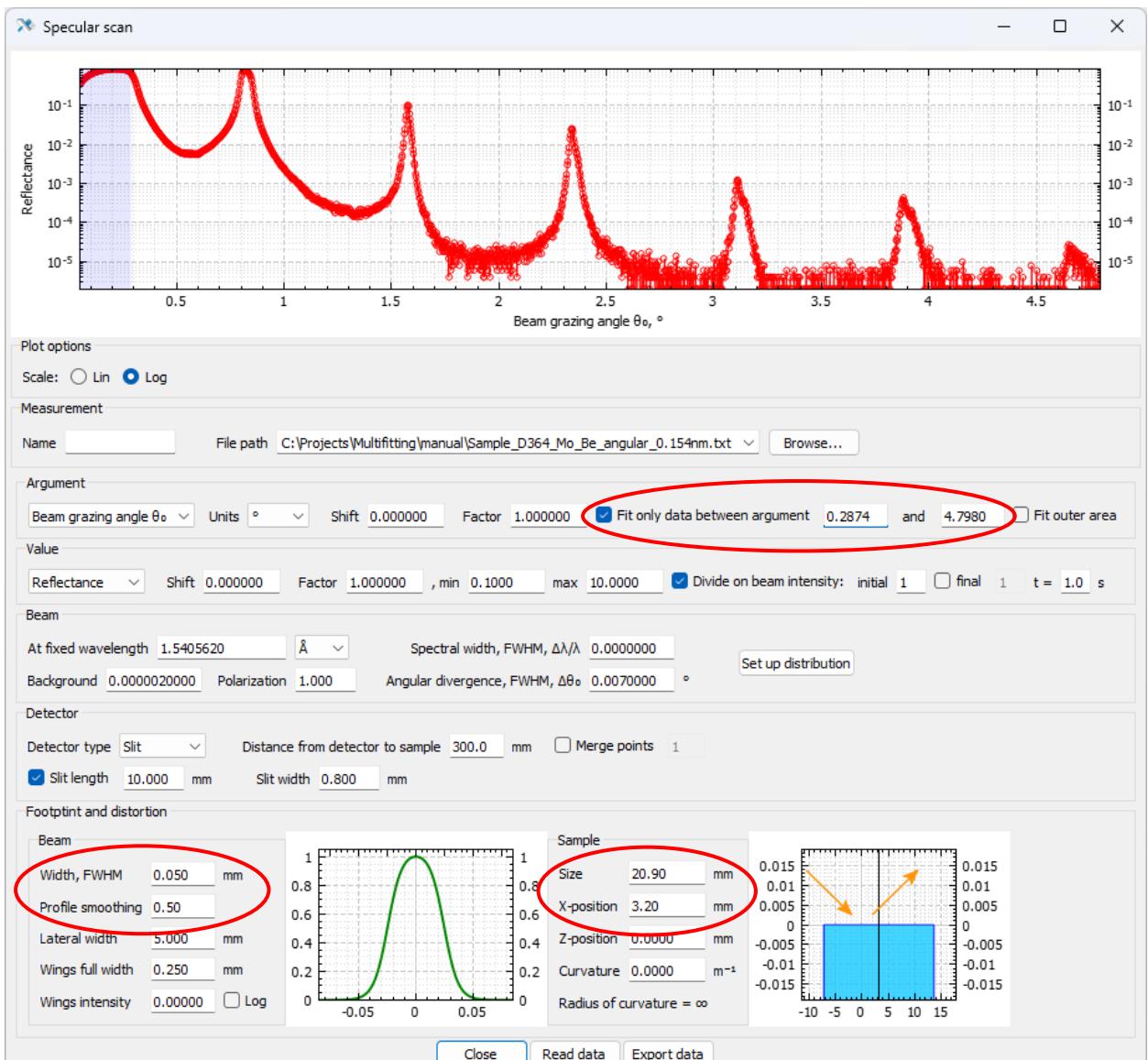


Рисунок 33. Параметры, определяющие эффект следа и диапазон аргумента для подгонки

Чтобы подобрать подходящие значения, нужно держать открытым окно с графиками, и при изменении геометрических параметров пересчитывать кривую. Чтобы масштаб кривых не менялся каждый раз на исходный, нужно отключить опцию «Rescale» в окне графиков.

Чтобы вести подгонку не по всей оси, нужно включить опцию «Fit only data between argument» в настройках кривой и вывести минимальный аргумент за область полного внешнего отражения.

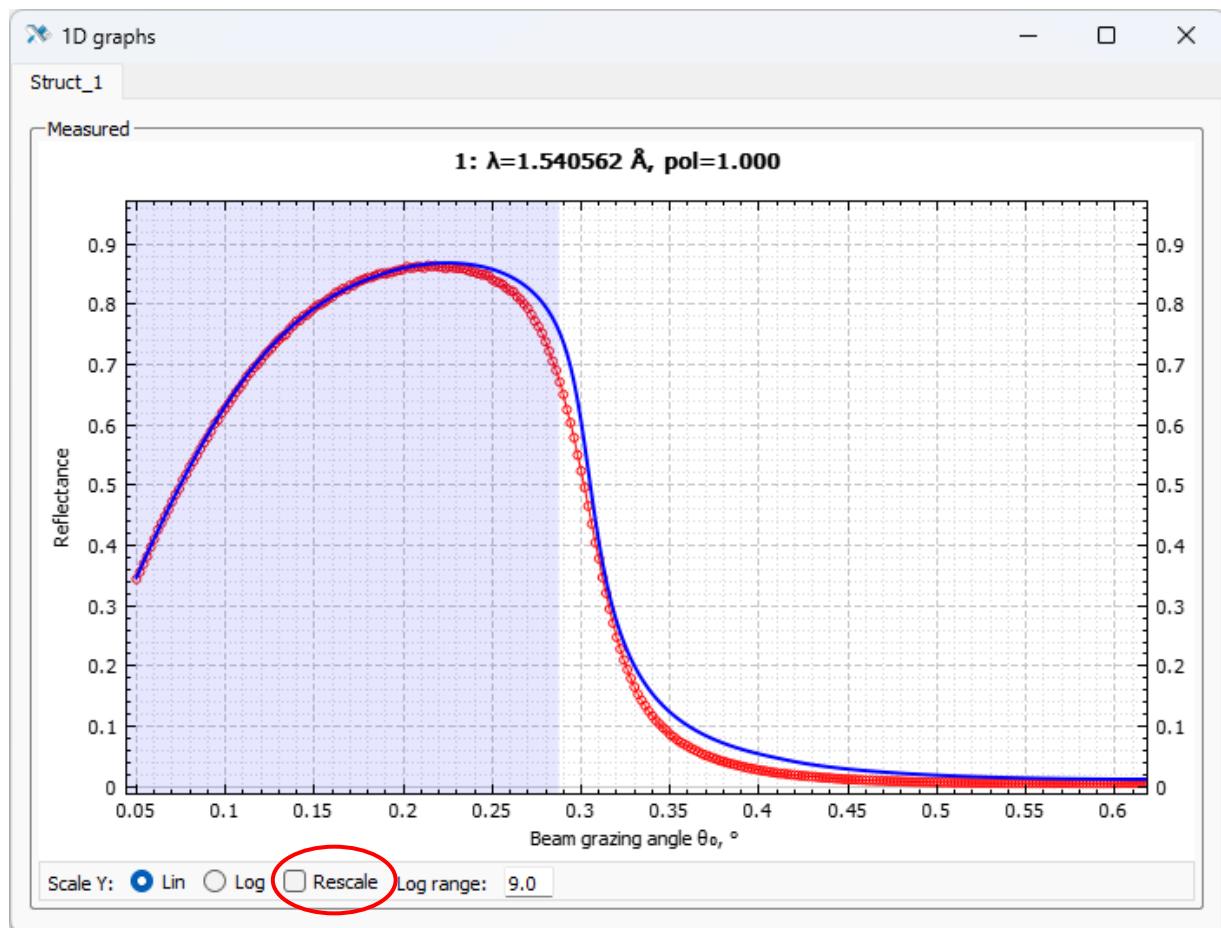


Рисунок 34. Затемнённая область исключена из подгонки

Теперь подготовим структуру к фитингу. В первую очередь для этого потребуется отметить в таблице параметры, которые будут подгоняться. Для этих параметров нужно включить опцию «**fit**»  и установить нижнюю и верхнюю границы значений.

z [Å]	
текущее значение	→ 32.5470
фитинг вкл/выкл	→ <input checked="" type="checkbox"/> fit
мин	→ 25.1000
макс	→ 45.0000

Рисунок 35. Подготовка параметра к подгонке

Разумно полагать, что уход толщин Mo и Be в процессе напыления одинаковый, поэтому уменьшим число степеней свободы модели и свяжем параметры дрейфа Mo и Be слоёв. Для этого нужно кликнуть *правой* кнопкой мыши на заголовке параметра «**dz lin**», вызвав контекстное меню:

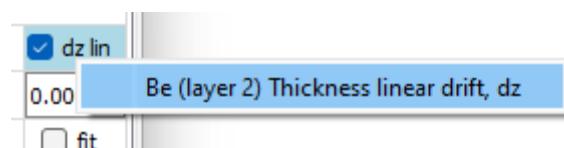


Рисунок 36. Контекстное меню параметра

Действие контекстного меню открывает окно «[Coupling editor](#)» для дрейфа Be слоя. Чтобы добавить зависимый параметр, нужно поставить курсор в одно из полей «**Slaves**» и после этого также **правой** кнопкой мыши кликнуть по целевому параметру, т.е. дрейфу Mo слоя. Имя добавленного параметра будет видно слева от редактируемого поля.

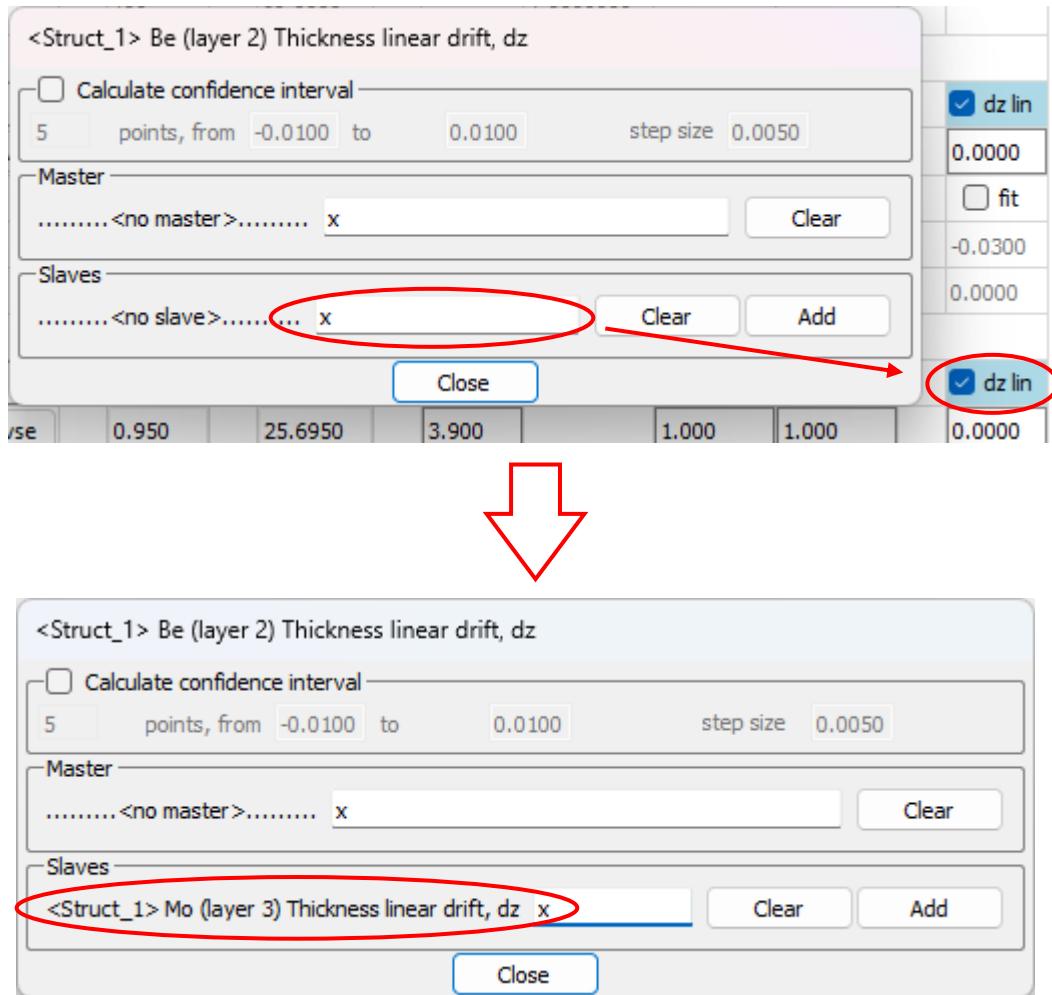


Рисунок 37. Добавление зависимого параметра

«[Coupling editor](#)» можно закрывать. Теперь таблица со всеми выставленными подгоночными параметрами и начальными значениями выглядит как на рисунке ниже. При первых прогонах можно не включать в модель поверхностный слой. Слои со всеми их параметрами можно быстро включать и выключать в таблице.

**Structure table**

File Calculate Length units Other units Precision

**Struct\_1**

pure slave	confidence interval	active fit	<input type="button" value="ρ"/>	<input type="button" value="z/d"/>	<input type="button" value="s"/>			
master/slave	master/confidence	use particles	<input type="button" value="Reset"/>	<input type="button" value="Reset"/>	<input type="button" value="Reset"/>			
pure master	free parameter	not parameter	-10.0%	±10.0%	±10.0%			

**Parameter change steps**

<input checked="" type="checkbox"/> Mouse wheel	<input checked="" type="checkbox"/> Change dependent	<input type="button" value="Set model"/>	<input type="button" value="ρ"/>	<input type="button" value="z/d [Å]"/>	<input type="button" value="s [Å]"/>	<input type="button" value="γ"/>	<input type="button" value="interl"/>	<input type="button" value="dz lin"/>
<input checked="" type="checkbox"/> Recalculate			0.010	0.0100	0.010	0.0100000	0.100	0.0010

**Struct\_1**

		BeO	<input type="button" value="Browse"/>	<input type="button" value="ρ [r.u.]"/>	<input type="button" value="z [Å]"/>	<input checked="" type="checkbox"/> <input type="button" value="s [Å]"/>	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input type="checkbox"/> lin	
				1.000	15.0000	7.000	1.000	1.000	
				<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	
				0.300	5.0000	1.000	<input type="button" value="s erf"/>	<input type="button" value="s lin"/>	
				1.000	30.0000	20.000	7.000	7.000	

**Mожно поначалу отключить**

<input checked="" type="checkbox"/> BeO layer (1)	<input type="button" value="N"/>	<input type="button" value="d [Å]"/>	<input type="button" value="γ"/>					
	110	57.1000	0.5500000					
<input checked="" type="checkbox"/> Multilayer (2 - 3)	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit					
	1	20.0000	0.0000000					
	100	60.0000	1.0000000					

		Be	<input type="button" value="Browse"/>	<input type="button" value="ρ [r.u.]"/>	<input type="button" value="z [Å]"/>	<input checked="" type="checkbox"/> <input type="button" value="s [Å]"/>	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input checked="" type="checkbox"/> lin	<input checked="" type="checkbox"/> dz lin
				1.000	31.4050	7.100	1.000	1.000	-0.0230
				<input type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit
				0.700	25.1000	1.000	<input type="button" value="s erf"/>	<input type="button" value="s lin"/>	-0.0320
				1.000	40.0000	20.000	7.100	7.100	-0.0150

		Mo	<input type="button" value="Browse"/>	<input type="button" value="ρ [r.u.]"/>	<input type="button" value="z [Å]"/>	<input checked="" type="checkbox"/> <input type="button" value="s [Å]"/>	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input checked="" type="checkbox"/> lin	<input checked="" type="checkbox"/> dz lin
				0.950	25.6950	3.900	1.000	1.000	-0.0230
				<input type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input checked="" type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
				0.800	20.0000	1.000	<input type="button" value="s erf"/>	<input type="button" value="s lin"/>	-0.0300
				1.000	30.0000	20.000	3.900	3.900	0.0000

Si substrate		Si	<input type="button" value="Browse"/>	<input type="button" value="ρ [r.u.]"/>	<input type="button" value="z [Å]"/>	<input checked="" type="checkbox"/> <input type="button" value="s [Å]"/>	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input type="checkbox"/> lin	
				1.000		3.000	1.000	1.000	
				<input type="checkbox"/> fit		<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	
				0.700		1.000	<input type="button" value="s erf"/>	<input type="button" value="s lin"/>	
				1.000		20.000	<input type="button" value="s erf"/>	<input type="button" value="s lin"/>	

Рисунок 38. Подгоночные параметры в таблице

Перед стартом нужно задать функцию невязки. Это делается в окне «**Calculation settings**». Можно оставить значения по умолчанию, они соответствуют логарифмической невязке, при которой величины меньше 1E-5 не вносят заметного вклада. Галочка «**fit**» для кривой должна быть включена.

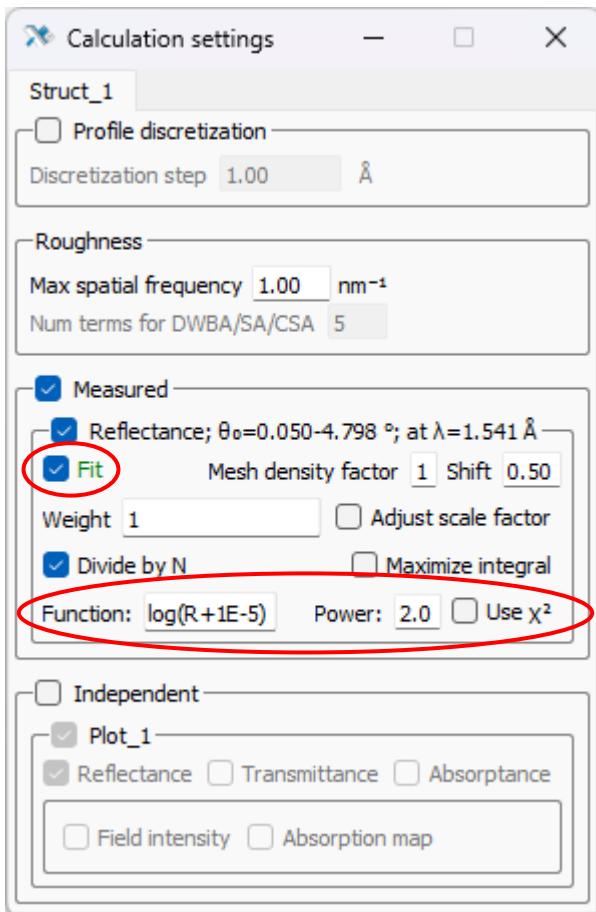


Рисунок 39. Участие кривой в подгонке и функция невязки

Алгоритм минимизации выбирается и настраивается в специальном окне «[Fitting settings](#)», которое также открывается с панели главного окна.

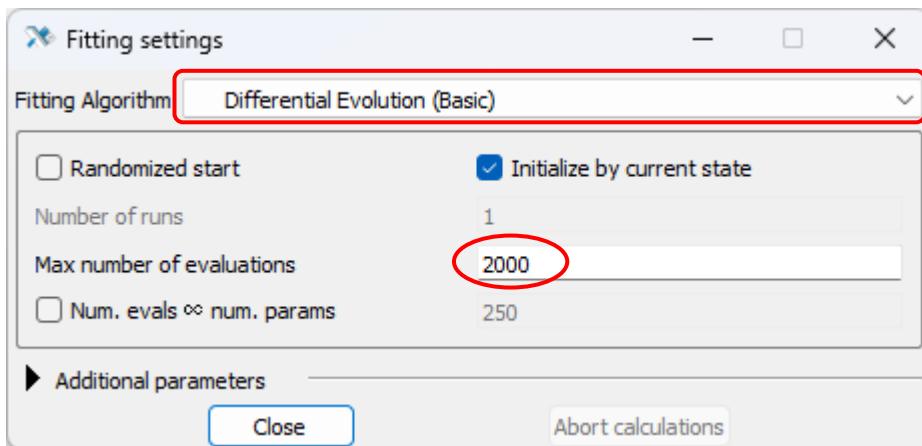


Рисунок 40. Окно «[Fitting settings](#)»

В качестве алгоритма выбираем «[Differential Evolution \(Basic\)](#)». Число вычислений невязки оставляем 2000, этого как правило достаточно, чтобы появилась сходимость.

Подготовка закончена. Теперь нужно запустить фитинг, нажав «[Ctrl+Shift+F](#)» или выбрав «[Start fitting](#)» в меню «[Calculate](#)» главного окна. Пойдет процесс вычисления, отображаемый в

консоли. Туда выводятся номер итерации, текущие значения варьируемых параметров и текущие значения невязки.

The screenshot shows a terminal window titled 'C:\Projects\Multifitting\build\release\Multifitting.exe'. The window displays the text 'fitting...'. Below it, the output of a 'SO "Differential Evolution (Basic)" optimization' is shown, listing iterations from 0 to 70. Each iteration includes parameter values and the value of the objective function |f|.

Iteration	Parameter Values	f
0	1.000000 1.000000 7.100000 31.405000 -0.023000 1.000000 1.000000 3.900000 25.695000	0.867284
10	0.871107 0.681943 2.946312 36.696790 -0.031074 0.322832 0.228453 3.197965 28.871324	7.21889
20	0.046393 0.014560 19.606953 31.940839 -0.024119 0.928064 0.897122 4.792234 29.285861	4.04328
30	0.085437 0.696682 15.545184 28.840906 -0.031507 0.153010 0.635433 19.852061 21.744063	6.03919
40	0.526316 0.712750 12.087520 26.097306 -0.016643 0.703102 0.651316 2.562803 22.054125	6.4954
50	0.051623 0.169845 12.468597 26.988939 -0.021557 0.759320 0.345747 10.132880 26.880967	4.43336
60	0.153446 0.881131 2.704411 27.399153 -0.030452 0.611591 0.081611 9.508235 25.370719	4.79994
70	0.667955 0.656753 2.156626 34.935030 -0.021308 0.400616 0.984948 7.741173 29.130881	6.5955

Рисунок 41. Отображение процесса подгонки в консоли

В конце в консоль будет выведено сравнение начальной и конечной невязок. Пользователю будет предложено принять результат или вернуться к исходному. При нажатии «Yes» структура в таблице будет обновлена. Если нет, то структура вернётся к состоянию до подгонки.

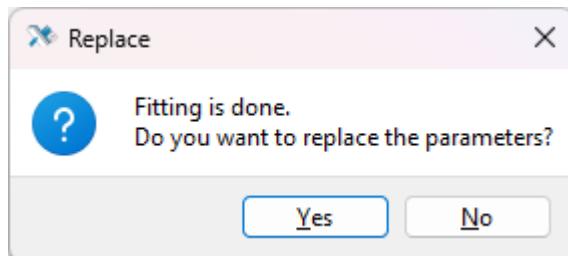


Рисунок 42. Окончание подгонки

Не всегда следует подгонять все параметры одновременно, т.к. при слишком большой размерности параметрического пространства труднее выявить желаемую область параметров и алгоритм будет хуже сходиться. Поэтому следует отключать и подключать группы параметров в последовательных подгонах, комбинируя автоматический фитинг с ручным изменением параметров, коррекцией невязки, включением и отключением вспомогательных слоёв и т.д. С одного запуска можно получить приемлемое соответствие кривых лишь для очень простых структур с минимумом параметров. В общем же случае подгонка – процесс итерационный и требующий ручного вмешательства. В результате этого комбинированного поиска можно получить примерно следующую картину:

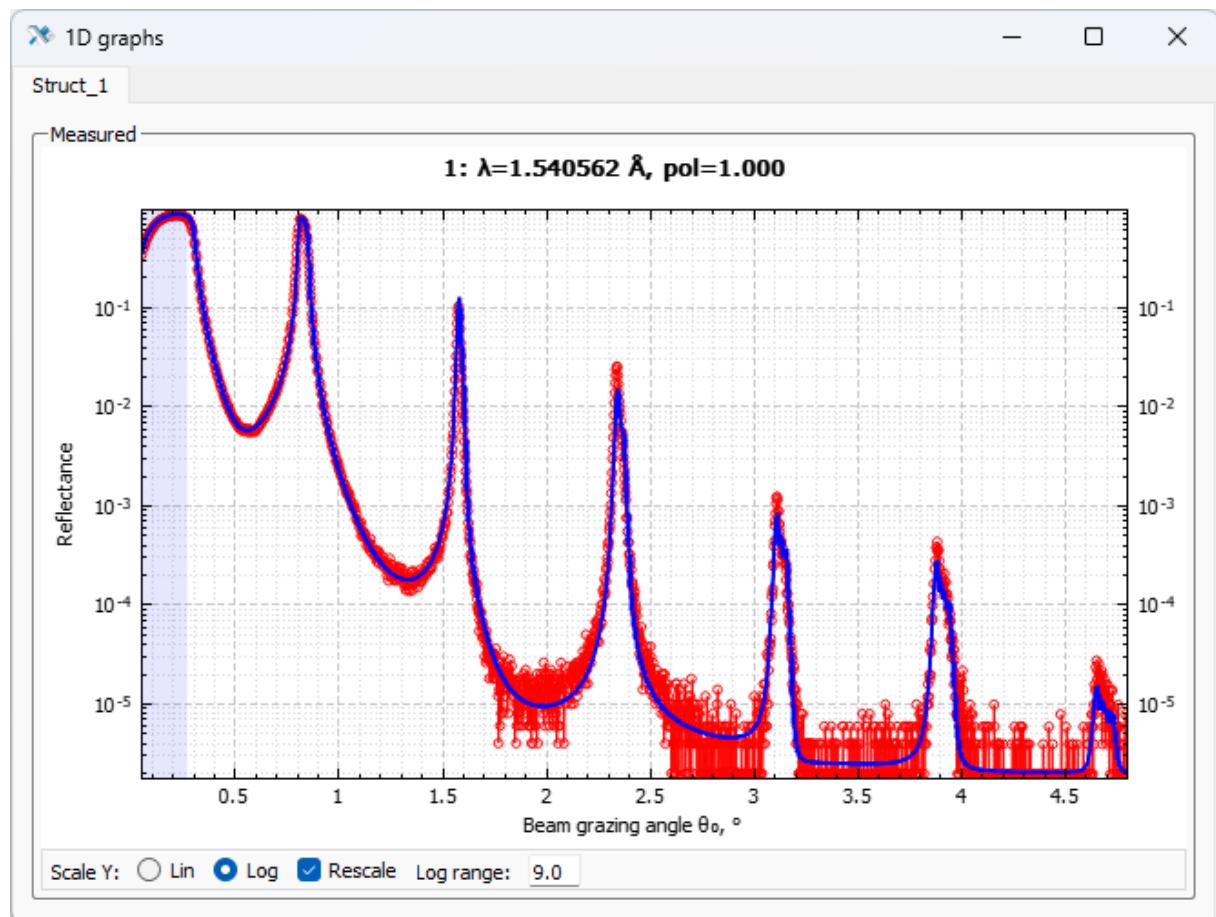


Рисунок 43. Результат подгонки

Найденная структура, соответствующая картинке выше, имеет следующие параметры:

```

ambient: Vacuum
BeO layer (1), z=16.750 Å, ρ=0.999, s=12.548 Å
▼ Multilayer (2 - 3), N=110, d=56.658 Å, γ=0.586
  Be layer (2), z=33.181 Å, ρ=1.000, s=5.522 Å
  ---> dz = {line, -0.0245%}
  Mo layer (3), z=23.477 Å, ρ=0.951, s=3.170 Å
  ---> dz = {line, -0.0245%}
Si substrate, ρ=1.000, s=3.000 Å

```

Рисунок 44. Найденные параметры

Важный вопрос: означает ли совпадение кривых отражения истинность найденных параметров? Нет, не означает, но является весомым аргументом для оперирования найденными величинами в дальнейшей работе. Оценка надёжности тех или иных данных требует некоторого опыта подобной «реконструкторской» работы и работы с реальными структурами; также крайне желательно привлекать результаты дополнительных исследований образцов.

### 3.6 Дополнительные экспериментальные кривые

Хорошее совпадение расчёта и измерения в одном спектральном диапазоне не означает совпадения в другом. Поэтому важно использовать для моделирования не единичные кривые, а

их наборы. Добавим для рассматриваемого Mo/Be зеркала спектральную кривую отражения, полученную под углом, близким к нормали. Для этого нужно внизу главного окна Multifitting на имеющейся экспериментальной кривой нажать кнопку «**Add row**». Появится еще одна строка, в которой можно загрузить экспериментальную кривую так же, как это было сделано и в первый раз:

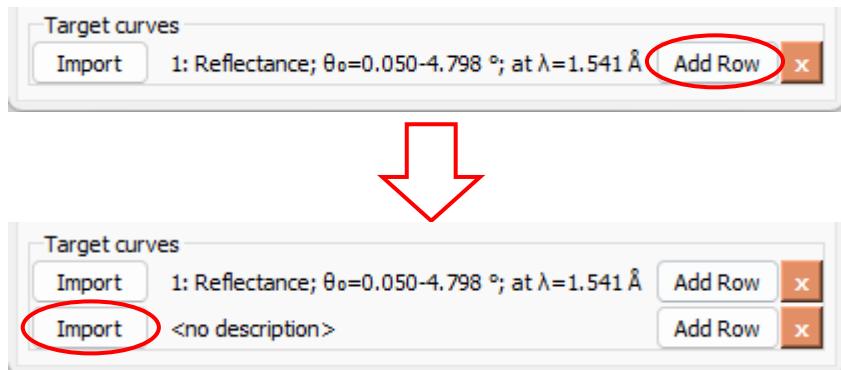


Рисунок 45. Добавление кривой

После нажатия на кнопку «**Import**» выбираем тип кривой «**Specular scan**». Откроется соответствующее окно, в которое следует «перетащить» файл со второй кривой, «**Sample\_D364\_Mo\_Be\_spectral\_88deg.txt**».

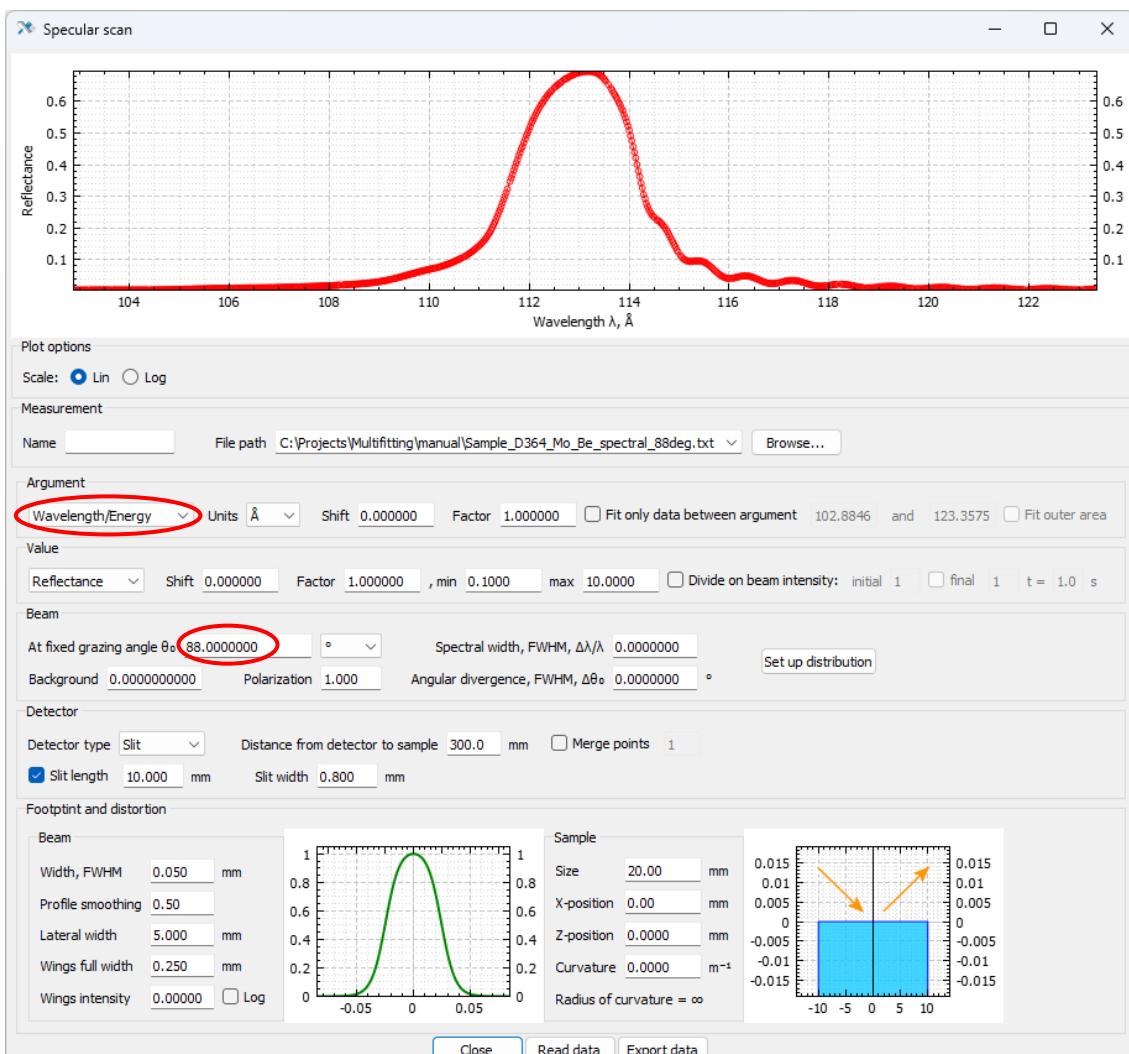


Рисунок 46. Спектральная кривая

По сравнению с параметрами по умолчанию следует изменить тип аргумента на «**Wavelength/Energy**», убедиться, что единицы измерения аргумента – «**Å**», поскольку в данном файле длины волн даны в ангстремах, выставить угол скольжения  $88^\circ$ . Теперь окно импорта можно закрыть.

В окне «**1D graphs**» теперь расположены две кривые, и при каждом изменении параметров видны отличия между экспериментальными и модельными данными в двух типах измерений. В окне «**Calculation settings**» теперь доступны опции для обеих кривых. Можно вести подгонку по двум кривым одновременно, если у обеих включены галочки «**Fit**», при этом суммарная невязка среднеквадратичным образом складывается из невязок каждой кривой с соответствующим весом, который также может быть задан в поле «**Weight**». Подкорректируем параметры, чтобы увеличить вклад спектральной кривой, и запустим подгонку снова нажатием «**Ctrl+Shift+F**».

