

На правах рукописи

Кожевников Игорь Викторович

ТЕОРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО
ИЗЛУЧЕНИЯ ОТ НЕОДНОРОДНЫХ СЛОИСТЫХ
СРЕД

01.04.07 - Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Москва 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте кристаллографии им. А.В. Шубникова Российской академии наук (ИК РАН).

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Бушуев Владимир Алексеевич, профессор кафедры физики твердого тела физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова;
доктор физико-математических наук
Горай Леонид Иванович, ведущий научный сотрудник Санкт-Петербургского академического университета – Научно-образовательного центра нанотехнологий РАН;
доктор физико-математических наук, профессор
Пунегов Василий Ильич, заведующий лабораторией теоретической и вычислительной физики отдела математики Коми научного центра УрО РАН

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»

Защита состоится «_____» _____ 2014 г. в _____ часов на заседании диссертационного совета Д 002.114.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте кристаллографии им. А.В. Шубникова Российской академии наук, расположенном по адресу: 119333, г. Москва, Ленинский пр-т, д. 59.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте (www.crys.ras.ru) ИК РАН.

Автореферат разослан «_____» _____ 2013 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

Каневский В.М.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Термин “рентгеновское излучение” (РИ) применяется сегодня к чрезвычайно широкому диапазону электромагнитных волн, простирающемуся от 0.01 нм до 30 нм. В соответствии с общепринятой терминологией, хотя и с некоторой долей условности, этот диапазон подразделяется на жесткий рентгеновский (ЖР, $\lambda \sim 0.01 - 0.3$ нм), мягкий рентгеновский (МР, $\lambda \sim 0.3 - 10$ нм) и экстремальный ультрафиолетовый (ЭУФ, $\lambda \sim 10 - 30$ нм).

В настоящее время рентгеновское излучение все шире применяется в научных исследованиях и современных технологиях благодаря, прежде всего, малой длине волны РИ, возможности изменять глубину проникновения волны в вещество от единиц нанометров в области полного внешнего отражения (ПВО) до сотен микрон вне ее, а также соответствию энергии рентгеновских фотонов энергиям связи внутренних атомных электронов.

Исследования отражения РИ от слоисто-неоднородных сред играют особую роль в рентгеновской физике. Дело заключается в том, что большое число современных микро и нанотехнологий, используемых, например, в электронике, спинтронике, оптике, в значительной степени основывается на напылении пленочных и многослойных структур с толщиной отдельных слоев в единицы и даже доли нанометров. При такой толщине критическим фактором становится качество внутренней структуры пленок и границ разделов между ними (шероховатость, интерслои и т.д.). Дефекты структур даже ангстремного масштаба могут существенно ухудшить электрические или оптические параметры устройств и привести к исчезновению желаемых эффектов (например, квантово-размерных). Ясно, что в силу малой длины волны именно РИ является незаменимым инструментом для исследования и контроля внутренней структуры наноразмерных пленочных и многослойных покрытий.

Методы рентгеновской рефлектометрии начали широко применяться для решения подобных задач в 1980-х годах. Результаты исследований наглядно показали, с одной стороны, большие возможности рентгеновских методов, а с другой - ограниченную применимость в этом диапазоне длин волн теоретических подходов, разработанных первоначально в оптике, акустике и радиофизике. Среди интересных экспериментальных эффектов, которые не могли быть описаны в рамках широко используемого в то время приближения Кирхгофа [1], отметим обнаружения пика [2] и анти-пика [3] Ионеды, кажущееся увеличение среднеквадратичной высоты шероховатостей при уменьшении угла скольжения зондирующего пучка [4] и значительное превышение измеренного коэффициента отражения над рассчитанным по формуле Френеля при падении пучка вне области ПВО [5]. Тем самым, в 1980-х годах

на повестку дня остро встал вопрос о необходимости разработки теории, которая адекватно описывала бы все особенности отражения и рассеяния РИ от слоисто-неоднородных шероховатых структур и могла бы служить основой для их исследований и контроля.

Более того, после появления мощных источников РИ появилась возможность для *in situ* исследований модификации внутренней структуры образцов при различных технологических воздействиях (напылении, травлении, окислении и т.д.). Ясно, что такие исследования позволяют получить несравненно больший объем информации об исследуемом объекте, но лишь при условии развития соответствующих методик ее извлечения из экспериментальных данных.

Далее, именно многослойные структуры обусловили в значительной степени быстрый прогресс в рентгеновской оптике в 80-х – 90-х годах прошлого века. В то же время, традиционные периодические многослойные зеркала характеризуются спектральной селективностью $\lambda/\Delta\lambda \sim 20-200$. Уже в середине 1990-х годов стало ясно, что для многих практических задач крайне желательно увеличить полосу отражения многослойных зеркал (зеркала для каналов синхротронного излучения (СИ) и ЭУФ литографии, зеркала Гёбеля для увеличения эффективности использования излучения “точечных” источников). Для других же задач, наоборот, следует увеличить спектральную селективность зеркала (рентгено-флуоресцентный анализ легких элементов). Ясно, что разработка и оптимизация параметров таких рентгенооптических устройств, основанных, как правило, на аperiodических (с периодом, изменяющимся по глубине) и ламеллярных (протравленных вдоль поверхности периодическим образом) многослойных структурах, подразумевает и разработку соответствующих теоретических подходов для описания отражения и дифракции РИ.

Отметим, что до последнего времени оптимизация аperiodических и ламеллярных многослойных структур (ЛМС) основывалась, как правило, на чисто компьютерных методах расчета (многомерной оптимизации с выбором той или иной целевой функции в случае аperiodических зеркал или переборе огромного числа комбинаций параметров в случае ЛМС), недостатком которых является отсутствие ясного физического обоснования полученных результатов. В качестве иллюстрации отметим утверждение, сделанное авторами работы [6], что проблема дифракции РИ от ламеллярной многослойной структуры является настолько сложной, что невозможно найти аналитические критерии (правила) для оптимизации параметров структуры.

Таким образом, быстрое развитие рентгеновской физики за последние 30 лет и практическая необходимость в разработке перспективных и совершенствовании традиционных рентгеновских методов исследования вещества, а также разработке и создании новых рент-

генооптических элементов для управления пучками РИ обуславливает актуальность темы исследований, проведенных в диссертации.

Целью диссертационной работы является развитие теории дифракции рентгеновского излучения от одномерно-неоднородных шероховатых сред, имея в виду (а) разработку самосогласованного безмодельного подхода к исследованию трехмерной структуры слоисто-неоднородных сред на основе анализа угловых зависимостей коэффициента отражения и интенсивности рассеянного рентгеновского излучения и (б) решение обратной задачи синтеза (т.е. оптимизации конструкции) в теории аперiodических и ламеллярных многослойных структур применительно к ряду прикладных задач рентгеновской оптики, таких как управление пучками СИ, создание широкополосных зеркал для ЭУФ литографии и оптики Гёбеля, а также увеличения разрешения спектрально селективных элементов для рентгенофлуоресцентного анализа (РФА).

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Теоретически исследовать общие закономерности отражения и рассеяния рентгеновского излучения от шероховатых слоисто-неоднородных сред.
2. Разработать количественные методики извлечения информации из данных рентгеновских экспериментов без использования каких-либо моделей отражающей среды и, в частности, из in-situ измерений отражения и рассеяния рентгеновского излучения от растущих/эродирующих слоисто-неоднородных структур.
3. Разработать безмодельный подход к решению обратной задачи рентгеновской рефлектометрии, т.е. восстановлению распределения диэлектрической проницаемости по глубине на основе измеренной угловой зависимости коэффициента отражения.
4. Разработать подход к решению фазовой проблемы рентгеновской рефлектометрии, т.е. определению фазы амплитудного коэффициента отражения по измерениям его модуля.
5. Разработать итерационную процедуру для самосогласованного безмодельного подхода к исследованию трехмерной структуры слоисто-неоднородных сред, позволяющего одновременно определить как профиль диэлектрической проницаемости по глубине образца, так и статистические параметры шероховатости границ раздела.
6. Разработать аналитическую теорию отражения рентгеновского излучения от аперiodических многослойных структур. С помощью созданного программного обеспечения

применить эту теорию к решению обратных задач в теории и практике синтеза широкополосных рентгеновских зеркал, предназначенных для управления пучками СИ, ЭУФ литографии и оптики Гёбеля.

7. Разработать аналитическую теорию дифракции рентгеновского излучения от ламеллярных многослойных структур, справедливую для любого числа слоев структуры и произвольной формы ламеллы, и оптимизировать их параметры для задач РФА.

Научная новизна

1. Впервые теория возмущений по высоте шероховатостей применена для анализа экспериментальных данных по рассеянию ЖР и МР излучения и холодных нейтронов. Обосновано применение этой теории для рентгеновского диапазона длин волн. Показано, что только теория возмущений позволяет определить параметры шероховатой поверхности (PSD-функцию) однозначным образом. Показано, что теория возмущений позволяет объяснить все основные особенности отражения и рассеяния рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей, такие как пик и анти-пик Ионеды, кажущееся увеличение высоты шероховатостей при предельно малых углах скольжения зондирующего пучка, переход от фактора Нево-Кроса (НК) к фактору Дебая-Валлера (ДВ) в выражении для коэффициента отражения при увеличении радиуса корреляции высот шероховатостей от нуля до бесконечности, а также поправки к фактору Нево-Кроса при малых, но конечных радиусах корреляции и, наконец, особенности коэффициента отражения при предельно малых углах скольжения зондирующего пучка, не описываемые ни фактором ДВ, ни фактором НК.
2. Разработаны методики определения скэйлинговых экспонент по in-situ измерениям рентгеновского рассеяния от растущих (эродирующих) поверхностей. Впервые в рентгеновском эксперименте наблюдался коллапс PSD-функций - одного из интересных предсказаний скэйлинговой теории роста (эрозии) пленок. Разработаны методики определения всех трех PSD-функций тонкой пленки из измерений набора индикатрис рентгеновского рассеяния, включая PSD-функцию внутренней границы раздела и кросс-корреляционную PSD-функцию.
3. Получено точное решение фазовой проблемы в in-situ рентгеновской рефлектометрии растущих слоистых структур. В отличие от существующих подходов, описанных в литературе, метод применим для поглощающих материалов и не требует дополнительных предположений о структуре объекта.

4. Разработан самосогласованный подход к исследованию 3D структуры тонкопленочных покрытий. Подход позволяет определить одновременно как профиль диэлектрической проницаемости по глубине, так и все три PSD-функции пленочных шероховатостей.
5. Разработан новый подход к обратной задаче синтеза широкополосных многослойных зеркал рентгеновского диапазона, основанный на комбинации аналитического и численного подходов. Проведен анализ конструкции и оптических свойств широкополосных многослойных зеркал применительно к задачам управления пучками СИ, широкоапертурной оптики нормального падения для ЭУФ литографии и увеличения эффективности использования излучения точечных источников (оптика Гёбеля).
6. Разработана аналитическая теория дифракции МР излучения от ламеллярных многослойных структур (ЛМС). Идентифицирован одномодовый режим работы ЛМС, при котором отсутствует связь между различными порядками дифракции. В результате коэффициент отражения от одномодовой ЛМС оказывается таким же, как у исходной многослойной структуры, а ширина пика отражения может быть сколь угодно мала.

Практическая ценность работы

1. Разработанные в диссертации подходы позволяют проводить количественные исследования 3D структуры слоистых покрытий без привлечения каких-либо априорных предположений о внутренней структуре объектов. Разработанные методы рентгеновского контроля были использованы для in-situ исследований процессов роста и ионного травления пленок ряда материалов, широко используемых в рентгеновской оптике и микроэлектронике. В некоторых случаях были определены нелинейные дифференциальные уравнения роста/эрозии, что открывает новые перспективы по численному моделированию этих процессов и нахождению оптимальных технологических условий роста/эрозии поверхностей, включая их сглаживание.
2. Разработанные подходы к конструированию широкополосных многослойных зеркал, основанные на комбинации аналитического и численного расчетов, позволяют оптимизировать конструкцию МИС для получения любого, даже очень сложного, спектрального или углового профиля кривой отражения, а также для получения максимального интегрального коэффициента отражения с учетом функции источника. Разработанные методы позволяют сконструировать широкополосные зеркала для самых разных практических приложений и, в частности, зеркала для управления пучками СИ, зеркала

Гёбеля для увеличения эффективности использования излучения рентгеновских трубок и зеркала для высокоапертурной оптики в ЭУФ литографии. С помощью разработанного программного обеспечения были сконструированы (а затем и изготовлены) широкополосные W/B₄C, W/Si, Ni/B₄C и Mo/Si зеркала для ЖР и МР диапазонов длин волн, проведен анализ экспериментальных данных и выработаны рекомендации по дальнейшему совершенствованию технологии изготовления широкополосных МИС.

3. Разработанное программное обеспечение (ПО), основанное на методе связанных волн, позволяет рассчитать и оптимизировать параметры ламеллярных многослойных структур с любым числом периодов МИС, произвольным распределением толщины слоев МИС по глубине и произвольной формой ламелл. Идентифицирован одномодовый режим работы ЛМС, который обеспечивает наивысшую эффективность (коэффициент отражения) ЛМС при сколь угодно большом ее спектральном (или угловом разрешении). С помощью разработанного ПО были сконструированы (а затем и изготовлены) W/Si ЛМС, предназначенные для использования в РФА легких элементов (от кремния до бора), оптимизированы их параметры, проведен анализ экспериментальных данных и выработаны рекомендации по дальнейшему совершенствованию технологии изготовления ЛМС.

