

ОТЗЫВ
официального оппонента на диссертацию
Кожевникова Игоря Викторовича
«Теория дифракции рентгеновского излучения от неоднородных слоистых сред»
представленную на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по специальности 01.04.07 –«физика конденсированного состояния»

Среди многочисленных направлений в исследовании структуры вещества наиболее перспективными являются методы, основанные на рассеянии рентгеновского и синхротронного излучений, включая жесткий, мягкий и экстремальный ультрафиолетовый диапазон частот. Эти методы являются неразрушающими и позволяют с достаточной точностью определять морфологические особенности поверхности образцов и гетерограниц, толщины слоев и электронную плотность тонких пленок в системе чередующихся материалов разного химического состава, структурные характеристики латеральных решеток и т.д. В зависимости от технологических условий при создании гладких и рельефных поверхностей, формирования самоорганизованныхnanoструктурированных сред или напылении ультратонких слоев практически всегда возникают структурные и композиционные нарушения (дефекты), требующие неразрушающего экспрессного контроля. Следует отметить, что приборная база высокоразрешающей рентгеновской рефлектометрии и дифрактометрии непрерывно развивается, появляются новые светосильные источники и элементы рентгеновской оптики для управления рентгеновскими пучками, что, несомненно, стимулирует проведение экспериментальных исследований на более высоком уровне. Однако новые экспериментальные результаты требуют адекватной физической интерпретации и соответствующего количественного анализа. В свою очередь, все это непрерывно связано с развитием сопутствующих теорий, выбором моделей и численных расчетов. Поэтому диссертационная работа И.В. Кожевникова, посвященная развитию теории, численному моделированию и решению обратных задач рентгеновского рассеяния от неоднородных слоистых сред является весьма актуальной и своевременной.

Достоверность и обоснованность полученных в работе соискателя результатов и выводов подтверждается выбором физически обоснованных моделей, сопоставлением полученных результатов с экспериментальными данными и с теоретическими результатами других авторов.

Научная новизна результатов, полученных в диссертационной работе И.В. Кожевникова, определяется впервые представленными теоретическими исследованиями процессов рентгеновского рассеяния от шероховатых слоисто-неоднородных сред, а именно:

- Впервые теория возмущений по высоте шероховатостей, позволяющая однозначно определять характеристики поверхности (PSD-функцию), применена для анализа экспериментальных данных.

- Предложен и реализован оригинальный подход определения скэйлинговых экспонент по *in-situ* измерениям рентгеновского рассеяния от растущих поверхностей.
- Впервые получено точное решение фазовой проблемы в *in-situ* рентгеновской рефлектометрии растущих слоистых структур.
- Разработан самосогласованный метод для исследования структурных параметров тонкопленочных покрытий. Метод позволяет одновременно определить как профиль диэлектрической проницаемости по глубине, так и PSD-функции шероховатостей.
- Впервые предложен и реализован новый подход к обратной задаче синтеза широкополосных многослойных рентгеновских зеркал с использованием аналитического решения и численных расчетов.
- Разработана теория дифракции мягкого рентгеновского излучения от латерально-периодических многослойных структур. Детально исследован одномодовый режим, при котором отсутствует связь между различными дифракционными порядками.

Практическая значимость работы неразрывно связана с поиском и реализацией подходов количественного анализа сложных структурированных сред по данным эксперимента. Несомненной заслугой И.В. Кожевникова является разработка методов решения обратных задач рентгеновского рассеяния без привлечения априорной информации о внутреннем строении исследуемых объектов. Кроме того, разработаны уникальные методы неразрушающего рентгеновского контроля (*in-situ* исследования) процессов роста и ионного травления пленок ряда перспективных материалов. Особо хочется отметить сформулированные подходы к конструированию широкополосных многослойных зеркал, основанные на комбинации аналитического решения и численных расчетов, которые позволяют оптимизировать строение многослойных интерференционных структур для любого спектрального или углового профиля кривой отражения. В частности, такие градиентные системы широко применяются для управления пучками синхротронного излучения, увеличения эффективности рентгеновских трубок и в ЭУФ литографии. Большое практическое значение имеет разработанный соискателем программный продукт, позволяющий проводить численные расчеты практически по всем задачам, представленным в диссертации.

Значительная часть результатов, представленных в диссертации, была получена в рамках проектов РФФИ и Международного научно-технического центра, в которых соискатель был руководителем.

Результаты диссертационной работы И.В. Кожевникова используются и могут быть использованы в монографиях и учебных пособиях, а также в учебных и научных организациях, в частности, в Институте кристаллографии РАН, Физическом институте им. П.Н. Лебедева РАН, Институте физики микроструктур РАН (Н. Новгород), на физических факультетах Московского и Санкт-Петербургского уни-

верситетов, в Европейском центре синхротронных исследований (Гренобль, Франция), Институте прикладной оптики и точной механики (Йена, Германия) и др.