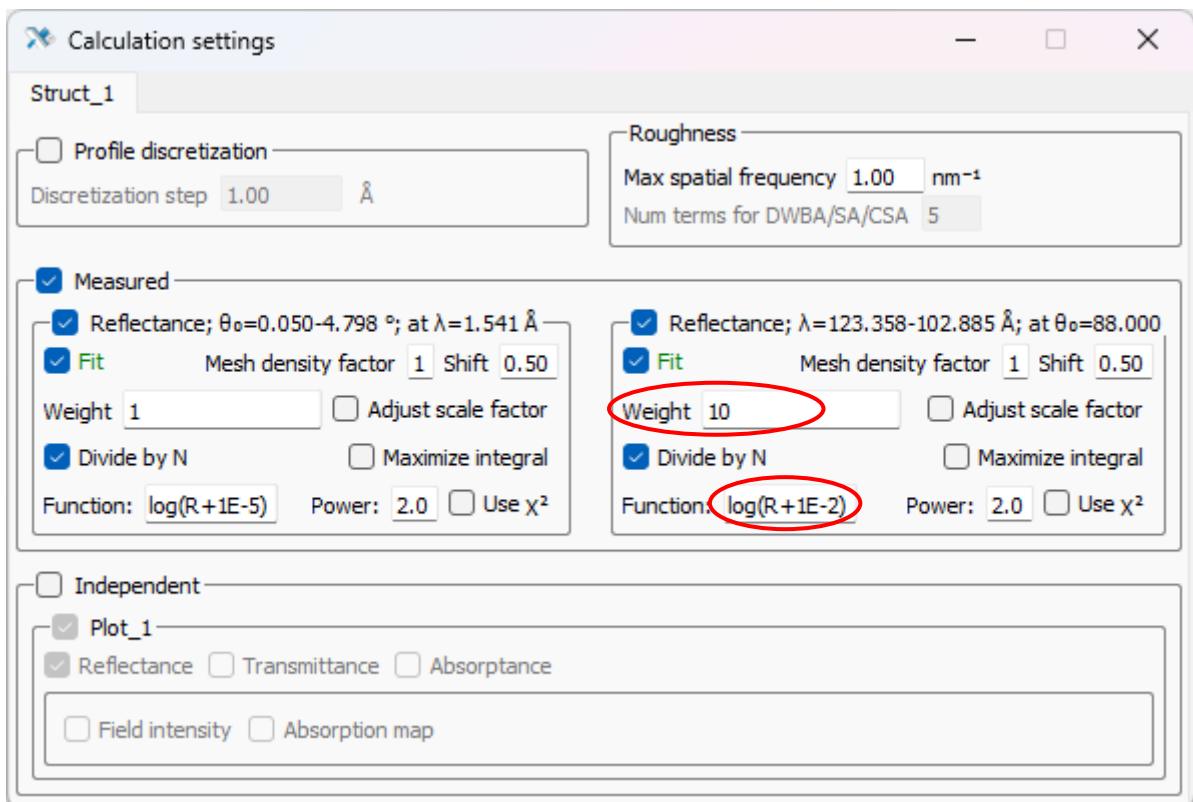


Рисунок 47. Настройка соотношения между вкладами кривых

Изменением относительного веса, настройкой подгоночного интервала и функции невязки можно перемещать фокус между кривыми и их областями кривых.

Наш финальный результат:

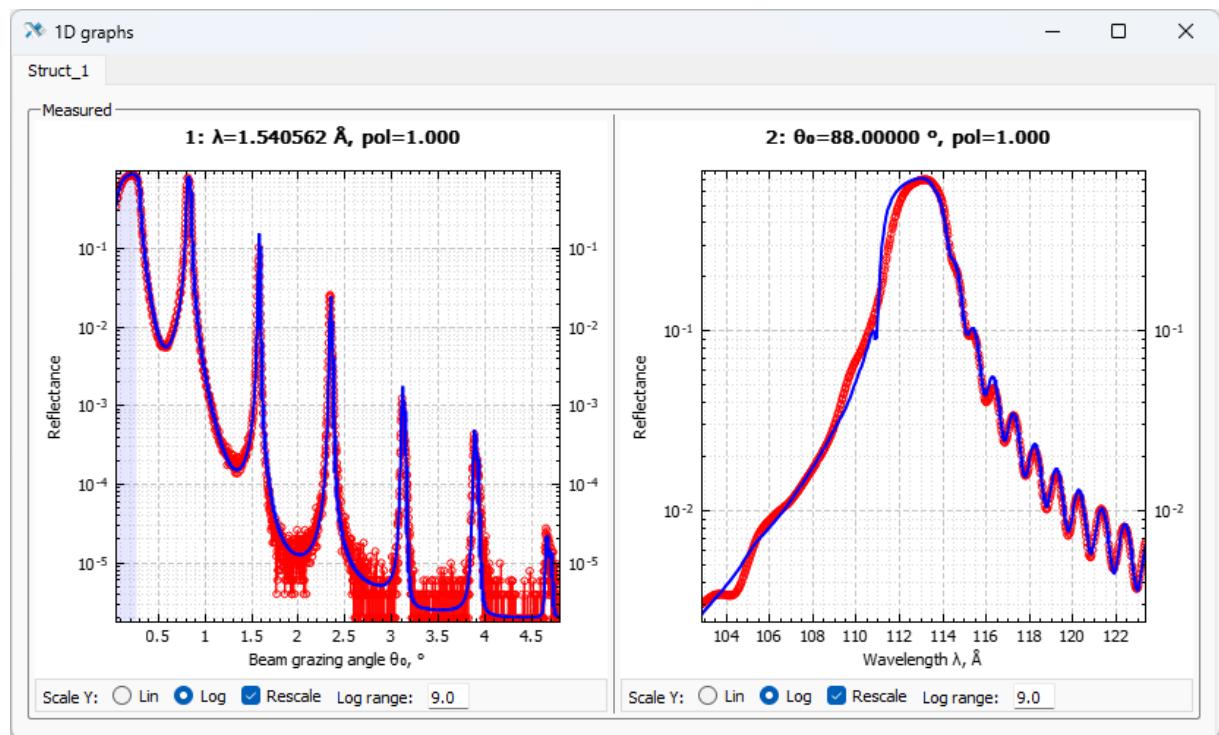


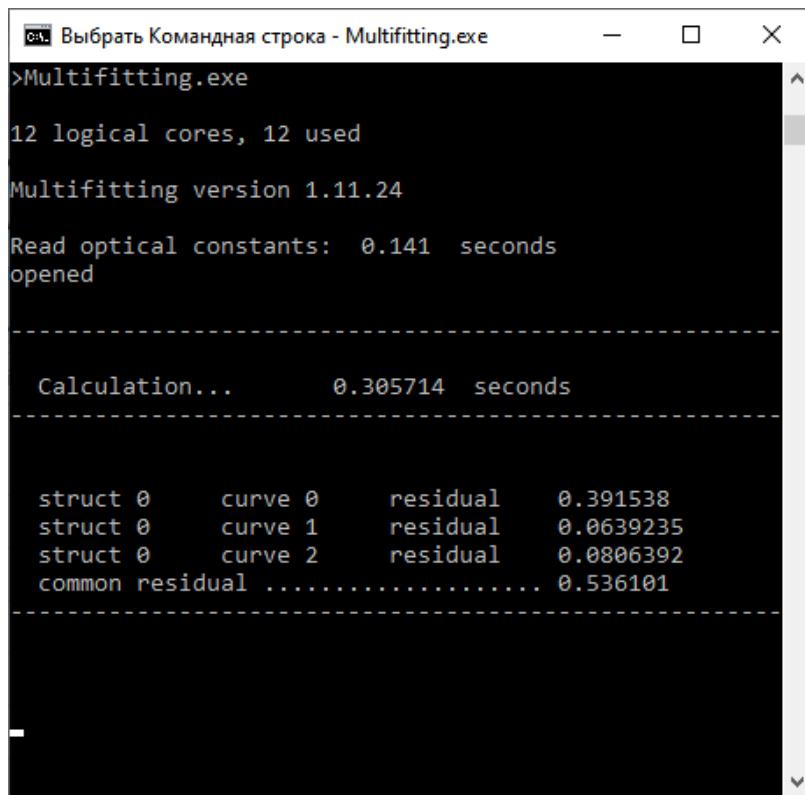
Рисунок 48. Итог подгонки по двум кривым одновременно