Разработанные в диссертации методы и подходы уже в течение многих лет активно используются в Институте кристаллографии РАН, Физическом институте РАН, Всероссийском научно-исследовательском институте технической физики (РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск), НИИ физики СПбГУ, Европейском центре синхротронных исследований (Гренобль, Франция), Институте физики плазмы (Ньювихайн, Нидерланды), Университете Твенте (Энчедэй, Нидерланды), Институте прикладной оптики и точной механики (Йена, Германия), Университете Тонгжи (Шанхай, КНР), Европейском рентгеновском лазере на свободных электронах (Гамбург, Германия).

На защиту выносятся следующие положения:

1. Применение теории возмущений по высоте шероховатостей для исследования особенностей дифракции РИ от шероховатых слоисто-неоднородных сред и анализа экспериментальных данных по отражению и рассеянию РИ.
2. Методики определения скэйлинговых экспонент и PSD-функций границ раздела сред в in-situ исследованиях шероховатости растущих/эродирующих поверхностей.

3. Точное решение фазовой проблемы в in-situ рефлектометрии растущих слоистых структур.
4. Самосогласованный безмодельный подход к исследованию 3D структуры слоистых образцов.
5. Аналитическая теория отражения РИ от многослойных структур с монотонно изменяющимся периодом и основанный на ней подход к проблеме синтеза (конструирования) широкополосных рентгеновских зеркал.
6. Аналитическая теория отражения и дифракции РИ от ламеллярных многослойных структур, работающих в одномодовом режиме.

Личный вклад автора

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Идея о возможности применения теории возмущений по высоте шероховатостей для описания отражения РИ от шероховатых поверхностей и использования интегральной формы волнового уравнения для вывода формул теории возмущений была впервые высказана А.В. Виноградовым, в соавторстве с которым были написаны первые теоретические статьи на эту тему [А1-А4]. Постановка и разработка всех остальных задач и теоретических подходов проведена лично автором. Все программное обеспечение для расчетов разработано и написано лично автором. Модельные расчеты проведены или лично автором, или под его непосредственным руководством с помощью разработанных автором теоретических подходов и методов. Хотя сам автор не проводил рентгеновские измерения, он принимал непосредственное участие в постановке описанных в диссертации экспериментов, многие из которых были предложены и спланированы лично автором. Анализ результатов экспериментов проведен лично автором или под его непосредственным руководством на основе разработанных автором методик.

Экспериментальные кривые отражения и рассеяния, обсуждаемые и анализируемые в диссертации, были получены в ЖР диапазоне длин волн В.Е. Асадчиковым и Ю.С. Кривоновым (разделы 1.1 и 1.3.6), В.Е. Асадчиковым, Б.С. Роциным и Ю.О. Волковым (раздел 2.1 и 3.3.6), E. Ziegler, L. Peverini (разделы 1.4, 2.2.6, 2.3.2, 2.3.3, 2.4.2), а в МР диапазоне длин волн В.А. Слемзиным (раздел 1.1), Е.О. Филатовой и А.А. Соколовым (раздел 2.5), А. Якшиным и E. Zoethout (раздел 3.3.6) и R. van der Meer (раздел 3.5.7). Атомно-силовые измерения выполнены А. Duparré (раздел 1.2.5) и L. Peverini (разделы 1.2.6 и 1.4.4) . Элек-

тронно-микроскопические изображения получены А.А. Соколовым (раздел 2.5) и R. van der Meer (раздел 3.5.6).

Анализ ряда экспериментальных данных проведен совместно с V. de Rooij-Lohman (раздел 1.4.6), Е.Н. Рагозиным и А.С. Пирожковым (раздел 3.3.6) и R. van der Meer (раздел 3.5.7). Некоторые из модельных расчетов проведены совместно с И.Н. Букреевой (раздел 3.3.3), А.Ю. Карабековым (раздел 1.3.5) и М.В. Пятахиным (раздел 1.2.5).

Существенная часть представляемой работы была выполнена в рамках проектов, поддержанных РФФИ (гранты 93-02-3254, 97-02-17870, 03-0239000) и Международным научно-техническим центром (гранты ISTC 139-95, 1051-99, 3124-06), в которых автор являлся руководителем.

Достоверность полученных результатов и апробация работы

Достоверность предложенных методов и решений подтверждается сравнением с результатами, полученными другими теоретическими методами, а также экспериментально.

Результаты, полученные в диссертации, были представлены на целом ряде Всероссийских и Международных конференций, среди которых укажем следующие: Международные конференции по физике рентгеновских многослойных структур (PXRMS, Шамони, Франция, 2000, 2002; Саппоро, Япония, 2006; Биг Скай Ресорт, США, 2008); Международная конференция по рентгеновской дифракции и изображающей оптике высокого разрешения (ХТОР, С.-Петебург, 2012); Международные симпозиумы по оптической технологии (SPIE, Сан-Диего, США, 1989, 1991, 1994, 1998, 2000, 2001, 2011; Прага, 2013); Международная конференция по рентгеновскому и нейтронному поверхностному рассеянию (Дубна, 1993); Международные конференции по рентгеновским лазерам (Шлиеерсее, Германия, 1992; Сант-Мало, Франция, 2000); Международный конгресс по рентгеновской оптике и микроанализу (Манчестер, Великобритания, 1992); Европейский оптический симпозиум (EUROPTO, Берлин, 1999); Международная конференция по синхротронному излучению (Новосибирск, 2006); Международная конференция по экспериментальной механике (Александрополис, Греция, 2007); Конференция европейского оптического общества по дифракционной оптике (Колли, Финляндия, 2010); Всероссийские конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучения, нейтронов и электронов для исследования материалов (Дубна, 1997, Москва 1999, 2001, 2011); Всероссийские совещания по рентгеновской оптике (Н. Новгород, 1998, 1999, 2001, 2003, 2004; Черноголовка, 2008, 2010); Международные симпозиумы по нанофизике и наноэлектронике (Н. Новгород, 2008, 2009); Международные научные семинары “Современные методы анализа дифракционных данных” (В. Новгород, 2008, 2011, 2013);

Международные молодежные научные школы-семинары “Современные методы анализа дифракционных данных (дифракционные методы для нанотехнологий)” (В. Новгород, 2008, 2011, 2013); Ежегодные конференции голландского общества FOM (FOM-Decemberdagen, Велдховен, 2005, 2011).

Результаты, полученные в диссертации, неоднократно докладывались и обсуждались на научных семинарах Института кристаллографии РАН, Физического института РАН, Физико-технологического института РАН, физического факультета и вычислительного центра МГУ им. М.В. Ломоносова, Всероссийского НИИ технической физики (Снежинск), Европейского центра синхротронных исследований (ESRF, Гренобль, Франция), Института физики плазмы (Ньювихайн, Нидерланды), Института прикладной оптики и точной механики (Йена, Германия), Университета Твенте (Энчедэй, Нидерланды), Университета Тонгжи (Шанхай, КНР), Европейского рентгеновского лазера на свободных электронах (XFEL, Гамбург, Германия), а также на конкурсе научных работ Института кристаллографии РАН в 2012 г., где были отмечены 1-й премией.

Публикации

Основные результаты исследований по теме диссертационной работы представлены в 63 публикациях, включая отдельные главы двух коллективных монографий и 43 статьи в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК для защиты докторских диссертаций, 6 из которых написаны автором единолично.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, перечня основных результатов и выводов. Общий объем диссертации составляет 356 страниц, включая 168 рисунков, 11 таблиц, список литературы из 225 наименований и список публикаций автора по теме диссертации из 63 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во Введении обоснована актуальность темы исследований, изложены цели работы, отражена научная новизна и практическая значимость полученных результатов, приведены основные положения, выносимые на защиту, и краткая аннотация работы.

В первой главе диссертации рассматриваются особенности отражения РИ от шероховатых сред и, в первую очередь, те из них, которые не наблюдаются в рассеянии видимого

излучения, а также описываются методики извлечения информации из экспериментальных данных по отражению и рассеянию РИ.

Получено обобщение оптической теоремы при дифракции РИ от шероховатой слоисто-неоднородной среды.

Доказано, что как Борновское приближение с искаженными волнами (DWBA), так и теория возмущений по высоте шероховатостей обеспечивают строгое выполнение закона сохранения энергии для произвольной непоглощающей слоисто-неоднородной среды, если индикатриса рассеяния в вакуум и в глубь среды рассчитываются в первом порядке DWBA или теории возмущений, а коэффициенты зеркального отражения и прохождения - во втором.

Проведено сравнение расчетов индикатрисы рассеяния РИ от одиночной поверхности в рамках различных подходов. Прежде всего, получено выражение для индикатрисы рассеяния в рамках строгого DWBA приближения, в котором, в отличие от подходов, описанных в литературе [7, 8], не делается никаких упрощающих предположений о структуре поля невозмущенной волны вблизи поверхности. Для проинтегрированной по азимутальному углу индикатрисы рассеяния, которая обычно измеряется в рентгеновском эксперименте, и в предположении изотропной поверхности это выражение имеет вид

$$\Pi(\theta) = \frac{1}{W_0} \frac{dW}{d\theta} = \frac{k^4 |1 - \varepsilon_+|^2 \sigma^2}{2\pi^2 k_-(q_0)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n \cdot n!} |K_{n-1}(q, q_0)|^2 \int c^n(\rho) \cos(2\pi p \rho) d\rho \quad (1)$$

$$2\pi p = |q_0 - q|; \quad q_0 = k \cos \theta_0; \quad q = k \cos \theta; \quad k = 2\pi/\lambda$$

где W_0 - мощность падающего излучения, dW - мощность излучения, рассеянного в интервал углов $d\theta$, ε_+ - диэлектрическая проницаемость вещества, p - пространственная частота, $c(\rho)$ - нормированная на единицу корреляционная функция шероховатостей, σ - их среднеквадратичная высота, θ_0 и θ - угол скольжения падающей и рассеянной волны, соответственно. Коэффициенты K_n определены следующим образом:

$$K_n(q, q_0) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n\left(\frac{\zeta}{\sigma\sqrt{2}}\right) \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2\sigma^2}\right) \psi_0(\zeta, q_0) \psi_0(\zeta, q) d\zeta \quad (2)$$

(где функция $\psi_0(z)$ характеризует поле невозмущенной волны, а $H_n(x)$ - полиномы Эрмита) и легко могут быть рассчитаны с использованием рекуррентных соотношений, выведенных в диссертации.

Если в (2) заменить точное волновое поле в вакууме на аналитическое продолжение поля в веществе, то интегралы (2) рассчитываются в явном виде, а ряд в (1) суммируется точно. Тогда получим выражение

$$\Pi_{SA}(\theta) = \frac{k^4 |1 - \varepsilon_+|^2 |t(q)t(q_0)|^2}{4\pi k_-(q_0) |\kappa_1|^2} \exp(-\sigma^2 \text{Re } \kappa_1^2) \times \int \cos(2\pi p \rho) \cdot [\exp(\sigma^2 |\kappa_1|^2 c(\rho)) - 1] d\rho$$

$$\kappa_1 = \kappa_+(q_0) + \kappa_+(q) \quad \kappa_+(q) = \sqrt{k^2 \varepsilon_+ - q^2} \quad (3)$$

которое совпадает с тем, которое было выведено в [7] и широко используется в литературе (приближение Синха, SA \equiv Sinha' Approximation).

Отметим, что вывод выражений (1)-(3) существенным образом основывался на предположении о нормальном распределении высот шероховатостей, которое часто не соответствует реальности [9], [A22].

Наконец, разложив (1)-(2) в ряд по высоте шероховатостей и ограничиваясь первым членом, получим очень простое выражение для индикатрисы рассеяния, проинтегрированной по азимутальному углу:

$$P_{PT}(\theta) = \frac{k^3 |1 - \varepsilon|^2}{16\pi \sin \theta_0} |t(\theta_0)t(\theta)|^2 \text{PSD}_{1D}(p); \quad t(\theta) = \frac{2\kappa(q)}{\kappa_-(q) + \kappa_+(q)} \quad (4)$$

где t - амплитудный коэффициент прохождения (амплитуда поля невозмущенной волны на идеально гладкой поверхности). $\text{PSD}(p)$ - спектральная плотность мощности шероховатостей, связанная с их корреляционной функцией $C(\rho)$ косинус-преобразованием Фурье $\text{PSD}(p) = 4 \int C(\rho) \cos(2\pi p\rho) d\rho$. Выражение (4) может быть непосредственно получено из обобщенного борновского ряда для индикатрисы рассеяния и в отличие от формул DWBA не зависит от функции распределения высот шероховатостей. Более того, выражение (4) показывает, что PSD-функция шероховатостей может быть найдена непосредственно из экспериментальной индикатрисы рассеяния без использования каких-либо моделей. В то же время, в приближении DWBA (или даже его упрощенной версии SA) необходимо использовать ту или иную модель корреляционной функции. Тем самым, применение теории возмущений для анализа экспериментальных данных выглядит намного более предпочтительным.