Диссертация состоит из введения, трех оригинальных глав, заключения в виде перечня основных результатов и выводов, списка литературы из 63 работ соискателя и 225 наименований работ других авторов. Объем диссертации составляет 356 страниц, в том числе 168 рисунков и 11 таблиц. Обращает на себя внимание отсутствие единого литературного обзора, присущего традиционной структуре диссертации. Историческая иерархия развития данного физического направления и сопутствующие этому направлению цитируемые работы размещены в оригинальных главах диссертации.

Во введении дается краткая справка об актуальности темы диссертации, сформулированы цели, научная новизна и практическая значимость исследований, приведены основные положения, выносимые на защиту, а также изложена аннотация работы.

Первая глава посвящена исследованию разных аспектов рассеяния рентгеновских лучей от шероховатых слоисто-неоднородных сред. Соискатель обобщил оптическую теорему рентгеновского рассеяния от шероховатой слоисто-неоднородной среды. Им доказано, что при определенных условиях борновское приближение для искаженных (возмущенных) волн (*distorted-wave Born approximation, DWBA*) и теория возмущений по высоте шероховатостей обеспечивают строгое выполнение закона сохранения энергии для непоглощающей среды. Более того, И.В. Кожевниковым получено выражение для индикатрисы рассеяния от шероховатой поверхности в рамках строгого DWBA приближения без упрощений структуры поля невозмущенной волны вблизи поверхности. Далее, в работе установлено, что в случае малого радиуса корреляции шероховатостей фактор Нево-Кроса справедлив только для нормального распределения высот поверхностного рельефа. При отклонении от гауссова распределения формула Нево-Кроса не описывает коэффициент отражения вне области ПВО. Кроме того, выполненный соискателем анализ рентгеновского рассеяния при предельно малых углах скольжения показал, что этот случай не может быть описан ни фактором Дебая-Валлера, ни фактором Нево-Кроса.

В рамках теории возмущений И.В. Кожевниковым проанализированы особенности рентгеновского рассеяния от шероховатой периодической многослойной структуры. В отличие от известных результатов им получены компактные выражения, описывающие угловое распределение рентгеновского рассеяния в условиях линейной модели роста пленок. Полученные формулы описывают все особенности рассеяния от многослойных структур, в частности весьма важный процесс формирования квази-брэгговских максимумов за счет интерференцией волн, рассеянных от межслойных границ с коррелированными шероховатостями.

Важным результатом диссертационной работы является разработка методов определения характеристик шероховатости в *in-situ* рефлектометрии растущих поверхностей без априорной информации о ростовом процессе. Можно выделить оп-

ределение скэйлинговых экспонент из анализа асимптотического поведения PSD функции в области высоких пространственных частот, зависимости среднеквадратичной высоты шероховатостей от времени напыления и наблюдения сжатия “перенормированных” PSD-функций в единую универсальную кривую.

В диссертации показано, что использование теории возмущений и определение PSD-функции непосредственно из измеренной индикаторы рассеяния является эффективным подходом к количественному анализу экспериментальных результатов. Однако условием реализации этого подхода является контроль применимости теории возмущений в каждом конкретном случае.

Наиболее значимой с точки зрения практической реализации результатов является вторая глава диссертации, посвященная решению обратных задач рентгеновской рефлектометрии. Строго говоря, обратные задачи рентгеновского рассеяния в общем случае относятся к числу некорректно поставленных задач, поэтому их решение без привлечения априорной информации весьма затруднительно, а порой и невозможно. Поэтому несомненной заслугой И.В. Кожевникова является разработка уникального модельно независимого подхода к решению обратной задачи рентгеновской рефлектометрии. Единственным условием в предложенном методе является наличие особых точек на одномерном профиле диэлектрической проницаемости, в которых функция изменения зарядовой плотности или одна из ее производных испытывают скачкообразное изменение. При этом предполагается, что в латеральных направлениях диэлектрическая проницаемость является однородной. Данный подход был успешно реализован в процессе исследования структурных характеристик пленок различных материалов на кремниевых подложках.

Вторым моментом, заслуживающим особого внимания, является разработанный соискателем оригинальный подход к решению фазовой проблемы рентгеновской рефлектометрии. Основной особенностью подхода является *in-situ* измерение коэффициента отражения от структуры в ее ростовом процессе, при этом как коэффициент отражения, так и его производная известны в данный конкретный момент времени. Эти значения оказываются вполне достаточными для определения комплексной амплитуды в этот же момент времени. Эффективность метода проиллюстрирована на примере растущей пленки вольфрама даже при фиксированном угле скольжения падающего рентгеновского пучка. Вполне понятно, что возможности метода несизмеримо возрастут при наличии углового сканирования и временной фиксации коэффициента отражения.

