MASARYKOVA UNIVERZITA Přírodovědecká fakulta katedra fyziky pevné fáze

## Monochromatizace rtg záření kovovými multivrstvami

Jiří Novák

Diplomová práce

Brno 1999

Děkuji vedoucímu své diplomové práce doc. RNDr. Josefu Kuběnovi, CSc. za pomoc při experimentech a řadu kritických připomínek k obsahu této práce a doc. RNDr. Václavu Holému, CSc. za podnětné připomínky týkající se teoretických problémů.

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a že jsem použil pouze citované literatury.

# Obsah

Ú	vod	1
1	Odraz rtg záření na multivrstvách         1.1. Šíření rtg záření prostředím         1.2. Odraz rtg záření na rovinném rozhraní         1.3. Odraz rtg záření na multivrstvě         1.3.1. Maticový formalizmus         1.3.2. Rekurentní formalizmus         1.3.3. Jednoodrazová aproximace         1.4. Periodické multivrstvy         1.5. Reflektivita multivrstev s nedokonalými rozhraními         1.5.1. Popis drsného rozhraní         1.5.2. Reflektivita drsných multivrstev	$     \begin{array}{r}       3 \\       3 \\       5 \\       8 \\       8 \\       10 \\       10 \\       10 \\       13 \\       14 \\       16 \\     \end{array} $
2	Výpočet detekovaného zářivého toku         2.1. Zdroj rtg záření	<b>19</b> 19 21 25 29 30
3	Monochromatizace a kolimace záření pro měření rtg reflektivity         3.1. Požadavky na monochromatizaci a kolimaci záření         3.2. Monochromatizace záření periodickými multivrstvami	<b>33</b> 33 35
4	<ul> <li>Realizace monochromatizační aparatury</li> <li>4.1. Struktura multivrstev pro monochromátor</li></ul>	<ul> <li><b>39</b></li> <li>40</li> <li>41</li> <li>42</li> <li>43</li> <li>45</li> <li>47</li> </ul>
5	<ul> <li>Vlastnosti realizovaného monochromátoru</li> <li>5.1. Poznámky k metodám měření vlastností svazku</li></ul>	<b>49</b> 49 49 50 51 51

## OBSAH

Záv	řěr		63			
	5.3.2.	svazku	$\frac{56}{58}$			
0.0.	5.3.1.	Prostorové rozložení zářivého toku kolimovaného	50			
53	5.2.2. Spektrální hustota zářivého toku primárního svazku					

6

# Úvod

Rozvoj technologií růstu nízkodimenzionálních systémů, jako jsou tenké vrstvy, periodické multivrstvy, či kvantové dráty a body, klade vysoké nároky na analytické metody, které umožňují studium jejich struktury. Velmi úspěšnou v tomto směru je nízkoúhlová rtg reflektometrie. Pomocí ní lze získat informace o rozložení elektronové hustoty, drsnosti rozhraní a její replikaci, které jsou jinými nedestruktivními metodami prakticky nedostupné. Měření je však často třeba provádět za podmínek, kdy je intenzita reflektovaného záření velice slabá oproti intenzitě záření primárního. Tento problém je možno řešit použitím intenzivních, leč ekonomicky náročných, zdrojů rtg záření jako jsou synchrotrony a rentgenky s rotační anodou. Druhou možností získání intenzivního primárního svazku je použití standardní elektronové rentgenky, jejíž záření je však monochromatizováno a kolimováno pomocí reflexe na periodických multivrstvách.

Multivrstvy určené pro monochromatizaci rtg záření jsou obvykle tvořeny periodickým opakováním motivu dvojvrstev kov/spacer (materiál nízké elektronové hustoty). Rozhraní pak vytváří strukturu podobnou atomovým rovinám jednorozměrného, velice tenkého krystalu. Perioda multivrstev činí totiž desítky až stovky Å a počet opakování motivu bývá 20 až 100. K monochromatizaci se obvykle využívá zrcadlové reflexe záření v prvém difrakčním maximu, jehož úhlová poloha je s periodou multivrstvy svázána Braggovou rovnicí. Poloha maxima se zpravidla pohybuje okolo 1° a odrazivost zde může přesahovat i 90%. Vstupní úhlová apertura multivrstev je však asi 10× větší než u běžně užívaných monochromátorů krystalových. Díky malé vlnové disperzi úhlových poloh reflexních maxim d $\theta_{\rm Br}/d\lambda$  jsou monochromátorem zároveň propouštěny obě čáry dubletů K $\alpha$ , což vede k dalšímu zvýšení intenzity svazku.

V experimentálních aparaturách bývá často využíváno gradovaných multivrstev [IGH95, SG95]. Ty mají, díky zakřivení do tvaru elipsoidu, resp. paraboloidu a modulaci periody multivrstvy, kromě monochromatizačního účinku, také fokusační efekt. K monochromatizaci a kolimaci rtg záření lze však využít i reflexe na kombinaci rovinných multivrstev [KHS97].

Předkládaná práce je zaměřena na monochromatizaci rtg záření rovinnými periodickými multivrstvami při reflexi záření v oblasti 1. Braggova maxima. Cílem experimentu bylo vytvořit pomocí soustavy štěrbin a periodických multivrstev kolimovaný a monochromatizovaný svazek záření CuK $\alpha$  a měřením určit monochromatizační účinek soustavy. Při tom bylo využito uspořádání multivrstev (+,+). V oblasti teoretické bylo hlavním cílem na základě vytvořeného modelu soustavy odvodit vztahy pro přímo měřitelné veličiny. Srovnání výpočtů, provedených na základě těchto vztahů, s výsledky měření by mělo umožnit ověření správnosti najustování soustavy.

Celá diplomová práce je po formální stránce rozdělena do šesti kapitol. První tři kapitoly jsou spíše teoretického charakteru. Druhá polovina diplomové práce je pak věnována výsledkům měření a jejich srovnání s teoretickými výpočty.

V prvé kapitole je formulována teorie reflexe rtg záření na jednoduchém rozhraní, multivrstvách a na multivrstvách s nedokonalými rozhraními. Zvláštní pozornost je zde věnována periodickým multivrstvám (PM). Pro volbu optimální struktury PM pro monochromatizaci je totiž nutná znalost souvislosti periody a počtu opakování motivu v multivrstvě s její reflektivitou. Proto je zde také diskutována jednoodrazová aproximace, která na rozdíl od přesných vztahů dynamické toerie, poskytuje jednoduchou interpretaci základních rysů reflexních křivek PM. Ty jsou také ilustrovány sérií simulací.

Druhá kapitola se zabývá obecnou experimentální soustavou rentgenky, štěrbin a PM a vlastnostmi svazku záření z ní vystupujícího. Je zde zvolen vhodný matematický popis této soustavy a průchod záření soustavou je sledován pomocí paraxiálního přiblížení geometrické optiky. Kapitolu uzavírá odvození vztahů pro výsledky měření prostorového rozložení zářivého toku vystupujícího svazku a jeho spektrální hustoty zářivého toku. Na základě výpočtů provedených podle těchto vztahů lze rozhodnout o správnosti najustování soustavy zrcadel v monochromatizovaném svazku a provádět optimalizaci uspořádání i parametrů zrcadel podle požadavku užitého systému.

Specifické požadavky rtg reflektometrie na monochromatizaci a kolimaci záření jsou diskutovány v třetí kapitole. Se zřetelem k těmto požadavkům, jsou zde dále diskutovány možnosti monochromatizace pomocí periodických multivrstev a její principy. Též je zde odůvodněna konkrétní volba uspořádání multivrstev (+,+) v realizovaném monochromatizačním uspořádání.

Čtvrtá kapitola je věnována realizované monochromatizační soustavě. Jsou zde uvedeny výsledky měření vlastností čtveřice použitých multivrstev a výsledky nastavení dvojic zrcadel do uspořádání (+,+). Dále jsou zde popsány experimenty použité k určování vlastností zkoumaného svazku a experimentální uspořádání vlastní monochromatizační soustavy.

V páté kapitole jsou pak uvedeny výsledky měření prostorového rozložení zářivého toku a spektrální hustoty zářivého toku. Tyto výsledky jsou dále srovnávány s výsledky výpočtů provedených na základě vztahů odvozených v kapitole třetí.

Šestá, závěrečná kapitola přináší shrnutí zjištěných vlastností dvojic zrcadel v uspořádání (+,+) a kritické zhodnocení jejich použitelnosti při měření rtg reflektivity.

## Kapitola 1

## Odraz rtg záření na multivrstvách

V této kapitole se budeme zabývat šířením rtg záření v prostředí v případě, kdy není splněna difrakční podmínka. Zavedeme index lomu prostředí. Všimneme si odrazu rtg záření na dokonale hladkém rozhraní dvou prostředí. Po té uvedeme odvození dvou formalismů pro výpočet odrazivosti planárních multivrstev s dokonale hladkými rozhraními. V následující podkapitole budeme na základě simulací a jednoodrazové aproximace analyzovat vliv parametrů periody a počtu opakování motivu v periodických multivrstvách na jejich reflektivitu. Nakonec uvedeme vztahy pro reflektivitu multivrstev s nedokonalými rozhraními.

## 1.1. Šíření rtg záření prostředím

Rentgenové záření, jakožto elektromagnetické vlnění, je popsáno Maxwellovými rovnicemi [Str61]. Jestliže se v prostředí šíří monochromatické záření frekvence  $\omega$ , mají vektory intenzity elektrického pole, respektive intenzity magnetického pole, v bodě  $\boldsymbol{r}$  časovou závislost

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{E}_0(\boldsymbol{r}) \exp(-i\omega t),$$

respektive

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{H}_0(\boldsymbol{r}) \exp(-i\omega t).$$

Jak je ukázáno v [Hol96], při reflexi rt<br/>g záření může být nahrazena permitivita  $\epsilon(\mathbf{r})$ , nesoucí informaci o struktuře prostředí, její střední hodnotou přes makroskopicky homogenní část látky objemu V

$$\langle \epsilon({m r}) 
angle = rac{1}{V} \int\limits_V \epsilon({m r}) d{m r}$$

Platí tedy

$$\operatorname{div} \boldsymbol{D} = \langle \boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{r}) \rangle \operatorname{div} \boldsymbol{E} = 0$$

a z Maxwellových rovnic pak dostáváme vlnovou rovnici

$$\Delta \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) + n(\boldsymbol{r})^2 k_0^2 \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = 0.$$
(1.1)

Zde je  $k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}$  velikost vlnového vektoru ve vakuu,  $\lambda$  vlnová délka záření a  $n = \sqrt{\epsilon_r \mu_r}$  index lomu prostředí, ve kterém se záření šíří. Při tom relativní magnetická permeabilita je pro frekvence rtg záření jednotková  $\mu_r = 1$ .

Závislost indexu lomu elektromagnetického vlnění na frekveci vlnění je charakteristickou funkcí daného prostředí. V případě interakce rtg záření s prostředím je dominantní rozptyl na elektronech

v atomovém obalu. V prvním přiblížení, kdy se uvažuje jen pružný rozptyl primární vlny, je index lomu látky dán vztahem [Pin74]

$$n = 1 - \frac{r_{\rm e}\lambda^2}{2\pi} \langle \rho_{\rm e}(\boldsymbol{r}) \rangle = 1 - \frac{r_{\rm e}\lambda^2}{2\pi} \frac{\sum_{j=1}^{n} f_{0j}}{V_{\rm el}}.$$
(1.2)

n

Zde je  $r_{\rm e} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{m_e c^2} = 2.81 \cdot 10^{-15}$  m klasický elektronový poloměr,  $\langle \rho_{\rm e}(\boldsymbol{r}) \rangle$  je střední elektronová hustota v objemu elementární buňky  $V_{\rm el}$  a  $f_{0j}$  je atomový rozptylový faktor j–tého atomu elementární buňky, při rozptylovém úhlu  $2\theta = 0$ . Ve skutečnosti však při rozptylu fotonů dochází i k excitacím elektronů na vyšší hladiny, ke Comptonovu jevu a rozptylu na atomovém jádře. Důsledkem toho je atomový rozptylový faktor komplexní veličina s reálnou a imaginární složkou f' a f'', které závisí na vlnové délce záření. Disperzní závislosti  $f'(\lambda)$  a  $f''(\lambda)$  jsou tabelovány v [HGD93] <sup>1</sup> a [cry74]. Zavádíme pak reálný, resp. imaginární dekrement indexu lomu

$$\delta = \frac{r_{\rm e}\lambda^2}{2\pi} \sum_{j=1}^n N_j f'_{0j}(\lambda) = \frac{r_{\rm e}\lambda^2}{2\pi} \frac{\varrho N_{\rm a}}{M_{\rm mol}} \sum_{j=1}^n s_j f'_{0j}(\lambda), \tag{1.3}$$

resp.

$$\beta = \frac{r_{\rm e}\lambda^2}{2\pi} \sum_{j=1}^n N_j f_{0j}''(\lambda) = \frac{r_{\rm e}\lambda^2}{2\pi} \frac{\varrho N_{\rm a}}{M_{\rm mol}} \sum_{j=1}^n s_j f_{0j}''(\lambda), \qquad (1.4)$$

pomocí nichž vyjádříme index lomu prostředí jako

$$n = 1 - \delta + i\beta. \tag{1.5}$$

Význam veličin vystupujících v (1.3) a (1.4) je následující:  $N_j$  je počet atomů *j*-tého prvku v jednotce objemu látky,  $f'_{0j}(\lambda)$  a  $f''_{0j}(\lambda)$  jsou reálná a imaginární složka atomového rozptylového faktoru příslušného prvku,  $N_{\rm a} = 6.023 \cdot 10^{23} \, {\rm mol}^{-1}$  je Avogadrova konstanta,  $M_{\rm mol}$  je relativní molekulová hmotnost látky,  $\varrho$  hustota látky a  $s_j$  je počet atomů *j*-tého prvku v jedné molekule látky. Několik příkladů dekrementů indexů lomu je uvedeno v tab. 1.1..

Prostředí	Q	δ	$\beta$	$\theta_{\rm c}$
	$[g \cdot cm^{-3}]$			["]
Ni	8.900	$2.42 \cdot 10^{-5}$	$5.10 \cdot 10^{-7}$	1430
W	19.30	$4.82 \cdot 10^{-5}$	$3.88 \cdot 10^{-6}$	2025
C(grafit)	2.24	$7.23 \cdot 10^{-6}$	$1.16 \cdot 10^{-8}$	785
Si	2.328	$7.61 \cdot 10^{-6}$	$1.74 \cdot 10^{-7}$	804
$SiO_2$	2.651	$8.63 \cdot 10^{-6}$	$1.12 \cdot 10^{-7}$	856
Vzduch				
$N_{78.08}O_{20.95}Ar_{0.93}$	$1.201 \cdot 10^{-3}$	$3.86 \cdot 10^{-9}$	$1.56 \cdot 10^{-11}$	18.5

Tabulka 1.1.: Dekrementy indexu lomu  $\delta$ ,  $\beta$  a kritický úhel  $\theta_c$  (viz. příští kapitola) pro vybrané látek a záření o vlnové délce  $\lambda = 1.540562$  Å(spektrální čára CuK $\alpha_1$ ). Výpočet  $\delta$  a  $\beta$  byl proveden pomocí programu Henke.

Řešení rovnice (1.1) v prostředí s indexem lomu n lze psát jako superpozici rovinných vln

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{E}_0 \exp(i\,\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}),\tag{1.6}$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Data z uvedených tabulek jsou dostupná na adrese ftp://xray1.physics.sunsib.edu. Zde lze také nalézt program Henke provádějící výpočet atomových rozptylových faktorů a dekrementů indexu lomu na základě interpolace tabelovaných dat.

#### 1.2.. ODRAZ RTG ZÁŘENÍ NA ROVINNÉM ROZHRANÍ

jejichž vlnový vektor k je svázán s vakuovým vlnovým vektorem  $k_0$  disperzní relací

$$\mathbf{k}\mathbf{k} = n^2 \, \mathbf{k}_0 \mathbf{k}_0. \tag{1.7}$$

Intenzita záření je rovna časové střední hodnotě velikosti Pointingova vektoru, (viz. např. [BW59, Kub94]), a pro rovinnou vlnu je dána vztahem

$$I = \frac{1}{T} \mid \int_{T} \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H} \, d\tau \mid = \frac{1}{2} \mid \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H} \mid = \frac{n}{2 \, c \, \mu} \mid \boldsymbol{E} \mid^{2} \,. \tag{1.8}$$

Komplexní část indexu lomu pak souvisí s absorpcí záření, tedy exponenciálním poklesem intenzity homogenní vlny, podle vztahu

$$I = I_0 \exp(-2\beta \boldsymbol{k}) = I_0 \exp(-\alpha \boldsymbol{k}), \tag{1.9}$$

kde  $\alpha$  je koeficient absorpce záření.

## 1.2. Odraz rtg záření na rovinném rozhraní

Uvažujme rovinou vlnu s vlnovým vektorem  $k_0^{(i)}$ , která dopadá ve vakuu na rovinné rozhraní s prostředím o indexu lomu  $n_1$  pod úhlem  $\theta^{(i)}$ . Zvolíme-li kartézskou soustavu souřadnic ve shodě s obr. 1.1. má vakuový vlnový vektor složky  $k_0^{(i)} = k_0^{(i)}(\cos \theta^{(i)}, 0, \sin \theta^{(i)})$ . Na rozhraní pak vzniká



Obrázek 1.1.: Odraz a lom rovinné vlny na rozhraní prostředí. Při popisu odrazu a lomu rovinné vlny na rozhraní dvou prostředí rozložíme vektor intenzity elektrického pole E na složku  $E_s$  kolmou na rovinu dopadu  $(0; \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z})$ , s-polarizovaná vlna, (vlevo) a složku  $E_p$  ležící v rovině dopadu, p-polarizovaná vlna, (vpravo).

odražená a prošlá rovinná vlna s vlnovými vektory  $\mathbf{k}_0^{(r)}$  a  $\mathbf{k}_1^{(t)}$ . Veličiny příslušející vlně dopadající, resp. odražené, resp. prošlé budeme dále vždy značit horními indexy uzavřenými v závorkách (i), resp. (r), resp. (t). Podle Snellova zákona musí být rovny tečné složky vlnových vektorů všech tří vln (i), (r) a (t)

$$\boldsymbol{k}_{0\parallel}^{(i)} = k_0^{(i)}(\cos\theta^{(i)}, 0, 0) = \boldsymbol{k}_{0\parallel}^{(r)} = \boldsymbol{k}_{1\parallel}^{(t)}.$$

Odtud použitím disperzní relace (1.7)dostáváme pro vlnové vektory odražené respektive pošlé vlny vztahy

$$\boldsymbol{k}_{0}^{(\mathrm{r})} = k_{0}^{(\mathrm{i})}(\cos\theta^{(\mathrm{i})}, 0, -\sin\theta^{(\mathrm{i})}), \qquad (1.10)$$

respektive

$$\boldsymbol{k}_{1}^{(\mathrm{t})} = k_{0}^{(\mathrm{i})}(\cos\theta^{(\mathrm{i})}, 0, \sqrt{n^{2} - \cos^{2}\theta^{(\mathrm{i})}})$$
(1.11)

Složku vlnového vektoru v materiálu kolmou k rozhraní  $k_{1z}^{(t)}$  můžeme s přihlédnutím k velikosti dekrementů indexu lomu  $\delta_1, \beta_1 \ll 1$  přibližně vyjádřit z (1.5) a (1.11) jako

$$k_{1_z}^{(t)} \approx k_0^{(i)} \sqrt{\sin^2 \theta^{(i)} - 2\delta + 2\beta i}.$$
 (1.12)

Poměry amplitud intenzit elektrického pole odraženého, respektive prošlého a dopadajícího záření jsou pak dány známými Fresnelovými vztahy [BW59]

$$r_s = \frac{E_s^{(r)}}{E_s^{(i)}} = \frac{k_{0_z}^{(i)} - k_{1_z}^{(t)}}{k_0^{(i)} + k_1^{(t)}}$$
(1.13)

$$r_p = \frac{E_p^{(r)}}{E_p^{(i)}} = \frac{n_0^2 k_{1_z}^{(t)} - n_1^2 k_{0_z}^{(r)}}{n_0^2 k_{1_z}^{(t)} + n_1^2 k_{0_z}^{(r)}},$$
(1.14)

respektive

$$t_s = \frac{E_s^{(t)}}{E_s^{(i)}} = \frac{k_{0_z}^{(i)}}{k_{0_z}^{(i)} + k_{1_z}^{(t)}}$$
(1.15)

$$t_p = \frac{E_p^{(t)}}{E_p^{(i)}} = \frac{n_1 k_{0_z}^{(i)}}{n_1^2 k_{0_z}^{(i)} + k_{1_z}^{(t)}}.$$
(1.16)

Zde index s odpovídá rovinné vlně, jejíž amplituda vektoru el. pole  $\mathbf{E}_{s}^{(\alpha)}$  ( $\alpha = i, r, t$ ) je kolmá k rovině dopadu (0,  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ ) (viz. obr.1.1.). Mluvíme v tomto případě o vlně s s-polarizací. Index p odpovídá vlně s p-polarizací, tedy rovinné vlně, jejíž amplituda vektoru el. pole  $\mathbf{E}_{p}^{(\alpha)}$  ( $\alpha = i, r, t$ ) leží v rovině dopadu.