## 4 Пользовательский интерфейс

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

### 4.1 Консоль

Консоль одновременно служит для вывода текстовой информации о текущем состоянии программы и сообщений о внутрипрограммных ошибках. Консоль 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.



```
Выбрать Командная строка - Multifitting.exe
>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 49. Пример вывода программы в консоли

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

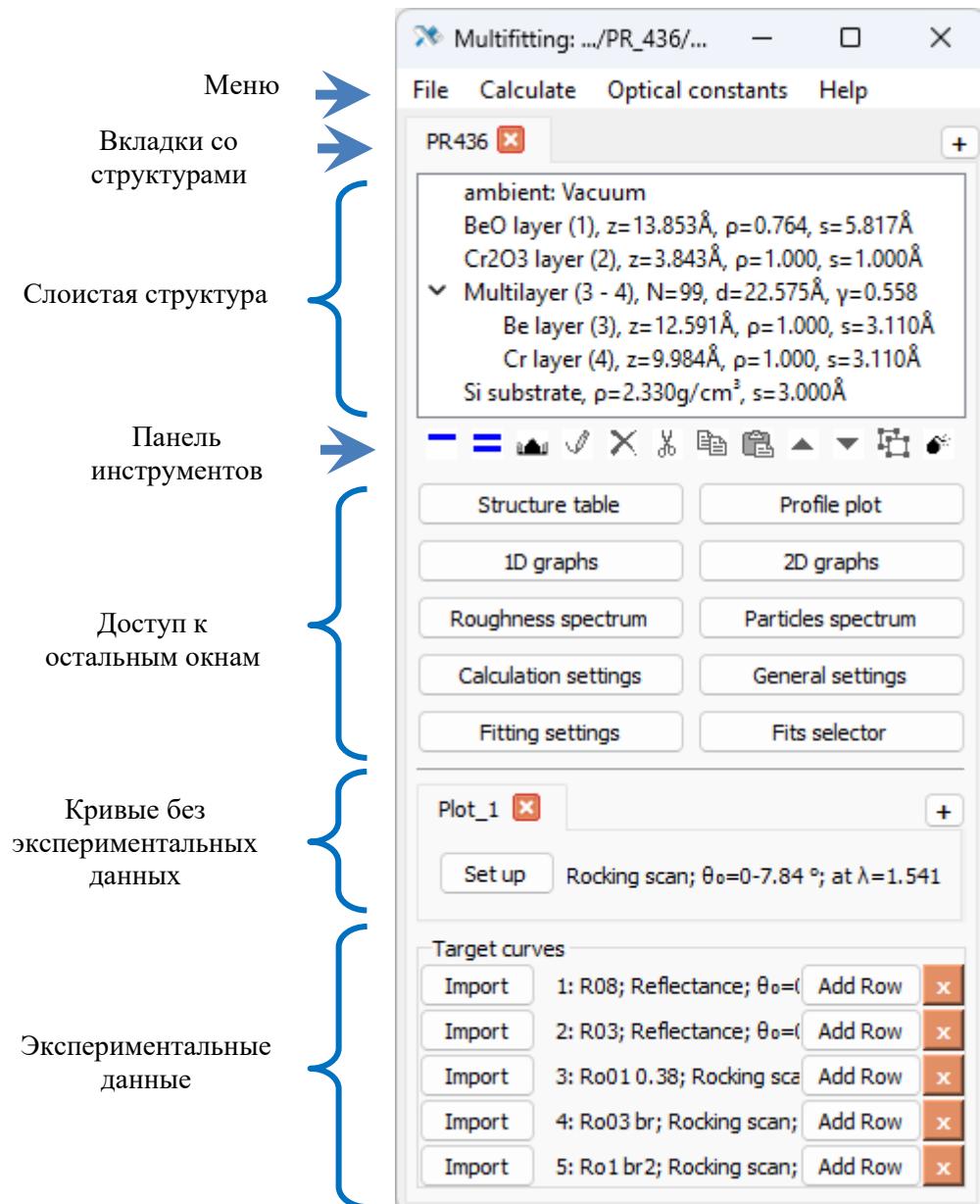


Рисунок 50. Структура основного окна

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](#).

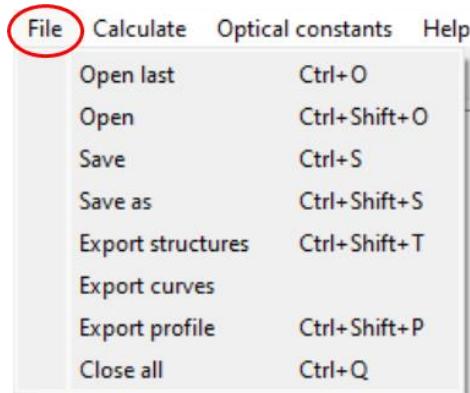


Рисунок 51. Главное меню «File»

- «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 последний проект будет открыт даже при новом запуске программы, если эта опция выключена, то откроется только последний проект в сессии. Если предыдущий файл проекта не найден, 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 откроется диалоговое окно 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 единицы. «<curve\_name>» – редактируемое имя кривой.
- «Export profile» экспортирует профиль многослойной структуры в файл. В зависимости от настроек, экспортируется диэлектрическая проницаемость, относительная плотность материала, концентрации химических элементов.

#### 4.1.1.2 Calculate

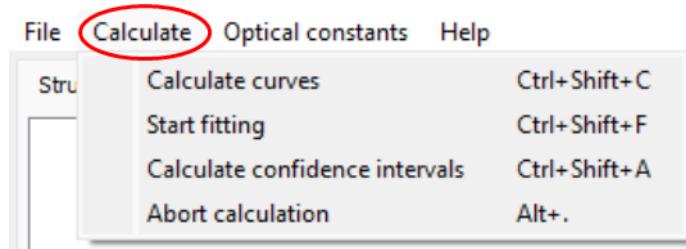


Рисунок 52. Главное меню «Calculate»

- «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 при разных значениях оцениваемых параметров для определения доверительных интервалов. Результат сохраняется в файле «[confidence.txt](#)»
- «Abort calculation» останавливает текущую подгонку.

#### 4.1.1.3 Optical constants

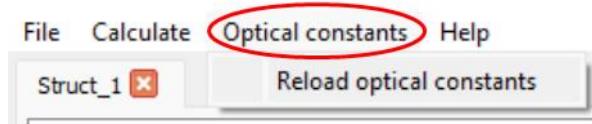


Рисунок 53. Главное меню «Optical constants»

- «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

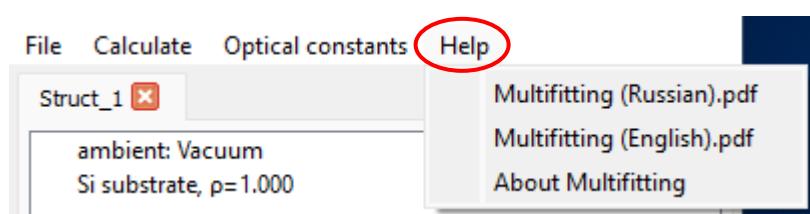


Рисунок 54. Главное меню «Help»

- «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

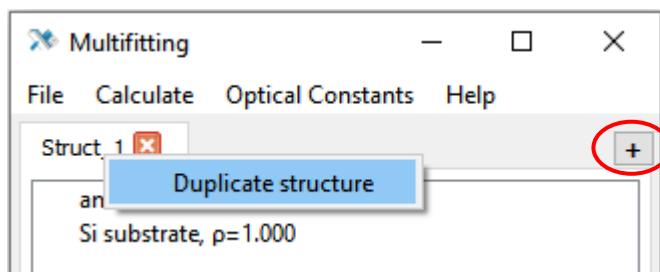


Рисунок 55. Добавление структуры: дублирование существующей или создание новой

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. 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

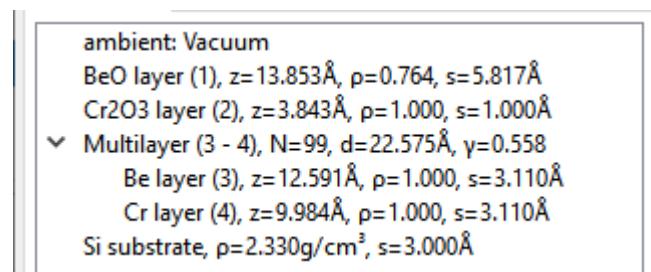


Рисунок 56. Древовидный список, описывающий структуру

Под названием вкладки располагается окно с древовидным списком, иллюстрирующим общий вид многослойной структуры и показывающим основную информацию о её параметрах. Для

слоёв это материал, толщина «**Z**», разброс толщин (если слой в составе «регулярной» апериодики), относительная или абсолютная плотность «**p**», среднеквадратичная толщина переходной области на верхней границе данного слоя «**S**». Для подложки это материал, плотность и толщина переходной области. Параметры периодической многослойки – число периодов «**N**», толщина периода «**d**», толщинный фактор «**V**» – отношение толщины верхнего слоя к толщине периода (если в периоде два слоя).

#### 4.2.4 Панель инструментов

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



Рисунок 57. 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 [Импорт и экспорт данных](#).
- «**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 клавиш: «**Ctrl+X**»
- «**Copy**» помещает элемент структуры в буфер обмена. Комбинация клавиш: «**Ctrl+C**»
- «**Paste**» вставляет элемент структуры из буфера обмена. Комбинация клавиш: «**Ctrl+V**»

- «Move up» перемещает элемент вверх по структуре.
- «Move down» перемещает элемент вниз по структуре.
- «Ungroup» удаляет многослойку и вставляет на её место, слои, 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 апериодическая многослойка (general aperiodic), регулярная апериодическая многослойка (regular aperiodic). Закрыть окно можно кнопкой «Close», нажатием клавиши «Enter» или «Escape».

##### 4.2.5.1 Layer

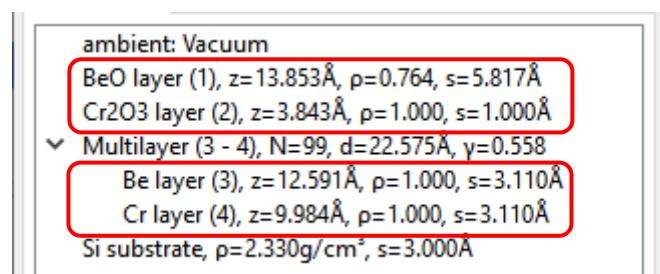


Рисунок 58. Слои на схеме структуры

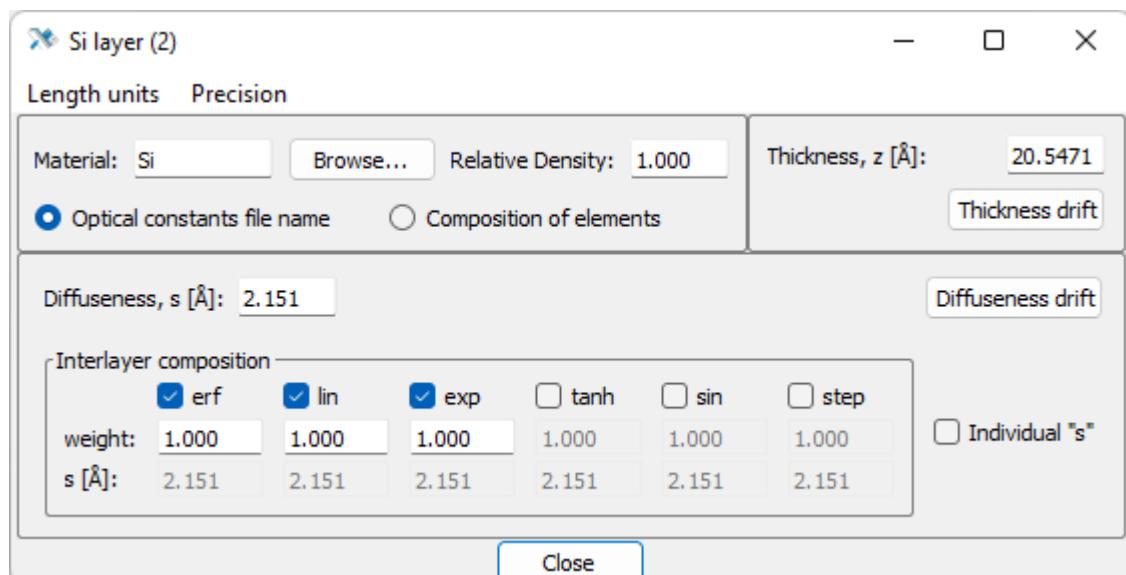


Рисунок 59. Окно «Layer»

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

#### 4.2.5.1.1 Заголовок

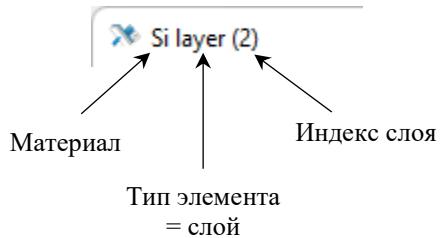


Рисунок 60. Заголовок окна «Layer»

Заголовок окна позволяет однозначно определить, 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

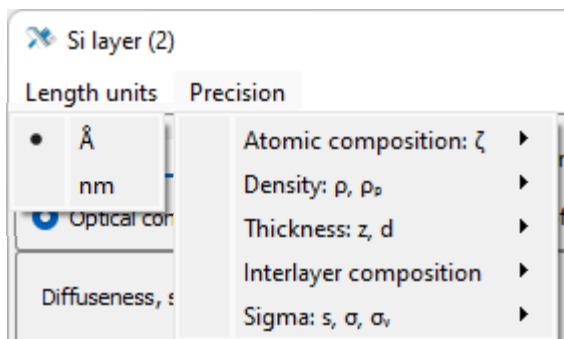


Рисунок 61. Меню окна «Layer»

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

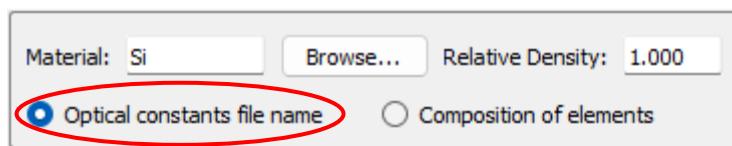


Рисунок 62. Блок «Material» с табулированным материалом

В Multifitting есть два способа задать материал. Первый – воспользоваться библиотекой показателей преломления, расположенной в папке «nk». Для этого нужно установить переключатель в положение «Optical constants filename». В поле «Material» указывается название текстового файла «\*.nk» которое служит и названием материала. Также можно указать файл вне библиотеки, нажав кнопку «Browse...». Настоящая плотность материала не

обязательно известна, т.к. задан именно показатель преломления. Но эту плотность можно изменять, задавая параметр «**Relative density**». Это фактор, на который умножается номинальная поляризуемость вещества.

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

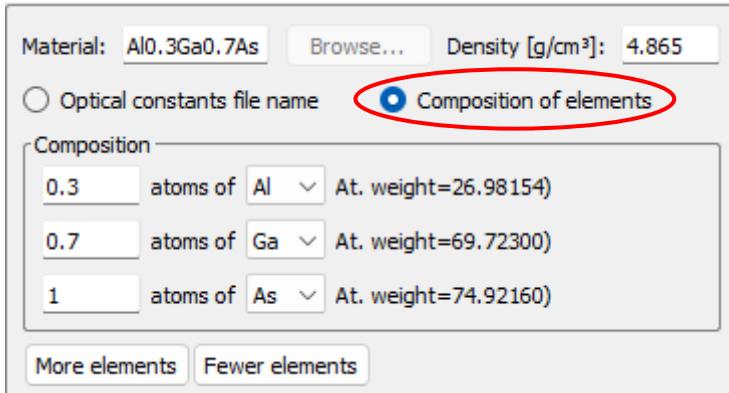


Рисунок 63. Блок «**Material**» с материалом, сконструированным из отдельных химических элементов

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 буквенной клавиши на клавиатуре можно перейти к элементу, начинающемуся на эту букву. Если число элементов больше одного, то можно задавать стехиометрическое соотношение между ними. Это именно отношение количеств атомов различных элементов между собой, т.е. «**WSi2**» – то же самое, что «**W2Si4**». Абсолютная концентрация атомов задаётся абсолютной же плотностью материала, в г/см<sup>3</sup>.

#### 4.2.5.1.4 Thickness

Thickness, z [Å]:	20.5470
<b>Thickness drift</b>	

Рисунок 64. Блок «**Thickness**»

Здесь можно задать толщину слоя. Если слой является частью периодической многослойки, то 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 служит кнопка «**Thickness drift**». Если её нажать, то откроется окно:

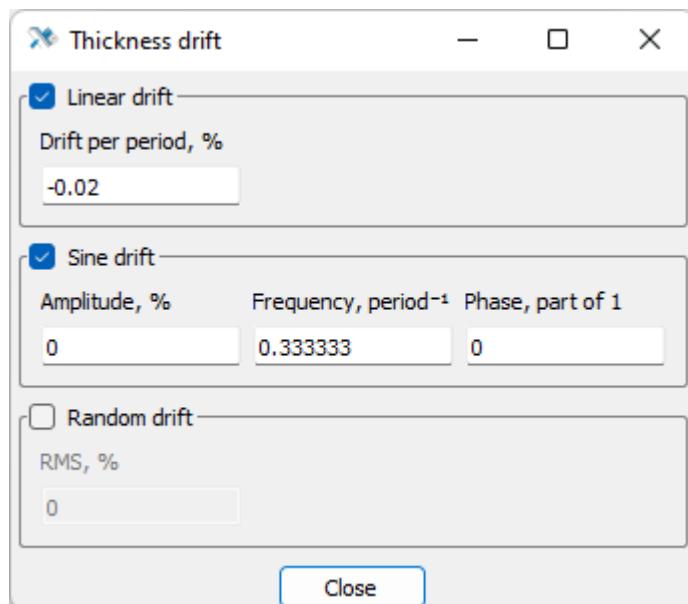


Рисунок 65. Окно «Thickness drift»

«**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 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 номинальной. Указывается среднеквадратическое отклонение в процентах от номинальной толщины, сами толщины генерируются случайным образом с гауссовой статистикой при каждом вычислении.

#### 4.2.5.1.5 Diffuseness



Рисунок 66. Блок «Diffuseness»

«**Diffuseness**» – это толщина области 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

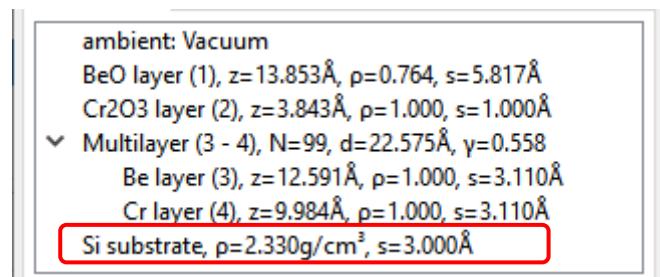


Рисунок 67. Подложка на схеме структуры

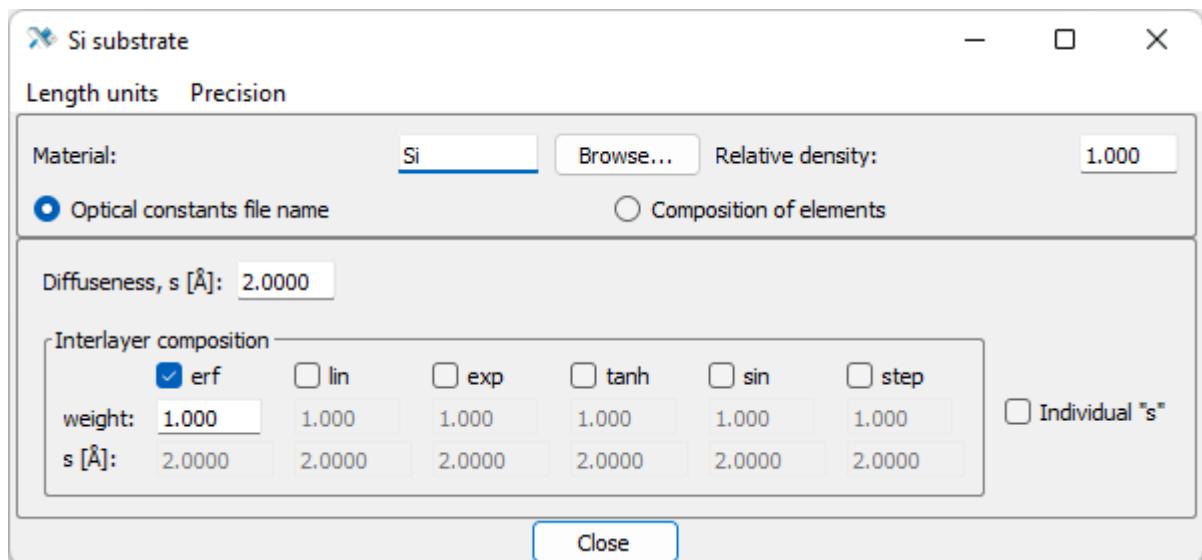


Рисунок 68. Окно «Substrate»

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

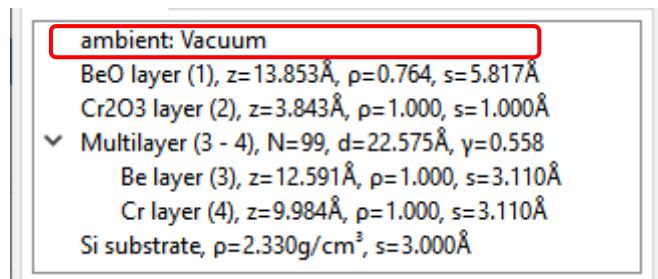


Рисунок 69. Внешняя среда на схеме структуры

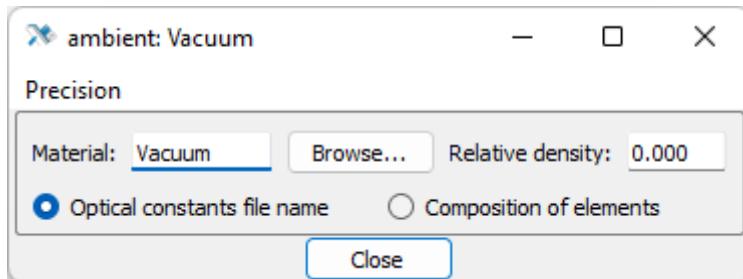


Рисунок 70. Окно «Ambient»

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

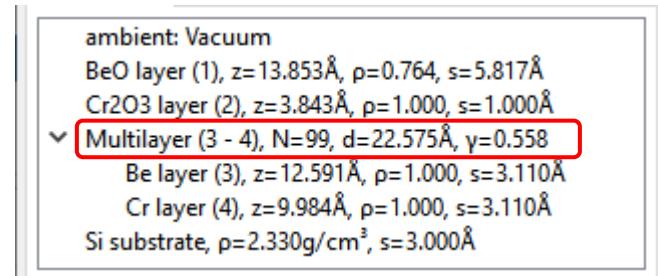


Рисунок 71. Периодическая многослойка на схеме структуры

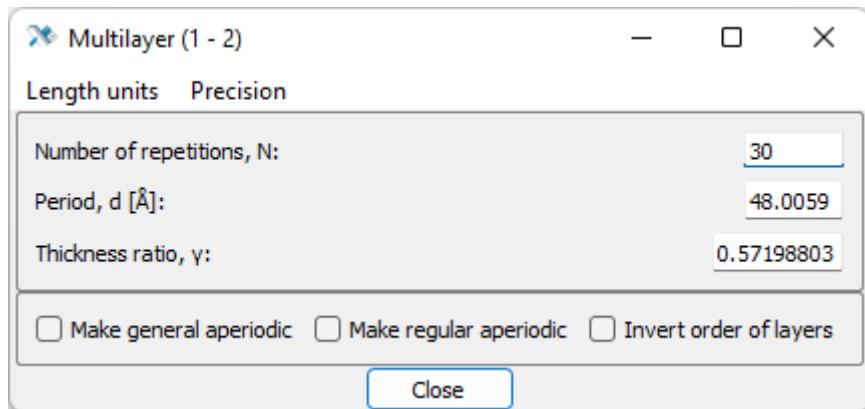


Рисунок 72. Окно «Multilayer»

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

#### 4.2.5.4.1 Заголовок

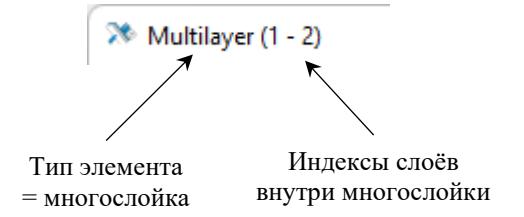


Рисунок 73. Заголовок окна «Multilayer»

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 74. 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

Number of repetitions, N:	30
Period, d [ $\text{\AA}$ ]:	48.0059
Thickness ratio, γ:	0.57198803

Рисунок 75. Блок настройки параметров

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

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

Третий параметр – толщинный фактор  $\gamma$ . 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 76. Блок управления типом структуры

Периодическая многослойка может быть превращена в регулярную или общую аperiодику выбором соответствующей опции. При этом число слоёв в аperiодике 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 аperiодику.

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

#### 4.2.5.5 Regular aperiodic

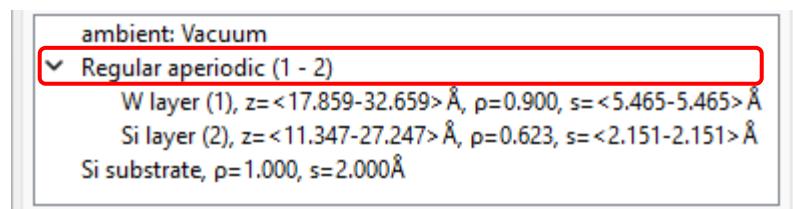


Рисунок 77. Регулярная аperiодика на схеме структуры

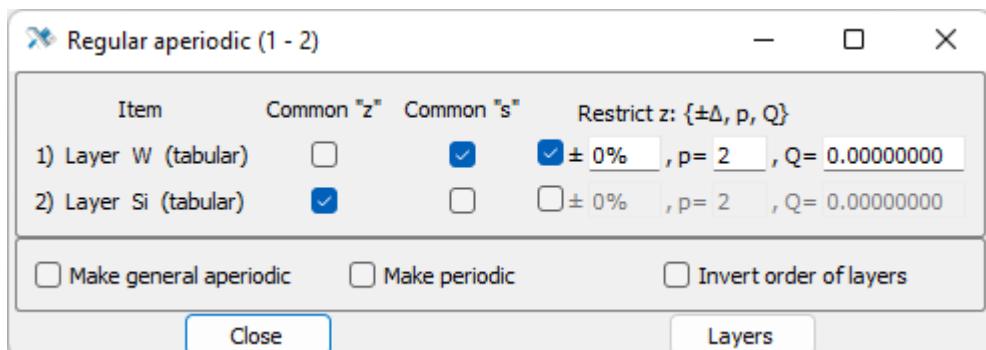


Рисунок 78. Окно «Regular aperiodic»

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

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

#### 4.2.5.5.1 Заголовок

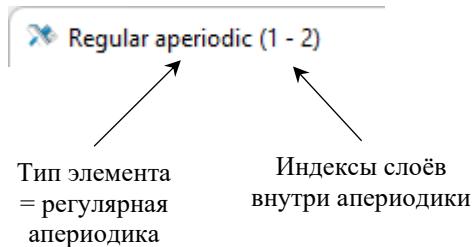


Рисунок 79. Заголовок окна «Regular aperiodic»

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

#### 4.2.5.5.2 Параметры

Item	Common "z"	Common "s"	Restrict z: $\{\pm\Delta, p, Q\}$
1) Layer W (tabular)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/> $\pm 4\%$ , p = 2, Q = 12.34500000
2) Layer Si (tabular)	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/> 0%, p = 2, Q = 0.00000000

Рисунок 80. Блок настройки параметров

В этом окне нельзя напрямую работать с параметрами слоёв, но можно накладывать связи и ограничения на толщины и интерфейсы «одинаковых» слоёв в разных элементарных ячейках аperiодики. Для 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 включить «Common “z”» и «Common “s”», то получится периодическая структура.

«Restrict z:  $\{\pm\Delta, p, Q\}$ » указывает, что при автоматической оптимизации толщин будет применяться «мягкое» ограничение: если толщина любого слоя будет отличаться больше, чем на величину  $\Delta$  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  $\pm\Delta$ .

#### 4.2.5.5.3 Управление типом структуры

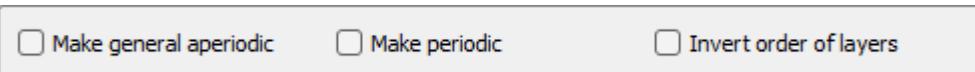


Рисунок 81. Блок управления типом структуры

Регулярная аperiодика может быть превращена в периодическую структуру или общую аperiодику выбором соответствующей опции.

#### 4.2.5.6 General aperiodic

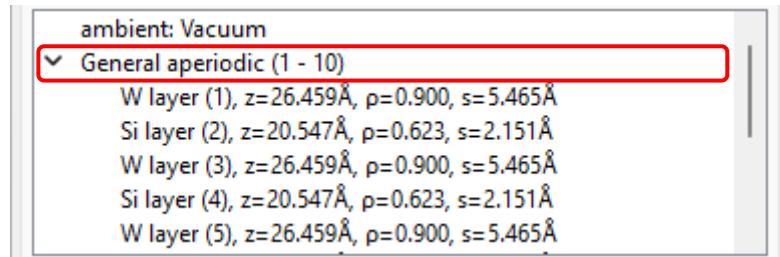


Рисунок 82. Общая аperiодика на схеме структуры

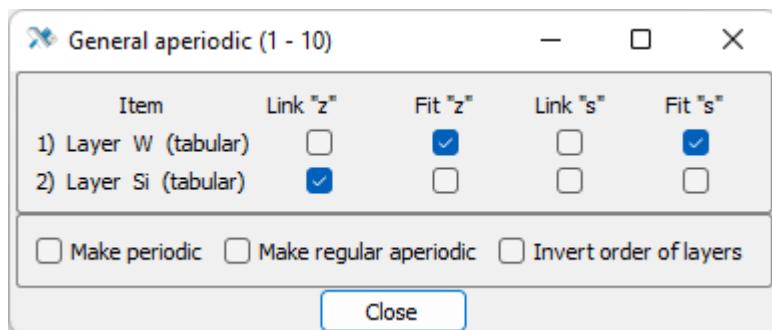


Рисунок 83. Окно «General aperiodic»

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

#### 4.2.5.6.1 Заголовок

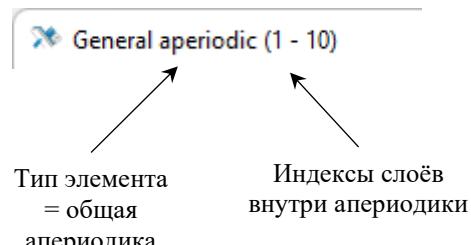


Рисунок 84. Заголовок окна «General aperiodic»

Заголовок окна указывает, что вы имеете дело с общей аperiодикой. В скобках указан диапазон индексов слоёв внутри этой структуры. В отличие от периодической структуры или регулярной аperiодики, 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 85. 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

<input type="checkbox"/> Make periodic	<input type="checkbox"/> Make regular aperiodic	<input type="checkbox"/> Invert order of layers
--	---	---

Рисунок 86. Блок управления типом структуры

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

### 4.2.6 Панель доступа к другим окнам

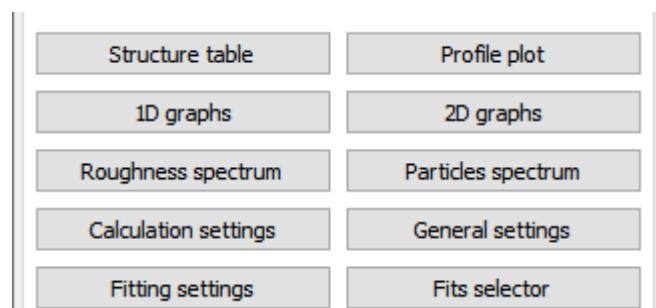


Рисунок 87. Доступ к другим инструментам

Следующими идут кнопки доступа к вспомогательным инструментам, позволяющим детально управлять параметрами структуры, строить графики, делать автоматическую подгонку и менять различные настройки. Все они описаны в соответствующих параграфах этой главы.

#### 4.2.7 Независимые кривые

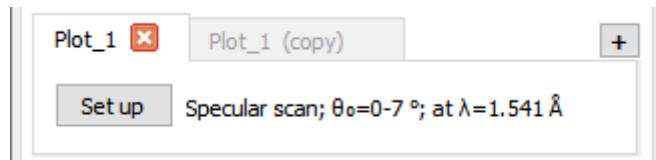


Рисунок 88. Вкладки с кривыми для расчёта без экспериментальной сетки

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

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

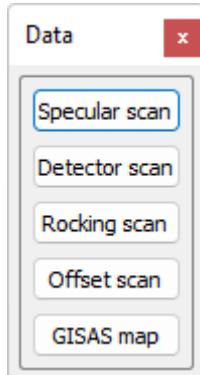


Рисунок 89. Выбор типа измерения

После задания типа кривой откроется соответствующее окно настроек.

#### 4.2.7.1 Specular scan

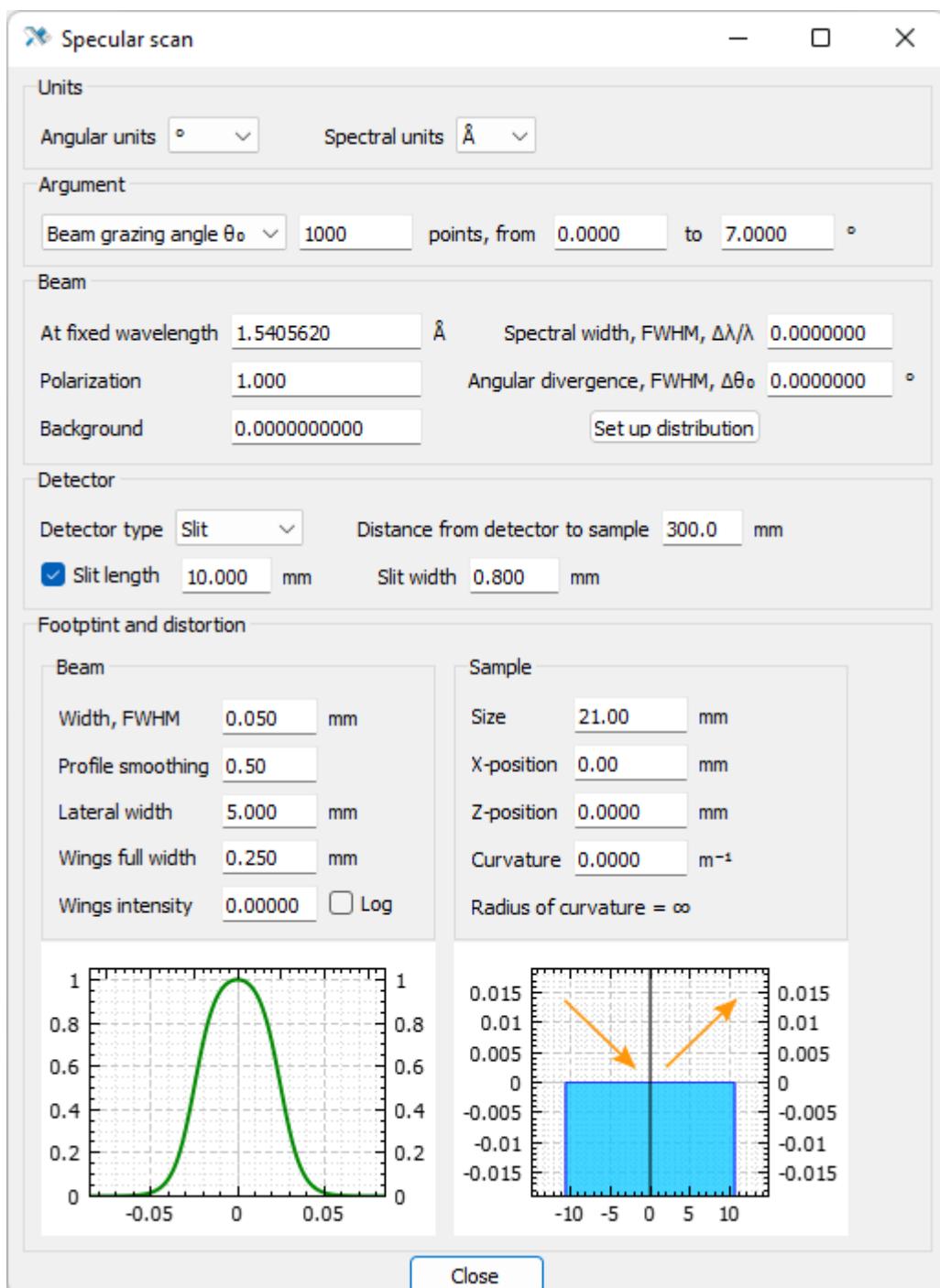


Рисунок 90. Настройки рефлектометрической кривой

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

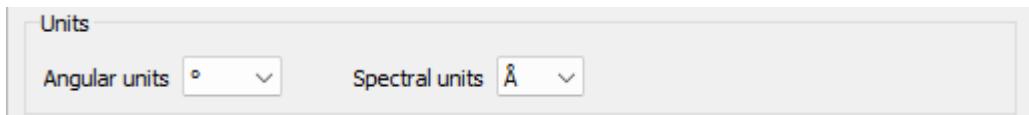


Рисунок 91. Блок «Units»

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

#### 4.2.7.1.2 Argument

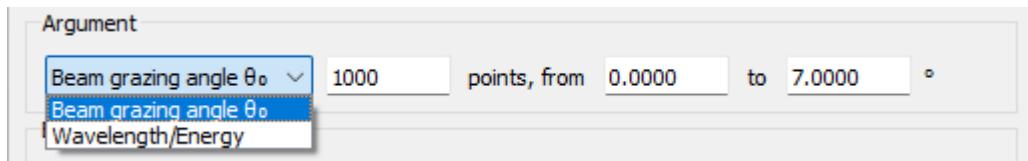


Рисунок 92. Блок «Argument»

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

#### 4.2.7.1.3 Beam

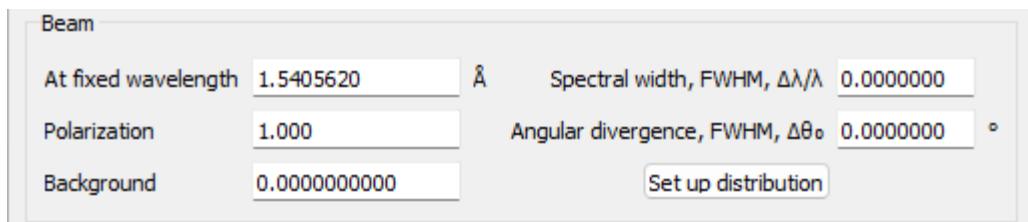


Рисунок 93. Блок «Beam»

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 – s-поляризация, -1 – p-поляризация, а промежуточные значения соответствуют их смеси в соответствующей пропорции.

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

#### 4.2.7.1.4 Detector

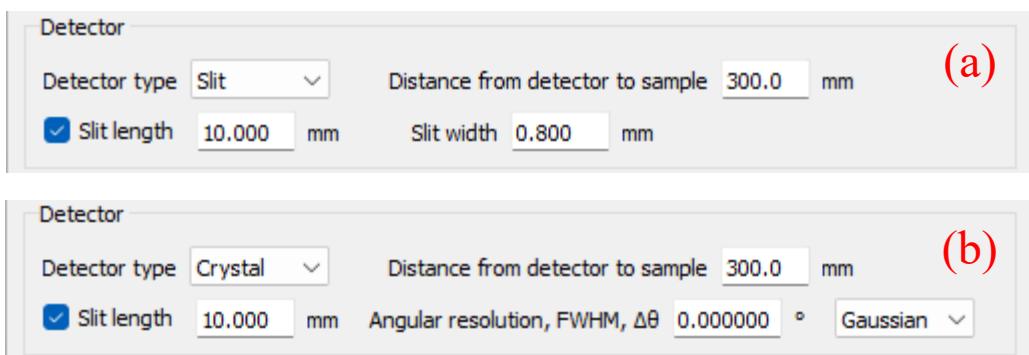


Рисунок 94. Блок «Detector» с щелевым (а) или кристаллическим (б) типом детектора

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

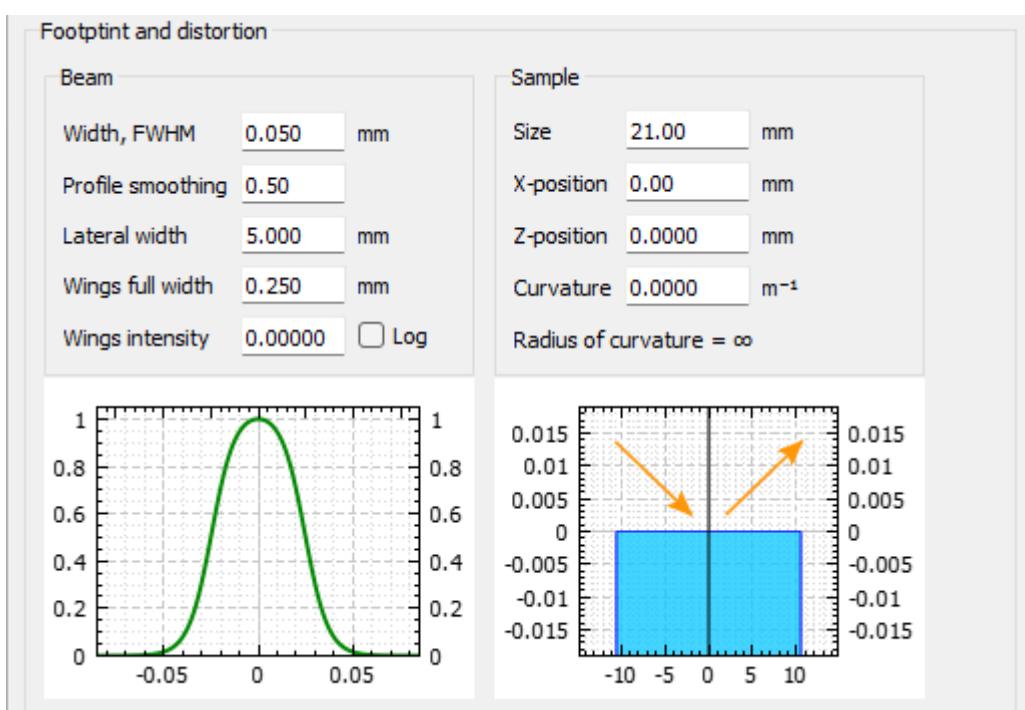


Рисунок 95. Блок «Footprint and distortion»

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, сечение пучка может иметь дополнительный «пьедестал» малой интенсивности («**Wings**»). Профиль пучка в плоскости падения показан на графике в линейном или логарифмическом масштабе.

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

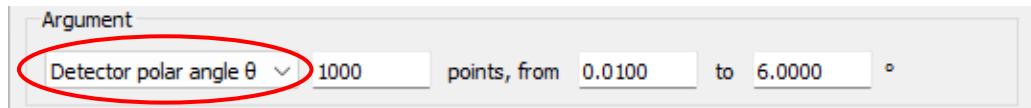


Рисунок 96. Блок «Argument»

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

##### 4.2.7.2.2 Beam

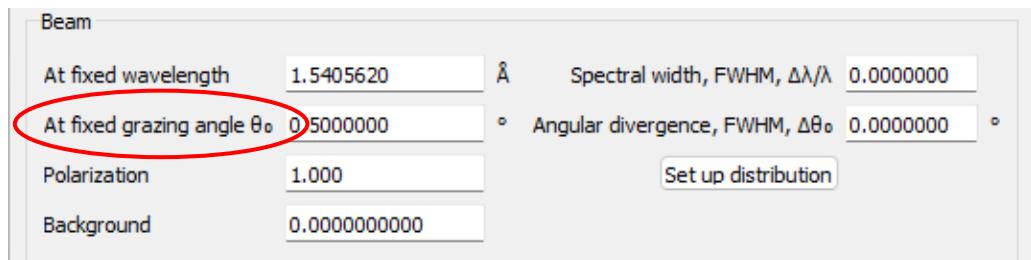


Рисунок 97. Блок «Beam»

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

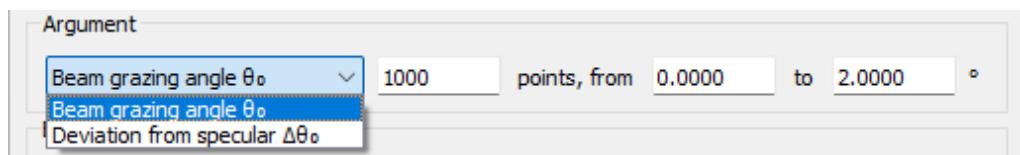


Рисунок 98. Блок «Argument»

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.

#### 4.2.7.3.2 Beam

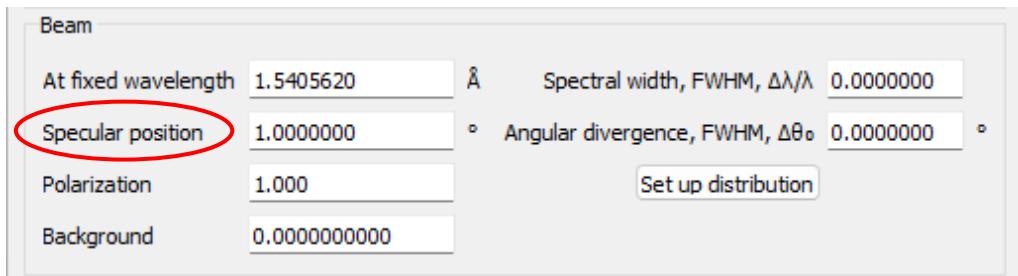


Рисунок 99. Блок «Beam»

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

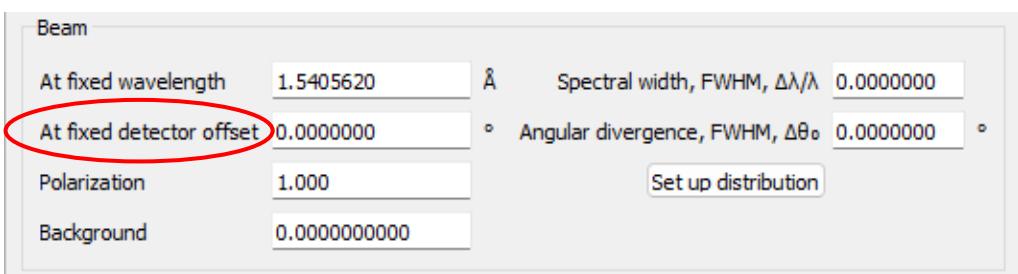


Рисунок 100. Блок «Beam»

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

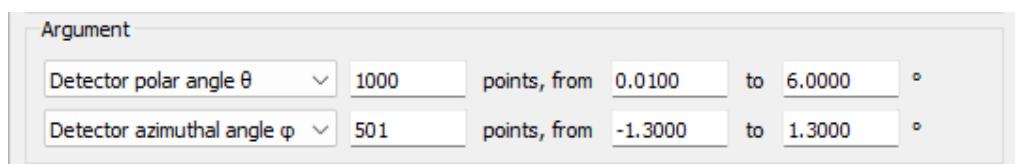


Рисунок 101. Блок «Argument»

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

#### 4.2.7.5.2 Beam

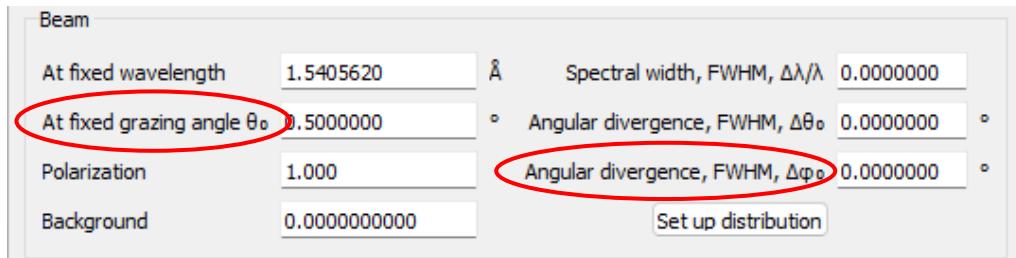


Рисунок 102. Блок «Beam»

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

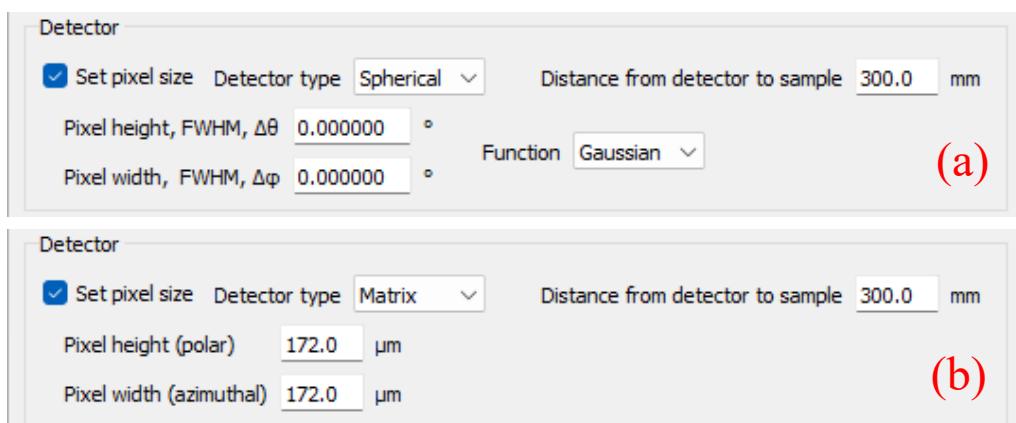


Рисунок 103. Блок «Detector» со сферическим (а) или пиксельным (б) типом детектора

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

#### 4.2.8 Экспериментальные кривые

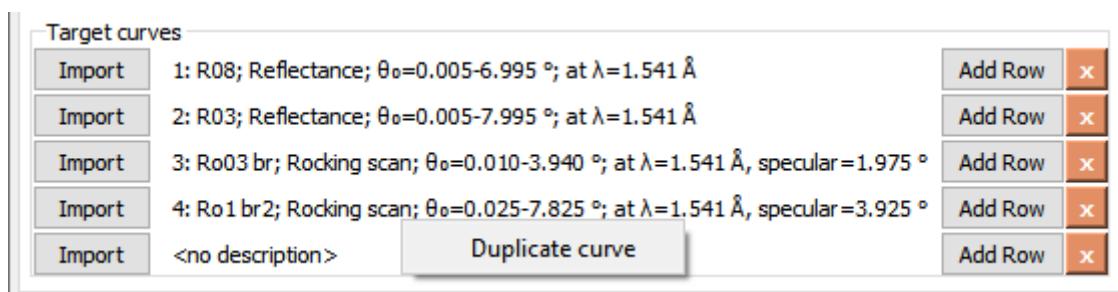


Рисунок 104. Список загруженных данных

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. Кнопки «**Add row**» и  соответственно добавляют и удаляют строку. Экспериментальную кривую со всеми её настройками можно продублировать, вызвав контекстное меню правой кнопкой мыши.

Для загрузки данных 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:

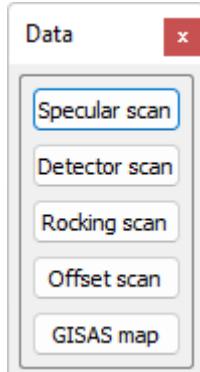


Рисунок 105. Выбор типа измерения

После задания типа кривой откроется соответствующее окно.

#### 4.2.8.1 Specular scan

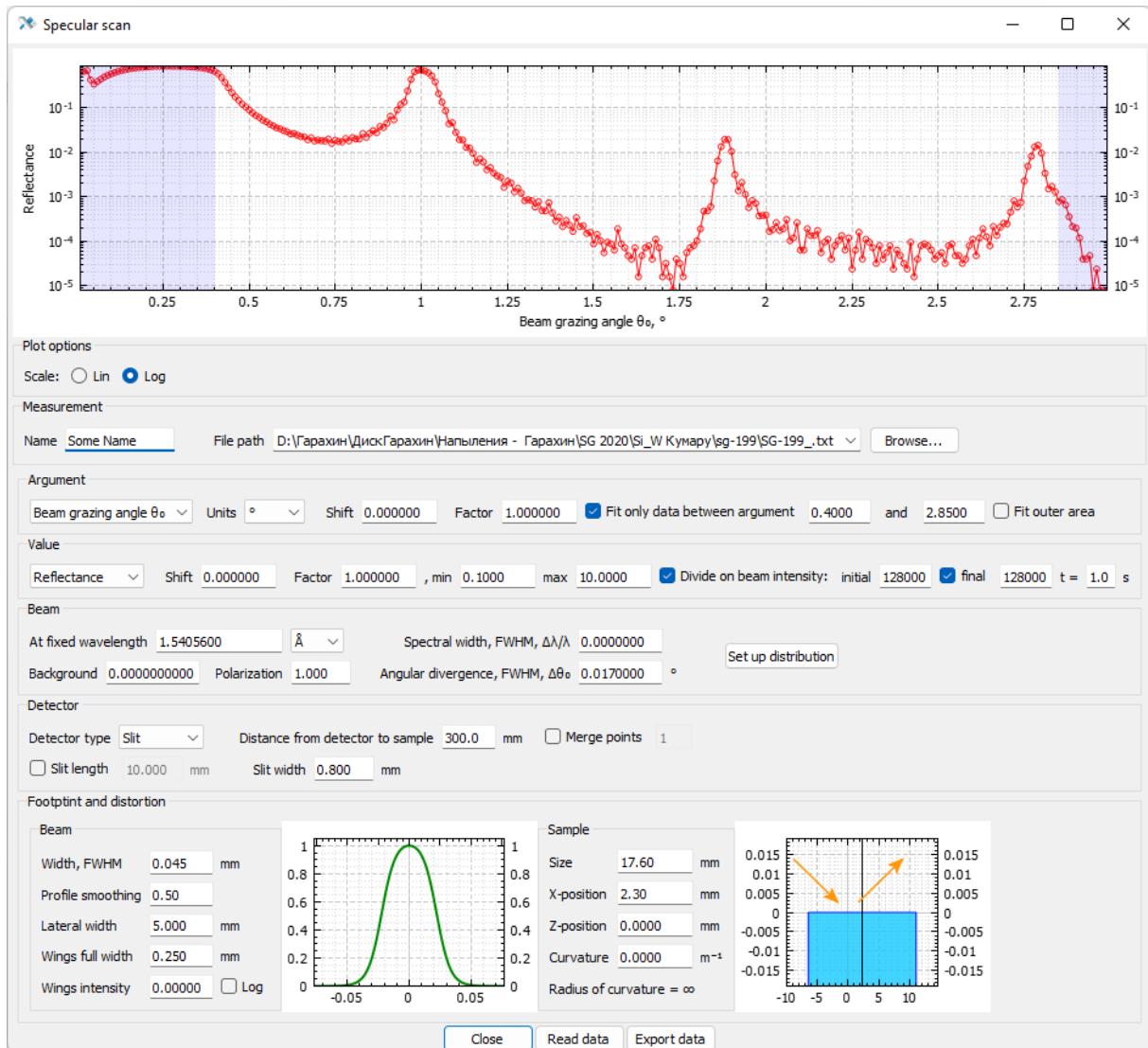


Рисунок 106. Настройки экспериментальной рефлектометрической кривой

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, исключенная 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

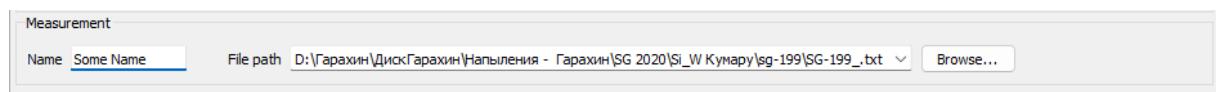


Рисунок 107. Блок «Measurement»

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 или вставить, можно воспользоваться файловым

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

#### 4.2.8.1.2 Argument

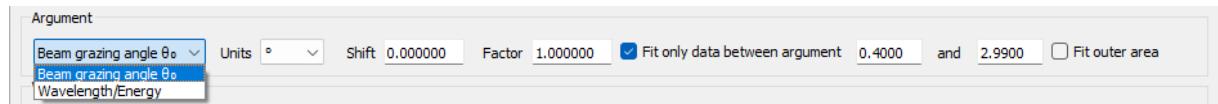


Рисунок 108. Блок «Argument»

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

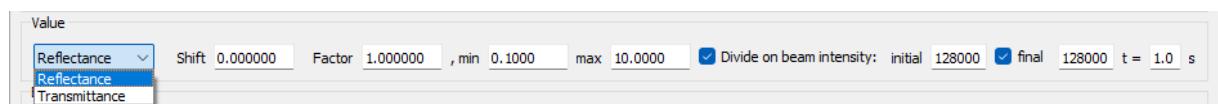


Рисунок 109. Блок «Value»

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 в простейшем (линейном) случае это можно учесть, включив галочку «**Final**» и указав кроме начальной величины ещё и конечную.

#### 4.2.8.1.4 Beam

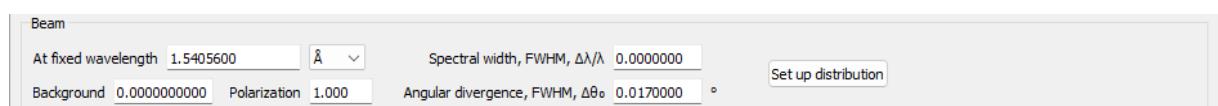


Рисунок 110. Блок «Beam»

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

#### 4.2.8.1.5 Detector

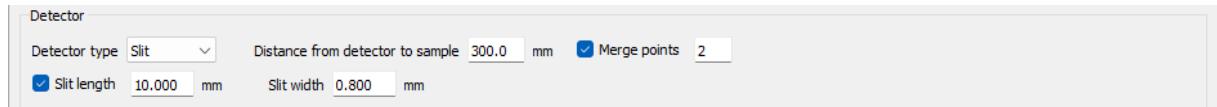


Рисунок 111. Блок «Detector»

