

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Petr Cejpek

Difuzní rtg reflexe na drsných multivrstvách

Katedra fyziky kondenzovaných látek

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Václav Holý, CSc.

Studijní program: Obecná fyzika

Studijní obor: FOF

Praha 2013

Poděkování

Na tomto místě bych rád poděkoval prof. RNDr. Václavu Holému, CSc. za vedení práce a podněty k jejímu zpracování. Dále bych chtěl poděkovat RNDr. Peteru Minárikovi za měření na AFM mikroskopu.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona.

V dne.....

Podpis autora

Název práce: Difúzní rtg reflexe na drsných multivrstvách

Autor: Petr Cejpek

Katedra / Ústav: Katedra fyziky kondenzovaných látek

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Václav Holý, CSc., Katedra fyziky kondenzovaných látek

Abstrakt:

Tato bakalářská práce se zabývá teorií difúzního rozptylu rentgenového záření na drsných multivrstvách. V úvodní kapitole shrneme některé základní principy - statistické vlastnosti rozhraní, Fresnelovy koeficienty, teorii rozptylu, atd. - které následně použijeme k odvození vztahů pro spekulární odraz a difúzní rozptyl od drsných rozhraní, která budeme považovat za náhodné fraktály.

Použití těchto odvozených vztahů budeme demonstrovat při měření na multivrstvě složené z vrstev SiO_2 a ZrO_2 a substrátu z minerálního skla. Naměřená data budeme fitovat na odvozené funkce pomocí programu *Matlab*. Drsnosti rozhraní navíc změříme pomocí AFM mikroskopu a srovnáme tyto dvě metody měření.

Klíčová slova: rtg reflexe, difúzní rozptyl, drsná rozhraní, náhodné fraktály

Title: Diffusion x-ray reflection from rough multilayers

Author: Petr Cejpek

Department: Department of Condensed Matter Physics

Supervisor: prof. RNDr. Václav Holý, CSc., Department of Condensed Matter Physics

Abstract:

This bachelor work follows with the theory of diffusion x-ray scattering from rough multilayers. In the first chapter we will recap some basic principles - statistic properties of interfaces, Fresnell coefficients, scattering theory, etc. - this stuff we will use to derive the expressions for specular reflection and diffusion scattering from rough interfaces, which we will consider as the random fractals.

We will demonstrate the use of these derived expressions at a measurement on the multilayers compounded from SiO_2 and ZrO_2 layers and substrate of mineral glass. Fitting of the measured data on the derived expressions will be done with *Matlab* software. Moreover, we will measure the roughness of interfaces with AFM microscope and we will compare these two measuring metodes.

Keywords: x-ray reflection, diffuse scattering, rough interfaces, random fractals

Obsah

Úvod.....	2
1 Základní principy	3
1.1 Vlastnosti vrstev a rozhraní.....	3
1.2 Základní pojmy rozptylu.....	5
1.3 Fresnelovy koeficienty.....	7
2 Spekulární a difúzní odraz	9
2.1 Odraz od drsného rozhraní.....	10
2.2 Spekulární odraz od drsné multivrstvy	12
2.3 Difúzní rozptyl	13
2.4 Analytický výpočet Fourierovy transformace korelační funkce.....	15
3 Korekce při měření.....	17
3.1 Geometrie měření.....	17
3.2 Divergence svazku	17
3.2.1 Měření spekulárního odrazu $2\theta - \omega$ skenem	18
3.2.2 Měření difúzního rozptylu ω skenem	18
4 Měření	20
4.1 Měření na rentgenovém difraktometru	20
4.2 Měření na AFM.....	26
4.2.1 Princip měření na AFM.....	26
4.2.2 Vlastní měření	27
4.3 Diskuze výsledků	31
Závěr	34
Seznam použité literatury.....	35
Seznam tabulek	36

Úvod / Předmluva

Zabývání se statistickými a korelačními rozhraní a zkoumání tenkých vrstev má svůj určitý význam. Některé fyzikální jevy jsou na nich silně závislé.

Optoelektronické součástky například využívají epitaxní růst vrstev - ty jsou potom tenké jen několik atomárních vrstev a umožňují tak projev kvantových efektů. Dále, tenké kovové vrstvy často vykazují magnetické vlastnosti, které nelze u větších vzorků dobře pozorovat. Pozorování interakcí mezi tenkými magnetickými a nemagnetickými vrstvami vede výzkumu magnetorezistance. Tato vlastnost silně závisí na tloušťce vrstev a drsnostech jejich rozhraní.

Parametry rozhraní závisí na způsobu růstu, jakým tenkou vrstvou vytvoříme. Zkoumání korelačních vlastností jednotlivých rozhraní je tedy užitečné k tomu, abychom dokázali nahlédnout do samotného procesu růstu jako takového.

Ke zkoumání těchto vlastností máme metody měření v přímém a reciprokém prostoru. Mezi metody měření v přímém prostoru patří skenovací mikroskopy, které nám poskytují přímo obraz profilu povrchu vzorku. Naproti tomu rentgenový rozptyl nám poskytuje obraz reciprokého prostoru. Parametry získané z rentgenového rozptylu nám dávají informace o struktuře, které jsou průměrovány přes velký objem vzorku.

Skenovací metody mohou mít destruktivní vliv na zkoumaný vzorek, protože při některých metodách je skenovací sonda v přímém kontaktu s jeho povrchem. V tomto má rentgenový rozptyl výhodu oproti skenovacím metodám. Navíc, umožňuje zkoumat i vnitřní strukturu vzorku, která nám při skenovacích metodách zůstává zapovězena.

V této práci srovnáme rentgenový rozptyl s měřením na mikroskopu atomových sil na několika použitých vzorcích multivrstev. V první části odvodíme vztahy pro intenzitu rentgenového záření rozptýleného od multivrstvy, na které budeme fitovat naměřená data. V závěru pak dané vzorky proměříme na AFM mikroskopu a obě metody srovnáme.

1 Základní principy

V této úvodní kapitole se budeme zabývat statistickými vlastnostmi vrstev a rozhraní. Dále zopakujeme některé základní principy jako jsou Fresnelovy koeficienty, či stručný popis teorie rozptylu. Tyto poznatky nám budou v následujících kapitolách sloužit k odvození vztahů pro spekulární odraz a difúzní rozptyl rentgenového záření na multivrstvě.

1.1 Vlastnosti vrstev a rozhraní

Libovolnou látku můžeme charakterizovat dielektrickou susceptibilitou χ . Susceptibilita je obecně tenzor, my však budeme pracovat s izotropními materiály, pro které platí, že (viz např. [3]):

$$\varepsilon = 1 + \chi \quad (1.1)$$

$$n^2 = \varepsilon, \quad (1.2)$$

kde ε je dielektrická permitivita a n index lomu materiálu.

Susceptibilita souvisí s elektronovou hustotou

$$\chi = \chi_n \rho, \quad (1.3)$$

kde χ_n je nominální hodnota susceptibility a ρ relativní elektronová hustota materiálu. Index lomu závisí také na frekvenci záření. Pro rentgenové záření je index lomu komplexní číslo menší než jedna. Přibližně pro rentgenové záření platí $|1 - n| \approx 10^{-5}$, proto v některých případech používáme index lomu (kombinace vztahu (1.1) a (1.2)) jako rozvoj do Taylorovy řady:

$$n = \sqrt{1 + \chi} \approx 1 + \frac{\chi}{2} \quad (1.4)$$

Uvažujme nyní polonekonečnou vrstvu (vzhledem k souřadné ose z) s drsným rozhraním, jehož profil můžeme charakterizovat náhodnou funkcí $U(x, y) = U(\vec{r}_H)$. Střední hodnotu funkce položíme $\langle U \rangle = 0$ a průměrnou z -ovou souřadnici profilu $z = z_0$.

Susceptibilita takového polonekonečného vzorku je pomocí Heavisideovy funkce dána jako:

$$\chi(\vec{r}) = \chi H(z_0 + U - z) \quad (1.5)$$

Statistické chování rozhraní je dáno jeho bodovými a korelačními vlastnostmi (korelace je vzájemný vztah mezi dvěma veličinami - pokud jsou dvě veličiny korelované a jedna se mění, mění se i druhá a naopak. V našem případě budeme chtít zjistit korelaci mezi drsnostmi rozhraní - viz. dále).

Bodové vlastnosti rozhraní jsou popsány hustotou pravděpodobnosti posunutí (vzhledem k z_0), danou jako:

$$w(U) = \frac{1}{S} \int_S \delta(U(\vec{r}_H) - U) d\vec{r}_H, \quad (1.6)$$

kde S je oblast, přes kterou integrujeme a příslušná charakteristická funkce je:

$$\chi_U(Q) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iQU} w(U) dU = \langle e^{-iQU} \rangle \quad (1.7)$$

Drsnost rozhraní spočítáme pak jako střední kvadratickou odchylku:

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} w(U) U^2 dU = \langle U^2(\vec{r}_{II}) \rangle \quad (1.8)$$

Pokud je profil rozhraní statisticky homogenní, je drsnost nezávislá na laterální pozici \vec{r}_{II} , tzn. souřadnicích x , y .

Budeme uvažovat, že hustota pravděpodobnosti posunutí je normovaná Gaussova funkce, tedy:

$$w(U) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{U^2}{2\sigma^2}} \quad (1.9)$$

Dosadíme-li (1.9) do vztahu (1.7), dostaneme:

$$\begin{aligned} \chi_U(Q) &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-iQU - \frac{U^2}{2\sigma^2}\right) dU = \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\left(\frac{U}{\sigma\sqrt{2}} + iQ\sigma\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 - \frac{1}{2}Q^2\sigma^2\right] dU = \left| z = \frac{U}{\sigma\sqrt{2}} + iQ\sigma\sqrt{2} \right. \\ &= \frac{e^{-\frac{1}{2}Q^2\sigma^2}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2} dz = e^{-\frac{1}{2}Q^2\sigma^2} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Korelační vlastnosti rozhraní mezi dvěma body \vec{r}_{II} a \vec{r}'_{II} jsou popsány dvoudimenzionální hustotou pravděpodobnosti a charakteristickou funkcí:

$$w(U, U') = w(U(\vec{r}_{II}), U(\vec{r}'_{II})) \quad (1.11)$$

$$\chi_{UU'}(Q, Q') = \langle e^{-i(QU - Q'U')} \rangle \quad (1.12)$$

Pokud dvoubodová hustota pravděpodobnosti závisí pouze na $\vec{r}_{II} - \vec{r}'_{II}$, zavádíme takzvanou korelační funkci rozhraní jako:

$$C(\vec{r}_{II} - \vec{r}'_{II}) = \langle U(\vec{r}_{II})U(\vec{r}'_{II}) \rangle \quad (1.13)$$

Uvažujme více rozhraní (více vrstev rozmístěných podél osy z). Chceme-li popsat i vertikální korelaci, to znamená korelaci mezi dvěma různými rozhraními, bude korelační funkce vypadat takto:

$$C_{mn}(\vec{r}_{II} - \vec{r}'_{II}) = \langle U_m(\vec{r}_{II})U_n(\vec{r}'_{II}) \rangle \quad (1.14)$$

Často užívaná metoda je, že můžeme drsné rozhraní chápat jako náhodný fraktál. Korelační funkci m -tého rozhraní můžeme pak vzít ve tvaru:

$$C_m(\vec{r}_{II} - \vec{r}'_{II}) = \sigma_m^2 \exp\left[-\left(\frac{|\vec{r}_{II} - \vec{r}'_{II}|}{\Lambda_{lat,m}}\right)^{2h_m}\right], \quad (1.15)$$

kde σ_m je drsnost rozhraní, $\Lambda_{lat,m}$ je takzvaná laterální korelační délka a h_m je Hurstův fraktální koeficient ($h_m \in (0;1]$). Korelační funkce (1.15) má ale některé nevýhody. Předně, Fourierova transformace této funkce jde spočítat analyticky pouze pro $h_m = 0,5$ a $h_m = 1$. Navíc, pro malá h_m numericky počítaný Fourierův integrál velice pomalu konverguje. Tuto funkci nelze rovněž použít pro popis monokrystalů, neboť nerespektuje krystalovou strukturu. My budeme ale pracovat s amorfními látkami, takže můžeme funkci (1.15) použít.

Pro popis korelačních vlastností dvou různých rozhraní budeme uvažovat funkci (1.14) ve tvaru, jako je uvedeno v [6].

$$C_{mn}(\vec{r}_{II} - \vec{r}_{II}') = \sqrt{C_m(\vec{r}_{II} - \vec{r}_{II}')C_n(\vec{r}_{II} - \vec{r}_{II}')} \exp\left(-\frac{|z_m - z_n|}{\Lambda_{vert}}\right), \quad (1.16)$$

kde Λ_{vert} je vertikální korelační délka a z_m , resp. z_n , je průměrná vertikální z-tová souřadnice daného rozhraní. Pro jednoduchost budeme ale dále uvažovat, že všechny fraktálové koeficienty jsou stejné, tedy $h_i = h, \forall i$.

1.2 Základní pojmy rozptylu

Nyní se budeme zabývat popisem rozptylového procesu. Nadále budeme uvažovat pružný rozptyl paprsků, to znamená, že nedochází ke ztrátě energie (úhlová frekvence a vlnová délka dopadající a rozptýlené vlny je stejná, jejich vlnové vektory mají stejnou délku). Vzorek budeme ozařovat rovinnou vlnou, jejíž elektrická intenzita je daná předpisem:

$$\vec{E}_i(\vec{r}, t) = \vec{E}_{i,0} e^{-i(\omega t - \vec{K}_i \cdot \vec{r})}, \quad (1.17)$$

kde $\vec{E}_{i,0}$ je amplituda, ω úhlová frekvence a \vec{K}_i je vlnový vektor dopadající vlny. Jak bylo řečeno, úhlové frekvence dopadající a rozptýlené vlny jsou stejné, nadále nebudeme člen $e^{-i\omega t}$ psát.

Pokud chceme popsat rozptylový proces, musíme vyřešit rozptylovou rovnici (viz např. [1]; [2]):

$$(\Delta + K^2)\vec{E}(\vec{r}) = \hat{V}(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}) \quad (1.18)$$

Tato rovnice se řeší pomocí Greenovy funkce a řešení má tvar:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_i(\vec{r}) + \int G_0(\vec{r} - \vec{r}') \hat{T}(\vec{r}') \vec{E}_i(\vec{r}') d^3\vec{r}', \quad (1.19)$$

kde $G_0(\vec{r} - \vec{r}')$ je Greenova (rozbíhavá) funkce:

$$G_0(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{iK|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (1.20)$$

a $\hat{T}(\vec{r}')$ je operátor, který vypadá takto:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}G_0\hat{V} + \hat{V}G_0\hat{V}G_0\hat{V} + \dots \quad (1.21)$$

Protože je výpočet integrálu ve výrazu (1.19) značně složitý už pro druhý člen rozvoje operátoru (1.21), bereme v kinematické aproximaci za operátor \hat{T} pouze první člen rozvoje (Bornova aproximace [2]), tedy $\hat{T} \approx \hat{V}$.

Pokud dosadíme do (1.19) z rovnice (1.20) a (1.21) a použijeme výše zmíněnou aproximaci, dostaneme výraz:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_i(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{iK|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \hat{V}(\vec{r}') \vec{E}_{i,0} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}'} d^3\vec{r}' \quad (1.22)$$

Pokud platí, že $|\vec{r}'| \ll |\vec{r}|$, to znamená, že je detektor daleko od rozptylového centra, můžeme výraz $K|\vec{r} - \vec{r}'|$ rozvinout pomocí Taylorova rozvoje (viz [2]).

$$\begin{aligned} K|\vec{r} - \vec{r}'| &= K\sqrt{(\vec{r} - \vec{r}') \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} = \\ &= Kr\sqrt{1 - 2\frac{\vec{e}_r \cdot \vec{r}'}{r} + \left(\frac{r'}{r}\right)^2} \approx Kr - \vec{K}_s \cdot \vec{r}', \end{aligned} \quad (1.23)$$

kde \vec{e}_r je jednotkový vektor ve směru \vec{r} a \vec{K}_s je vektor, který charakterizuje rozptýlenou vlnu a směřuje přímo do detektoru. Použijeme-li tuto aproximaci, lze přepsat vztah (1.22) na:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}) &= \vec{E}_i(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{iKr}}{r} \int \hat{V}(\vec{r}') \vec{E}_{i,0} e^{i(\vec{K}_s - \vec{K})\vec{r}'} d^3\vec{r}' = \\ &= \vec{E}_i(\vec{r}) - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{iKr}}{r} \vec{E}_{i,0} \langle K_s | \hat{V} | K_i \rangle\end{aligned}\quad (1.24)$$

kde jsme poslední výraz v rovnici zapsali pomocí Diracovy symboliky typické pro kvantovou mechaniku.