Reflektivita rozhraní, tedy poměr intenzit odraženého a dopadajícího záření, je pak dán vztahem

$$\mathcal{R}_{\alpha} = \frac{I_{\alpha}^{(\mathrm{r})}}{I_{\alpha}^{(\mathrm{i})}} = r_{0_{\alpha}} r_{0_{\alpha}}^{*}, \qquad (1.17)$$

kde spodní index  $\alpha$  je s nebo p, podle polarizace dopadajícího záření.

Jak je patrno z tabulky 1.1. je dekrement indexu lomu vzduchu o tři řády menší než pro pevné látky. Vlnový vektor rovinné vlny ve vzduchu můžeme proto nahrazovat při studiu reflexe vakuovým vlnovým vektorem  $\mathbf{k}_0$  a index lomu vzduchu považovat za rovný 1. <sup>2</sup> Protože je index lomu pevných látek menší jak 1, dochází pro malé úhly dopadu  $\theta^{(i)}$  vakuové vlny k totálnímu odrazu,  $\mathcal{R} \approx 1$ . Pro maximální úhel dopadu, při kterém bude ještě v prostředí pod rozhraním vznikat pouze evanescentní vlna, tzv. kritický úhel, vyplývá z (1.12)  $\theta_c \approx \sqrt{2\delta}$ . Příklady reflexních křivek niklu a uhlíku jsou uvedeny na obr. 1.2.. Mírný pokles reflektivity pro podkritické úhly  $\theta^{(i)} < \theta_c$  je způsoben absorpcí v látkovém prostředí. Efekt absorpce lze posoudit ze srovnání reflexních křivek rozhraní vzduch – Ni, kdy je v jednom případě vzat imaginárním dekrementem indexu lomu niklu  $\beta_{Ni}$  tabelovaný v tab. 1.1. a v druhém případě je absorpce záření v niklu zanedbána ( $\beta_{Ni} = 0$ ). Na obr. 1.2. jsou vyneseny pouze odrazivosti  $\mathcal{R}_s$  pro s–polarizovanou vlnu. V sledovaném oboru úhlů dopadu  $\theta^{(i)} \in [0^\circ, 3^\circ]$  se však reflexní křivky pro obě polarizace  $\mathcal{R}_p$  a  $\mathcal{R}_s$  shodují s přesností větší jak 1% (viz. obr. 1.3.). Proto budeme dále všechny výpočty odrazivosti provádět jen pro s–polarizované záření a index *s* nebudeme explicitně uvádět.

 $\mathbf{6}$ 

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Nenulovou imaginární část indexu lomu je však nutno vzít v úvahu při šíření záření vzduchem, kdy na vzdálenosti 1 m od zdroje je pohlceno asi 10% fotonů s energií odpovídající čáře Cu  $K\alpha_1$ ve svazku.



Obrázek 1.2.: Reflexní křivky uhlíku a niklu pro charakteristické čáry Cu  $K\alpha_1$  a  $K\beta_1$ . Efekt absorpce je patrný z reflexní křivka niklu vypočtené při zanedbání imaginárního dekrementu indexu lomu pro záření Cu $K\beta_1$  ( $\delta = 2.07 \cdot 10^{-5}, \beta = 0$ ).



Obrázek 1.3.: Relativní a absolutní odchylka odrazivosti rozhraní vzduch – Ni,  $\frac{|\mathcal{R}_s - \mathcal{R}_p|}{\mathcal{R}_s}$  a |  $\mathcal{R}_s - \mathcal{R}_p$  |. Výpočet byl proveden pro záření Cu  $K\alpha_1$ .

### 1.3. Odraz rtg záření na multivrstvě

V této podkapitole se budeme zabývat reflektivitou ideálních multivrstev. V prvé řadě odvodíme vztahy pro reflektivitu vyplývající z dynamické teorie pomocí maticového formalizmu. Pak uvedeme rekurentní formuli, která z maticového zápisu přímo plyne. Nakonec se seznámíme s jednoodrazovou aproximací, která nám v následující podkapitole pomůže porozumět reflexním křivkám periodických multivrstev.

Ideální multivrstvou budeme dále rozumět strukturu na sebe nanesených homogenních vrstev oddělených paralelními rovinnými rozhraními. Vrstvy označíme indexy j = 1, 2, ..., N, N + 1, kde index 1 přísluší první vrstvě sousedící se vzduchem a index N + 1 náleží substrátu, na kterém je mnohonásobně tenčí multivrstva umístěna (viz. obr.1.4.). Vrstva j je charakterizována indexem lomu  $n_j$  a její tloušťkou  $d_j = z_j - z_{j-1}$ .



Obrázek 1.4.: Vlevo: Schematický nákres ideální multivrstvy. Každá vrstva j = 1, 2, ..., N je charakterizována indexem lomu  $n_j$  a tloušťkou vrstvy  $d_j$ . Uprostřed: Schematický nákres průchodu a odrazu záření na rozhraních multivrstvy. Horní indexy (t), resp. (r) odpovídají rovinným vlnám postupujícím k substrátu, resp. k rozhraní vakuum – první vrstva. Vpravo: Schematický nákres periodické multivrstvy s Mkrát opakovaným motivem dvojce materiálů A, B.

#### 1.3.1. Maticový formalizmus

Uvažme rovinnou vlnu s vlnovým vektorem  $k_0^{(i)}$  dopadající ze vzduchu na povrch multivrstvy. V každé vrstvě mohou nyní vznikat rovinné vlny se dvěma různými vlnovými vektory, které vyhovují Snellovu zákonu a disperzní relaci (1.7). Rovinné (t) vlny postupující směrem k rozhraní multivrstva–substrát budou mít v *j*–té vrstvě vlnový vektor

$$\boldsymbol{k}_{j}^{(\mathrm{t})} = (k_{0_{x}}^{(\mathrm{i})}, 0, \sqrt{\mid \boldsymbol{k}_{0}^{(\mathrm{i})} \mid^{2} n_{j}^{2} - k_{0_{x}}^{(\mathrm{i})^{2}}}).$$
(1.18)

#### 1.3.. ODRAZ RTG ZÁŘENÍ NA MULTIVRSTVĚ

Vlnový vektor vln (r) postupujících k rozhraní multivrstva vakuum pak bude

$$\boldsymbol{k}_{j}^{(\mathrm{r})} = (k_{0_{x}}^{(\mathrm{i})}, 0, -\sqrt{\mid \boldsymbol{k}_{0}^{(\mathrm{i})} \mid^{2} n_{j}^{2} - k_{0_{x}}^{(\mathrm{i})^{2}}}).$$
(1.19)

Komponentu vlnového vektoru kolmou k rozhraním  $k_{j_z}^{(t)}$  vrstev můžeme opět přibližně vyjádřit vztahem (1.12). Je-li sin $\theta^{(i)} > \sqrt{2\delta}$ , můžeme dále převést výraz pod odmocninou v (1.12) v Taylorovu řadu podle člene  $2\delta_j / \sin^2 \theta^{(i)}$ . Zanedbáme-li v rozvoji členy u derivací vyšších řádů jak 1., dostáváme

$$k_{j_z}^{(\mathrm{t})} \approx k_0 \sin \theta^{(\mathrm{i})} (1 - \frac{\delta_j}{\sin^2 \theta^{(\mathrm{i})}}).$$
(1.20)

Podmínky spojitosti tečných složek intenzity magnetického a elektrického pole nad a pod (j-1)-ním rozhraním můžeme zapsat v maticovém zápisu [Hol96]

$$\begin{pmatrix} 1 & 1\\ k_{j-1_z}^{(t)} & -k_{j-1_z}^{(t)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{j-1}^{(t)}\\ E_{j-1}^{(r)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1\\ k_{j_z}^{(t)} & -k_{j_z}^{(t)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_j^{(t)\prime}\\ E_j^{(r)\prime} \end{pmatrix},$$
(1.21)

kde  $E_j^{(\alpha)\prime} = E_j^{(\alpha)}(z_{j-1})$  popisuje stav el. pole na horním rozhraní j-té vrstvy a  $E_{j-1}^{(\alpha)} = E_{j-1}^{(\alpha)}(z_{j-1})$  popisuje stav el. pole na dolním rozhraní (j-1)-ní vrstvy. Ze vztahu (1.21) pak vyjádříme intenzity elektrického pole vln (t) a (r) na dolním rozhraní (j-1)- ní vrstvy

$$\underbrace{\begin{pmatrix} E_{j-1}^{(t)} \\ E_{j-1}^{(r)} \\ \vec{E}_{j-1} \end{pmatrix}}_{\vec{E}_{j-1}} = \frac{1}{t_{j-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & r_{j-1} \\ r_{j-1} & 1 \end{pmatrix}}_{\hat{R}_{j-1}} \underbrace{\begin{pmatrix} E_{j}^{(t)\prime} \\ E_{j}^{(r)\prime} \\ \vec{E}_{j}^{\prime} \end{pmatrix}}_{\vec{E}_{j}^{\prime}}.$$
(1.22)

Zde jsou  $r_{j-1}$  a  $t_{j-1}$  příslušné Fresnelovy koeficienty odrazu a průchodu dané vztahy

$$r_{j-1} = \frac{k_{j-1_z}^{(t)} - k_{j_z}^{(t)}}{k_{j-1_z}^{(t)} + k_{j_z}^{(t)}}$$
(1.23)

$$t_{j-1} = \frac{2k_{j-1_z}^{(t)}}{k_{j-1_z}^{(t)} + k_{j_z}^{(t)}}.$$
(1.24)

Fázový posuv intenzit elektrického pole na horním a dolním rozhraní  $j-{\rm t\acute{e}}$ vrstvy lze podobně vyjádřit v maticovém zápisu

$$\vec{E}'_{j} = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{(-ik_{j_{z}}^{(t)}d_{j})} & 0\\ 0 & e^{(ik_{j_{z}}^{(t)}d_{j})} \end{pmatrix}}_{\widehat{\boldsymbol{\varphi}}_{j}} \vec{E}_{j}.$$
(1.25)

Sloupcový vektor  $\vec{E_0},$  popisující stav vlnového pole na povrchu multivrstvy, je pak vyjádřen součinem matic

$$\vec{E}_0 = \frac{1}{t_0 t_1 \cdots t_N} \widehat{\boldsymbol{R}}_0 \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_1 \widehat{\boldsymbol{R}}_1 \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_2 \cdots \widehat{\boldsymbol{R}}_{N-1} \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_N \widehat{\boldsymbol{R}}_N = \frac{1}{t_0 t_1 \cdots t_N} \widehat{\boldsymbol{M}} \vec{E}_{N+1}.$$
(1.26)

Je-li substrát multivrstvy dostatečně tlustý,  $d_{N+1} > 1 \, \mu m$ , můžeme zanedbat vlnu (r) postupující v substrátu směrem k povrchu multivrstvy a položit  $E_{N+1}^{(r)} = 0$ . Potom lze vyjádřit reflektivitu multivrstvy jako poměr elementů matice  $\widehat{M}$ 

$$\mathcal{R} = \left| \frac{\widehat{M}_{21}}{\widehat{M}_{11}} \right|^2. \tag{1.27}$$

#### 1.3.2. Rekurentní formalizmus

Výše uvedený maticový formalizmus umožňuje rychlý výpočet reflektivit periodických multivrstev, o kterých se zmíníme v příští podkapitole. U multivrstev, ve kterých se některý z parametrů nemění periodicky, je výhodnější použít pro výpočet rekurentního formalizmu, který byl poprvé zaveden do oblasti rtg reflektivity v [Par54]. Ten snadno vyvodíme z maticových vztahů. Intenzity pole na spodních rozhraních (j-1)-ní a j-té vrstvy jsou podle (1.22) a (1.25) svázány vztahem  $\vec{E}_{j-1} = \hat{R}_{j-1} \hat{\Phi}_j \vec{E}_j$ . Odtud pak pro poměry intenzit pole na rozhraních dostáváme rekurentní vztah

$$R_{j-1} = \frac{E_{j-1}^{(r)}}{E_{j-1}^{(t)}} = \frac{r_{j-1} + R_j \exp\left(i \, 2k_{j_z}^{(t)} d_j\right)}{1 + R_j r_{j-1} \exp\left(i \, 2k_{j_z}^{(t)} d_j\right)}.$$
(1.28)

Rekurence počíná od  $R_N = r_N$  a postupujeme až k $R_0$ , ze kterého určíme reflektivitu multivrstvy

$$\mathcal{R} = \mid R_0 \mid^2. \tag{1.29}$$

#### 1.3.3. Jednoodrazová aproximace

V odstavci 1.3.1. a 1.3.2. byly uvedené vztahy pro odrazivost multivrstvy odvozené z dynamické teorie. Ty jsou však dosti neprůhledné a nedávají možnost jednoduché analýzy vlivu parametrů multivrstvy na její reflektivitu. Jak je však patrné ze vztahů (1.11), (1.23) a grafu 1.2. je pro úhly dopadu vlny větší než kritický úhel materiálu absolutní hodnota Fresnelových reflexních koeficientů mnohem menší než jedna. Nabízí se zde možnost zanedbat ve vztazích pro reflektivitu multivrstvy (1.27) a (1.28) výrazy, ve kterých se vyskytují v součinu Fresnelovy koeficienty odrazu více jak jedené vrstvy. V rekurentním vztahu (1.28) to znamená zanedbání součinu  $R_j r_{j-1}$  ve jmenovateli, takže se zjednoduší na

$$R_{j-1} = \frac{E_{j-1}^{(r)}}{E_{j-1}^{(t)}} \approx r_{j-1} + R_j \exp\left(i \, 2k_{j_z}^{(t)} d_j\right). \tag{1.30}$$

Vztah pro reflektivitu multivrstvy

$$\mathcal{R} \approx |\sum_{j=0}^{N} r_j \prod_{l=1}^{j} \exp\left(i \, 2k_{l_z}^{(t)} d_l\right)|^2 = |\sum_{j=0}^{N} r_j \exp\left(i \, 2\sum_{l=1}^{j} k_{l_z}^{(t)} d_l\right)|^2$$
(1.31)

má pak jednoduchou interpretaci. Vlna, která pronikne k j-tému rozhraní, se částečně odráží a vystupuje z multivrstvy s fázovým posuvem  $\phi_j = 2 \sum_{l=1}^{j} k_{l_z}^{(t)} d_l + \arg(r_j)$ . Výsledná odražená vakuová vlna je superpozicí vln vzniklých po jediném odrazu na každém z rozhraní. Odtud také plyne název aproximace.

Na obr. 1.5. jsou uvedeny simulace reflexních křivek monovrstvy niklu naneseného na křemíkovém substrátu. Je patrné, že vzdálenost maxim — tzv. Kissingových interferencí — v úhlovém prostoru se zvětšuje se zmenšující se tloušťkou vrstev.

## 1.4. Periodické multivrstvy

V této podkapitole se budeme zabývat reflektivitou na periodických multivrstvách. Kvalitativní úvahy v závěrečné části jsou výchozím bodem pro optimální volbu struktury multivrstvy, kterou bude možno využít pro monochromatizaci rtg záření. Zejména budeme vycházet ze simulací reflexních křivek a z analýzy vztahu pro reflektivitu v jednoodrazové aproximaci.



Obrázek 1.5.: Reflexní křivky monovrstvy niklu na křemíkovém substrátu pro tloušťky vrstvy  $d_a = 80$  Å a  $d_b = 40$  Å.

Pod pojmem periodická multivrstva budeme dále rozumět strukturu tvořenou opakovaným nanášením motivu dvojvrstvě materiálů A a B na substrát (viz. obr. 1.4.). Zde jsou vrstvy j = 2k-1 tvořeny materiálem A, j = 2k materiálem B, kde k = 1, 2, ..., M a M označuje počet opakování motivu AB. Dvojvrstva má vždy stejnou tloušťkou D, kterou označujeme jako periodu. Tloušťky vrstev jsou

$$d_A = pD$$
  $d_B = (1-p)D$   $(0 (1.32)$ 

kde p je parametr dvojvrstvy. Další charakteristikou periodických multivrstev jsou indexy lomu materiálů  $n_A$ ,  $n_B$ . U multivrstev užívaných v rtg optice je žádoucí, aby jeden z materiálů měl velký dekrement indexu lomu oproti druhému materiálu. Ten tvoří vrstvu s větší tloušťkou (tzv. spacer), aby nedocházelo k velké absorpci záření ve struktuře. Tak je docíleno vysoké reflektivity v širším oboru úhlů dopadu záření.

Výpočet reflektivity pomocí maticového formalizmu se nyní zjednoduší. Podle (1.23) platí pro Fresnelovy koeficienty rozhraní vrstev A-B, respektive B-A  $r_A$  respektive  $r_B$ 

$$r_A = -r_B = \frac{k_{A_z}^{(t)} - k_{B_z}^{(t)}}{k_{A_z}^{(t)} + k_{B_z}^{(t)}}.$$

Přechodová matice v (1.26) se nyní vypočte jako

$$\widehat{\boldsymbol{M}}_{\text{per}} = (-1)^{(M-1)} \widehat{\boldsymbol{R}}_0 (\widehat{\boldsymbol{\Phi}}_A \widehat{\boldsymbol{R}}_A \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_B \widehat{\boldsymbol{R}}_B)^{(M-1)} \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_A \widehat{\boldsymbol{R}}_A \widehat{\boldsymbol{\Phi}}_B \widehat{\boldsymbol{R}}_{2M}$$
(1.33)

V reflexních křivkách periodických multivrstev (viz. obr. 1.6.) jsou výrazná maxima, jejichž úhlová poloha souvisí s periodou multivrstvy D podobně jako poloha difrakčních maxim u krystalů. Nazýváme je proto Braggovými maximy (BM).



Obrázek 1.6.: Reflexní křivka periodické multivrstvy 20×(Ni,C), substrát Si,  $d_{\rm Ni} = 20$  Å a  $d_{\rm C} = 80$  Å.

#### 1.5.. REFLEKTIVITA MULTIVRSTEV S NEDOKONALÝMI ROZHRANÍMI

Průhlednější vztah pro reflektivitu periodické multivrstvy nám poskytne jednoodrazová aproximace. Pro jednoduchost zápisu zavedeme pro fázový posuv reflektované vlny, která prošla jednou vrstvou A, respektive B, označení  $\Phi_A = 2k_{A_z}^{(t)}d_A$ , respektive  $\Phi_B = 2k_{B_z}^{(t)}d_B$ . Tak přepíšeme výraz pro reflektivitu (1.31) na

$$\mathcal{R}_{\text{per}} \approx |(r_0 - r_B) + (r_B + r_A e^{i\Phi_A}) \sum_{j=0}^{M-1} e^{ij(\Phi_A + \Phi_B)} + r_{2M} e^{iM(\Phi_A + \Phi_B)} |^2$$
  

$$\mathcal{R}_{\text{per}} = |(r_0 + r_A) - F e^{i(M-1)(\Phi_A + \Phi_B)/2} \frac{\sin(M(\Phi_A + \Phi_B)/2)}{\sin((\Phi_A + \Phi_B)/2)} + (1.34)$$
  

$$r_{2M} e^{iM(\Phi_A + \Phi_B)} |^2$$

Zde jsme označili  $F = r_A(1 - \exp(i\Phi_A))$  strukturní faktor supermřížky. Právě ten je zodpovědný za vymizení 5. BM v reflexní křivce na obr. 1.6.. Poloha BM řádu ( $m = 0, 1, 2, \cdots$ ), vyplývající z druhého člene výrazu na pravé straně (1.34), odpovídá úhlům dopadu záření, při kterých je splněna podmínka

$$k_{A_z}^{(t)} d_A + k_{B_z}^{(t)} d_B = \pi \, m. \tag{1.35}$$

Této podmínky lze využít k přibližnému určení periody multivrstvy D ze známé úhlové polohy BM  $\theta_{\rm Br}$ . Dosazením za  $k_{A_z}^{(t)}$  a  $k_{B_z}^{(t)}$  z (1.20) do (1.35) dostáváme

$$D \approx \frac{\pi m}{k_0 \sin \theta_{\rm Br} (1 - \langle \delta \rangle / \sin^2 \theta_{\rm Br})} \approx \frac{\pi m}{k_0 \sin \theta_{\rm Br}} (1 + \frac{\langle \delta \rangle}{\sin^2 \theta_{\rm Br}}), \qquad (1.36)$$

kde

$$\langle \delta \rangle = p \delta_A + (1-p) \delta_B$$

je střední dekrement indexu lomu multivrstvy. Pro polohu maxim pak můžeme zapsat Braggovu difrakční podmínku

$$2D\sin\langle\theta_{\rm Br}\rangle = m\lambda,\tag{1.37}$$

kde  $\langle \theta_{\rm Br} \rangle$  je úhel pod kterým by se šířila rovinná vlna v materiálu s indexem lomu  $n = 1 - \langle \delta \rangle$ . K již zmíněnému vymizení maxima řádu *m* dojde, jestliže platí přibližná rovnost  $m \approx l/p$ , kde *l* je celé číslo.

Pro velký počet period M v multivrstvě je reflektivita v BM přibližně rovna  $(M \mid r_A \mid \sin(k_{A_z}^{(t)}d_A))^2$ . Reflektivita tedy roste s kvadrátem počtu period. Zvyšování reflektivity v 1. BM je patrné v grafu na obr. 1.7., kde je také vidět zužování maxim v úhlovém obru se zvětšujícím se počtem period. To vyplývá též z argumentu funkce sin prostředního člene (1.34).

Pro monochromatizaci rtg záření je podstatné, že úhlová poloha BM je závislá na vlnové délce. Šířka maxima je přitom úměrná 1/M. Vhodnou volbou parametrů multivrstvy lze docílit v 1. BM reflektivity až  $\mathcal{R} \approx 0.95$  a FWHM až 150", přitom se však BM spektrálních čar  $K_{\alpha}$ ,  $K_{\beta}$  úhlově nepřekrývají.

