Опубликовано в «Поверхность, N.2, с.62-66, 2003»

УДК 548.732

К ТЕОРИИ ЗЕРКАЛЬНОГО ОТРАЖЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ МНОГОСЛОЙНЫМИ ЗЕРКАЛАМИ. II. ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ МОДЕЛИ ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ.

В. Г. Кон

Российский научный центр "Курчатовский Институт", 123182 Москва, Россия

Аннотация. – Представлен анализ точных решений для ослабляющих множителей в параметрах отражения и прохождения, учитывающих шероховатость межслойных границ и используемых при расчете отражения рентгеновских лучей многослойными зеркалами методом рекуррентных соотношений, в случае двух моделей переходного слоя: ступеньки Ферми и линейного переходного слоя. Показано, что точные решения в обеих моделях в линейном по параметру шероховатости σ^2 приближении эквивалентны формулам Нево-Кросе и решению, получаемому из обобщенного борновского приближения для возмущенных волн.

1. Введение

Проблема зеркального отражения жестких рентгеновских лучей в синтетических многослойных зеркалах при скользящих углах падения в последние годы привлекает внимание в связи с возможностью неразрушающей диагностики структуры таких зеркал. При скользящих углах поляризационными свойствами излучения можно пренебречь и рассматривать скалярную монохроматическую волну с частотой ω в виде $A(z)\exp(iK\cos\theta\, x - i\omega t)$, где $K = \omega/c$, c – скорость света в вакууме, θ – скользящий угол падения плоской волны на поверхность многослойного зеркала. С другой стороны, интересуясь только зеркальным отражением поляризуемость среды $\chi(x,y,z)$ можно усреднить по координатам x и y вдоль поверхности зеркала [1-3] и рассматривать зависящую лишь от координаты z среднюю поляризуемость $\chi_a(z)$.

В результате задача сводится к решению одномерного уравнения Максвелла

$$\frac{d^2 A(z)}{dz^2} + K^2[\sin^2\theta + \chi_a(z)]A(z) = 0 \qquad (1)$$

Для одномерно-периодических структур с большим числом периодов одним из методов приближенного решения уравнения (1) является "дифракционный" подход в двухволновом приближении, когда поляризуемость $\chi_a(z)$ и решение $A(z)$ ищется в виде разложения в ряд Фурье [4-6]. При этом структура межслойных границ влияет лишь на параметр рассеяния (фурье-компоненту поляризуемости), в то время как волновой вектор стоячей волны остается постоянным внутри периода. Изменение волнового вектора внутри периода можно получить при учете высших порядков отражения, однако анализ до сих пор не проводился.

Дифракционный подход при всех своих недостатках является достаточно простым и позволяет получить в ряде случаев аналитические решения. В кинематическом приближении, удается аналитически описать даже слабые вариации периода структуры около среднего значения [7]. С другой стороны, в литературе большое распространение получил "локальный" подход, основанный на точном решении задачи для одной границы и точных рекуррентных соотношениях при расчете многослойных структур. В качестве стартового приближения рассматривается модель с идеально гладкими поверхностями, в которой прямой и обратный параметры отражения и прохождения плоской волны определяются формулами Френеля

$$r_i = \frac{k_{iz} - k_{jz}}{k_{iz} + k_{jz}}, \quad t_i = 1 + r_i, \quad \overline{r_i} = -r_i, \quad \overline{t_i} = 1 + \overline{r_i} \tag{2}$$

где $k_{nz} = K\,[\sin^2\theta + \chi_n]^{1/2}$, χ_n – средняя поляризуемость среды в n-том слое,.$n = i,j$, а индексы i и $j = i - 1$ нумеруют слои в направлении отраженного пучка.

Для расчета коэффициента отражения $|R_N|^2$ всей многослойной структурой достаточно использовать рекуррентное соотношение [8] для амплитуды отражения R_i всеми слоями, имеющими индекс меньше i-го. В общем случае его следует записывать в виде [9]

$$R_i = C_i^2 \frac{r_i + Q_i R_j}{1 - \overline{r_i} R_j}, \quad Q_i = t_i \overline{t_i} - r_i \overline{r_i}, \quad C_i = \exp(ik_{iz} a_i) \tag{3}$$

где a_i – толщина i-го слоя, и амплитуда отражения R_i определена для верхней части каждого слоя.