Показано, что теория возмущений применима в случае, когда параметр Рэлея $\eta_R = 4\pi\sigma \sin \theta_0/\lambda$ не превышает единицу, т.е. среднеквадратичная высота шероховатостей σ не превышает 1.5 - 3 нм (значение σ может быть больше 1.5 нм для легких материалов), если угол скольжения зондирующего пучка θ_0 порядка критического угла полного внешнего отражения (ПВО). Угол рассеяния может быть любым в случае фрактальной поверхности, когда PSD-функция шероховатостей убывает по обратному степенному закону при увеличении пространственной частоты. Продемонстрировано, что теория возмущений, несмотря на свою очень простую форму, зачастую лучше согласуется с точным DWBA по сравнению с упрощенным подходом Синха [7], наиболее часто используемым в литературе. Пример дан на рис.1а.

Показано, что существует оптимальная длина волны излучения $\lambda \sim 16\sigma$, при которой теория возмущений описывает индикатрисы рассеяния с точностью не худшей 10% во всем

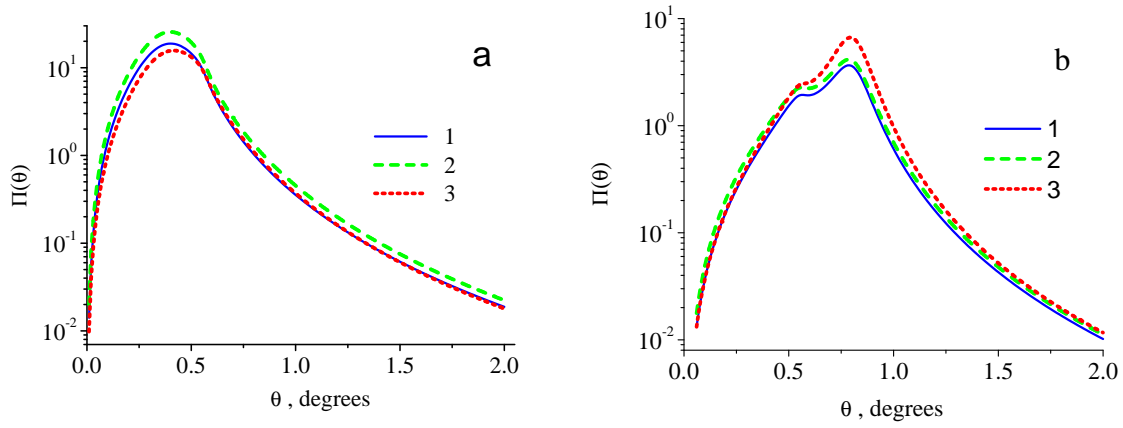


Рис. 1. Индикатриса рассеяния рентгеновского излучения $\Pi(\theta)$ от золотого отражающего покрытия на длине волны $\lambda = 0.154$ нм, рассчитанная с использованием формул DWBA (1), SA (2) и теории возмущений (3). Расчеты проведены для случая падения зондирующего пучка в области ПВО при $\theta_0 = 0.3^\circ$ (a) и вне ее при $\theta_0 = 0.8^\circ$ (b). Корреляционная функция имеет вид $C(\rho) = \sigma^2 \exp(-\rho/\xi)$ при $\sigma = 1$ нм и $\xi = 1$ мкм. Параметр Рэлея равен $\eta_R \approx 0.43$ для рис.а и $\eta_R \approx 1.1$ для рис.б.

диапазоне углов рассеяния для PSD-функции любого вида, причем максимальная регистрируемая в эксперименте пространственная частота достигает значения $p_{max} \sim 1/(8\sigma)$. В случае сверхгладких поверхностей при значении $\sigma \sim 0.1 - 1$ нм, оптимальная длина волны лежит в МР диапазоне длин волн.

Показано, что описание коэффициентов зеркального отражения R и интегрального рассеяния TIS с помощью фактора Дебая-Валлера, разложенного в ряд до σ^2 , а именно, $R = R_0 [1 - (4\pi\sigma \sin \theta_0/\lambda)^2]$ и TIS = $R_0 \cdot (4\pi\sigma \sin \theta_0/\lambda)^2$, где R_0 - коэффициент отражения в отсутствие шероховатостей, справедливо для произвольной слоисто-неоднородной среды с конформными (повторяющимися по глубине) шероховатостями и для произвольного распределения их высот при условии, что радиус корреляции шероховатостей в латеральном направлении ξ достаточно большой, так что угловая ширина индикатрисы рассеяния меньше размера особенностей, наблюдаемых на кривой отражения. Это означает, что интегральный коэффициент отражения $R_\Sigma = R + \text{TIS}$ от среды с длиннопериодными конформными шероховатостями очень близок к коэффициенту отражения от идеально гладкой среды.

Показано, что описание коэффициента отражения от границы раздела сред с исчезающе малым радиусом корреляции шероховатостей $\xi \rightarrow 0$ с помощью фактора Нево-Кроса справедливо только для нормального распределения высот шероховатостей. Если же это распределение отличается от нормального, то коэффициент зеркального отражения вне области ПВО может отличаться на порядки величины от значения, предсказываемого формулой Нево-Кроса.

Таблица 1. Выражения для коэффициентов интегрального рассеяния в вакуум (TIS) и в глубь вещества (TIS₊), а также для поправок к коэффициентам зеркального отражения (δR) и прохождения (δT), рассчитанных для ряда предельных значений параметров $\mu_0 = \pi\xi\theta_0^2/\lambda$ и $\mu_c = \pi\xi(1 - \varepsilon_+)/\lambda$. Выражения приведены для случая непоглощающей среды $\text{Im}\varepsilon_+ = 0$ в предположении $\text{Re}\varepsilon_+ < 1$. Числовые параметры f_1 и f_2 определяются явным видом PSD-функции, а параметры $k_-(q_0) = k \sin \theta_0$ и $k_+(q_0) = k\sqrt{\varepsilon_+ - \cos^2 \theta_0}$.

N	μ_0 и μ_c	TIS/R_F	TIS₊/R_F
1	$\mu_0 \gg 1$	$[2k_-(q_0)\sigma]^2$	$4k_-(q_0)\text{Re}k_+(q_0)\sigma^2$
2	$\mu_0 \ll 1; \mu_c \gg 1$	$f_1kk_-(q_0)\sigma^2/\sqrt{k\xi}$	0
3а	$\mu_0 < \mu_c \ll 1$	$f_2kk_-(q_0)\sigma^2\sqrt{k\xi}(1 - \varepsilon_+)$	$f_2kk_-(q_0)\sigma^2\sqrt{k\xi}(1 - \varepsilon_+)$
3б	$\mu_c \ll \mu_0 \ll 1$	$4f_2k_-^3(q_0)\sigma^2\sqrt{\xi/k}$	$4f_2k_-^3(q_0)\sigma^2\sqrt{\xi/k}$
N	μ_0 и μ_c	$\delta R/R_F$	$\delta T/R_F$
1	$\mu_0 \gg 1$	$[2k_-(q_0)\sigma]^2$	$4k_-(q_0)\text{Re}k_+(q_0)\sigma^2$
2	$\mu_0 \ll 1; \mu_c \gg 1$	$f_1kk_-(q_0)\sigma^2/\sqrt{k\xi}$	0
3а	$\mu_0 < \mu_c \ll 1$	$2f_2kk_-(q_0)\sigma^2\sqrt{k\xi}(1 - \varepsilon_+)$	0
3б	$\mu_c \ll \mu_0 \ll 1$	$4k_-(q_0)k_+(q_0)\sigma^2$	$-4k_-(q_0)k_+(q_0)\sigma^2 + 8f_2k_-^3(q_0)\sigma^2\sqrt{\xi/k}$

Проанализирована взаимосвязь между четырьмя каналами дифракции рентгеновского излучения от шероховатой поверхности (рассеяние в вакуум и в глубь среды, зеркальное отражение и прохождение). Различные предельные случаи сведены в табл.1. Показано, что при достаточно большом угле скольжения зондирующего пучка θ_0 (параметр $\mu_0 \equiv \pi\xi\theta_0^2/\lambda \gg 1$), когда ширина индикатрисы рассеяния мала по сравнению с θ_0 , каналы дифракции в вакуум и в глубь среды независимы в том смысле, что полное интегральное рассеяние в вакуум как раз соответствует убыли из зеркально отраженного пучка. Если же параметр μ_0 мал (индикатриса рассеяния “ложится” на поверхность), то взаимосвязь между каналами дифракции более сложная: при падении пучка в области ПВО убыль из зеркальной компоненты обеспечивает рассеяние как в вакуум, так и в глубь среды. Если пучок падает вне области ПВО, то уменьшение зеркально отраженной компоненты объясняется увеличением коэффициента прохождения (эффективный переходной слой, образованный как результат усреднения шероховатостей), а интенсивность рассеяния мала и обеспечивается некоторым уменьшением коэффициента прохождения.

Проанализирована дифракция РИ от шероховатых поверхностей при предельно малых

углах скольжения падающего излучения (строки 2 и 3а в табл.1). Показано, что этот случай не может быть описан ни фактором Дебая-Валлера, ни фактором Нево-Кроса. В частности, коэффициент интегрального рассеяния TIS становится пропорциональным $\sin \theta_0$ в первой степени в отличие от формулы Дебая-Валлера, в которой $TIS \sim \sin^2 \theta_0$. В результате, если определить среднеквадратичную высоту шероховатости σ из измерений интегрального рассеяния в рамках теории Дебая-Валлера или Нево-Кроса, то значение σ быстро увеличивается при уменьшении угла скольжения θ_0 .

Показано, что уже в рамках простейшей модели скачкообразной поверхности теория возмущений объясняет появление пика и анти-пика Ионеды, а также возможность превышения интегрального коэффициента отражения над френелевским при падении пучка вне области ПВО без каких-либо дополнительных предположений о структуре поля волны вблизи поверхности.

Проанализировано рассеяние РИ от шероховатой поверхности конечных размеров L , когда индикатриса рассеяния является случайной функцией и зависит от конкретной реализации поверхности. Получено условие, когда конечными размерами поверхности можно пренебречь, т.е. индикатриса рассеяния от данной поверхности не отличается от усредненной по реализациям: $L^2 \gg \lambda^2 / (2 \sin \theta_0 \delta \Omega)$. Это условие зависит от угловой ширины приемной щели детектора $\delta \Omega$, причем чем точнее прописывается форма индикатрисы рассеяния, тем больше статистическая неопределенность измерений, связанная с конечным размером поверхности.

Рассмотрены особенности рассеяния рентгеновского излучения от тонкой шероховатой пленки, не имеющие аналогов при рассеянии от одиночной поверхности и обусловленные интерференционными эффектами. Среди них: отсутствие рассеяния от внешней поверхности пленки и интерференционное подавление рассеяния. Эти эффекты могут быть полезны как при исследовании шероховатостей пленки, так и при разработке рентгенооптических элементов с предельно малым рассеянием.

В рамках теории возмущений проанализированы особенности рентгеновского рассеяния от шероховатой периодической многослойной структуры. В отличие от всех известных подходов, где индикатриса рассеяния представляется в виде двойной суммы парциальных амплитуд рассеяния от каждой границы раздела, это суммирование проведено в явном виде и получены компактные формулы, описывающие индикатрису рентгеновского рассеяния в предположении справедливости линейной модели роста пленок. Полученные выражения описывают все особенности рассеяния от многослойных структур, наиболее интересной среди которых являются квази-брэгговские пики, обусловленные интерференцией волн, рассеянных от разных границ раздела с коррелированными шероховатостями. Показано, что для

извлечения информации о ростовых параметрах многослойных структур необходимо производить измерения рассеяния на большие углы. Имеющиеся в нашем распоряжении экспериментальные данные указывают на высокую коррелированность межслоевых шероховатостей исследованных структур в измеряемом в эксперименте диапазоне пространственных частот.

Выведено уравнение переноса лучевой эффективности при распространении пучка РИ вдоль шероховатой вогнутой поверхности в режиме шепчущей галереи. Показано, что влияние шероховатостей на эффективность передачи пучка не слишком велико несмотря на большее число отражений РИ: необходимо, чтобы высота шероховатостей не превышала 1.5-2 нм. Дело заключается в том, что рассеянное излучение не теряется, а в свою очередь поворачивается вогнутой поверхностью и дает существенный вклад в интенсивность выходящего излучения.

На основе теории возмущений разработаны методики определения параметров шероховатости применительно к *in-situ* рефлектометрии растущих или эродирующих поверхностей без каких-либо априорных предположений о модели роста/эрозии. Среди них

- Определение скэйлинговых экспонент из анализа асимптотического поведения PSD-функции в области высоких пространственных частот, зависимости среднеквадратичной высоты шероховатостей от времени напыления/травления и наблюдения коллапса (сжатия) “перенормированных” PSD-функций в единую универсальную кривую, что иногда позволяет определить вид нелинейного дифференциального уравнения, описывающего процесс роста/эрозии.
- Однозначное определение двух PSD-функций (внешней поверхности пленки и кросс-корреляционной) из одной измеренной индикатрисы рассеяния при падении зондирующего пучка вне области ПВО.
- Однозначное разделение шероховатостей внешней поверхности пленки на две составляющие, одна из которых связана с шероховатостью подложки, а вторая - собственная шероховатость пленки, индуцированная случайным характером процессов роста/эрозии.
- Демонстрация независимости скэйлинговых экспонент, т.е. уравнения роста или эрозии, от шероховатости исходной подложки (на примере роста пленок Al_2O_3 и ионного травления кремниевой подложки).