#### 1.5. Reflektivita multivrstev s nedokonalými rozhraními

V podkapitolách 1.2.,1.3. a 1.4. jsme předpokládali reflexi záření na dokonale hladkých rozhraních. Růst multivrstvy však není ve všech místech stejně rychlý a dochází ke vzniku nehomogenit, které můžeme statisticky popsat jako náhodnou tloušťku vrstev. Mluvíme potom o drsnosti povrchu, jejímž důsledkem je snížení reflektivity. V první části této podkapitoly se zmíníme o popisu drsného rozhraní. V druhé části budou uvedeny vztahy pro spekulární reflektivitu drsné multivrstvy.



Obrázek 1.7.: Reflexní křivka periodické multivrstvy v okolí 1. BM. Struktura multivrstvy: motiv (A,B)=(Ni,C), substrát Si,  $d_{\rm Ni} = 20$  Å a  $d_{\rm C} = 30$  Å. Vlevo: Zužování 1. BM a zvyšování reflektivity v maximu se zvětšujícím se počtem period M. Vpravo: Úhlové polohy BM pro čáry CuK $\alpha$ , CuK $\beta$  jsou při vhodné volbě sruktury multivrstvy odděleny. Zde je  $\Delta \theta_{\rm Br} = 330''$ ,  $\mathcal{R}_{\rm max} = 0.87$ . Počet period v multivrstvě byl M = 30.

#### 1.5.1. Popis drsného rozhraní

Profil drsného rozhraní pod j-tou vrstvou můžeme popsat [Hol96] pomocí odchylky  $U_j(\mathbf{r}_{\parallel})$  od středního rozhraní se souřadnicí  $z_j^{\text{id}}$ , která je funkcí dvojice pravoúhlých souřadnic  $\mathbf{r}_{\parallel} = (x, y)$  v rovině středního rozhraní (viz. obr. 1.8.). Skutečné rozhraní má pak z–ovou souřadnici

$$z_j(\boldsymbol{r}_{\parallel}) = z_j^{\rm id} + U_j(\boldsymbol{r}_{\parallel}), \qquad (1.38)$$

přičemž veličina  $z_i^{\text{id}}$  je souřadnice středního rozhraní j

$$z_{j}^{\mathrm{id}} = \langle z_{j}(\boldsymbol{r}_{\parallel}) 
angle = \int dx \int_{S} dy z_{j}(\boldsymbol{r}_{\parallel})$$

a Szde označuje ozářenou plochu rozhraní. Lokálními výchylkami rozhraní obklopujících  $j{\mbox{-}tou}$ vrstvu je dána její lokální tloušťka

$$d_{j}(\mathbf{r}_{\parallel}) = z_{j}^{\mathrm{id}} - z_{j-1}^{\mathrm{id}} + U_{j}(\mathbf{r}_{\parallel}) - U_{j-1}(\mathbf{r}_{\parallel}) = d_{j}^{\mathrm{id}} + U_{j}(\mathbf{r}_{\parallel}) - U_{j-1}(\mathbf{r}_{\parallel}).$$
(1.39)

Přesná znalost nehomogenit rozhraní atomárních rozměrů na makroskopicky velké ozářené ploše není možná. Zavádí se proto statistický popis rozhraní (viz. [SSG88, Hol96]). Funkci  $U_j(\boldsymbol{r}_{\parallel})$  nahradíme náhodnou veličinou výchylky od středního rozhraní  $U_j$ , která má na celé ploše stejnou hustotu pravděpodobnosti

$$w_j(U_j) = \frac{1}{S} \int dS \,\delta(U_j(\boldsymbol{r}_{\parallel}) - U_j), \qquad (1.40)$$

kde  $\delta(x)$  označuje Diracovu distribuci. Důležitou veličinou charakterizující rozhraní se pak stává disperze funkce hustoty pravděpodobnosti

$$\sigma_j = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dU_j \, w_j(U_j) U_j^2},\tag{1.41}$$



Obrázek 1.8.: K popisu drsných rozhraní j-té vrstvy.

která charakterizuje dr<br/>snost $j\mbox{-}tého$ rozhraní. Nakonec zavedeme charakteristickou funkci husto<br/>ty pravděpodobnosti

$$\chi_j(q_j) = \int_{-\infty}^{\infty} dU_j \, w_j(U_j) e^{i \, U_j}, \qquad (1.42)$$

což je Fourierova transformace rozdělení  $w_i(U_i)$ .

Často se uvažuje rozdělení pravděpodobnosti výchylky j-tého rozhraní od jeho středního povrchu jako Gaussovské s drsností  $\sigma_j$ 

$$w_j(U_j) = \frac{1}{\sigma_j \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{U_j^2}{2\sigma_j^2}}.$$
(1.43)

Charakteristická funkce hustoty pravděpodobnosti je potom též Gaussovská

$$\chi_j(q_j) = e^{-\frac{\sigma_j^2 U_j^2}{2}}.$$
(1.44)

V případě vrstev malé tloušťky může během růstu docházet k částečné replikaci nedokonalého povrchu předešlého rozhraní. Pro popis tohoto jevu zavedeme funkci replikace  $a_j(\mathbf{r}_{\parallel})$  [Hol96], udávající "míru přenosu" nehomogenit *j*-tého rozhraní na rozhraní (j-1). Pomocí ní vyjádříme výchylku (j-1)-ního rozhraní jako

$$U_{j-1}(\boldsymbol{r}_{\parallel}) = \int \int_{S} d\boldsymbol{r}_{\parallel}' U_{j}(\boldsymbol{r}_{\parallel} - \boldsymbol{r}_{\parallel}') a_{j}(\boldsymbol{r}_{\parallel}') + \Delta_{j}(\boldsymbol{r}_{\parallel}).$$
(1.45)

Náhodná funkce  $\Delta_j(\mathbf{r}_{\parallel})$  je vlastní drsnost *j*-té vrstvy (projevující se na (j-1)-ním rozhraní), která popisuje nedokonalost růstu. O veličině  $\Delta_j(\mathbf{r}_{\parallel})$  předpokládáme, že je statisticky nezávislá na  $U_j(\mathbf{r}_{\parallel})$ . Dále se zmíníme o třech nejjednodušších modelech vertikální replikace drsnosti rozhraní:

- a) Identické vrstvy. Rozhraní se dokonale replikuje, nevzniká žádná vlastní drsnost při růstu vrstvy. Tedy volíme  $a(\mathbf{r}_{\parallel}) = \delta(\mathbf{r}_{\parallel})$  a  $h(\mathbf{r}_{\parallel}) = 0$ . Lokální tloušťka vrstvy nezávisí na  $\mathbf{r}_{\parallel}$  a drsnost všech rozhraní je rovna drsnosti povrchu substrátu  $\sigma_{\rm sb}$ .
- b) Zdrsňování rozhraní. Během růstu dochází k dokonalé replikaci nehomogenit předešlého povrchu stejně jako v předešlém modelu. Navíc však dochází ke vzniku náhodných nových nehomogenit a  $\Delta(\mathbf{r}_{\parallel}) \neq 0$ . Zvláště jednoduchý vztah pro drsnost jednotlivých vrstev dostaneme

v následujícím případě. Zvolíme jako hustotu pravděpodobnosti výchylky povrchu substrátu Gaussovo rozdělení  $w_N(U_N) = 1/(\sqrt{2\pi}\sigma_N) \exp\left(-U_N^2/(2\sigma_N^2)\right)$ a vlastní dr<br/>snosti následujících vrstev  $\Delta_j$  ( $j = N, N - 1, \cdots, 1$ ) budeme předpokládat též Gaussovské

$$w_j^{\rm in}(\Delta_j) = 1/(\sqrt{2\pi\sigma_j}) \exp\left(\frac{h_j^2}{(2\Delta\sigma_j^2)}\right)$$

s disperzemi  $\Delta \sigma_j$ . Z (1.45) pak plyne, že lokální výchylka *j*-tého rozhraní  $U_j$  je součtem náhodných veličin s Gaussovským rozdělením, tedy má také Gaussovské rozdělení a kvadrát jeho drsnosti pak bude součet kvadrátů vlastních drsností jednotlivých vrstev

$$\sigma_j = \sqrt{\sigma_N^2 + \sum_{l=j+1}^N \Delta \sigma_l^2}.$$
(1.46)

 $\Delta \sigma_j$  můžeme tedy nazvat přírůstkem dr<br/>snosti j-té vrstvy.

c) Nekorelovaný růst. Zde se uplatňuje při růstu každé vrstvy pouze její vlastní drsnost  $a(\mathbf{r}_{\parallel}) = 0$ a  $\Delta(\mathbf{r}_{\parallel}) \neq 0$ .

Vzhledem k tomu že v rámci této práce se budeme zabývat pouze multivrstvami s malou tloušťkou, budeme dále uvažovat jen model drsnosti b). Navíc budeme pro jednoduchost předpokládat, že přírůstky drsností jsou u všech vrstev stejné  $\Delta \sigma_j = \Delta \sigma$ . Drsnost bude narůstat směrem k hornímu rozhraní podle vztahu

$$\sigma_j = \sqrt{\sigma_{\rm sb}^2 + (N-j)\Delta\sigma^2}.$$
(1.47)

Je přirozené předpokládat, že výchylky povrchu rozhraní ve dvou bodech  $\mathbf{r}_{\parallel}$ ,  $\mathbf{r}'_{\parallel}$  jsou do jisté míry korelovány, tedy že nutně neplatí  $\langle U_j(\mathbf{r}_{\parallel})U_j(\mathbf{r}_{\parallel} + \Delta \mathbf{r}_{\parallel})\rangle = C(\Delta \mathbf{r}_{\parallel}) \neq 0$  pro dostatečně malá  $\Delta \mathbf{r}_{\parallel}$ . Jak je však ukázáno v [SSG88] vztahy pro spekulární reflektivitu lze nezávisle na tomto faktu nahradit v dobré aproximaci vztahy uvedenými v druhé části této podkapitoly, které jsou odvozovány pro rozhraní s nulovou funkcí laterální korelace  $C(\Delta \mathbf{r}_{\parallel})$ .

#### 1.5.2. Reflektivita drsných multivrstev

Nyní uvedeme odvození reflektivity drsné multivrstvy na základě dynamické teorie, kterou jsme se zabývali v podkapitole 1.3.. Jak jsme již zmínili v předešlé části, drsnost rozhraní mění lokálně tloušťky vrstev. To ovšem ovlivní translační matice  $\hat{\boldsymbol{\Phi}}_j$  v (1.25), které nyní musí respektovat lokální výchylky  $U_j(\boldsymbol{r}_{\parallel})$  a  $U_{j-1}(\boldsymbol{r}_{\parallel})$  rozhraní vymezujících *j*-tou vrstvu

$$\widehat{\boldsymbol{\varPhi}}_{j}'(\boldsymbol{r}_{\parallel}) = \begin{pmatrix} e^{-i\,k_{j_{z}}^{(\mathrm{t})}(d_{j}^{\mathrm{id}}+U_{j}-U_{j-1})} & 0\\ 0 & e^{i\,k_{j_{z}}^{(\mathrm{t})}(d_{j}^{\mathrm{id}}+U_{j}-U_{j-1})} \end{pmatrix}.$$
(1.48)

Tuto diagonální matici můžeme nyní rozepsat na součin tří matic

$$\widehat{\boldsymbol{\varPhi}}_{j}'(\boldsymbol{r}_{\parallel}) = \underbrace{\begin{pmatrix} e^{i\,k_{j_{z}}^{(t)}U_{j-1}} & 0\\ 0 & e^{-i\,k_{j_{z}}^{(t)}U_{j-1}} \end{pmatrix}}_{\widehat{\boldsymbol{L}}_{j-1}(\boldsymbol{r}_{\parallel})} \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-i\,k_{j_{z}}^{(t)}d_{j}^{id}} & 0\\ 0 & e^{i\,k_{j_{z}}^{(t)}d_{j}^{id}} \end{pmatrix}}_{\widehat{\boldsymbol{\varPhi}}_{j}} \times \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-i\,k_{j_{z}}^{(t)}U_{j}} & 0\\ 0 & e^{i\,k_{j_{z}}^{(t)}U_{j}} & 0\\ 0 & e^{i\,k_{j_{z}}^{(t)}U_{j}} & 0\\ 0 & e^{i\,k_{j_{z}}^{(t)}U_{j}} & \end{pmatrix}}_{\widehat{\boldsymbol{U}}_{j}(\boldsymbol{r}_{\parallel})}.$$
(1.49)

Elementy matice  $\widehat{\boldsymbol{\Phi}}_{j}$  jsou nyní opět dány střední hodnotou tloušťky vrstvy, zatímco elementy matic  $\widehat{\boldsymbol{L}}_{j-1}(\boldsymbol{r}_{\parallel})$  a  $\widehat{\boldsymbol{U}}_{j}(\boldsymbol{r}_{\parallel})$  mají náhodný charakter. V matici  $\widehat{\boldsymbol{M}}$  v (1.26), spojující intenzity el. pole v substrátu a na povrchu multivrstvy nyní svážeme matice náležející k jednomu rozhraní

$$\widehat{\boldsymbol{M}}'(\boldsymbol{r}_{\parallel}) = \widehat{\boldsymbol{U}}_{0}(\boldsymbol{r}_{\parallel})\widehat{\boldsymbol{R}}_{0}\widehat{\boldsymbol{L}}_{0}(\boldsymbol{r}_{\parallel})\prod_{j=1}^{N}(\widehat{\boldsymbol{\varPhi}}_{j}\underbrace{\widehat{\boldsymbol{U}}_{j}(\boldsymbol{r}_{j\parallel})\widehat{\boldsymbol{R}}_{j}\widehat{\boldsymbol{L}}_{j}(\boldsymbol{r}_{j\parallel})}_{\widehat{\boldsymbol{B}}_{j}(\boldsymbol{r}_{j\parallel})}).$$
(1.50)

Reflexní matice  $\widehat{B}_{j}(r_{j\parallel})$  nyní odráží i lokální posuv j-tého rozhraní a má tvar

$$\widehat{B}'_{j}(\mathbf{r}_{j\parallel}) = \begin{pmatrix} e^{-i(k_{j_{z}}^{(t)} - k_{j+1_{z}}^{(t)})U_{j}} & r_{j}e^{-i(k_{j_{z}}^{(t)} + k_{j+1_{z}}^{(t)})U_{j}} \\ r_{j}e^{i(k_{j_{z}}^{(t)} + k_{j+1_{z}}^{(t)})U_{j}} & e^{i(k_{j_{z}}^{(t)} - k_{j+1_{z}}^{(t)})U_{j}} \end{pmatrix}.$$
(1.51)

Amplitudu reflektivity multivrstvy  $R' = \widehat{M}'_{21}/\widehat{M}'_{11}$  je nutno středovat přes celý ozářený povrch multivrstvy, nebo ekvivalentně přes všechny konfigurace jejich rozhraní. V případě malých drsností jsou však v rozvoji

$$R' = \left\langle \frac{\widehat{M}'_{21}}{\widehat{M}'_{11}} \right\rangle = \frac{\langle \widehat{M}'_{21} \rangle}{\langle \widehat{M}'_{11} \rangle} \left( 1 + \frac{\langle (\Delta \widehat{M}'_{11})^2 \rangle}{\langle \widehat{M}'_{11} \rangle^2} - \frac{\langle \Delta \widehat{M}'_{11} \Delta \widehat{M}'_{21} \rangle}{\langle \widehat{M}'_{11} \rangle \langle \widehat{M}'_{21} \rangle} \cdots \right)$$

zanedbatelné členy, ve kterých vystupují  $\Delta \widehat{M}'_{11} = \widehat{M}'_{11} - \langle \widehat{M}'_{11} \rangle$  a  $\Delta \widehat{M}'_{21} = \widehat{M}'_{21} - \langle \widehat{M}'_{21} \rangle$  (viz. [Hol96]). Reflektivitu multivrstvy s drsnými rozhraními pak vypočítáme z podílu středních hodnot maticových elementů

$$\mathcal{R} \approx \left| \frac{\langle \widehat{M}'_{21} \rangle}{\langle \widehat{M}'_{11} \rangle} \right|^2.$$
(1.52)

Za předpokladu, že vých<br/>ylky rozhraní  $U_j(\mathbf{r}_{j\parallel})$   $U_l(\mathbf{r}_{l\parallel})$ jsou nekorelované pro<br/> všechna  $j, l \in (0, \cdots, N)$   $j \neq l$  můžeme provést středování reflexních matic odděleně

$$\widehat{\boldsymbol{M}}'(\boldsymbol{r}_{\parallel}) = \int_{-\infty}^{\infty} dU_0 \int_{-\infty}^{\infty} dU_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dU_N \ \widehat{\boldsymbol{B}}_0(U_0) w_0(U_0) \times$$

$$\times \prod_{j=1}^{N} (\widehat{\boldsymbol{\Phi}}_j \widehat{\boldsymbol{B}}_j(U_j) w_j(U_j)) = \langle \widehat{\boldsymbol{B}}_0(U_0) \rangle \prod_{j=1}^{N} (\widehat{\boldsymbol{\Phi}}_j \langle \widehat{\boldsymbol{B}}_j(U_j) \rangle).$$
(1.53)

Jak plyne z (1.51), ve středovaných reflexních maticích vystupují charakteristické funkce hustot pravděpodobnosti  $w_j(U_j)$ 

$$\langle \hat{B}'_{j}(U_{j}) \rangle = \begin{pmatrix} \chi_{j}(-[k^{(t)}_{j_{z}} - k^{(t)}_{j+1_{z}}]) & r_{j}\chi_{j}(-[k^{(t)}_{j_{z}} + k^{(t)}_{j+1_{z}}]) \\ r_{j}\chi_{j}([k^{(t)}_{j_{z}} + k^{(t)}_{j+1_{z}}]) & \chi_{j}([k^{(t)}_{j_{z}} - k^{(t)}_{j+1_{z}}]) \end{pmatrix}.$$
(1.54)

V případě Gaussovské funkce hustoty pravděpodobnosti dr<br/>snosti  $w_j(U_j)$  budou charakteristické funkce dány vztahem

$$\chi_j(-[k_{j_z}^{(t)} - k_{j+1_z}^{(t)}]) = \chi_j([k_{j_z}^{(t)} - k_{j+1_z}^{(t)}]) = e^{-\frac{(k_{j_z}^{(t)} - k_{j+1_z}^{(t)})^2 \sigma_j^2}{2}}$$
(1.55)

a reflexní matice upravíme do následujícího tvaru

$$\widehat{B}_{j}^{G}(U_{j}) = e^{-\frac{(k_{jz}^{(t)} + k_{j+1z}^{(t)})^{2}\sigma_{j}^{2}}{2}} \begin{pmatrix} 1 & r_{j}e^{-2k_{jz}^{(t)}k_{j+1z}^{(t)}\sigma_{j}^{2}} \\ r_{j}e^{-2k_{jz}^{(t)}k_{j+1z}^{(t)}\sigma_{j}^{2}} & 1 \end{pmatrix}.$$
(1.56)

Při výpočtu reflektivity podle (1.52) se zjevně členy před maticí vykrátí. Vidíme tedy, že reflektivita rozhraní při jeho nenulové drsnosti s rostoucí z-ovou složkou vlnového vektoru klesá více oproti reflektivitě dokonalého rozhraní.

Rekurentní formule bude mít v tomto případě podobný tvar jako v (1.28)

$$R_{j-1}^{\rm G} = \frac{E_{j-1}^{\rm (r)}}{E_{j-1}^{\rm (t)}} = \frac{r_{j-1}^{\rm G} + R_{j}^{\rm G} \exp\left(i \, 2k_{jz}^{\rm (t)} d_{j}\right)}{1 + R_{j}^{\rm G} r_{j-1}^{\rm G} \exp\left(i \, 2k_{jz}^{\rm (t)} d_{j}\right)},\tag{1.57}$$

kde $r_{j-1}^{\rm G}$ označuje reflektivitu (j-1)-ho rozhraní násobenou útlumovým faktorem

$$r_j^{\rm G} = r_j e^{-2k_{jz}^{\rm (t)}k_{j+1z}^{\rm (t)}\sigma j - 1:}.$$
(1.58)

Jak je patrné z rekurentní formule (1.57) a tvaru útlumového faktoru v (1.58) drsnost rozhraní multivrstvy snižuje její reflektivitu oproti multivrstvě s dokonalými rozhraními. Tento efekt se stává výraznější se zvětšující se komponentou vlnového vektoru  $k_{0_z}^{(t)}$ , tedy se zvětšujícím se úhlem dopadu záření  $\theta^{(i)}$ . To je důležité při použití multivrstev jako monochromátorů. Zde se využívá reflexe při nízkých úhlech dopadu záření a jsou-li drsnosti rozhraní  $\sigma_j$  dostatečně malé, je zmenšení reflektivity zanedbatelné. Při všech následujících simulacích v této práci uvedených byl výpočet reflektivity multivrstev prováděn podle vztahu (1.57). Reflektivitu multivrstvy budeme však dále označovat pouze  $\mathcal{R}(\theta)$ , popřípadě  $\mathcal{R}(\theta, \lambda)$ , budeme-li chtít zdůraznit závislost reflektivity na vlnové délce.

