ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, 2003, № 1, с. 23–27

УДК548.732

К ТЕОРИИ ЗЕРКАЛЬНОГО ОТРАЖЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ МНОГОСЛОЙНЫМИ ЗЕРКАЛАМИ. I. УЧЕТ ШЕРОХОВАТОСТЕЙ МЕЖСЛОЙНЫХ ГРАНИЦ В ПРИБЛИЖЕНИЯХ ДЕБАЯ-ВАЛЛЕРА И НЕВО-КРОСЕ

© 2003 г. В. Г. Кон

Российский научный центр "Курчатовский Институт", Москва, Россия
Институт кристаллографии А.В. Шубникова РАН, Москва, Россия

Поступила в редакцию 24.07.2002 г.

Представлен простой и прямой вывод ослабляющих множителей в приближениях Дебая–Валлера (Debye–Waller) и Нево–Кросе (Nevot–Croce), учитывающих наличие шероховатости межслойных границ при расчете отражения рентгеновских лучей методом рекуррентных соотношений. Приближение Дебая-Валлера непосредственно получается методом усреднения фазовых множителей в параметрах отражения и прохождения на одной границе без учета многократных отражений. Приближение Нево–Кросе получается усреднением матричных элементов перехода из слоя в слой. Последующий пересчет параметров отражения и прохождения эффективно учитывает многократные отражения. Однако и данное приближение является последовательным только до членов первой степени по параметру шероховатости σ^2.

ВВЕДЕНИЕ

Явление зеркального отражения света в одномерно-неоднородных средах известно с доисторических времен. Хотя основы физики этого явления в настоящее время изучаются в школе, до сих пор существуют проблемы, решение которых нельзя считать удовлетворительным. Это относится, в том числе, к проблеме зеркального отражения рентгеновских лучей в синтетических многослойных зеркалах при скользящих углах падения. В этом явлении поляризационными свойствами излучения можно пренебречь и рассматривать скалярную монохроматическую волну с частотой ω, а именно, $A(z)\exp(iK\cos\theta - x\omega t)$, где $K = \omega/c$, c – скорость света в вакууме, θ – скользящий угол падения плоской волны на поверхность многослойного зеркала, x – координата вдоль поверхности зеркала в плоскости отражения, z – координата по нормали к поверхности.

Одним из наиболее популярных методов расчета коэффициента отражения рентгеновской волны в многослойных зеркалах является "локальный" подход, основанный на точном решении задачи для одной границы и точных рекуррентных соотношениях при расчете многослойных структур. Применимость локального подхода не ограничена числом слоев, их периодичностью, величиной отражения на одной поверхности, что является несомненным его преимуществом. В качестве стартового приближения рассматривается модель с идеально гладкими поверхностями. При этом прямой и обратный параметры отражения и прохождения плоской волны через одну границу определяются формулами Френеля

$$r_i = \frac{k_{iz} - k_{jz}}{k_{iz} + k_{jz}}, \quad t_i = 1 + r_i, \quad \bar{r}_i = -r_i, \quad \bar{t}_i = 1 + \bar{r}_i, \quad (1)$$

где индексы i и $j = i - 1$ нумеруют слои в направлении отраженного пучка, $k_{iz} = K[\sin^2\theta + \chi_i]^{1/2}$, χ_i – значение средней поляризуемости среды в i-том слое. Принятые выше обозначения означают следующее: r_i – параметр отражения в i-том слое от j-го слоя, $\bar{r}_i$ – параметр отражения от i-го слоя в j-ый слой, t_i – параметр прохождения из i-го слоя в j-ый слой, $\bar{t}_i$ – параметр прохождения в обратном направлении.