Наконец, завершающим штрихом второй главы является разработанный соискателем самосогласованный подход к исследованию структурных характеристик пленочных покрытий. Суть подхода состоит в одновременной реконструкции профиля диэлектрической проницаемости по глубине образца и определении статистических параметров шероховатостей. Для этой цели И.В. Кожевниковым разработан итерационный алгоритм последовательных вычислений профиля диэлектрической проницаемости и структурных параметров шероховатостей. Подход успеш-

но использован для исследований пленок вольфрама после их напыления, ионного травления и окисления.

В третьей главе разработана теория отражения рентгеновского излучения от многослойной интерференционной структуры (МИС) с монотонно изменяющимся периодом. В рамках этой теории соискателем разработан новый подход к решению обратной задачи синтеза широкополосных многослойных зеркал рентгеновского диапазона. Сущность задачи состоит в определении последовательности толщин слоев МИС, соответствующей требуемой спектральной зависимости коэффициента отражения. Для этого И.В. Кожевниковым разработана итерационная процедура, позволяющая решать вышеизложенную задачу. В общей стратегии решения обратных задач важное место имеет начальное приближение. Предложенное в работе аналитическое решение выполняет данную функцию, при этом оказывается очень хорошим стартовым приближением даже в случае очень сложного профиля кривой отражения. Исходя из вышесказанного, в работе проведен детальный анализ конструкции широкополосных зеркал применительно к проблеме управления пучками синхротронного излучения (выбор пар материалов, оптимальное число слоев, роль тяжелого материала в структуре МИС и т.д.). Попутно исследованы причины слабой эффективности широкополосных зеркал, к которым были отнесены неточность расчетных оптических констант, технологические трудности нанесения ультратонких слоев, наличие межслойных шероховатостей и случайный разброс толщин слоев.

Заключительная часть третьей главы посвящена развитию теории рентгеновской дифракции на латерально-периодических (в трактовке соискателя – ламеллярных) многослойных структурах. В рамках теории разработана компьютерная программа для численного решения системы уравнений связанных рентгеновских волн. Отличительной чертой программы является то, что она применима для произвольного распределения химических компонент и любого числа слоев по глубине МИС, а также произвольного периода латерально-периодической структуры. Кроме того, программа учитывает форму штриха (латерально - ограниченного зеркала) и ее пассивацию стенок. Следует отметить, что И.В. Кожевниковым детально исследован одномодовый режим отражения латерально-периодической структуры, при этом показано, что профиль кривой отражения в этом режиме такой же как от обычного многослойного зеркала.

В заключении перечисляются основные результаты и выводы, отражающие многоплановость и большой объём проделанной работы.

В целом, можно отметить, что научное значение диссертационной работы, а связи с этим и заслуга И.В. Кожевникова заключается в разработке теорий рентгеновского рассеяния от сложных слоисто-неоднородных сред, включая численное моделирование (прямая задача) и решение обратных задач. Каждый шаг исследований теоретически обоснован, поэтому весьма сложно найти какие-то недостатки в диссертационной работе. Тем не менее, следует отметить, что соискатель весьма значимо сравнивает расчетные результаты с экспериментальными данными, при

этом достаточно подробно описывает экспериментальное оборудование, в частности, канала BM5 синхротронного источника ESRF. Кроме того, анализируются измерения, выполненные с использованием лабораторных источников излучения. Экспериментальные установки характеризуются так называемой инструментальной функцией, характеризующейся наличием щелей, параметрами монороматора (анализатора), спектральной и угловой расходностью пучка и т.д. В ряде случаев инструментальная функция существенно влияет на результаты «чистой» теории, базирующейся на предположении безграничного фронта падающей рентгеновской волны, отсутствие угловой и спектральной расходности и т.д. Возможно, на представленные в работе результаты инструментальная функция влияет слабо и не требует специальных вычислений, однако об этом информация не приводится.

Сделанное замечание не изменяют общей положительной оценки диссертации И.В. Кожевникова, являющейся законченной научно-квалификационной работой. Результаты исследований И.В. Кожевникова своевременно опубликованы в ведущих научных журналах и докладывались на престижных конференциях. Содержание автореферата в полной мере соответствует содержанию диссертации.

Диссертационная работа И.В. Кожевникова выполнена на высоком научно-теоретическом уровне, отвечает всем требованиям ВАК Российской Федерации, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор И.В. Кожевников, несомненно, заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

Заведующий лабораторией теоретической
и вычислительной физики Отдела математики
Коми научного центра УрО РАН,
доктор физико-математических наук,
профессор /В.И. Пунегов/

4 февраля 2014 г.



Подпись Пунегов В.И.
заявляю.
Начальник Общего отдела Президиума Федерального
государственного бюджетного учреждения науки
Коми научного центра Уральского отделения
Российской академии наук
Пунегов В.И.
«04» февраля 2014 г.