Продемонстрировано, что наиболее естественный и корректный подход к обработке данных по рентгеновскому рассеянию с целью извлечения информации о поверхностных шероховатостях состоит в использовании формул теории возмущений и определении PSD-функции

непосредственно из измеренной индикатрисы рассеяния безо всяких предположений о ее виде и о распределении высот шероховатостей. Если поверхность является слишком грубой, то следует увеличить длину волны зондирующего пучка (например, перейти от ЖР диапазона длин волн к МР) с тем, чтобы остаться в пределах применимости теории возмущений, поскольку в ином случае необходимо быть уверенным в том, что высота шероховатостей распределена по нормальному закону, а функция корреляции имеет тот или иной модельный вид. Более общие и точные теоретические подходы, в свою очередь, необходимы для контроля условий применимости теории возмущений в конкретном эксперименте.

Вторая глава диссертации посвящена разработке новых подходов к решению обратных задач рентгеновской рефлектометрии.

Разработан новый модельно независимый подход к определению профиля диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z)$ на основе измерений коэффициента отражения в зависимости от угла скольжения зондирующего пучка. Единственное, что предполагается в подходе - это наличие особых точек (границ раздела) на профиле диэлектрической проницаемости, в которых или сама функция $\varepsilon(z)$ (особая точка нулевого порядка), или ее n -ная производная испытывает скачкообразное изменение. Кроме того, пренебрегается поглощением излучения в веществе, т.е. толщина L слоистой пленки на поверхности подложки должна быть достаточно мала: $L \ll \lambda/(2\pi) \cdot \sqrt{\text{Re}(1 - \varepsilon)}/\text{Im}\varepsilon$.

Прежде всего, анализируя измеренную часть кривой отражения, оказывается возможным определить число особых точек на распределении $\varepsilon(z)$, расстояния между ними и, более того, значения скачков диэлектрической проницаемости в особых точках, т.е. построить адекватную и достаточно подробную модель отражающей среды. После этого можно определить и асимптотическое поведение амплитудного коэффициента отражения (не только его модуля, но и фазы) в области больших углов скольжения. Для анализа вводится следующая функция

$$F(x) = \frac{2^{2n+4}}{k^4(q_{max} - q_{min})} \int_{q_{min}}^{q_{max}} [q^{2n+4}R(q) - C] \cos(2qx) dq \quad (5)$$

$$C = \frac{1}{q_{max} - q_{min}} \int_{q_{min}}^{q_{max}} q^{2n+4}R(q) dq$$

где интегрирование проводится по измеряемому интервалу значений параметра $q = k \sin \theta$. Функция $F(x)$ осциллирует около нулевого значения, причем положения максимумов и минимумов зависят, вообще говоря, от значений q_{max} и q_{min} . В то же время имеется последовательность стабильных экстремумов, расположенных в фиксированных точках $x = h_{ij}$, соответствующих расстояниям между особыми точками n -ного порядка, независимо от зна-

чений q_{max} и q_{min} , причем значение $F(x)$ в этих точках равно

$$F(h_{ij}) = \Delta^{(n)}(z_i)\Delta^{(n)}(z_j) + (\text{нерезонансные члены}) \quad (6)$$

и определяется значениями скачков функции $\varepsilon(z)$ (либо ее производной) в особых точках $\Delta^{(n)}(z_i)$. Кроме того, можно найти еще и сумму

$$\sum_j [\Delta^{(n)}(z_j)]^2 = \frac{2^{2n+4}}{k^4} C + (\text{нерезонансные члены}) \quad (7)$$

Нерезонансные члены уменьшаются пропорционально $1/(q_{max} - q_{min})$ при увеличении q_{max} . Тем самым, анализируя функцию $F(x)$ при разных q_{max} и q_{min} , оказывается возможным определить расстояния между всеми особыми точками, а также значения скачков диэлектрической проницаемости в этих точках. Пример дан на рис.2.

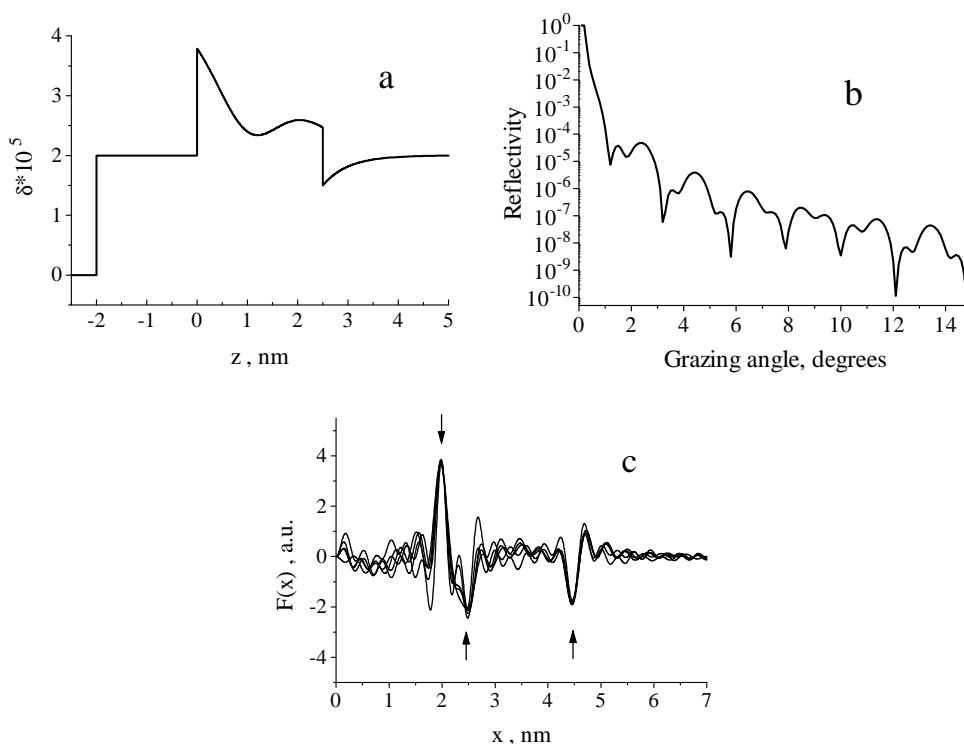


Рис. 2. Модельный профиль диэлектрической проницаемости $\delta(z) \equiv 1 - \varepsilon(z)$ (а), кривая отражения на длине волны $\lambda = 0.154$ нм (б) и набор функций $F(x)$, умноженных на 10^{10} и рассчитанных для разных значений q_{max} и q_{min} (в). Стационарные пики указаны стрелками. Они расположены в точках $x_1 = 2$, $x_2 = 2.5$ и $x_3 = 4.5$ нм. Следовательно, распределение $\delta(z)$ имеет три особые точки нулевого порядка, расстояния между которыми равны 2 нм и 2.5 нм.

Показано, что, используя специально разработанный алгоритм, возможно найти только те решения обратной задачи, которые описывают измеренную часть кривой отражения и, кроме того, обеспечивают требуемое поведение амплитудного коэффициента отражения в асимптотической области. Алгоритм основан на минимизации следующей функции невязки

(случай особых точек нулевого порядка):

$$MF = \sum_{j=1}^m [\log R(\theta_j) - \log R_{exp}(\theta_j)]^2 + Q \sum_{i \neq i_1, \dots, i_m} (\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)^2 \quad (8)$$

где $R_{exp}(\theta_j)$ и $R(\theta_j)$ - измеренное и рассчитанное значения коэффициента отражения при угле скольжения θ_j , m - число измерений и Q - параметр задачи, который должен быть максимально возможным, но таким, чтобы различие между измеренной и рассчитанной кривыми отражения еще не превышало ошибку измерений. Вторая сумма в (8) обеспечивает требуемое асимптотическое поведение коэффициента отражения при больших q . Суммирование проводится по всем подынтервалам, исключая особые точки $i = i_1, \dots, i_m$, где функция $\varepsilon(z)$ меняется скачком.

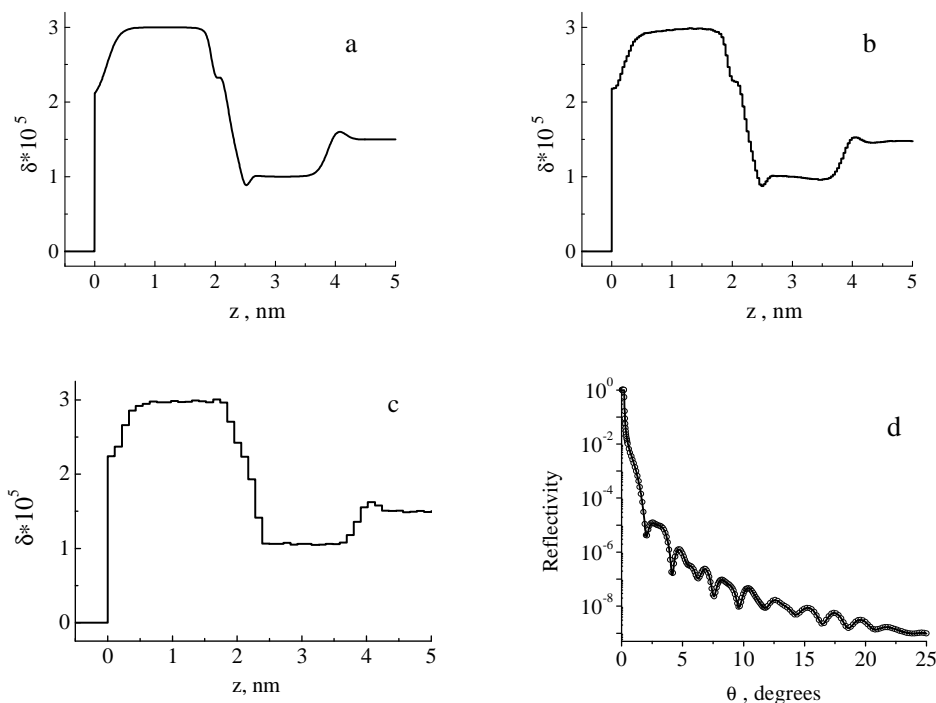


Рис. 3. Модельный (a) и реконструированные (b, c) профили диэлектрической проницаемости с особенностями размера 0.1 - 0.2 нм. Показана также и кривая отражения на длине волны $\lambda = 0.154$ нм (d) от модельного (кружки) и реконструированного (сплошная кривая) профиля $\delta(z) = 1 - \varepsilon(z)$. Угловый интервал измерений коэффициента отражения, принятый во внимание при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости, составлял 25° (b) или 6.5° (c).

Модельный пример, демонстрирующий уникальную чувствительность метода рентгеновской рефлектометрии, представлен на рис.3. Этот пример показывает, что даже очень малые особенности на распределении $\delta(z)$ могут быть реконструированы с высокой точностью, если кривая отражения измерена в достаточно широком угловом интервале. Показано, что минимальный размер особенности на распределении $\varepsilon(z)$, который еще может быть кор-

ректно реконструирован, составляет $(0.25 - 0.5)\lambda / \sin \theta_{max}$, где θ_{max} - максимальный угол скольжения, измеряемый в эксперименте.

Если различны все расстояния между особыми точками и попарные произведения скачков диэлектрической проницаемости в особых точках, то число возможных решений обратной задачи равно четырем, причем два из них приводят к значениям $\varepsilon(z)$, превышающим единицу, и могут быть сразу же отброшены. Решение, соответствующее реальности, может быть выбрано из оставшихся двух либо из общих физических соображений, либо на основе дополнительных экспериментов.

Разработанный подход был успешно применен к исследованию внутренней структуры пленок различных материалов на кремниевых подложках, включая тонкую структуру границ раздела, образующихся из-за диффузии, химических реакций или имплантации, и адгезионного слоя на поверхности образцов. Дополнительным доказательством правильности найденных решений является практически идеальное соответствие профилей $\varepsilon(z)$ для пленок различной толщины.

Разработан новый подход к решению фазовой проблемы рентгеновской рефлектометрии. Подход требует in-situ измерения коэффициента отражения от растущей слоистой структуры, так что как коэффициент отражения $R(t)$, так и его производная dR/dt известны в момент времени t . Этих двух чисел оказывается достаточно, чтобы определить комплексный амплитудный коэффициент отражения $r(t)$ в тот же момент времени, причем для определения фазы нет необходимости знать предисторию процесса роста.