Для расчета коэффициента отражения $|R_N|^2$ всей многослойной структурой достаточно использовать рекуррентное соотношение для амплитуды отражения R_i всеми слоями, имеющими индекс меньше i-го, которое впервые было предложено в работе [1]. При произвольных значениях параметров отражения и прохождения его следует записывать в виде [2]:

$$R_i = C_i^2 \frac{r_i + Q_i R_j}{1 - \bar{r}_i R_j}, \quad Q_i = t_i\bar{t}_i - r_i\bar{r}_i, \quad C_i = \exp(ik_{iz}d_i), \quad (2)$$

где d_i – толщина i-го слоя, и амплитуда отражения определена для верхней части каждого слоя. В случае идеально-гладких границ, когда справедливы формулы (1), $Q_i = 1$. Считая подложку ($i = 0$) до-

статочно толстой, полагают $R_0 = 0$, а толщину верхнего слоя (воздух) с $i = N$ можно считать произвольной, поскольку она не влияет на коэффициент отражения.

Измеряемые экспериментально коэффициенты отражения от многослойных зеркал имеют практически всегда меньшие значения, чем следует из расчетов по формулам (1), (2). Одной из основных причин этого считается наличие шероховатости межслойных границ. Различные приближенные подходы к анализу этой проблемы привели к выводу, что формулу (2) следует использовать с более точными параметрами отражения и прохождения, которые отличаются от параметров (1) наличием ослабляющих множителей, то есть r_i следует заменить на $r_i f_i^{(r)}$, t_i следует заменить на $t_i f_i^{(t)}$ и аналогично для параметров обратного отражения и прохождения.

В литературе часто используют ослабляющие множители в приближении, приводящем к множителям, аналогичным фактору Дебая–Валлера в теории рассеяния на колеблющихся атомах:

$$f_i^{(r)} = \exp(-2k_{iz}^2\sigma_i^2), \quad \bar{f}_i^{(r)} = \exp(-2k_{jz}^2\sigma_i^2),$$
$$f_i^{(t)} = \bar{f}_i^{(t)} = \exp(-[k_{iz} - k_{jz}]^2\sigma_i^2/2), \tag{3}$$

где параметр σ_i^2 описывает среднеквадратичные высоты шероховатостей на границе между i-тым и j-тым слоями. В работах [3, 4] отмечено, что область их применимости относится к поверхностям с длинномасштабными шероховатостями.

Другое приближение основано на результатах, полученных впервые в работе [5] и затем в статьях [6–8]. Принято считать, что оно справедливо для поверхностей с короткомасштабными шероховатостями [3, 4]. В этом приближении

$$f_i^{(r)} = \bar{f}_i^{(r)} = \exp(-2k_{iz}k_{jz}\sigma_i^2),$$
$$f_i^{(t)} = \bar{f}_i^{(t)} = \exp([k_{iz} - k_{jz}]^2\sigma_i^2/2). \tag{4}$$

Заметим, что во всех цитированных работах рассматривается только одна поверхность, имеющая резкую границу, и усреднение проводится не в уравнениях Максвелла, а уже в полученных решениях для одной границы. При этом применимость таких приближений для расчета многослойных зеркал с использованием рекуррентных соотношений нигде не обсуждается.

В работах [3, 4] с использованием борновского приближения для возмущенных волн сделана попытка обосновать оба приближения и установить связь между ними. Опять рассматривается лишь одна поверхность, имеющая резкую границу, и, кроме зеркально отраженной волны, учитываются диффузные волны и их влияние на зеркально отраженную волну. Заметим, что несмотря на использование красивого математического подхода, практическая ценность полученных в этих работах результатов невелика по той причине, что предложенное обобщение результатов на случай многослойных зеркал с многими поверхностями неочевидно.

В данной работе представлен наиболее прямой и простой вывод ослабляющих факторов в приближении Дебая–Валлера (3) и Нево–Кросе (4) методом усреднения фазовых множителей, который используется во всех цитированных работах в завуалированном виде. Из способа вывода становится очевидным, что метод ослабляющих факторов в экспоненциальном виде определенно неприменим для самосогласованного рекуррентного соотношения (2). Кроме того, сам подход, основанный на рассмотрении резкой границы, справедлив главным образом для внешней границы воздух–вещество.