## Kapitola 2

# Výpočet detekovaného zářivého toku

V minulé kapitole byla shrnuta teorie reflexe rtg záření na periodických multivrstvách, které chceme využít k monochromatizaci rtg záření. Vždy jsme však uvažovali rovinnou monochromatickou vlnu dopadající na systém vrstev. Reálné zdroje rtg záření nám takovéto ideální experimentální podmínky neposkytují. Vychází z nich divergentní svazek, ve kterém se vyskytuje široké spektrum vlnových délek.

V této kapitole se postupně budeme zabývat jednotlivými částmi monochromatizačního uspořádání, charakteristikami svazku záření a jejich souvislostí s přímo měřenými veličinami. Nejdříve popíšeme vlastnosti záření vycházejícího z rtg lampy a mechanizmus jeho vzniku. V druhé podkapitole se pak budeme zabývat popisem šíření záření v soustavě ohniska rtg lampy, rovinných zrcadel a štěrbin. Ve třetí podkapitole dále uvedeme zjednodušené vztahy pro spektrální zářivost a ozáření, které budou základem pro výpočet měřeného zářivého toku. Ve čtvrté a páté podkapitole pak odvodíme vztahy pro zářivý tok detekovaný ve dvou základních experimentech, které budeme používat ke zkoumání vlastností svazku. Výpočty provedené pomocí odvozených vztahů pak budeme srovnávat v kapitole 5 s výsledky měření.

## 2.1. Zdroj rtg záření

Monochromatizační uspořádání, kterým se zde budeme zabývat, je určena pro monochromatizaci záření z elektronové rentgenky (viz. obr. 2.1.). Proto se zde krátce zmíníme o vlastnostech záření vycházejícího z tohoto zdroje a o mechanizmech jeho vzniku.

Elektrony v rtg lampě jsou emitované přímo žhavenou wolframovou katodou umístěnou uvnitř fokusačního válečku, na něž je přiveden záporný potenciál U, velikosti řádově desítek kV. Elektrony urychlované tímto potenciálem dopadají na uzemněný terčík antikatody. Zde vzniká rtg záření, které vychází z rentgenky přes berylliová okénka.

Skutečné ohnisko záření má přibližně tvar obdélníku o stranách a > b. Okénka jsou umístěna tak, aby úhel mezi osou vycházejícího svazku a povrchem terčíku byl přibližně  $\gamma \approx 6^{\circ}$ . Při průchodu záření jedním z okének je zdánlivá velikost ohniska ve směru svazku  $a/10 \times b$ , pak mluvíme o bodovém ohnisku. Při průchodu okénkem s osou kolmou na předešlé je zdánlivá velikost ohniska  $a \times b/10$ , jde o čarové ohnisko. Pro potřeby našich úvah v příští podkapitole nahradíme plochu skutečného ohniska jejím průmětem do roviny kolmé na osu vystupujícího svazku a střed této



Obrázek 2.1.: Vlevo: Schema rentgenky: A fokusační váleček, B žhavená wolframová katoda, C berylliová okénka, D přívod chladící vody, d velikost zdánlivého ohniska. Vpravo: Nákres k volbě efektivního ohniska: A první štěrbina před rentgenkou, B efektivní ohnisko, střední paprsek.

plochy ponecháme totožný se středem terčíku rentgenky (viz. obr. 2.1.). O takto vzniklé ploše se budeme zmiňovat jako o efektivním ohnisku.

Při dopadu na antikatodu se elektrony nepružně rozptylují na atomech a předávají kinetickou energii krystalové mřížce. Dochází tak ke vzniku brzdného záření se spojitým spektrem. Minimální vlnová délka brzdného záření, tzv. krátkovlnná hrana, je

$$\lambda_{min} = \frac{12.394}{U}$$
 [Å;  $kV$ ]. (2.1)

Teoretické vztahy pro průběh spektrální hustoty zářivého toku brzdného záření jsou komplikované [Blo57]. Proto se zde o nich nebudeme podrobně zmiňovat. Jen poznamenejme, že maximální spektrální hustotu zářivého toku přísluší složce spojitého spektra s vlnovou délkou přibližně 1.5  $\lambda_{min}$ 

Při interakci urychlených elektronů s atomy terčíku dochází také k ionizaci elektronů ze slupek s malým hlavním kvantovým číslem. Na tyto uvolněné hladiny pak přecházejí elektrony z vyšších slupek. V případě zářivých přechodů vzniká charakteristické záření s diskrétním spektrem. Jeho spektrální hustota zářivého toku je při optimálním urychlovacím napětí více než 100 krát větší než u spojitého záření. Označení charakteristické spektrální čáry sestává z písmene latinské abecedy  $K, L, M, \cdots$ , jednoho z prvních písmen řecké abecedy  $\alpha, \beta, \gamma$  a číselného indexu, odpovídajících kvantovým stavům, mezi kterými elektron emitující záření přechází (viz. [MH88]). Prakticky se nejvíce využívá záření čar serií K a L prvků s atomovými čísly 25 až 50. Serie K má přitom nejjednodušší strukturu s intenzivním dubletem  $K\alpha_1, K\alpha_2$  a čarou  $K\beta$ . Vlnové délky charakteristických spekter lze nalézt například v [cry74, Blo57, Bea67]. Pro ilustraci jsou v tab. 2.1. uvedeny vlnové délky a relativní intenzity čar serie K čtyř často používaných materiálů terčíku rtg lampy.

Prvek	at. číslo	$K\alpha_1$		$K\alpha_2$		$K\beta_2$	
		$\lambda$ [Å]	$I_{r1}$	$\lambda$ [Å]	$I_{r2}$	$\lambda$ [Å]	$I_{r3}$
Cr	24	2.293606	100	2.293606	51.5	2.08487	17.9
Co	27	1.788965	100	1.792850	49.7	1.62079	16.0
Cu	29	1.540562	100	1.544390	49.7	1.392218	20.0
Ag	47	0.559408	100	0.563798	49.9	0.497069	29.0

Tabulka 2.1.: Vlnové délky charakteristických čar vybraných prvků a jejich relativní intenzita (označena  $I_{rk}$ , kde k je číslo přiřazené spektrální čáře).

Z tabulky je patrné, že z hlediska intenzity je nejvýhodnější využít záření jedné z čar  $K\alpha$ , popřípadě obou dvou, jestliže to odpovídá experimentálním požadavkům na monochromatičnost svazku.

## 2.2. Zavedení přiblížení geometrické optiky

V této podkapitole se budeme zabývat průchodem záření soustavou štěrbin a rovinných zrcadel. Uvážíme konečné rozměry zdroje záření a důsledky divergence svazku z něho vycházejícího. Přitom použijeme přiblížení geometrické optiky [BW59] a zavedeme vhodnou soustavu souřadnic pro popis průchodu paprsku monochromatizační soustavou, tvořenou rovinnými zrcadly a štěrbinami. Všechny úvahy povedou k odvození vztahů pro spektrální zářivosti svazku vycházející z monochromatizační soustavou, které provedeme v podkapitole 2.3.

Nyní uvažme uspořádání sestávající z efektivního ohniska rentgenky (viz. podkapitola 2.1.) a soustavy obdélníkových štěrbin (clon) a rovinných periodických multivrstev. Ty budeme dále zkráceně označovat jako zrcadla, neboť uvažujeme pouze spekulární reflexi. S efektivním ohniskem spojme soustavu kartézských souřadnic  $\langle 0_f; \boldsymbol{x}_f, \boldsymbol{y}_f, \boldsymbol{z}_f \rangle$ , stejně jako na obr. 2.2.. Dále budeme předpokládat, že normály  $\boldsymbol{n}_i$  všech zrcadel  $i = 1 \dots m$  leží v rovině  $(0_f; \boldsymbol{x}_f, \boldsymbol{z}_f)$  a vertikální hrany štěrbin jsou rovnoběžné s osou  $\boldsymbol{y}_f$ . Definujme osu soustavy A, která je totožná s paprskem, který vychází ze středu efektivního ohniska rentgenky, prochází středem výstupní štěrbiny rentgenky a zrcadlově se odráží na všech rovinných zrcadlech soustavy. Plochy štěrbin považujme za kolmé na osu soustavy, jimi procházející. A zrcadla nechť svírají s osou soustavy úhly  $\omega_i$ .



Obrázek 2.2.: Schema uspořádání štěrbin a zrcadel a volba souřadnicových soustav V<sub>s</sub> spojených s body osy soustavy A. Označení: F efektivní ohnisko rentgenky, R paprsek vycházející z ohniska, S štěrbiny, M zrcadla. Vzdálenost roviny  $\sigma_{s_2}$  od efektivního ohniska je  $s_2 = L_1 + L_2 + L_3$ .

Nechť dále s označuje vzdálenost bodu  $P_s$ , ležícího na ose soustavy A, od středu ohniska  $0_f$ , měřenou podél osy soustavy A (viz. obr. 2.2.). S každým bodem  $P_s$  na ose soustavy nechť je spojena kartézská soustava souřadnic  $V_s = \langle P_s; \boldsymbol{x}_s, \boldsymbol{y}_s, \boldsymbol{z}_s \rangle$  s počátkem  $0_s$  v bodu  $P_s$ . Směr souřadnicových os je takový, že všechny osy  $\boldsymbol{y}_s$  jsou rovnoběžné s osou  $\boldsymbol{y}_f$  a osy  $\boldsymbol{x}_s$  a  $\boldsymbol{z}_s$  leží v rovině  $(0_f; \boldsymbol{x}_f, \boldsymbol{z}_f)$  (viz. obr. 2.2.),  $\boldsymbol{z}_s$  je přitom identická s osou soustavy procházející bodem

 $P_s$  (vyjma bodů dotyku os<br/>yAs povrchem zrcadla). Paprsek R (obr. 2.3. a) bude v soustavě<br/>  $\mathbf{V}_s$  popsán čtyřmi veličinami  $(\pmb{r}_s,\varphi_s,\chi_s)$ , kde vektorem<br/>  $\pmb{r}_s=(x_s,y_s)$  jsou souřadnice průmětu paprsku R do rovin<br/>y $\sigma_s=(P_s;\pmb{x}_s,\pmb{y}_s)$  a  $\varphi\in\left[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right]$ ,<br/>  $\chi\in\left[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\right]$  jsou směrové úhly paprsku. Pomocí nich zapíšeme směrový vektor paprsku Rv soustavě <br/>  $\mathbf{V}_s$ 

$$\boldsymbol{p}_s = (\sin\varphi_s \cos\chi_s, \,\sin\chi_s, \,\cos\varphi_s \cos\chi_s) \tag{2.2}$$

Pokud se budeme zabývat dvojicemi veličin  $r_s$  <br/>a  $p_s$  odděleně, budeme o $r_s$  mluvit jako o souřadnicích papr<br/>sku Rv soustavě V<sub>s</sub> a budeme mít na mysli průmět papr<br/>sku do roviny  $\sigma_s = (P_s; \boldsymbol{x}_s, \boldsymbol{y}_s)$ . Úhly<br/> ( $\varphi_s, \chi_s$ ) budeme nazývat směrovými úhly papr<br/>sku R. Při výpočtech se omezíme na paraxiální přiblížení. Experimentální uspořádání tyto podmínky dobře splňují omezením úhlů |  $\varphi_s$  |< 0.1° a<br/> |  $\chi$  |< 2°.



Obrázek 2.3.: a) K popisu paprsku R v soustavě souřadnic V<sub>s</sub>. b) K transformaci souřadnic a směrových úhlů při přechodu paprsku mezi rovinami  $\sigma_{s_n}$  a  $\sigma_{s_{n+1}}$ , jestliže nedojde k reflexi na zrcadle.

Nyní nalezneme funkční závislost mezi charakteristickými veličinami ( $\mathbf{r}_s, \varphi_s, \chi_s$ ) paprsku v soustavě V<sub>s</sub> a charakteristickými veličinami paprsku ( $\mathbf{r}_f, \varphi_f, \chi_f$ ) v soustavě ohniska V<sub>f</sub> a vzdáleností počátků soustav s. Neboli budeme hledat transformaci charakteristik paprsku

$$(\mathbf{r}_f, \varphi_f, \chi_f) \longrightarrow (\mathbf{r}_s, \varphi_s, \chi_s).$$
 (2.3)

Paprsek můžeme rozdělit rovinami  $\sigma_{s_n} = (P_{s_n}, \boldsymbol{x}_{s_n}, \boldsymbol{y}_{s_n}), \sigma_{s_{n+1}}, l = 1, 2...l - 1$ na úseky, na kterých nedojde k odrazu na zrcadle (obr. 2.3.b) a úseky, na kterých dojde k právě jednomu odrazu paprsku (obr. 2.5.). Odvození transformačních vztahů pro souřadnice a směrové úhly paprsku  $(\boldsymbol{r}_{s_n}, \varphi_{s_n}, \chi_{s_n}) \longrightarrow (\boldsymbol{r}_{s_{n+1}}, \varphi_{s_{n+1}}, \chi_{s_{n+1}})$ mezi soustavami V<sub>sn</sub> a V<sub>sn+1</sub> provedeme pro každý typ úseku odděleně. Výsledný transformační vztah (2.3) pak dostaneme složením transformací

$$(\mathbf{r}_{f}, \varphi_{f}, \chi_{f}) \longrightarrow (\mathbf{r}_{s_{1}}, \varphi_{s_{1}}, \chi_{s_{1}}) \longrightarrow (\mathbf{r}_{s_{2}}, \varphi_{s_{2}}, \chi_{s_{2}}) \longrightarrow \cdots$$

$$\cdots \longrightarrow (\mathbf{r}_{s_{l}}, \varphi_{s_{l}}, \chi_{s_{l}}) = (\mathbf{r}_{s}, \varphi_{s}, \chi_{s}).$$

$$(2.4)$$

#### Paprsek v úseku soustavy bez zrcadla

V prvním případě, když mezi rovinami  $\sigma_{s_n}$ ,  $\sigma_{s_{n+1}}$  nedochází k odrazu na zrcadle, je úsek paprsku přímkový. Směrové úhly paprsku jsou tedy v soustavách  $\mathbf{V}_{s_n}$  a  $\mathbf{V}_{s_{n+1}}$  stejné (obr. 2.3.b ), jedná se o transformaci identity

$$(\varphi_{s_n}, \chi_{s_n}) \longrightarrow (\varphi_{s_{n+1}}, \chi_{s_{n+1}}) = (\varphi_{s_n}, \chi_{s_n}).$$

$$(2.5)$$

#### 2.2.. ZAVEDENÍ PŘIBLÍŽENÍ GEOMETRICKÉ OPTIKY

Dále označme L vzdálenost rovin  $\sigma_{s_n} \sigma_{s_{n+1}}$ , tedy délku osy soustavy A mezi rovinami,  $L = |P_{s_{n+1}}P_{s_n}| = s_{n+1} - s_n$ . Paprsek vytkne mezi těmito rovinami úsečku  $K_{s_n}K_{s_{n+1}}$  délky  $\Delta s_p$ , jejíž koncové body mají v soustavě  $V_{s_n}$  souřadnice  $K_n = (\mathbf{r}_{s_n}, 0)$  a  $\{K_{n+1}\}_{s_n} = (\mathbf{r}_{s_{n+1}}, L)$  (viz. obr. 2.3.b ) a její směrový vektor je  $\mathbf{p}_{s_n}$  (viz. vztah (2.2)). Odtud plyne rovnost

$$(\mathbf{r}_{s_{n+1}} - \mathbf{r}_{s_n}, L) = \Delta s_p(\sin\varphi_{s_n}\cos\chi_{s_n}, \sin\chi_{s_n}, \cos\varphi_{s_n}\cos\chi_{s_n}).$$
(2.6)

Optickou dráhu paprsku mezi rovinam<br/>i $\sigma_{s_n}$  a  $\sigma_{s_{n+1}}$ vyjádříme z rovnosti třetích komponent vektorů v <br/> (2.6)

$$\Delta s_p = \frac{L}{\cos \varphi_{s_n} \cos \chi_{s_n}} \approx L. \tag{2.7}$$

Pro souřadnice paprsku v soustavě  $\mathbf{V}_{s_{n+1}}$  pak z (2.6) dostaneme transformační vztah

$$\boldsymbol{r}_{s_n} \longrightarrow (x_{s_{n+1}}, y_{s_{n+1}}) = (x_{s_n} + L \tan \varphi_{s_n}, y_{s_n} + \frac{\tan \chi_{s_n}}{\cos \varphi_{s_n}} L) \approx$$

$$\approx (x_{s_n} + L\varphi_{s_n}, x_2 + L\chi_{s_n}).$$
(2.8)

#### Paprsek v úseku soustavy se zrcadlem

Nyní uvažme případ, kdy mezi rovinami  $\sigma_{s_n}$  a  $\sigma_{s_{n+1}}$ , procházejícími body  $P_{s_n}$  a  $P_{s_{n+1}}$ , dojde k odrazu paprsku na jednom zrcadle (viz. obr. 2.5.). Jeho povrch nechť svírá s osou soustavy A úhel  $\omega_i$ . Označme bod dotyku osy soustavy A s povrchem zrcadla  $P_M$  a dále vzdálenosti bodů na ose soustavy |  $P_{s_n}P_M |= L_1 | P_{s_{n+1}}P_M |= L_2$ , pak je vzdálenost rovin  $L = L_1 + L_2 = s_{n+1} - s_n$ . S ohledem na znaménkovou konvenci úhlu  $\varphi_s$  musíme odlišit dvě různé orientace vnější normály povrchu zrcadla  $n_i$  ke kladné poloose  $\mathbf{x}_{s_n}$ . Bude-li skalární součin  $\mathbf{x}_{s_n}\mathbf{n}_i > 0$ , budeme mluvit o orientaci (+). Opačný případ budeme označovat orientací (-) (viz. obr. 2.4. a)).

Vnější jednotková normála zrcadla má ve vztažné soustavě  $V_{s_n}$  na obr. 2.4. a) směrové souřadnice

$$\boldsymbol{n}_i = (\pm \cos \omega_i, 0, -\sin \omega_i), \tag{2.9}$$

kde horní znaménko odpovídá orientaci (+) a dolní odpovídá orientaci zrcadla (-). Toto rozlišení budeme uplatňovat v textu i nadále.

Pro úhel $\theta_i,$ který svírá paprsek $p_{s_n}$ s povrchem multiv<br/>rstvy (viz. obr. 2.4.b ) pak dostáváme s pomocí (2.2),<br/>(2.9)

$$-\cos(\frac{\pi}{2} - \theta_i) = \cos\chi_{s_n}(\pm\sin\varphi_{s_n}\cos\omega_i - \cos\varphi_{s_n}\sin\omega_i)$$
(2.10)

$$\sin \theta_i = \cos \chi_{s_n} \sin(\omega_i \mp \varphi_{s_n}) \tag{2.11}$$

$$\theta_i \approx \omega_i \mp \varphi_{s_n}.$$
(2.12)

Ve vztahu (2.12) jsme využili paraxiálního přiblížení a toho, že úhel  $\omega_i$  bude vždy menší než 1°. Horní znaménko platí opět pro orientaci zrcadla (+) a dolní pro orientaci (-).

Směrový vektor paprsku po reflexi na zrcadle v soustavě  $V_{s_n}$  vyjádříme s pomocí (2.2),(2.9)

$$\{\boldsymbol{p}_{s_{n+1}}\}_{s_n} = \boldsymbol{p}_{s_n} - 2(\boldsymbol{p}_{s_n}\boldsymbol{n}_i)\boldsymbol{n}_i =$$

$$(\cos\chi_{s_n}[\sin\varphi_{s_n} \pm 2\sin(\omega_i \mp \varphi_{s_n})\cos\omega_i], \sin\chi_{s_n},$$

$$\cos\chi_{s_n}[\cos\varphi_{s_n} \mp 2\sin(\omega_i \mp \varphi_{s_n})\sin\omega_i])$$

$$(2.13)$$

Směry souřadnicových os soustav V<sub>sn</sub> přejdou ve směry souřadnicových os soustavy V<sub>sn+1</sub> po rotaci o úhel ±2 $\omega$  kolem osy  $\boldsymbol{y}_{s_n}$ . Transformaci komponent řádkového směrového vektoru { $\boldsymbol{p}_{s_{n+1}}$ }<sub>sn</sub> (2.13) ze soustavy V<sub>sn</sub> do soustavy V<sub>sn+1</sub> zprostředkovává matice rotace

$$\widehat{\boldsymbol{R}}_{\pm 2\omega_i} = \begin{pmatrix} \cos(2\omega_i) & 0 & \pm \sin(2\omega_i) \\ 0 & 1 & 0 \\ \mp \sin(2\omega_i) & 0 & \cos(2\omega_i) \end{pmatrix}.$$
(2.14)

Takže pro komponenty směrového vektoru paprsku v soustavě  $\mathbf{V}_{s_{n+1}}$ dostaneme, použitím (2.13) a (2.14),

$$\boldsymbol{p}_{s_{n+1}} = \{\boldsymbol{p}_{s_{n+1}}\}_{s_n} \widehat{\boldsymbol{R}}_{\pm 2\omega} = (-\sin(\varphi_{s_n})\cos(\chi_{s_n}), \sin(\chi_{s_n}), \cos(\varphi_{s_n})\cos(\chi_{s_n})).$$
(2.15)

Ze srovnání vztahů (2.15) a (2.2) vyplývá, že po reflexi se změní orientace směrového úhlu  $\varphi_s$  vzhledem k ose soustavy A. Směrové úhly paprsku se tedy při odrazu na zrcadle transformují podle vztahu

$$(\varphi_{s_n}, \chi_{s_n}) \longrightarrow (\varphi_{s_{n+1}}, \chi_{s_{n+1}}) = (-\varphi_{s_n}, \chi_{s_n}).$$

$$(2.16)$$

Tento výsledek je zřejmý i bez výpočtu z obr. 2.4. b.