Измеряемые экспериментально коэффициенты отражения имеют практически всегда меньшие значения, чем следует из расчетов по формулам (2), (3). Одной из основных причин этого факта считается наличие щероховатости межслойных границ. Различные приближенные подходы к анализу этой проблемы привели к выводу, что формулу (3) следует использовать с более точными параметрами отражения и прохождения, которые отличаются от параметров (2), 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 обратных параметров.

В литературе часто используют ослабляющие множители в приближениях Дебая-Валлера (Debye-Waller) и Нево-Кросе (Nevot-Croce) [10-13]. Заметим, что во всех цитированных работах рассматривается только одна поверхность, имеющая резкую границу, что соответствует границе воздух-вещество. В связи с этим применимость таких приближений при расчете многослойных зеркал с использованием рекуррентных соотношений нигде не обсуждается. 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 (1), когда шероховатая поверхность приводит к различной структуре изменения электронной плотности в переходном слое. Такой подход хорош еще и тем, что позволяет для различных моделей переходного слоя получить точное решение для параметров прямого и обратного отражения и прохождения. В данной работе представлены и исследованы аналитические решения для двух моделей переходного слоя: ступеньки Ферми и линейного переходного слоя.

2. Переходный слой в виде ступеньки Ферми

Решение уравнения (1) можно получить итерационным методом (3) устанавливая соответствующие граничные условия в двух точках z_1 и z_2 и решая уравнение на интервале между z_1 и z_2. Рассмотрим интервал, содержащий одну межслойную границу. Если толщина межслойной границы много меньше толщин слоев, то слои можно приближенно считать бесконечно толстыми а середину межслойной границы поместить в начало координат. В данном разделе мы рассмотрим точное решение уравнения (1) для модели переходного слоя в виде ступеньки Ферми

$$\chi_a(z) = \chi_i v(z) + \chi_j [1 - v(z)], \quad v(z) = [1 + \exp(z/d)]^{-1} \tag{4}$$

где χ_i и χ_j – комплексные поляризуемости в верхнем и нижнем слоях.

В статье [2] указана подстановка, приводящая к точному решению, но полное решение не выписано. Дитрих и Хаазе [3] решили эту задачу более аккуратно, используя другую подстановку, а именно

$$A(z) = \xi^{-ik_{jz}d} F(\xi), \quad \xi(z) = -\exp(-z/d) = \frac{v(z)}{v(z)-1} \tag{5}$$

Подставляя (4) и (5) в уравнение (1) получаем

$$\xi(1-\xi)\frac{d^2F}{d\xi^2} + (1-\xi)(1-2ik_{jz}d)\frac{dF}{d\xi} + (k_{jz}^2 - k_{iz}^2)F = 0 \tag{6}$$

Это уравнение совпадает с уравнением для гипергеометрической функции $F(a,b,c,\xi)$ со следующими значениями параметров

$$a = i(k_{iz} - k_{jz})d, \quad b = -i(k_{iz} + k_{jz})d, \quad c = 1 - 2ik_{jz}d = a + b + 1 \tag{7}$$

Поэтому можно сразу выписать точное решение при $|\xi| \le 1$, то есть при $z \ge 0$, когда гипергеометрическая функция описывается степенным рядом

$$F(a,b,c,\xi) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{\xi^n}{n!} \tag{8}$$

где $\Gamma(x)$ есть гамма-функция. Решение имеет следующий вид

$$A_j(z) = C\exp(ik_{jz}z) F(a,b,1+a+b,-\exp(-z/d)) \tag{9}$$

Здесь C – нормировочная константа.