Для межслойных границ вещество–вещество само понятие резкой границы не вполне корректно из-за наличия весьма заметной диффузии атомов из одного слоя в другой. По этой причине, а также потому, что самосогласованное решение можно корректно получить только в рамках единого уравнения для всей структуры, шероховатые межслойные границы необходимо рассматривать в рамках подхода, основанного на усредненном уравнении Максвелла, когда щероховатая поверхность приводит к различной структуре изменения электронной плотности в переходном слое. Такой подход будет рассмотрен в отдельной работе.

ПРИБЛИЖЕНИЕ ДЕБАЯ–ВАЛЛЕРА

Рассмотрим два слоя с индексами i и $j = i - 1$ и используем единую систему координат для обоих слоев, причем координата z отсчитывается в направлении проходящей волны. Пусть средняя граница между слоями соответствует $z = 0$. Введем амплитуды проходящей и отраженной волн в середине каждого из слоев $A_{i,j}^T$ и $A_{i,j}^B$, соответствующие усредненной межслойной границе.

Решение уравнения Максвелла в каждом из слоев имеет вид:

$$A_i(z) = A_i^T \exp(ik_{iz}[z + d_i/2]) + \\ + A_i^R \exp(-ik_{iz}[z + d_i/2]),$$
$$A_j(z) = A_j^T \exp(ik_{jz}[z - d_j/2]) + \\ + A_j^R \exp(-ik_{jz}[z - d_j/2]). \tag{5}$$

Введем теперь локальную границу между слоями $z = h(x, y)$. Из условия непрерывности амплитуды поля излучения, то есть, $A_i(h) = A_j(h)$ и ее произ-

водной на локальной границе получаем связь между амплитудами $A^T_{i,j}$ и $A^B_{i,j}$ в виде

$$A^R_i = r^{(c)}_i A^T_i + \bar{t}^{(c)}_i A^R_j, \quad A^T_j = t^{(c)}_i A^T_i + \bar{r}^{(c)}_i A^R_j, \qquad (6)$$

где

$$r^{(c)}_i = r_i B^{(c)}_i, \quad \bar{r}^{(c)}_i = \bar{r}_i B^{-2}_j, \quad t^{(c)}_i = t_i B_i B^{-1}_j, \quad \bar{t}^{(c)}_i = \bar{t}_i B_i B^{-1}_j. \qquad (7)$$

Здесь r_i, $\bar{r}_i$, t_i, $\bar{t}_i$ – френелевские параметры отражения и прохождения, определенные формулой (1), и

$$B_i = \exp(ik_{iz}[h + d_i/2]), \quad B_j = \exp(ik_{jz}[h - d_j/2]). \qquad (8)$$

Формулы (6) предполагают, что амплитуда проходящей волны в i-том слое и амплитуда отраженной волны в j-том слое являются независимыми, а две другие амплитуды определяются в результате отражения и прохождения через границу между слоями. Так как, по определению, амплитуды $A^T_{i,j}$ и $A^B_{i,j}$, соответствуют усредненной границе, нам необходимо усреднить соотношения (6) по возможным положениям границы. При этом очевидно усредняются только фазовые множители. Обычно полагают, что локальное положение границы $h(x, y)$ является случайной величиной, распределенной по гауссовому закону с функцией вероятности $w(h) = [\sigma(2\pi)^{1/2}]^{-1}\exp(-h^2/2\sigma^2)$ около среднего значения $h = 0$. С помощью табличного интеграла:

$$\int \exp(i\alpha h) w(h) dh = \exp(-\alpha^2\sigma^2/2), \qquad (9)$$

вычисления выполняются в аналитическом виде, и результат соответствует появлению ослабляющих коэффициентов, определенных формулой (3).