Obrázek 2.4.: a) Dvě orientace vnější normály zrcadla vzhledem ke kladnému směru osy  $x_{s_n}$ . b) K transformaci směrových úhlů při odrazu paprsku na zrcadle.

Dále odvodíme vztah pro souřadnice paprsku v rovině  $\sigma_{s_{n+1}}$  v souřadnicové soustavě  $V_{s_{n+1}}$  po reflexi paprsku na zrcadle. Nechť rovina  $\sigma'_{s_{n+1}}$  a rovina  $\sigma_{s_{n+1}}$ , bod  $P'_{s_{n+1}}$  a bod  $P_{s_{n+1}}$ , bod  $K'_{s_{n+1}}$  a  $K_{s_{n+1}}$  a konečně souřadnicová soustava  $V'_{s_{n+1}} = \langle P'_{s_{n+1}}; x'_{s_{n+1}}, y'_{s_{n+1}}, z'_{s_{n+1}} \rangle$  a soustava  $V_{s_{n+1}}$  jsou objekty sdružené vzhledem ke geometrické transformaci zrcadlení podle roviny  $\mu_M$  totožné s rovinou povrchu zrcadla (viz. obr. 2.5.). Bodem  $K_{s_{n+1}}$  jsme zde opět označili průsečík paprsku R s rovinou  $\sigma_{s_{n+1}}$ . Označme dále R' virtuální paprsek, který je prodloužením paprsku R ve směru  $p_{s_n}$  pod rovinu zrcadla. Z geometrie odrazu paprsku na rovinném zrcadle plyne, že bod  $K'_{s_{n+1}}$  je průsečíkem virtuálního paprsku R' s rovinou  $\sigma'_{s_{n+1}}$ . A dále platí pro souřadnice bodu  $K_{s_{n+1}}$  v souřadnicové soustavě  $V_{s_{n+1}}$ 

$$\mathbf{r}_{s_{n+1}} = \mathbf{r}_{s_{n+1}}',\tag{2.17}$$

kde jsme označili  $\mathbf{r}'_{s_{n+1}}$  souřadnice bodu  $K'_{s_{n+1}}$  v soustavě  $V'_{s_{n+1}}$ . Virtuální paprsek R' mezi rovinami  $\sigma_{s_n}$  a  $\sigma_{s_{n+1}}$  tvoří úsečku délky |  $K_{s_n}K_{s_{n+1}}$  |= L. Vztah pro souřadnice bodu  $K'_{s_{n+1}}$  tedy odvodíme stejně jako u nereflektovaného paprsku v minulém odstavci vztah (2.8). Musíme si však uvědomit, že bázový vektor  $\mathbf{x}'_{s_{n+1}}$  souřadnicové soustavy  $V'_{s_{n+1}}$  má opačnou orientaci jak bázový vektor  $\mathbf{x}_{s_n}$ . Z (2.17) a (2.8) pak dostáváme transformační vztah pro souřadnice paprsku v rovině  $\sigma_{s_{n+1}}$  pro případ, že mezi rovinami  $\sigma_{s_n}$ ,  $\sigma_{s_{n+1}}$  dojde k jedné reflexi na zrcadle

$$\boldsymbol{r}_{s_n} \longrightarrow (x_{s_{n+1}}, y_{s_{n+1}}) = (-x_{s_n} - L \tan \varphi_{s_n}, y_{s_n} + \frac{\tan \chi_{s_n}}{\cos \varphi_{s_n}} L)$$

$$\approx (-x_{s_n} - L \varphi_{s_n}, y_{s_n} + L \chi_{s_n}).$$
(2.18)

Optická dráha, kterou urazil paprsek, je zřejmě opět dána vztahem (2.7).



Obrázek 2.5.: Geometrická konstrukce pro odvození transformace polohových souřadnic paprsku při přechodu z roviny  $\sigma_{s_n}$  do roviny  $\sigma_{s_{n+1}}$  po reflexi na zrcadle.

#### Souřadnice paprsku v rovině $\sigma_s$ po odrazu na m zrcadlech

Konečně můžeme uvést vztah svazující souřadnice a směrové vektory paprsku v soustavě  $V_s$  s počátečními souřdnicemi  $r_f$  a směrovými úhly paprsku v soustavě ohniska  $\varphi_f, \chi_f$ . Složením transformačních vztahů (2.8) a (2.18) podle (2.4) dostáváme pro souřadnice paprsku

$$(x_f, y_f) \longrightarrow \mathbf{r} = (x, y) \approx ((-1)^m (x_f + s\varphi_f), y_f + s\chi_f), \qquad (2.19)$$

kdemoznačuje počet zrcadel, na kterých se paprsek odrazil. Dále podle (2.16), (2.5) jsou směrové úhly paprsku v soustavě  $\mathbf{V}_s$ 

$$(\varphi_f, \chi_f) \longrightarrow (\varphi_s, \chi_s) = ((-1)^m \varphi_f, \chi_f). \tag{2.20}$$

Úhel  $\theta_i$ , pod kterým dopadá paprsek na rovinu prvního zrcadla za rovinou  $\sigma_s$  je dán vztahem (2.12). Tento úhel je třeba znát pro výpočet reflektivity pro paprsek. Konečně optická dráha paprsku je v paraxiálním přiblížení dána vztahem (2.7). Je tedy přibližně rovna vzdálenosti roviny  $\sigma_s$  od roviny povrchu efektivního ohniska, měřené podél osy soustavy A.

Tím můžeme uzavřít analýzu zobrazení a přejít k výpočtu prostorového a úhlového rozložení záření po výstupu z monochromatizační soustavy.

### 2.3. Veličiny charakterizující vlastnosti zdroje a svazku záření

V této podkapitole odvodíme vztahy pro výpočet spektrální zářivosti vycházející z monochromatizační soustavy a ozáření plochy za soustavou. Přitom použijeme přiblížení paprskové optiky zavedené v podkapitole 2.2.. Tak získáme prostředek pro kvantitativní popis vlastností monochromatizovaného svazku a pro modelování vlivu různých parametrů uspořádání na měřenou spektrální hustotu zářivého toku a prostorové rozložení zářivého toku, jejichž výpočet provedeme v podkapitolách 2.4. a 2.5..

Nejdříve zde uvedeme význam veličin použitých k popisu toku energie optickou soustavou.

**Ozáření.** Nechť  $\delta P$  je zářivý tok záření v intervalu vlnových délek  $[\lambda, \lambda + \delta \lambda]$ , které dopadá na infinitezimální plošku  $\delta S$  v okolí bodu (x, y) v rovině detekce záření. Ozářením  $\psi_{\lambda}$  budeme

dále rozumět tento zářivý tok vztažený na jednotkovou plochu a vlnovou délku [HK66]

$$\psi_{\lambda}(\lambda, x, y) = \frac{\delta P}{\delta S \delta \lambda} \quad [W, m^{-2}, m^{-1}].$$
 (2.21)

**Spektrální zářivost.** Nechť  $\delta P$  je energie záření v intervalu vlnových délek  $[\lambda, \lambda + \delta\lambda]$ , která je vyzářena soustavou do infinitezimálního prostorového úhlu  $\delta\Omega$  v okolí směru určeného úhly  $(\varphi, \chi)$  za jednotku času. Spektrální <sup>1</sup> zářivost [BRV80] <sup>2</sup> je tato energie vztažená na jednotku vlnové délky a jednotku prostorového úhlu

$$I_{\lambda}(\lambda,\varphi,\chi) = \frac{\delta P}{\delta\Omega\delta\lambda} \quad [W, sr^{-1}, m^{-1}].$$
(2.22)

**Spektrální**<sup>1</sup> **zář**<sup>3</sup> je energie vyzářená efektivním ohniskem do úhlového okolí směru ( $\varphi, \chi$ ) z plochy  $\delta S_f$  v okolí bodu ( $x_f, y_f$ ) za jednotku času v infinitezimálním intervalu vlnových délek, vztažená na jednotkové intervaly. Pomocí výše vymezených veličin ji zapíšeme

$$L_{\lambda}(\lambda,\varphi,\chi,x_f,y_f) = \frac{\delta P}{\delta\Omega\delta\lambda\delta S_f} \quad [W, sr^{-1}, m^{-1}, m^{-2}].$$
(2.23)

Ve vztazích pro ozáření a spektrální zářivost bude vystupovat funkce štěrbiny  $S_i(x_i, y_i)$ , kterou definujeme pomocí funkcí H a V takto:

$$S_i(x_i, y_i) = H_i(x_i)V_i(y_i)$$

$$(2.24)$$

$$H_i(x_i) = \begin{cases} 1, & |x_i - X_i| < d_i/2 \\ 0, & |x_i - X_i| \ge d_i/2 \end{cases}$$
(2.25)

$$V_i(y_i) = \begin{cases} 1, & |y_i - Y_i| < v_i/2 \\ 0, & |y_i - Y_i| \ge v_i/2 \end{cases}.$$
 (2.26)

Zde  $v_i$ , resp.  $d_i$ , označují výšku (rozměr ve směru osy  $y_f$ ), resp. šířku (rozměr ve směru osy  $x_{s_i}$ ), obdélníkové štěrbiny a  $(X_i, Y_i)$  je vektor posunutí středu štěrbiny z osy zobrazení v soustavě  $V_{s_i}$ . Souřadnice bodu průsečíku paprsku s rovinou štěrbiny  $(x_i, y_i)$  je přitom funkcí jeho výchozího bodu na povrchu efektivního ohniska  $(x_f, y_f)$ , směrových úhlů paprsku  $(\varphi, \chi)$ , vzdálenosti štěrbiny od ohniska  $s_i$  a počtu m předešlých reflexí na zrcadlech (viz. (2.19)). Dále však budeme pro jednoduchost používat zápis uvedený v (2.24) až (2.26).

Paprsky s různými vlnovými vektory (co do směru i velikosti) budeme považovat za úplně nekoherentní. Spektrální zářivost monochromatizační soustavy pak vypočítáme jako

$$I_{\lambda}(\lambda,\varphi,\chi) = e^{-\alpha s} \int_{-d_f/2}^{d_f/2} dx_f \int_{-v_f/2}^{v_f/2} dy_f L_{\lambda}(x_f, y_f, \lambda_f, \varphi_f, \chi) \times$$

$$\mathcal{R}_1(\theta_1, \lambda) \cdots \mathcal{R}_m S_1(x_1, y_1) \cdots S_n(x_n, y_n),$$
(2.27)

kde  $\mathcal{R}_i(\theta_1, \lambda)$  označuje reflektivitu *i*-té multivrstvy (1.52) a  $S_k(x_k, y_k)$  jsou funkce štěrbin (2.24). Směrové úhly ( $\varphi, \chi$ ) jsou se směrovými úhly paprsků vystupujících z ohniska svázány vztahy (2.20). Úhel dopadu paprsku na multivrstvu  $\theta_i$  je funkcí počtu předešlých reflexí a směrových úhlů paprsku

26

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Přívlastku spektrální bylo použito pro zdůraznění závislosti na vlnové délce jako je tomu například u veličiny spektrální hustoty zářivého toku[BRV80].

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Zářivost se běžně spojuje se zářením primárním či sekundárním zdrojem záření a nikoliv s úhlovým rozložením toku energie po průchodu optickou soustavou. Výstižnější v tomto ohledu je pravděpodobně termín použitý v [BW59] photometric intensity in the direction ( $\varphi, \chi$ ).

 $<sup>^{3}\</sup>mathrm{V}$ anglosaské literatuře týkající se zdrojů r<br/>tg záření, a především synchrotronů, je zář označována termínem brilliance.

 $(\varphi_f, \chi_f)$  danou vztahy (2.20) a (2.12). Úhly  $\omega$  a  $\varphi_f$  jsou malé a závislost reflektivity na výchylce  $\chi_f$  lze při konkrétních výpočtech zanedbat. Ve vztahu (2.27) je  $\alpha$  koeficient absorpce vzduchu.

Jak již bylo řečeno intervaly úhlů  $\varphi_f$  a  $\chi_f$ , pod nimiž vstupují paprsky z rentgenky do soustavy, budou malé. Proto budeme dále předpokládat, že spektrální zář je na těchto úhlech nezávislá. Navíc budeme pro jednoduchost výpočtů předpokládat o záři ohniska, že je ve všech bodech povrchu ohniska stejná. Nechť má dále efektivní ohnisko tvar obdélníku se stranami o šířce  $d_f$  (strana rovnoběžná s osou  $\boldsymbol{x}$ ) a výšce  $v_f$ . Záři ohniska pak můžeme zapsat jako součin spektrální hustoty zářivého toku  $\varrho(\lambda)$ , funkce štěrbiny (2.24) s X = Y = 0 mm a konstanty úměrnosti L

$$L_{\lambda}(x_f, y_f, \lambda) = L\varrho(\lambda)H_f(x_f)V_f(y_f)$$
(2.28)

Díky těmto zjednodušujícím předpokladům můžeme převést spektrální zářivost, danou vztahem (2.27), na součin dvou integrálů podle souřadnic ohniska

$$I_{\lambda}(\lambda,\varphi,\chi) = \Phi_{\lambda}(\varphi,\lambda)\Xi(\chi)$$

$$(2.29)$$

$$v_{f/2}$$

$$\Xi(\chi) = L \int_{-v_f/2}^{\infty} dy_f V_f(y_f) V_1(y_1) \cdots V_n(y_n)$$
(2.30)

$$\Phi_{\lambda}(\varphi,\lambda) = e^{-\alpha s} \varrho(\lambda) \mathcal{R}_{1}(\theta_{1},\lambda) \cdots \mathcal{R}_{m}(\theta_{m},\lambda) \times$$

$$\int_{-d_{f}/2}^{d_{f}/2} dx_{f} H_{f}(x_{f}) H_{1}(x_{1}) \cdots H_{n}(x_{n}).$$
(2.31)

Funkce  $\Phi(\varphi, \lambda)$  popisuje divergenci svazku v rovině reflexních úhlů. V rtg literatuře je nazývána horizontální divergencí [Kub91]. Díky přítomnosti multivrstev je závislá i na vlnové délce. Funkce  $\Xi(\chi)$  popisuje vertikální divergenci svazku. Horizontální  $\delta'_h$ , resp. vertikální  $\delta'_v$ , divergencí svazku budeme rozumět úhel, který svírají okrajové paprsky svazku v rovině  $(P_s; \boldsymbol{x}_s, \boldsymbol{z}_s)$ , resp.  $(P_s; \boldsymbol{y}_s, \boldsymbol{z}_s)$ 

Za stejných předpokladů vypočítáme ozáření v bodě  $\mathbf{r}_d = (x_d, y_d)$ jako

$$\psi(x_d, y_d) = \Psi_x(x_d)\Psi_y(y_d) \tag{2.32}$$

$$\Psi_{y}(y_{d}) = L \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\chi_{f} \int_{-v_{f}/2}^{v_{f}/2} dy_{f} V_{f}(y_{f})$$

$$(2.33)$$

$$\Psi_{x}(x_{d}) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi_{f} \int_{-d_{f}/2}^{d_{f}/2} dx_{f} H_{f}(x_{f})H_{1}(x_{1})\cdots H_{n}(x_{n}) \times$$

$$\delta(x_{d} - x(x_{f},\varphi_{f})) \int_{0}^{\infty} d\lambda \ e^{-\alpha s} \varrho(\lambda) \mathcal{R}_{1}(\theta_{1},\lambda) \cdots \mathcal{R}_{m}(\theta_{m},\lambda).$$
(2.34)

Vztahy (2.32), (2.33) a (2.34) tvoří základ pro výpočet toku zářivé energie detektorem ve dvou základních experimentálních uspořádáních, které uvedeme v následujících podkapitolách 2.4. a 2.5..

#### Svazek omezený jedinou štěrbinou

Na tomto místě uvedeme příklad, který je právě tak triviální, že lze jeho výsledky s úspěchem uplatnit při justování monochromatizační aparatury. Mějme obdélníkové ohnisko o délkách stran

 $\Delta x = d_f$  a  $\Delta y = v_f$ . Toto ohnisko nechť má ve všech bodech povrchu stejnou spektrální zář. Před ohniskem nechť je umístěna jediná štěrbina šířky  $d_1$  ve vzdálenosti  $s_1$ . Zabývejme se jen funkcí rozložením zářivosti  $\Phi(\varphi)$  v rovině  $(0_f; \boldsymbol{x}_f, \boldsymbol{z}_f)$  za štěrbinou.

Z $\left( 2.31\right)$ dostáváme

$$\Phi(\varphi) = \begin{cases}
0, & \varphi < -\varphi_{max}, & \varphi > \varphi_{max} \\
C(\varphi_{max} + \varphi)s_1, & -\varphi_{max} < \varphi < -\varphi_p \\
CD, & -\varphi_p < \varphi < \varphi_p \\
C(\varphi_{max} - \varphi)s_1, & \varphi_p < \varphi < \varphi_{max}
\end{cases},$$
(2.35)

kde jsme označili

$$\varphi_{max} = \frac{d_f + d_1}{2s_1} \quad \varphi_p = \left| \frac{d_f - d_1}{2s_1} \right| \quad D = \min(d_f, d_1).$$
$$C = e^{-\alpha s_1} L \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \ \varrho(\lambda).$$

Grafem (2.35) je charakteristická lichoběžníková funkce s FWHM = ( $\varphi_{max} + \varphi_p$ ). Divergence svazku je  $2\varphi_{max}$  a zmenšuje se při konstantní šířce štěrbiny s její vzdáleností. Na druhé straně se však, díky absorpci, zmenšuje hodnota konstanty úměrnosti C v (2.35). Divergenci svazku můžeme také snižovat zmenšováním šířky štěrbiny. Tím se však samozřejmě sníží celkový tok zářivé energie, která projde štěrbinou.



Obrázek 2.6.: K divergenci svazku kolimovaného v horizonatálním směru jednou štěrbinou. Označení:  $\delta'$  divergence svazku, w výška ozářené plochy na pavrchu multivrstvy.

Při justování se pak často potýkáme s problémem omezení šířky svazku multivrstvami (svazek multivrstvy "obtéká"), čemuž je třeba zamezit. Proto nyní vypočteme délku průsečíku w ozářené plochy zrcadla s rovinou reflexí  $(0_f; \boldsymbol{x}_f, \boldsymbol{z}_f)$  (viz. obr. 2.6.). Přitom uvažujme stejné uspořádání jako v předešlém případě a zrcadlo, které je umístěno ve vzdálenosti  $s_2$  od ohniska. Za podmínky  $x_f < \omega s_2$  pak dostáváme pro délku ozářené plochy

$$w = \frac{2s_2\varphi_{max} - d_f}{\omega}.$$
(2.36)

Výška ozářené plochy w by neměla přesáhnout velikost zrcadla. Jinak řečeno, průmět multivrtsvy do roviny kolmé na osu svazku by měl být větší jako šířka svazku. Splnit tento požadavek je často velice problematické, neboť svazek dopadá v monochromátorech na multivrstvy pod malými úhly  $\omega \approx 1^{\circ}$ . Tedy rozměr průmětu zrcadla do roviny kolmé na svazek je přibližně  $0.02 \times$  rozměr zrcadla podél svazku. Aby nebylo nutno k omezení šířky svazku užít příliš úzké štěrbiny je třeba umístit zrcadlo co nejblíže štěrbiny. To vyplývá jak z obr. 2.6., tak ze vztahu (2.36).

 $\mathbf{a}$
## 2.4. Prostorové rozložení zářivého toku

V této podkapitole odvodíme vztah pro výpočet měřeného rozložení zářivého toku svazku  $I_m(X_d)$ podél osy  $\mathbf{x}_d$  (viz. obr. 2.8.), která je kolmá na osu soustavy A a leží v rovině normál multivrstev (stále tedy používáme označení a orientace souřadnicových os podle obr. 2.2.). Budeme přitom předpokládat, že zářivý tok je detekován pomocí detektoru se štěrbinou málé šířky  $d_d$  se středem v bodě  $X_d$ . Dále budeme předpokládat, že výška štěrbiny  $v_d$  ve směru osy  $y_d$  je větší než výška svazku v rovině clony detektoru  $\sigma_d(0_d; \mathbf{x}_d, \mathbf{y}_d)$ , která se nachází ve vzdálenosti  $s_d$  od efektivního ohniska.