Получено следующее выражение для временной зависимости коэффициента отражения от растущей пленки

$$\frac{dR}{dt} = -Aq(t) \frac{k}{\sin \theta} \left\{ f_1(t) [1 - R(t)] \text{Im}[r(t)] + f_2(t) \left[2R(t) + (1 + R(t)) \text{Re}[r(t)] \right] \right\} \quad (9)$$

где q - поток падающих частиц (на единицу площади за единицу времени), $f_1 - if_2$ - комплексный фактор атомного рассеяния, определяемый химическим составом падающего пучка. Постоянная $A = a_0 \lambda^2 / \pi$ выражается через классический радиус электрона a_0 и длину волны излучения λ . Если R и dR/dt известны, то (9) представляет собой алгебраическое уравнение, устанавливающее линейную зависимость между вещественной и мнимой частями амплитудного коэффициента отражения r . В общем случае как поток частиц q , так и его химический состав (f_1 и f_2) изменяются со временем. Решая уравнение (9) совместно с очевидным соотношением $R(t) = [\text{Re}(r(t))]^2 + [\text{Im}(r(t))]^2$ находим $\text{Re}(R(t))$ и $\text{Im}(R(t))$ непосредственно из экспериментальных данных без использования какой-либо модели отражающей среды.

При выводе уравнения (9) предполагалось, что внутренняя структура пленки не изме-

няется в течение временного интервала, необходимого для измерения производной dR/dt . Поэтому уравнение (9) справедливо на определенных стадиях роста пленки, но может быть неверно на других стадиях, когда, в частности, происходит имплантация или диффузия атомов. Кроме того, уравнение (9) выведено при важном предположении, что поляризуемость вещества $\varepsilon - 1$ пропорциональна его плотности. Поэтому это уравнение может быть использовано в рентгеновской или нейтронной рефлектометрии, но несправедливо, например, в видимом диапазоне.

В отличие от подходов, рассмотренных в литературе, метод справедлив и для поглощающей среды. Показано (на примере растущей пленки вольфрама), что in-situ измерения коэффициента отражения даже при фиксированном угле скольжения зондирующего пучка позволяют восстановить профиль плотности пленки, по крайней мере, в течение тех временных интервалов напыления, когда не происходит процессов имплантации или диффузии атомов.

Разработан самосогласованный подход к исследованию трехмерной структуры пленочных покрытий. Подход позволяет одновременно реконструировать профиль диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z)$ и определить статистические параметры шероховатостей (PSD-функции), основываясь на угловой зависимости коэффициента отражения и набора индикатрис рентгеновского рассеяния, измеренных при разных углах скольжения зондирующего пучка. Подход основан на специально разработанной итерационной процедуре, так что параметры шероховатости, найденные на предыдущей итерации, принимаются во внимание при реконструкции профиля диэлектрической проницаемости на последующей итерации и, наоборот, найденный профиль $\varepsilon(z)$ учитывается при определении PSD-функций исследуемого образца. Продемонстрирована быстрая сходимость итерационной процедуры: для исследованных гладких образцов две итерации оказались вполне достаточны. Подход существенным образом основан на измерениях интегрального коэффициента отражения вместо зеркального, что позволяет преодолеть проблему экстраполяции измеренной PSD-функции в область малых пространственных частот и, тем самым, проблему неоднозначности определения среднеквадратичной высоты шероховатости.

Разработанный самосогласованный подход был использован для сравнительных исследований 3D структуры пленок вольфрама после их напыления, ионного травления и окисления (рис.4-6). Показано, что плотность пленки, напыленной на Si подложку методом магнетронного распыления не постоянна по глубине, а составляет около 80% от плотности массива вблизи подложки и увеличивается до 95% на вершине пленки толщиной около 3 нм. Дальнейшее напыление плотность пленки не изменяет. Диффузия и/или имплантация атомов W

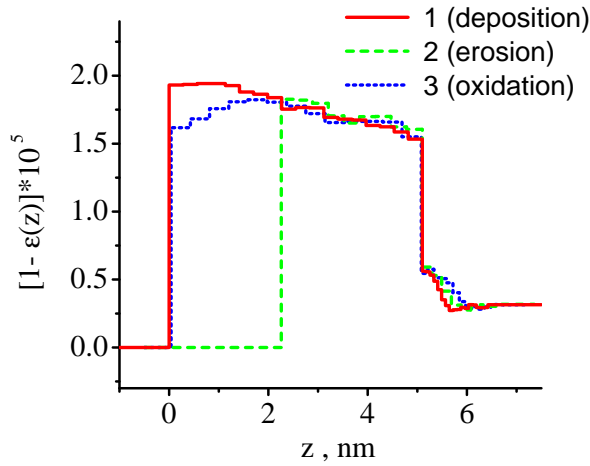


Рис. 4. Сравнение профилей диэлектрической проницаемости пленки вольфрама толщиной 5.1 нм непосредственно после напыления на кремниевую подложку (1), после стравливания верхнего слоя толщиной около 2.3 нм (2) и после окисления на воздухе в течение около 30 мин (3).

в подложку приводит к появлению интерслоя толщиной 0.7 нм. Напыление пленки приводит к развитию короткопериодных шероховатостей. Ионное травление пленки на глубину 2.3 нм не изменяет среднеквадратичную шероховатость пленки, но приводит к резкому уменьшению вертикальной корреляции между шероховатостями пленки и подложки. Ни напыление пленки, ни ее травление не изменило шероховатость подложки (в диапазоне пространственных частот до $3.5 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$, по крайней мере). Окисление приводит к сильному развитию короткопериодных шероховатостей и уменьшению вертикальной корреляции.

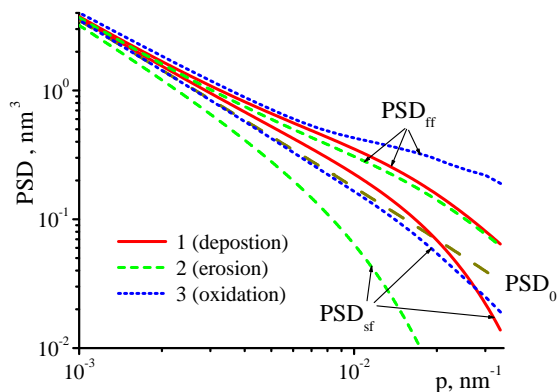


Рис. 5. PSD_{ff} -функции внешней поверхности и кросс-корреляционные PSD_{sf} -функции пленки вольфрама толщиной 5.1 нм (1), после стравливания верхнего слоя толщиной около 2.3 нм (2) и после окисления на воздухе в течение около 30 мин (3). Для сравнения PSD_0 -функция исходной кремниевой подложки тоже показана.

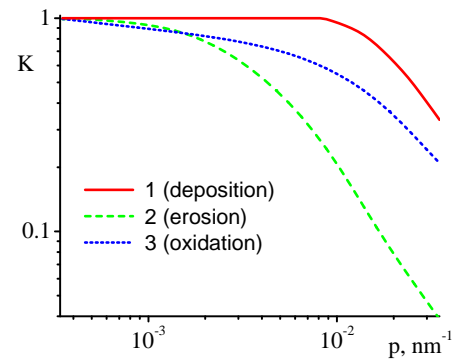


Рис. 6. Коэффициент вертикальной корреляции $K = PSD_{sf} / \sqrt{PSD_{ff} PSD_{ss}}$ шероховатостей подложки и пленки вольфрама толщиной 5.1 нм (1), после стравливания верхнего слоя пленки толщиной около 2.3 нм (2) и после окисления схожей пленки на воздухе в течение около 30 мин (3).

Продемонстрирована возможность восстановления профилей концентраций химических элементов, составляющих образец, а не только профиля диэлектрической проницаемости на фиксированной длине волны. Подход основан на одновременном анализе набора кривых

отражения, измеренных в зависимости от угла скольжения МР излучения при различных энергиях фотонов, лежащих между краями поглощения элементов.

В третьей главе диссертации рассматриваются обратные задачи синтеза (конструирования) аperiodических и ламеллярных многослойных структур.

Построена аналитическая теория отражения РИ от произвольной МИС с монотонно изменяющимся периодом, так что распределение диэлектрической проницаемости по глубине представляется в следующем общем виде:

$$\varepsilon(z) = \mu + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cos\left[2\pi n \int_0^z q(z') dz' + \pi n \Gamma\right]; \quad \mu = \Gamma \varepsilon_1 + (1 - \Gamma) \varepsilon_2; \quad B_n = 2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) \frac{\sin(\pi n \Gamma)}{\pi n}$$

где $q(z)$ - положительная, дифференцируемая и ограниченная на интервале $z \in [0, L]$ функция (по существу, q есть обратный период в точке z), а L - толщина многослойной структуры. Толщинный фактор Γ для простоты считается одним и тем же для всех пар слоев.

Основываясь на интегральной форме волнового уравнения, предполагая, что полоса отражения градиентной МИС значительно шире полосы отражения периодического зеркала, и используя метод стационарной фазы для расчета интегралов, получаем следующее выражение для коэффициента отражения:

$$R(\lambda) = \left| \frac{\eta(\lambda) \sqrt{2|q'(z)|} L \left[G\left(z \sqrt{2|q'(z)|}\right) + G\left((L-z) \sqrt{2|q'(z)|}\right) \right]}{|q'(z)| L^2 + 2\eta^2(\lambda) G^*\left(z \sqrt{2|q'(z)|}\right) G\left((L-z) \sqrt{2|q'(z)|}\right)} \right|^2 \exp[-4\text{Im}\kappa(\lambda)z] \quad (10)$$

$$\eta(\lambda) \equiv \frac{\pi L}{4 \lambda} \frac{B_1(\lambda)}{\sqrt{\mu(\lambda) - \cos^2 \theta}}; \quad G(x) = \int_0^x \cos\left(\frac{\pi}{2} t^2\right) dt - i \text{sign}(q'(z)) \int_0^x \sin\left(\frac{\pi}{2} t^2\right) dt$$

где $\kappa = 2\pi \sqrt{\mu - \cos^2 \theta} / \lambda$, функция G выражается через интегралы Френеля, а параметр $z = z(\lambda)$ определяет глубину, на которой происходит отражение излучения с длиной волны λ , и однозначно определяется уравнением $q(z) = \text{Re}\kappa(\lambda) / \pi$.

Если заменить интегралы Френеля на их асимптотическое значение $1/2$, то получим существенно более простое выражение, описывающее кривую отражения в среднем:

$$R(\lambda) = \left| \frac{2\eta(\lambda) \sqrt{|q'(z)|} L}{\eta^2(\lambda) + |q'(z)| L^2} \right|^2 \exp[-4\kappa_2(\lambda)z] \quad (11)$$

Выражения (10)-(11) справедливы для достаточно быстрого изменения периода в глубь структуры: $|q'(z)| > [\eta(\lambda)/L]^2$. Точность полученных выражений иллюстрируется рис.7.

Разработан новый подход к решению обратной задачи синтеза широкополосных многослойных зеркал рентгеновского диапазона, основанный на комбинации аналитического и

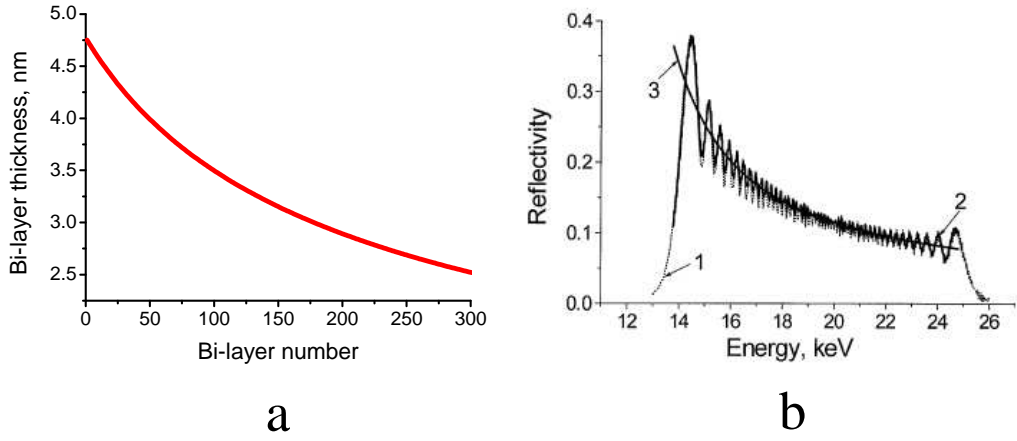


Рис. 7. (а) Изменение периода по глубине Cr/C МИС, определенного выражением $q(z) = q_0(1 + 0.9z/L)$ при $q_0 = 0.21 \text{ нм}^{-1}$ и $L = 1 \text{ мкм}$. Периоды отсчитываются от вершины структуры. (б) Коэффициент отражения от в зависимости от энергии рентгеновских квантов для угла скольжения падающего излучения равного 10 мрад. Расчеты проведены с помощью точного метода рекуррентных соотношений (кривая 1), а также с использованием аналитических выражений (10) (кривая 2) и (11) (кривая 3).