При $|\xi| \ge 1$, то есть при $z \le 0$, решение записывается в виде, следующем из формулы преобразования 15.3.7 справочника [14]

$$\begin{aligned} A_i(z) = C\Big\{ &\exp(ik_{iz}z)\frac{\Gamma(1+a+b)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(1+b)} F(a,-b,1+a-b,-\exp(z/d)) \\ &+ \exp(-ik_{iz}z)\frac{\Gamma(1+a+b)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(1+a)} F(b,-a,1-a+b,-\exp(z/d)) \Big\} \end{aligned} \tag{10}$$

Для нормировки решения на падающую волну с единичной амплитудой нужно выбрать константу C в виде

$$C = \frac{\Gamma(b)\Gamma(1+b)}{\Gamma(1+a+b)\Gamma(b-a)} \tag{11}$$

При этом коэффициент перед отраженной волной в пределе $z \to -\infty$ равен точному значению параметра отражения

$$r = C\frac{\Gamma(1+a+b)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(1+a)} = \frac{(k_{jz}+k_{iz})}{(k_{jz}-k_{iz})} \frac{\Gamma(2ik_{iz}d)}{\Gamma(-2ik_{iz}d)} \frac{\Gamma^2(-id[k_{jz}+k_{iz}])}{\Gamma^2(-id[k_{jz}-k_{iz}])} \tag{12}$$

Точное значение параметра прохождения равно

$$t = C = \frac{(k_{iz}+k_{jz})}{2k_{jz}} \frac{\Gamma^2(-id[k_{iz}+k_{jz}])}{\Gamma(-2ik_{iz}d)\Gamma(-2ik_{jz}d)} \tag{13}$$

В предельном случае $d \to 0$ с учетом соотношения $\Gamma(x) \to 1/x$ при $x \to 0$ получаем правильные значения (2) для френелевских параметров r_i и t_i . Чтобы получить разложение точных решений в ряд по степеням d при малых значениях d, используем формулу 6.1.34 справочника [14]

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^n, \quad a_1 = 1, \quad a_2 = 0.57722, \quad a_3 = -0.65588, \quad a_4 = -0.042 \tag{14}$$

Коэффициенты разложения известны лишь численно, выше приведены явные значения первых коэффициентов, которые понадобятся в дальнейшем.

Подставляя в формулу (12) разложение (14) с точностью до членов порядка d^2 получаем

$$r = r_i(1 - 2k_{iz}k_{jz}Sd^2 + \cdots), \quad S = 2(a_2^2 - 2a_3) \approx 3.29 \tag{15}$$

Чтобы придать этой формуле физический смысл, заметим, что переходный слой можно трактовать как усредненную шероховатую поверхность. Среднее значение этой поверхности соответствует $z = 0$, а вероятность различных отклонений от средней поверхности описывается функцией

$$w(z) = \frac{d}{dz}\frac{\chi_a(z) - \chi_i}{\chi_j - \chi_i} = \frac{d}{dz}[1 - v(z)] = \frac{1}{2d[1 + \cosh(z/d)]} \tag{16}$$

Функция $w(z)$ нормирована на единицу, а среднее и среднеквадратичное отклонения поверхности равны соответственно

$$\int w(z)dz = 1, \quad \langle z \rangle = \int zw(z)dz = 0, \quad \langle z^2 \rangle = \sigma^2 = \int z^2 w(z)dz = \frac{\pi^2}{3}d^2 \approx 3.29d^2$$

Таким образом формулу (15) можно записать в виде $r = r_i\,(1 - 2k_{iz}k_{jz}\sigma^2 + \ldots)$, что соответствует первому члену разложения ослабляющего множителя в приближении Нево-Кросе. Однако в данном случае этот результат является точным и получен для конкретной структуры переходного слоя. Подставляя разложение (14) в формулу (13) получаем $t = t_i\,[1 + (k_{iz} - k_{jz})^2\sigma^2/2 + \ldots]$, что опять точно соответсвует приближению Нево-Кросе. Параметры обратного отражения и прохождения следуют из соотношений симметрии. Заметим, что в данной модели функция вероятности отклонений поверхности от среднего значения и параметр шероховатости σ^2 имеют вполне определенный смысл. Используя точное решение можно продолжить анализ предельных случаев, но это выходит за рамки данного сообщения.