Řešení se rovnice (1.18) se dá (při použití předchozích aproximací) také vyjádřit pomocí takzvaného form-faktoru a to:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_{i,0} \left[e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}} + f(\vec{K}_i, \vec{K}_s) \frac{e^{iKr}}{r} \right] \quad (1.25)$$

Form-faktor má tedy tvar:

$$f(K_i, K_s) = \frac{1}{4\pi} \langle K_s | \hat{V} | K_i \rangle \quad (1.26)$$

Důležitým pojmem v teorii rozptylu je diferenciální účinný průřez. Je to v podstatě pravděpodobnost, že se paprsek rozptýlí do určitého infinitizimálně malého prostorového úhlu. Dá se odvodit (viz. např. [2]), že diferenciální účinný průřez je dán absolutní hodnotou form-faktoru:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(K_i, K_s)|^2 \quad (1.27)$$

Z předchozích vztahů tedy pro diferenciální účinný průřez dostáváme:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16\pi^2} \left| \langle K_s | \hat{V} | K_i \rangle \right|^2 \quad (1.28)$$

Intenzita, kterou při experimentu měříme, je úměrná diferenciálnímu účinnému průřezu. Pokud se paprsek rozptýlí do malého prostorového úhlu $d\Omega$, můžeme psát, že mezi intenzitou a diferenciálním účinným průřezem platí vztah:

$$I = j \frac{d\sigma}{d\Omega} \Omega = \frac{I_{prim}}{S} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega, \quad (1.29)$$

kde j hustota toku, I_{prim} intenzita a S průřez dopadajícího paprsku. Navíc, pokud je detektor dostatečně daleko od rozptylového centra, můžeme s velkou přesností psát:

$$d\Omega = \frac{S}{4\pi d^2}; \quad S \ll d^2, \quad (1.30)$$

kde d je vzdálenost rozptylového centra od detektoru. Pak se vztah (1.29) změní na:

$$I = I_{prim} \frac{d\sigma}{d\Omega} \frac{1}{4\pi d^2} \quad (1.31)$$

Je potřeba také zjistit, jak vypadá rozptylový potenciál \hat{V} ve vztahu (1.28). Pokud se omezíme na nemagnetické materiály, to znamená když relativní magnetická permeabilita bude 0, z Maxwellových rovnic se dá odvodit, že pro potenciál bude platit tento vztah:

$$V = \nabla \nabla \cdot (-K^2 \chi(\vec{r})), \quad (1.32)$$

kde K je vlnový vektor a χ susceptibilita. Nadále se budeme zabývat pouze malouhlovým rozptylem. Pro ten se dá aproximovat, že:

$$V \approx -K^2 \chi(\vec{r}) \quad (1.33)$$

1.3 Fresnelovy koeficienty

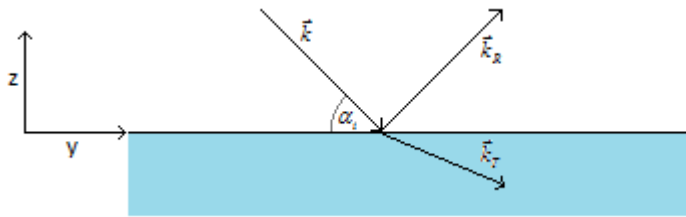
Zabývejme se situací, kdy nám rentgenové záření dopadá na hladké rozhraní vakua a nějakého materiálu. Uvažujme monochromatickou rovinnou vlnu - tu můžeme snadno popsat výrazem (1.17). Vlna se na rozhraní částečně odrazí a částečně láme. Odraženou a prošlou vlnu můžeme psát jako:

$$\begin{aligned} \vec{E}_R &= \vec{E}_{R,0} e^{-i(\omega_R t - \vec{k}_R \cdot \vec{r})} \\ \vec{E}_T &= \vec{E}_{T,0} e^{-i(\omega_T t - \vec{k}_T \cdot \vec{r})} \end{aligned} \quad (1.34)$$

Pro velikost vlnového vektoru všeobecně platí (viz např. [3]):

$$k = k_0 n, \quad (1.35)$$

kde k_0 je velikost vlnového vektoru ve vakuu a n index lomu prostředí. Předpokládejme, že rozhraní leží v rovině xy jako na obrázku 1.1 (osa x jde kolmo z obrázku):



Obrázek 1.1 - Odraz a lom rentgenového záření na rozhraní dvou prostředí

Složka vlnového vektoru, která je rovnoběžná s rovinou xy se při průchodu rozhraním zachovává, mění se pouze z -tová komponenta vektoru. Z geometrie, kterou vidíme na obrázku 1.1, můžeme lehce odvodit (pro rentgenové záření, tzn. s využitím (1.4) a zanedbáním členů $\chi^2 \approx 10^{-10}$), že pro velikost z -tové komponenty prošlého vlnového vektoru platí:

$$k_{z,T} = k \sqrt{\sin^2 \alpha_i + \chi}, \quad (1.36)$$

kde α_i je úhel dopadu a k velikost vlnového vektoru dopadajícího záření (v našem případě tedy velikost ve vakuu).

V rovině rozhraní existují všechny tři vlny současně - v libovolném bodě roviny a v libovolném čase musí mít tedy vlny stejnou fázi. To znamená:

$$\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} = \omega_R t - \vec{k}_R \cdot \vec{r} = \omega_T t - \vec{k}_T \cdot \vec{r} \quad (1.37)$$

Dosadíme-li postupně za $t = 0$ a $\vec{r} = 0$, dostaneme, že musí platit:

$$\begin{aligned} \omega &= \omega_R = \omega_T \\ \vec{k} \cdot \vec{r} &= \vec{k}_R \cdot \vec{r} = \vec{k}_T \cdot \vec{r} \end{aligned} \quad (1.38)$$

Okrajové podmínky, které platí na rozhraní, tedy jsou:

$$E_i + E_R = E_T; \quad k_{z,i}(E_i - E_R) = k_{z,T} E_T, \quad (1.39)$$

kde E_i , E_R a E_T jsou velikosti intenzity dopadající, odražené a prošlé vlny, $k_{z,i}$ a $k_{z,T}$ z -tové složky vlnového vektoru dopadající a prošlé vlny.

Chtěli bychom nyní stanovit, v jakém poměru jsou prošlá a odražená intenzita vzhledem k intenzitě primárního paprsku - tedy určit reflektivní a transmisní koeficienty. Z předchozích hraničních podmínek (1.39) se dá lehce odvodit, že:

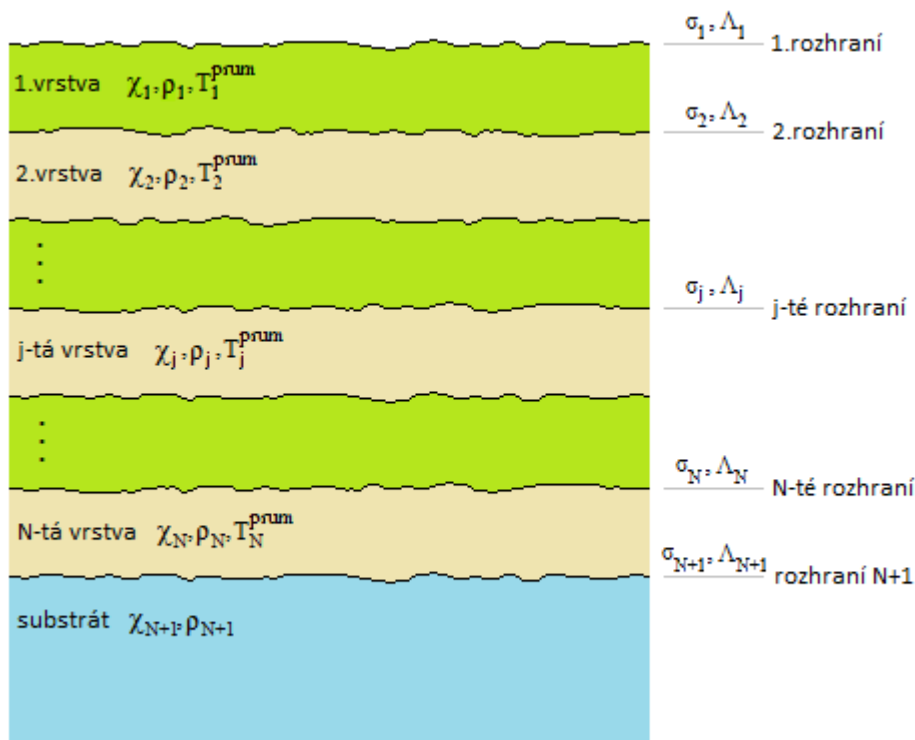
$$r_{0,1} = \frac{E_R}{E_i} = \frac{k_{z,0} - k_{z,1}}{k_{z,0} + k_{z,1}},$$

$$t_{0,1} = \frac{E_T}{E_i} = \frac{2k_{z,0}}{k_{z,0} + k_{z,1}},$$
(1.40)

kde jsme si přeznačili z-tové komponenty vlnových vektorů jako $k_{z,i} = k_{z,0}$ a $k_{z,T} = k_{z,1}$. Důvodem je to, že v dalším výkladu potřebujeme indexovat rozhraní vzhledem k pořadí vrstvy v multivrstvě. Vztahy (1.40) platí univerzálně bez ohledu na polarizaci původního dopadajícího záření.

2 Spekulární a difúzní odraz

V této kapitole se budeme zabývat odrazem rentgenového záření od multivrstvy. Pokud nebude uvedeno jinak, budeme uvažovat multivrstvu jako N vrstev ležících na polonekonečném substrátu. Písmenem j budeme indexovat pořadí vrstvy, index $j = 0$ značí volné prostředí nad prvním rozhraním, $j = N + 1$ indexuje substrát, každá vrstva má svoji průměrnou tloušťku, elektronovou hustotu, susceptibilitu, každé rozhraní svoji drsnost a další statistické vlastnosti - viz. obrázek 2.1.



Obrázek 2.1 - Nákres multivrstvy o N vrstvách

Uvažujeme-li takovouto multivrstvu, susceptibilita ve výrazu (1.5) přejde na:

$$\chi(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N+1} \chi_n \Omega_n(\vec{r}), \quad (2.1)$$

kde $\Omega_n(\vec{r})$ je tvarová funkce n-té vrstvy - nabývá hodnoty 1 uvnitř n-té vrstvy, hodnoty 0 mimo ni. Tvarová funkce $\Omega_n(\vec{r})$ tedy vypadá takto:

$$\begin{aligned} \Omega_n(\vec{r}) &= H(z_n + U_n(\vec{r}) - z) - H(z_{n+1} + U_{n+1}(\vec{r}) - z) \quad 0 < n \leq N \\ \Omega_{N+1}(\vec{r}) &= H(z_{N+1} + U_{N+1}(\vec{r}) - z) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Dále rozepsáním vztahů (1.40) pro jednotlivá rozhraní v multivrstvě odvodíme důležité relace, které použijeme v dalších výpočtech. Podobně jako v (1.40) značilo $r_{0,1}$ Fresnellův koeficient pro první rozhraní, tj. rozhraní mezi vrstvou 0 (vakuum) a vrstvou 1, bude nyní $r_{j-1,j}$ značit Fresnellův koeficient pro j-té rozhraní, tj. rozhraní mezi vrstvou j a $j+1$ (analogicky $t_{j-1,j}$).

$$\begin{aligned}
r_{j-1,j} &= \frac{k_{z,j-1} - k_{z,j}}{k_{z,j-1} + k_{z,j}} = -r_{j,j-1} \\
t_{j-1,j} &= \frac{2k_{z,j-1}}{k_{z,j-1} + k_{z,j}} = \frac{2k_{z,j-1} - 2k_{z,j} + 2k_{z,j}}{k_{z,j-1} + k_{z,j}} = 2r_{j-1,j} + t_{j,j-1} \Rightarrow t_{j-1,j} - t_{j,j-1} - 2r_{j-1,j} = 0
\end{aligned} \tag{2.3}$$

2.1 Odraz od drsného rozhraní

Naším úkolem bude nyní odvodit, jak se projeví drsnost rozhraní na Fresnelových koeficientech (1.40). Vzorek budeme považovat za jedno rozptylové centrum s nějakým efektivním potenciálem. Výslednou intenzitu (resp. diferenciální účinný průřez (1.28)) získáme středováním přes všechny možné konfigurace rozhraní. Musíme tedy řešit rozptylovou rovnici:

$$(\Delta + K^2)\langle E \rangle = \langle VE \rangle \equiv V_{ef}\langle E \rangle, \tag{2.4}$$

kde V_{ef} je nějaký efektivní potenciál. My budeme používat středovaný potenciál (1.33), který volíme ho ve tvaru:

$$V_{ef}(\vec{r}) \approx -K^2 \sum_{j=1}^{N+1} \chi_j \langle \Omega_j(\vec{r}) \rangle \tag{2.5}$$

V tomto tvaru se efektivní potenciál skládá z průměrných příspěvků jednotlivých vrstev a veškerá možná vertikální korelace mezi rozhraními je tedy zanedbána. Pokud můžeme o vzorku předpokládat, že je laterálně statisticky homogenní, závisí hodnota efektivního potenciálu pouze na z-tové souřadnici.

Pomocí maticového zápisu lze odvodit, že pro intenzity odražené a prošlé multivrstvou platí (viz [1]):

$$\begin{aligned}
E_0 &= ME_{sub} = \phi_0^{-1} R_1 \phi_1^{-1} R_2 \dots R_{N+1} \phi_{N+1}^{-1} E_{sub}, \tag{2.6} \\
E_j &= \begin{pmatrix} E_{j,T} \\ E_{j,R} \end{pmatrix}; \quad \phi_j = \begin{pmatrix} e^{-ik_{z,j}T_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_{z,j}T_j} \end{pmatrix}; \quad R_j = \frac{1}{t_{j-1,j}} \begin{pmatrix} 1 & r_{j-1,j} \\ r_{j-1,j} & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

kde $k_{z,j}$ je z-tová souřadnice vlnového vektoru v j-té vrstvě, T_j je tloušťka j-té vrstvy a $r_{j-1,j}$ a $t_{j-1,j}$ jsou Fresnelovy koeficienty definované (1.40).

Musí platit, že

$$E_0 = \begin{pmatrix} E_i \\ E_R \end{pmatrix}; \quad E_{sub} = \begin{pmatrix} E_{sub,T} \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{2.7}$$

neboť 0 indexuje volné prostranství nad multivrstvou a zde máme primární dopadající paprsek. Naproti tomu v substrátu žádná odražená vlna není, je zde pouze vlna prošlá.

Pokud jsou rozhraní drsná, s laterální pozicí \vec{r}_{II} se bude měnit tloušťka j-té vrstvy v matici ϕ_j , a to tak, že:

$$T_j(\vec{r}_{II}) = T_j^{prum} + U_j(\vec{r}_{II}) - U_{j+1}(\vec{r}_{II}), \tag{2.8}$$

kde U_j je odchylka j-tého rozhraní a T_j^{prum} je průměrná tloušťka j-té vrstvy (tzn. tloušťka neporušené vrstvy).

Modifikace matic ϕ_j můžeme lehce dosáhnout tak, že matice ϕ_j v rovnici (2.6) obložíme maticemi:

$$\hat{U}_j = \begin{pmatrix} e^{ik_{z,j}U_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z,j}U_j} \end{pmatrix}; \quad \tilde{U}_{j+1} = \begin{pmatrix} e^{ik_{z,j}U_{j+1}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_{z,j}U_{j+1}} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Rovnice (2.6) pak přejde na:

$$E_0 = ME_{sub} = \phi_0^{-1} \tilde{U}_1 R_1 \hat{U}_1 \phi_1^{-1} \tilde{U}_2 R_2 \cdots R_{N+1} \hat{U}_{N+1} \phi_{N+1}^{-1} E_{sub} \quad (2.10)$$

Na začátku tohoto odstavce jsme stanovili, že potřebujeme spočítat střední hodnotu intenzity, která jde do detektoru (tzn. $\langle E_0 \rangle$). Předpokládáme, že intenzita v substrátu není náhodná, což není ve skutečnosti pravda, protože rozhraní jsou popsána náhodnou funkcí $U(\vec{r}_{II})$. Zavedením aproximace (2.5) jsme ale náhodnou tvarovou funkcí $\Omega_j(\vec{r})$ vystředovali, tudíž E_{sub} za náhodnou považovat nebudeme. Můžeme tedy psát:

$$\langle E_0 \rangle = \langle M \rangle E_{sub} \quad (2.11)$$

Tuto rovnici můžeme přepsat tak, že maticemi \hat{U}_j a \tilde{U}_{j+1} obložíme matice R_j . Předpokládáme-li, že jsou odchylky U_j statisticky nezávislé (vzhledem k j , tj. zanedbáváme vertikální korelaci), rovná se pak střední hodnota součinu všech matic součinu jednotlivých středních hodnot $\langle \tilde{U}_j R_j \hat{U}_j \rangle$. Pak můžeme zavést modifikované Fresnelovy koeficienty následovně:

$$R'_j = \langle \tilde{U}_j R_j \hat{U}_j \rangle = \frac{1}{t'_{j-1,j}} \begin{pmatrix} 1 & r'_{j-1,j} \\ r'_{j-1,j} & 1 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

Musíme dále uvažovat, že:

$$\left\langle \frac{e^{i(k_{z,j-1}+k_{z,j})U_j}}{e^{i(k_{z,j-1}-k_{z,j})U_j}} \right\rangle \approx \frac{\langle e^{i(k_{z,j-1}+k_{z,j})U_j} \rangle}{\langle e^{i(k_{z,j-1}-k_{z,j})U_j} \rangle}, \quad (2.13)$$

což si podle numerických výpočtů můžeme dovolit, když jsou drsnosti mnohem menší ve srovnání s tloušťkami vrstev. V našem měření platí, že tloušťky jsou v řádu stovek Angströmů a drsnosti v řádech jednotek Angströmů, aproximaci (2.13) si tedy můžeme dovolit.