Действительно

$$\begin{gathered}\langle r^{(c)}_i \rangle = r_i \langle B^2_i \rangle = r_i \exp(-2k^2_{iz}\sigma^2) C_i, \\ \langle \bar{r}^{(c)}_i \rangle = \bar{r}_i \langle B^{-2}_i \rangle = \bar{r}_i \exp(-2k^2_{jz}\sigma^2) C_j, \\ \langle t^{(c)}_i \rangle = t_i \langle B_i B^{-1}_j \rangle = \\ = t_i \exp(-[k_{iz} - k_{jz}]^2\sigma^2/2)(C_i C_j)^{1/2}, \\ \langle \bar{t}^{(c)}_i \rangle = \bar{t}_i \langle B_i B^{-1}_j \rangle = \\ = \bar{t}_i \exp(-[k_{iz} - k_{jz}]^2\sigma^2/2)(C_i C_j)^{1/2}.\end{gathered} \qquad (10)$$

Здесь коэффициент C_i определен в формуле (2). Заметим, что в данном подходе формуле (2) соответствуют определения:

$$A^R_i = A^T_i R_i C^{-1}_i, \quad A^T_j = A^R_j R^{-1}_j C_j, \qquad (11)$$

так как параметры R_i и R_j определены для верхней части соответствующих слоев.

Как следует из представленного вывода, введение ослабляющих множителей в форме (3) вполне оправдано при рассмотрении коэффициентов отражения и прохождения одной поверхностью, когда падающие на поверхность волны из обоих слоев можно считать независимыми. Однако в рекуррентном соотношении (2) для расчета отражения многослойной структурой независимым считается параметр R_j при вычислении параметра R_i. Но параметр R_j не является независимым, поскольку при его определении используется зависимый параметр A^T_j – амплитуда волны, удаляющейся от поверхности. Поэтому эффекты многократного отражения рассматриваются не на локальной поверхности, а на средней поверхности. Очевидно приближение Дебая–Валлера не вносит существенных ошибок лишь в кинематическом приближении, когда эффектами многократного отражения можно пренебречь.

ПРИБЛИЖЕНИЕ НЕВО–КРОСЕ

Рассмотрим снова волновые поля в двух слоях, определенные уравнением (5), но теперь имея в виду использование рекуррентных соотношений для расчета многослойной структуры будем считать независимыми амплитуды полей в j-том слое и выразим через них амплитуды полей в i-том слое. Опять используя условие непрерывности амплитуды поля и его производной, запишем соотношения в матричном виде

$$A^T_i = a_{tt} A^T_j + a_{ir} A^R_j, \quad A^R_i = a_{rt} A^T_j + a_{rr} A^R_j, \qquad (12)$$

где

$$a_{tt} = \alpha_+ B^{-1}_i B_j, \quad a_{tr} = \alpha_- B^{-1}_i B^{-1}_j, \quad a_{rt} = \alpha_- B_i B_j, \quad a_{rr} = \alpha_+ B_i B^{-1}_j, \quad \alpha_\pm = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{k_{jz}}{k_{iz}}\right). \qquad (13)$$

Предполагая, что амплитуды соответствуют усредненной поверхности, проведем усреднение уравнений (12) по возможным случайным положениям поверхности. Это опять эквивалентно вычислению средних значений фазовых множителей. Расчет аналогичен рассмотренному выше. Результат можно записать в виде:

$$\begin{gathered}\langle a_{tt} \rangle = \alpha_+ \langle B^{-1}_i B_j \rangle = \alpha_+ \exp(-[k_{iz} - k_{jz}]^2\sigma^2/2)(C_i C_j)^{-1/2}, \\ \langle a_{tr} \rangle = \alpha_- \langle B^{-1}_i B^{-1}_j \rangle = \alpha_- \exp(-[k_{iz} + k_{jz}]^2\sigma^2/2) C^{-1/2}_i C^{1/2}_j, \\ \langle a_{rt} \rangle = \alpha_- \langle B_i B_j \rangle = \alpha_- \exp(-[k_{iz} + k_{jz}]^2\sigma^2/2) C^{1/2}_i C^{-1/2}_j, \\ \langle a_{rr} \rangle = \alpha_+ \langle B_i B^{-1}_j \rangle = \alpha_+ \exp(-[k_{iz} - k_{jz}]^2\sigma^2/2)(C_i C_j)^{1/2}.\end{gathered} \qquad (14)$$

Заметим, что рассмотренный выше простой и прямой расчет полностью воспроизводит результаты

работы [6], полученные с использованием теоремы Грина.