численного расчетов. Задача синтеза состоит в определении последовательности толщин слоев, составляющих МИС, которая обеспечивает наперед заданную спектральную или угловую зависимость коэффициента отражения. Исходя из упрощенного выражения (11), получена аналитическая итерационная процедура, позволяющая определить необходимое распределение толщины слоев МИС по глубине, которое обеспечивает заданную спектральную зависимость коэффициента отражения $R(\lambda)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} z_{2j+2} = z_{2j} + \pi/\text{Re}\kappa(\lambda_{2j}) \\ z_{2j+1} = z_{2j} + \Gamma(z_{2j+2} - z_{2j}) \\ \lambda_{2j+2} = \lambda_{2j} \pm 2\pi^2 F(\lambda_{2j}, z_{2j}) |d(\text{Re}\kappa(\lambda_{2j}))^2/d\lambda|^{-1} \\ F(\lambda, z) = \eta^2(\lambda)/L^2 \cdot (2 - \tau + 2\sqrt{1 - \tau})/\tau; \quad \tau \equiv R(\lambda) \exp[4\text{Im}\kappa(\lambda)z] \\ z_0 = 0; \quad \lambda_0 = \lambda_{\min} \text{ или } \lambda_{\max} \end{array} \right. \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (12)$$

Точки z_j соответствуют границе между слоями, а λ_j - длина волны, связанная с точкой z_j условием Брэгга $q(z) = \text{Re}\kappa(\lambda)/\pi$. Расчет начинается с верхнего слоя структуры. Выбор знака в выражении для λ_{2j+2} и одного из граничных условий для λ зависит от того, увеличивается или уменьшается период в глубь структуры. Похожие рекуррентные соотношения были получены и в случае, когда МИС должна обеспечить заданную угловую зависимость коэффициента отражения.

Аналитическое решение проблемы используется как начальное приближение для прямой компьютерной оптимизации с использованием функции невязки стандартного вида $MF =$

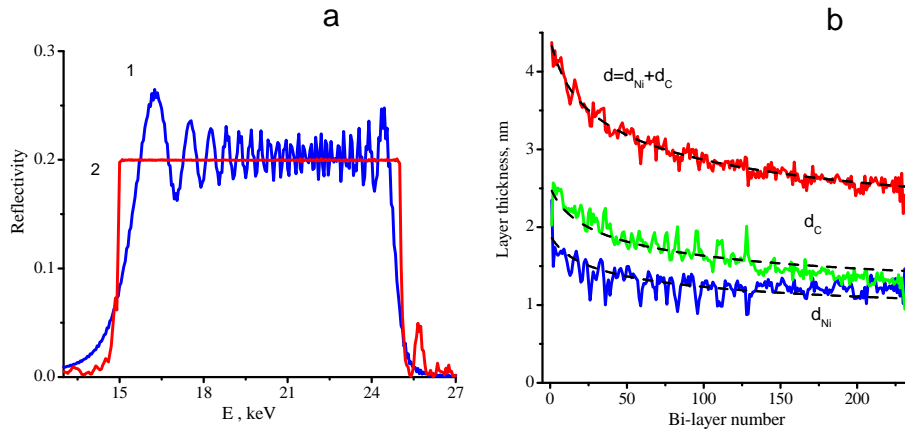


Рис. 8. Коэффициент отражения (a) и изменение периода по глубине Ni/C многослойного зеркала (b), оптимизированного на постоянный коэффициент отражения в спектральном диапазоне $E \in [15, 25]$ кэВ при $\theta = 10$ мрад. Толщины слоев были найдены с использованием рекуррентных соотношений (12) (пунктирные кривые на рис. b), а затем уточнены с помощью прямого численного алгоритма (сплошные кривые). Соответствующие им коэффициенты отражения показаны кривыми 1 и 2 на рис. a. Би-слои отсчитываются от вершины МИС.

$\sum [R_0(E_j) - R(E_j)]^2$, которая характеризует среднеквадратичное отклонение рассчитанного профиля коэффициента отражения $R(E)$ от желаемого $R_0(E)$. Такой подход позволяет преодолеть проблему глобальной минимизации, поскольку аналитическое решение оказывается очень хорошим начальным приближением даже в случае сложного профиля кривой отражения. Примеры представлены на рис. 8-10.

Проведен анализ конструкции и оптических свойств широкополосных градиентных зеркал применительно к задаче управления пучками СИ. Проведен выбор пар материалов для создания широкополосных зеркал с точки зрения максимально достижимого коэффициента отражения и минимального числа слоев структуры. Показано, что основным фактором, определяющим необходимое число слоев, является поляризуемость тяжелого (поглощающего) вещества, входящего в состав структуры. Правильный выбор тяжелого компонента структуры позволяет уменьшить требуемое число слоев более, чем в 10 раз. Коэффициент отражения и число слоев структуры слабо зависят от слабопоглощающего компонента, что существенно расширяет класс материалов, пригодных для изготовления широкополосных зеркал.

Продемонстрирована возможность создания ЭУФ зеркал с постоянным коэффициентом отражения в широком интервале углов падения. Коэффициент отражения достигает 60% на длине волны $\lambda = 13.5$ нм в интервале углов падения $[0, 18^\circ]$. Показано сильное влияние интерслоев на максимально достижимый коэффициент отражения на плато. Поэтому структуры со стабильными и контролируемыми границами раздела (такие как $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}$ и $\text{Mo}/\text{Mo}_2\text{C}/\text{Si}/\text{Mo}_2\text{C}$) выглядят более предпочтительными для практики.

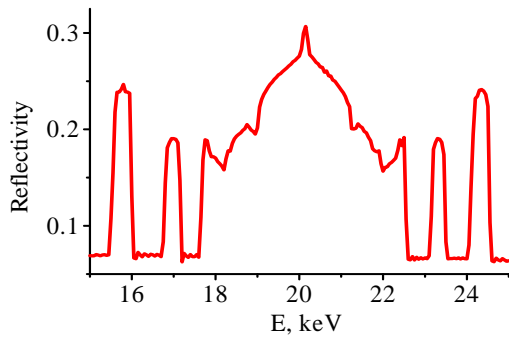
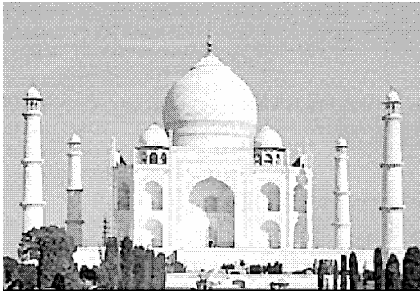


Рис. 9. Фотография мавзолея Тадж-Махал и кривая отражения, найденная как результат решения обратной задачи синтеза многослойных структур.

Исследованы факторы, ухудшающие оптическое качество широкополосных зеркал. Среди них: неточность оптических констант материалов и их плотностей, использованных при расчетах; влияние межплоскостных шероховатостей; невозможность нанесения сверхтонких слоев толщиной менее 0.6-0.8 нм; случайный разброс толщин слоев во время напыления структуры. Разработанный подход был успешно использован при практическом изготовлении широкополосных многослойных зеркал, работающих в ЖР и ЭУФ спектральных диапазонах.

Разработан общий подход для конструирования МИС, обеспечивающей максимальную интегральную эффективность отражения для произвольной функции источника. Подход основан на применении уравнения Эйлера-Лагранжа для нахождения экстремалей функционала и аналитическом уравнении для отражения рентгеновского излучения от широкополосной МИС. Получена аналитическая итерационная процедура, позволяющая определить распределение толщин слоев МИС по глубине. Показано, что численное уточнение конструкции МИС не имеет смысла, т.к. приводит к крайне незначительному увеличению эффективности за счет драматического усложнения распределения толщин слоев.

Разработана строгая теория дифракции рентгеновского излучения от ламеллярных мно-

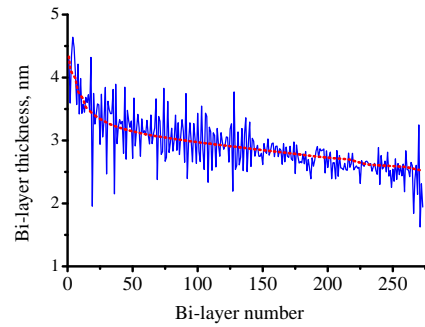


Рис. 10. Распределение толщин би-слоев, обеспечивающее требуемый профиль коэффициента отражения, показанный на соседнем рисунке. Расчеты проведены для Ni/C многослойного зеркала при $\theta = 10$ мрад. Пунктирная кривая найдена с помощью аналитических рекуррентных соотношений, сплошная кривая получена в результате численного уточнения конструкции зеркала.

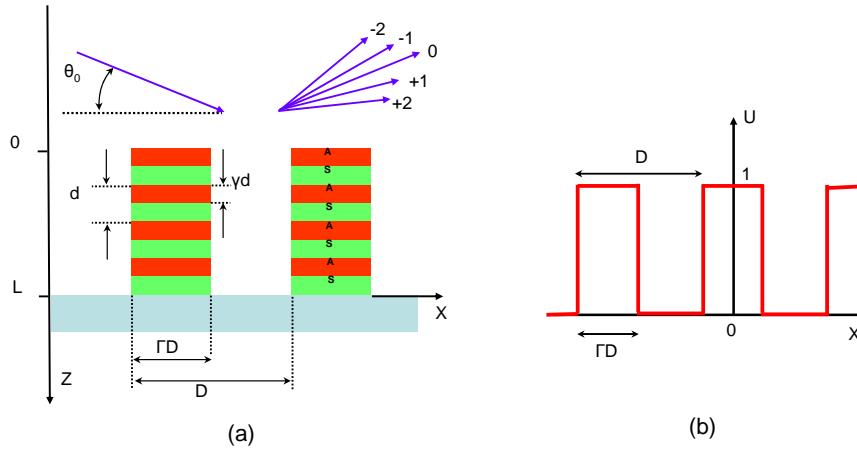


Рис. 11. (а) Схема отражения волны от ЛМС. Многослойная структура (МИС) состоит из чередующихся слоев двух материалов А (толщиной γd) и S (толщиной $(1 - \gamma)d$). Период МИС равен d , число периодов N , общая толщина МИС $L = Nd$. Решеточная структура характеризуется периодом D и шириной ламеллы ΓD . (б) Функция $U(x)$, описывающая профиль ламелл.

гослойных структур (ЛМС), основанная на методе связанных волн (МСВ). Дифракция волны от ЛМС иллюстрируется рис.11. Создана компьютерная программа для численного решения системы уравнений МСВ. Программа применима для любого распределения диэлектрической проницаемости по глубине МИС, т.е. для периодических и аperiodических структур с резким или плавным изменением диэлектрической проницаемости на границах раздела соседних материалов, двух-компонентных или многокомпонентных МИС, любого числа слоев МИС, а также для любого значения периодов МИС и ЛМС. Более того, программа применима для любой формы ламелл (функции $U(x)$ на рис.11б) и учитывает наличие пассивирующего слоя на стенках ламелл.

Идентифицирован одномодовый режим работы ЛМС, когда падающая волна эффективно возбуждает единственную волну одного или другого порядка дифракции. Найдены условия существования этого режима, а именно: $\Gamma D \Delta\theta_{MS} < d/3$, где ΓD - ширина ламеллы, а $\Delta\theta_{MS}$ и d - ширина брэгговского пика и период исходной МИС. Разработана простая аналитическая теория отражения и дифракции МР излучения от одномодовых ЛМС, результаты которой полностью совпадают с результатами строгой теории. Показано, что кривая отражения МР излучения от одномодовой ЛМС такая же как от обычного многослойного зеркала, но с уменьшенной плотностью материалов, составляющих структуру. В результате пиковый коэффициент отражения от одномодовой ЛМС точно такой же как от обычного многослойного зеркала, а ширина брэгговского пика может быть сколь угодно мала. Пример расчетов приведен на рис.12. Сформулированы принципы конструирования одномодовых ЛМС.

Проанализировано влияние различных технологических факторов на эффективность

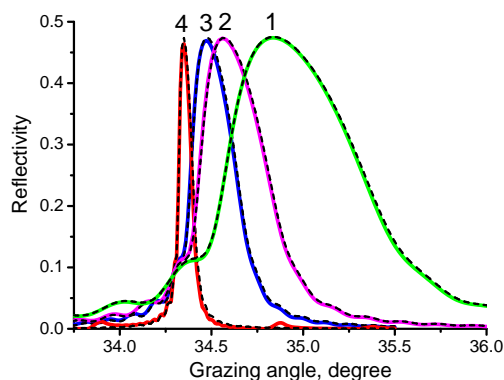


Рис. 12. Коэффициент отражения от обычного Mo/V₄C зеркала при $E = 183.4$ эВ в зависимости от угла скольжения падающего излучения (1) и от трех ЛМС (2-4) с одной и той шириной ламелл $\Gamma D = 70$ нм, но различными значениями параметров Γ и D и разным числом периодов МИС N : $\Gamma = 1/2$, $N = 200$, $D = 140$ нм (2); $\Gamma = 1/3$, $N = 300$, $D = 210$ нм (3); $\Gamma = 1/10$, $N = 1000$, $D = 700$ нм (4). Сплошные кривые рассчитаны по методу связанных волн с учетом 11 порядков дифракции, а пунктирные - с использованием полученных простых аналитических выражений.