Pak výpočtem R'_j odvodíme, že

$$r'_{j-1,j} = r_{j-1,j} \frac{\langle e^{i(k_{z,j-1}+k_{z,j})U_j} \rangle}{\langle e^{i(k_{z,j-1}-k_{z,j})U_j} \rangle} = r_{j-1,j} \frac{\chi_{U_j}(k_{z,j-1} + k_{z,j})}{\chi_{U_j}(k_{z,j-1} - k_{z,j})} \quad (2.14)$$

$$t'_{j-1,j} = \frac{t_{j-1,j}}{\langle e^{i(k_{z,j-1}-k_{z,j})U_j} \rangle} = \frac{t_{j-1,j}}{\chi_{U_j}(k_{z,j-1} - k_{z,j})}$$

Nyní můžeme dosadit z výpočtu (1.10), který jsme prováděli v první kapitole. Fresnelovy koeficienty pro drsné rozhraní vypadají tedy takto:

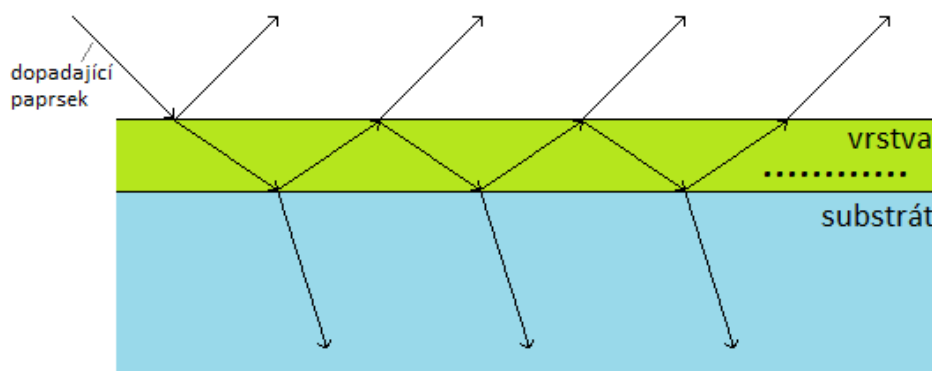
$$r'_{j-1,j} = r_{j-1,j} e^{-2k_{z,j}k_{z,j-1}\sigma_j^2} \quad (2.15)$$

$$t'_{j-1,j} = t_{j-1,j} e^{\frac{1}{2}(k_{z,j-1}-k_{z,j})^2\sigma_j^2} \quad (2.16)$$

Po rozepsání je vidět, že dokonce platí beze změny vztahy (2.3), které jsme odvodili na začátku této kapitoly.

2.2 Spekulární odraz od drsné multivrstvy

Naším cílem nyní bude popsat spekulární odraz záření od multivrstvy. Uvažujme nejprve jednu vrstvu ležící na substrátu, kterou budeme ozařovat. Dopadající vlna se rozloží na dvě části. Jedna se přímo odráží od vrstvy pod stejným úhlem, jako dopadal primární paprsek, druhá projde do vrstvy pod určitým úhlem. Druhá část vlny prochází vrstvou a na rozhraní vrstvy se substrátem se opět rozloží na část, která se odráží a na část, která se láme. Odražená část jde zpět vrstvou a prochází, nebo se láme na prvním rozhraní, a tak dále. Vše je znázorněno na Obrázku 3.2.



Obrázek 2.2 - Odraz na vrstvě ležící na substrátu

Ve vrstvě tedy v podstatě dojde k nekonečně mnoho odrazům. Výsledná intenzita je pak dána superpozicí všech svazků, které se dostaly zpět na povrch. Máme tedy:

$$E = E_i \left(r_{0,1} + t_{0,1} e^{ik_{z,1}T} r_{1,2} e^{ik_{z,1}T} t_{1,0} + t_{0,1} e^{ik_{z,1}T} r_{1,2} e^{ik_{z,1}T} r_{1,0} e^{ik_{z,1}T} r_{1,2} e^{ik_{z,1}T} t_{1,0} + \dots \right), \quad (2.17)$$

kde $k_{z,1}$ je z-tová složka vlnového vektoru ve vrstvě, T průměrná tloušťka vrstvy a $r_{j-1,j}$ Fresnelovy koeficienty.

Uvážíme-li vztahy (2.3) odvozené pro Fresnelovy koeficienty na začátku kapitoly, které platí, i když uvažujeme drsnost, dostaneme dvě nekonečné řady:

$$E = E_i \left(\sum_{n=0}^{\infty} r_{0,1} \left(-e^{2ik_{z,1}T} r_{1,2} r_{0,1} \right)^n + \sum_{n=0}^{\infty} e^{2ik_{z,1}T} r_{1,2} \left(-e^{2ik_{z,1}T} r_{1,2} r_{0,1} \right)^n \right) \quad (2.18)$$

Tyto řady můžeme sečíst a dostaneme:

$$E = E_i \frac{r_{0,1} + r_{1,2} e^{2ik_{z,1}T}}{1 + r_{0,1} r_{1,2} e^{2ik_{z,1}T}} \quad (2.19)$$

Dostali jsme tedy intenzitu svazku odraženého od jedné vrstvy ležící na substrátu. Pokud chceme dostat intenzitu svazku odraženého od multivrstvy, vyjdeme z jedné vrstvy ležící na substrátu a další vrstvy budeme postupně přidávat. Máme-li tedy N vrstev a substrát indexujeme indexem $N + 1$, dostaneme:

$$\begin{aligned}
r_{N-1,N} &= \frac{r'_{N-1,N} + r_{N,N+1} e^{2ik_z T_N}}{1 + r'_{N-1,N} r_{N,N+1} e^{2ik_z T_N}} \\
&\vdots \\
r_{j-1,j} &= \frac{r'_{j-1,j} + r_{j,j+1} e^{2ik_z T_j}}{1 + r'_{j-1,j} r_{j,j+1} e^{2ik_z T_j}} , \\
&\vdots \\
r_{0,1} &= \frac{r'_{0,1} + r_{1,2} e^{2ik_z T_1}}{1 + r'_{0,1} r_{1,2} e^{2ik_z T_1}}
\end{aligned} \tag{2.20}$$

kde $r'_{j,j+1}$ jsou koeficienty dané vztahy (2.15).

Výsledná měřená intenzita je pak dána jako:

$$I = RI_{prim} = |r_{0,1}|^2 I_{prim} , \tag{2.21}$$

kde I_{prim} je intenzita dopadajícího paprsku.

2.3 Difúzní rozptyl

Jak bylo naznačeno na začátku odvození odrazu od drsného rozhraní, potřebujeme spočítat rovnici (2.4). Budeme chtít spočítat diferenciální účinný průřez podle vztahu (1.28). Vzorek bereme jako jedno rozptylové centrum s nějakým efektivním potenciálem a diferenciální účinný průřez (1.28) budeme středovat přes všechny laterální souřadnice.

Označme $\tau = \langle K_s | \hat{V} | K_i \rangle$. Uvažme nyní, že rozptylový potenciál se skládá ze dvou částí: neporušeného potenciálu \hat{V}_A a porušeného \hat{V}_B , tedy i τ má dvě části τ_A a τ_B . Potom pro diferenciální účinný průřez máme:

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{16\pi^2} \langle |\tau_A + \tau_B|^2 \rangle = \\
&= \frac{1}{16\pi^2} \left(\tau_A^2 + \tau_A \langle \tau_B^* \rangle + \tau_B \langle \tau_A^* \rangle + \langle |\tau_B|^2 \rangle \right) = \\
&= \frac{1}{16\pi^2} \left(|\tau_A + \langle \tau_B \rangle|^2 + \langle |\tau_B|^2 \rangle - |\langle \tau_B \rangle|^2 \right) = \\
&= \frac{1}{16\pi^2} \left(|\tau_A + \langle \tau_B \rangle|^2 + Cov(\tau_B, \tau_B) \right)
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Tato část:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16\pi^2} |\tau_A + \langle \tau_B \rangle|^2 \tag{2.23}$$

představuje spekulární odraz na drsných rozhraních v multivrstvě, který jsme počítali na začátku této kapitoly. Naším hlavním cílem bude tedy spočítat kovarianci $Cov(\tau_B, \tau_B)$. Nejprve spočteme, čemu se rovná τ_B .

Hned na začátek provedeme aproximaci a to takovou, že budeme celou multivrstvou považovat za polonekonečný substrát se susceptibilitou χ_s . Původní potenciál ve tvaru (1.33) přejde na tvar:

$$\hat{V}_B = -K^2 \sum_{j=1}^{N+1} (\chi_j - \chi_s) \Omega_j(\vec{r}) = -K^2 \sum_{j=1}^{N+1} \Delta\chi_j \Omega_j(\vec{r}) \quad (2.24)$$

Použitím aproximace polonekonečného substrátu spočteme τ_B jako:

$$\tau_B = \langle K_s | \hat{V}_B | K_i \rangle = - \int d^2 \vec{r}_{II} \int_{-\infty}^0 t_s e^{-i\vec{k}_{T,s} \cdot \vec{r}} K^2 \sum_{j=1}^{N+1} \Delta\chi_j \Omega_j(\vec{r}) t_i e^{-i\vec{k}_{T,i} \cdot \vec{r}} dz \quad (2.25)$$

kde i a s indexují dopadající paprsek a paprsek jdoucí do detektoru, t_i a t_s jsou Fresnelovy koeficienty (transmisní koeficienty při přechodu do polonekonečného substrátu se susceptibilitou χ_s).

Označme $\vec{Q} = \vec{k}_{T,s} - \vec{k}_{T,i}$. Po přehození sumace a integrace můžeme jednoduše vyintegrovat přes z a dostaneme:

$$\tau_B = - \frac{iK^2 t_i t_s}{Q_z} \sum_{j=1}^{N+1} \Delta\chi_j \int d^2 \vec{r}_{II} e^{-i\vec{Q}_{II} \cdot \vec{r}_{II}} \left(e^{-iQ_z z_j} e^{-iQ_z U_j} - e^{-iQ_z z_{j+1}} e^{-iQ_z U_{j+1}} \right) \quad (2.26)$$

Tento výsledek můžeme vhodnou úpravou přepsat na:

$$\tau_B = - \frac{iK^2 t_i t_s}{Q_z} \sum_{j=1}^{N+1} \delta\chi_j \xi_j, \quad (2.27)$$

kde jsme označili:

$$\delta\chi_j = \Delta\chi_j - \Delta\chi_{j-1} = \chi_j - \chi_s - \chi_{j-1} + \chi_s = \chi_j - \chi_{j-1} \quad (2.28)$$

$$\xi_j = e^{-iQ_z z_j} \int d^2 \vec{r}_{II} e^{-i\vec{Q}_{II} \cdot \vec{r}_{II}} e^{-iQ_z U_j(\vec{r}_{II})} \quad (2.29)$$

Ve výrazu (2.27) je nyní náhodná veličina pouze ξ_j . Musíme tedy spočítat kovarianci $Cov(\xi_j, \xi_k)$. Jelikož je v (2.29) náhodná veličina pouze $U_j(\vec{r}_{II})$, dosazením do kovariance dostaneme:

$$Cov(\xi_j, \xi_k) = e^{-iQ_z z_j} e^{iQ_z z_k} \int d^2 \vec{r}_{II} \int d^2 \vec{r}'_{II} e^{-i\vec{Q}_{II} \cdot (\vec{r}_{II} - \vec{r}'_{II})} Cov\left(e^{-iQ_z U_j(\vec{r}_{II})}, e^{-iQ_z U_k(\vec{r}'_{II})}\right) \quad (2.30)$$

Podle definice kovariance je $Cov(A, B) = \langle AB^* \rangle - \langle A \rangle \langle B^* \rangle$. Rozepsáním pro náš případ dostaneme:

$$Cov\left(e^{-iQ_z U_j(\vec{r}_{II})}, e^{-iQ_z U_k(\vec{r}'_{II})}\right) = \left\langle e^{-i(Q_z U_j(\vec{r}_{II}) - Q_z^* U_k(\vec{r}'_{II}))} \right\rangle - \left\langle e^{-iQ_z U_j(\vec{r}_{II})} \right\rangle \left\langle e^{iQ_z^* U_k(\vec{r}'_{II})} \right\rangle \quad (2.31)$$

Výpočet střední hodnoty $\left\langle e^{-iQ_z U_j(\vec{r}_{II})} \right\rangle$ jsme řešili v první kapitole. Výpočet členu $\left\langle e^{-i(Q_z U_j(\vec{r}_{II}) - Q_z^* U_k(\vec{r}'_{II}))} \right\rangle$ je složitější a řeší se takzvaným rozvojem do kumulantu (viz [7]).

$$\begin{aligned} \left\langle e^{-i(Q_z U_j(\vec{r}_{II}) - Q_z^* U_k(\vec{r}'_{II}))} \right\rangle &\approx \exp\left[-\frac{1}{2} \left\langle (Q_z U_j - Q_z^* U_k)^2 \right\rangle\right] = \\ &= \exp\left[-\frac{1}{2} \left\langle (Q_z U_j)^2 - 2|Q_z|^2 U_j U_k + (Q_z^* U_k)^2 \right\rangle\right] = \\ &= \exp\left[-\frac{1}{2} Q_z^2 \langle U_j^2 \rangle + |Q_z|^2 \langle U_j U_k \rangle - \frac{1}{2} (Q_z^*)^2 \langle U_k^2 \rangle\right] \end{aligned} \quad (2.32)$$

Z první kapitoly dosadíme do (2.32) vztahy (1.8) a (1.14). Po úpravách tedy dostaneme, že se celá kovariance (2.31) rovná:

$$\text{Cov}\left(e^{-iQ_z U_j(\bar{r}_{II})}, e^{-iQ_z U_k(\bar{r}_{II})}\right) = e^{-\frac{1}{2}(Q_z^2 \sigma_j^2 + (Q_z^*)^2 \sigma_k^2)} \left(e^{|Q_z|^2 C_{jk}(\bar{r}_{II} - \bar{r}'_{II})} - 1 \right) \quad (2.33)$$

Konečný vztah pro difúzní rozptyl bude tedy vypadat takto:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{diff} = \frac{K^4 |t_i t_s|^2}{16\pi^2 |Q_z|^2} \sum_{j=1}^{N+1} \sum_{k=1}^{N+1} \delta\chi_j \delta\chi_k^* e^{-i(Q_z z_j - Q_z^* z_k)} e^{-\frac{1}{2}(Q_z^2 \sigma_j^2 + (Q_z^*)^2 \sigma_k^2)} \times \quad (2.34)$$

$$\times \int d^2 \bar{r}_{II} \int d^2 \bar{r}'_{II} \left(e^{|Q_z|^2 C_{jk}(\bar{r}_{II} - \bar{r}'_{II})} - 1 \right) e^{-i\bar{Q}_{II} \cdot (\bar{r}_{II} - \bar{r}'_{II})}$$

Což můžeme ještě substitucí v integrálu přepsat. Zvolíme novou integrační proměnnou $\bar{x} = \bar{r}_{II} - \bar{r}'_{II}$ a jedno vyintegrování nám dá ozářenou plochu vzorku.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{diff} = \frac{AK^4 |t_i t_s|^2}{16\pi^2 |Q_z|^2} \sum_{j=1}^{N+1} \sum_{k=1}^{N+1} \delta\chi_j \delta\chi_k^* e^{-i(Q_z z_j - Q_z^* z_k)} e^{-\frac{1}{2}(Q_z^2 \sigma_j^2 + (Q_z^*)^2 \sigma_k^2)} \int d^2 \bar{x} \left(e^{|Q_z|^2 C_{jk}(\bar{x})} - 1 \right) e^{-i\bar{Q}_{II} \cdot \bar{x}} \quad (2.35)$$

Jak bylo řečeno v první kapitole, Fourierova transformace korelační funkce, kterou jsme použili, čili integrál ve vztahu (2.35) (po úpravě), jde spočítat analyticky pouze v několika případech. Na to se nyní podíváme v následujícím odstavci.