S použitím faktorizovaného ozáření (2.32) vypočteme detekovaný zářivý tok jako

$$I_m(X_d) = \int_{-v_d/2}^{v_d/2} dy_d \,\Psi_y(y_d) \,\int_{-v_d/2}^{v_d/2} dx_d \,\Psi_x(x_d).$$
(2.37)

Výsledek prvého integrálu je z hlediska měření pouhá instrumentální konstanta, která závisí na geometrii soustavy ve směru osy  $y_f$  (výškách a posunutí clon) a na napětí a proudu na rentgence. Dále budeme předpokládat, že se koeficient absorpce záření  $\alpha$  v sledovaném oboru vlnových délek mění zanedbatelně a příslušný faktor vytkneme před integrály v  $\Psi_x(x_d)$ . Zaveď me tedy konstantu

$$I_0 = e^{-\alpha s} \int_{-v_d/2}^{v_d/2} dy_d \, \Psi_y(y_d)$$

Spektrální hustotu zářivého toku rentgenky  $\rho(\lambda)$  dále rozložíme na součet příspěvku od spojitého spektra  $\rho_c(\lambda)$  a příspěvků jednotlivých spektrálních čar  $\rho'_i(\lambda)$ 

$$\varrho(\lambda) = \varrho_c(\lambda) + \sum_i \varrho'_i(\lambda).$$
(2.38)

Profil charakteristických spektrálních čar uvážíme Lorenzovský

$$\rho_i'(\lambda) = \frac{H_i}{1 + ((\lambda - \lambda_i)/w_i)^2}.$$
(2.39)

Při výpočtu zářivého toku detektorem zanedbáme příspěvky spojitého spektra. Nyní můžeme v  $\Psi_x(x_d)$  (2.34) provést jednoduše integraci přes vlnové délky. Přitom dále zanedbáme změnu reflektivit  $\mathcal{R}_m(\theta_m, \lambda)$  v rámci šířky jedné spektrální čáry. Dostáváme pak

$$G_{1}(\varphi_{f}) = \int_{0}^{\infty} d\lambda \,\mathcal{R}_{1}(\theta_{1},\lambda)\cdots\mathcal{R}_{m}(\theta_{m},\lambda)\varrho(\lambda) \approx \\ \approx \pi \sum_{i} w_{i} \,\mathcal{R}_{1}(\theta_{1},\lambda_{i})\cdots\mathcal{R}(\theta_{m},\lambda_{i}).$$
(2.40)

Dále ve vztahu (2.37) provedeme integraci podle souřadnice detektoru  $x_d$ . Přitom využijeme vztahů (2.19), (2.34) a (2.25). Pro zářivý tok detektorem pak dostáváme

$$I_m(X_d) = I_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi_f \ D(\varphi_f) \ G_1(\varphi_f),$$
(2.41)

kde  $D(\varphi_f)$  je délka úsečky vzniklé průnikem plochy zdánlivého ohniska a průmětů ploch otvorů všech štěrbin S<sub>1</sub> až S<sub>d</sub> na souřadnicovou osu  $\mathbf{x}_f$  podél paprsků, které mají počáteční směrové úhly

 $(\varphi_f, 0)$ 

$$D(\varphi_f) = \begin{cases} (x'_{f \max} - x'_{f \min}) & , x'_{f \max} > x'_{f \min} \\ 0 & , x'_{f \max} < x'_{f \min} \end{cases}$$
(2.42)

$$x'_{f max} = \min(\frac{d_f}{2}, (-1)^{m_1} X_1 - s_1 \varphi_f + \frac{d_1}{2}, \dots, (2.43))$$
$$\dots, (-1)^{m_d} X_d - s_d \varphi_f + \frac{d_d}{2})$$

$$x'_{f\ min} = \max(\frac{-d_f}{2}, (-1)^{m_1} X_1 - s_1 \varphi_f - \frac{d_1}{2}, \dots, (2.44)$$
$$\dots, (-1)^{m_d} X_d - s_d \varphi_f - \frac{d_d}{2}).$$

Veličiny  $m_i$  ve vztazích (2.43), (2.44) označují počet reflexí svazku na zrcadlech před průchodem *i*-tou štěrbinou.

V krátkosti analyzujme výsledek výpočtu. Čím bude štěrbina detektoru úžší, tím více se bude měřená závislost  $I_m(X_d)$  blížit rozložení části funkce ozáření  $\Psi_x(X_d)$  násobené multiplikativní konstantou. Navíc s rostoucí vzdáleností štěrbiny detektoru od ohniska  $s_d$  se zmenšuje šířka maxima  $D(\varphi_f)$  v okolí  $\varphi'_f = (-1)^{m_d} X_d/s_d$ . Pro  $d_f, d_d \ll s_d$  pak měříme úhlové rozložení zářivé energie neboli zářivost soustavy

$$I_m(X_d) \approx I_0 \int_0^\infty d\lambda \, \Phi_\lambda(\lambda, \varphi'_f).$$

Při výpočtech  $I_m(X_d)$ , které budeme srovnávat s experimentálně naměřenými daty, podle (2.41) již vystačíme s jednoduchou numerickou integrací podle směrového úhlu  $\varphi_f$  (napříkald složenou Simpsonovou metodou).



Obrázek 2.7.: Schema experimentálního uspořádání pro měření prostorového rozložení zářivého toku detektorem D s úzkou štěrbinou  $S_d$ .

## 2.5. Spektrální hustota zářivého toku

Pro posouzení monochromatizačního účinku experimentálního uspořádání je třeba měřit spektrální hustotu zářivého toku ve svazku  $\rho(\lambda)$ . Jednoduchý spektrometr pro rtg záření získáme, necháme-li svazek dostatečně malé divergence dopadat na krystal a měříme závislost difraktovaného zářivého toku  $I_m(\omega_c)$  na úhlu  $\omega_c$ , který svírají difraktující krystalografické roviny s osou svazku A (viz. obr. 2.8.). V této podkapitole odvodíme vztah pro měřenou závislost  $I_m(\omega_c)$ . Konečný vztah pak použijeme v kapitole 5 ve výpočtech, jejichž výsledky porovnáme s experimentem.

Nechť svazek záření prošlý, dříve uvažovanou soustavou rovinných zrcadel a štěrbin (obr. 2.2.) dopadá na krystal, jehož normála povrchu a normála k difraktujícím rovinám leží přibližně v rovině

30



Obrázek 2.8.: Schema uspořádání pro měření spektrální hustoty záření ve svazku pomocí krystalu C, jehož difrakční roviny svírají úhel  $\omega_c$  s osou soustavy A.

reflexí na zrcadlech  $(0_f; \mathbf{x}_f, \mathbf{z}_f)$ . Budeme uvažovat případ, kdy veškeré záření difraktované krystalem je detekováno detektorem. To lze realizovat, jestliže má detektor dostatečně velký vstupní otvor a mezi něj a krystal již nevkládáme žádnou štěrbinu. Za těchto předpokladů je detekovaný zářivý tok vyjádřen pomocí spektrální zářivosti (2.29) vztahem

$$I_m(\omega_c) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\chi_f \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi_f \int_{0}^{\infty} d\lambda \,\Xi(\chi) \Phi_\lambda(\varphi, \lambda) \mathcal{R}_c(\lambda, \theta_f, \chi_f),$$
(2.45)

kde  $\mathcal{R}_c$  je reflexní mohutnost krystalu v dvouvlnné aproximaci [Hol96, Kub91, VPL92]. Nyní zavedeme sérii aproximací, které povedou k zjednodušení vztahu (2.45) a k urychlení numerických výpočtů.

Předně zanedbáme vliv vertikální divergence na reflexní mohutnost krystalu, tedy  $\mathcal{R}_c$  nebude záviset na směrovém úhlu paprsků  $\chi_f$ . Vertikální divergence svazku způsobí rozšíření difrakčních křivek krystalu [Kub91], neboť se mění úhel dopadu svazku na difrakční rovinu přibližně podle vztahu (2.11) (navíc je třeba zahrnout efekt lomu záření na povrchu krystalu). Dále approximujeme difrakční mohutnost krystalu Lorenzovou křivkou s vhodnou pološířkou u v oboru vlnových délek

$$\mathcal{R}(\lambda, \theta_c) = \frac{R_0}{1 + ((\lambda - \lambda_c)/u)^2},$$
(2.46)

kde $\theta_c=\omega_c-(-1)^{m_c}\varphi_f$ je úhel, který svírá dopadající paprsek s difraktujícími rovinami (viz. (2.20), (2.11)) a

$$\lambda_c = 2D\sin\theta_c \tag{2.47}$$

je vlnová délka splňující Braggovu difrakční podmínku pro záření, které dopadá pod úhlem  $\theta_c$  na systém difraktujících krystalografických rovin, s mezirovinnou vzdáleností D.

Nyní provedeme integraci součinu části faktorizované spektrální zářivosti  $\Phi_{\lambda}(\varphi, \lambda)$  a reflexní mohutnosti krystalu  $\mathcal{R}(\lambda, \theta_c)$  v (2.45) podle vlnové délky  $\lambda$  při konstantním úhlu dopadu paprsku na krystal  $\theta_c$ . Přitom budeme opět předpokládat, že v intervalu vlnových délek v okolí maxima součinu funkcí  $\mathcal{R}_c(\lambda, \theta_c)\varrho(\lambda)$ , kde funkční hodnota integrandu významně přispívá k výsledné hodnotě integrálu, je změna reflektivit multivrstev  $\mathcal{R}_i(\lambda, \theta_i)$  malá.Součin reflektivit multivrstev budeme tedy považovat za konstantní a vytkneme jej před integrál. O spektrální hustotě zářivého toku spojitého záření  $\varrho_c(\lambda)$  (viz. (2.38)) budeme taktéž předpokládat, že je pomalu se měnící funkcí vlnové délky a můžeme ji vytknout před integrál. Dále zanedbáme závislost koeficientu absorpce záření  $\alpha$  na vlnové délce. Integrujeme-li tedy zbylé, na vlnové délce závislé funkce ve (2.45)

$$G_2(\theta_c) = \int_0^\infty d\lambda \,\mathcal{R}_c(\lambda, \theta_c)\varrho(\lambda) \approx \int_{-\infty}^\infty d\lambda \,\mathcal{R}_c(\lambda, \theta_c)\varrho(\lambda)$$
(2.48)

dostáváme s použitím (2.38), (2.39) a (2.46)

$$G_2(\theta_c) \approx \sum_i \frac{uw_i}{u + w_i} \frac{\pi}{1 + ((\lambda_i - \lambda_c)/(u + w_i))^2} + \pi u.$$
(2.49)

Dále můžeme provést integraci části  $\Phi_{\lambda}(\varphi, \lambda)$  (viz. vztah (2.31)) závislé na souřadnici x podle  $x_f$  při konstantním směrovém úhlu  $\varphi_f$ . Výsledkem bude opět funkce  $D(\theta_f)$  (2.42), ve které tentokrát nebude vystupovat šířka štěrbiny detektoru  $d_d$ . Jak již bylo řečeno, předpokládáme, že svazek není za krystalem prostorově omezen. Celkově tedy pro tok zářivé energie detektovaný po difrakci na krystalu dostáváme

$$I_m(\omega_c) = I_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi_f \ D(\varphi_f) \mathcal{R}_1(\lambda_c, \theta_1) \cdots \mathcal{R}_m(\lambda_c, \theta_m) G_2(\theta_c),$$
(2.50)

kde j<br/>sme ${\cal I}_0$ opět označili instrumentální konstantu

$$I_0 = e^{-\alpha s} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\chi_f \,\Xi(\chi).$$

Diferencováním Braggovy rovnice dostaneme pro úhlovou vzdálenost difrakčních maxim  $\Delta\!\theta_{Br}$ záření vlnových délek $\lambda$ a $\lambda+\delta\!\lambda$ známý vztah

$$\Delta \theta_{Br} = \tan \theta_{Br} \, \frac{\delta \lambda}{\lambda}.\tag{2.51}$$

Aby tedy diskutované měření rozlišilo spektrální hustotu zářivých toků těchto dvou vlnových délek, musí být divergence svazku  $\delta'_h$ , určená součinem funkcí  $D(\varphi_f) \cdots \mathcal{R}_m$  v (2.50), a vstupní úhlová apertura krystalu menší než  $\Delta \theta_{Br}$ . Při měřeních s uspořádáním popisovaném v kapitole 5 dostaneme podle tohoto kritéria rozlišení  $\delta \lambda = 3 \cdot 10^{-3}$  Å, což je postačující dokonce i k rozlišení čar CuK $\alpha_1$ , CuK $\alpha_2$ .

## Kapitola 3

# Monochromatizace a kolimace záření pro měření rtg reflektivity

V úvodu minulé kapitoly jsme se zmínili krátce o spektrálním složení záření elektronových rentgenek a o divergenci svazku rtg záření. V této kapitole se budeme zabývat jejich důsledky na měřenou reflektivitu záření a požadavky na vlastnosti primárního svazku pro rtg reflektometrii. V druhé podkapitole si pak všimneme možností, které nám v oblasti monochromatizace a kolimace rtg záření poskytují periodické multivrstvy.

## 3.1. Požadavky na monochromatizaci a kolimaci záření

Při studiu vrstevnatých struktur pomocí rtg reflexe je žádoucí, aby bylo detekované záření monochromatizováno. Tím se vyhýbáme komplikacím, které by byly spojeny s vyhodnocováním experimentu. V této kapitole budou vytýčeny tři požadavky na primární záření dopadající na vzorek a ukázány důsledky jejich nesplnění.

Měřená spekulární reflektivita vzorku v závislosti na úhlu  $\omega_s$ , který svírá rovina povrchu vzorku s osou soustavy monochromátoru, je dána obecně vztahem

$$\mathcal{R}_m(\omega_s) = \int_{-\delta'_h/2}^{\delta'_h/2} d\varphi_f \int_0^\infty d\lambda \, \mathcal{R}(\lambda_{K\alpha_1}, \omega_s \pm \varphi_f) \Phi_\lambda(\lambda, \varphi_f) / I_p, \tag{3.1}$$

kde

$$I_p = \int_{-\delta'_h/2}^{\delta'_h/2} d\varphi_f \int_0^\infty d\lambda \ \Phi(\lambda, \varphi_f).$$
(3.2)

je celkový zářivý tok primárního svazku,  $\delta'_h$  označuje horizontální divergenci svazku a  $\Phi(\lambda, \varphi_f)$  je spektrální zářivost v rovině reflexe. Přitom předpokládáme, že štěrbina detektoru je tak široká, že detekujeme veškeré záření vystupující ze soustavy před vzorkem. Dále jsme uvážili případ, kdy veškeré záření dopadá na vzorek. Protože jsou úhly dopadu svazku na vzorek  $\omega_s$  malé, měřená reflektivita vzorku  $\mathcal{R}_m(\omega_s)$  nebude vertikální divergencí svazku výrazně ovlivněna. Proto také ve vztahu (3.1) nevystupuje úhel vertikální divergence  $\chi_f$ . Na obr. 3.1. je vynesena simulace, ukazující vliv nemonochromatičnosti a divergence záření na měřenou reflexní křivku periodické multivrstvy. Použito bylo záření Cu rentgenky, které obsahovalo čáry K série (bez brzdného záření). Poměry intenzit čar byly stejné jako v tab. 2.1.. Je vidět, že přítomnost záření K $\beta$  v primárním svazku způsobila změnu výšky některých vedlejších maxim a především tvar obálkové křivky. Tím jsme ztratili část informace o parametrech multiv<br/>rstvy. K dalšímu vyhlazení křivky došlo zavedením divergence svazku<br/>  $\delta' \neq 0.$ 



Obrázek 3.1.: K vlivu divergence primárního svazku a monochromatičnosti záření na reflexní křivku. Simulace reflexní křivky (RK) periodické multivrstvy  $5 \times (\text{Ni}, \text{C})$ ,  $d_{\text{Ni}} = 20$  Å,  $d_{\text{C}} = 100$  Å, substrát Si v okolí 2. a 3. BM. Vlevo: Měřené RK s dokonale kolimovaným a monochromatizovaným svazkem záření CuK $\alpha$  (přerušovaná čára), s nemonochromatizovaným, dokonale kolimovaným svazkem (plná čára), s divergentním a nemonochromatizovaným svazkem (kroužky). Vpravo: Část RK téže struktury simulovaná pro měření dokonale kolimovaným a monochromatizovaným svazkem záření CuK $\alpha_1$  (plná čára), resp. CuK $\beta$  (přerušovaná čára).

Uvažme nyní, že v spektru primárního záření dopadajícího na multivrstvu se vyskytují dvě výrazné spektrální čáry blízkých vlnových délek  $\lambda_1$  a  $\lambda_2$ , které mají řádově stejnou intenzitu. Vliv nemonochromatičnosti primárního svazku na tvar reflexní křivky lehko nahlédneme diferencováním Braggovy rovnice (1.37). Veličina D v (1.37) v tomto případě představuje charakteristický rozměr měřené struktury (např. tloušťku oxidované vrstvičky, velikost periody multivrstvy atd.). Rozdíl úhlových poloh BM  $\Delta \theta_{Br} = \theta_{Br}(\lambda_1) - \theta_{Br}(\lambda_2)$  příslušejících vlnovým délkám  $\lambda_1$  a  $\lambda_2$  pro záření dvou vlnových délek jejichž rozdíl je  $\Delta \lambda = \lambda_1 - \lambda_2$  je dán přibližným vztahem

$$\Delta \theta_{Br} \approx \tan(\langle \theta_{Br} \rangle) \frac{\Delta \lambda}{\langle \lambda \rangle},\tag{3.3}$$

kde je  $\langle \lambda \rangle = (\lambda_1 - \lambda_2)/2$ ,  $\langle \theta_{Br} \rangle = (\theta_{Br}(\lambda_1) + \theta_{Br}(\lambda_2))/2$  a  $\Delta \lambda = \lambda_1 - \lambda_2$ . V případě že pološířka BM je mnohem větší než  $\Delta \theta_{Br}$ , dojde v měřené reflexní křivce k "slití" BM, které se projeví jako rozšíření jednoho BM. V opačném případě dojde k pozorovatelnému zdvojení BM v reflexní křivce. Se zmenšující se úhlovou polohou BM  $\langle \theta_{Br} \rangle$  se zmenšuje vliv nemonochromatičnosti záření. V tabulce 3.1. je uveden rozdíl úhlových poloh Braggových maxim odpovídajících reflexi čar CuK $\alpha_1$ a CuK $\alpha_2$  v závislosti na střední poloze BM  $\langle \theta_{Br} \rangle$  vyplývající z (1.37).

V mnohých aplikacích rtg reflexe lze rozšíření Braggových maxim  $\langle \Delta \theta_{Br} \rangle$  vzhledem k jejich velké FWHM zanedbat a použít záření obou charakteristických čar dubletu. Poslední uvedený údaj v tab. 3.1. odpovídá difrakčnímu úhlu na rovině (1, 1, 1) krystalu Si.

Důsledkem divergence svazku je vyhlazování reflexní křivky, to je patrné z obr. 3.1. a rovnice (3.1). Jestliže je divergence svazku srovnatelná nebo větší než charakteristická úhlová perioda

$\langle \theta_{Br} \rangle$	$\Delta \theta_{Br}; ['']$
1500"	3.7
3500"	8.7
3°	26
14.22°	128

Tabulka 3.1.: Úhlový rozdíl poloh BM maxim pro čáry dubletu K $\alpha$  v závislosti na středním úhlu  $\langle \theta_{Br} \rangle$ .

oscilací struktury  $\vartheta_{Br} \approx \lambda/(2D)$  (uvažujeme maloúhlovou reflexi a tak  $\cos \theta_{Br} \approx 1$ ), pak opět ztrácíme informace, které jsou důležité při vyhodnocování experimentu. Jako kritérium pro přípustnou divergenci svazku lze například vzít podmínku  $\vartheta_{Br} > 4\delta'$ .

Dalším problémem který při detekci záření řešíme je přesnost měření zářivého toku detektorem. Při měření pomocí scintilačního detektoru určujeme střední četnost detekovaných pulzů  $\overline{n_d}$ , která je úměrná zářivému toku detektorem. Počet pulzů  $N_d$  detekovaných za časový interval  $\tau$  je náhodná veličina s Poissonovým rozdělením [Hum88, VPL92]. Její střední hodnota a disperze je  $\overline{N_d} = D(N_d) = n\tau$ . Relativní chyba určení střední hodnoty četnosti pulzů je pak nepřímo úměrná odmocnině z počtu detekovaných pulzů. Kromě reflektovaného záření detekujeme navíc pozadí se střední četností pulzů  $\overline{n_b}$ . Pro relativní chybu měření četnosti pulzů příslušejících reflektovanému záření pak dostáváme

$$\delta_r(n_R) = \delta_r(n_d - n_b) = \frac{1}{\sqrt{\tau n_d}} \frac{1}{1 - n_b/n_d}.$$
(3.4)

K dosažení požadované přesnosti měření je třeba dostatečného množství detekovaných pulzů  $N_d$ . Aby mohly být integrační doby  $\tau$  únosné, musí zářivý tok detektorem, pocházející od reflektovaného záření, značně převyšovat pozadí. Tedy je třeba intenzivního primárního svazku. Vysoké požadavky na intenzitu zdroje záření jsou patrné například v práci [Med98]. Zde je nezanedbatelná část informace o vzorku obsažena v částech reflexní křivky, kde se reflektivita blíží  $1 \cdot 10^{-7}$ .

Zvýšení intenzity primárního svazku oproti klasické elektronové rentgence je možné dosáhnout použitím výkonějšího zdroje záření jako jsou rentgenky s rotační anodou nebo synchrotronu. Druhá možná cesta je zvětšení divergence svazku a využití větší části spektrálního oboru vyzařovaného klasickou elektoronovou rtg lampou.

Požadavek na větší intenzitu primárního svazku tedy stojí proti požadavkům na monochromatičnost záření a divergenci svazku. Optimální řešení závisí na konkrétních požadavcích experimentu. Obecně lze však shrnout, že v případě rtg reflexe je přijatelné použití širšího oboru vlnových délek záření v primárním svazku než v případě difrakce. Nejvhodnější je využití obou čar dubletu K $\alpha$ . Dále je třeba volit divergenci svazku tak, aby byla dostatečně menší než úhlový rozdíl poloh maxim v reflektivitě, které chceme pozorovat.

### 3.2. Monochromatizace záření periodickými multivrstvami

V návaznosti na výsledky kapitoly 1 a předešlé části této kapitoly nyní shrneme možnosti využití periodických multivrstev k monochromatizaci a kolimaci záření. Zaměříme se přitom na multivrstvy rovinné, kterým je tato práce věnována.