ЛМС, среди которых отличие формы ламелл от идеальной прямоугольной, включая наличие квази-периодических неоднородностей на боковых стенках ламелл, и наличие остатков пассивирующего слоя на стенках ламелл. Рассмотрено влияние конечного числа периодов МИС на оптические характеристики ЛМС. Разработанная теория была использована при практическом изготовлении ЛМС и позволила количественно описать экспериментальные результаты исследования отражения и дифракции МР излучения от ЛМС.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предложен и разработан модельно независимый подход к исследованию шероховатостей поверхностей и границ раздела, основанный на измерениях углового распределения рассеяния ЖР и МР излучения или холодных нейтронов и на применении теории возмущений по высоте шероховатостей для анализа экспериментальных данных. Впервые из данных экспериментов по рентгеновскому рассеянию извлечены PSD-функции границ раздела, включая кросс-корреляционные PSD-функции, а также скэйлинговые экспоненты и соответствующие им уравнения роста/эрозии поверхностей в in-situ рефлектометрии растущих или эродирующих слоистых сред.
2. Показано, что теория возмущений по высоте шероховатостей является наиболее естественным и корректным подходом к анализу данных по рентгеновскому рассеянию, по-

сколькxу эта теория (а) позволяет определить параметры шероховатостей (PSD-функции) безо всяких априорных предположений о функции распределения их высот и о виде корреляционной функции, (б) зачастую лучше согласуется с точным борновским приближением с искаженными волнами по сравнению с упрощенным подходом Синха, наиболее часто используемым в литературе, и (в) позволяет объяснить все явления, наблюдаемые при дифракции РИ от слабошероховатых поверхностей. Продемонстрировано, что теория возмущений применима в случае, когда параметр Рэля $\eta_R = 4\pi\sigma \sin \theta_0/\lambda$ не превышает единицу, т.е. среднеквадратичная высота шероховатостей σ не превышает 1.5 - 3 нм (значения σ может быть больше 1.5 нм для легких материалов), если угол скольжения зондирующего пучка θ_0 равен критическому углу ПВО.

3. Предложен и разработан модельно независимый подход к решению обратной задачи рентгеновской рефлектометрии, т.е. реконструкции профиля диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z)$, который основан на измерениях коэффициента отражения в зависимости от угла скольжения зондирующего пучка и предположении о существовании особых точек, где функция $\varepsilon(z)$ не является аналитической. Показано, что число физически обоснованных решения обратной задачи равно двум, если все расстояния между особыми точками различны. Подход был успешно применен к исследованию внутренней структуры пленок различных материалов, включая тонкую структуру границ раздела, образующихся из-за диффузии, химических реакций или имплантации, и адгезионного слоя на поверхности образцов. Показано, что минимальный размер особенности на распределении $\varepsilon(z)$, которая еще может быть корректно реконструирована, составляет $(0.25 - 0.5)\lambda/\sin \theta_{max}$, где θ_{max} - максимальный измеряемый угол скольжения, что соответствует 0.35–0.7 нм в условиях описанных в диссертации экспериментов.
4. Предложен и разработан самосогласованный подход к исследованию трехмерной структуры слоисто - неоднородных сред, который позволяет одновременно определить как профиль диэлектрической проницаемости по глубине $\varepsilon(z)$, так и статистические параметры шероховатостей (PSD-функции) границ раздела, включая кросс - корреляционные PSD-функции. Подход основан на совместном анализе угловой зависимости коэффициента отражения и набора индикатрис рассеяния, измеренных при разных углах скольжения зондирующего пучка, и был успешно применен на практике, в частности, для сравнительных исследований внутренней структуры и шероховатости пленок вольфрама после их напыления, ионного травления и окисления.

5. Найдено точное решение фазовой проблемы применительно к in-situ рентгеновской рефлектометрии растущих слоистых структур. Доказано следующее утверждение: если в какой-то момент времени t известен коэффициент отражения $R(t)$ и его производная $dR(t)/dt$, то и вещественная $\text{Re}r(t)$, и мнимая $\text{Im}r(t)$ части амплитудного коэффициента отражения $r(t)$ в этот же момент времени находятся однозначно, причем для определения фазы нет необходимости знать предисторию процесса роста структуры.

6. Разработана аналитическая теория отражения РИ от произвольной многослойной интерференционной структуры (МИС) с монотонно изменяющимся периодом и основанная на ней аналитическая итерационная процедура, позволяющая определить такое распределение толщины слоев МИС по глубине, которое обеспечивает наперед заданную спектральную (угловую) зависимость коэффициента отражения или максимальное значение интегрального коэффициента отражения. Показано, что аналитическое решение задачи синтеза оказывается настолько хорошим начальным приближением для прямой компьютерной оптимизации широкополосных МИС, что позволяет преодолеть проблему поиска глобального минимума целевой функции даже в случае очень сложного профиля кривой отражения. Разработанный подход был использован при практическом изготовлении широкополосных МИС, работающих в ЖР и ЭУФ диапазонах длин волн.

7. На основе разработанной строгой теории дифракции РИ от ламеллярных многослойных структур (ЛМС) идентифицирован одномодовый режим работы ЛМС, когда падающая волна эффективно возбуждает единственную волну одного или другого порядка дифракции, и найдены условия существования этого режима, а именно: $\Gamma D \Delta\theta_{MS} < d/3$, где ΓD - ширина ламеллы, а $\Delta\theta_{MS}$ и d - ширина брэгговского пика и период исходной МИС. Получено аналитическое решение задачи об отражении и дифракции МР излучения от одномодовых ЛМС. Показано, что пиковое значение коэффициента отражения от одномодовой ЛМС точно такое же как у исходной МИС, в то время как угловое или спектральное разрешение ЛМС может быть каким угодно большим. Разработанная теория использовалась при практическом изготовлении ЛМС и позволила количественно описать экспериментальные результаты по отражению и дифракции МР излучения от ЛМС.

Цитированная литература

- [1] Басс Ф.Г. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности / Ф.Г.Басс, И.М.Фукс. - М.: Наука, 1972. - 424 с.
- [2] Yoneda, Y. Anomalous surface reflection of X-rays / Y.Yoneda // Physical Review. - 1963. - V. 131. - P. 2010-2013.
- [3] Смирнов, Л.А. Диффузное рассеяние при полном внешнем отражении рентгеновских лучей от шероховатой поверхности / Л.А. Смирнов, Т.Д. Сотникова, Ю.И. Коган // Оптика и спектроскопия. - 1985. - Т. 58. С. 400-405.
- [4] Zombeck, M.V. High resolution X-ray scattering measurements / M.V. Zombeck, H. Brauninger, A. Ondruch, P. Predehl // Proceedings of SPIE. 1981. - V. 316. - P. 174-186.
- [5] Bilderback, D.H. X-ray mirror reflectivities from 3.8 to 50 keV (3.3 Å to 0.25 Å). Part I - Float glass / D.H.Bilderback, S.Hubbard // Nuclear Instruments and Methods A. - 1982. - V. 195. P. 85-89.
- [6] Benbalagh, R. Lamella multilayer amplitude gratings as soft X-ray Bragg monochromator / R. Benbalagh, J.-M. André, R. Barchewitz, P. Jonnard, G. Gulié, L. Mollard, G. Rolland, C. Rémond, P. Troussel, R. Marmoret, E.O. Filatova // Nuclear Instruments and Methods. - 2005. - V. 541. - P. 590-597.
- [7] Sinha, S.K. X-ray and neutron scattering from rough surfaces / S.K. Sinha, E.B. Sirota, S. Garoff, H.B. Stanley // Physical Review B. - 1988. - V. 38. - P. 2297-2311.
- [8] Pynn, R. Neutron scattering by rough surfaces at grazing incidence / R. Pynn // Physical Review B. - 1992. - V. 45. P. 602-611.
- [9] Ogilvy, J.A. Theory of wave scattering from random rough surfaces / J.A. Ogilvy. - Bristol: IOP Publishing, 1991. - 277 p.

Список публикаций автора по теме диссертации

- [A1] Виноградов, А.В. Об эффекте полного внешнего отражения рентгеновских лучей / А.В. Виноградов, Н.Н. Зорев, И.В. Кожевников, И.Г. Якушкин // ЖЭТФ. - 1985. - Т. 89. - С. 2124-2132.
- [A2] Виноградов, А.В. Об особенностях диффузного рассеяния при отражении рентгеновского излучения / Виноградов, Н.Н. Зорев, И.В. Кожевников, С.И. Сагитов, А.Г. Турьянский // Препринт ФИАН. - 1986. - № 319. - 31 с.

- [A3] Виноградов, А.В. О рассеянии рентгеновского излучения слабошероховатыми поверхностями / А.В. Виноградов, Н.Н. Зорев, И.В. Кожевников, С.И. Сагитов, А.Г. Турьянский // ЖЭТФ. - 1988. - Т. 94. - С. 203-216.
- [A4] Виноградов, А.В. Зеркальная рентгеновская оптика / А.В. Виноградов, И.А. Брытов, А.Ю. Грудский, М.Т. Коган, И.В. Кожевников, В.А. Слемзин, 1989. - Л.: Машиностроение. - 464 с.
- [A5] Виноградов, А.В. О применимости метода TIS для исследования шероховатости сверхгладких поверхностей по рассеянию рентгеновского излучения / А.В. Виноградов, И.В. Кожевников, М.М. Митропольский, В.А. Слемзин // Краткие сообщения по физике. - 1989. - № 11. - С. 29-31.
- [A6] Виноградов, А.В. Отражение и рассеяние рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей / А.В. Виноградов, И.В. Кожевников, // Рентгеновская оптика. - Труды ФИАН. - Т.196. М.: Наука. - 1989. - С. 18-46.
- [A7] Vinogradov, A.V. Investigation of superpolished surfaces by X-ray scattering / A.V. Vinogradov, I.A. Artyukov, S.S. Borisova, N.N. Zorev, I.V. Kozhevnikov, I.F. Mikhailov, S.I. Sagitov, A.I. Fedorenko // Proceedings of SPIE. - 1989. - V. 1140. - P. 490-499.
- [A8] Borisova, S.S. Determination of the roughness spectrum of superpolished surfaces by measuring X-ray scattering / S.S. Borisova, I.F. Mikhailov, I.V. Kozhevnikov, A.V. Vinogradov // Optical & Acoustical Review. - 1990. - V. 1. - P. 183-195.
- [A9] Mikerov, V.I. Investigation of interfaces with grazing incident neutron radiation / V.I. Mikerov, A.V. Vinogradov, I.V. Kozhevnikov, F.A. Pudonin, V.A. Tukarev, M.P. Yakovlev // Physica B. - 1991. - V. 174. - P. 174-176.
- [A10] Карабеков, А.Ю. Рассеяние рентгеновского излучения шероховатой пленкой / А.Ю. Карабеков, И.В. Кожевников // Препринт ФИАН. - 1993. - № 6. - 47 с.
- [A11] Karabekov, A.Yu. Interference suppression of X-ray scattering under total external reflection from rough surfaces / A.Yu Karabekov, I.V. Kozhevnikov, V.E. Fedyukovich // Journal of X-Ray Science and Technology. - 1993. - V. 4. - P. 37-43.
- [A12] Kozhevnikov, I.V. X-ray investigations of supersmooth surfaces / I.V. Kozhevnikov, V.E. Asadchikov, B.M. Alaudinov, A.Yu. Karabekov, A.V. Vinogradov // Proceedings of SPIE. - 1994. - V. 2253. - P. 679-690.
- [A13] Karabekov, A.Yu. Peculiarities of X-ray scattering by thin film roughness / A.Yu. Karabekov, I.V. Kozhevnikov // Proceedings of SPIE. - 1995. - V. 2453. - P. 176-185.

- [A14] Kozhevnikov, I.V. Reflection and scattering of x-rays from rough surfaces / I.V. Kozhevnikov, A.V. Vinogradov // Journal of Russian Laser Research. - 1995. - V. 16. - P. 229-258.
- [A15] Кожевников, И.В. О рассеянии волн от шероховатой поверхности конечных размеров / И.В. Кожевников // Поверхность. - 1998. - № 11. - С. 18-24.
- [A16] Асадчиков, В.Е. Экспериментальные исследования корреляции шероховатостей пленки и подложки методом рентгеновского рассеяния / В.Е. Асадчиков, А.Ю. Карабеков, В.В. Клечковская, И.В. Кожевников, В.Е. Левашов, С.И. Сагитов // Кристаллография. - 1998. - Т. 43. - С. 119-130.
- [A17] Асадчиков, В.Е. Исследования микрошероховатостей сверхгладких поверхностей методом рассеяния рентгеновского излучения / В.Е. Асадчиков, Е.Е. Андреев, А.В. Виноградов, А.Ю. Карабеков, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривоносов, А.А. Постнов, С.И. Сагитов // Поверхность. - 1998. - № 7. - С. 17-29.
- [A18] Kozhevnikov, I.V. Theoretical study of multilayer x-ray mirrors with a wide spectral band of reflection / I.V. Kozhevnikov, N.I. Bukreeva, E. Ziegler // Proceedings of SPIE. - 1998. - V. 3448. - P. 322-331.
- [A19] Kozhevnikov, I.V. Comparative study of the roughness of optical surfaces and thin films using atomic force microscopy, x-ray scattering and light scattering methods / I.V. Kozhevnikov, V.E. Asadchikov, A. Duparré, O.N. Gilev, N.A. Havronin, Yu.S. Krivonosov, V.I. Ostashev, J. Steinert // Proceedings of SPIE. - 1999. - V. 3739. - P. 348-354.
- [A20] Asadchikov, V.E. X-ray and AFM studies of ultrathin films for EUV and soft X-ray applications / V.E. Asadchikov, A. Duparré, I.V. Kozhevnikov, Yu.S. Krivonosov, S.I. Sagitov // Proceedings of SPIE. - 1999. - V. 3738. - P. 387-393.
- [A21] Ziegler, E. Depth-graded multilayer mirrors for the hard x-ray spectral region: theory, inverse and direct problems / E. Ziegler, I.N. Bukreeva, I.V. Kozhevnikov, A.S. Pirozhkov, E.N. Ragozin // Proceedings of SPIE. - 1999. - V. 3737. - P. 386-395.
- [A22] Asadchikov, V.E. Comparative study of the roughness of optical surfaces and thin films by use of x-ray scattering and atomic force microscopy / V.E. Asadchikov, A. Duparré, S. Jakobs, A.Yu. Karabekov, I.V. Kozhevnikov, Yu.S. Krivonosov // Applied Optics. - 1999. - V. 38. - P. 684-691.
- [A23] Асадчиков, В.Е. Изучение микрорельефа поверхности некоторых материалов для микроэлектроники методом рассеяния рентгеновского излучения в условиях полного внешнего

отражения / В.Е. Асадчиков, А.Ю. Карабеков, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривоносов, С.И. Сагитов // Известия ВУЗов. Материалы электронной техники. - 1999. - № 1. - С. 65-69.