2.4 Analytický výpočet Fourierovy transformace korelační funkce

Protože je korelační funkce ve výrazu (2.35) v exponenciále, vyjádříme ji pomocí Taylorova rozvoje. Jako korelační funkci používáme (1.16) a, jak bylo řečeno v první kapitole, její Fourierova transformace, čili integrál, který vznikl v (2.35) zavedením Taylorova rozvoje, jde spočítat analyticky pouze v několika případech. Integraci můžeme provést přes celou rovinu (korelační funkce nabývá měřitelných nenulových hodnot na ploše daleko menší, než je ozářená plocha vzorku). Integrál vyjádříme v polárních souřadnicích.

$$\sum_{s=1}^{+\infty} \frac{1}{s!} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} dr r e^{-i|\bar{Q}_x| r \cos \varphi} \left[|Q_z|^2 C_{mn}(\bar{r}) \right]^s = \quad (2.36)$$

$$= \sum_{s=1}^{+\infty} \frac{|Q_z|^{2s} \sigma_j^s \sigma_k^s}{s!} e^{-\frac{s}{2} \left(\frac{1}{\Lambda_{lat,j}^{2h}} + \frac{1}{\Lambda_{lat,k}^{2h}} \right)} e^{-\frac{|z_j - z_k|}{\Lambda_{vert}}} 2\pi \int_0^{+\infty} dr r J_0 \left(|\bar{Q}_{II}| r \right) e^{-\frac{s}{2} r^{2h}}$$

kde J_0 je Besselova funkce nultého řádu. Integrál v tomto výrazu se dá řešit analyticky pro $h = 1$ a $h = 0,5$. V tabulkách s integrály (např. [5]) můžeme nalézt:

$$\int_0^{+\infty} J_\nu(\beta x) e^{-\alpha x} dx = \frac{\beta^{-\nu} \left[\sqrt{\alpha^2 + \beta^2} - \alpha \right]^\nu}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}}; \quad \text{Re } \nu > -1; \text{Re}(\alpha \pm i\beta) \geq 0 \quad (2.37)$$

$$\int_0^{+\infty} J_\nu(\beta x) e^{-\alpha x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{8\alpha}} I_{\frac{1}{2}\nu} \left(\frac{\beta^2}{8\alpha} \right); \quad \text{Re } \alpha > 0; \beta > 0; \text{Re } \nu > -1, \quad (2.38)$$

kde $I_{\frac{1}{2}\nu}$ je takzvaná modifikovaná Besselova funkce, která souvisí s klasickou

Besselovou funkcí, a platí: $I_\mu(z) = e^{-\frac{\pi}{2}\mu i} J_\mu \left(e^{\frac{\pi}{2}i} z \right)$.

Je rovněž vidět, že podmínky pro existenci integrálů (2.37) a (2.38) jsou splněny. Dáme-li vše dohromady, dostaneme pro $h = 0,5$:

$$\int_0^{+\infty} dr r J_0(|Q_{II}|r) e^{-\frac{s}{2}r^{2h}} = \frac{1}{\sqrt{\frac{s^2}{4} + |Q_{II}|^2}} \quad (2.39)$$

a pro $h = 1$:

$$\int_0^{+\infty} dr r J_0(|Q_{II}|r) e^{-\frac{s}{2}r^{2h}} = \frac{\sqrt{2\pi}}{2\sqrt{s}} e^{-\frac{|Q_{II}|^2}{4s}} J_0\left(e^{\frac{\pi}{2}i} \frac{|Q_{II}|^2}{4s}\right) \quad (2.40)$$

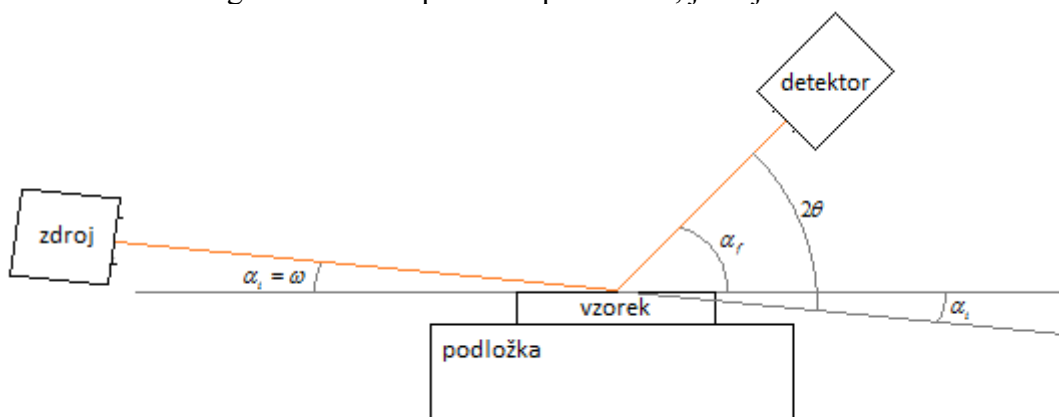
Tyto výsledky se pak dají při počítačovém zpracování zahrnout do programu pro urychlení výpočtu.

3 Korekce při měření

V této kapitole se budeme věnovat popisu měření spekulárního odrazu a difuzního rozptylu. Nastíníme geometrii při měření a popíšeme, které korekce je potřeba při zpracování výsledků měření započítat.

3.1 Geometrie měření

Obecně máme geometrické uspořádání při měření, jako je na obrázku 3.1.



Obrázek 3.1 - Geometrické uspořádání při měření

Z obrázku je vidět, že pro úhel dopadu α_i a výstupu α_f paprsku platí:

$$\begin{aligned}\alpha_i &= \omega \\ 2\theta &= \alpha_i + \alpha_f\end{aligned}\quad (3.1)$$

Podle toho, v jaké jsou vzájemné poloze během měření detektor se zdrojem záření (tzn. vztah mezi úhly ω a 2θ na obrázku) rozlišujeme několik druhů skenování. Pro naše měření jsou důležité tyto dva skeny:

2θ - ω sken

Detektor obíhá stejnou úhlovou rychlostí kolem vzorku jako zdroj (otáčení vůči ose, která prochází vzorkem a vychází kolmo z obrázku 3.1). Během skenování je vždy úhel 2θ roven dvojnásobku úhlu ω . Spekulárně odražený paprsek jde tedy vždy do detektoru - tento sken budeme používat pro měření spekulárního odrazu.

ω sken

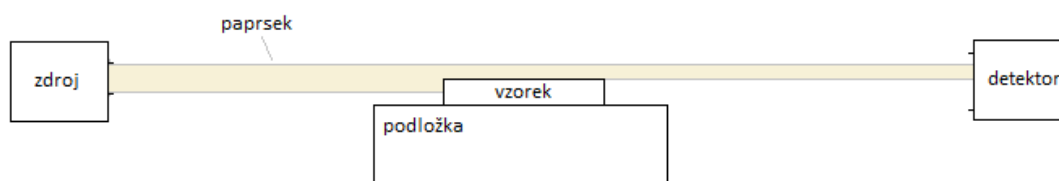
Při skenování je nastaven konstantní úhel 2θ . Podle vztahu (3.1) to tedy znamená, že při úhlu $\alpha_i = \theta$ je i výstupní úhel $\alpha_f = \theta$ a my měříme spekulárně odražený paprsek. Během měření tedy skenujeme oblast kolem něj. Tento sken budeme používat pro měření difuzního rozptylu.

3.2 Divergence svazku

Je třeba uvažovat, že zdroj rentgenového záření není bodový a tím pádem má primární svazek dopadající na vzorek určitou tloušťku. Navíc, přidáním štěrbin má svazek velkou divergenci v ose y. Tato vlastnost se projeví v několika aspektech.

3.2.1 Měření spekulárního odrazu $2\theta - \omega$ skenem

1) pro nulový úhel α_i bude vlnový vektor dopadajícího záření rovnoběžný s rovinou vzorku. Svazek jde rovnou do detektoru, ale půlka jeho intenzity je odstíněna (naznačeno na obrázku (3.2)). Ze začátku grafu ve $2\theta - \omega$ skenu tedy můžeme určit intenzitu primárního svazku.



Obrázek 3.2 - Měření při nulovém úhlu dopadu

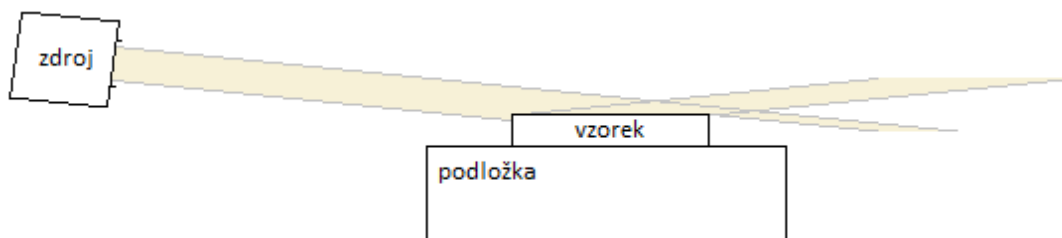
2) Uvažujeme, že detektor je dostatečně široký na to, aby zachytil celý odražený paprsek. Jelikož má primární paprsek konečnou šířku, do detektoru dopadá svazek, který je složen z vln, které se odrazily v určitém rozmezí úhlů. Budeme uvažovat, že intenzita primárního svazku má Gaussovské rozložení kolem úhlu dopadu. To znamená, že výsledná intenzita v detektoru bude dána konvolucí:

$$I = R * G, \quad (3.2)$$

kde $G = \frac{I_{prim}}{L_b \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\alpha^2}{2L_b^2}}$ a b je úhlová šířka primárního svazku. Při měření

difúzního rozptylu to však není tak jednoduché a konvoluci uvažovat nebudeme.

3) při velmi malých úhlech dochází k tomu, že část primárního paprsku vůbec nedopadá na vzorek, jak je naznačeno na obrázku 3.3.



Obrázek 3.3 - Měření při malých úhlech dopadu

Z jednoduché geometrie lze odvodit, že pro reflektivitu bude platit (namísto (2.21)):

$$R = p \sin \alpha |r_{0,1}|^2, \text{ když } p \sin \alpha < 1, \quad (3.3)$$

kde p je poměr šířky svazku a velikosti vzorku.

3.2.2 Měření difúzního rozptylu ω skenem

1) ve skutečnosti máme před zdrojem ještě divergenční štěrbinu (nebo šterbiny). Ty zaručí velkou divergenci primární paprsku vzhledem k ose kolmé k obrázku 3.1, a tak je pro malé úhly dopadu ozářena celá plocha vzorku až do místa, kde $p \sin \alpha = 1$. Se vzrůstajícím úhlem dopadu vytíná na vzorku dopadající záření proužek o určité šířce. To je následně s ohledem na tvar vzorku třeba započítat.

Geometrie s divergenčními šterbinami navíc umožňuje zjednodušit výraz (2.35) pro difúzní rozptyl. Pokud tedy uvažujeme divergenci ve směru osy y ,

ve skutečnosti tak měříme $\frac{1}{K} \int \frac{d\sigma}{d\Omega} dQ_y$, což můžeme upravit pomocí δ -distribuce (viz. např. [4]). Výraz (2.36) pak přejde na tvar:

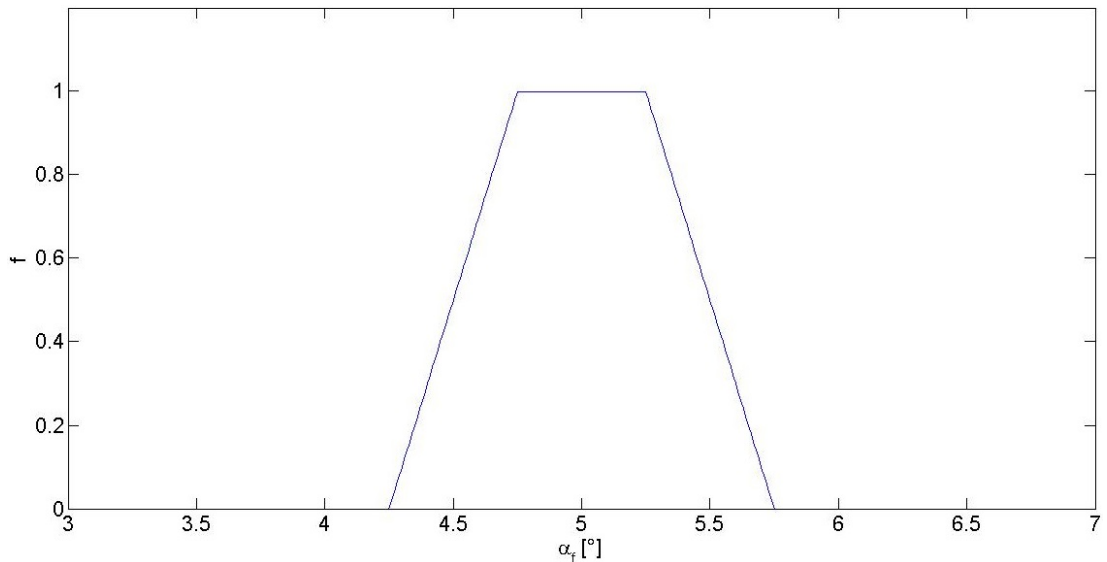
$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{diff} = \frac{AK^3 |t_i t_s|^2}{8\pi |Q_z|^2} \sum_{j=1}^{N+1} \sum_{k=1}^{N+1} \delta\chi_j \delta\chi_k^* e^{-i(Q_z z_j - Q_z^* z_k)} e^{-\frac{1}{2}(Q_z^2 \sigma_j^2 + (Q_z^*)^2 \sigma_k^2)} \int d\vec{x} e^{-i\vec{Q}_x \cdot \vec{x}} \left(e^{|\vec{Q}_z|^2 C_{jk}(\vec{x})} - 1 \right) \quad (3.4)$$

2) při měření difúzního rozptylu je třeba správně započítat spekulárně odražený paprsek. Nejlépe je to vidět na ω skenu. Jak bylo vysvětleno výše, při ω máme konstantní úhel 2θ . Kolem úhlu θ tedy musíme narazit na spekulárně odražený svazek. Z jednoduché geometrie se dá odvodit, že rozdělovací funkce spekulárně odraženého svazku bude mít tvar:

$$f(\alpha_i, \alpha_f, L_b, L_d) = \begin{cases} 0; & \alpha_f + \frac{L_d}{2} < \alpha_i - \frac{L_b}{2} \\ \frac{1}{L_b} \alpha_f - \frac{1}{L_b} \alpha_i + \frac{L_b + L_d}{2L_b}; & \left(\alpha_f + \frac{L_d}{2} > \alpha_i - \frac{L_b}{2} \right) \wedge \left(\alpha_f - \frac{L_d}{2} < \alpha_i + \frac{L_b}{2} \right) \\ 1; & \left(\alpha_f - \frac{L_d}{2} < \alpha_i - \frac{L_b}{2} \right) \wedge \left(\alpha_f + \frac{L_d}{2} > \alpha_i + \frac{L_b}{2} \right) \\ -\frac{1}{L_b} \alpha_f + \frac{1}{L_b} \alpha_i + \frac{L_b + L_d}{2L_b}; & \left(\alpha_f - \frac{L_d}{2} > \alpha_i + \frac{L_b}{2} \right) \wedge \left(\alpha_f + \frac{L_d}{2} > \alpha_i + \frac{L_b}{2} \right) \\ 0; & \alpha_f - \frac{L_d}{2} > \alpha_i + \frac{L_b}{2} \end{cases} \quad (3.5)$$

kde L_d je úhlová šířka detektoru.

Pro ukázkou zvolme konstantní $\alpha_i = 5^\circ$ a úhlovou šířku svazku $L_b = 0,5^\circ$ a detektoru $L_d = 1^\circ$. Rozdělovací funkce (3.5) pak bude vypadat takto:



Obrázek 3.4 - Rozdělovací funkce spekulárně odraženého paprsku při měření difúzního rozptylu

4 Měření

4.1 Měření na rentgenovém difraktometru

V této kapitole použijeme odvozené vztahy z předchozích kapitol při fitování naměřených dat z rentgenového difraktometru. Jako vzorek jsme použili multivrstvy složené z SiO_2 , ZrO_2 a substrátu z minerálního skla, vzorky byly ve tvaru tenkých disků o průměru 2,5 cm. Uspořádání vrstev v jednotlivých vzorcích vidíme na obrázku 4.1.



Obrázek 4.1 - Uspořádání vrstev v použitých vzorcích

Na daných vzorcích jsem tedy provedl $2\theta - \omega$ sken a ω -sken. Jako vstupní data jsem potřeboval zjistit nominální hodnotu dielektrické susceptibility jednotlivých vrstev pro použitou vlnovou délku rentgenového záření. Tyto hodnoty jsem čerpal z [8].