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 позволяет кратно уменьшать массив точек, объединяя их (биннинг). Указывается число точек для объединения. Результат сразу отражается на графике.

#### 4.2.8.1.6 Footprint and distortion

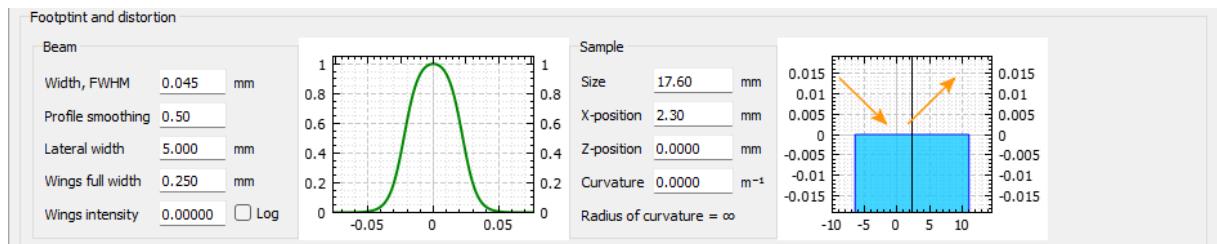


Рисунок 112. Блок «Footprint and distortion»

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

#### 4.2.8.1.7 Нижняя панель

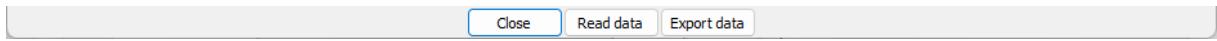


Рисунок 113. Нижняя панель окна

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

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

«**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

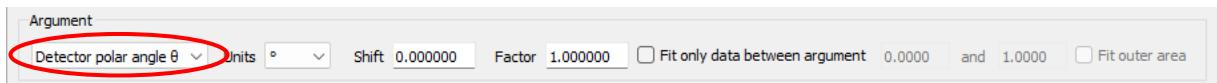


Рисунок 114. Блок «Argument»

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

#### 4.2.8.2.2 Beam

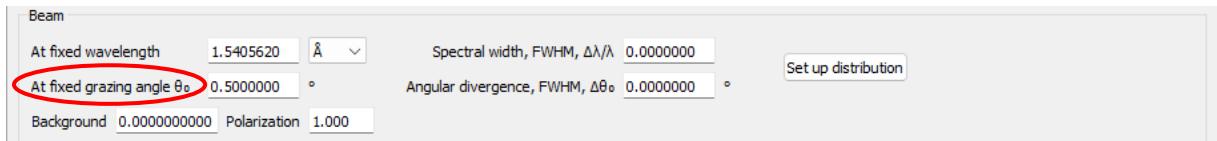


Рисунок 115. Блок «Beam»

Почти все параметры те же самые, что и у [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

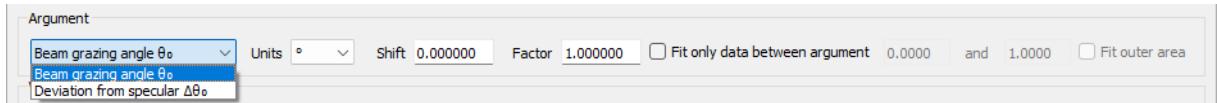


Рисунок 116. Блок «Argument»

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 117. Блок «Beam»

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

#### 4.2.8.4 Offset 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](#)».

##### 4.2.8.4.1 Argument

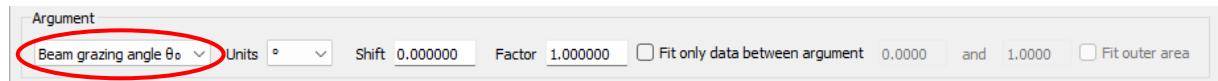


Рисунок 118. Блок «Argument»

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

##### 4.2.8.4.2 Beam



Рисунок 119. Блок «Beam»

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

#### 4.2.8.5 GISAS map

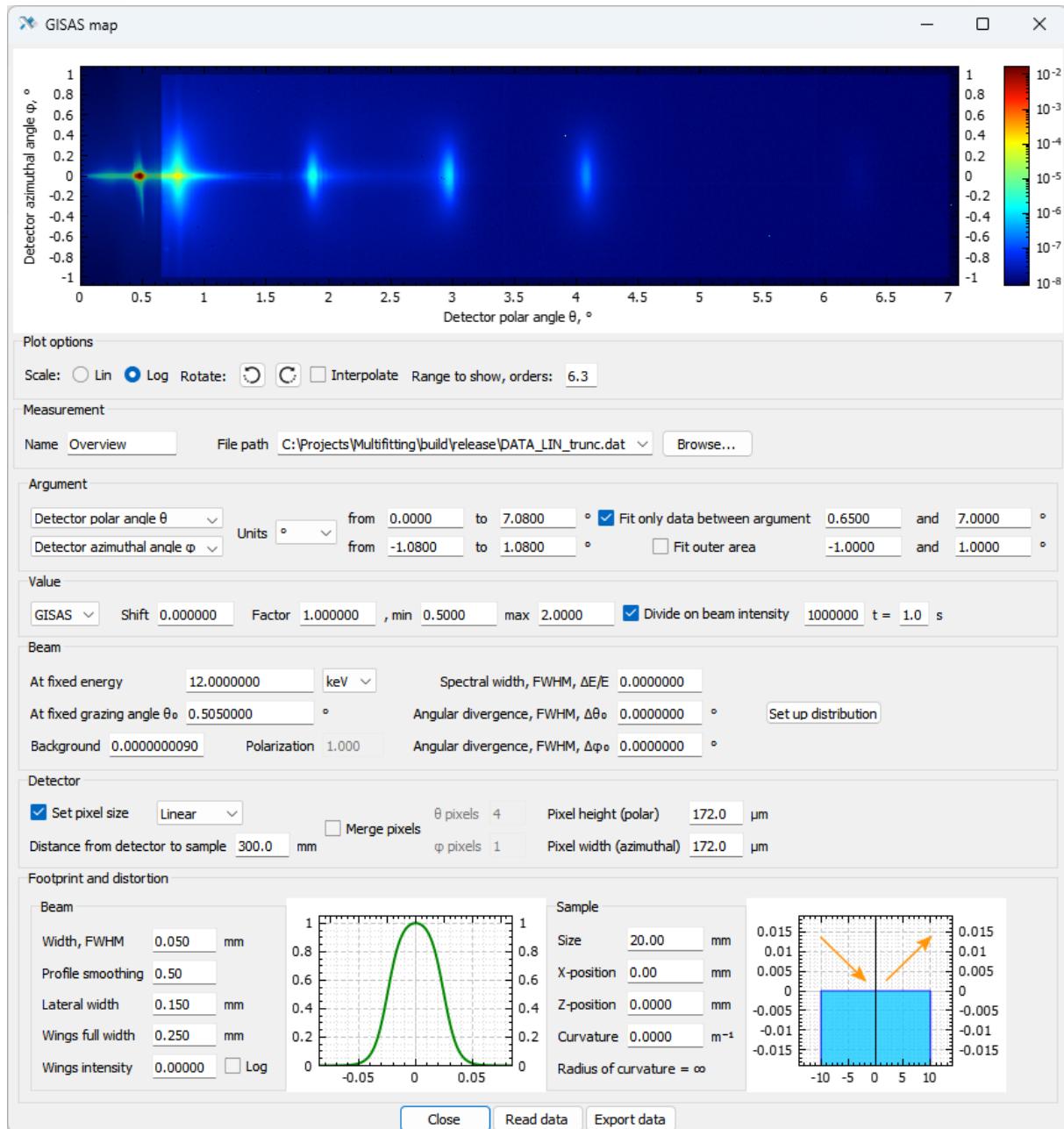


Рисунок 120. Настройки GISAS измерения

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, указывать диапазон значений, отображаемых в логарифмическом масштабе – 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.

#### 4.2.8.5.1 Argument

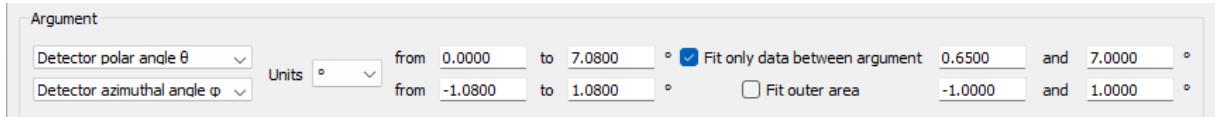


Рисунок 121. Блок «Argument»

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

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

#### 4.2.8.5.2 Value



Рисунок 122. Блок «Value»

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

Опция «[Divide on beam intensity](#)» позволяет нормировать данные на интенсивность зондирующего пучка и время экспозиции.

#### 4.2.8.5.3 Beam

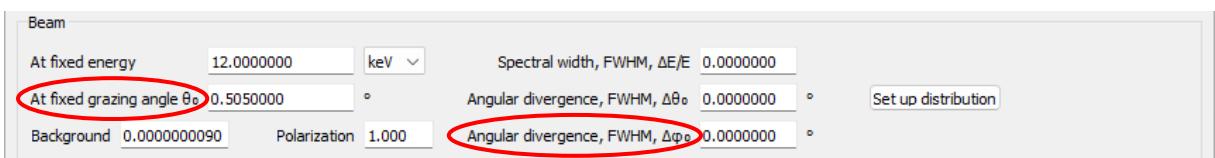


Рисунок 123. Блок «Beam»

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

#### 4.2.8.5.4 Detector



Рисунок 124. Блок «Detector» с линейным (а) или угловым (б) размером пикселей

Здесь можно указать расстояние от образца до детектора, угловые или линейные размеры 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

**D364**

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

**D364**

		$\zeta$	$\rho$	$z/d$ [Å]	$s$ [Å]	$y$	interl	$dz$ lin
Mouse Wheel	Change dependent	0.100	0.010	0.0100	0.010	0.0010000	0.100	0.0010
Recalculate	Set model							

**BeO0 layer (1)**

	$\rho$ [g/cm³]	$z$ [Å]	$s$ [Å]	erf	lin	$dz$ lin	
1.000	0.000	1.848	34.5028	6.684	0.001	0.223	-0.0183
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

**MoO0 layer (2)**

	$\rho$ [g/cm³]	$z$ [Å]	$s$ [Å]	erf	lin	$dz$ lin	
1.000	0.000	9.700	22.3062	3.433	1.000	0.000	-0.0183
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 substrate**

	$\rho$ [g/cm³]	$s$ [Å]	erf	lin
	2.330	4.000	1.000	1.000
	1.165	1.000	□ fit	□ fit
	3.495	20.000	s erf	s lin
		4.000	4.000	4.000

Рисунок 125. 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 пределы 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 в главном окне. «Length units» позволяет менять основные единицы длины, в том числе толщины слоёв и интерфейсов, и размеры частиц. «Other units» позволяет изменить другие единицы, используемые в таблице. В меню «Precision» можно менять количество знаков после запятой, используемое для представления значений параметров.

### 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			толщины	переходной	
	плотности	слоя/периода	области		
pure slave	confidence interval	active fit	$\rho, -\%$	$z/d, \pm\%$	$s, \pm\%$
master/slave	master/confidence	use particles	<input type="button" value="Reset"/>	<input type="button" value="Reset"/>	<input type="button" value="Reset"/>
pure master	free parameter	not parameter	10.000	20.000	10.000

Рисунок 126. Шапка таблицы

#### 4.3.2.2 Модификаторы

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



Рисунок 127. 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  $\uparrow$  и  $\downarrow$  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).

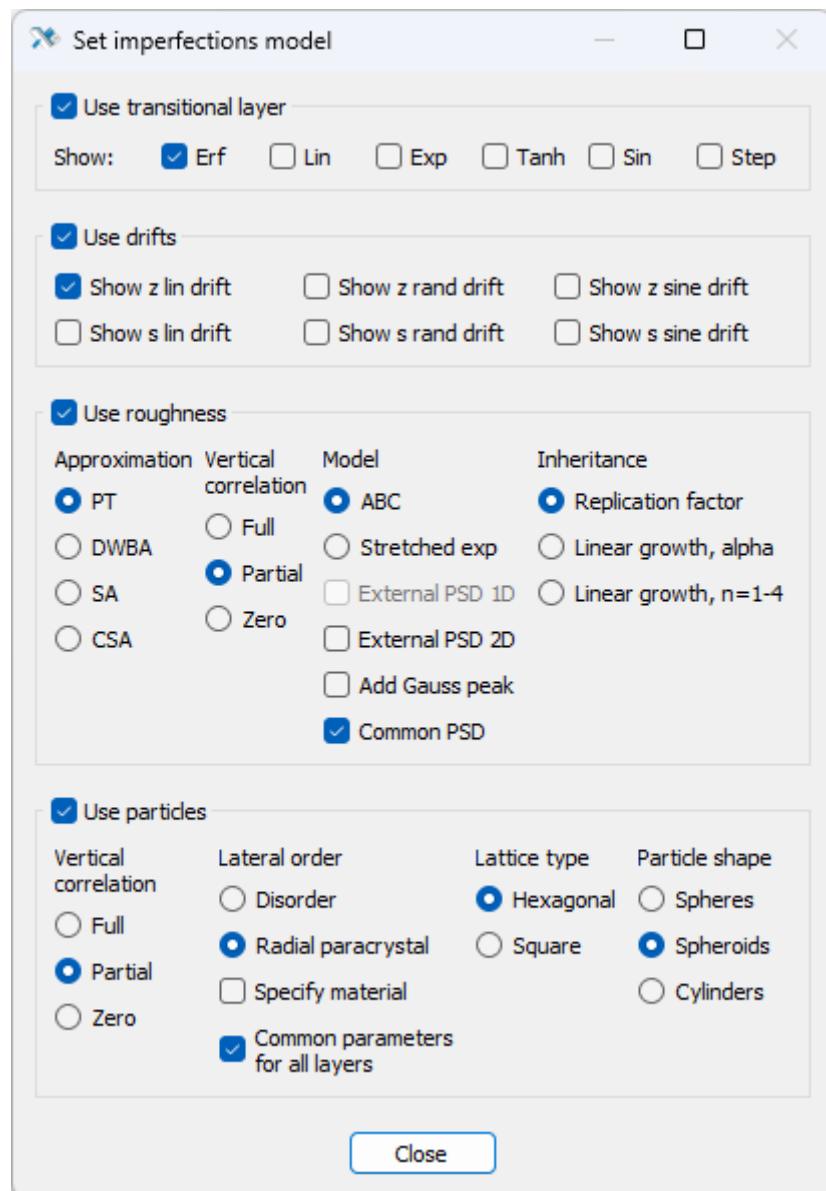


Рисунок 128. Модели «несовершенства» структуры

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

#### 4.3.2.3.1 Transitional layer

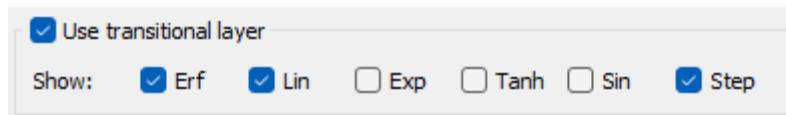


Рисунок 129. Блок «Use transitional layer»

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

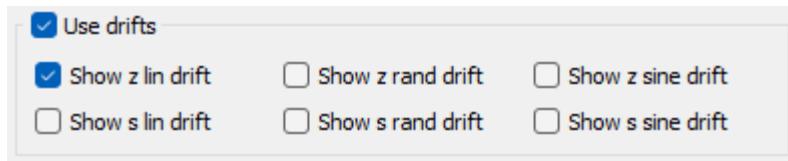


Рисунок 130. Блок «Use drifts»

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 слоев, входящих в состав периодической многослойки. Если модель отключена, то она скрыта из таблицы и не используется при вычислениях. Если функция включена, то она видна в таблице, но отключена по умолчанию для использования в вычислении. Окончательно включена и настроена она может быть из таблицы.

#### 4.3.2.3.3 Roughness

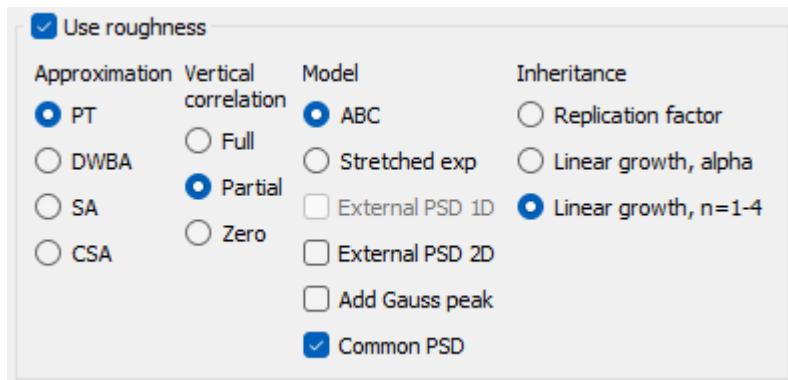


Рисунок 131. Блок «Use roughness»

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

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

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

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

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

- «[ABC](#)» – ABC-модель или К-корреляционная функция.
- «[Stretched exp](#)» – другая фрактальная модель шероховатости.
- «[External PSD 1D](#)» – возможность загрузки произвольной одномерной PSD функции из файла. За пределами загруженных данных PSD продолжается в виде модели.
- «[External PSD 2D](#)» – возможность загрузки произвольной двумерной изотропной PSD функции из файла. За пределами загруженных данных PSD продолжается в виде модели.
- «[Add Gauss peak](#)» – 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

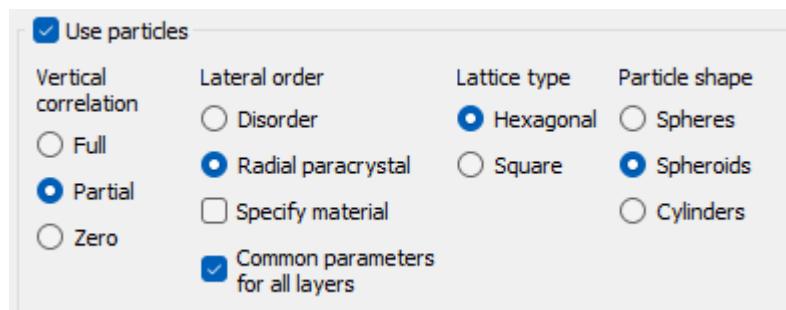


Рисунок 132. Блок «[Use particles](#)»

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 могут быть разными для каждого слоя.

- «**Full**» – частицы в разных слоях расположены строго друг над другом, рассеяние полностью когерентное. Параметры латерального распределения общие для всех слоёв.
- «**Partial**» – частицы в разных слоях расположены не строго 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 решётки.

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

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

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

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

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

- «**Spheres**» – частицы – сферы.
- «**Spheroids**» – частицы – сфериоиды, 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						
	$\rho$	z/d [Å]	s [Å]	$\gamma$	interl	dz lin
	0.010	0.0100	0.010	0.0010000	0.100	0.0010

Рисунок 133. 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 расположена 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 стехиометрическое соотношение.

<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 134. Материалы слоёв

На заметку: Для более быстрого нахождения элемента можно нажать на клавиатуре букву, с которой начинается название химического 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.

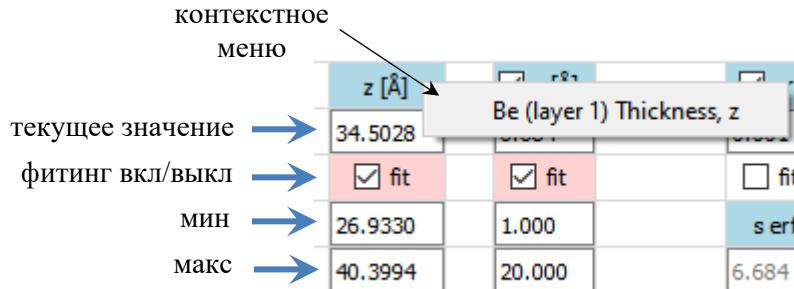


Рисунок 135. Блок полей для одного параметра

*Внимание:* У стехиометрических коэффициентов « $\zeta$ » 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 его помощью включены и выключены:

dz sin : A*sin(2πnv+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 136. Гармоническая модуляция толщины слоя: величины  $A$ ,  $v$ ,  $φ$

Исключением является толщина межслоевой переходной области. Она может быть задана единственным параметром «**S**» или толщинами отдельных функций профиля. Во втором случае эффективная толщина считается как среднеквадратическое 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	<b>s erf</b>	<b>s lin</b>
5.0000	2.0000	3.0000

Рисунок 137. 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.

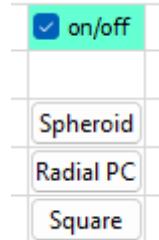


Рисунок 138. Управление частицами в слое

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

PSD 1D	PSD 2D
$\sigma_e [\text{\AA}]$	$\sigma_e [\text{\AA}]$
3.8707	0.0000
rf 1D	rf 2D
0.800	1.000

Рисунок 139. Внешняя PSD шероховатости

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

#### 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/cm³]

абсолютная плотность вещества

**$\rho$  [r.u.]** относительная плотность вещества

**$z [\text{\AA}]$**  толщина слоя

**$s [\text{\AA}]$**  среднеквадратическая толщина диффузного интерфейса

Функции профиля диффузного интерфейса:

**$erf$**  функция ошибок  $erf$  и весовой коэффициент

**$lin$**  линейный профиль  $lin$  и весовой коэффициент

**$exp$**  экспоненциальный профиль  $exp$  и весовой коэффициент

**$tanh$**  гиперболический тангенс  $tanh$  и весовой коэффициент

**$sin$**  синусоидальный профиль  $sin$  и весовой коэффициент

**$step$**  ступенчатый профиль  $step$  и весовой коэффициент

**$s_{erf}$**  среднеквадратическая толщина  $erf$  профиля

**$s_{lin}$**  среднеквадратическая толщина  $lin$  профиля

**$s_{exp}$**  среднеквадратическая толщина  $exp$  профиля

**$s_{tanh}$**  среднеквадратическая толщина  $tanh$  профиля

**$s_{sin}$**  среднеквадратическая толщина  $sin$  профиля

**$s_{step}$**  среднеквадратическая толщина  $step$  профиля

Дрейф толщины слоя:

**$dz_{lin}$**  линейный дрейф толщины

**$dz_{ran}$**  случайные флуктуации толщины

**$dz_{sin} : A * \sin[2\pi(nv + \phi)]$**  синусоидальная модуляция толщины

Дрейф толщины диффузного интерфейса:

**$ds_{lin}$**  линейный дрейф толщины интерфейса

**ds ran** случайные флуктуации толщины интерфейса

**ds sin : A\*sin[2π(nv+φ)]** синусоидальная модуляция толщины интерфейса

Шероховатость:

**σ [Å]** среднеквадратическая высота

**ξ [μm]** корреляционный радиус

**a** фрактальный параметр

**σ<sub>v</sub> [Å]** среднеквадратическая высота пика шероховатости

**v<sub>0</sub> [μm<sup>-1</sup>]** центральная пространственная частота пика шероховатости

**δv [μm<sup>-1</sup>]** ширина пика шероховатости по пространственной частоте

**L<sub>v</sub> [Å]** глубина корреляции на базовой частоте

**v<sub>0</sub> [μm<sup>-1</sup>]** базовая частота для глубины корреляции

**β** показатель частотной экспоненты в факторе корреляции PSD

**Ω [Å<sup>3</sup>]** объём частицы в модели линейного роста

**a<sub>1</sub>** коэффициент при первой степени частоты в модели линейного роста

**a<sub>2</sub> [nm]** коэффициент при второй степени частоты в модели линейного роста

**a<sub>3</sub> [nm<sup>2</sup>]** коэффициент при третьей степени частоты в модели линейного роста

**a<sub>4</sub> [nm<sup>3</sup>]** 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<sub>o</sub> [g/cm<sup>3</sup>]** абсолютная плотность вещества частицы

**ρ<sub>o</sub> [r.u.]** относительная плотность вещества частицы

R [ $\text{\AA}$ ]	латеральный радиус частицы
H [ $\text{\AA}$ ]	высота частицы
r [ $\text{\AA}$ ]	среднее расстояние между частицами
$\delta r$ [ $\text{\AA}$ ]	вариация расстояния между частицами
D [ $\mu\text{m}$ ]	размер домена – области корреляции частиц
$\Delta$ [ $\text{\AA}$ ]	случайный сдвиг частиц в слое относительно соседнего слоя
$z_0$ [ $\text{\AA}$ ]	вертикальный сдвиг всех частиц относительно центра слоя
$\delta z_0$ [ $\text{\AA}$ ]	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.

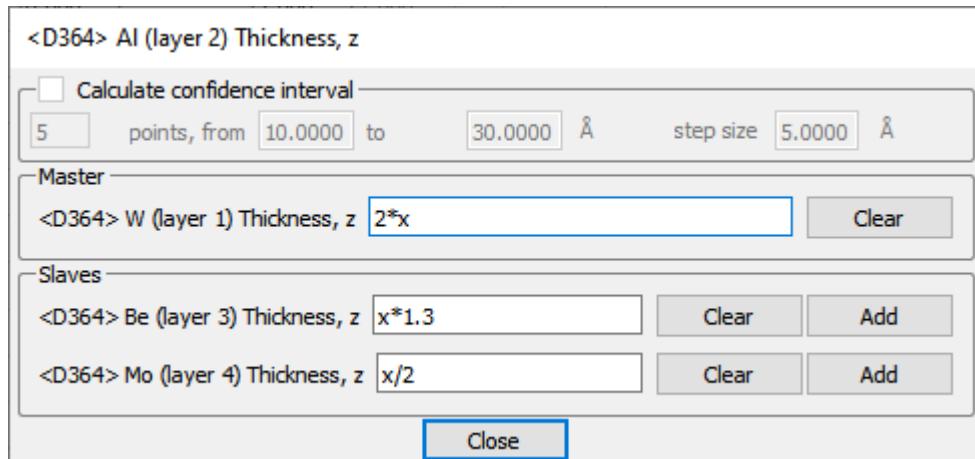


Рисунок 140. Окно «**Coupling editor**»

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/>) позволяет анализировать и распознавать широкий спектр математических выражений. Например, могут быть использованы

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

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

**Внимание:** Учитывайте размерность и текущие единицы, указанные в таблице! И значение функции, и аргумент «x» измеряются в ангстремах для всех параметров, имеющих размерность длины, или  $\text{\AA}^n$  при размерности [длина]<sup>n</sup>. Величина 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 получите неправильный результат или аварийное завершение программы.

Также в этом окне можно настроить получение данных для дальнейшего вычисления доверительного интервала для конкретного параметра. Принцип здесь такой: для каждого фиксированного значения параметра из заданной сетки производится подгонка всех остальных 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.

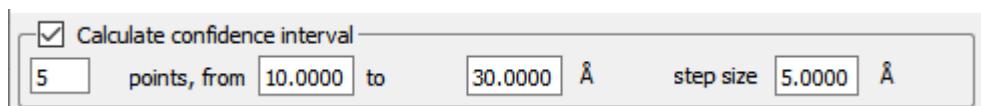


Рисунок 141. Настройка сетки для доверительного интервала

#### 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 аperiодики, можно включать и выключать. Отключенный элемент при расчётах не учитывается, как будто его нет. Для периодической многослойки можно вызвать контекстное меню, если в её составе нет слоёв с зависимой толщиной (красный или жёлтый цвет).

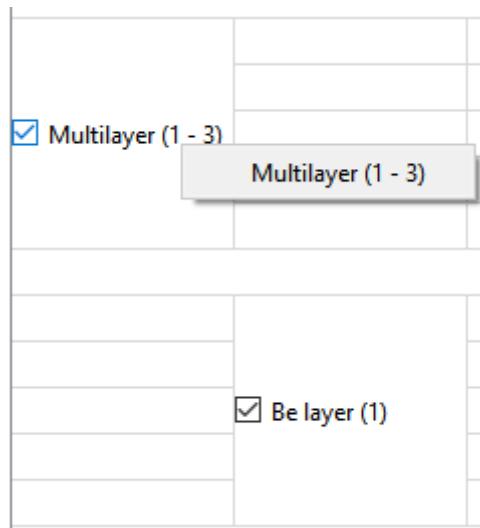


Рисунок 142. Элементы структуры с возможностью отключения

#### 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.

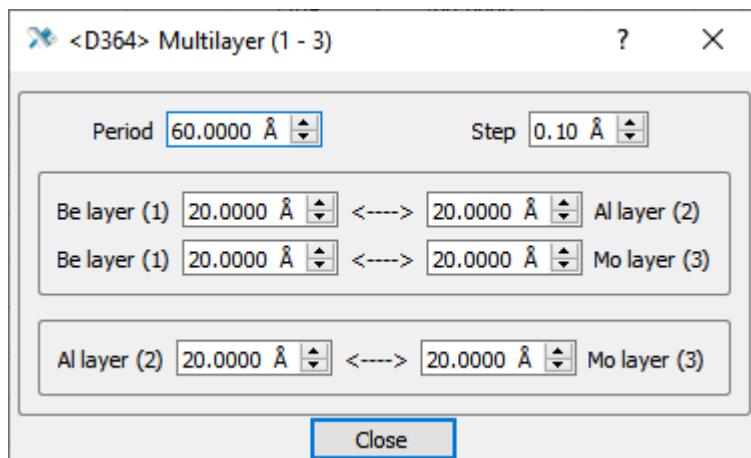


Рисунок 143. Перераспределение толщины между слоями периодической структуры

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

### 4.3.3 Regular aperiodic

Создание регулярной аperiодики описано в разделе [Задание слоистой структуры](#). В составе регулярной аperiодики может находиться целое число элементарных ячеек, как в периодической структуре. Слои одного типа могут иметь разные толщины и интерфейсные 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 аperiодического 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  $\Delta$ , 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 144. Особые параметры регулярной аperiодики

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

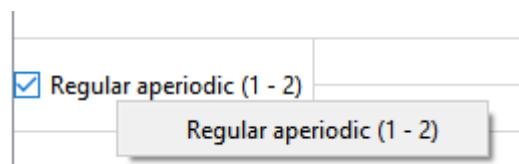


Рисунок 145. Контекстное меню регулярной аperiодики

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 аperiодики 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
1	1	Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/> 0.000
2	1	Mo	39.3360	<input type="checkbox"/> 0.000
3	2	Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/> 0.000
4	2	Mo	39.3360	<input type="checkbox"/> 0.000
5	3	Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/> 0.000
6	3	Mo	39.3360	<input type="checkbox"/> 0.000
7	4	Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/> 0.000
8	4	Mo	39.3360	<input type="checkbox"/> 0.000
9	5	Be	39.3360	<input checked="" type="checkbox"/> 0.000
10	5	Mo	20.2260	<input type="checkbox"/> 0.000

**Close**

Рисунок 146. Таблица слоёв регулярной аperiодики

## 4.4 Profile plot

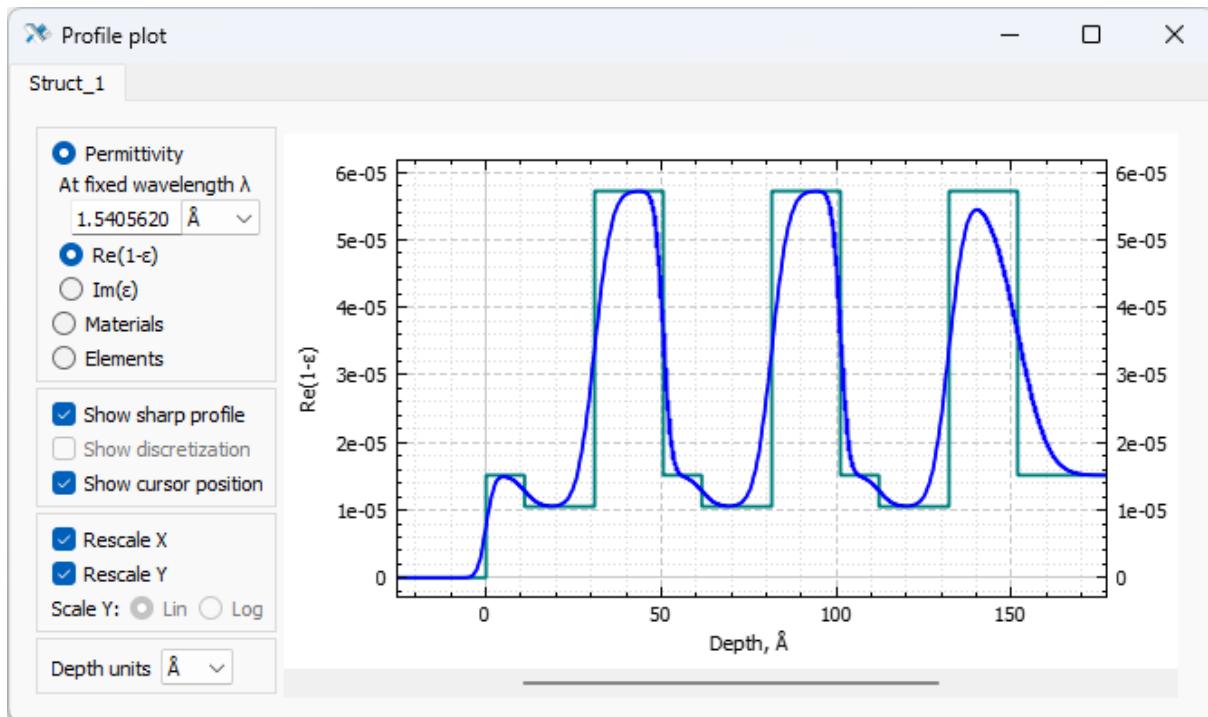


Рисунок 147. Профиль действительной части диэлектрической проницаемости

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, перетаскивая её 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 одной оси, то меняется только её масштаб.

В левой части находится панель параметров 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 жирным, а двойной клик уберёт с графика все материалы, кроме данного. Вернуть их можно повторным двойным щелчком 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.

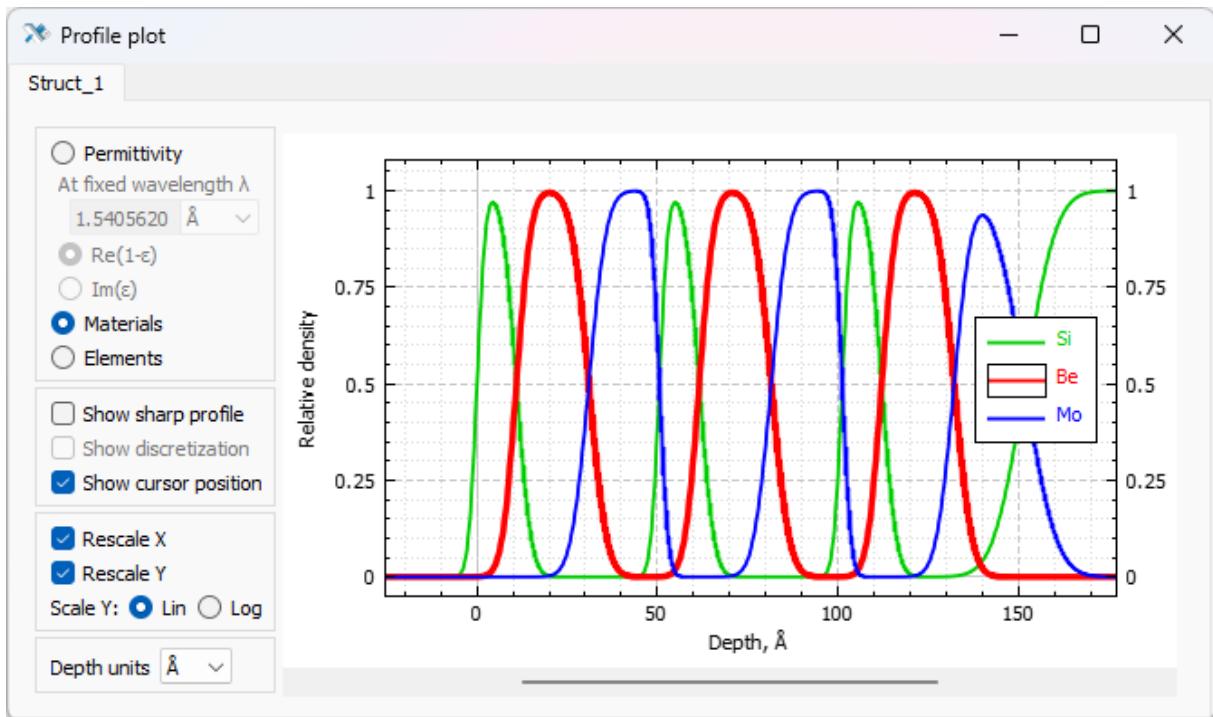


Рисунок 148. Распределение материалов в структуре

При выборе «Materials» по вертикальной оси будет откладываться относительная плотность каждого материала. Она зависит от плотности, заданной в таблице, и от проникновения материала в соседние слои. При выборе «Elements» по вертикальной оси отображается абсолютная концентрация атомов на  $1\text{ см}^3$ . Она зависит не только от параметров структуры, но и от внутренних свойств элемента.