Při monochromatizaci záření pomocí periodických multivrstev se využívá reflexe v oblasti 1. BM [KHS97, KSNY98]. Právě tak je možno dosáhnout maximální propustnosti monochromátoru pro záření vlnových délek čar K $\alpha$ . U multivrstev typu kov/spacer (Si,C) lze dosáhnout reflektivity v 1. BM až 95% a FWHM až 150″. Přitom se úhlově nepřekrývají BM čar K $\beta$  a K $\alpha$  a 1. BM čar dubletu K $\alpha$  jsou posunuty zanedbatelně oproti velikosti jejich FWHM (viz. tab. 3.1. a obr. 3.2.). Vstupní

úhlová apertura periodických multivrstev je tak několikanásobně větší než u běžných krystalových monochromátorů. Například v případě symetrické difrakce na rovinách (1, 1, 1) křemíku je vstupní apertura pro čáru CuK $\alpha_1$  přibližně 7". Periodické multivrstvy jsou tedy vhodné jako součást monochromátorů pro rtg reflektometrii.

K dosažení maximální propustnosti monochromátoru pro záření K $\alpha$  je zřejmě třeba nastavit náklon multivrstvy tak, aby osa soustavy svírala s jejím povrchem úhel odpovídající středu 1. BM  $\omega = \theta_{Br}(K\alpha_1)$  (viz. obr. 3.2.). Dále je třeba štěrbinou omezit divergenci svazku  $\delta'$ , aby byla potlačena čára K $\beta$ . K plnému využití výhody multivrstvy je vhodné nastavit divergenci svazku přibližně rovnu FWHM 1. BM záření K $\alpha$ . Divergenci lze dle potřeby snížit pomocí štěrbin, aniž by bylo nutno znovu justovat monochromátor. To však samozřejmě činíme na úkor intenzity I



Obrázek 3.2.: Reflexní křivka periodické multivrstvy v okolí 1. BM čar CuK $\alpha$  a čáry CuK $\beta$ . Struktura multivrstvy: 20×(Ni,C), substrát Si,  $t_{Ni} = 20$  Åa  $t_C = 87$ Å. Za povšimnutí stojí zejména malý rozdíl poloh 1. BM čar dubletu CuK $\alpha$ .

Monochromatizační efekt lze dále zlepšit použitím reflexe na více rovinných multivrstvách za sebou, tak jak je to běžné u krystalových monochromátorů. Zde budeme demonstrovat jen případ dvou zrcadel.

Nechť povrchy zrcadel svírají úhel  $\alpha$  a rovina prvního z nich svírá s optickou osou soustavy úhel  $\omega_1$ . Tak můžeme orientovat vnější normálu  $\mathbf{n}_2$  druhé multivrstvy dvojím způsobem (viz. obr. 3.3.). Orientace multivrstev označíme podle minulé podkapitoly (+,+) v případě, že pro jejich normály platí  $\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2 > 0$ , a (+,-) v případě, že platí  $\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2 < 0$ . Předpokládejme, že není svazek omezen konečnými rozměry zrcadel. Z (2.12) a (2.31) plynou pro poměr spektrálních zářivostí dopadajícího  $I_i$  a reflektovaného svazku  $I_r(\varphi_1, \lambda)$  vztahy

$$\mathcal{R}_{+}(\varphi_{1},\lambda) = \frac{I_{r}(\varphi_{1},\lambda)}{I_{i}(\varphi_{1},\lambda)} = \mathcal{R}_{1}(\omega_{1}-\varphi_{1},\lambda)\mathcal{R}_{2}(\alpha-\omega_{1}+\varphi_{1},\lambda)$$
(3.5)

pro uspořádání (+,+) a

$$\mathcal{R}_{-}(\varphi_{1},\lambda) = \frac{I_{r}(\varphi_{1},\lambda)}{I_{i}(\varphi_{1},\lambda)} = \mathcal{R}_{1}(\omega_{1}-\varphi_{1},\lambda)\mathcal{R}_{2}(\alpha+\omega_{1}-\varphi_{1},\lambda)$$
(3.6)

pro uspořádání (+,–). Aby bylo dosaženo minimálního potlačení záření K $\alpha$  pro  $\varphi < \delta'$ , musí se úhly  $\omega_1$  a  $\alpha \mp \omega_1$ , které svírá osa zobrazení s povrchy první a druhé multivrstvy, rovnat úhlovým polohám 1. BM první a druhé multivrstvy pro tuto vlnovou délku

$$\omega_1 \approx \theta_{Br\,1}(\lambda_{K\alpha}) \tag{3.7}$$

 $\mathbf{a}$ 

$$\alpha \approx \theta_{Br\,1}(\lambda_{K\alpha}) \pm \theta_{Br\,2}(\lambda_{K\alpha}). \tag{3.8}$$



6

Obrázek 3.3.: Vzájemné orientace multivrstev v monochromatizačním uspořádání (+,+) a (+,-).

Zajímavý je případ, kdy mají obě multivrstvy stejnou strukturu a tedy i stejnou polohu 1. BM  $\theta_{Br}$ . Posledně uvedené podmínky (3.7), (3.8) pak předepisují v případě uspořádání (+,+) pro ideální vzájemný náklon multivrstev  $\alpha = 2\omega_1 = 2\theta_{Br}(\lambda_{K\alpha})$ . Reflexní funkce  $\mathcal{R}_+(\varphi_1,\lambda)$  je pak symetrická vůči úhlu odchylky paprsku od středního svazku  $\varphi$ . Pro uspořádání (+,-) je ideální otočení prvního zrcadla vůči ose soustavy  $\omega_1 = \theta_{Br}$  a ideální vzájemné natočení zrcadel  $\alpha = 0$ . Závislosti  $\mathcal{R}_+(\varphi_1,\lambda)$  a  $\mathcal{R}_-(\varphi_1,\lambda)$  pro paprsky úhlově blízké ose zobrazení jsou vyneseny v grafech na obr. 3.4.. Simulace byla provedena pro stejnou multivrstvu jako na obr. 1.7.. Je zde patrné zlepšení monochromatizačního účinku. Přitom maximum reflektivity v 1. BM pro jedinou multivrstvu bylo  $\mathcal{R}(\theta_{Br}, \lambda_{K\alpha}) = 0.87$  a pro kombinaci dvou zrcadel je  $\mathcal{R}_+ \approx \mathcal{R}_- \approx \mathcal{R}^2(\theta_{Br}, \lambda_{K\alpha}) = 0.76$ .

U uspořádání (+,+) navíc došlo k potlačení záření CuK $\beta$  v celém blízkém úhlovém okolí maxima CuK $\alpha$ . Dále se toto uspořádání vyznačuje větším poklesem reflektivit mimo maximu. Jedná se tedy nejen o vlnově disperzní, ale také o úhlově disperzní uspořádání. Proto bylo toto uspořádání zvoleno pro realizovaný monochromátor. Poznamenejme, že velikost vstupní apertury kombinace dvou zrcadel lze dále měnit jejich vzájemným náklonem. Tak se však snižuje i hodnota maxima reflexní funkce. Divergenci svazku je proto vhodnější měnit pouze pomocí štěrbin.



Obrázek 3.4.: Reflexní funkce dvojic multivrstev se stejnou strukturou: 30× (Ni,C),  $d_{\rm Ni} = 20$  Å,  $d_{\rm C} = 30$  Å, pro záření CuK $\alpha$  (plná čára) a záření CuK $\beta$  (přerušovaná čára). Reflexní funkce pro uspořádání (++) (vlevo)  $\mathcal{R}_+$ ,  $\alpha = 6700''$ . Reflexní funkce pro uspořádání (+,-)  $\mathcal{R}_-$  (vpravo),  $\alpha = 0''$ . Náklon první multivrstvy je v obou případech  $\omega_1 = \theta_{\rm Br} = 3350''$ .

## Kapitola 4

# Realizace monochromatizační aparatury

V rámci této diplomové práce byl vytvořen monochromatizovaný svazek záření CuK $\alpha$  kolimovaný v jedné rovině. Přitom byly použity dvě dvojice multivrstev v uspořádání (+,+), jehož výhody jsme vyzdvihli v podkapitole 3.2.. Záměrem bylo dosáhnout maximálního toku záření CuK $\alpha$  a potlačení záření CuK $\beta$ . V této kapitole budou postupně probrány jednotlivé kroky, které byly provedeny při vytváření monochromatizačního uspořádání. V první podkapitole budou uvedeny vlastnosti multivrstev použitých k monochromatizaci a experiment, který k určení těchto vlastností vedl. Dále je v textu rozdělena justace multivrstev v monochromatizační aparatuře do dvou fází. První fáze, popsaná v druhé podkapitole, se týká nastavení vzájemného náklonu dvojice multivrstev  $\alpha$  v uspořádání (+,+) (viz. podkapitola 3.2.). V třetí podkapitole je popsána vlastní aparatura určená k monochromatizaci a kolimaci svazku. Dále se zde budeme zabývat druhou fází justace zrcadel, jejímž cílem je dosáhnout ideální polohy multivrstev nastavených do uspořádání (+,+) v monochromatizovaném svazku.

## 4.1. Struktura multivrstev pro monochromátor

Pro sestavení monochromatizační aparatury byly k dispozici čtyři periodické multivrstvy vytvořené technologií magnetronového naprašováni na ÚPT AVČR Brno. Zamýšlená struktura multivrstvy byla 20 násobné opakování motivu materiálů (Ni-N/C-N) s tloušťkou vrstev  $d_{\rm Ni} = 20$ Å,  $d_{\rm C} = 80$ Å. Multivrstva byla nanesena na rovinném substrátu ze skla. Takto vytvořená zrcadla měla tvar disků o výšce  $h = (5.35 \pm 0.02)$ mm a průměru  $d_m = 40$ mm.

Před vlastní aplikací multivrstev do monochromatizační soustavy bylo nutno ověřit kvalitu multivrstev a tedy jejich vhodnost k použití pro monochromatizaci. Konkrétně jsme se zajímali o strukturu multivrstvy ve směru kolmém na povrch multivrstvy, o polohu a FWHM 1. BM, a o homogenitu struktury na ploše zrcadla. Při zkoumání multivrstev bylo použito měření spekulární rtg reflektivity (viz. kapitola 1) v tzv.  $\omega - 2\theta$  scanu.

V prvním odstavci této kapitoly popíšeme měřící aparaturu a shrneme metodu měření. V druhém odstavci se budeme zabývat vyhodnocením výsledků měření a kvalitativně i kvantitativně posoudíme multivrstvy.

#### 4.1.1. Metoda měření spekulární reflektivity multivrstev

Měření reflexních křivek  $\mathcal{R}(\omega)$  multivrstev bylo provedeno zářením CuK $\alpha_1$ . Experimentálního uspořádání je schématicky zobrazeno na obr. 4.1.. Jako zdroj rtg záření byla použita elektronová rentgenka s čarovým ohniskem šířky  $d_f = 0.1$ mm. Záření vystupující z rentgenky bylo monochromatizováno a kolimováno difrakcí Si (1,1,1) na dvou krystalech C<sub>1</sub>, C<sub>2</sub> v paralelním uspořádání (viz. [Kub91]). Clona S<sub>2</sub> pak propouštěla jen záření CuK $\alpha_1$ . Primární svazek měl v rovině pohybu detektoru šířku (0.12±1) mm a divergence svazku byla 35″. Výška svazku byla nastavena štěrbinou S<sub>2</sub> na 4mm.

Dále záření dopadalo na multivrstvu umístěnou na goniometru. Scintilačním detektorem byla pak detekována rtg kvanta reflektovaná na vzorku a elektronicky převáděna na proudové pulzy. Počet pulzů N za dobu  $\tau$  a střední četnost  $\bar{n}_d = N/\tau$  byla měřena a zapisována počítačem, jímž byl také celý experiment řízen. Zjišťovaná četnost pulzů je pak pro monochromatické záření úměrná zářivému toku v reflektovaném svazku  $I_m(\omega)$ . Zářivým tokem  $I_m$  budeme i nadále označovat detekovanou veličinu a budeme ji udávat v jednotkách [cps] (counts per second).

Měřena byla spekulární reflektivita multivrstvy, tak že pro úhly které svírala rovina vzorku resp. osa detektoru,  $\omega$  resp.  $2\theta$ , se směrem primárního svazku, platilo  $\omega = \theta$ . Otáčení vzorku a detektoru kolem osy goniometru bylo zajištěno dvěma krokovými motorky. Třetí motorek pak zajišťoval zasouvání vzorku do svazku ve směru kolmém na povrch vzorku. Vzdálenost mezi osou goniometru a štěrbinou detektoru byla (148 ± 2) mm. Šířka štěrbiny detektoru byla 0.3 mm, tedy do detektoru vstupovalo veškeré záření svazku.



Obrázek 4.1.: Schema aparatury použité pro měření spekulární reflektivity. Pohled shora.

Před započetím měření reflektivity bylo postupně provedeno měření přirozeného pozadí  $I_b$ , měření zářivého toku primárního svazku  $I_p$ , nastavení nulové polohy detektoru  $2\theta = 0$ , nastavení roviny povrchu vzorku do osy goniometru a nulového úhlu dopadu primárního svazku na povrch vzorku. Při provádění posledních dvou jmenovaných operací bylo využito toho, že osa primárního svazku prochází osou goniometru. Multivrstva byla zasouvána pomocí třetího motorku do svazku dokud se nesnížil zářivý tok detektorem na  $I_p/2$ , poté byl vzorek a detektor otočen do oblasti totálního odrazu (v případě měřených multivrstvy  $\theta = 900'' \approx \omega$ ), ve které již veškeré záření primárního svazku dopadalo na povrch multivrstvy. Dále byl měněn úhel  $\omega$  při konstantním úhlu  $\theta$ dokud nebyl detekovaný zářivý tok maximální  $I(\omega)$ , což odpovídá detekci spekulárně odraženého záření. Nakonec byl opět detektor a vzorek otočen do polohy  $\omega = \theta = 0''$  a zkontrolováno splnění podmínky detekovaného zářivého toku  $I(\omega = 0) \approx I_p/2$ . Těchto pět kroků bylo několikrát iterativně opakováno.

Pak byla měřena reflexní křivka

$$\mathcal{R}_m(\omega) = I(\omega)/I_p,\tag{4.1}$$

Integrační doba měření zářivého toku byla volena tak, aby relativní chyba měření četnosti pulzů, daná vztahem (3.4), nepřesáhla 2% pro zářivý tok větší jak 100 cps. Intenzita primárního svazku byla přitom 600 000 cps.

Pro každé ze 4 zrcadel, dále označovaných M1 až M4, bylo provedeno 5 měření. V jednom z nich svazek dopadal na střed multivrstvy a jeho průmět do roviny multivrstvy byl rovnoběžný s význačnou osou multivrstvy, osou naprašování multivrstvy. V dalších čtyřech měřeních dopadal střed svazku vždy ve vzdálenosti 4 mm od středu multivrstvy a průmět osy svazku do roviny multivrstvy byl buď rovnoběžný nebo kolmý na osu naprašování. Tak byla zkoumána homogenita multivrstvy v části, která byla později využita k monochromatizaci.

#### 4.1.2. Vyhodnocení měření

Při vyhodnocování naměřených dat byl použit velice zjednodušený model struktury multivrstvy. Předpokládali jsme, že všechny vrstvy daného materiálu v multivrstvě mají stejnou tloušťku.

Dále je známo, že při nanášení materiálu do tenkých vrstev není výsledná hustota  $\varrho_M$  stejná jako je hustota objemového materiálu  $\varrho_M^{(B)}$ . Důsledkem je pak změna elektronové hustoty vrstvy a jak plyne ze vztahu (1.3), (1.4) i změna reálného a imaginárního dekrementu indexu lomu. Proto byly zavedeny koeficinty zředění vrstev niklu a uhlíku  $c_M = \varrho_M / \varrho_M^{(B)}$ . Pro dekrementy indexu lomu pak platí

$$\delta_M = c_M \delta_M^{(B)}, \quad \beta_M = c_M \beta_M^{(B)}. \tag{4.2}$$

Ve vrstvách jsou navíc jako příměs přítomny molekuly dusíku. Jejich molární koncentrace jsou řádově jednotky procenta, přesně však není známa. Při teoretickém výpočtu reflexní křivky  $\mathcal{R}_t(\theta)$  jsme proto použili jako  $\delta_M^{(B)}$  a  $\beta_M^{(B)}$  hodnoty čistého niklu a uhlíku. O substrátu jsme předpokládali, že je jeho hustota rovna objemové hustotě, tedy  $c_{\rm sb} = 1$ .

Pro drsnost rozhraní mezi vrstvami jsme zvolili model zdrsňování rozhraní podle vztahu (1.46) (viz. [SSK93]). Celkově jsme tedy hledali pět parametrů multivrstvy: tloušťky vrstev materiálu  $d_{\rm Ni}$ ,  $d_{\rm C}$ , koeficienty zředění vrstev  $c_{\rm Ni}$ ,  $c_{\rm C}$ , drsnost rozhraní substrát/multivrstva  $\sigma_{\rm sb}$  a vlastní drsnost růstu vrstev  $\Delta \sigma$ .

Při vyhodnocování bylo předpokládáno Guassovské rozdělení náhodných chyb měření. Parametry multivrstvy jsme pak hledali minimalizací součtu kvadrátů odchylek měřených reflektivit  $\mathcal{R}'_m(\theta)$  od reflektivit teoretických  $\mathcal{R}_t(\theta, \boldsymbol{p})$ 

$$S = \sum_{i=1}^{N} w_i (\mathcal{R}'_t(\theta_i, \boldsymbol{p}) - \mathcal{R}_m(\theta_i))^2, \qquad (4.3)$$

kde vektor p označuje soubor hledaných parametrů,  $w_i$  je statistická váha i-tého měření a  $i = 1, \ldots, N$  označuje pořadové číslo položky měření. Veličina S byla minimalizována Marquardtovým-Levenbergovým algoritmem [PTVF92, Cel85]. Váha byla volena nepřímo úměrná disperzi i-tého měření reflektivity  $D(\mathcal{R}_m(\theta))$ . Z (3.4) a (4.1) dostáváme pro váhu měření přibližný vztah  $w_i = 1/D(\mathcal{R}(\theta)) = \tau/\mathcal{R}_m(\theta)$ . Při fitování byla vzata v úvahu divergence svazku  $\delta'_h$  a přirozené pozadí a teoretická reflektivita byla počítána jako

$$\mathcal{R}'_t(\theta_i, \boldsymbol{p}) = \frac{1}{6} (\mathcal{R}_t(\theta_i - \delta'_h/2, \boldsymbol{p}) + 4\mathcal{R}_t(\theta_i, \boldsymbol{p}) + \mathcal{R}_t(\theta_i + \delta'_h/2, \boldsymbol{p})) + R_b,$$
(4.4)

kde  $R_b$  je střední příspěvek přirozeného pozadí k reflektivitě  $R_b = I_b/I_p$ ,  $\mathcal{R}_t(\theta)$  je reflektivita periodické multivrstvy vypočtená podle (1.57) a (1.29).

Reflexní křivka zrcadla M4 a její fit jsou vyneseny na obr. 4.2.. Z rozšíření 4. BM a rozštěpení vyšších BM plyne, že v multivrsvě všechny dvojvrsvy nemají stejnou tloušťku  $D = d_{\rm Ni} + d_{\rm C}$ . Dále je patrné, že detekovaný zářivý tok v oblasti  $\theta > 7500''$  byl již prakticky na úrovni zářivého toku od přirozeného pozadí a signál je již silně zašuměný přes použitou integrační dobu  $\tau = 10$  s.

Neshoda měřené a teoretické reflexní křivky pro  $\theta < 800''$  je způsobena geometrií experimentálního uspořádání. Přesnost, se kterou byla multivrstva justována do poloviny svazku byla 0.01 mm, což činí přibližně 8% šířky primárního svazku. Proto zde dobře známá korekce na geometrické efekty nebyla uplatněna, a reflexní křivka byla fitována až pro úhly  $\theta > 900''$ . Toto omezení však nebylo na újmu kvality nafitovaných parametrů, relevantní informace o poměru tlouštěk vrstev a zředění je poskytována polohou konce oblasti totálního odrazu. Pro určení periody multivrstvy D jsou podstatné polohy BM. Kritická je však nemožnost použít reflexní křivky v oblasti vysokých reflexních úhlů. V té by bylo možno zpřesnit odhady parametru multivrstvy  $p = d_{\rm Ni}/D$  (viz. (1.32)) a drsností charakterizujících v našem modelu multivrstvu  $\sigma$ ,  $\Delta \sigma$ . Z těchto důvodů byla reflexní křivka nejdříve fitována pro úhly 900'' <  $\theta < 5000''$  a poté byly fixovány tloušťky a koeficienty zředění vrstev a byl proveden fit drsností v celé měřené oblasti  $\theta > 900''$ .



Obrázek 4.2.: Naměřená reflexní křivka multivrstvy M4, kroužky, a simulovaná reflexní křivka pro fitované parametry, plná čára.