Naměřená data jsem zpracoval pomocí programu, který jsem napsal v programu *Matlab*. Před samotným fitováním je potřeba zadat dostatečně dobrý počáteční odhad jednotlivých parametrů, jinak nebude fit dobře sedět a fitování může trvat příliš dlouho. **Všechny chyby**, které uvádím v tabulkách, jsou chyby fitu, ve skutečnosti mohou být chyby fitovaných parametrů daleko větší, započítáme-li všechny vlivy při měření. Například:

- Před samotným měřením je potřeba celý difraktometr seřadit, každá špatně zkorigovaná nepřesnost pak vnáší chybu do měření.
- Pohyb v ω a 2θ má určitou konečnou přesnost. Komponenty difraktometru umožňují zpravidla přesnost $\Delta\omega, \Delta 2\theta \leq 0,001^\circ$ (viz. [1]).
- Vzorek by se měl před měřením očistit. Pokud je něm špína nebo prach, mohlo by to ovlivnit hodnoty drsnosti a korelačních délek, které získáme pro nejsvrchnější rozhraní.

Intenzitu primárního paprsku jsem určil způsobem, jaký je uveden v předchozí kapitole, tedy změřenou intenzitou při $\alpha_i = 0$. Šířku paprsku a poměr p ze vztahu (3.4) jsem nijak neměřil - je lepší tyto parametry nastavit ručně při zadávání počátečního odhadu a trochu si těmito parametry pohrát, dokud odhad dobře nesesedne na naměřená data.

Zabývejme se nejprve zpracováním výsledků z $2\theta - \omega$ skenu. Při zadávání počátečního odhadu je dobré vědět, jaký vliv budou mít jednotlivé parametry

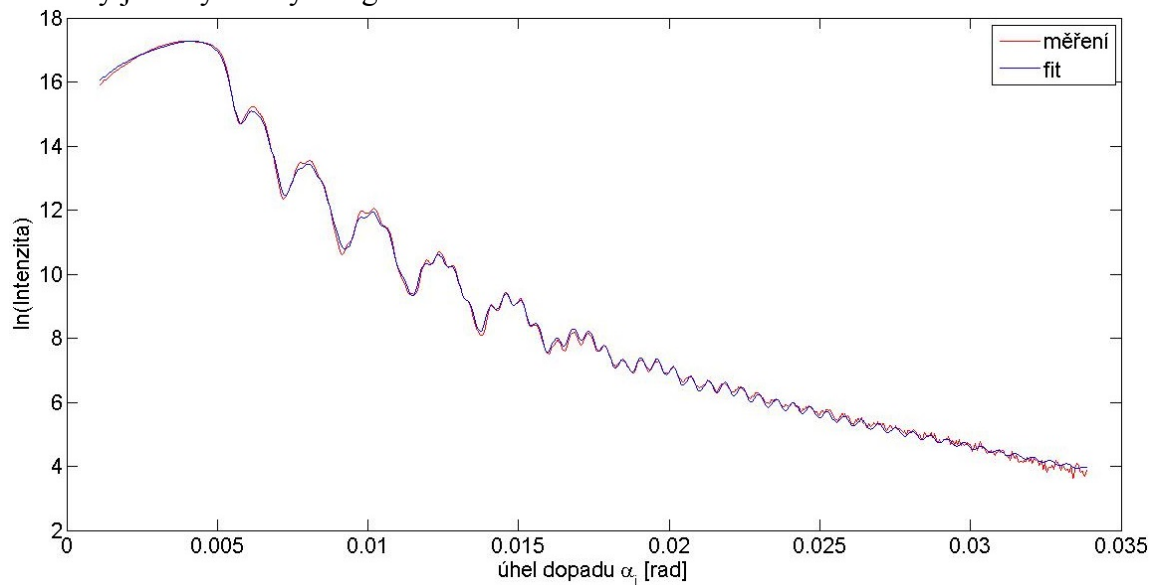
multivrstev na výsledný graf. Parametry se projevují takto (srovnejte s výslednými grafy):

- tloušťky vrstev - určují, jak daleko jsou od sebe oscilační maxima
- drsnosti rozhraní - určují rychlost ztlumení oscilací
- relativní elektronové hustoty - určují jemnější strukturu jednotlivých oscilací

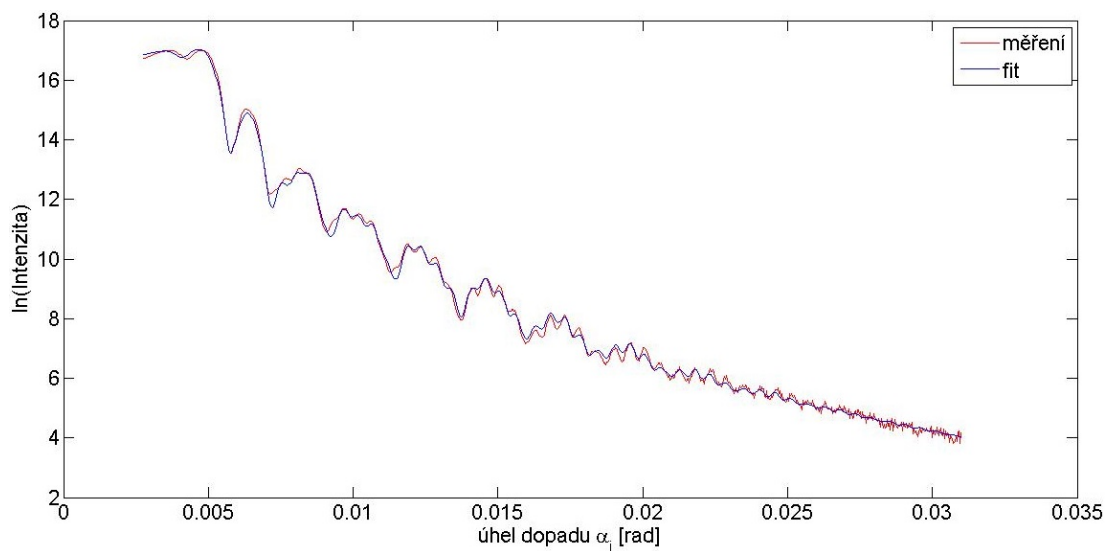
Pokud budou tloušťky vrstev příliš velké, oscilační maxima budou v grafu tak blízko u sebe, že je nebudeme schopni rozlišit. Naopak, pokud budou tloušťky příliš malé, oscilační maxima se v grafu vůbec neobjeví a dostáváme stejný patologický případ. Pro jednu vrstvu na substrátu dostáváme (viz. [1]) pro tloušťku okolo 50 nm vzdálenost maxim v grafu $0,1^\circ$.

Intenzita odraženého paprsku velmi rychle klesá s rostoucím úhlem dopadu. Jak bylo naznačeno v předchozí kapitole, paprsek má určitou konečnou tloušťku. Divergenci svazku redukuje štěrbinami, které jsou umístěné před zdrojem, ale nesmíme tak učinit příliš, protože se šířkou svazku klesá i tok fotonů a tím pádem intenzita odraženého paprsku.

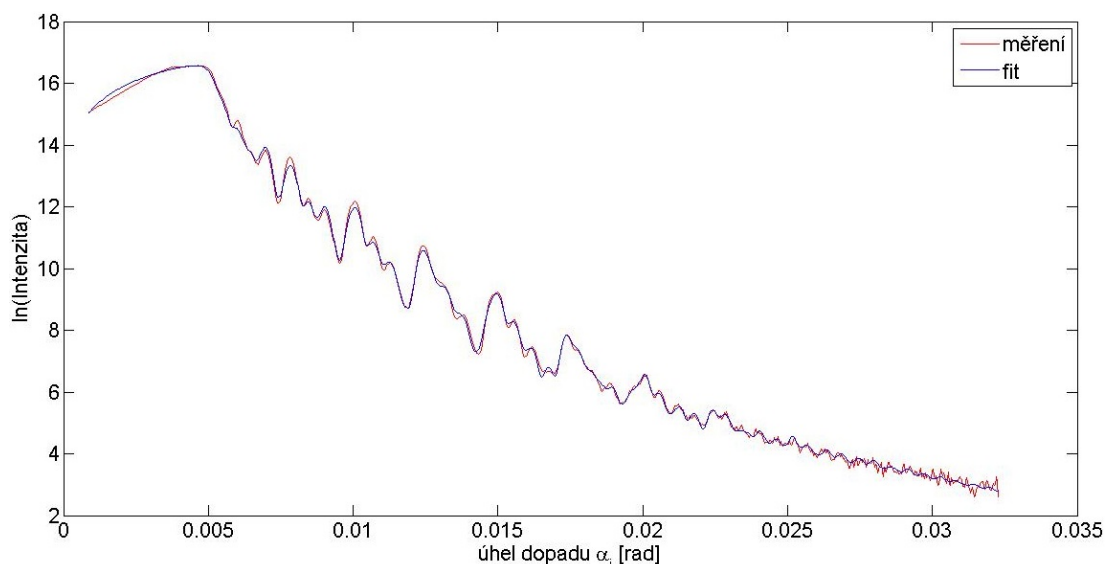
Výsledky měření a fitů $2\theta - \omega$ skenu uvádím na obrázcích 4.2 až 4.5, číselně jsou pak nafitované hodnoty parametrů - průměrná tloušťka vrstev T^{prum} , relativní elektronová hustota vrstev ρ a drsnost rozhraní σ - v tabulkách 4.1 až 4.4. Hodnoty na ose y jsou vynášeny v logaritmické škále.



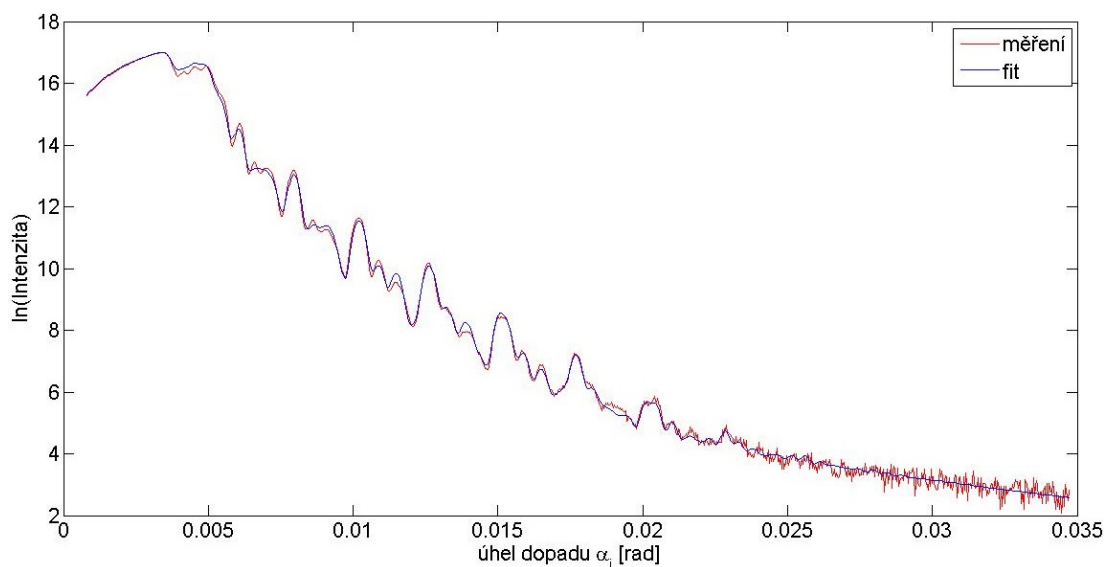
Obrázek 4.2 - $2\theta - \omega$ sken (Vzorek 1)



Obrázek 4.3 - $2\theta - \omega$ sken (Vzorek 2)



Obrázek 4.4 - $2\theta - \omega$ sken (Vzorek 3)



Obrázek 4.5 - $2\theta - \omega$ sken (Vzorek 4)

Vzorek 1

Vrstva	T^{prum} [Å]	ρ
1	$305,6 \pm 0,1$	$0,705 \pm 0,001$
2	$1345,0 \pm 0,3$	$0,690 \pm 0,008$
substrát	-	$1,208 \pm 0,008$

Tabulka 4.1a) Tloušťky vrstev a relativní elektronové hustoty ve vzorku 1 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu

Rozhraní	σ [Å]
1	$15,39 \pm 0,08$
2	$9,3 \pm 0,1$
3	$3,58 \pm 0,04$

Tabulka 4.1b) Drsnosti rozhraní ve vzorku 1 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu

Vzorek 2

Vrstva	T^{prum} [Å]	ρ
1	$283,6 \pm 0,7$	$0,69 \pm 0,01$
2	$306,3 \pm 0,2$	$0,740 \pm 0,002$
3	$1373,7 \pm 0,7$	$0,33 \pm 0,01$
substrát	-	$0,87 \pm 0,01$

Tabulka 4.2a) Tloušťky vrstev a relativní elektronové hustoty ve vzorku 2 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu

Rozhraní	σ [Å]
1	$18,1 \pm 0,3$
2	$11,9 \pm 0,2$
3	$12,3 \pm 0,9$
4	$4,15 \pm 0,07$

Tabulka 4.2b) Drsnosti rozhraní ve vzorku 2 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu

Vzorek 3

Vrstva	T^{prum} [Å]	ρ
1	$588,5 \pm 0,3$	$0,745 \pm 0,002$
2	$287,0 \pm 0,3$	$0,61 \pm 0,01$
3	$302,0 \pm 0,3$	$0,81 \pm 0,006$
4	$1347,0 \pm 0,7$	$0,69 \pm 0,02$
substrát	-	$1,14 \pm 0,02$

Tabulka 4.3a) Tloušťky vrstev a relativní elektronové hustoty ve vzorku 3 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu

Rozhraní	σ [Å]
1	$14,99 \pm 0,08$
2	$11,1 \pm 0,1$
3	$12,7 \pm 0,1$
4	$10,9 \pm 0,1$
5	$4,22 \pm 0,09$

Tabulka 4.3b) Drsnosti rozhraní ve vzorku 3 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu

Vzorek 4

Vrstva	T^{prum} [Å]	ρ
1	$977,0 \pm 1,9$	$0,78 \pm 0,01$
2	$571,3 \pm 0,5$	$0,750 \pm 0,003$
3	$290,8 \pm 0,6$	$0,870 \pm 0,002$
4	$291,4 \pm 0,3$	$0,691 \pm 0,007$
5	$1347,1 \pm 1,0$	$0,47 \pm 0,04$
substrát	-	$0,68 \pm 0,04$

Tabulka 4.4a) Tloušťky vrstev a relativní elektronové hustoty ve vzorku 4 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu

Rozhraní	σ [Å]
1	$23,8 \pm 0,8$
2	$13,2 \pm 0,1$
3	$14,3 \pm 0,2$
4	$11,6 \pm 0,2$
5	$13,5 \pm 0,2$
6	$1,5 \pm 0,2$

Tabulka 4.4b) Drsnosti rozhraní ve vzorku 4 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu

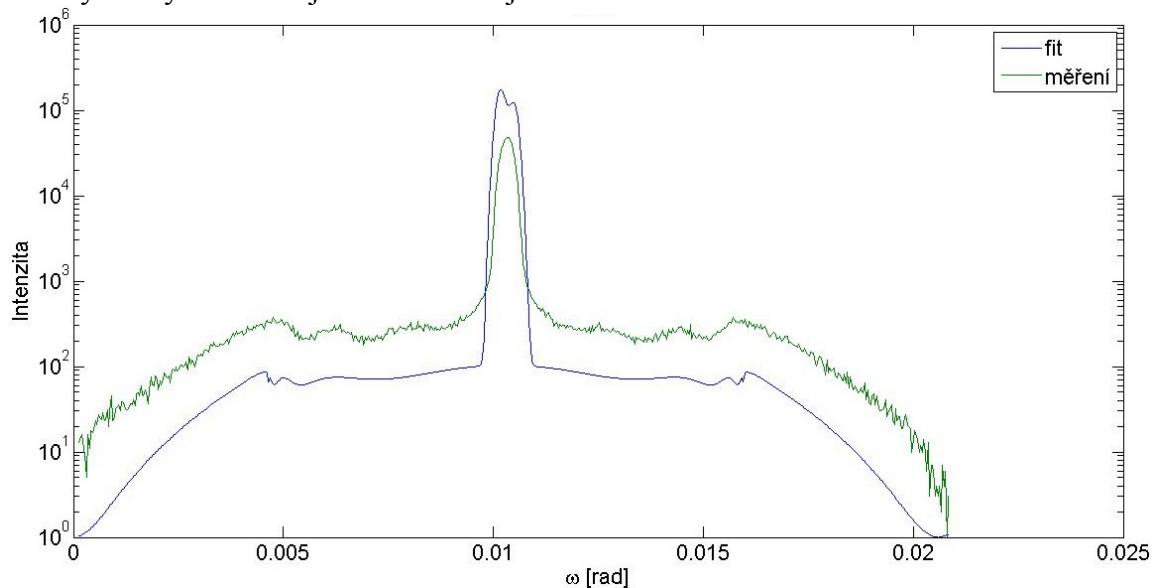
Takto získané parametry z $2\theta - \omega$ skenu jsem použil jako vstupní parametry pro zpracování dat z měření difúzního rozptylu.