Второй блок позволяет вывести дополнительную информацию на графиках. «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» отображает 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 открытии проекта, нужно предварительно сохранить проект.

## 4.5 1D graphs

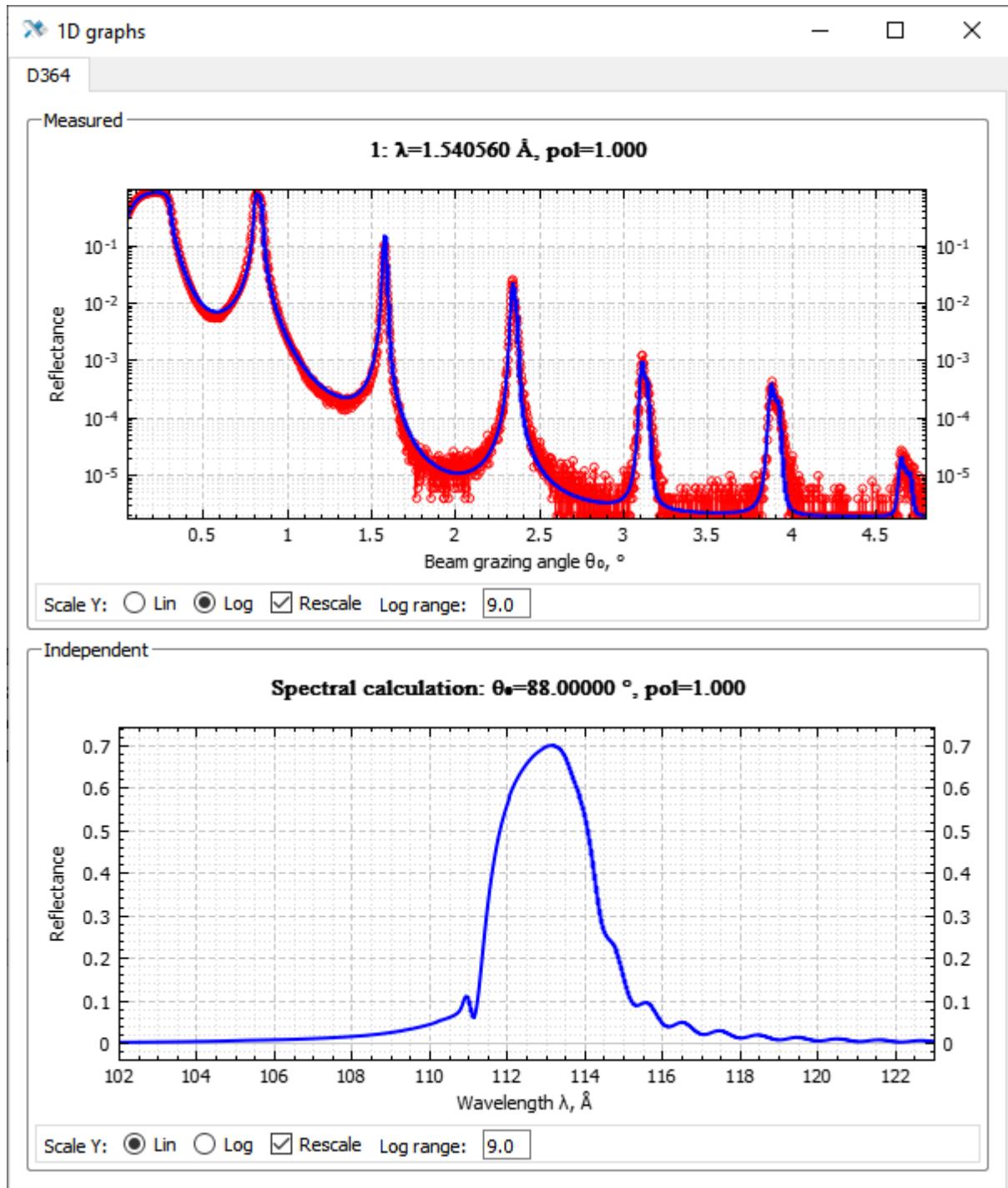


Рисунок 149. Окно «1D graphs»: расчёт по экспериментальной сетке и независимый расчёт

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.

Пустые секции не отображаются. Между секциями находится невидимый горизонтальный разделитель, который позволяет вручную перераспределить высоту между секциями в окне с помощью мыши.

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

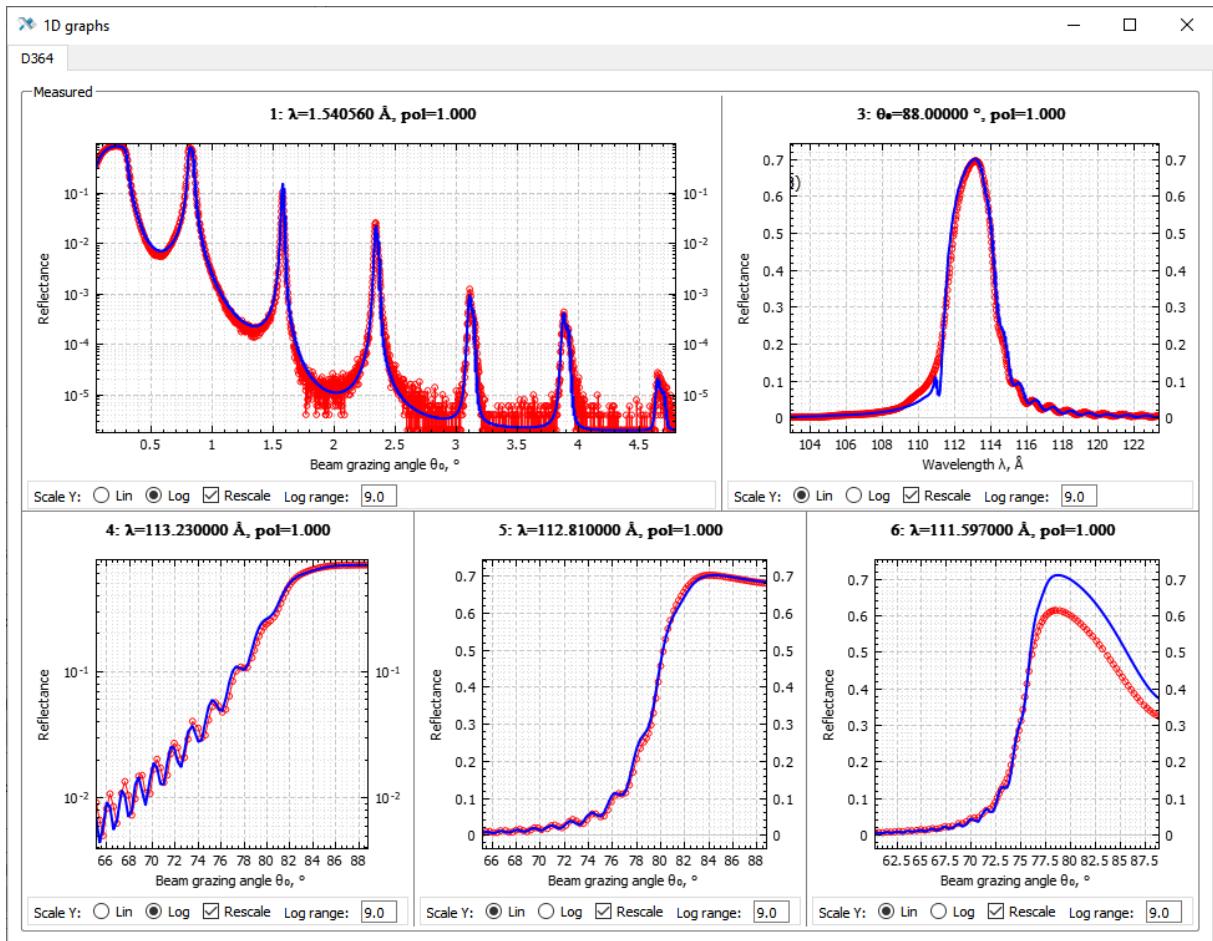


Рисунок 150. Расположение нескольких кривых в секции

Между графиками в одной строке 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**».

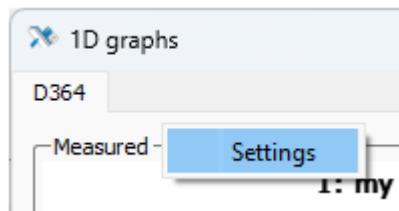


Рисунок 151. Контекстное меню «1D graphs»

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

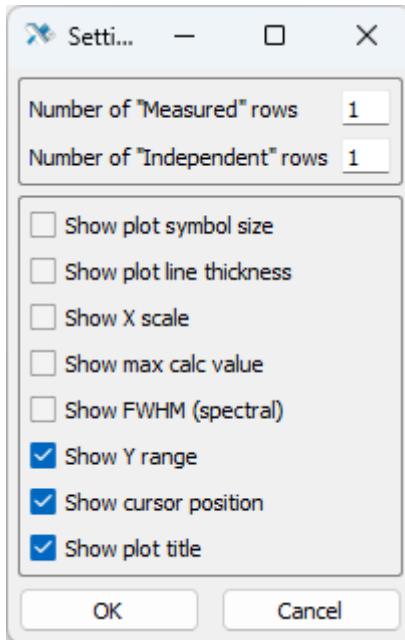


Рисунок 152. Настройки окна «1D graphs»

Дальнейший список опций касается отображения элементов 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. 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» показывает максимальное значение и его положение на вычисленной кривой.

«Show FWHM (spectral)» показывает спектральную ширину пика на вычисленной кривой.

«Show Y range» показывает опцию «Log range», в которой можно указать количество порядков, отображаемых по вертикальной оси при автоматическом перескайдировании. 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.

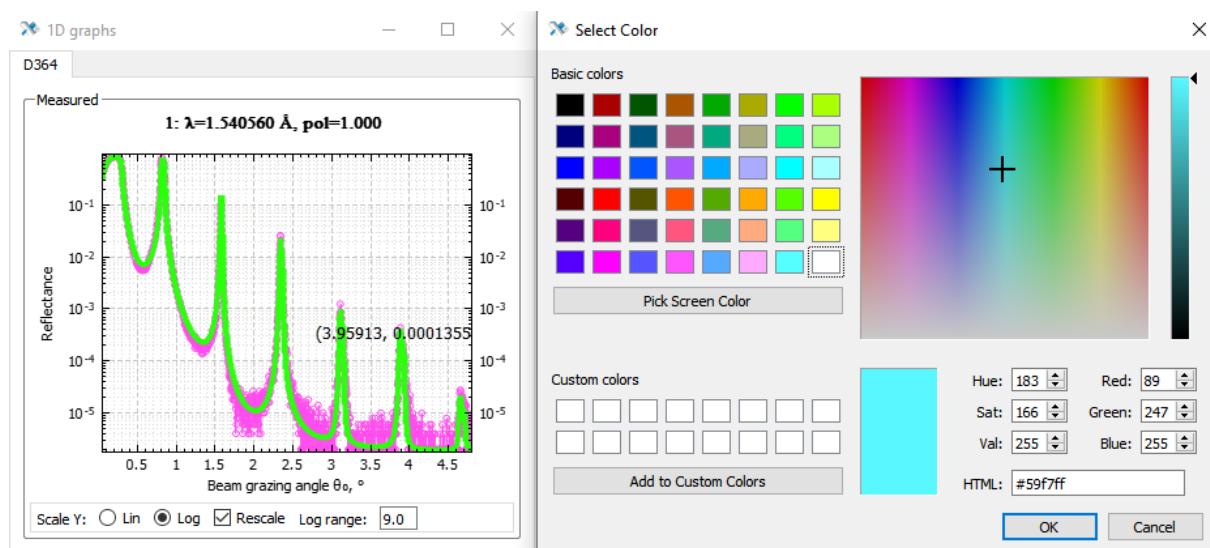


Рисунок 153. Изменение цвета кривой двойным кликом

#### 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, перетаскив 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 прочитан в тех же единицах, что указаны на осях в момент перетаскивания файла.

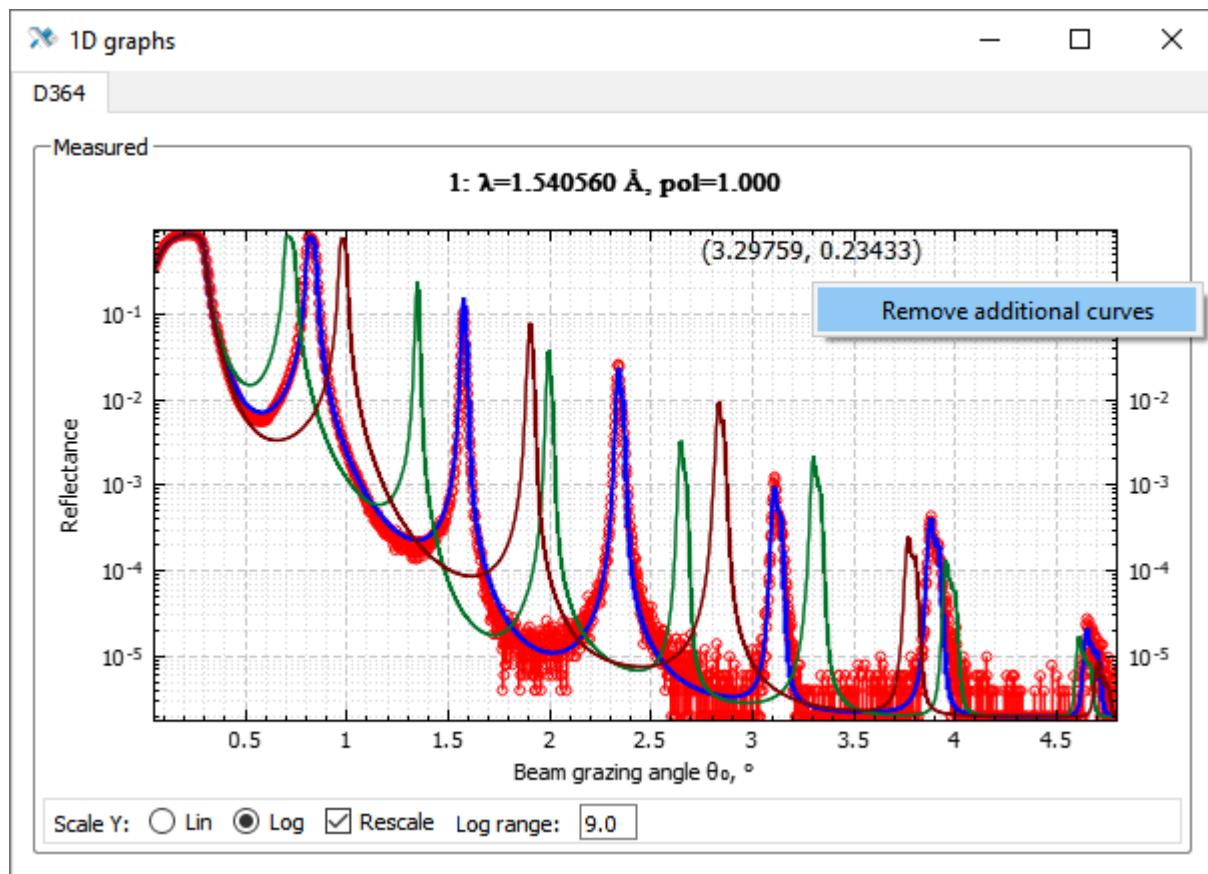


Рисунок 154. Дополнительные кривые на графике

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

## 4.6 2D graphs

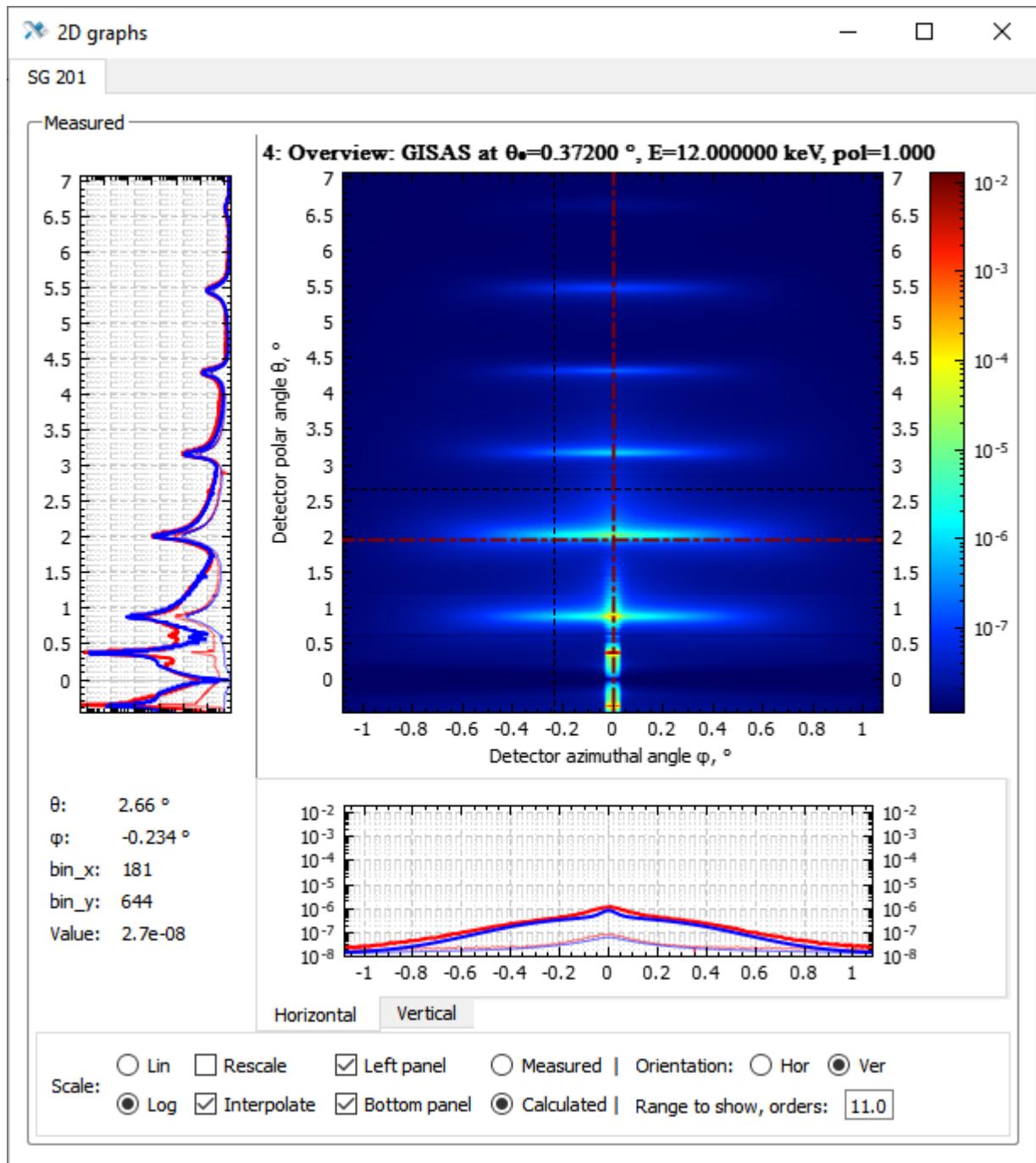


Рисунок 155. GISAS: измерение и расчёт

В Multifitting есть два вида данных, рассчитываемых сразу от двух координат. Это GISAS, 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 GISAS. Количество графиков определяется тем, сколько их задано в главном окне и сколько «включено» в окне «[Calculation settings](#)». 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**».

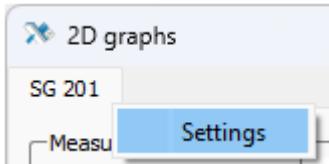


Рисунок 156. Контекстное меню «2D graphs»

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.

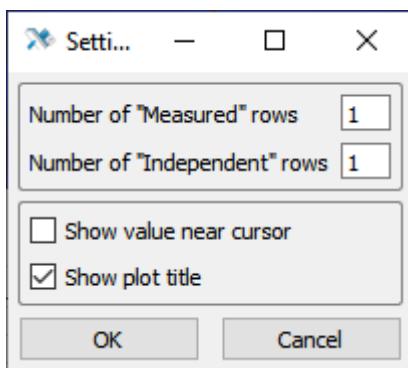


Рисунок 157. Настройки окна «2D graphs»

Все остальные элементы управления расположены на панели под каждым графиком.

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

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

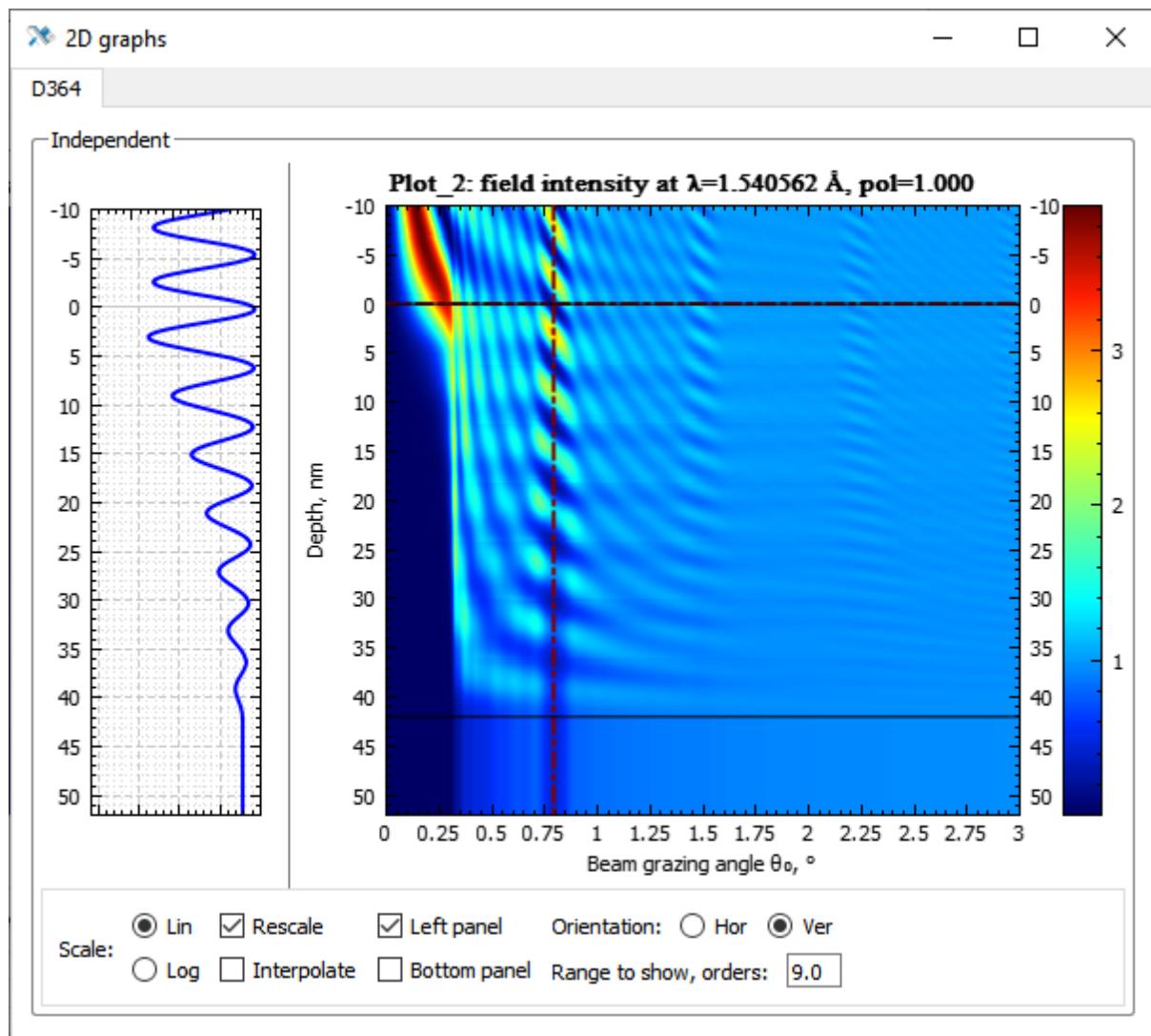


Рисунок 158. Интенсивность поля в структуре

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

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

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

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

Другие настройки специфичны именно для двумерных карт:

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

Переключатель «Measured» – «Calculated» определяет, какая карта отображается. Эта опция присутствует только в секции «Measured».

«Orientation» меняет местами осями и определяет ориентацию карты, 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 отображается блок с информацией о координатах, номере ячейки и значениях в текущем положении курсора.

#### 4.6.2 Настройка цветовой схемы

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

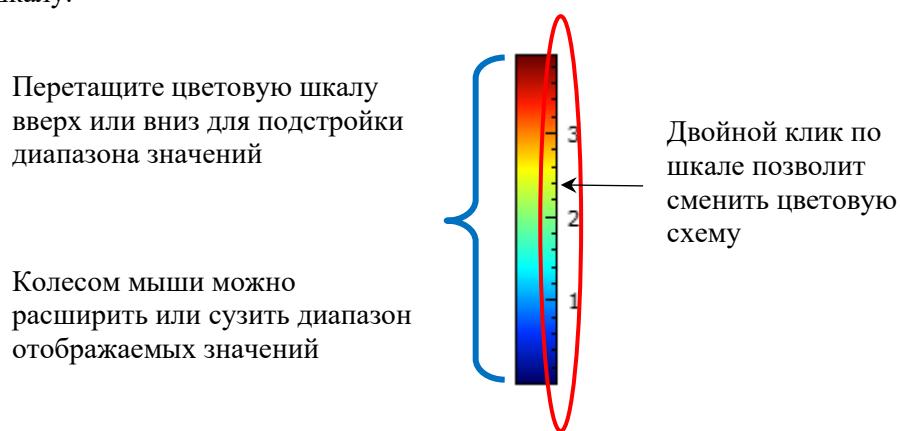


Рисунок 159. Работа со шкалой значений

Для смены цветовой схемы нужно дважды кликнуть по правой части цветовой шкалы.

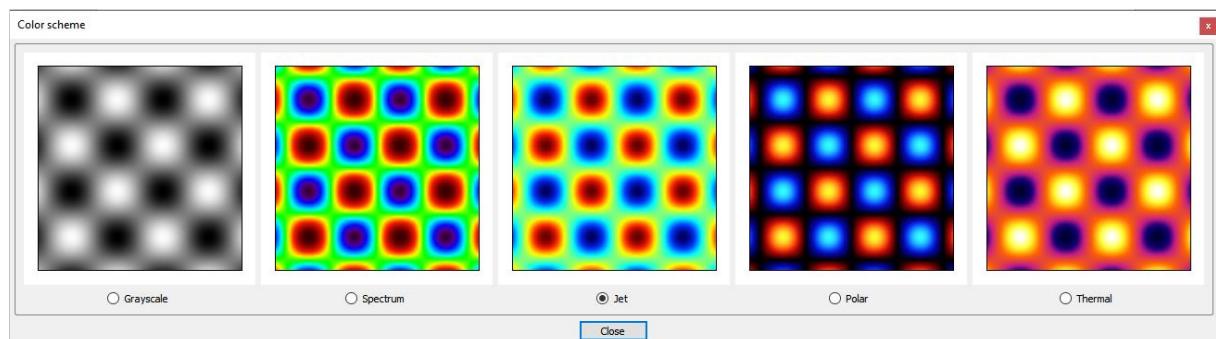


Рисунок 160. Смена цветовой схемы

## 4.7 Roughness spectrum

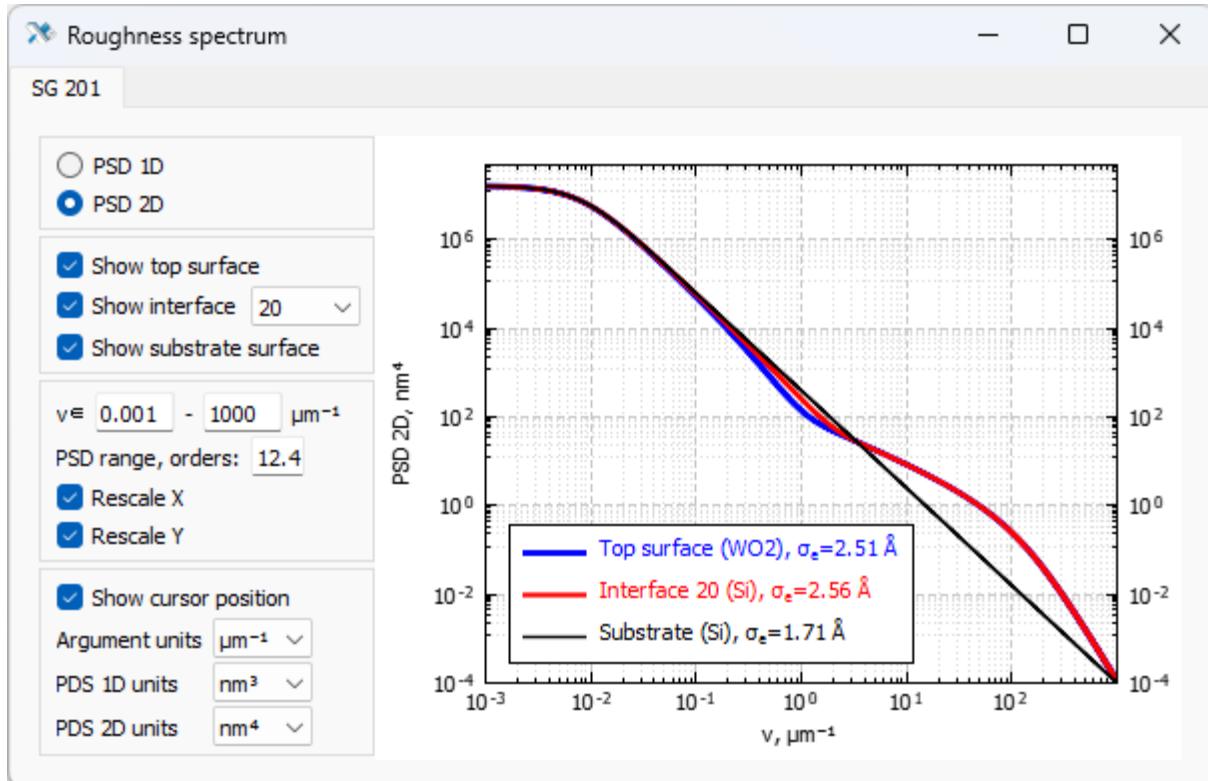


Рисунок 161. PSD шероховатостей на интерфейсах

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 одной 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  $v$ .

В последнем блоке можно указать единицы аргумента и отдельно единицы PSD<sub>1D</sub> и PSD<sub>2D</sub>. 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

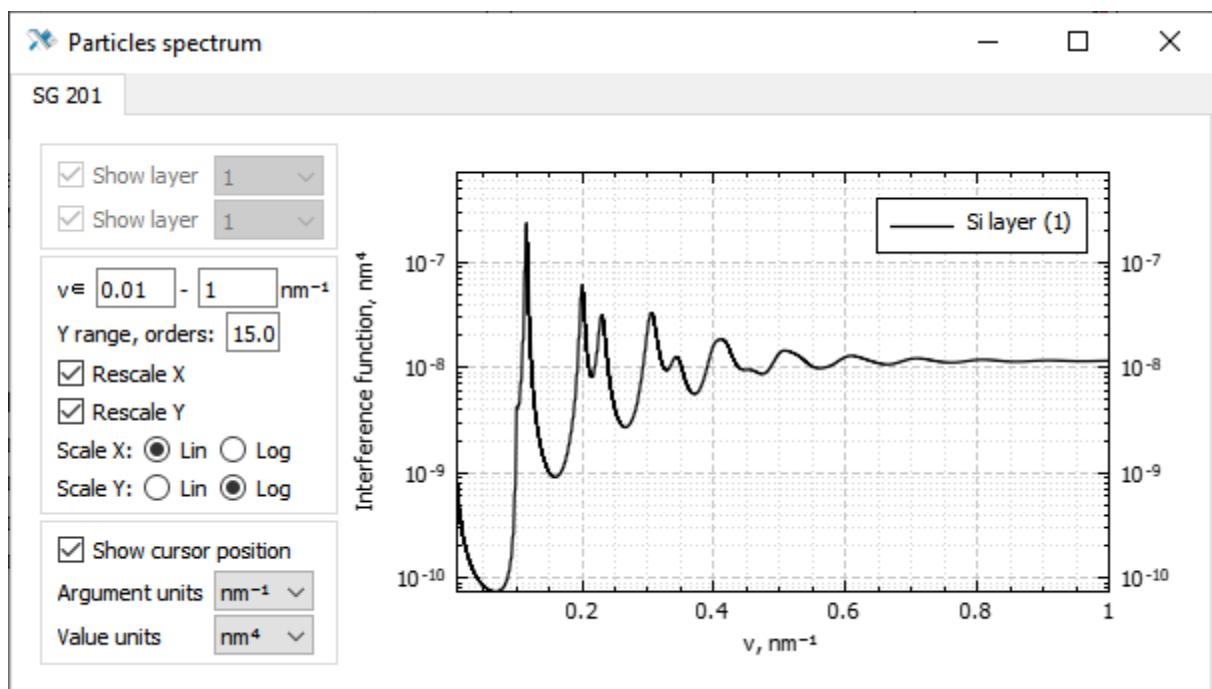


Рисунок 162. Интерференционная функция частиц

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 изменяется с помощью колеса мыши. Если указатель находится во внутренней области графика, то масштабирование по обеим осям меняется синхронно. Если указатель находится возле одной 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 пересчете 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

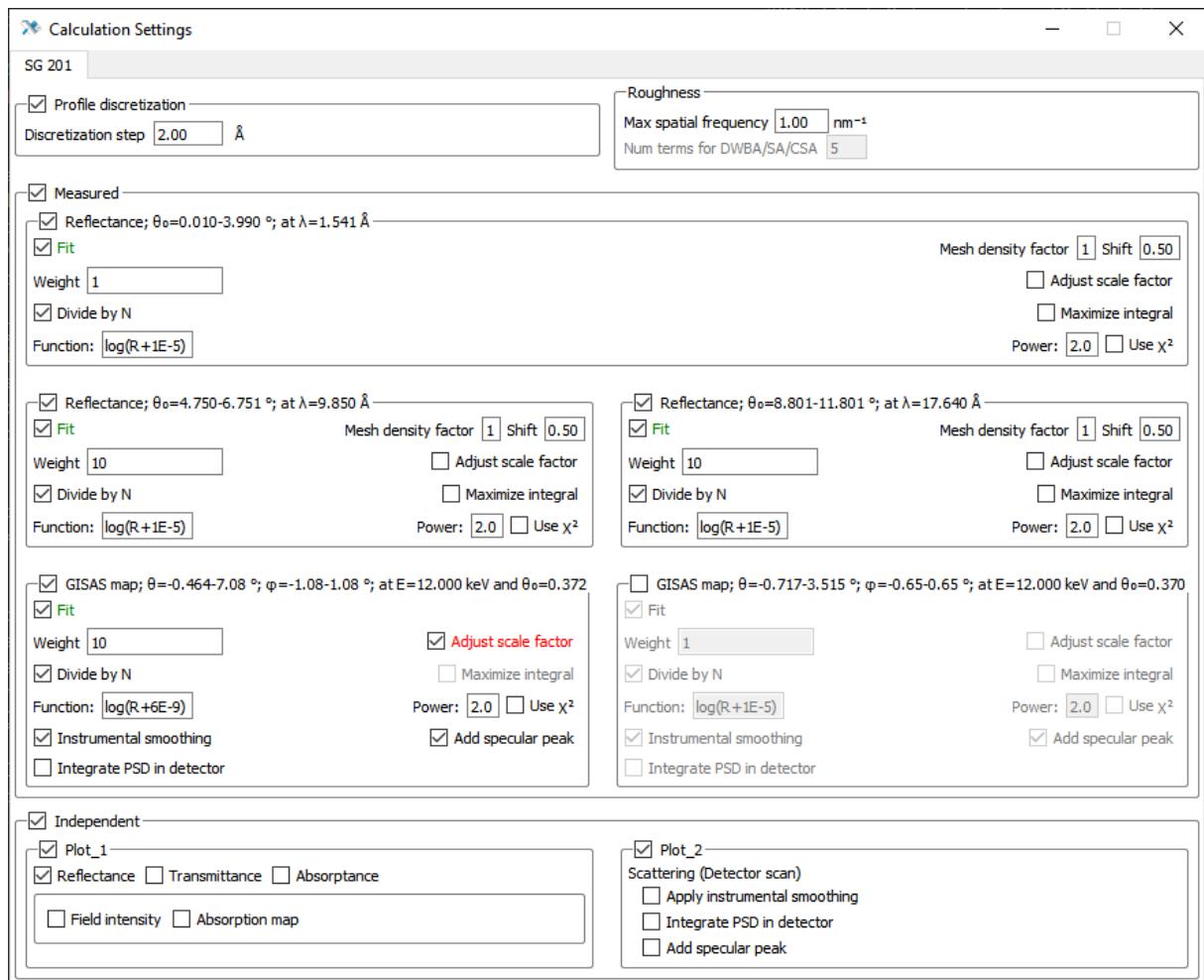


Рисунок 163. Окно «**Calculation settings**»

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](#)».

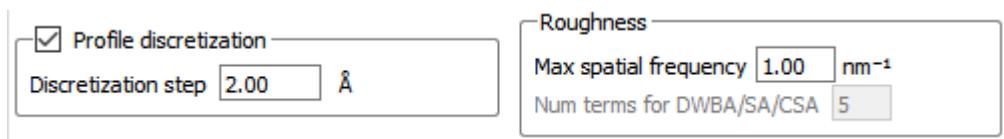


Рисунок 164. Дополнительные параметры модели для вычислений

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 колесо мыши. Реальный шаг разбиения индивидуален для каждого слоя, он автоматически устанавливается 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 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**».

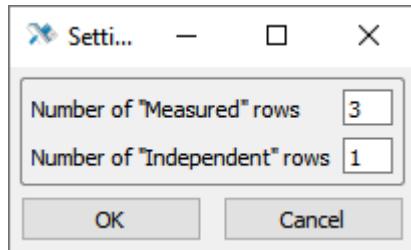


Рисунок 165. Настройки окна «Calculation settings»

### 4.9.3 Зеркальная кривая с экспериментальной сеткой

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

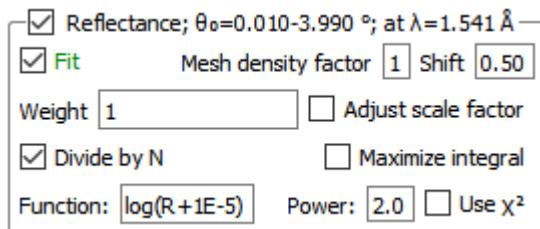


Рисунок 166. Параметры вычисления экспериментальной кривой отражения

«**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 при 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 приоритетнее подгоняться, даже в ущерб другим кривым. Текущие значения невязки можно увидеть в консоли при ручном перевычислении («[Ctrl+Shift+C](#)»).

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

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

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

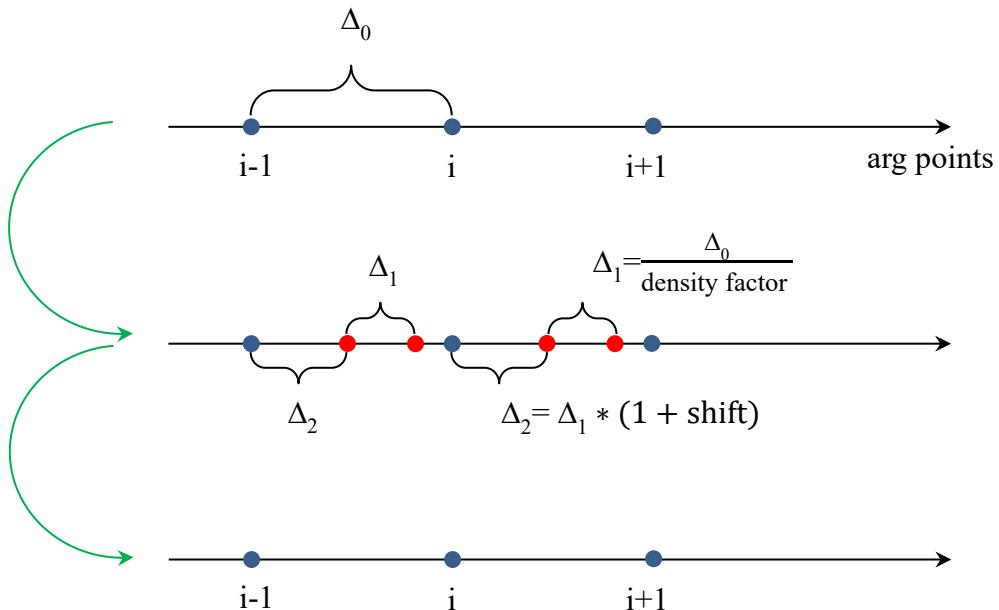


Рисунок 167. Способ расстановки дополнительных точек в уплотнённой сетке

«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/exptk/>). 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  $\chi^2$** » – 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 другие. 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 и мнимой части диэлектрической проницаемости  $J=F^*\text{Im}(\epsilon)$ .

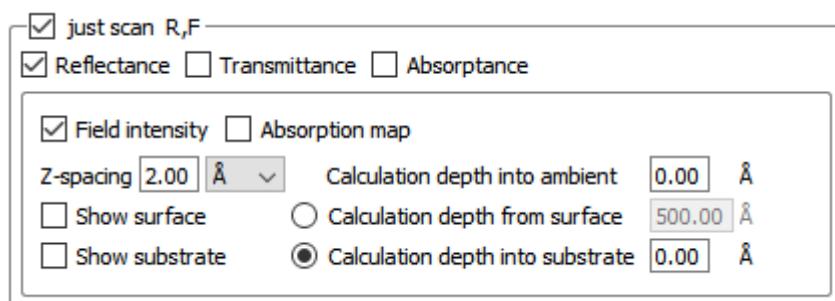


Рисунок 168. Настройки «независимого» зеркального скана

При выборе полевой функции «**Field intensity**» или «**Absorption map**» 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 плюс 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

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

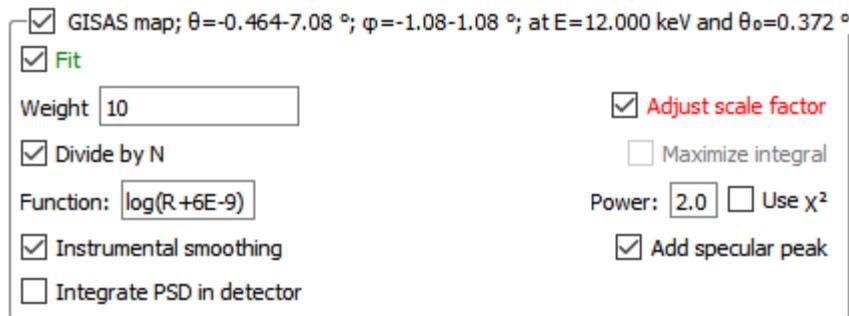


Рисунок 169. Параметры вычисления экспериментальной кривой рассеяния

«**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 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 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

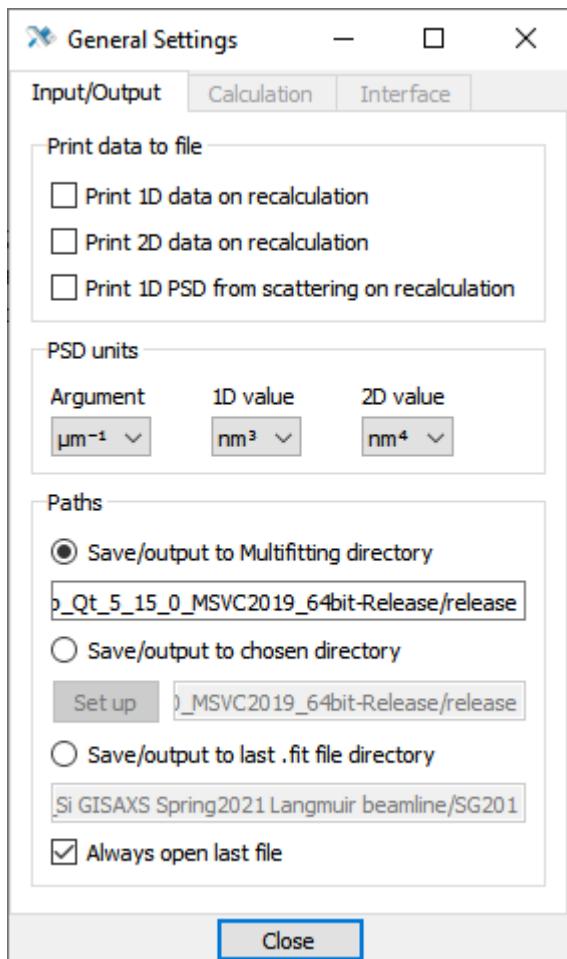


Рисунок 170. Вкладка «Input/Output»

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. Рабочая директория является стартовой в диалоговом окне сохранения и загрузки.

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

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

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

«Always open last file» – опция, позволяющая сразу же после запуска Multifitting быстрым открытием («Ctrl+O») загружать последний загруженный файл независимо от выбранной рабочей директории. Если предыдущий файл не существует, Multifitting предупредит об этом. Если опция отключена, то при нажатии «Ctrl+O» сразу после запуска Multifitting откроет диалоговое окно с рабочей директорией.

#### 4.10.2 Calculation

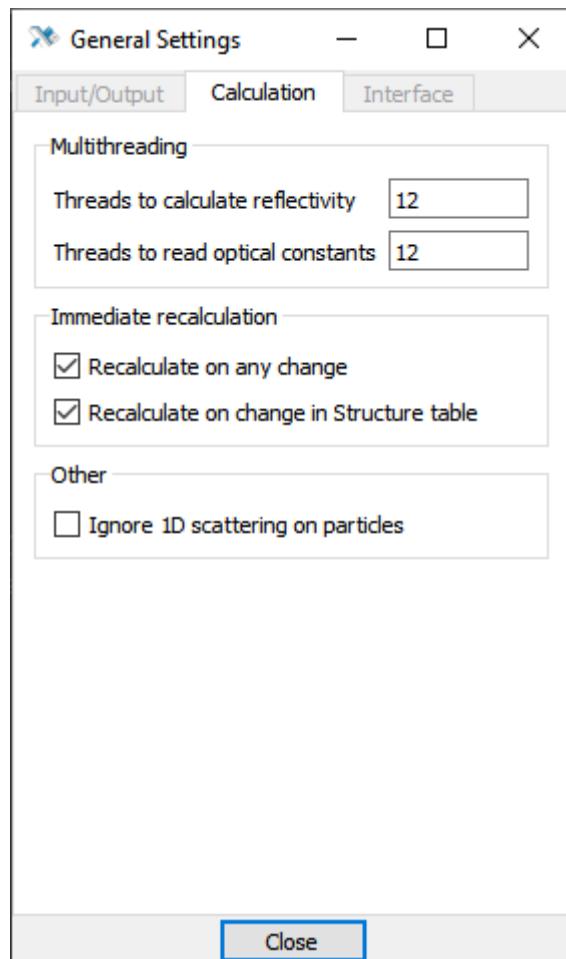


Рисунок 171. Вкладка «Calculation»

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

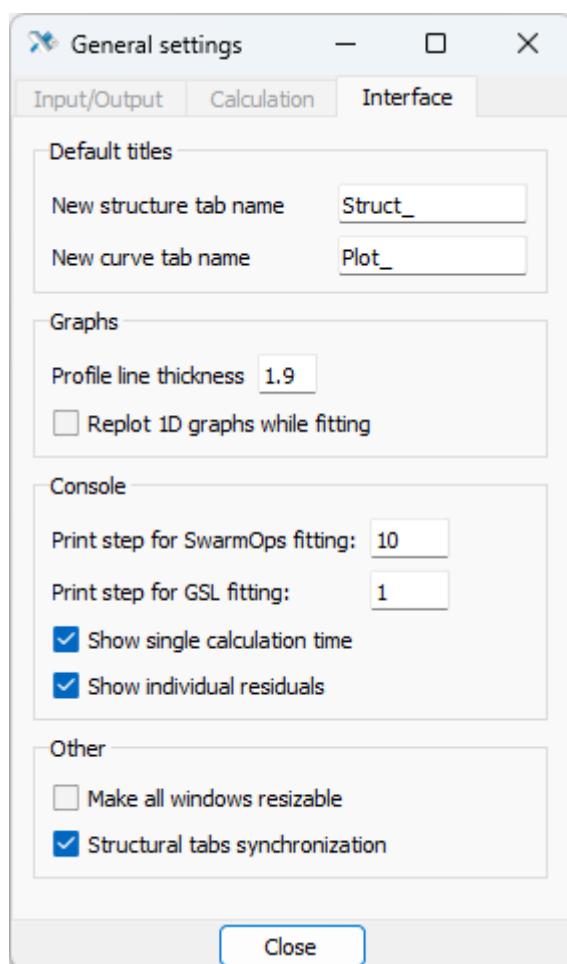


Рисунок 172. Вкладка «Interface»

Здесь находятся некоторые настройки внешнего вида и поведения окон.

В первом блоке указываются названия 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 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.

Пункты в блоке «**Console**»:

«**Print step for SwarmOps fitting**» – задаёт период обновления N текущего состояния в процессе автоматической подгонки. В консоль выводится информация о каждом N-ом вычислении невязки при использовании алгоритмов группы SwarmOps.

«**Print step for GSL fitting**» – задаёт период обновления N текущего состояния в процессе автоматической подгонки. В консоль выводится информация о каждой N-й итерации при использовании алгоритмов группы GSL.

«**Show single calculation time**» – показывает в консоли 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](#)»).

Пункты в блоке «**Other**»:

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

«**Structural tabs synchronization**» – если в 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.

## 4.11 Fitting settings

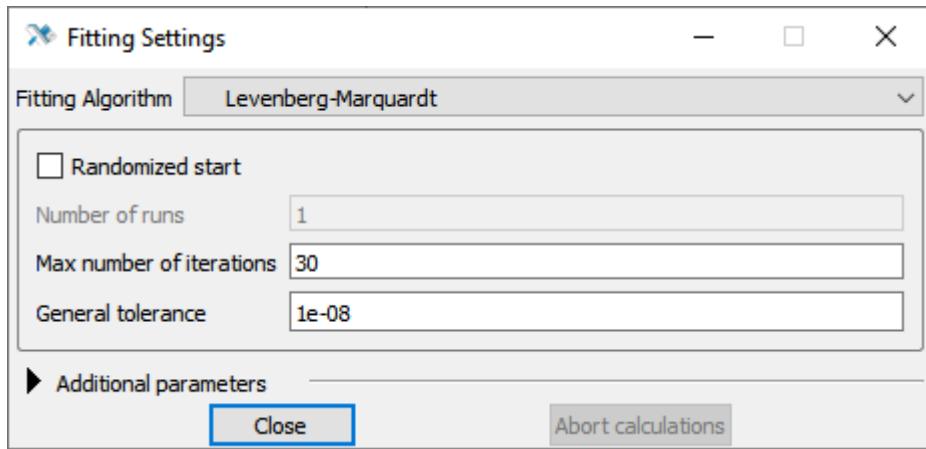


Рисунок 173. Окно «Fitting settings»

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 (<https://www.gnu.org/software/gsl/doc/html/nls.html#nonlinear-least-squares-fitting>), из библиотеки SwarmOps – преимущественно стохастические ([https://github.com/Hvass-Labs/swarmops-other/blob/master/SwarmOpsC1\\_1.pdf](https://github.com/Hvass-Labs/swarmops-other/blob/master/SwarmOpsC1_1.pdf))

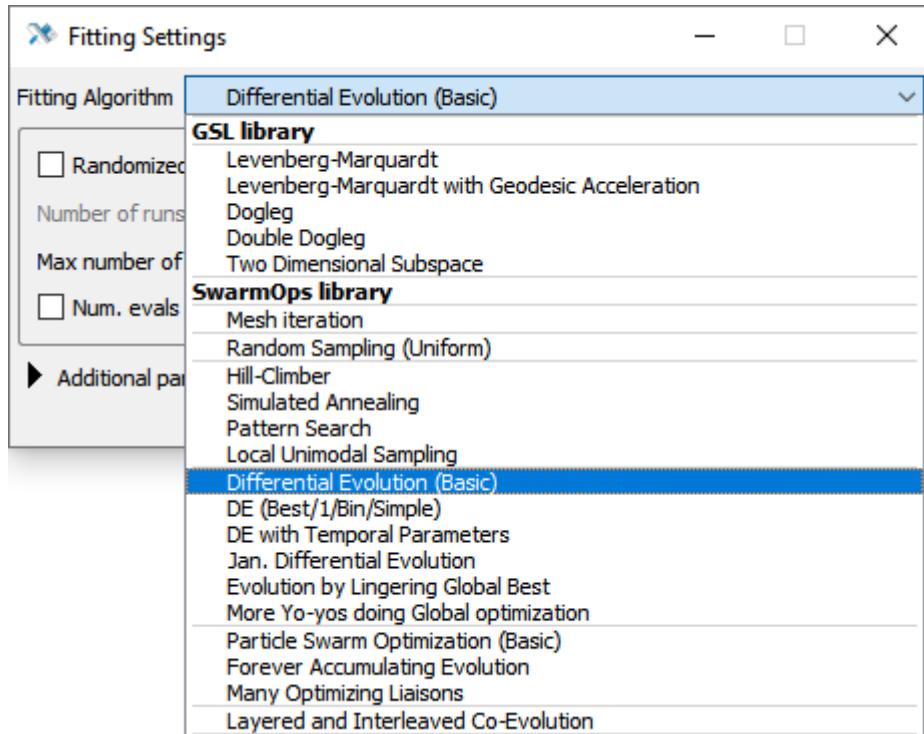


Рисунок 174. Список алгоритмов

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 большую часть параметрического пространства и с большей вероятностью найти достаточно глубокий минимум невязки.

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

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

Для алгоритмов из SwarmOps часть параметров отличается, а именно:

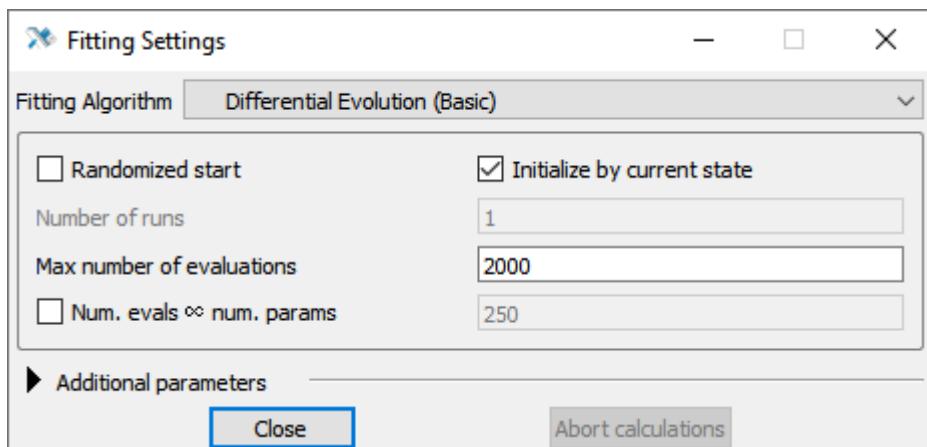


Рисунок 175. Окно «Fitting settings»

«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 задания 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»:

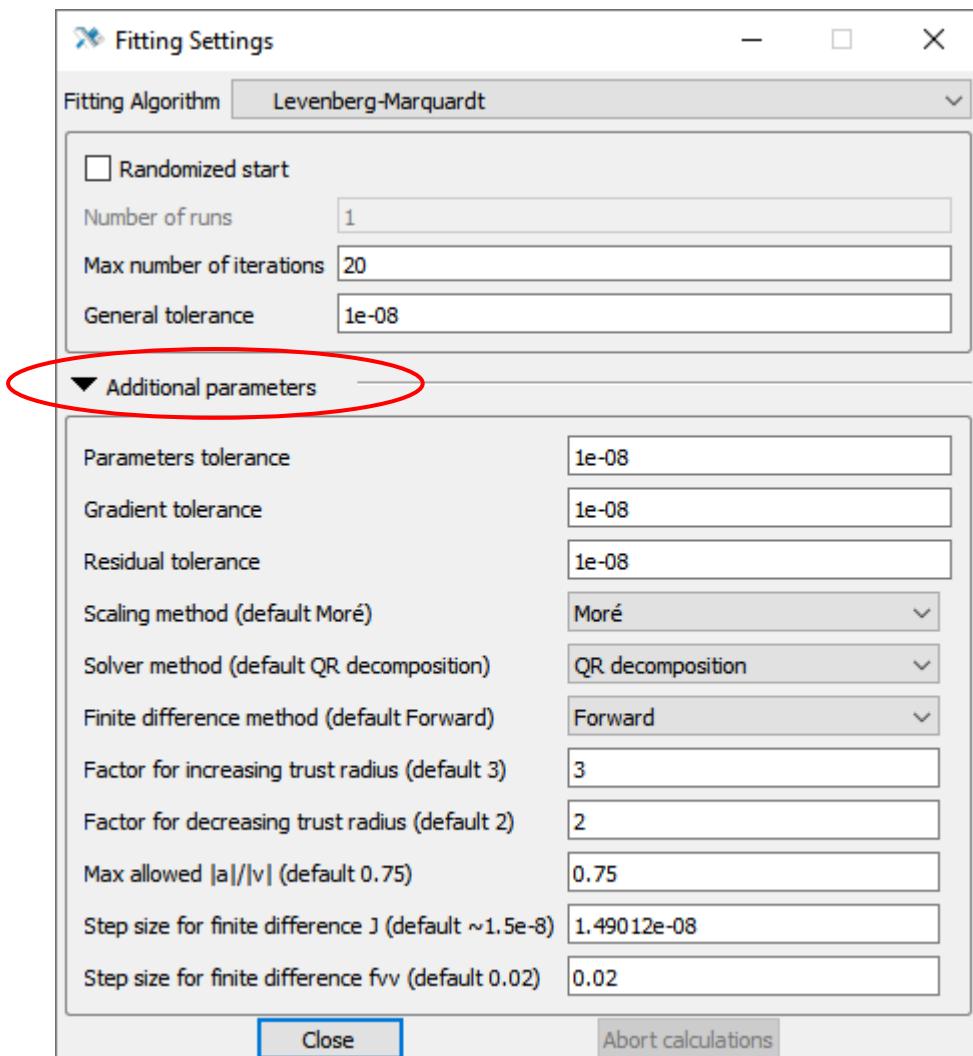


Рисунок 176. Дополнительные параметры алгоритмов

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

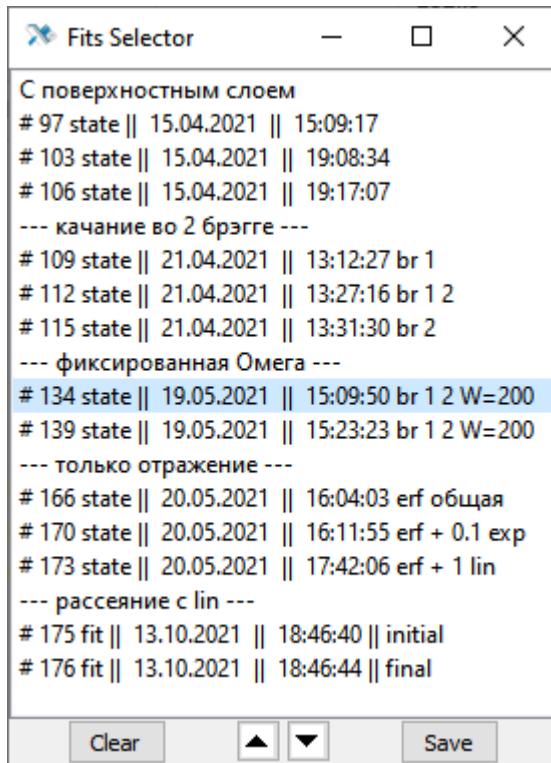


Рисунок 177. Окно «Fits selector»

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:

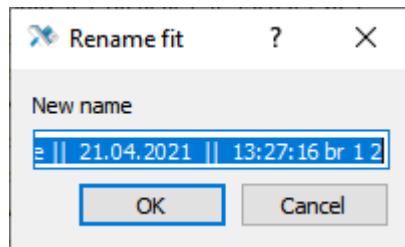


Рисунок 178. Переименование записи

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 мышью (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

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

### 5.1 Слой

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

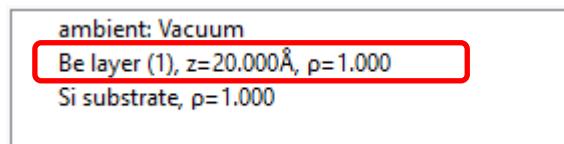


Рисунок 179. Слой в структуре

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

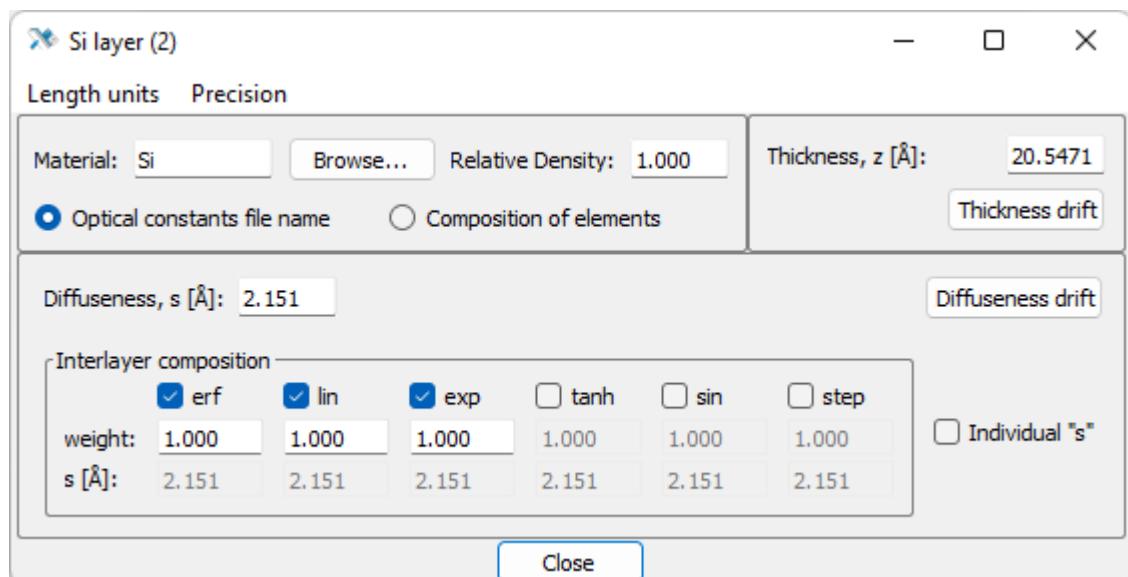


Рисунок 180. Окно «Layer»

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

### 5.1.1 Материал

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

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

Al	O	$\rho$ [g/cm <sup>3</sup> ]
2.00	3.00	3.950
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
0.00	0.00	2.500
1.00	1.00	2.700

W	$\rho$ [г.у.]
<input type="button" value="Browse"/>	1.000
	<input type="checkbox"/> fit
	0.700
	1.000

Рисунок 181. Параметры материалов в таблице

### 5.1.2 Толщина

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

z [Å]
20.0000
<input type="checkbox"/> fit
10.0000
30.0000

Рисунок 182. Толщина слоя в таблице

### 5.1.3 Диффузность

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

Чтобы работать с диффузным интерфейсом в таблице, нужно сначала открыть [окно настройки модели](#) структуры и уже там включить [соответствующий блок](#) и нужные виды профиля.

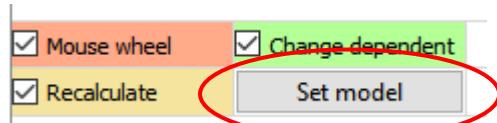


Рисунок 183. Доступ к настройкам модели структуры в таблице

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

Суммарный профиль конструируется как нормированная линейная комбинация [3]:

$$f(z) = \frac{\sum \alpha_j f_j(z, s_j)}{\sum \alpha_j}, \quad \alpha_j \geq 0, \quad \sum_j \alpha_j > 0, \quad j = erf, lin, exp, tanh, sin, step$$

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

<input checked="" type="checkbox"/> s [\AA]	<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input type="checkbox"/> lin	<input checked="" type="checkbox"/> exp	<input checked="" type="checkbox"/> tanh	<input checked="" type="checkbox"/> sin	<input type="checkbox"/> step
0.0000	0.250	1.000	0.250	0.250	0.250	1.000
<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 type="checkbox"/> fit
1.0000	s erf	s lin	s exp	s tanh	s sin	s step
20.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Рисунок 184. Диффузный интерфейс в таблице

Толщину каждой компоненты также можно задавать индивидуально в нижней строке, но для этого нужно кликнуть по заголовку среднеквадратичной толщины «**S**».

## 5.2 Периодическая многослойка

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

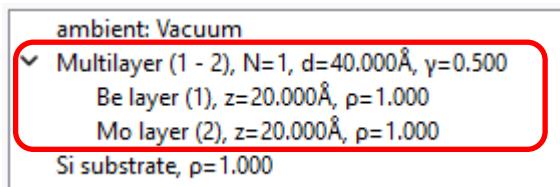


Рисунок 185. Периодическая многослойка в структуре

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

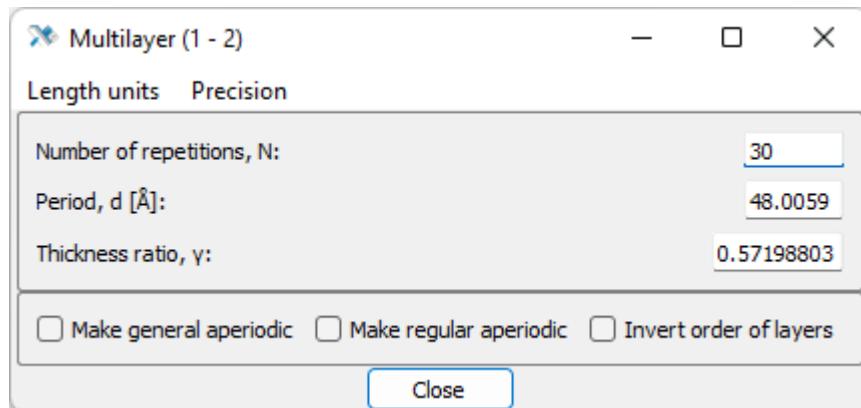


Рисунок 186. Окно «Multilayer»

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

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

<b>N</b>	<b>d [Å]</b>	<b>γ</b>
10	40.0000	0.6600000
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
1	20.0000	0.0000000
100	60.0000	1.0000000

Рисунок 187. Число периодов, толщина периода и толщинный фактор в таблице

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

### 5.2.1 Перераспределение толщин слоёв внутри периода

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

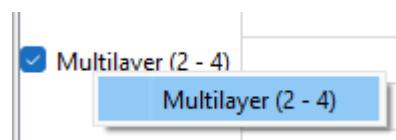


Рисунок 188. Вызов окна для работы с толщинами слоёв элементарной ячейки

## 5.2.2 Дрейф толщин по глубине

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

$$\text{При линейном дрейфе толщины слоёв заменяются } z \rightarrow z \times \left[ 1 + \frac{dz_{lin}}{100} \left( n - \frac{N}{2} \right) \right]$$

$$\text{При случайных отклонениях: } z \rightarrow z \times \left[ 1 + gauss\_rand \left( \frac{dz_{ran}}{100} \right) \right]$$

$$\text{При гармонической модуляции: } z \rightarrow z \times \left[ 1 + \frac{A}{100} \sin(2\pi(n\nu + \varphi)) \right]$$

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

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

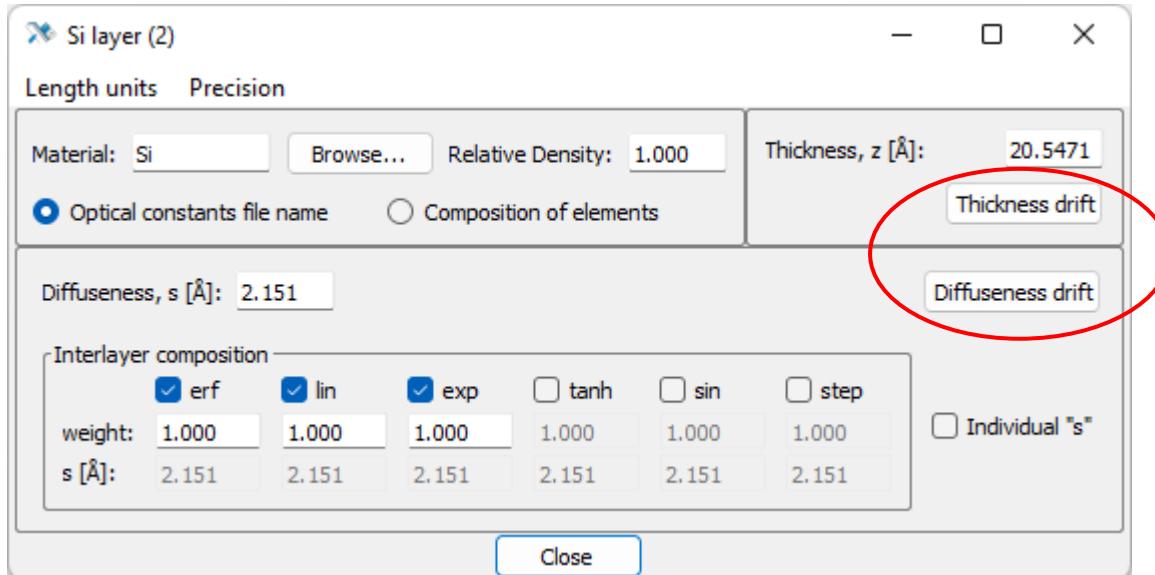


Рисунок 189. Доступ к настройкам дрейфа толщин слоя в составе периодики

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

<input checked="" type="checkbox"/> dz lin	<input checked="" type="checkbox"/> dz ran	<input checked="" type="checkbox"/> dz sin : $A \cdot \sin[2\pi(nv+\phi)]$		
0.0010	1.0000	1.0000	0.3333	0.0000
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
-0.0100	0.0000	0.0000	0.0100	0.0000
0.0100	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

Рисунок 190. Дрейф толщин: линейный, случайный, гармонический

<input checked="" type="checkbox"/> ds lin	<input checked="" type="checkbox"/> ds ran	<input checked="" type="checkbox"/> ds sin : $A \cdot \sin[2\pi(nv+\phi)]$		
0.0370	1.1600	0.3500	0.3534	0.1120
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
-0.0100	0.0000	0.0000	0.0100	0.0000
0.0100	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

Рисунок 191. Дрейф интерфейсов: линейный, случайный, гармонический

### 5.3 Общая аperiодика

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