3. Линейный переходный слой

Точное решение уравнения Максвелла для переходного слоя в виде ступеньки Ферми имеет небольшой практический интерес из-за очень сложного вида решения и наличия длинных "хвостов". В реальной многослойной структуре толщины слоев малы и значит толщины переходных слоев резко ограничены. Другими словами хвосты одного переходного слоя пересекаются с хвостами другого слоя и разумно решать уравнение Максвелла сразу на периоде, так как асимптотические области отсутствуют. Решение имеет практический интерес только для очень резких слоев, толщина которых много меньше периода. Но это сильно ограничивает область применимости такого подхода.

В связи с этим, интересно рассмотреть переходный слой конечных размеров, в котором восприимчивость $\chi(z)$ линейно меняется от χ_i в верхнем слое до χ_j в нижнем слое. Эта задача решается точно в виде быстро сходящегося степенного ряда. Итак, рассмотрим уравнение Максвелла (1) для модели линейного переходного слоя

$$\chi_a(z) = \chi_i v(z) + \chi_j[1 - v(z)], \quad v(z) = \begin{cases} 1, & z < -d \\ (1 - z/d)/2, & |z| < d \\ 0, & z > d \end{cases} \tag{17}$$

Вводя безразмерные параметры

$$x = \frac{z}{d}, \quad q_n = k_{nz}d = Kd[\sin^2\theta + \chi_n]^{1/2}, \quad n = i, j \tag{18}$$

внутри переходного слоя $|x|<1$ приходим к уравнению

$$\frac{d^2A(x)}{dx^2} + [\alpha - \beta x]A(x) = 0, \quad \alpha = \frac{1}{2}(q_i^2 + q_j^2), \quad \beta = \frac{1}{2}(q_i^2 - q_j^2) \tag{19}$$

В верхнем слое $x \le -10$ выберем решение в виде $A_i(x) = \exp(iq_i x) + r \exp(-iq_i x)$. В нижнем слое $x \ge 1$ выберем решение в виде $A_j(x) = t \exp(iq_j x)$. Искомое решение внутри переходного слоя необходимо сшить с указанными решениями в точках $x = \pm 1$. Граничные условия обеспечивают как однозначность решения внутри переходного слоя, так и определяют параметры отражения и прохождения.

Уравнение (19) не имеет особых точек и решение можно искать в виде степенного ряда, коэффициенты которого удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$A(x) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k x^k, \quad C_{k+2} = \frac{\beta C_{k-1} - \alpha C_k}{(k+1)(k+2)}, \quad C_{-1} = 0 \tag{20}$$

Рекуррентные соотношения определяют все коэффициенты ряда через два первых коэффициента C_0 и C_1, которые остаются произвольными. Таким образом, общее решение уравнения можно представить в виде $A(x) = C_0 f_0(x) + C_1 f_1(x)$, где функции $f_0(x)$ и $f_1(x)$ определены однозначно и являются двумя линейно независимыми решениями уравнения (19)

$$f_0(x) = 1 + \sum_{k=2}^{\infty} a_k x^k, \quad f_1(x) = x\left(1 + \sum_{k=2}^{\infty} b_k x^k\right) \tag{21}$$

Здесь $a_k = C_k / C_0$ при условии $C_1 = 0$, $b_k = C_{k+1} / C_1$ при условии $C_0 = 0$. Например, первые коэффициенты равны

$$a_2 = -\frac{\alpha}{2}, \quad a_3 = \frac{\beta}{6}, \quad b_2 = -\frac{\alpha}{6}, \quad b_3 = \frac{\beta}{12} \tag{22}$$

Заметим, что в случае $q_i = q_j = q$ имеем $f_0(x) = \cos(qx)$, $f_1(x) = \sin(qx)/q$.