Při zadávání počátečního odhadu pro ω sken se musíme vypořádat s tím, že jsme aproximovali multivrstvu za polonekonečný substrát. Potřebujeme určit

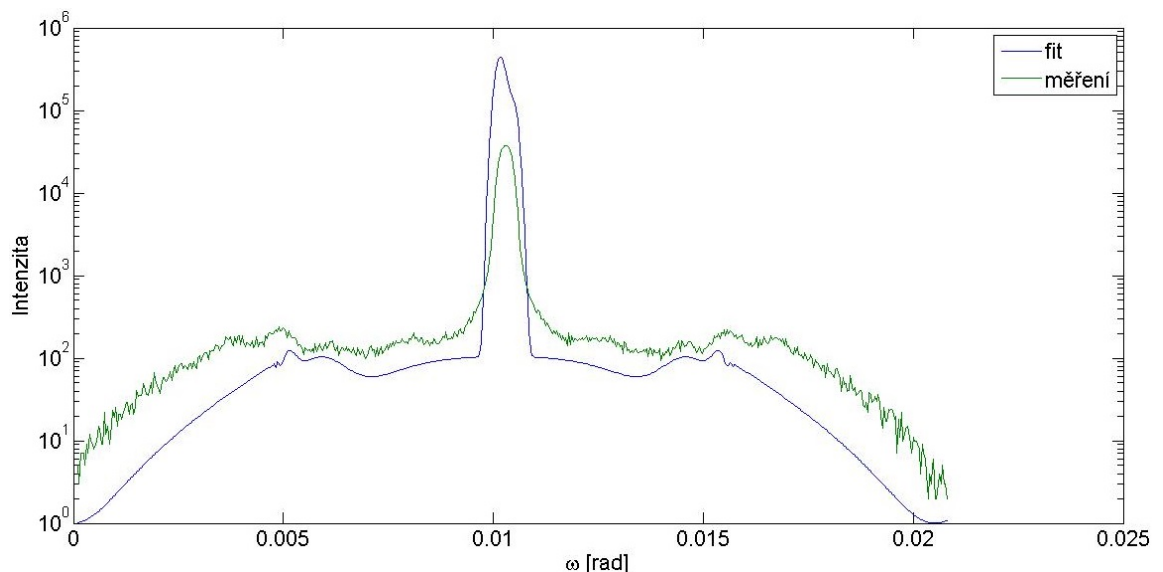
susceptibilitu χ_s tohoto substrátu (potřebujeme ji pro výpočet Fresnelových koeficientů t_i a t_s ve vztahu (2.34)). Je několik možností, jak to udělat. Jako jedna možnost se nabízí vzít susceptibilitu skutečného substrátu z multivrstvy. Druhá, poněkud lepší možnost, je ta, že vezmeme jako χ_s vážený průměr susceptibilit jednotlivých vrstev z multivrstvy (vážený přes tloušťky vrstev). Susceptibilitu χ_s můžeme rovněž fitovat jako další parametr. Nicméně, při zpracování dat se mi neosvědčila ani jedna z předchozích možností, je tedy třeba vložit susceptibilitu průměrovaného substrátu ručně.

Nejlépe to provedeme pomocí grafu z ω skenu. Odzkoušel jsem, že změna v imaginární části susceptibility χ_s , která je v rámci řádu imaginárních částí susceptibilit jednotlivých vrstev, graf skoro neovlivní. Stačí tedy hýbat pouze s reálnou částí susceptibility χ_s . Tu nastavíme snadno podle grafu z ω skenu tak, aby krajní vrcholy grafu dobře odpovídali kritickému úhlu.

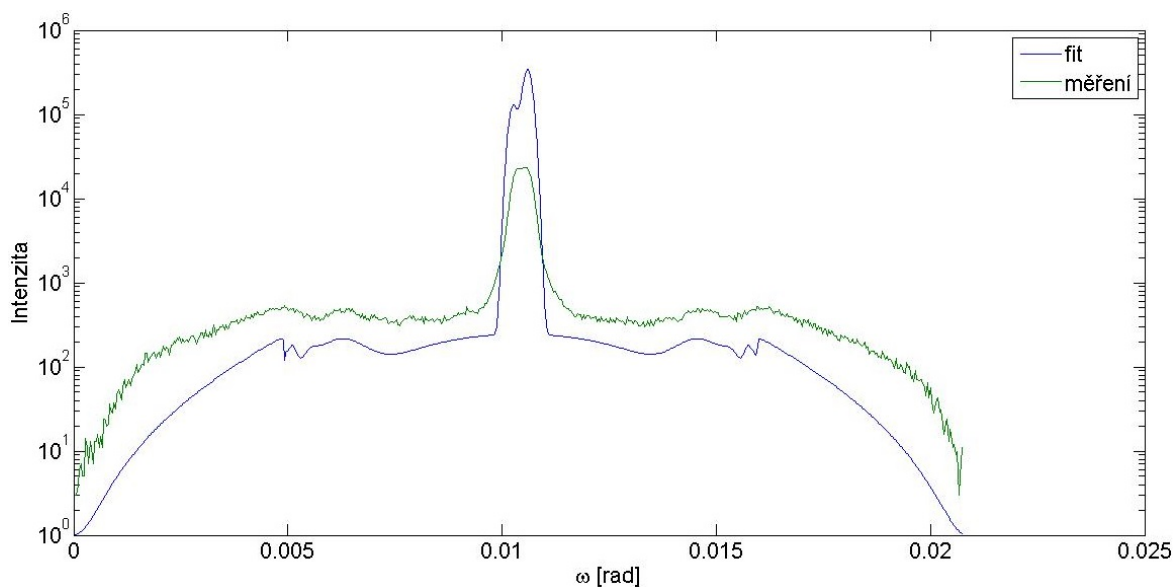
Výsledky ω skenu jsou na následujících obrázcích.



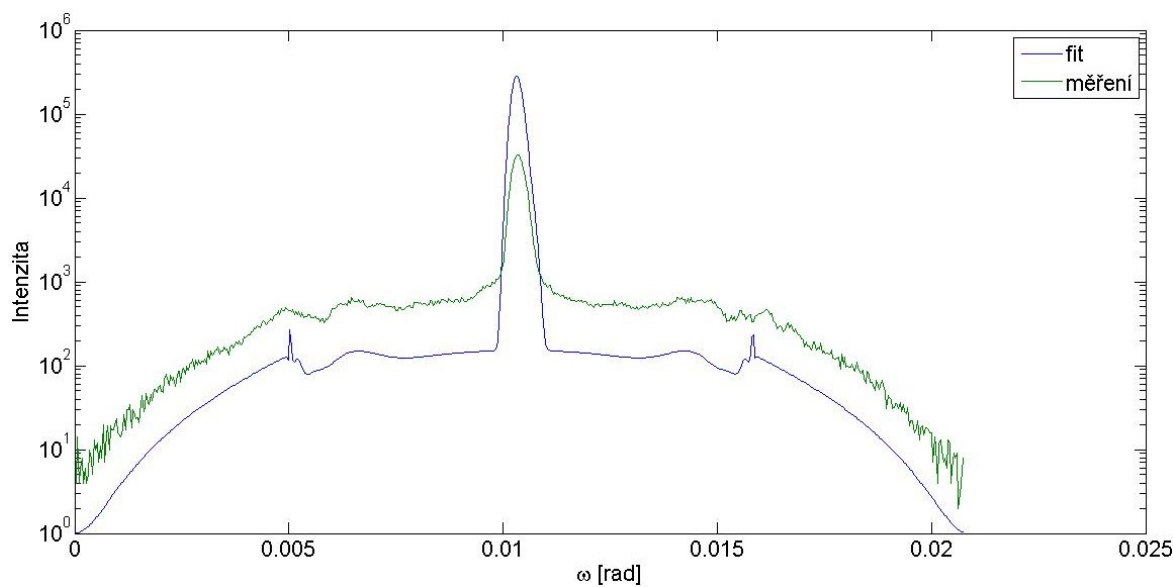
Obrázek 4.6 - ω sken (Vzorek 1)



Obrázek 4.7 - ω sken (Vzorek 2)



Obrázek 4.8 - ω sken (Vzorek 3)



Obrázek 4.9 - ω sken (Vzorek 4)

Nafitované parametry z ω skenu - fraktálový koeficient h , laterální korelační délky Λ_{lat} a vertikální korelační délku Λ_{vert} - uvádím v následujících tabulkách 4.5 a 4.6.

Rozhraní	Λ_{lat} [nm]			
	Vzorek 1	Vzorek 2	Vzorek 3	Vzorek 4
1	550 ± 30	600 ± 70	560 ± 40	650 ± 20
2	40 ± 20	50 ± 20	50 ± 20	80 ± 20
3	420 ± 1100	20 ± 10	30 ± 20	100 ± 40
4	-	1000 ± 1100	20 ± 20	70 ± 30
5	-	-	700 ± 1800	70 ± 20
6	-	-	-	1600 ± 17000

Tabulka 4.5: Laterální korelační délky jednotlivých rozhraní vzorků získané zpracováním dat z rentgenového difraktometru

Vzorek	h	Λ_{vert} [nm]
1	$0,7 \pm 0,1$	370 ± 580
2	$1,0 \pm 0,1$	660 ± 850
3	$0,79 \pm 0,09$	520 ± 690
4	$1,00 \pm 0,09$	230 ± 70

Tabulka 4.6: Fraktálový koeficient a vertikální korelační délka vzorků získaná zpracováním dat z rentgenového difraktometru

4.2 Měření na AFM

Na závěr jsme proměřili jednotlivé vzorky na AFM mikroskopu, abychom získali informaci o profilu nejsvrchnějšího rozhraní. Úvodem stručně nastíníme, jak AFM mikroskop funguje.

4.2.1 Princip měření na AFM

Čerpáno z [9]. AFM je zkratka anglického výrazu Atomic force microscopy, tedy česky mikroskopie atomových sil. Používá se ke zobrazování profilů povrchů (dá se ale také použít k tvorbě povrchových struktur).

Při skenování se používá velmi tenký hrot, který se pohybuje nad povrchem a reaguje na přitažlivé síly meziatomárního charakteru. AFM metoda je tedy velmi podobná tunelovací mikroskopu (ten využívá tunelový proud) s tou výhodou, že můžeme skenovat i nevodivé povrchy. Hrot musí být velmi ostrý, abychom dosáhli dobrého rozlišení. Je připevněn na ohebném nosníku, který se ohýbá v důsledku sil působících na hrot.

Ohnutí nosníku se snímá pomocí laseru. Laserovým paprskem svítíme na nosník, paprsek dopadá pod určitým úhlem a odráží se na plošný detektor, který je citlivý na místo dopadu záření (můžeme zaznamenat do kterého místa odražený paprsek dopadl). Ohne-li se nosník, odráží se laserový paprsek pod jiným úhlem a dopadá do jiného místa detektoru. Z toho pak můžeme určit, jak byl nosník ohnutý.

Mikroskop skenuje v pravidelném rastru. Pro pohyb hrotu se používají piezoelektrické skenery, které jsou schopny vykonávat pohyby v řádech desetin nanometru.

V principu můžeme provádět dva způsoby skenování:

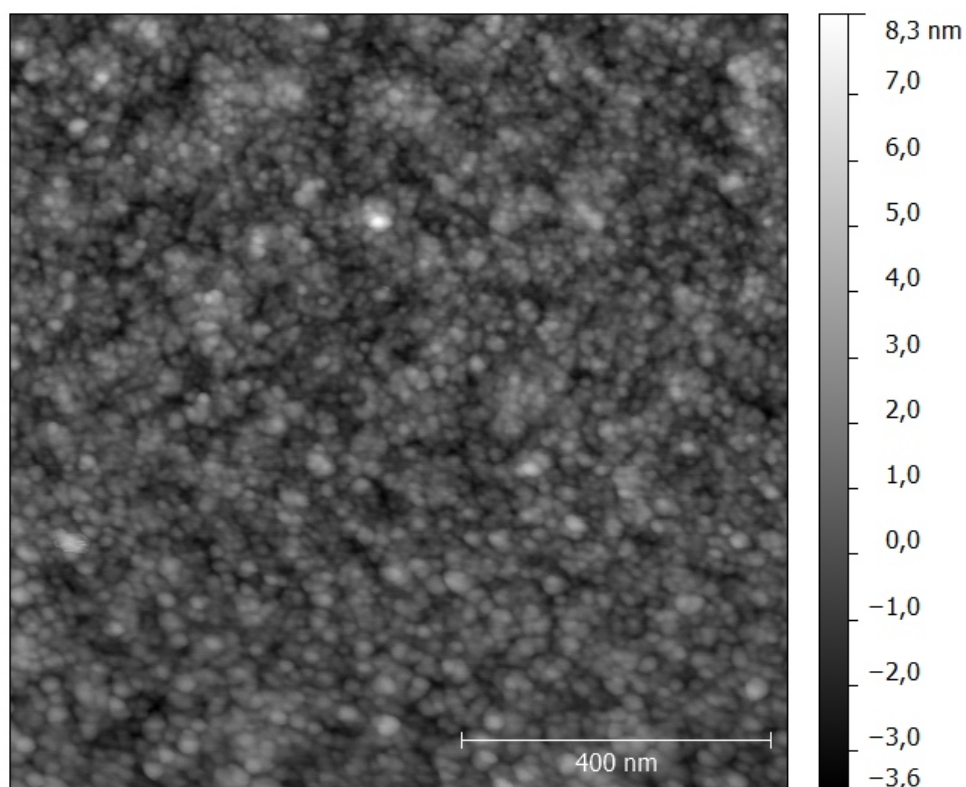
- 1) Hrot se pohybuje a druhý konec nosníku je udržován v konstantní výšce.
- 2) Je přednastavena určitá konstantní hodnota ohnutí nosníku a při pohybu hrotu se vždy srovná tato hodnota s aktuální. Hrot se pak posune o takovou vertikální vzdálenost z , aby se ohnutí vyrovnalo s přednastavenou hodnotou. K sestavení obrazu profilu povrchu se pak používají přímo hodnoty z .

Častěji se používá druhá metoda, protože pokud máme povrch s velkými nerovnostmi, může snadno dojít k poškození hrotu. Jelikož při obou metodách působí mezi povrchem a hrotem velké třecí síly, může dojít k poškození vzorku. Proto se také někdy používají takzvané bezkontaktní režimy, kdy mezi hrotem a povrchem není přímý mechanický kontakt a působí na sebe především pomocí van der Waalovy síly.

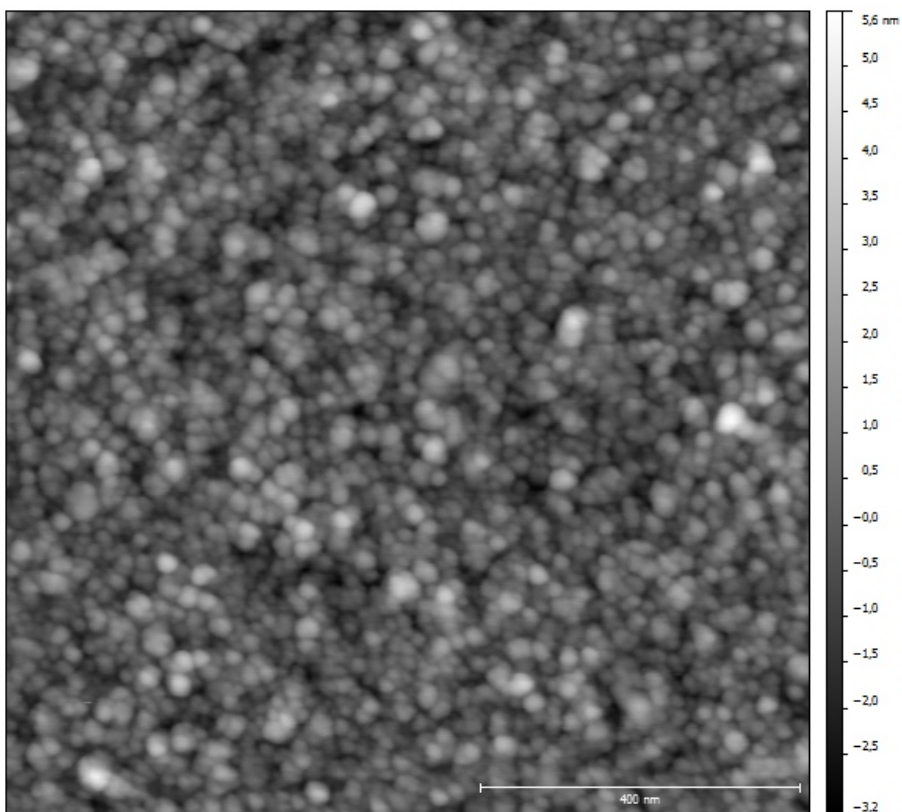
4.2.2 Vlastní měření

Úkolem při měření na AFM je tedy získat mapu odchylek souřadnic povrchu v z-tové ose od nějaké průměrné souřadnice z_0 . Chceme tedy zjistit $U(x, y) = U(\vec{r}_{II})$ z první kapitoly. Před samotným měřením je nutné studovaný vzorek dobře vyčistit od špíny a prachu - například zrnka prachu mohou mít velikost v řádech mikrometrů a značně by nám sken znehodnotily. Vzorky jsme tedy vyčistili lihem a oprášili natlakovaným oxidem uhličitým.