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



Рисунок 192. Блок управления типом структуры

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

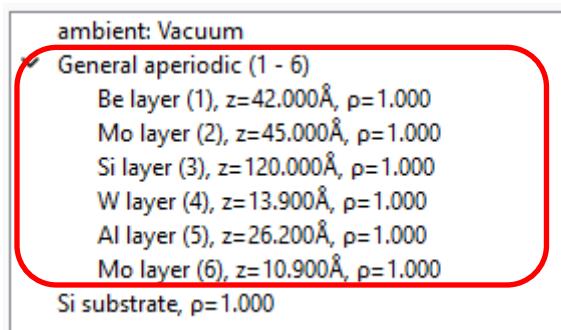


Рисунок 193. Общая аperiодика в структуре

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

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

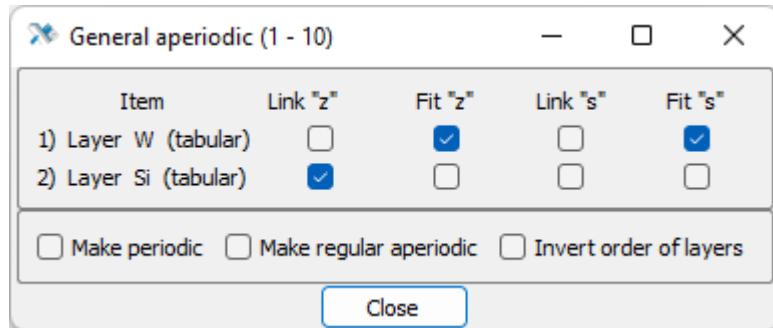


Рисунок 194. Окно «General aperiodic»

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

## 5.4 Регулярная аperiодика

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

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

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

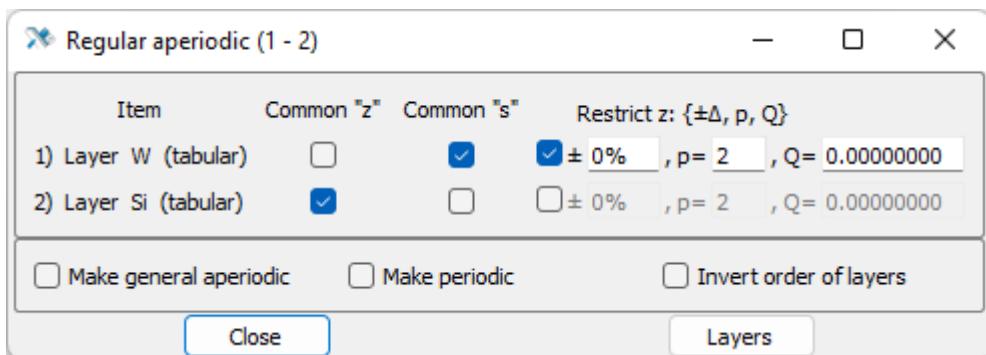


Рисунок 195. Окно «Regular aperiodic»

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

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

The dialog box has tabs for 'Length units' and 'Precision'. The main table has columns: 'common s', 'common z', 'active fit', and 'common z and s'. It includes checkboxes for 'Mouse wheel' and 'Recalculate', and input fields for 'z step' (0.10 Å) and 's step' (0.10 Å). The table lists four layers (Cell # 1-4) with columns: 'Cell #', 'Material', 'z [Å]', 'Fit z', 's [Å]', and 'ρ'. Layer 1: Be, z = 75.7000, Fit z checked, s = 52.0000, ρ = 1.000 [r.u.]. Layer 2: Mo, z = 62.9000, Fit z checked, s = 23.0000, ρ = 1.000 [r.u.]. Layer 3: Be, z = 75.7000, Fit z checked, s = 52.0000, ρ = 1.000 [r.u.]. Layer 4: Mo, z = 62.9000, Fit z checked, s = 23.0000, ρ = 1.000 [r.u.]. A 'Close' button is at the bottom right.

Regular aperiodic (3 - 4)					
Length units		Precision			
		common s	common z	active fit	common z and s
<input checked="" type="checkbox"/> Mouse wheel		z step 0.10 Å		<input type="checkbox"/> s step 0.10 Å	
<input checked="" type="checkbox"/> Recalculate					
Cell #	Material	z [Å]	Fit z	s [Å]	ρ
1	Be	75.7000	<input checked="" type="checkbox"/>	52.0000	1.000 [r.u.]
2	Mo	62.9000	<input checked="" type="checkbox"/>	23.0000	1.000 [r.u.]
3	Be	75.7000	<input checked="" type="checkbox"/>	52.0000	1.000 [r.u.]
4	Mo	62.9000	<input checked="" type="checkbox"/>	23.0000	1.000 [r.u.]

Рисунок 196. Таблица слоёв регулярной аperiодики

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

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

[Параметры](#) в группе «**Restrict z: {±Δ, p, Q}**» позволяют настроить «мягкое» ограничение разброса толщин слоёв при автоматической оптимизации структуры. Если толщина любого слоя будет отличаться больше, чем на величину  $\Delta$  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  $\pm\Delta$ .

В главной таблице эти параметры расположены под профилями интерфейса.

<input checked="" type="checkbox"/> erf	<input type="checkbox"/> lin	<input checked="" type="checkbox"/> exp	<input type="checkbox"/> tanh	<input checked="" type="checkbox"/> sin	<input type="checkbox"/> step
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
<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	$\pm 10\%$	$p = 4$	$Q = 123455.00000000$		

Рисунок 197. Параметры регулярной аperiодики

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

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

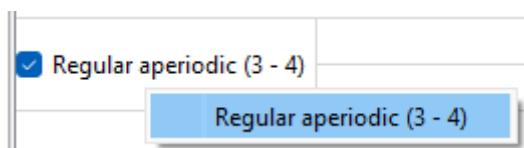


Рисунок 198. Контекстное меню для таблицы слоёв

## 5.5 Шероховатость

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

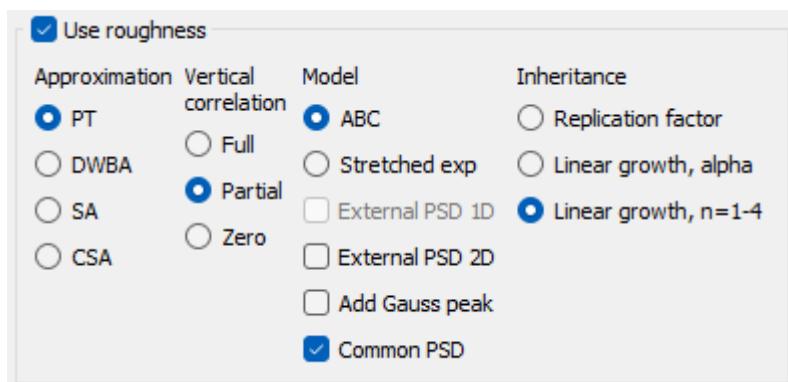


Рисунок 199. Блок «Use roughness»

### 5.5.1 Приближение

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

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

<b>PT approximation</b> <b>ABC model + external PSD + Gauss peak</b> <b>partial vertical correlation</b>
--

Рисунок 200. Информация о выбранной модели шероховатости в шапке таблицы

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

## 5.5.2 Шероховатость подложки

### 5.5.2.1 Основная модель

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

$$C(\rho) = \sigma^2 \frac{2^{1-\alpha}}{\Gamma(\alpha)} \left( \frac{\rho}{\xi} \right)^\alpha K_\alpha \left( \frac{\rho}{\xi} \right)$$

Её PSD вычисляется аналитически:

$$PSD_{2D}(\nu) = \frac{4\pi\sigma^2\xi^2\alpha}{(1+\xi^2(2\pi\nu)^2)^{\alpha+1}}$$

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

$$C(\rho) = \sigma^2 \exp \left[ - \left( \frac{\rho}{\xi} \right)^{2\alpha} \right]$$

При « $\alpha$ » = 0.5 эти модели совпадают.

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

$\sigma$ [Å]	$\xi$ [μm]	$a$
2.9000	2.600	0.55
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
1.0000	0.100	0.10
20.0000	50.000	1.00

Рисунок 201. Параметры «ABC» и «Stretched exp» моделей

### 5.5.2.2 Внешняя PSD

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

PSD 1D	PSD 2D
$\sigma_e$ [Å]	$\sigma_e$ [Å]
3.8707	0.0000
rf 1D	rf 2D
0.800	1.000

Рисунок 202. Внешняя PSD шероховатости

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

### 5.5.2.3 Гауссов пик

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

$$PSD_{2D}(\nu) = f \sigma_\nu^2 \exp\left[-\left(\frac{\nu - \nu_0}{\delta\nu}\right)^2\right]$$

где  $f$  – нормировочный фактор, такой, что  $\int_0^\infty PSD_{2D}(\nu) 2\pi\nu d\nu = \sigma_\nu^2$

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

У пика три параметра: « $\sigma_\nu$ » – полная среднеквадратичная шероховатость пика, « $\nu_0$ » – центральная пространственная частота, « $\delta\nu$ » – частотная ширина пика на полувысоте.

$\sigma_v$ [Å]	$v_0$ [ $\mu\text{m}^{-1}$ ]	$\delta v$ [ $\mu\text{m}^{-1}$ ]
0.0000	0.00000	0.00900
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
0.0000	0.00000	0.00090
2.0000	90.00000	0.90000

Рисунок 203. Гауссов пик шероховатости

### 5.5.3 Модель репликации

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

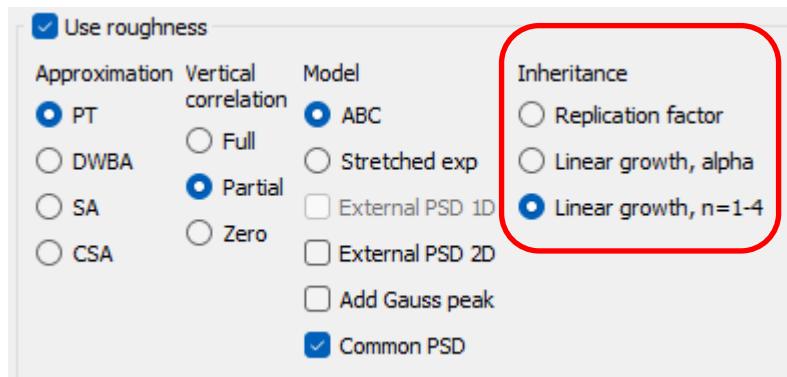


Рисунок 204. Модели вертикальной корреляции

#### 5.5.3.1 Replication factor

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

$$e^{-\left(\frac{\nu}{\nu_l}\right)^\beta \frac{z}{L_\nu}}$$

Здесь два основных параметра: « $L_\nu$ » – глубина корреляции на частоте « $\nu_l$ », « $\beta$ » – показатель частоты, определяющий скорость спадания корреляции в область высоких частот.

$L_\nu$ [Å]	$\beta$
200.000	3.00
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
10.000	1.00
1000.000	5.00

Рисунок 205. Параметры репликации

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

PT approximation		
ABC model		
partial vertical correlation		
$\sigma [\text{\AA}]$	$v_l [\mu\text{m}^{-1}]$	$\alpha$
0.1000	10.00	0.01

Рисунок 206. Частота, для которой выставляется глубина корреляции

### 5.5.3.2 Linear growth, alpha

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

$$PSD_{up}(\nu) = PSD_{low}(\nu) e^{-b(\nu)z} + \Omega \frac{1 - e^{-b(\nu)z}}{e^{-b(\nu)z}}, \text{ где } b(\nu) = \left( \frac{\nu}{\nu_l} \right)^\alpha \frac{1}{L_\nu}$$

Здесь три основных параметра: « $\Omega$ » – объём падающих в процессе роста частиц, « $L_\nu$ » – глубина корреляции на частоте « $V_l$ », « $\alpha$ » – фрактальный параметр, определяющий скорость спадания спектра и кросс-корреляции в область высоких частот.

$\Omega [\text{\AA}^3]$	$L_\nu [\text{\AA}]$	$\alpha$
100.000	200.000	0.50
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
20.000	10.000	0.10
2000.000	1000.000	1.00

Рисунок 207. Ростовые параметры

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

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

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

$$PSD_{up}(\nu) = PSD_{low}(\nu) e^{-b(\nu)z} + \Omega \frac{1 - e^{-b(\nu)z}}{e^{-b(\nu)z}}, \text{ где } b(\nu) = \sum_{n=1}^4 a_n \nu^n$$

Модель содержит пять параметров: « $\Omega$ » – объём падающих в процессе роста частиц, « $a_1$ », « $a_2$ », « $a_3$ », « $a_4$ » – ростовые коэффициенты.

$\Omega [\text{\AA}^3]$	$a_1$	$a_2 [\text{nm}]$	$a_3 [\text{nm}^2]$	$a_4 [\text{nm}^3]$
100.000	0.600	2.000	6.000	20.000
<input type="checkbox"/> fit				
20.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2000.000	10.000	90.000	900.000	900.000

Рисунок 208. Ростовые параметры

## 5.6 Внутрислоевые частицы

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

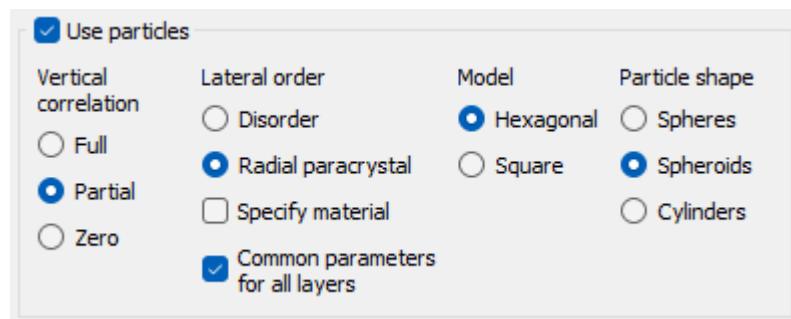


Рисунок 209. Блок «Use particles»

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

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

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

---

**DWBA approximation**  
**radial paracrystal, hexagonal lattice**  
**partial vertical correlation**

---

Рисунок 210. Информация о выбранной модели частиц в шапке таблицы

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

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



Рисунок 211. Управление слоем частиц

### 5.6.1.1 Параметры частиц

Материал частицы задаётся так же, как и материал слоя.

Al	Al	$\rho_0$ [g/cm <sup>3</sup> ]
1.00	1.00	2.699
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
0.00	0.00	2.500
0.00	0.00	2.700

Рисунок 212. Материал частиц

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

R [Å]	H [Å]
10.000	20.000
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
0.000	0.000
20.000	20.000

Рисунок 213. Размеры частиц

### 5.6.1.2 Параметры распределения

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

r <sub>0</sub> [Å]
100.000
<input type="checkbox"/> fit
10.000
200.000

Рисунок 214. Среднее расстояние между частицами

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

r [Å]	$\delta r$ [Å]	D [ $\mu\text{m}$ ]
100.000	5.000	500.000
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
10.000	0.500	0.010
200.000	90.000	900.000

Рисунок 215. Параметры решётки

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

$\Delta$ [Å]
5.000
<input type="checkbox"/> fit
0.000
50.000

Рисунок 216. Случайный сдвиг частиц в слое относительно нижележащего слоя

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

$z_o$ [Å]	$\delta z_o$ [Å]
0.000	0.000
<input type="checkbox"/> fit	<input type="checkbox"/> fit
-10.000	0.000
10.000	5.000

Рисунок 217. Вертикальное расположение частиц в слое

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

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

## 6 Расчёт кривых и загрузка экспериментальных данных

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

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

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

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

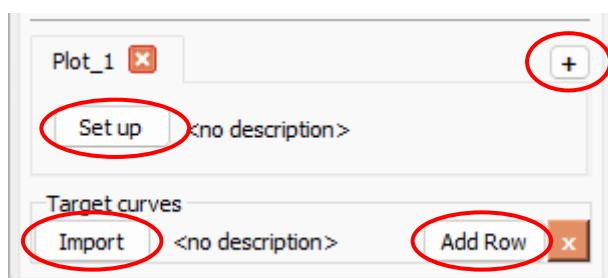


Рисунок 218. Добавление новой кривой

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

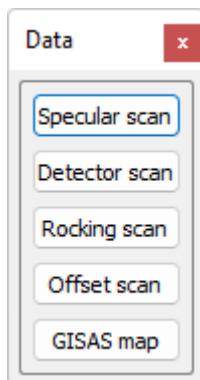


Рисунок 219. Выбор типа измерения

## 6.1 Specular scan

### 6.1.1 Независимая кривая

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

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

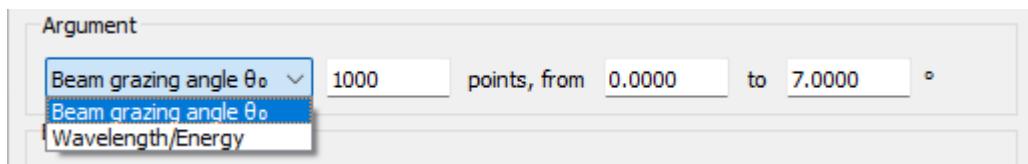


Рисунок 220. Блок «[Argument](#)»

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

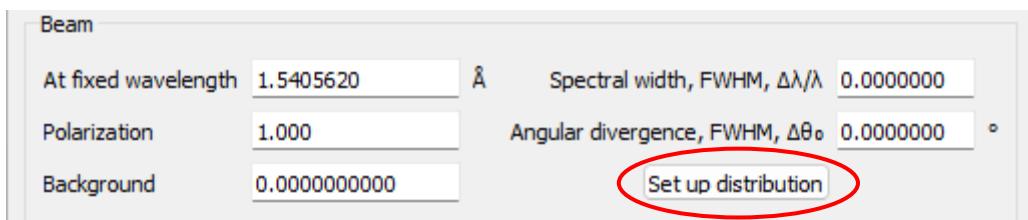


Рисунок 221. Блок «[Beam](#)» и настройка распределения

Откроется отдельное окно с графиками распределения интенсивности излучения по длине волны или углу. Опции здесь следующие:

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

«[Distribution](#)» – форма распределения.

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

«[Coverage](#)» – указать ширину области, в пределах которой будут выбраны точки.

«[Number of samples](#)» – сколько значений угла/длины волны брать для расчёта.

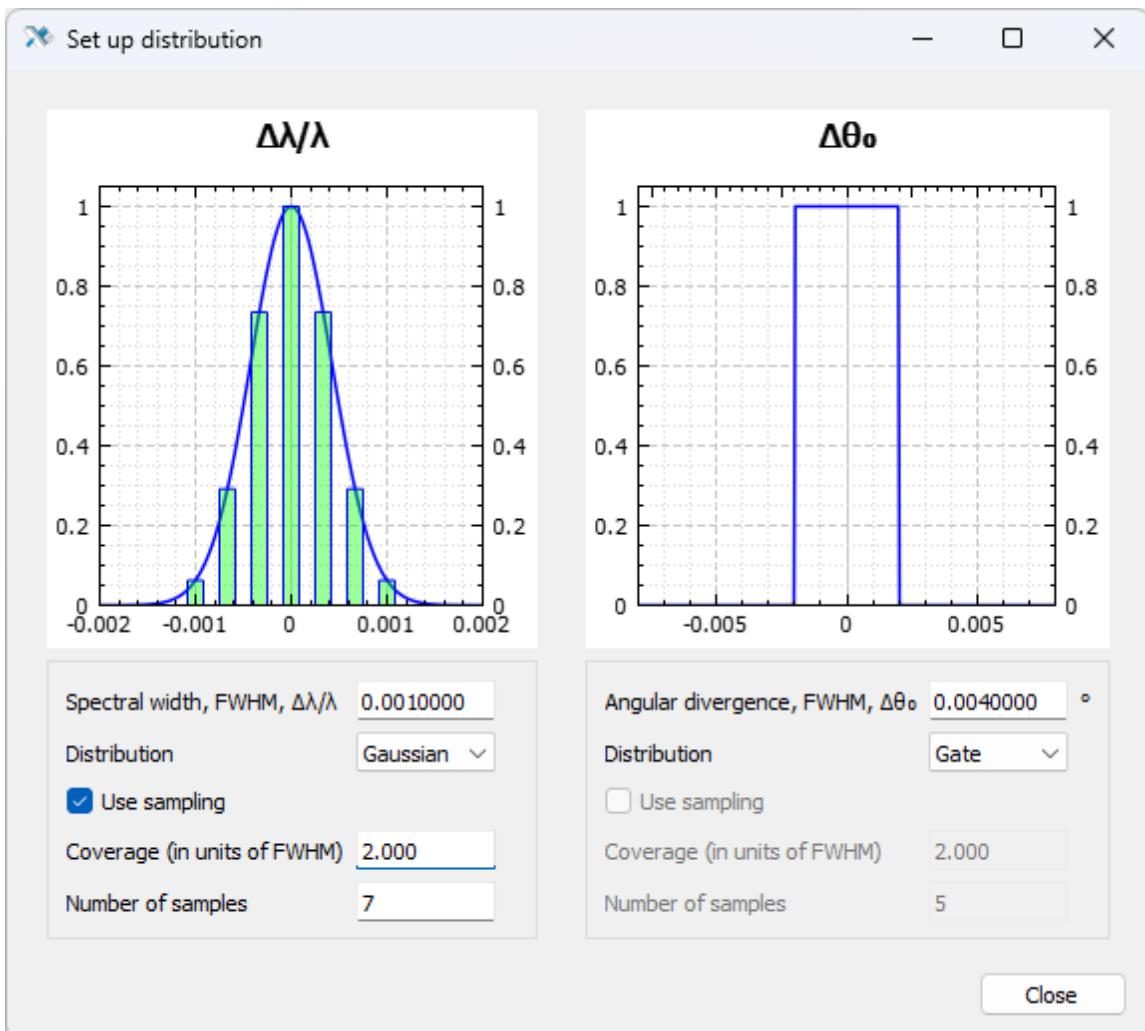


Рисунок 222. Окно углового и спектрального распределения интенсивности падающего пучка

Если опция «**Use sampling**» выключена или недоступна, то расходимость учитывается более простым образом: «чистая» кривая заменяется свёрткой с соответствующим распределением. При этом спектральное распределение всё равно влияет на угловую кривую, а угловое распределение – на спектральную кривую. Делается это в соответствии со следующим соображением: при наличии углового уширения применяется спектральное уширение, которое

$$\text{даёт такое же распределение волнового вектора } k = \frac{2\pi}{\lambda} \sin(\theta + \delta\theta) = \frac{2\pi}{\lambda - \delta\lambda} \sin \theta .$$

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

### 6.1.2 Экспериментальная кривая

Структура окна экспериментальной кривой подробно рассматривается в главе [Пользовательский интерфейс](#). Окно состоит из блоков [«Measurement»](#), [«Argument»](#), [«Value»](#), [«Beam»](#), [«Detector»](#), [«Footprint and distortion»](#) и [«Нижнего блока»](#) с кнопками загрузки и выгрузки данных.

Процесс загрузки данных описан в разделе «[Import](#)» главы «[Экспорт и импорт данных](#)». Формат данных описан [в соответствующем разделе](#).

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

## 6.2 Detector scan

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

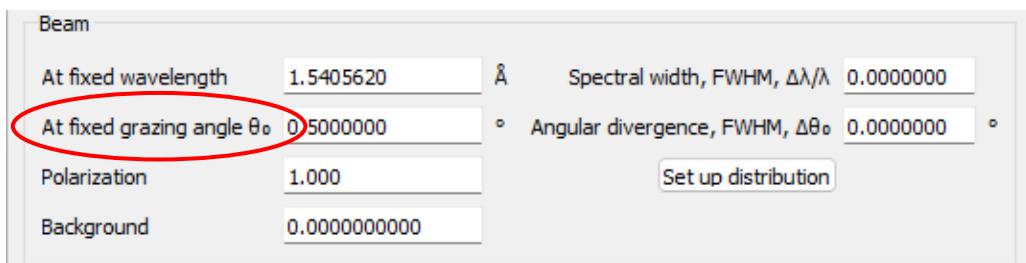


Рисунок 223. Фиксированный угол скольжения

## 6.3 Rocking scan

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

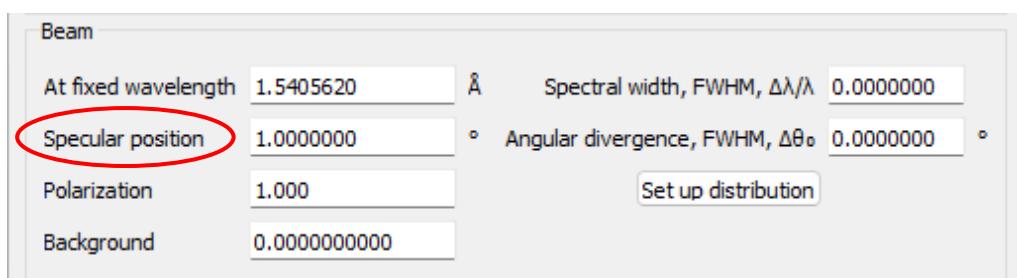


Рисунок 224. Угол зеркального положения

## 6.4 Offset scan

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

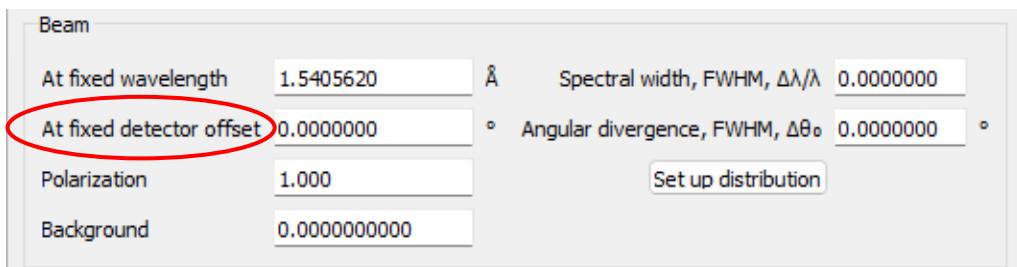


Рисунок 225. Отстройка от зеркального направления

## 6.5 GISAS map

### 6.5.1 Независимая кривая

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

Данные на детекторе двумерные, но угол скольжения пучка задаётся только для полярной координаты  $\theta_0$ . Азимутальной координаты пучка  $\phi_0$  нет, она считается равной нулю. Но угловая расходимость  $\Delta\phi_0$  в азимутальной плоскости может быть задана.

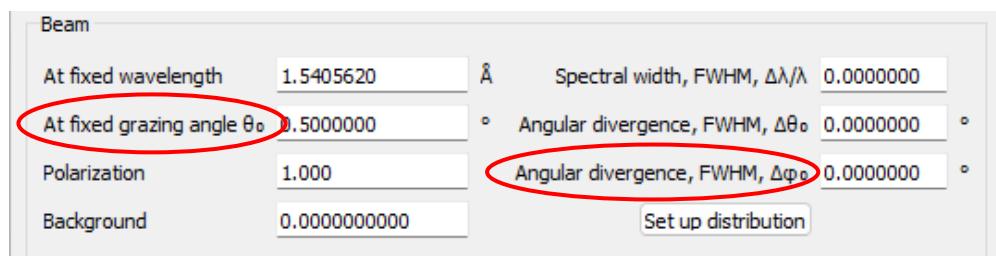


Рисунок 226. Блок «Beam»

### 6.5.2 Экспериментальная кривая

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

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

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

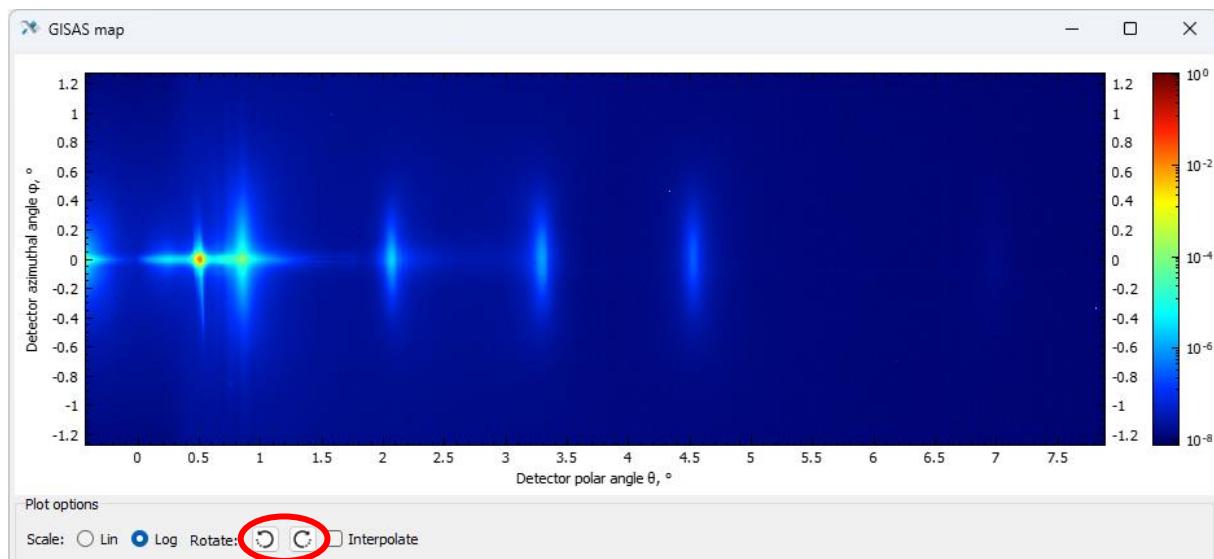


Рисунок 227. Настройка ориентации двумерных данных

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



Рисунок 228. Блок «Argument»

## 6.6 Визуализация результатов расчёта

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

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

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

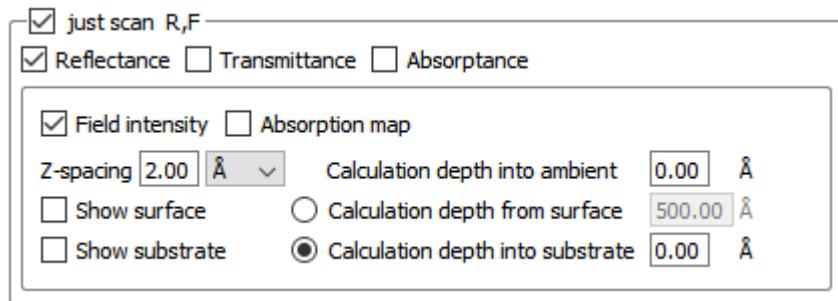


Рисунок 229. Настройки «независимого» зеркального скана

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

## 7 Оптимизация и подгонка

Автоматическое или как минимум автоматизированное нахождение подходящих параметров структуры – одно из основных требований к программам, подобным Multifitting. Имеет смысл выделить два класса задач, встающих перед исследователями и технологами, для которых требуется эта функциональность.

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

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

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

### 7.1 Выбор целевых кривых

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

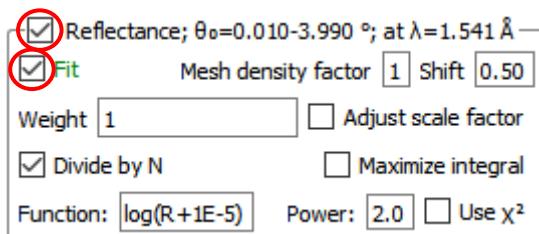


Рисунок 230. Участие кривой в подгонке

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

Прежде всего следует обратить внимание на вид функции невязки кривой. Поля «Function» и «Power» задают вид пользовательской функции невязки, которая устроена так:

$$residual = \sum_i |f(calc\_value_i) - f(meas\_value_i)|^{power}$$

использовать функцию  $residual = \frac{beam\_counts\_per\_s}{N-p} \sum_{i=1}^N \left( \frac{calc\_value_i - meas\_value_i}{calc\_value_i} \right)^2$

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

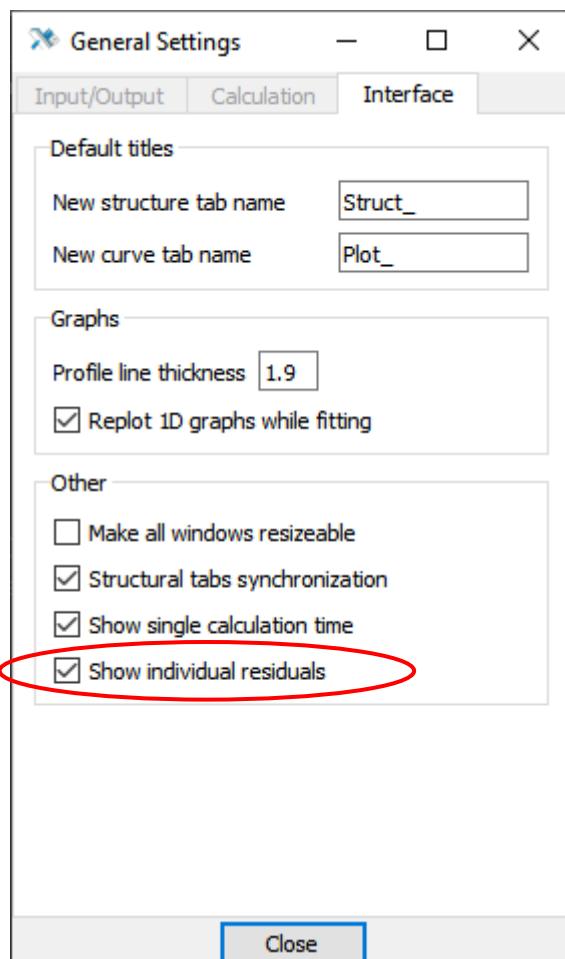


Рисунок 231. Вкладка «Interface»

Тогда в консоли выводятся невязка каждой отдельной кривой и суммарная невязка.