Коэффициенты C_0 и C_1 находятся из граничных условий. Необходимо, чтобы решение и его первая производная совпадали с таковыми в верхнем и в нижнем слоях в точках $x = -1$ и $x = +1$ соответственно. Эти условия можно записать в виде 4-х уравнений

$$\begin{aligned} &C_0 f_{0t} + C_1 f_{1t} = E_i^{-1} + rE_i, \quad C_0 f_{0b} + C_1 f_{1b} = tE_j, \\ &C_0 p_{0t} + C_1 p_{1t} = iq_i(E_i^{-1} - rE_i), \quad C_0 p_{0b} + C_1 p_{1b} = iq_j tE_j \end{aligned} \tag{23}$$

где $E_n = \exp(iq_n)$, $n = i,j$,

$$f_{k,t} = f_k(-1), \quad p_{k,t} = \frac{df_k(-1)}{dx}, \quad f_{k,b} = f_k(1), \quad p_{k,b} = \frac{df_k(1)}{dx} \tag{24}$$

Здесь и далее $k = 0,1$. Очевидно коэффициенты C_0 и C_1 можно определить независимо либо из первой пары уравнений, либо из второй. При этом оба выражения должны совпадать. Решения можно записать в виде

$$C_0 = \frac{[h_1 E_i^{-1} + r g_1 E_i]}{D_t} = \frac{t w_1 E_j}{D_b}, \quad C_1 = -\frac{[h_0 E_i^{-1} + r g_0 E_i]}{D_t} = \frac{t w_0 E_j}{D_b} \tag{25}$$

где $h_k = p_{k,t} - iq_i f_{k,t}$, $g_k = p_{k,t} + iq_i f_{k,t}$, $w_k = p_{k,b} - iq_j f_{k,b}$, $D_c = f_{0c} p_{1c} - f_{1c} p_{0c}$, $c = t,b$.

Выражения (25) определяют решение в переходном слое и одновременно представляют собой систему двух уравнений для определения точных параметров отражения r и прохождения t, то есть доопределяют решения в верхнем и нижнем слоях. Система линейных уравнений решается стандартным способом и в результате получаем

$$r = \exp(-2iq_i)\frac{h_1 w_0 - h_0 w_1}{g_0 w_1 - g_1 w_0}, \quad t = \exp(-i[q_i + q_j])\frac{D_b}{D_t}\frac{(g_0 h_1 - g_1 h_0)}{(g_0 w_1 - g_1 w_0)} \tag{26}$$

Таким образом, мы получили точное решение для параметров отражения и прохождения плоской волны через границу с линейным переходным слоем.

Как и для предыдущей модели, решение можно представить в виде ряда по степеням параметра d. Вычислим члены ряда до степени d^2 включительно. С указанной точностью имеем

$$f_0(x) = 1 + a_2 x^2 + a_3 x^3, \quad f_1(x) = x + b_2 x^3 + b_3 x^4 \tag{27}$$

Используя (22) и производя необходимые расчеты, получаем

$$r \approx \frac{(q_i - q_j)}{(q_i + q_j)}\left(1 - \frac{2}{3} q_i q_j\right), \quad t \approx \frac{2q_i}{(q_i + q_j)}\left(1 + \frac{1}{6}(q_i - q_j)^2\right) \tag{28}$$

Заметим, что в данной модели переходный слой характеризуется функцией вероятности $w(z) = (2d)^{-1}\theta(d - |z|)$ и при этом

$$\int w(z)dz = 1, \quad \langle z \rangle = \int z w(z)dz = 0, \quad \langle z^2 \rangle = \sigma^2 = \int z^2 w(z)dz = \frac{d^2}{3}$$

Поэтому полученный результат снова можно представить в виде

$$r = r_i(1 - 2k_{iz}k_{jz}\sigma^2 + \cdots), \quad t = t_i(1 + [k_{iz} - k_{jz}]^2 \sigma^2/2 + \cdots) \tag{29}$$

4. Дополнительные замечания

Тот факт, что в двух точных решениях линейные по σ^2 поправочные члены дают одну и ту же зависимость (29) указывает на то, что такое поведение имеет универсальный характер, не зависящий от конкретной модели переходного слоя. В работах [15,16] отмечено, что этот результат следует из расчетов методом борновского приближения для возмущенных волн. Однако в этих работах рассматривалась резкая граница и усреднение проводилось с гауссовой функцией.