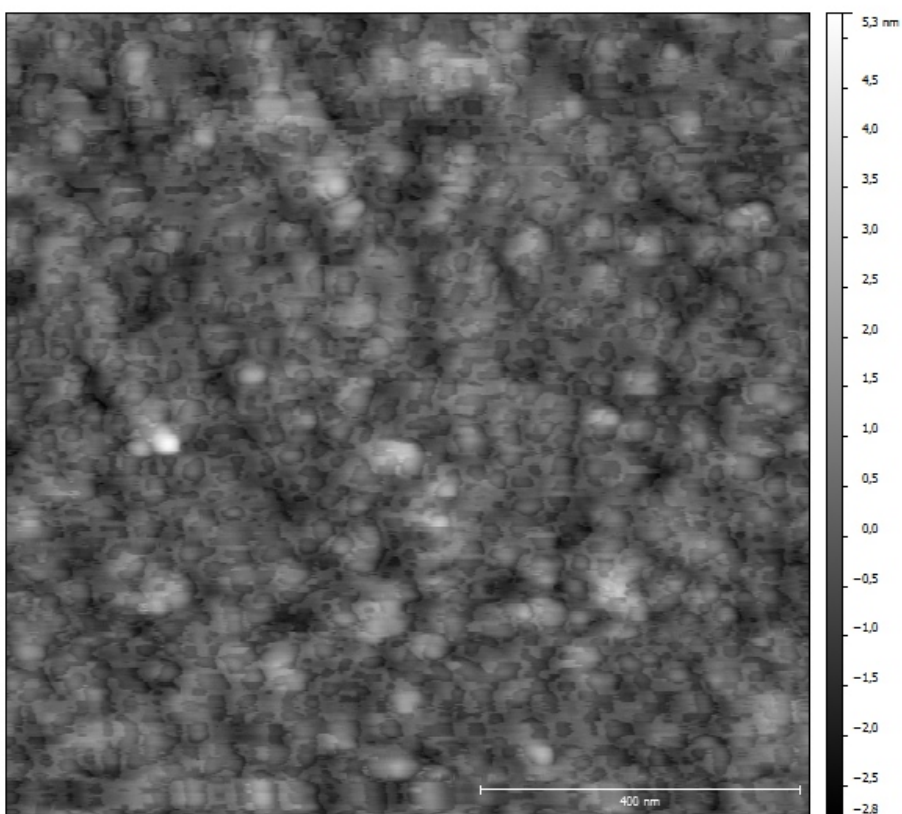
Z měření na AFM získáme dvě mapy - hrot totiž vždy naskenuje jeden řádek a potom se vrací stejnou cestou zpět. Jelikož má hrot konečnou šířku, tyto dvě mapy se od sebe nepatrně liší. Na následujících obrázcích uvádím mapu odchylek $U(x, y)$ získanou pro jednotlivé vzorky "při cestě hrotu dopředu".



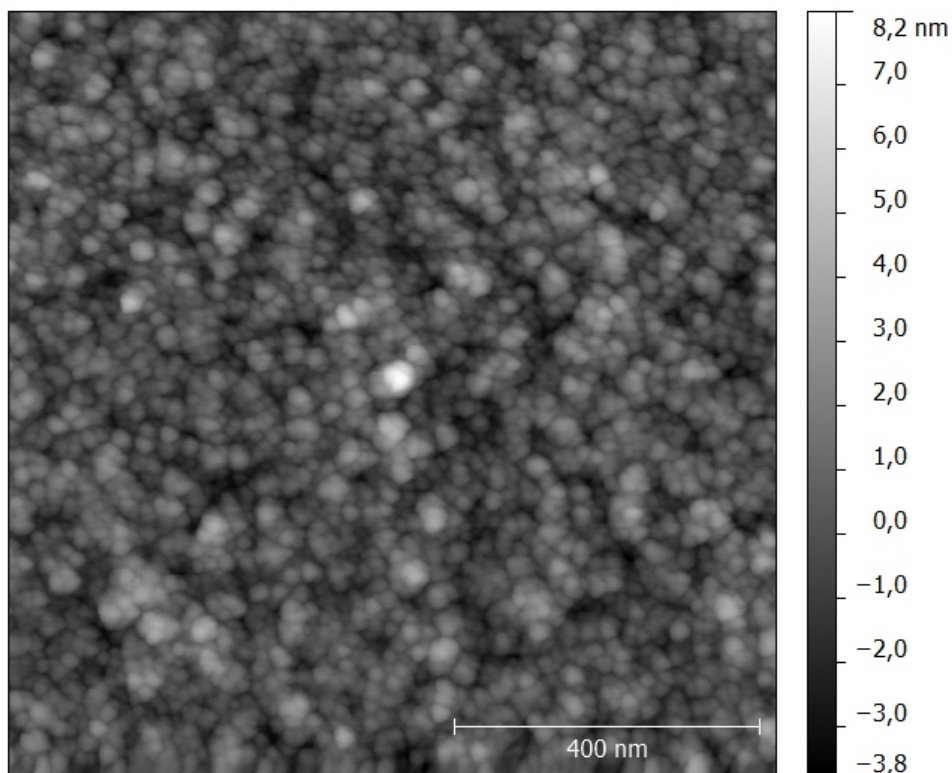
Obrázek 4.10: Obraz povrchu vzorku 1 získaný AFM mikroskopem



Obrázek 4.11: Obraz povrchu vzorku 2 získaný AFM mikroskopem



Obrázek 4.12: Obraz povrchu vzorku 3 získaný AFM mikroskopem



Obrázek 4.13: Obraz povrchu vzorku 4 získaný AFM mikroskopem

Z naměřených dat můžeme snadno stanovit drsnost povrchu jednotlivých vzorků (tedy drsnost prvního rozhraní). Zamysleme se nad tím, jak stanovit chybu drsnosti. Drsnost je sama o sobě střední kvadratická odchylka od průměrné z-tové souřadnice povrchu. Její chyba tedy vlastně zohledňuje to, jestli se určitých místech povrchu drsnost mění od nějaké průměrné hodnoty. Proto si zkoumanou plochu "rozparcelujeme" na menší části a spočítáme jejich drsnosti, ze kterých pak určíme průměrnou hodnotu a její chybu. V principu platí, že čím větší počet dílčích ploch uděláme, tím větší přesnost máme. Nicméně jsme omezeni konečným počtem bodů, které mikroskop změřil, takže musíme zmenšování velikosti ploch včas zarazit, abychom statisticky nezpracovávali malý počet bodů.

Vypočítané drsnosti uvádím v tabulce 4.6.

Vzorek	σ_1 [Å]
1	$11,3 \pm 0,2$
2	$10,1 \pm 0,1$
3	$8,1 \pm 0,2$
4	$12,4 \pm 0,4$

Tabulka 4.7: Drsnosti nejsvrchnějších rozhraní vzorků získané AFM mikroskopem

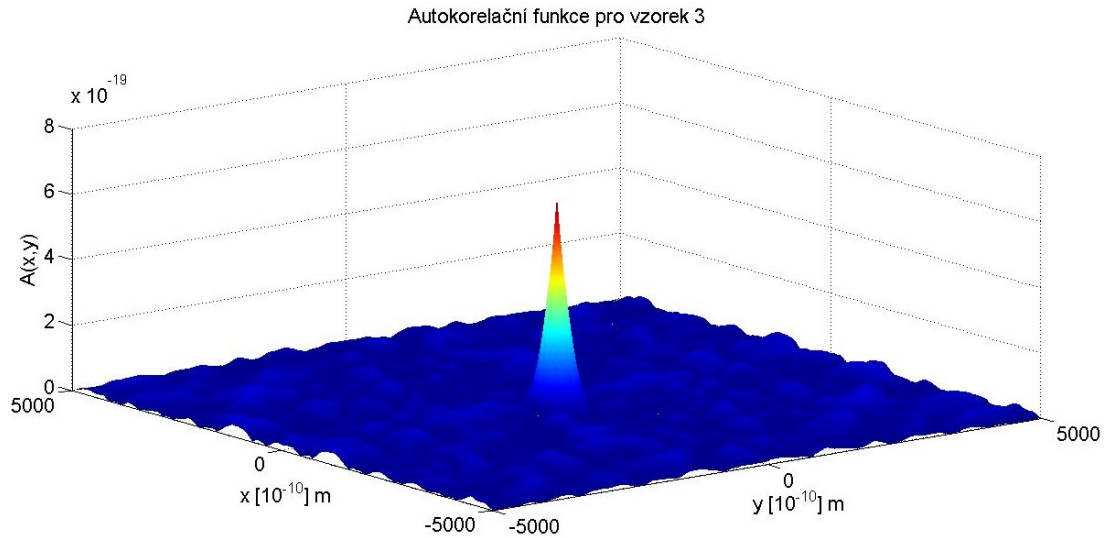
Dále můžeme z měření na AFM stanovit i laterální korelační délku a fraktálový koeficient. Využijeme přitom autokorelační funkce, kterou získáme následujícím postupem. Nejprve spočítáme Fourierovu transformaci funkce $U(x, y)$:

$$w(\vec{Q}) = \int U(\vec{r}_H) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}_H} d\vec{r}_H \quad (4.1) \quad (4.1)$$

Autokorelační funkce $A(\vec{r}_H)$ je pak dána jako:

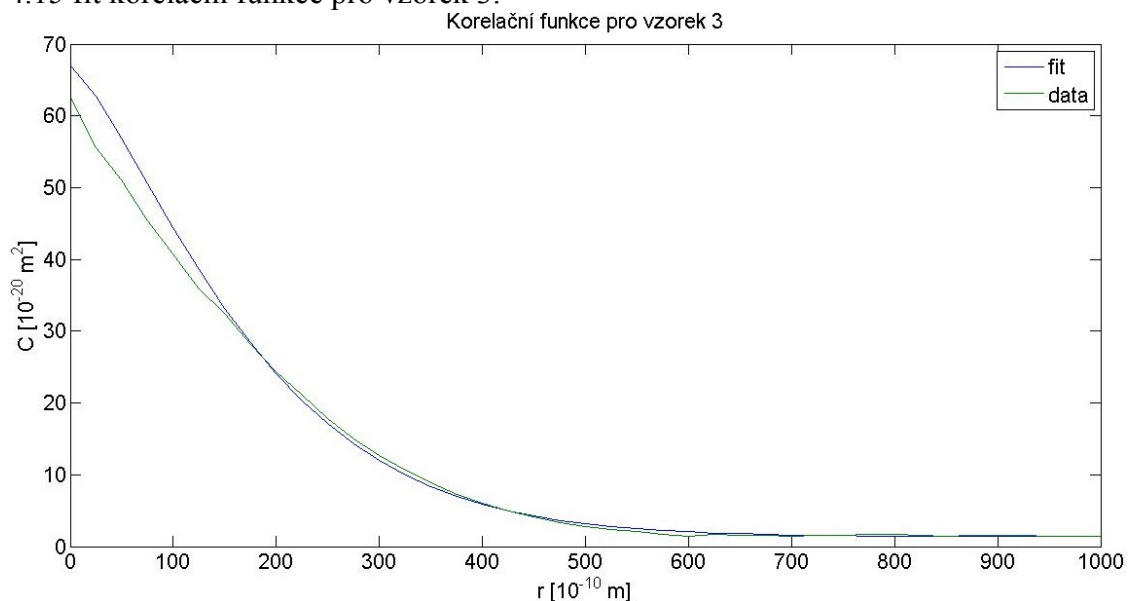
$$A(\vec{r}_{II}) = \int |w(\vec{Q})|^2 e^{i\vec{Q}\cdot\vec{r}_{II}} d\vec{r}_{II} = \int U(\vec{r}_{II}) U(\vec{r}_{II} - \vec{r}'_{II}) d\vec{r}'_{II} \quad (4.2)$$

Pro příklad uvádím na obrázku 4.14 graf autokorelační funkce $A(\vec{r}_{II})$ pro vzorek 3.



Obrázek 4.14: Graf autokorelační funkce pro vzorek 3

Pokud vystředujeme (4.2) přes všechny azimuty, dostaneme korelační funkci. Na ni pak můžeme fitovat funkci (1.15), kterou v této práci používáme. Drsnost ve funkci (1.15) fitovat nebudeme, vložíme ji jako fixní parametr - její hodnotu budeme brát z tabulky 4.6. Středování přes azimuty jsem prováděl tak, že jsem si mapu $A(x,y)$ převedl do polárních souřadnic (čili $A(r \cos \varphi, r \sin \varphi)$) a data potom interpoloval v *Matlabu* na předem zvolenou mřížku souřadnic r a φ . Data jsem potom vystředoval přes všechny úhly φ . Tímto postupem jsem ale docílil toho, že hustota mřížových bodů klesá s rostoucím poloměrem. Pro lepší shodu výsledné funkce je dobré fitovat i pozadí. Abych zohlednil tyto fakty, nakonec jsem tedy nefitoval výslednou korelační funkci na funkci (1.15), ale korelační funkci vynásobenou poloměrem na $f = r(C(\vec{r}) + \text{pozadí})$. Pro ilustraci uvádím na obrázku 4.15 fit korelační funkce pro vzorek 3.



Obrázek 4.15: Fit korelační funkce vzorku 3

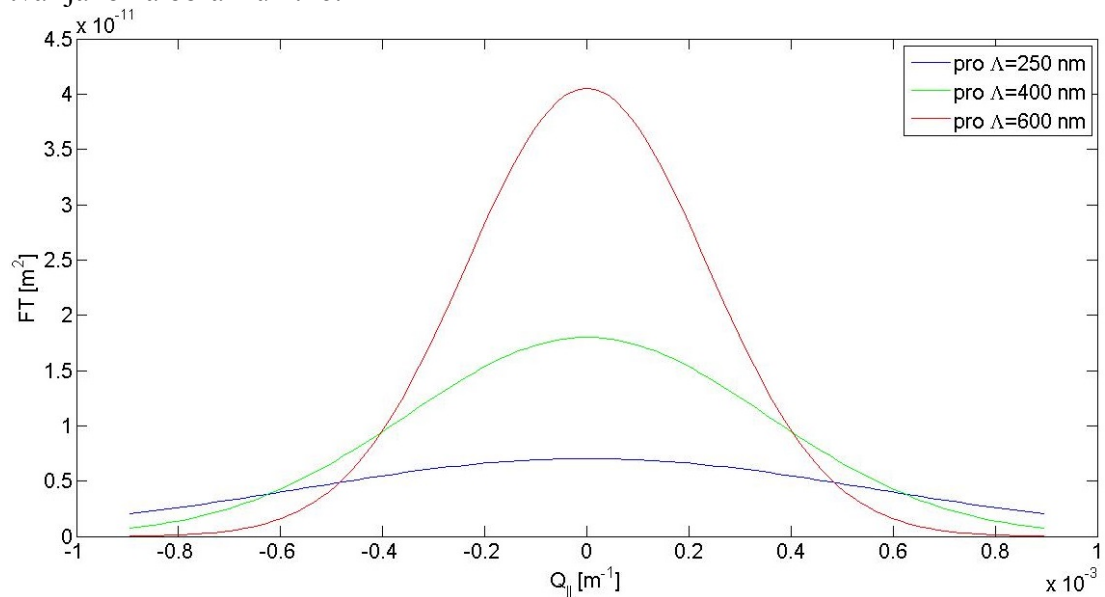
V tabulce 4.7 uvádím korelační délku $\Lambda_{lat,1}$ a fraktálový koeficient h , který jsem při fitování získal.

Vzorek	$\Lambda_{lat,1}$ [Å]	h	pozadí [Å ²]
1	143 ± 3	0,63 ± 0,02	2,8 ± 0,1
2	141 ± 2	0,87 ± 0,03	1,37 ± 0,07
3	191 ± 2	0,66 ± 0,01	1,36 ± 0,07
4	164 ± 3	0,78 ± 0,03	4,9 ± 0,2

Tabulka 4.8: Fraktálové koeficienty a laterální korelační délky 1ejsvrchnějšího rozhraní získané zpracováním dat z AFM mikroskopu

4.3 Diskuze výsledků

Na závěr bych chtěl odiskutovat výsledky, které jsem získal z jednotlivých měření. Všimněme si, že chyby korelačních délek, které jsme získali fitováním ω skenu, jsou poměrně vysoké. Jak je vidět z velikosti chyb především pro laterální korelační délky nejspodnějších rozhraní, v mnoha případech jsou chyby větší, než je naitovaná hodnota (v jednom případě až desetkrát!). Pokud je laterální korelační délka velká, Fourierova transformace korelační funkce v recipročném prostoru má tvar jako na obrázku 4.16.