```

PowerShell 7
-----
Calculation... 0.016012 seconds
-----
struct 0      curve 0      residual    0.813042
struct 0      curve 1      residual    0.677707
common residual ..... 1.49075
-----
```

Рисунок 232. Невязки: суммарная и по каждой кривой

«**Adjust scale factor**» позволяет варьировать нормировочный «**Factor**» целевой кривой. Это может потребоваться только если экспериментальная кривая не нормирована, в остальных случаях подгонять нормировку не нужно!

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

## 7.2 Пареметры структуры

### 7.2.1 Включение параметра

Подгонка параметров включается и выключается в главной таблице структуры. Каждый параметр под полем с текущим значением имеет флажок «**fit**». Включение добавляет параметр в подгоночный список и делает редактируемыми поля для выставления верхнего и нижнего предела.



Рисунок 233. Включение подгонки и пределы варьирования

Параметр не будет подгоняться, если он является зависимым. В этом случае его шапка будет не голубая, а красная или жёлтая.

### 7.2.2 Регулярная апериодика

В случае регулярной апериодики подгонка всех параметров, кроме толщин, может быть включена и выключена только для всех слоёв того же типа одновременно. Толщины слоёв можно подгонять как вместе, так и по отдельности. Включение «**fit**» из основной таблицы приведёт к

включению подгонки для всех слоёв, что можно увидеть, открыв [таблицу слоёв регулярной апериодики](#).

Regular aperiodic (2 - 3)					
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	Be	20.0000	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0000	1.000 [r.u.]
2	Mo	20.0000	<input type="checkbox"/>	0.0000	1.000 [r.u.]
3	Be	20.0000	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0000	1.000 [r.u.]
4	Mo	20.0000	<input type="checkbox"/>	0.0000	1.000 [r.u.]
5	Be	20.0000	<input checked="" type="checkbox"/>	0.0000	1.000 [r.u.]
6	Mo	20.0000	<input type="checkbox"/>	0.0000	1.000 [r.u.]

Рисунок 234. Подгонка слоёв регулярной апериодики

«Fit z» в этой таблице включает подгонку для отдельных слоёв. Если при включении зажать «Shift», то будет включена подгонка сразу всех слоёв.

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

### 7.2.3 Связанные параметры

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

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

## 7.3 Настройка алгоритма

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

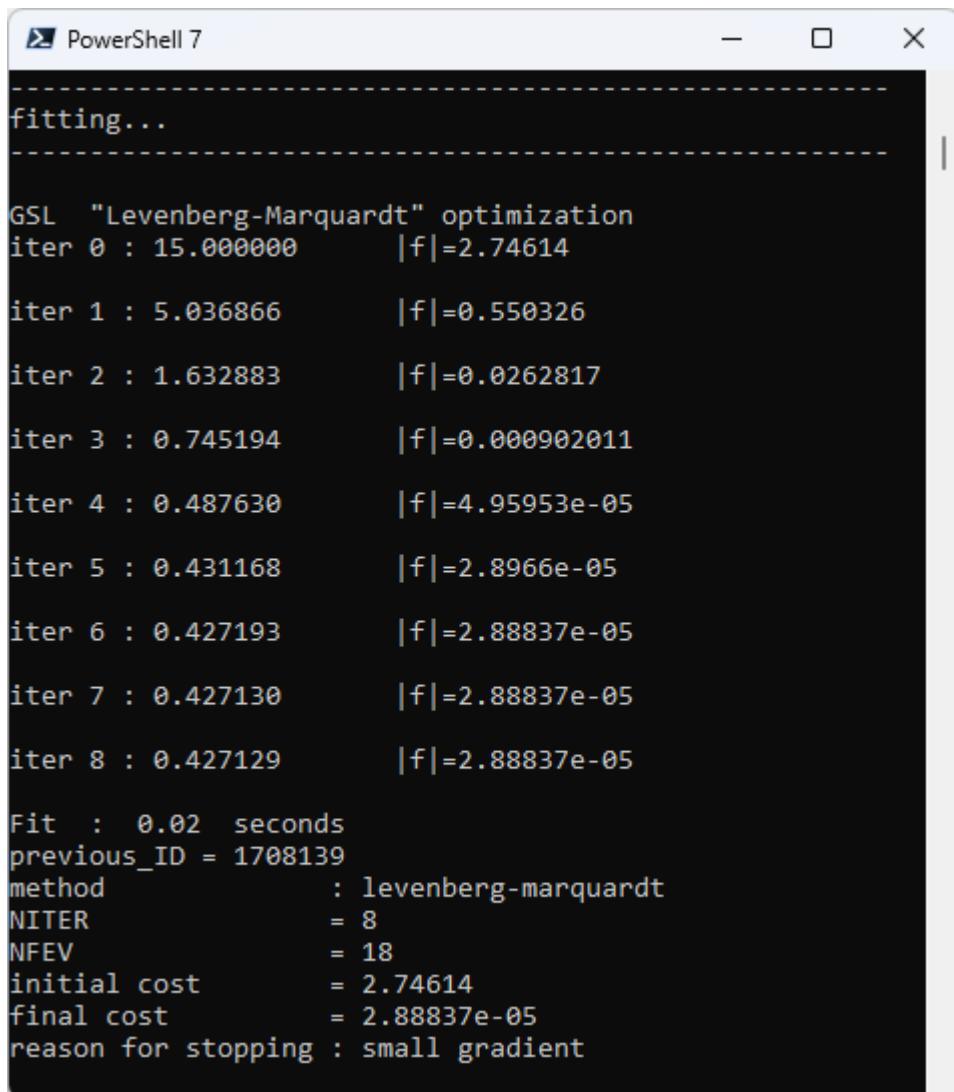
Для алгоритмов группы GSL параметр «**Number of iterations**» устанавливает максимальное количество итераций, которое может быть достигнуто, если не будет выполнен критерий сходимости. Для алгоритмов группы SwarmOps это число равно количеству вычислений невязки.

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

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

## 7.4 Запуск

Чтобы запустить подгонку, нужно нажать «**Ctrl+Shift+F**» или в меню «**Calculate**» главного окна выбрать «**Start fitting**». В консоли можно следить за прогрессом и результатом подгонки.



```
PowerShell 7
-----
fitting...
-----
GSL "Levenberg-Marquardt" optimization
iter 0 : 15.000000      |f|=2.74614
iter 1 : 5.036866      |f|=0.550326
iter 2 : 1.632883      |f|=0.0262817
iter 3 : 0.745194      |f|=0.000902011
iter 4 : 0.487630      |f|=4.95953e-05
iter 5 : 0.431168      |f|=2.8966e-05
iter 6 : 0.427193      |f|=2.88837e-05
iter 7 : 0.427130      |f|=2.88837e-05
iter 8 : 0.427129      |f|=2.88837e-05

Fit : 0.02 seconds
previous_ID = 1708139
method          : levenberg-marquardt
NITER          = 8
NFEV           = 18
initial cost    = 2.74614
final cost      = 2.88837e-05
reason for stopping : small gradient
```

Рисунок 235. Вывод информации в процессе подгонки

Процесс можно прервать, нажав «Alt+.» или в меню «Calculate» главного окна выбрать «Abort calculation».

## 7.5      После завершения

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

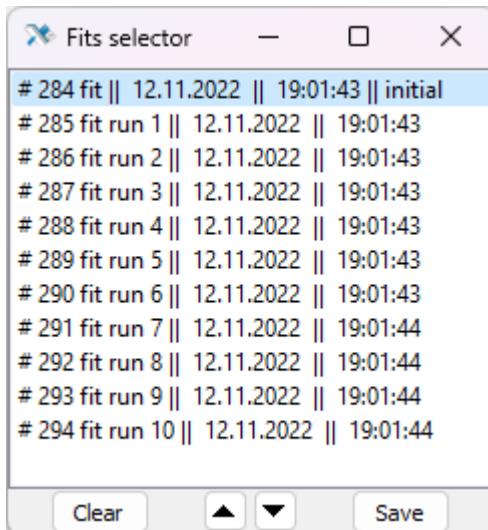


Рисунок 236. Набор подгонок в окне «**Fits selector**»

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

A screenshot of a text editor window titled 'fits.txt - AkelPad'. The window displays a table of data with three columns: 'run', 'residual', and 'Diffuseness, s'. The data shows 11 rows, each corresponding to a different run from 0 to 10. The 'residual' column contains values like 2.888e-05, and the 'Diffuseness' column contains values like 0.4271. The table is preceded by a header line: '< 12.11.2022 | 18:24:34 >'.

run	residual	Diffuseness, s
0	2.888e-05	0.4271
1	2.888e-05	0.4271
2	2.888e-05	0.4271
3	2.888e-05	0.4271
4	2.888e-05	0.4272
5	2.888e-05	0.4272
6	2.888e-05	0.4271
7	2.888e-05	0.4271
8	2.888e-05	0.4271
9	2.888e-05	0.4271
10	2.888e-05	0.4271

Рисунок 237. Результаты прогонов в файле «**fits.txt**»

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

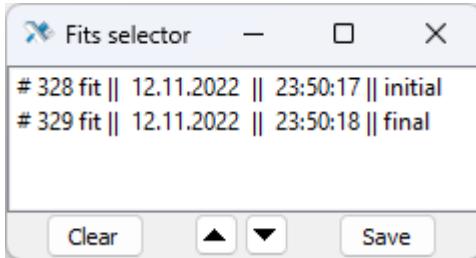


Рисунок 238. Набор подгонок в окне «Fits selector»

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

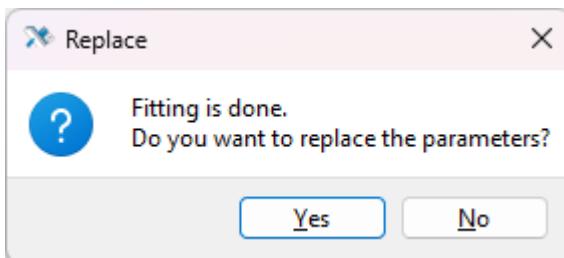


Рисунок 239. Диалог по окончании подгонки

## 7.6 Доверительный интервал

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

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

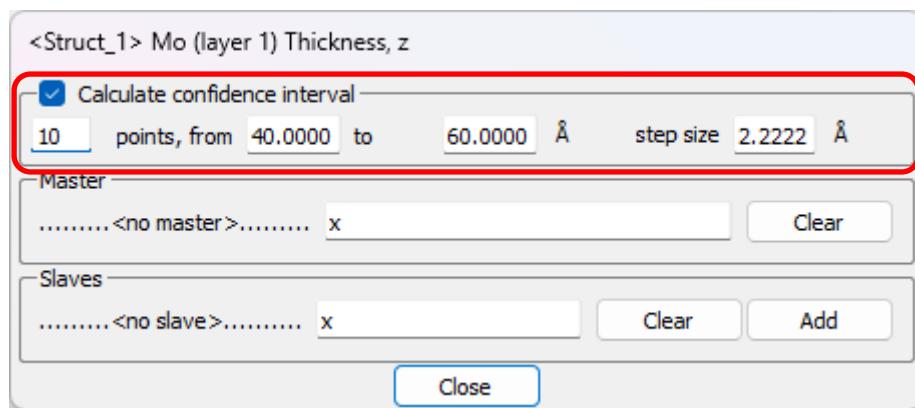


Рисунок 240. Настройка сетки для доверительного интервала

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

	$z [\text{\AA}]$
	46.2000
	<input type="checkbox"/> fit
	10.0000
	70.0000

	$z [\text{\AA}]$
	46.2000
	<input type="checkbox"/> fit
	10.0000
	70.0000

Рисунок 241. Цветовое обозначение параметра

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

Старт вычислений происходит при нажатии «**Ctrl+Shift+A**» или если в меню «**Calculate**» главного окна выбрать «**Calculate confidence intervals**». Процесс можно прервать, нажав «**Alt+.**», или в меню «**Calculate**» главного окна выбрав «**Abort calculation**».

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

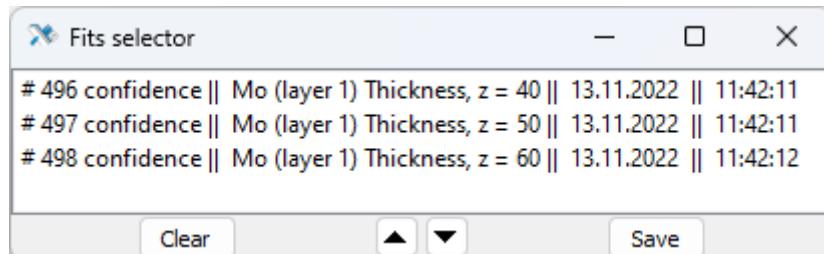


Рисунок 242. Подгонки при фиксированных значениях оцениваемого параметра

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

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

