# Модели и методы

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

## Поле в слоистой структуре

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

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

1. Отражение электромагнитной волны от многослойной структуры

*x*

*y*

*z*



*Слой j*



*Подложка*



*Вакуум*



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

Волновое уравнение для поля в кусочно-однородной среде имеет вид

 (14.1.1)

или  (14.1.2)

где                                (14.1.3)

Внутри каждого слоя решением является

 (14.1.4)

В подложке отражённая волна отсутствует:

 (14.1.5)

Граничные условия возьмём следующие: непрерывность *Ey* (выполняется абсолютно всегда) и непрерывность *Hy* (поверхностный ток отсутствует):

 (14.1.6)

где  (14.1.7)

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

 (14.1.8)

Теперь можно ввести «текущие» коэффициенты отражения и прохождения :

 (14.1.9)

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

 (14.1.10)

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

 (14.1.11)

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

 (14.1.12)

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

 (14.1.13)

с использованием «граничных» условий

 (14.1.14)

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

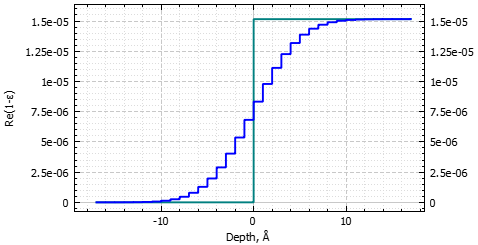
 (14.1.15)

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

## Переходные области на интерфейсах

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

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

1. Разбиение профиля *ε* на тонкие однородные слои

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

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

# Список сокращений

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

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

# 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).