Obrázek 4.16: Fourierova transformace korelační funkce (1.15) pro různé hodnoty korelačních délek (drsnost volena 1,5 nm a $h=1$)

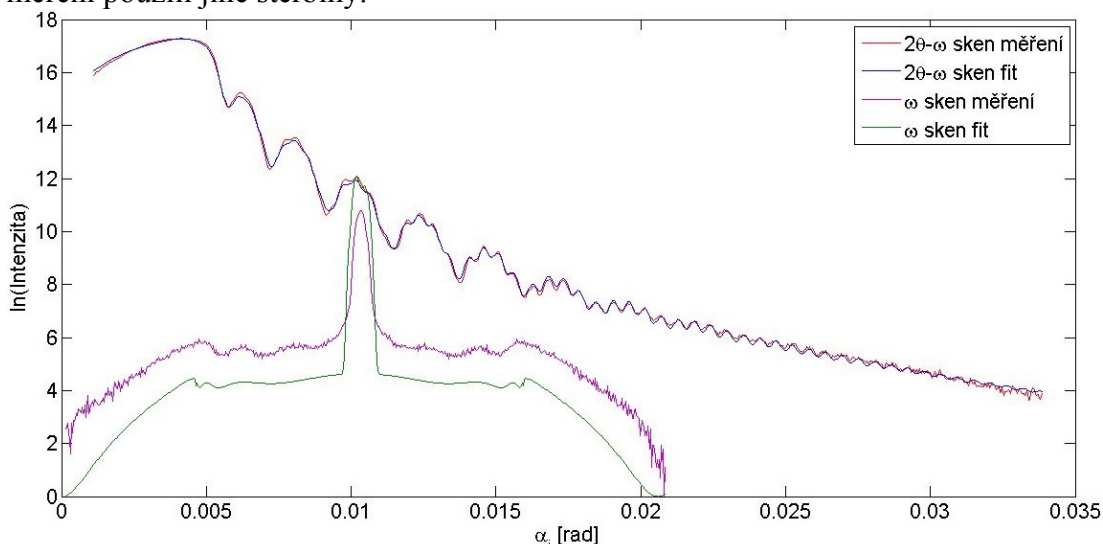
Drsnost ovlivňuje výšku maxima. Se vzrůstající laterální korelační délkou se vrchol v grafu zužuje a maximum se posouvá nahoru. S velkou laterální korelační délkou přispívá tedy Fourierova transformace k výsledné intenzitě pouze okolo oblasti spekulárně odraženého paprsku ($Q_{||} = 0$). Jelikož vyšly z $2\theta - \omega$ skenu drsnosti nejspodnějších rozhraní malé, je příspěvek tohoto rozhraní "zamaskován" příspěvky ostatních a proto má výsledná fitovaná hodnota velkou chybu.

Vertikální korelační délka ovlivňuje to, jak moc jsou v grafu vidět fluktuační mezi Yonedovými křídly (okrajová maxima v grafu ω skenu, jsou to maxima funkce $|t_i t_s|^2$ z výrazu (2.35)). Pro velké hodnoty vertikální korelační délky se už graf prakticky nemění, proto jsou chyby velké.

Ve své podstatě tedy můžeme tedy tvrdit jenom to, jestli jsou příslušná rozhraní korelována, či nikoliv. Přesnější výsledky bychom mohli dostat tehdy, pokud bychom uvažovali jednu laterální korelační délku pro všechna rozhraní - to ale u námi zvolených vzorků nelze použít. Vidíme totiž, že ve všech vzorcích mají rozhraní 2 až N mnohem menší laterální korelační délku než rozhraní 1 a $N + 1$.

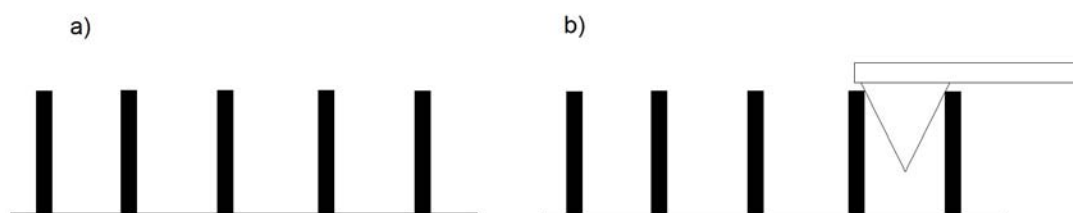
Fraktálové koeficienty získané jednotlivými metodami se od sebe poněkud liší. Funkci (1.15) jsme ale zjednodušili tak, že jsme uvažovali jeden fraktálový koeficient pro všechna rozhraní. Ve skutečnosti to ovšem nemusí být pravda. Navíc, fraktálový koeficient získaný z AFM patří pouze k prvnímu rozhraní, žádnou informaci o dalších rozhraních nejsme schopni touto metodou získat.

Mohlo by se zdát, že spekulárně odražený paprsek není do ω skenu započítán správně. Nicméně, pokud bychom si vynesli výsledky z $2\theta - \omega$ skenu a ω skenu do jednoho grafu, měl by se v bodě maxima spekulárně odraženého paprsku graf ω skenu dotýkat grafu $2\theta - \omega$ skenu. Na následujícím obrázku 4.17 uvádím (pro vzorek 1), že tomu tak je. Nižší naměřené maximum mohlo být způsobeno tím, že jsme při měření použili jiné štěrbinový.



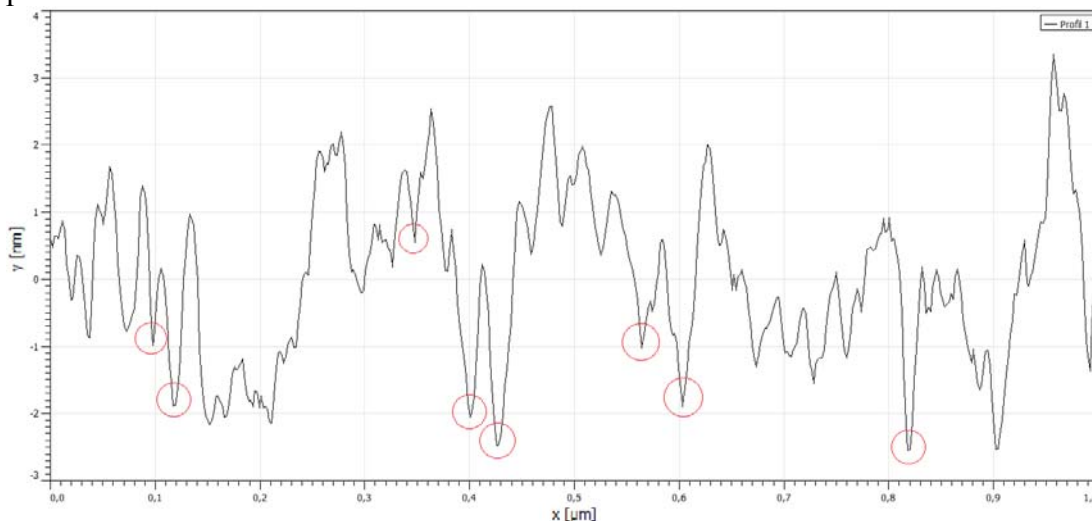
Obrázek 4.17: $2\theta - \omega$ sken a ω sken v jednom grafu pro vzorek 1

Při měření AFM jsme možná narazili na omezení s rozlišovací schopností mikroskopu. Hrot, který AFM mikroskop používá, není dokonale tenký, má konečnou šířku a na konci nemá úplně špičku, ale kulovou plochu o určitém poloměru (v našem případě jsme použili hrot s poloměrem 7 nm). Nejsme schopni tedy detekovat změny v profilu povrchu, které se dějí na krátkých intervalech délky. Tím se měřená drsnost zmenší, a proto vychází drsnosti z AFM menší než z difraktometru. Navíc, pokud máme v povrchové struktuře velké skokové nerovnosti, nemusíme být schopni je rozlišit. Představme si strukturu jako na následujícím obrázku 4.18a):



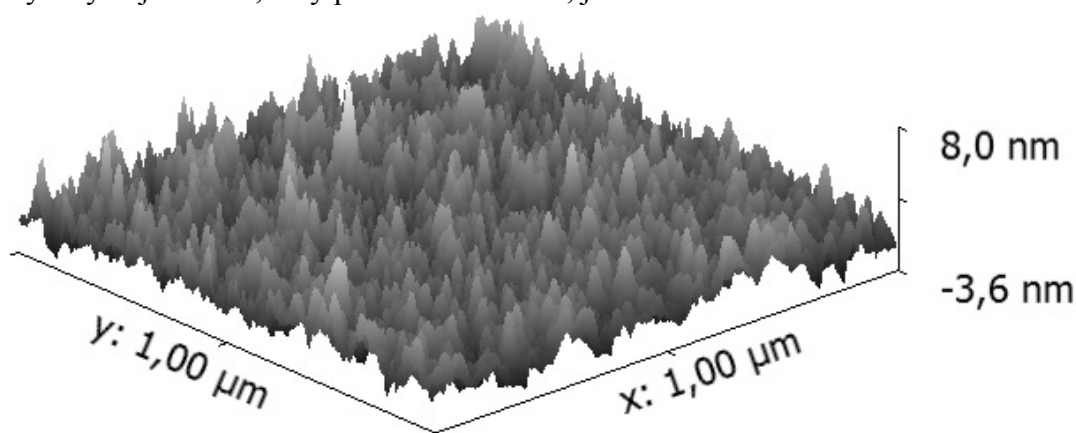
Obrázek 4.18: Možné skokové nerovnosti ve struktuře povrchu

Pokud jsou "skoky" dostatečně blízko u sebe, hrot není schopen mezi ně úplně zajet (jak je naznačeno na obrázku 4.18b)) a tím se v podstatě zmenší měřená drsnost. Při měření povrchu se to projeví tak, že v grafu profilu pro jeden naskenovaný řádek, je v okolí určitých minim stejný průběh, protože už v podstatě neskenujeme vzorek, ale hrot. Pro příklad uvádím profil jednoho naskenovaného řádku ze vzorku 1, kde můžeme téměř stejný průběh grafu v okolí několika minim pozorovat.



Obrázek 4.19: Graf jednoho naskenovaného řádku ze vzorku 1 AFM mikroskopem

Jak je vidět i z 3D pohledu na sken prvního vzorku, jeho povrch tvoří spousta "vysokých Jehliček", tedy podobná struktura, jako na obrázku 4.18.



Obrázek 4.20: 3D pohled na povrchovou strukturu povrchu prvního vzorku získaný programem *Gwyddion*

Je tedy možné, že jsme narazili na rozlišovací schopnost mikroskopu.

Při měření na AFM jsme měřili na velmi malé ploše ve srovnání s tím, jak velká plocha vzorku je ozářena při měření na difraktometru. Číselně: na AFM jsme skenovali oblast velkou $1 \mu\text{m}^2 = 10^{-12} \text{ m}^2$, kdežto na difraktometru byl mnohdy ozářen celý vzorek, to jest plocha $\frac{\pi d^2}{4} = 4,9 \text{ cm}^2 = 4,9 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$, čili plocha stamilionkrát větší. Užitím korelační funkce (1.15) jsme uvažovali rozhraní jako náhodný fraktál. Parametry náhodného fraktálu se škálují spolu s velikostí oblasti (viz. [10]), ve které fraktál uvažujeme. Proto vychází laterální korelační délka rozhraní z AFM menší, než vyšla z měření difúzního rozptylu.

Závěr

Studovali jsme multivrstvy s drsnými rohranými pomocí dvou metod - rozptylem rentgenového záření a skenováním na AFM mikroskopu. Zásadní nevýhoda AFM mikroskopu je ta, že nezískáme žádné informace o vnitřní struktuře multivrstvy ani informace o vertikální korelaci. Jsme rovněž limitováni rozlišovací schopností mikroskopu. Výhodou je to, že vidíme přímo povrch vzorku, avšak skenování probíhá na velmi malých plochách. Jako model rozhraní jsme použili náhodný fraktál jehož parametry se škálují spolu s pozorovanou oblastí. Abychom mohli ověřit, zda tyto hodnoty souhlasí s hodnotami získanými z rentgenového rozptylu, museli bychom provést sken přes daleko větší oblast. Zaprvé to může být časově náročné, zadruhé jsme limitováni - u AFM mikroskopu máme určitou hranici, jak velkou oblast můžeme naskenovat.

Zkoumání multivrstev pomocí rentgenu má oproti AFM tu zásadní výhodu, že vidíme i "dovnitř" vzorku. Jak jsem zjistil, nevýhodou pak mohou být velké chyby získaných korelačních délek, které jsou způsobeny chováním korelační funkce, jejíž tvar jsme volili. I přes vysoké chyby mají však tyto získané informace svou cenu.

Jako dobrý postup při získávání parametrů multivrstev se jeví následující: parametry drsnosti, elektronové hustoty a tloušťky vrstev získáme fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu - odvozený vztah (2.21) s korekcemi z kapitoly 3 vykazuje poměrně dobrou shodu s měřením. Tyto hodnoty potom použijeme jako vstupní parametry pro fitování dat z ω skenu, abychom získali korelační délky. V ω skenu bychom mohli drsnosti, tloušťky a elektronové hustoty také fitovat, ovšem zavedli bychom si tak velký počet volných parametrů a fitovací software (v našem případě *Matlab*) by nemusel fitování zvládnout.

Seznam použité literatury

- [1] PIETSCH, Ullrich, HOLÝ, Václav, BAUMBACH, Tilo, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Lateral Nanostructures*, Advanced Text in Physics, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 2004
- [2] KLÍMA, Jan, VELICKÝ, Bedřich, *Kvantová mechanika II*, 1.vydání, Praha: Státní pedagogické nakladatelství, 1990, ISBN 80-7066-185-2
- [3] MALÝ, Petr, *Optika*, 1.vydání, Praha: Nakladatelství Karolinum, 2008, ISBN 978-80-246-1342-0
- [4] ČIHÁK, Pavel, ČERYCH, Jan, KOPÁČEK, Jiří, *Příklady z matematiky pro fyziky V.*, 2.vydání, Praha: Matfyzpress, 2003, ISBN 80-86732-15-0
- [5] GRADSHTEYN, Israil Solomonowitsch, RYZHIK, Josif Moissejewitsch, *Table of Integrals, Series and Products*, 7.vydání, San Diego, London: Elsevier Academic Press, 2007, ISBN-13: 978-0-12-373637-6
- [6] HOLÝ, Václav, *Studium reálné struktury tenkých monokrystalických vrstev difúzním rozptylem rtg záření* [online], [Cit. 25.3.2013]. Dostupné z <http://www.xray.cz/kryst/difrakce/holy/difuzni.htm>
- [7] ČERNÁNSKÝ, Marian, *Kumulanty v profilové analýze* [online], [Cit. 17.4.2013]. Dostupné z <http://www.xray.cz/ms/bul2008-2a/lectures8.pdf>
- [8] STEPANOV, Sergey, *X-ray server* [online], poslední změna 19.3.2012, [Cit. 13.1.2013]. Dostupné z http://sergey.gmca.aps.anl.gov/cgi/WWW_form.exe?template=x0h_form.htm
- [9] *Wikipedia* [online]: Atomic force microscopy, poslední změna 6.5.2013, [Cit. 8.5.2013], Dostupné z http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_force_microscopy
- [10] BARABÁSI, Albert-Laszlo, STANLEY, Harry Eugene, *Fractal Concepts in Surface Growth*, 1.vydání, Cambridge University Press, 2002, ISBN 0-521-48318-2

Seznam tabulek

Tabulka 4.1a) Tloušťky vrstev a relativní elektronové hustoty ve vzorku 1 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu	strana 23
Tabulka 4.1b) Drsnosti rozhraní ve vzorku 1 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu	strana 23
Tabulka 4.2a) Tloušťky vrstev a relativní elektronové hustoty ve vzorku 2 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu	strana 23
Tabulka 4.2b) Drsnosti rozhraní ve vzorku 2 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu	strana 23
Tabulka 4.3a) Tloušťky vrstev a relativní elektronové hustoty ve vzorku 3 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu	strana 23
Tabulka 4.3b) Drsnosti rozhraní ve vzorku 3 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu	strana 23
Tabulka 4.4a) Tloušťky vrstev a relativní elektronové hustoty ve vzorku 4 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu	strana 23
Tabulka 4.4b) Drsnosti rozhraní ve vzorku 4 získané fitováním dat z $2\theta - \omega$ skenu	strana 23
Tabulka 4.5: Laterální korelační délky jednotlivých rozhraní vzorků získané zpracováním dat z rentgenového difraktometru.....	strana 25
Tabulka 4.6: Fraktálový koeficient a vertikální korelační délka vzorků získaná zpracováním dat z rentgenového difraktometru.....	strana 26
Tabulka 4.7: Drsnosti nejsvrchnějších rozhraní vzorků získané AFM mikroskopem	strana 29
Tabulka 4.8: Fraktálové koeficienty a laterální korelační délky nejsvrchnějšího rozhraní získané zpracováním dat z AFM mikroskopu	strana 31