Однако, аналогичный расчет можно провести и в рамках усредненного уравнения Максвелла (1), когда в качестве нулевого приближения берется решение с резким переходным слоем, а отклонение поляризуемости в реальном переходном слое рассматривается как возмущение. Детальный расчет выхолит за рамки данной статьи. Здесь лишь отметим, что решение (29) имеет универсальный характер, то есть справедливо для любой модели переходного слоя, если в качестве функции вероятности используется нормированная производная по z от профиля поляризуемости в переходном слое. Однако члены порядка $\langle z^4 \rangle$, вообще говоря, будут зависеть от модели переходного слоя.

Отметим, что гауссовой функции вероятности высот шероховатостей соответствует профиль переходного слоя в виде функции ошибок, имеющий достаточно длинные хвосты. Часто экспериментальные результаты хорошо описываются при значении σ=3 A. При этом толщина линейного переходного слоя равна $2d = 2(3)^{1/2}\sigma \approx 10$ A. Следовательно многослойная структура с периодом порядка 20 A практически целиком состоит из переходных слоев. Поэтому для расчета, например, выхода флуоресценции из таких структур необходимо использовать точное решение для волнового поля внутри переходного слоя.

* * *

Автор выражает признательность Н. Н. Новиковой, С. И. Желудевой и М. В. Ковальчуку за интерес к работе и полезные обсуждения. Работа поддержана РФФИ, грант N. 01-02-16508.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Stearns D.G. // J. Appl. Phys. 1989. V. 65. P. 491.
2. Андреев А.В. // УФН. 1985. V. 145. C. 113.
3. Dietrich S., Haase A. // Phys. Rep. 1995. V. 260. P. 1.
4. Виноградов А.В., Зельдович Б.Я. // Оптика и Спектр. 1977. V. 42. №.4. C. 709.
5 Vinogradov A.V., Zeldovich B.Y. // Appl. Opt. 1977. V. 16. C. 89.
6 Платонов Ю.Я., Полушкин И.И., Салащенко Н.Н., Фраерман А.А. // ЖТФ. 1987. V. 57. №.11. C. 2192.
7 Фраерман А.А., Вайнер Ю.А., Митенин С.В. и др. // Поверхность. 1997. №.12. C. 57.
8. Parratt L.G. // Phys. Rev., 1954. V. 95. P. 359.
9. Бушуев В.А., Сутырин А.Г. // Поверхность. 2000. №1. C. 82.
10. Nevot L., Croce P. // Rev. Phys. Appl. 1980. V. 15. N.3. P. 761.
11. Vidal B., Vincent P. // Appl. Opt. 1984. V. 23. P. 1794.
12. Pynn R. // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. N.2. P. 602.
13. Caticha A. // Physics of X-ray Multilayer Structure, Technical Digest Series, V. 6, Washington D. C.: Optical Society of America, 1994. P. 56.
14. Справочник по специальным функциям. / ред. Абрамович М., Стиган И. М.: Наука, 1979.
15. de Boer D.K.G. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. P. 5817.
16. de Boer D.K.G. // Phys. Rev. B. 1995. V. 51 P. 5297.

ON THE THEORY OF X-RAY REFLECTIVITY BY MULTILAYER MIRRORS. II. EXACTLY SOLVABLE MODELS OF TRANSITION LAYER.

V. G. Kohn

Russian Research Centre "Kurchatov Institute", 123182 Moscow, Russia

Abstact.

Analysis of exact solutions for the decreasing factors in the parameters of reflection and transition is presented for the two models of transition layer: the Fermi step and the linear transition layer. The factors take into account roughness of interfaces and are used in calculation of x-ray reflectivity by multilayer mirrors by means of recurrent relations. It is shown that the exact solutions for both models and for the linear in the roughness parameter σ^2 approximation are equivalent to the Nevot-Croce formulas and the solution obtained in the distorted wave Born approximation.