```

confidence.txt - AkelPad
File Edit View Options Help
< 13.11.2022 | 11:42:11 >
-----
Mo (layer 1) Thickness, z
-----
value      residual
40          1.20851e+00
50          1.56976e-14
60          1.10169e+00

```

9:24 Modified Ins Unix 1252 (ANSI - Latin I)

Рисунок 243. Наименьшая невязка для каждого значения параметра в файле «confidence.txt»

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

```

confidence.txt - AkelPad
File Edit View Options Help
< 13.11.2022 | 12:58:22 >
-----
Mo (layer 1) Thickness, z
-----
value      residual
40          1.20671e+00  ( 1.207e+00,   1.207e+00,   1.804e+00)
50          1.56966e-14  ( 1.570e-14,   1.570e-14,   1.570e-14)
60          1.08743e+00  ( 1.087e+00,   1.913e+00,   1.913e+00)

```

5:24 Ins Unix 1252 (ANSI - Latin I)

Рисунок 244. Наименьшая невязка и весь набор при рандомизированных стартах в файле «confidence.txt»

## 8 Экспорт и импорт данных

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

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

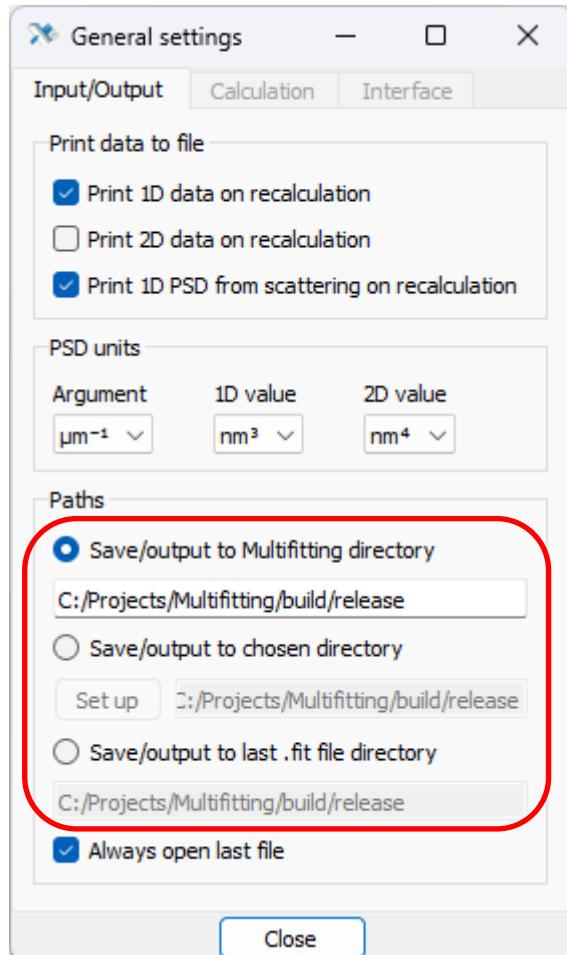


Рисунок 245. Директория для экспорта файлов

### 8.1 Экспериментальные кривые

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

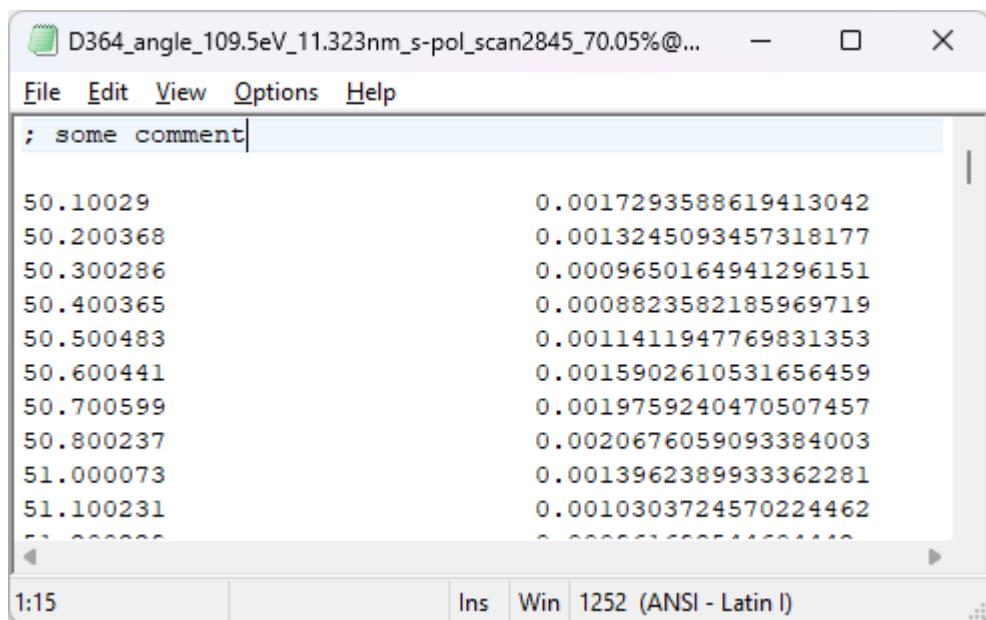
## 8.1.1 Формат данных

### 8.1.1.1 1D данные

Формат одномерных данных: два столбца:

- аргумент
- значение

Если столбцов больше двух, то последующие просто игнорируются.



The screenshot shows a Windows Notepad window titled 'D364\_angle\_109.5eV\_11.323nm\_s-pol\_scan2845\_70.05%@...'. The menu bar includes File, Edit, View, Options, and Help. The main text area contains a single-line comment ': some comment' followed by a list of data pairs. The data is as follows:

Argument	Value
50.10029	0.0017293588619413042
50.200368	0.0013245093457318177
50.300286	0.0009650164941296151
50.400365	0.0008823582185969719
50.500483	0.0011411947769831353
50.600441	0.0015902610531656459
50.700599	0.0019759240470507457
50.800237	0.0020676059093384003
51.000073	0.0013962389933362281
51.100231	0.0010303724570224462
51.200000	0.000515005144501110

Рисунок 246. Пример файла с данными

### 8.1.1.2 2D данные

Двумерные данные для GISAS могут быть прочитаны в двух форматах.

Первый – поточечный. Файл содержит три колонки:

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

```

row column SG201_data.h5 AS_MEASURED DATA
0 0 0.00366541
0 1 0.00398019
0 2 0.00436849
0 3 0.00435284
0 4 0.00366731
0 5 0.00423885
0 6 0.00451493
0 7 0.00352988
0 8 0.00443053
0 9 0.00366541

```

Рисунок 247. Пример файла с двумерными GISAS данными, одна строка – один пиксель

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

```

;; some text here

4.198560000000e-03 3.933260000000e-03 3.934980000000e-03 3.778
3.614070000000e-03 3.889760000000e-03 3.680650000000e-03 3.931
3.856290000000e-03 4.158160000000e-03 4.045260000000e-03 3.471
4.073910000000e-03 3.607050000000e-03 3.810310000000e-03 3.626
3.896280000000e-03 3.753900000000e-03 3.929260000000e-03 3.973
3.694840000000e-03 3.864940000000e-03 4.321400000000e-03 4.120
3.967750000000e-03 4.020850000000e-03 4.278890000000e-03 3.621
3.999700000000e-03 4.255630000000e-03 4.841370000000e-03 4.263
4.208430000000e-03 3.962730000000e-03 4.311690000000e-03 4.026
4.558370000000e-03 4.367230000000e-03 3.980040000000e-03 3.966
3.962070000000e-03 4.181630000000e-03 3.796940000000e-03 3.680
4.402870000000e-03 4.383520000000e-03 4.027160000000e-03 3.683
3.978680000000e-03 4.693550000000e-03 4.820270000000e-03 3.821

```

Рисунок 248. Пример файла с двумерными GISAS данными в виде матрицы

### 8.1.2 Импорт

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



Рисунок 249. Окно экспериментальной рефлектометрической кривой

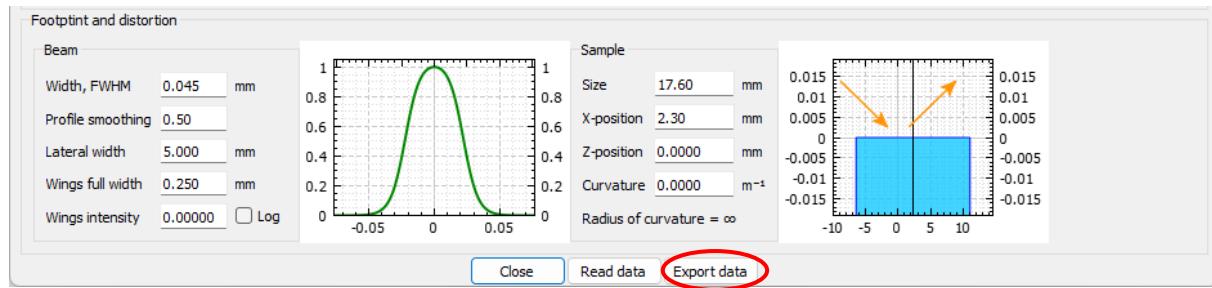
Самый простой и удобный способ – перетащить файл в окно кривой, он при этом будет считан автоматически.

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**».

### 8.1.3 Экспорт ранее загруженных данных

Кнопка «**Export data**» внизу окна позволяет сохранить в файл загруженную ранее кривую. Исходные 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 250. Окно экспериментальной кривой

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

### 8.2 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 пересчёт, нажав «**Ctrl+Shift+C**».

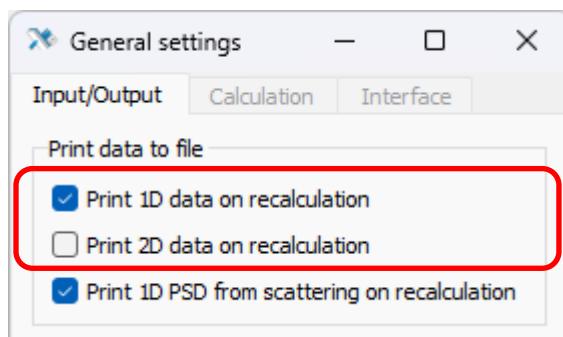


Рисунок 251. Автоматический вывод в файл

При любых настройках можно сделать разовый экспорт, выбрав пункт меню «**File**» главного окна. При этом все кривые будут перевычислены.

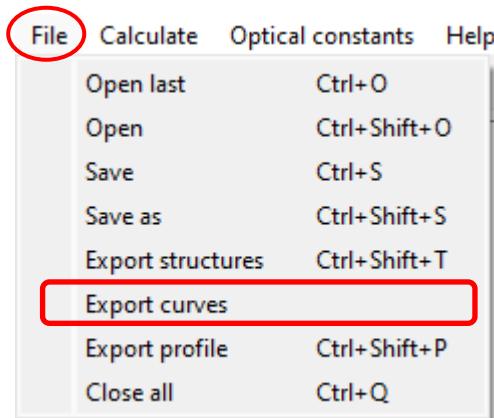


Рисунок 252. Главное меню «File»

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:

```
; < 31.10.2022 | 09:49:06 >
; Specular scan

; polarization = 1.000
; wavelength = 1.540562 Å

; 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 253. Вывод в файл рефлектометрического расчёта

```
; < 31.10.2022 | 09:49:06 >
; Rocking scan

; polarization = 1.000
; wavelength = 1.540562 Å
; 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
0.0000000000000000      0.000000e+00      0.000000e+00
0.0020020020020020      0.000000e+00      0.000000e+00
0.0040040040040040      0.000000e+00      0.000000e+00
0.0060060060060060      0.000000e+00      0.000000e+00
```

Рисунок 254. Вывод в файл кривой качания

```
; < 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 Å
; 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-
5.021670e-04    5.221251e-04    5.060050e-04    4.954209e-04    4.847271e-
```

Рисунок 255. 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 Å
; 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 256. Вывод в файл GISAS

Для одномерных кривых выводятся значения для каждой из задействованных поляризаций и суммарный результат (`R_mixed`, `R_s`, `R_p`). Рефлектометрическая кривая также содержит фазу для отражённой волны для задействованной поляризации (`Phase_R_s`, `Phase_R_p`) в диапазоне (-180°, 180°].

### 8.3 Импорт PSD шероховатости

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

PSD 1D	PSD 2D
$\sigma_e [\text{\AA}]$	$\sigma_e [\text{\AA}]$
3.8707	0.0000
rf 1D	rf 2D
0.800	1.000

Рисунок 257. Кнопка загрузки PSD шероховатости

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

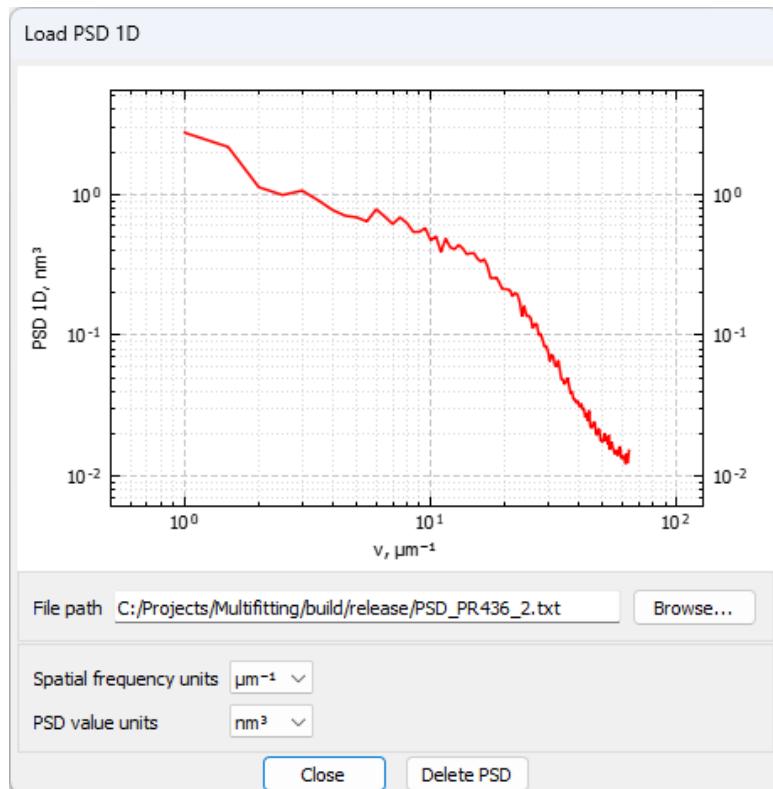


Рисунок 258. Загрузка одномерной PSD

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

## 8.4 Структура

### 8.4.1 Экспорт всей структуры

Информацию обо всей структуре можно сохранить в текстовом файле в человекочитаемом виде. Автоматически загрузить этот файл обратно в Multifitting нельзя; файл предназначен только 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».

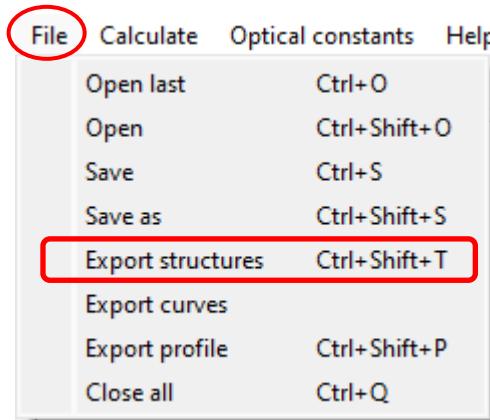


Рисунок 259. Экспорт структуры в главном меню «[File](#)»

Результат сохраняется 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
< 11.04.2023 | 11:31:32 >
< Multifitting v.2.0.0 >
< legend: >
    N      - number of elementary cells
    d      - period or thickness
    s_d   - root-mean-square interlayer thickness (sigma diffuse)
    rho   - material density, absolute or relative
    A      - angstroms
    r.u.  - relative units

NOTE: diffuse interlayer composition, roughness and particles are not shown here
-----
1 WO2      : d= 6.000 Å      s_d=2.500 Å      rho=1.100 r.u.
2 WSi2      4.000            0.000            1.100 r.u.
3 Si        33.552          2.512            0.530 r.u.
4 Periodic Si/W   N=29
    4.1     W      : d=13.889 Å    s_d=1.715 Å    rho=0.910 r.u.
    4.2     Si      37.552          2.512            1.000 r.u.
5 Substrate Si      s_d=3.000 Å      rho=1.000 r.u.

1:26           Ins Unix 1252 (ANSI - Latin I)

```

Рисунок 260. Основные параметры структуры в текстовом файле

## 8.4.2 Апериодика

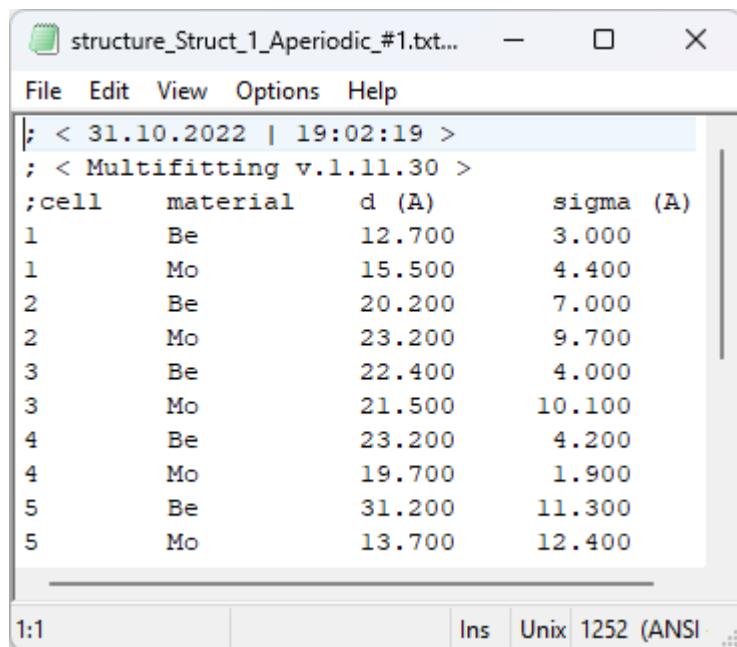
Апериодические стеки сохраняются в файл структуры на общих основаниях. Однако апериодику можно наполнить значениями, считанными из файла. Для регулярной и общей апериодики это делается немного по-разному.

### 8.4.2.1 Экспорт регулярной апериодики

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

В файл включены следующие колонки значений:

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



	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 261. Параметры слоёв регулярной аperiодики

Файл подобного формата может быть импортирован обратно в Multifitting.

#### 8.4.2.2 Импорт регулярной аperiодики

Создать регулярную аperiодику 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 соответствуют рисунку выше. При этом колонка №4 (**sigma**) является опциональной, т.е. интерфейсы можно не загружать. Первые две колонки играют вспомогательную роль, позволяя проверить данные и не запутаться, но непосредственно информация из них не используется.

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

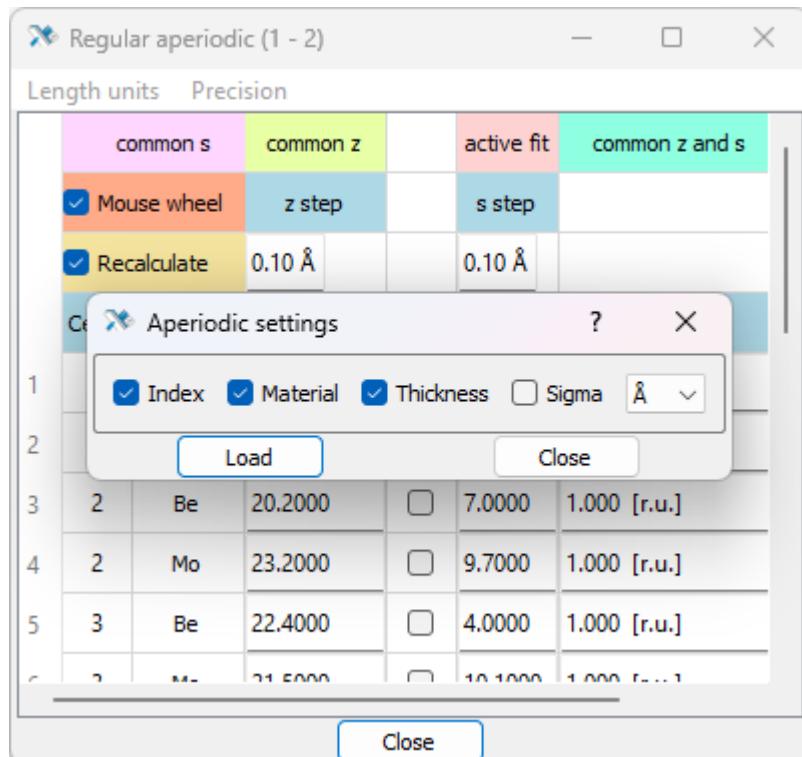


Рисунок 262. Загрузка регулярной аperiодики из файла

Здесь выбираются единицы толщины, в которых будут прочитаны значения в файле, а также выбирается, 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, предупреждение можно проигнорировать, и 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.

#### 8.4.2.3 Импорт общей аperiодики

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

- номер слоя (от поверхности)
- вещества 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.

index	material	thickness	sigma	density
1	Mo	23.4	1.32	0.95
2	Si	43.1	4.94	1
3	Ru	21.3	2.38	0.9
4	Al	120.7	3.52	0.98
5	Si	5.2	5.67	0.87
6	Zr	13.2	3.97	0.99
7	Ni	10.2	1.41	1
8	SiO2	56.2	2.47	1

Рисунок 263. Параметры слоёв общей апериодики

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

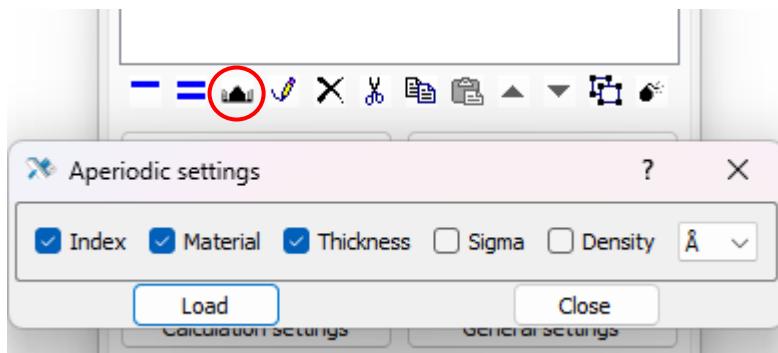


Рисунок 264. Загрузка общей апериодики из файла

## 8.5 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 нажав «[Ctrl+Shift+P](#)»:

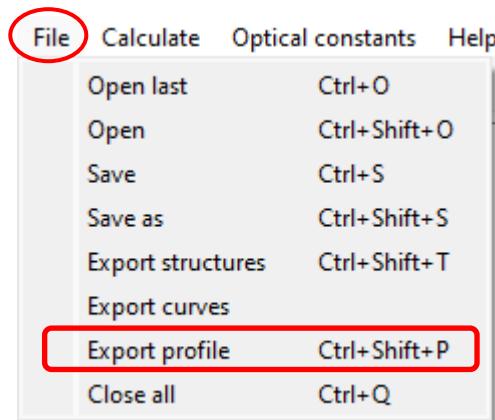


Рисунок 265. Экспорт профиля в главном меню «File»

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\_Sharpened\_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 быть различные, поэтому в качестве аргумента указываются координаты верхней границы слоя.

```

profile_Elements_Sharp_Struct_1.txt - AkelPad
File Edit View Options Help
; < 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

```

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

Рисунок 266. 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](#)».

```

profile_Materials_Discrete_Struct_1.txt - AkelPad
File Edit View Options Help
; < 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 2.021926e-12 7.467464e-08 0.000000e+00

```

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

Рисунок 267. Пример содержимого файла с дискретизированным 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**

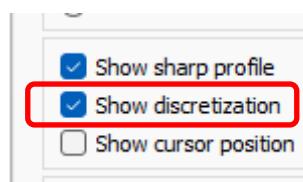
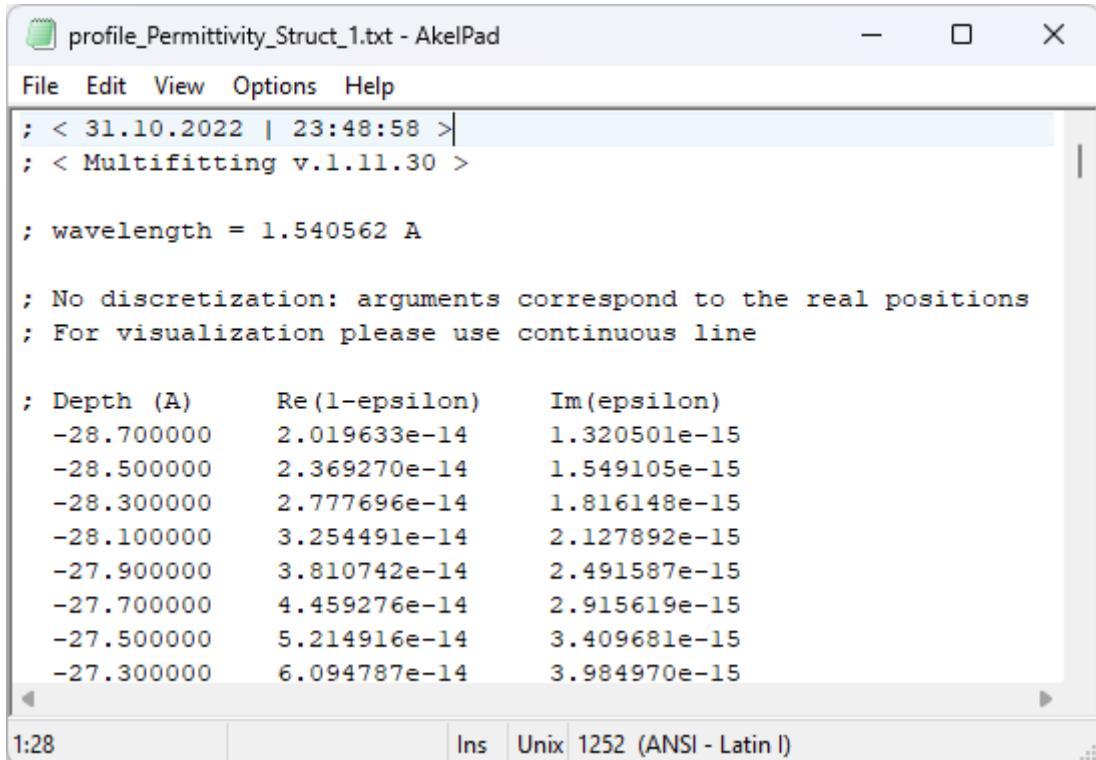


Рисунок 268. Опции представления профиля в окне «[Profile plot](#)»

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 осмыслиенный размер какой-либо особенности профиля. Поскольку шаг постоянный, а профиль предназначен для представления в интерполированном виде, здесь аргумент – это координата центра субслоя.



The screenshot shows a text editor window titled "profile\_Permittivity\_Struct\_1.txt - AkePad". The menu bar includes File, Edit, View, Options, and Help. The main content area displays the following text:

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

; wavelength = 1.540562 Å

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

; Depth (Å)      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
```

The status bar at the bottom shows "1:28", "Ins", "Unix", and "1252 (ANSI - Latin I)".

Рисунок 269. Пример содержимого файла с «непрерывным» профилем диэлектрической проницаемости

Для экспорта непрерывного профиля необходимо, чтобы галочка «**Show discretization**» в опциях «**Profile plot**» была выключена.

## 9 Оптические константы материалов

Расчёт отражения и рассеяния излучения требует знания диэлектрической проницаемости веществ. Она зависит от длины волны или энергии фотона, поэтому для каждого участующего 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 могут содержать комментарии. Стока с комментарием может начинаться с любого символа, кроме цифры (пробел или табуляция не считаются таким символом). 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 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.

Если файл содержит только одну спектральную точку, то она применяется для всех  $\lambda \in (0, \infty)$ .

```
; 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 270. 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]
Ag20	=Ag20_llnl_xro [.12398425-423.15444]
Ag20_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 271. Содержимое файла «*AAACATALOG.TXT*»

## 9.2 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. Показатель преломления вычисляется следующим образом:

$$n = 1 - \delta - i\beta = 1 - \frac{r_0}{2\pi} \lambda^2 \sum_i N_i f_i(\lambda)$$

где  $r_0$  – классический радиус электрона,  $\lambda$  – длина волны,  $N_i$  – атомная концентрация, а  $f_i$  – атомный фактор рассеяния  $i$ -го элемента.

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

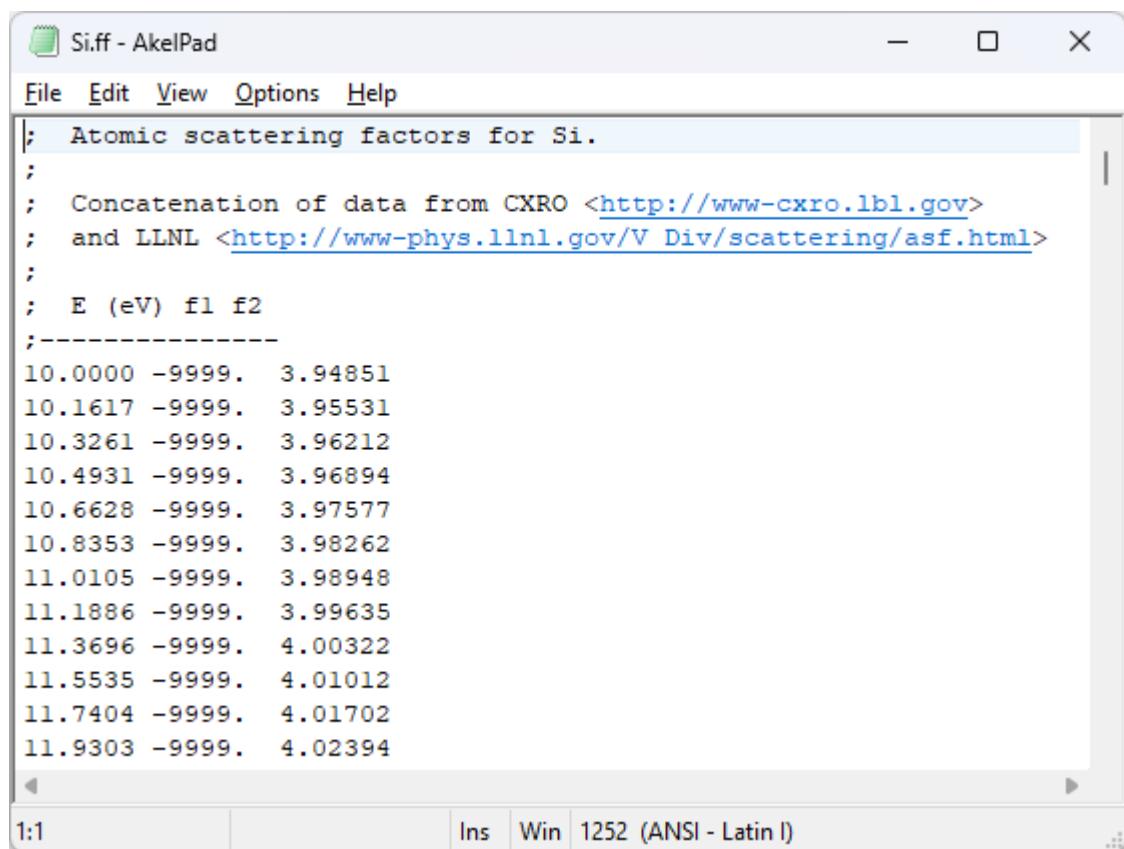
В шапке файла обычно находится комментарий с информацией, обычно это ссылка на источник данных.

Данные расположены в трёх колонках:

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

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



The screenshot shows a window titled "Si.ff - AkelPad". The menu bar includes "File", "Edit", "View", "Options", and "Help". The main text area contains the following content:

```
; 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
```

The status bar at the bottom shows "1:1", "Ins", "Win", and "1252 (ANSI - Latin I)".

Рисунок 272. Содержимое файла «**Si .ff**»

## 10 История версий

- Multifitting v.1.9.2 – публикация (06.07.2019)
- Multifitting v.1.10.0 (19.10.2019)
  - 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 FWHM равной 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.
  - Добавлено 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**».
  - Добавлен 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**».
  - Исправлены различные ошибки.
- Multifitting v.1.10.2 (21.02.2020)
  - В базу оптических констант добавлены файлы «**Sc\_larrauquert.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.
  - Добавлено устранение муаровых искажений расчётной кривой, возникающих, когда период осцилляций отражения от толстых структур почти кратен шагу экспериментальной кривой.

- Добавлено автоматическое вычисление спектральной ширины пика отражения при вычислении соответствующей кривой.
- Исправлены различные ошибки, в том числе ошибка фитинга к отмасштабированной экспериментальной кривой.
- Multifitting v.2.0.0 (13.04.2023)
  - Переработан пользовательский интерфейс.
  - Добавлена возможность моделирования одномерного и двумерного рассеяния на шероховатостях и частицах.
  - Добавлена визуализация распределения интенсивности поля в структуре.
  - Множество мелких изменений и исправлений.

## **11 Список сокращений**

GISAS – Grazing Incidence Small-Angle Scattering / малоугловое рассеяние при скользящем падении

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

## 12 Список цитируемой литературы

1. D. Windt, "IMD—Software for modeling the optical properties of multilayer films," *Comput. Phys.* **12**(4), 360 (1998).
2. M. Svechnikov, "Multifitting : software for the reflectometric reconstruction of multilayer nanofilms," *J. Appl. Crystallogr.* **53**(1), 244–252 (2020).
3. M. Svechnikov, D. Pariev, A. Nechay, N. Salashchenko, N. Chkhalo, Y. Vainer, and D. Gaman, "Extended model for the reconstruction of periodic multilayers from extreme ultraviolet and X-ray reflectivity data," *J. Appl. Crystallogr.* **50**(5), 1428–1440 (2017).
4. G. Palasantzas, "Roughness spectrum and surface width of self-affine fractal surfaces via the K-correlation model," *Phys. Rev. B* **48**(19), 14472–14478 (1993).
5. P. Siffalovic, E. Majkova, and M. Jergel, "Gisaxs - probe of buried interfaces in multi-layered thin films," in *X-Ray Scattering*, Christopher M. Bauwens, ed. (Nova Science Publishers, 2011), pp. 1–54.
6. S. K. Sinha, E. B. Sirota, and S. Garoff, "X-ray and neutron scattering from rough surfaces," *Phys. Rev. B* **38**(4), 2297–2311 (1988).
7. D. G. Stearns, "Stochastic model for thin film growth and erosion," *Appl. Phys. Lett.* **62**(15), 1745–1747 (1993).
8. D. G. Stearns and E. M. Gullikson, "Nonspecular scattering from extreme ultraviolet multilayer coatings," *Phys. B Condens. Matter* **283**(1–3), 84–91 (2000).
9. V. E. Asadchikov, I. N. Bukreeva, A. Duparre, I. V. Kozhevnikov, Y. S. Krivonosov, C. Morawe, M. V. Pyatakhin, J. Steinert, A. V. Vinogradov, and E. Ziegler, "X-ray study of surfaces and interfaces," in *Proceedings of SPIE 4449, Optical Metrology Roadmap for the Semiconductor, Optical, and Data Storage Industries II* (2001), **4449**, pp. 253–264.
10. А. В. Виноградов, И. А. Брытов, А. Я. Грудский, М. Т. Коган, И. В. Кожевников, and В. А. Слемзин, *Зеркальная Рентгеновская Оптика* (Машиностроение, 1989).