Для идеально гладкой поверхности матричный подход (12) эквивалентен использованию рекуррентного соотношения (2). Для шероховатой поверхности замена матричных элементов на их усредненные значения представляется вполне разумной, хотя сами матричные элементы не имеют непосредственного физического смысла, поскольку они связывают между собой волны как удаляющиеся от поверхности, так и приближающиеся к ней. Выразим теперь обобщенные параметры отражения и прохождения через усредненные матричные элементы (14). Очевидно $\langle r_i^{(c)} \rangle = A_i^R / A_i^T$, и $\langle t_i^{(c)} \rangle = A_j^R / A_j^T$ при условии $A_j^R = 0$. Аналогично $\langle \bar{r}_i^{(c)} \rangle = A_j^R / A_j^T$, и $\langle \bar{t}_i^{(c)} \rangle = A_i^T / A_j^T$ при условии $A_i^T = 0$. В результате получаем:

$$\begin{aligned} \langle r_i^{(c)} \rangle &= \frac{\langle a_{rt} \rangle}{\langle a_{tt} \rangle} = r_i \exp(-2k_{iz}k_{jz}\sigma^2) C_i, \\ \langle \bar{r}_i^{(c)} \rangle &= \frac{\langle a_{tr} \rangle}{\langle a_{tt} \rangle} = \bar{r}_i \exp(-2k_{iz}k_{jz}\sigma^2) C_j, \\ \langle t_i^{(c)} \rangle &= \frac{1}{\langle a_{tt} \rangle} = t_i f(\sigma)(C_i C_j)^{1/2}, \\ \langle \bar{t}_i^{(c)} \rangle &= \langle a_{rr} \rangle - \frac{\langle a_{rt} \rangle \langle a_{tr} \rangle}{\langle a_{tt} \rangle} = \overline{t_i f}(\sigma)(C_i C_j)^{1/2}. \end{aligned} \tag{15}$$

Таким образом, обобщенные параметры прямого и обратного отражения имеют те же фазовые множители, но другой ослабляющий фактор по сравнению с приближением Дебая–Валлера.

Однако обобщенные параметры прямого и обратного прохождения не удовлетворяют очевидному правилу симметрии относительно замены индексов i и j, поскольку

$$\begin{aligned} f(\sigma) &= \exp([k_{iz} - k_{jz}]^2 \sigma^2/2), \\ \bar{f}(\sigma) &= \exp(-[k_{iz} - k_{jz}]^2 \sigma^2/2) \frac{1 - r_i^2 \exp(-4k_{iz}k_{jz}\sigma^2)}{1 - r_i^2}. \end{aligned} \tag{16}$$

Этот результат отмечен в работах [4, 8]. Тем не менее, легко убедиться непосредственно, что с точностью до членов порядка σ^2 оба фактора совпадают и равны $f(\sigma) = \bar{f}(\sigma) = 1 + [k_{iz} - k_{jz}]^2\sigma^2/2 + o(\sigma^4)$. Таким образом, нефизические свойства появляются только в членах более высокого порядка по σ_2.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Ослабляющий фактор в приближении Дебая–Валлера естественным образом появляется при решении уравнения Максвелла в первом борновском приближении [9], когда амплитуда отражения мала и пропорциональна первой степени разности $[k_{iz} - k_{jz}]$. При этом различие между факторами $\exp(-2k_{iz}^2\sigma^2)$ и $\exp(-2k_{iz}k_{jz}\sigma^2)$ даже в линейном приближении по σ^2 оказывается членом второго порядка по малому параметру $[k_{iz} - k_{jz}]$. Заметим, что непосредственное усреднение фазовых множителей в параметрах отражения и прохождения на одной границе вполне законно при отсутствии многократного отражения. Однако оно неприменимо для рекуррентного соотношения по причине того, что оно не учитывает многократные отражения.