[A24] Kozhevnikov, I.V. Use of DWBA and perturbation theory in x-ray control of the surface roughness / I.V. Kozhevnikov, M.V. Pyatakhin // Journal of X-Ray Science and Technology. - 2000. - V. 8. - P. 253-275.

[A25] Kozhevnikov, I.V. X-ray study of the roughness of surfaces and interfaces / I.V. Kozhevnikov, V.E. Asadchikov, I.N. Bukreeva, A. Duparré, Yu.S. Krivonosov, C. Morawe, V.I. Ostashev, M.V. Pyatakhin, E. Ziegler // Proceedings of SPIE. - 2000. - V. 4099. - P. 267-278.

[A26] Kozhevnikov, I.V. Design of x-ray supermirrors / I.V. Kozhevnikov, I.N. Bukreeva, E. Ziegler // Nuclear Instruments and Methods A. -2001. - V. 460. - P. 424-443.

[A27] Асадчиков, В.Е. Метод рентгеновского рассеяния в изучении процесса полировки сверхгладких подложек / В.Е. Асадчиков, А.В. Виноградов, В.Н. Зрюев, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривоносов, Р. Мерсье, И. Намба, С.И. Сагитов, М. Ямамото // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. - 2001. - Т. 67. - С. 19-23.

[A28] Duparré, A. Surface characterization of optical components for the DUV, VUV and EUV / A. Duparré, I. Kozhevnikov, S. Gilech, J. Steinert, G. Notni // Microelectronics Engineering. - 2001. - V. 57-58. - P. 65-70.

[A29] Ziegler, E. Wide-band multilayer mirrors for medium to hard x-ray applications / E. Ziegler, C. Morawe, I.V. Kozhevnikov, T. Bigault, C. Ferrero, A. Tallinder // Proceedings of SPIE. - 2002. - V. 4782. P.

[A30] Morawe, C. Design and fabrication of depth-graded x-ray multilayers / C. Morawe, E. Ziegler, J.-C. Peffen, I.V. Kozhevnikov // Nuclear Instruments and Methods A. - 2002. - V. 493. - P. 189-198.

[A31] Morawe, C. Depth-graded multilayers / C. Morawe, J.-C. Peffen, I.V. Kozhevnikov // J. Physique IV France. - 2003. - V. 104. - P. 239-240.

[A32] Асадчиков, В.Е. Рентгеновские исследования тонких пленок и приповерхностных слоев твердых тел / В.Е. Асадчиков, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривоносов // Кристаллография. - 2003. - Т. 48. - С. S43-S58.

[A33] Асадчиков, В.Е. Рентгеновские исследования поверхностных шероховатостей / В.Е. Асадчиков, И.В. Кожевников, Ю.С. Кривоносов // Кристаллография. - 2003. - Т. 48. - С. 897-911.

- [A34] Kozhevnikov, I.V. Physical analysis of the inverse problem of X-ray reflectometry / I.V. Kozhevnikov // Nuclear Instruments and Methods A. - 2003. - V. 508. - P. 519-541.
- [A35] Kozhevnikov, I.V. Analysis of X-ray scattering from a rough multilayer mirror in the first-order perturbation theory / I.V. Kozhevnikov // Nuclear Instruments and Methods A. - 2003. - V. 498. - P. 482-495.
- [A36] Asadchikov, V.E. Application of x-ray scattering technique to the study of supersmooth surfaces / V.E. Asadchikov, I.V. Kozhevnikov, Yu.S. Krivonosov, R. Mercier, T.H. Metzger, C. Morawe, E. Ziegler // Nuclear Instruments and Methods A. - 2004. - V. 530. - P. 575-595.
- [A37] Peverini, L. Roughness conformity during tungsten film growth: An in situ synchrotron x-ray scattering study / L. Peverini, E. Ziegler, T. Bigault, I. Kozhevnikov // Physical Review B. - 2005. - V. 71. - P. 045445-6.
- [A38] Кожевников, И.В. Конструирование, изготовление и исследование широкополосных рентгеновских зеркал / И.В. Кожевников, А.С. Воронов, Б.С. Роцин, В.Е. Асадчиков, К.Н. Медников, А.С. Пирожков, Е.Н. Рагозин, Дж. Ванг, Дж. Джонг, Ф. Ванг // Кристаллография. - 2006. - Т. 51. - С. 1146-1152.
- [A39] Peverini, L. Dynamic scaling of roughness at the early stage of tungsten film growth / L. Peverini, E. Ziegler, T. Bigault, I. Kozhevnikov // Physical Review B. - 2007. - V. 76. - P. 045411-5.
- [A40] Peverini, L. Dynamic scaling in ion etching of tungsten films / L. Peverini, E. Ziegler, I. Kozhevnikov // Applied Physics Letters. - 2007. - V. 91. - P. 053121-3.
- [A41] Peverini, L. Dynamic scaling in sputter grown tungsten thin films / L. Peverini, E. Ziegler, I. Kozhevnikov // Thin Solid Films. - 2007. - V. 515. - P. 5541-5545.
- [A42] Peverini, L. Real-time X-ray reflectometry during thin-film processing / L. Peverini, I. Kozhevnikov, E. Ziegler // Phys. Stat. Sol. (a). - 2007. - V. 204. - P. 2785-2791.
- [A43] Kozhevnikov, I. Exact solution of the phase problem in in-situ X-ray reflectometry of growing layered films / I. Kozhevnikov, L. Peverini, E. Ziegler // Journal Applied Physics. - 2008. - V. 104. - P. 054914-6.
- [A44] Kozhevnikov, I. Exact determination of the phase in time-resolved x-ray reflectometry / I. Kozhevnikov, L. Peverini, E. Ziegler // Optics Express. - 2008. - V. 14. - P. 144-149.
- [A45] Кожевников, И.В. Влияние поверхностных шероховатостей на эффективность рентгеновских зеркал с пепчущими модами / И.В. Кожевников // Кристаллография. - 2009. - Т. 54. - С. 350-355.

- [A46] Filatova, E.O. Investigation of the structure of thin HfO₂ films by soft x-ray reflectometry techniques / E.O. Filatova, A.A. Sokolov, I.V. Kozhevnikov, E.Yu. Taracheva, O.S. Grunsky, F. Schaefers, W. Braun // Journal of Physics: Condensed Matter. - 2009. - V. 21. - P. 185012-7.
- [A47] Filatova, E. Atomic ordering in TiO₂ thin films studied by X-ray reflection spectroscopy / E. Filatova, E. Taracheva, G. Shevchenko, A. Sokolov, I. Kozhevnikov, S. Yulin, F. Schaefers, W. Braun // Phys. Stat. Solidi B. 2009. - V. 246. - P. 1454-1458.
- [A48] Kozhevnikov, I.V. Design of X-ray multilayer mirrors with maximal integral efficiency / I.V. Kozhevnikov, C. Montcalm // Nuclear Instruments and Methods A. - 2010. - V. 624. - P. 192-202.
- [A49] Filatova, E.O. Evolution of surface morphology at the early stage of Al₂O₃ films growth on a rough substrate / E.O. Filatova, L. Peverini, E. Ziegler, I.V. Kozhevnikov, P. Jonnard, J.-M. André // Journal of Physics: Condensed Matter. - 2010. - V. 22. - P. 345003-8.
- [A50] Кожевников, И.В. Общие закономерности отражения рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей. I. Закон сохранения энергии / И.В. Кожевников // Кристаллография. - 2010. - Т. 55. - С. 581-587.
- [A51] de Rooij-Lohmann, V.I.T.A. Roughness evolution of Si surfaces upon Ar ion erosion / V.I.T.A. de Rooij-Lohmann, I.V. Kozhevnikov, L. Peverini, E. Ziegler, R. Cuerno, F. Bijkerk, A.E. Yakshin // Applied Surface Science. - 2010. - V. 256. - P. 5011-5014.
- [A52] Kozhevnikov, I.V. High-resolution, high-reflectivity operation of lamellar multilayer amplitude gratings: identification of the single-order regime / I.V. Kozhevnikov, R. van der Meer, H. J. M. Bastiaens, K.-J. Boller, F. Bijkerk // Optics Express. - 2010. - V. 18. - P. 16234-16242.
- [A53] Yakshin, A.E. Broadband depth-graded multilayer mirrors for EUV optical systems / A. E. Yakshin, I. V. Kozhevnikov, E. Zoethout, E. Louis, F. Bijkerk // Optics Express. - 2010. - V. 18. - P. 6957-6971.
- [A54] van der Meer, R. Improved resolution for soft-x-ray monochromatization using lamellar multilayer gratings / R. van der Meer, B. Krishnan, I.V. Kozhevnikov, M.J. de Boer, B. Vratzov, H.M.J. Bastiaens, J. Huskens, W.G. van der Wiel, P.E. Hegeman, C.G.S. Brons, K.-J. Boller, F. Bijkerk // Proceedings of SPIE. - 2011. - V. 8139. - P. 81390Q-8.
- [A55] Kozhevnikov, I.V. Analytic theory of soft X-rays diffraction by lamellar multilayer gratings / I.V. Kozhevnikov, R. van der Meer, H.J.M. Bastiaens, K.-J. Boller, F. Bijkerk // Optics Express. - 2011. - V. 19. - P. 9172-9184.

- [A56] Кожевников, И.В. Обратные задачи в теории многослойных рентгеновских зеркал / И.В. Кожевников // Сборник материалов 3-й международной молодежной научной школы-семинара “Современные методы анализа дифракционных данных” (В. Новгород, 12-16 сентября 2011 г.) - С.64-65.
- [A57] Filatova, E.O. Characterization of High-k Dielectrics Internal Structure by X-Ray Spectroscopy and Reflectometry. New Approaches to Inter Layer Identification and Analysis / E.O. Filatova, I.V. Kozhevnikov, A.A. Sokolov // High-k Gate Dielectrics for SMOS Technology, 2012. - Weinheim: Wiley-VCH Verlag. - Gang He, Ed. - Chapter 7. - P. 225-271.
- [A58] Кожевников, И.В. Общие закономерности отражения рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей. II. Конформные шероховатости / И.В. Кожевников // Кристаллография. - 2012. - Т. 57. - С.417-426.
- [A59] Kozhevnikov, I.V. Development of a self-consistent free-form approach for studying the three-dimensional morphology of a thin film / I.V. Kozhevnikov, L. Peverini, E. Ziegler // Physical Review B. - 2012. - V. 85. - P. 125439-15.
- [A60] Ziegler, E. Comparative study of the morphology of tungsten films after deposition, erosion and oxidation treatments / E. Ziegler, I. V. Kozhevnikov, L. Peverini // 11th Biennial Conference of High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (XTOP 2012, S.Petersburg, 15-20 September 2012). Book of abstracts. - 2012. - P.343.
- [A61] Filatova, E.O. Soft X-ray reflectometry, hard X-ray photoelectron spectroscopy and transmission electron microscopy investigations of the internal structure of $\text{TiO}_2(\text{Ti}) / \text{SiO}_2 / \text{Si}$ stacks / E.O. Filatova, I.V. Kozhevnikov, A.A. Sokolov, E.V. Ubiyovok, S. Yulin, M. Gorgoi, F. Schaefer // Science and Technology of Advanced Materials. - 2012. - V. 13. - P. 015001-12.
- [A62] van der Meer, R. Extended theory of soft x-ray reflection for realistic lamella multilayer gratings / R. van der Meer, I.V. Kozhevnikov, H.M.J. Bastiaens, K.-J. Boller, F. Bijkerk // Optics Express. - 2013. V. 21. - P. 13105-13117.
- [A63] van der Meer, R. Single-order operation of lamellar multilayer gratings in the soft x-ray spectral range / R. van der Meer, I. Kozhevnikov, B. Krishnan, J. Huskens, W. van der Wiel, P. Hegeman, C. Brons, B. Bastiaens, K. Boller, F. Bijkerk // AIP Advances. - 2013. - V. 3. - P. 012103-7.