Как известно, решение уравнения Максвелла в борновском приближении для возмущенных волн [3, 4] является точным до членов первого порядка по σ^2 и приводит к тем же результатам, что и в рассмотренном выше приближении Нево–Кросе. По этой причине следует признать, что приближение Нево–Кросе является более последовательным и самосогласованным, чем приближение Дебая–Валлера. Однако и в нем члены более высокого порядка по параметру шероховатости не удовлетворяют очевидному свойству симметрии, что указывает на его ограниченную применимость.

Заметим, что в представленном выше выводе никаких предположений о длине продольной корреляции шероховатостей не делалось как при выводе приближения Нево–Кросе, так и при выводе приближения Дебая–Валлера. По этой причине вывод о том, что приближение Дебая–Валлера является более точным в случае длинномасштабных шероховатостей [3, 4], в то время как приближение Нево–Кросе соответствует короткомасштабным шероховатостям не представляется убедительным. Эффект влияние диффузных волн на зеркально отраженную волну появляется только в модели резкой границы между слоями, что не вполне соответсвует структуре межслойных границ многослойных зеркал из-за наличия взаимной диффузии атомов из слоя в слой. По-видимому более правильный метод расчета зеркального отражения рентгеновских лучей должен использовать усредненное уравнение Максвелла, в котором поляризуемость зависит лишь от координаты по нормали к поверхности, а шероховатость поверхности проявляется в виде наличия переходного слоя [9–11].

Автор выражает признательность Н.Н. Новиковой, С. И. Желудевой и М.В. Ковальчуку за интерес к работе и полезные обсуждения. Работа поддержана РФФИ, грант № 01-02-16508.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Parratt L.G.* // Phys. Rev., 1954. V. 95. P. 359.
2. *Бушуев В.А., Сутырин А.Г.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. 2000. № 1. С. 82.
3. *de Boer D.K.G.* // Phys. Rev. B. Condens. Matter. 1994. V. 49. P. 5817.

4. *de Boer D.K.G.* // Phys. Rev. B. 1995. V. 51 P. 5297.
5. *Nevot L., Croce P.* // Rev. Phys. Appl. 1980. V. 15. № 3. P. 761.
6. *Vidal B., Vincent P.* // Appl. Opt. 1984. V. 23. P. 1794.
7. *Pynn R.* // Phys. Rev. B. Condens. Matter. 1992. V. 45. № 2. P. 602.
8. *Caticha A.* // Physics of X-ray Multilayer Structure, Technical Digest Series, V. 6. Washington D. C.: Optical Society of America, 1994. P. 56.
9. *Stearns D.G.* // J. Appl. Phys. 1989. V. 65. P. 491.
10. *Dietrich S., Haase A.* // Phys. Rep. 1995. V. 260. P. 1.
11. *Андреев А.В.* // УФН. 1985. V. 145. С. 113.

On the Theory of X-Ray Reflectivity by Multilayer Mirrors. I. Debye–Waller and Nevot–Croce Approximations for Taking into Account The Roughness of Interfaces

V. G. Kohn

A simple and straightforward derivation of the decreasing factors is presented for the Debye–Waller and Nevot–Croce approximations taking into account the roughness of the interfaces in calculation of the X-ray reflectivity by means of recurrent relations. The Debye–Waller approximation is obtained directly by means of averaging the phase factors in reflection and transmission parameters for one interface where the multiple reflections were not taken into account. The Nevot–Croce approximation is obtained by means of averaging the matrix elements of transition from one layer to another layer. A following calculation of the reflection and transmission parameters takes effectively account of the multiple reflections. However this approximation is self-consistent only for the terms of first order in the roughness parameter σ^2.