#### 4.1.3. Výsledky měření

V tabulce 4.1. jsou uvedeny nafitované parametry multivrstev a úhlové polohy 1. BM  $\theta_{Br}^{(1)}$ . Reflektivita všech multivrstev v 1. BM dosahovala  $\mathcal{R} \approx 0.92$  a šířky v polovině maxima byly

$$\Delta \theta_{\rm Br}^{(1)} = (150 \pm 10)''.$$

	D	$p = \frac{d_{\text{Ni}}}{D}$	$c_{ m Ni}$	$c_{ m C}$	$\sigma_{\rm sb}$	Δσ	$ heta_{ m Br}^{(1)}$
	[Å]				[Å]	[Å]	[″]
M1	$107 \pm 1$	$0.19\pm0.02$	$0.96\pm0.04$	$0.96\pm0.02$	$4\pm1$	$1.4 \pm 0.5$	1750
M2	$108 \pm 1$	$0.19 \pm 0.03$	$1.05\pm0.04$	$0.94\pm0.03$	$5\pm1$	$2.0 \pm 0.5$	1800
M3	$104 \pm 1$	$0.18 \pm 0.02$	$0.93\pm0.07$	$0.94\pm0.01$	$3\pm1$	$1\pm0.5$	1780
M4	$105 \pm 1$	$0.20 \pm 0.03$	$0.89\pm0.05$	$1.05\pm0.02$	$5\pm1$	$1.8\pm0.5$	1780

Tabulka 4.1.: Parametry multivrstev M1...M4 zjištěné z fitování výsledků měření reflektivity na středu multivrstvy.

V případě multivrstvy M2 se výsledek fitu ko<br/>eficientů zředění vrstev vymyká našim představám o dějích, které probíhaly při růstu multivrstev. Očekávali bychom, že se hustota niklu bude snižovat pod obje<br/>movou hustotu  $c_{\rm Ni} < 1$  jako důsledek difuze uhlíkových atomů do niklové vrst<br/>vy. Struktura multivrstvy je zřejmě komplikovanější, než je náš model schopen postihnout. Hlubší analýza však nebyla prováděna, pro potřebu pos<br/>ouzení možnosti využití multivrstev v monochromátoru byla postačující informace o periodě multivrstvy. Uvedené hodnoty drsností rozhraní neovlivnily výrazně velikost reflektivity v 1. BM. Simulace ukázaly, že v případě všech multivrstev se reflektivita snížila maximálně o 2% oproti reflektivitě multivrstvy s dokonalými rozhraními.

U reflexních křivek naměřených při svazku dopadajícím mimo střed povrchu multivrstvy nebylo fitování parametrů prováděno. Ve všech případech vykazovaly reflexní křivky dobrou kvalitativní shodu s měřeními na středu multivrstvy. Především úhlová poloha 1. BM byla vždy stejná s přesností ±10". Vyjímkou bylo jedno z měření na multivrstvě M3, jejíž reflexní křivky jsou vyneseny v grafu na obr. 4.3.. Zde byl zjištěn úhlový posuv 1. BM o +25" a rozšíření 1. BM oproti měřením na jiných částech povrchu o 20". Z větší úhlové vzdálenosti mezi BM je dále patrné, že v měřené oblasti je menší perioda multivrstvy než je pod středem jejího povrchu. Z fitování bylo odhadnuto  $D = (102 \pm 2)$  Å

Informace o struktuře multivstev nám umožňují simulovat závislost reflektivity na úhlu dopadu rovinné vlny pro záření CuK $\beta$  a jiné vlnové délky a tak odhadnout monochromatizační účinek multivstev. Jak je vidět na obr. 3.2., kde jsou vyneseny simulované reflexní křivky multivstvy M1, jsou 1. BM spektrálních čar pro záření CuK $\alpha_1$ , CuK $\beta$  úhlově odděleny a multivstvy jsou vhodné k monochromatizaci záření Cu rentgenky. Nehomogenitou podmíněný posuv středu 1. BM multivstvy M3 je 6× menší než je jeho šířka a jak uvidíme v kapitole 5, nebude mít na kvalitu monochromatizace výrazný vliv.

## 4.2. Nastavení zrcadel do polohy (+,+)

Všechny čtyři multivrstvy, které byly popsány v podkapitole 4.1. byly po dvojicích najustovány do uspořádání (+,+), ve kterém svazek záření může reflektovat na obou multivrstvách pod úhlem odpovídajícím polohám 1. BM záření CuK $\alpha_1$ . V této kapitole bude stručně popsáno nastavení dvojic zrcadel a metoda ověření správného nastavení.

Před justováním zrcadel do poloh (+,+) byly dvojice zrcadel M1 a M2, resp. M3 a M4, připevněny na nosiče (schema viz. obr. 4.4.). Nosiče umožňovaly nastavení optimálního vzájemného náklonu  $\alpha$  dvojic zrcadel, pro nějž ze vztahu (3.8) a zjištěných poloh 1. BM  $\theta_{\rm Br}^{(1)}(\lambda_{K\alpha}) \approx 1780''$ plyne  $\alpha \approx 3560''$ . V dalším textu budeme dvojici zrcadel M1 a M2 umístěnou na prvním nosiči označovat jako DMA a dvojici zrcadel M3 a M4 jako DMB.

K nastavení vzájemného náklonu zrcadel jsme využili experimentálního uspořádání popsaného



Obrázek 4.3.: Reflexní křivky naměřené na multivrstvě M3 při svazku dopadajícím na střed multivrstvy (přerušovaná čára), a 4 mm od středu multivrstvy (plná čára).



Obrázek 4.4.: Schema nosiče použitého pro najustování dvojice multivrstev do polohy (+,+), pohled z boku. Šroub S<sub>1</sub> a pružný kovový plátek P, spojující podložky B<sub>1</sub> a B<sub>2</sub>, umožňovaly nastavení vzájemného náklonu zrcadel  $\alpha$  (přírůstek náklonu  $\Delta \alpha \approx 1500''/$ otáčku S<sub>1</sub>). Šroub S<sub>2</sub> spolu s klínem W<sub>1</sub>, W<sub>2</sub> sloužily k nastavení výšky povrchu zrcadla B nad povrchem podložky B<sub>2</sub> (změna výšky  $\Delta h \approx 0.023 \text{ mm/otáčku S<sub>2</sub>}$ ).

v odstavci 4.1.1.. Jak již bylo řečeno, byl zde primární svazek tvořen zářením  $\operatorname{CuK}\alpha_1$ , pro nějž mělo být dosaženo maximální propustnosti uspořádání. Stačilo tedy nastavit otočení goniometru s nosičem a vzájemný náklon zrcadel tak, aby došlo k odrazu svazku na zrcadle A i B v 1. BM. V této konfiguraci očekáváme podle (3.5) maximální detekovaný zářivý tok

$$I_m = \mathcal{R}_1(\theta_{\mathrm{Br}\,\mathrm{A}}^{(1)}) \mathcal{R}_2(\theta_{\mathrm{Br}\,\mathrm{B}}^{(1)}) I_p \approx 0.84 I_p,$$

kde $I_p$ značí opět intenzitu primárního svazku. U obou uspořádání DMA i DMB dosaženo dosaženo maximální odrazivosti 80%.

#### 4.2.1. Ověření správnosti nastavení zrcadel

Správnost nastavení do uspořádání (+,+) byla ověřována měřením reflexní funkce dvojice zrcadel.

V aparatuře na obr. 4.1. byla měřena závislost zářivého toku  $I_m(\omega_1)$  po reflexi svazku na zrcadlech A a B. Nosič byl při tomto experimentu umístěn na goniometru tak, aby osa goniometru procházela přibližně středem zrcadla A. Primární svazek dopadal nejdříve na multivrstvu A (M1, resp. M3) pod úhlem  $\omega_1$ , pak na multivrstvu B (M2, resp. M4) pod úhlem  $\alpha - \omega_1$ . Zářivý tok reflektovaného svazku byl měřen detektorem v poloze  $2\theta = 2(\alpha + \omega_1)$ .

Pro měřený zářivý tok by mělo v okolí  $\omega_1 = \theta_{Br B}^{(1)}$  bude podle (3.5) platit

$$I_{m}(\omega_{1}) \approx \mathcal{R}_{A}(\omega_{1}, \lambda_{CuK\alpha_{1}})\mathcal{R}_{B}(\theta_{\mathrm{Br} \,\mathrm{B}}^{(1)} + \theta_{\mathrm{Br} \,\mathrm{A}}^{(1)} - \omega_{1}, \lambda_{CuK\alpha_{1}})I_{p} =$$

$$\mathcal{R}_{+}(\omega_{1}, \lambda_{CuK\alpha_{1}}, \alpha = \theta_{\mathrm{Br} \,\mathrm{B}}^{(1)} + \theta_{\mathrm{Br} \,\mathrm{A}}^{(1)})I_{p},$$

$$(4.5)$$

kde  $\mathcal{R}_A$  resp.  $\mathcal{R}_B$  jsou reflektivity zrcadla A resp. zrcadla B pro příslušné úhly dopadu rovinné vlny.

Závislost  $I_m(\omega)/I_p$  naměřená na najustované dvojici zrcadel DMB (M3 a M4) je vynesena v grafu na obr. 4.5.. Dále je v grafu vynesena simulovaná závislost  $\mathcal{R}_+(\omega_1, \lambda_{CuK\alpha_1}, \alpha)$  pro  $\alpha =$ 3540", přičemž jako zdroj  $\mathcal{R}_A$  a  $\mathcal{R}_B$  byly vzaty naměřené reflexní křivky zrcadel M3 a M4, které byly proloženy kubickým splajnem. Pro úhly  $\omega_1 \in [1670"; 1900"]$  je vidět dobrá shoda měřené závislosti se simulací. Pro úhly dopadu svazku větší jak 1900" již část svazku reflektovaného na zrcadle M3 dopadá přímo do detektoru, aniž by reflektovala na M4. Měřená závislost tak přejde pro úhly  $\omega_1 > 2100"$  v reflexní křivku  $\mathcal{R}_A$  zrcadla M3 , která je v grafu rovněž vynesena. Pro úhly menší jak 1670" se opět již jen část svazku odráží na zrcadle M4 a dopadá na nosič zrcadel. Podobné výsledky mělo i měření reflexní funkce  $I_m(\omega_1)$  na dvojici zrcadel DMA.

Popsané chování poukazuje na problém s využitím multivrstev v monochromátorech. Díky malým úhlům dopadu je třeba dostatečně velká plocha homogenní multivrstvy, aby se na ní mohl odrážet celý svazek.

#### Souhrn

Hodnota vzájemného náklonu dvojice DMB, zjištěná ze shody simulace a experimentálních dat  $\alpha = 3540''$ , se uspokojivě blíží "ideálnímu náklonu" 3560''. Můžeme tedy potvrdit správnost najustování multivrstev do uspořádání (+,+). Přitom uspořádání má maximální propustnost pro záření CuK $\alpha$ . FWHM reflexní funkce bylo v případě uspořádání DMA 115'' a v případě dvojice zrcadel DMB 124''. Tyto hodnoty jsou určující pro divergenci svazku kolimovaného dvojicemi zrcadel. V dalších simulacích uvedených v textu bude pro dvojici zrcadel DMB vždy předpokládán úhel vzájemného náklonu zrcadel  $\alpha = 3540''$ . Srovnání těchto simulací s výsledky měření bude i nadále sloužit k ověření správnosti justace.



Obrázek 4.5.: K ověření správnosti nastavení dvojice zrcadel DMB (M3 a M4). Kroužky: měření závislosti  $I_m(\omega_1)/I_p$  po reflexi záření na dvojici zrcadel DMB. Přerušovaná čára: simulovaná závislost  $\mathcal{R}_+$  (reflexe na obou zrcadlech), ke které se měřená reflexní funkce  $I_m(\omega_1)/I_p$  blíží v okolí úhlové polohy 1. BM  $\omega_1 = 1780''$ . Pro úhly dopadu svazku  $\omega_1 > 2100''$  se odráží svazek pouze na multivrstvě M3 a reflexní funkce se shoduje s její reflexní křivkou (plná čára).

## 4.3. Realizované monochromatizační uspořádání

V této podkapitole bude popsáno experimentální uspořádání použité k vytvoření monochromatizovaného svazku, kolimovaného v jednom směru a stručně podán princip justování multivrstev v uspořádání (+,+) do svazku.

Realizované experimentální uspořádání je schematicky zobrazeno na obr. 4.6.. Monochromatizováno bylo záření vystupující z Cu rentgenky s čarovým ohniskem  $4 \times 0.04$  mm. Štěrbina S<sub>1</sub>, umístěná ve vzdálenosti  $l_1 = 133$  mm sloužila k hrubému vymezení svazku a horizontální divergence. Výška štěrbiny byla při všech experimentech nastavena na  $v_1 = 2$  mm, čímž byla dána vertikální divergence svazku  $\delta'_v = 2.5^{\circ}$ . Štěrbina S<sub>2</sub>, umístěná ve vzdálenosti  $l_2 = 370$  mm, sloužila k zmenšení divergence svazku a především k zmenšení šířky svazku, přesněji k zamezení výstupu části svazku, která nereflektovala na zrcadlech.



Obrázek 4.6.: Schema monochromatizačního uspořádání. Označení: O osa goniometru, N nosič s multivrstvami A (M1, resp. M3) a B (M2, resp. M4).

Dvojice zrcadel v uspořádání (+,+) byla umístěna na goniometru jehož otáčení bylo zajištěno přes pákový mechanizmus mikrometrickým šroubem otáčeným krokovým motorkem. Přitom střed první multivrstvy A ležel přibližně v ose goniomeru. Jeden krok motorku představoval otočení goniometru o $\Delta\omega_1 = 4.35''/{\rm krok}$ . Vzdálenost osy goniometru od zdánlivého ohniska rentgenky byla  $l_m = 200 \,{\rm mm}$ . Další krokový motorek umožňoval zasouvání zrcadel do svazku v horizontální rovině.

Jak bylo řečeno v podkapitole 3.2., pro optimální využití multivrstev je třeba, aby svazek dopadal na první multivrstvu A v uspořádání (+,+) pod úhlem  $\omega_1 = \theta_{\text{Br}A}^{(1)}$  1. BM záření CuK $\alpha$ . Do svazku byla přitom vkládána dvojice zrcadel s již nastaveným vzájemným náklonem multivrstev optimálním pro maximální propustnost záření CuK $\alpha$  (viz. podkapitola 4.2.). Dublet CuK $\alpha$  je navíc ve spektru rentgenky nejintenzivnější. Požadovanému úhlu  $\omega_1$  za těchto okolností odpovídá natočení goniometru s nosičem, při kterém svazek po odrazech na multivrstvách A i B poskytuje maximální zářivý tok. Toho bylo také využito při nastavení dvojic zrcadel DMA, resp. DMB do svazku.

Avšak při takovémto způsobu nastavení multivrstev si nemůžeme být jisti, zda se svazek odráží na obou multivrstvách, či zda není omezen hranou některé z multivrstev. O správnosti nastavení dvojice zrcadel se můžeme přesvědčit například měřením vlastností svazku a jejich srovnání s teoretickými výpočty. Měřením prostorového rozložení zářivého toku a spektrální hustoty zářivého toku monochromatizovaného svazku a porovnání se simulacemi bude věnována následující kapitola 5.

## Kapitola 5

# Vlastnosti realizovaného monochromátoru

V této kapitole se budeme zabývat vlastnostmi svazku záření Cu rentgenky monochromatizovaného a kolimovaného aparaturou popsanou v podkapitole 4.3.

V první podkapitole zopakujeme stručně metody měření vlastností svazku ve dvou použitých experimentech a zmíníme se o problémech s nimi spojených. O výsledcích měření spektrální hustoty zářivého toku primárního svazku a velikosti ohniska bude pojednáno v druhé podkapitole. Ve třetí, závěrečné, podkapitole pak budou diskutovány měřená prostorová rozložení zářivého toku a spektrální hustoty zářivého toku monochromatizovaného svazku a jejich srovnání s teoretickými. Především nám v tomto srovnání půjde o potvrzení správnosti najustování dvojice zrcadel do svazku.

# 5.1. Poznámky k metodám měření vlastností svazku

Obě metody použité ke zkoumání vlastností svazku byly již teoreticky rozebrány v kapitole 2. Na tomto místě uvedeme způsob realizace měření, zmíníme se o některých problémech s nimi spojených a doplníme parametry potřebné pro provedení výpočtů podle vztahů (2.41) a (2.50), které souvisí s naší konkrétní realizací měření.

### 5.1.1. Měření prostorového rozložení zářivého toku

Měření prostorového rozložení zářivého toku bylo teoreticky diskutováno v podkapitole 2.4.. Záření zkoumaného svazku bylo měřeno detektorem s úzkou štěrbinou S<sub>d</sub> (viz. obr. 2.7.). Vzdálenost osy  $\mathbf{x}_d$ , po níž se otvor štěrbiny pohyboval, od ohniska rentgenky byla  $l_d = 700 \text{ mm}$ . Měřena byla závislost zářivého toku  $I_m(X_d)$  prošlého štěrbinou S<sub>d</sub> na posunu detektoru od osy soustavy podél osy  $\mathbf{x}_d$ . Posun detektoru byl zajištěn mikrometrickým šroubem otáčeným krokovým, jehož jeden krok odpovídal posunu detektoru o  $6.25 \cdot 10^{-3} \text{ mm/krok}$ .

Abychom získali informace o lokálním rozložení zářivého toku podél osy  $\boldsymbol{x}$ , byla při měření používána úzká štěrbina detektoru šířky  $d_d = 0.02 \text{ mm}$ , resp.  $d_d = 0.04 \text{ mm}$ . Avšak výška štěrbiny byla  $v_d = 12 \text{ mm}$ . To se při vyhodnocování naměřených dat ukázalo jako problematické. Již velmi malý náklon  $\gamma = 1^{\circ}$  clony detektoru kolem osy soustavy způsobí v takovémto případě zvětšení

průmětu štěrbiny do osy x o 0.2 mm. Náklon clon však nebylo možno s dostatečnou přesností kontrolovat. To vysvětluje proč bylo při simulacích dosaženo shody s experimentem až při uvážení šířky štěrbiny detektoru  $d_d$  velikosti, která byla někdy srovnatelná s šířkou primárního svazku. Stejné chyba vznikala i otočením štěrbiny  $S_2$  okolo osy svazku, v případě, že jí byl svazek omezen.

Zde je vidět jaké idealizace se dopouštíme, když předpokládáme že všechny štěrbiny v soustavě mají hrany rovnoběžné se souřadnicovými osami  $\boldsymbol{x}$  a  $\boldsymbol{y}$  a všechny normály multivrstev leží v rovině  $(0_f; \boldsymbol{x}_f, \boldsymbol{z}_f)$  (viz. obr. 2.2.). Pro měření prostorového rozložení zářivého toku primárního svazku je proto vhodnější používat štěrbin menší výšky, tak že průmět štěrbiny do osy  $\boldsymbol{x}$  při jejím malém náklonu (můžeme požadovat např. |  $\gamma \mid < 3^{\circ}$ ) bude řádově srovnatelný s žádanou šířkou štěrbiny  $d_d$ . V našem případě by to znamenalo výšku štěrbiny 0.5 mm.

Při výpočtu simulací měřených závislostí bylo použito vztahu (2.41).

### 5.1.2. Měření spektrální hustoty zářivého toku

Teoretický rozbor tohoto měření byl uveden v podkapitole 2.5. a schéma experimentálního uspořádání je na obr. 2.8.. Záření zkoumaného svazku zde dopadá na krystal a měří se zářivý tok  $I_m(\omega_c)$  difraktovaný do plně otevřeného detektoru v závislosti na úhlu difrakčních rovin a osy soustavy.

Při našem měření bylo použito difrakce na rovinách (1, 1, 1) krystalu Si s úhlem asymetrie  $\beta \approx 0^{\circ}$ . Mezirovinná vzdálenost difraktujících krystalografických rovin byla v tomto případě D = 3.1353 Å.

Pro simulaci výsledku měření  $I_m(\omega_c)$  podle vztahu (2.50) bylo třeba znát pološířku Lorenzovy křivky v aproximaci reflexní mohutnosti  $\mathcal{R}_c(\theta_c, \lambda)$  (2.39). Ta byla získána fitováním Lorenzovy křivky na teoretickou reflexní mohutnost  $\mathcal{R}_c(\theta_c, \lambda)$  vypočtenou v dvouvlnném přiblížení pro difrakční úhel záření CuK $\alpha_1 \ \theta_c = 14.221^\circ$ . Zjištěná pološířka difrakční křivky byla  $u = 5 \cdot 10^{-5}$  Å. To je pološířka asi  $10 \times$  menší než pološířka spektrálních čar v sledovaném spektrálním oboru. Tvarová funkce  $G_2(\theta_c)$  měřeného spektra, vystupující ve vztahu pro detekovaný zářivý tok (2.50), je tedy jen zanedbatelně ovlivněna šířkou difrakční křivky krystalu Si. Její průběh dobře odpovídá funkci spektrální hustoty zářivého toku svazku  $\varrho(\lambda_c(\theta_c))$ .

Na druhé straně byla při měření běžně divergence svazku 100" až 200", přitom FWHM difrakce Si (1, 1, 1)  $\beta = 0^{\circ}$  je 11". Pro danou vlnovou délku tedy difraktuje jen záření z části svazku. Dále je při uvedených divergencích Braggova podmínka splněna pro záření vlnových délek v pásmu šířky až  $\Delta \lambda = 6 \cdot 10^{-3}$  Å, což způsobuje rozšíření měřených spektrálních čar o velikosti jejich přirozené šířky. S přihlédnutím k těmto faktům můžeme uvažovat výsledky měření jako hrubou informaci o spektrální hustotě zářivého toku ve svazku.

Krystal Si byl umístěn na goniometru, jehož otáčení umožňoval krokový motorek, který otáčel mikrometrickým šroubem. Mikrometrický šroub tlačil kolmo na páku spojenou s goniometrem, tak byl převáděn jeho translační pohyb na rotační pohyb goniometru. Jeden krok motorku představoval otočení goniometru o úhel  $\Delta \omega_c = 4.32''$ . Úhel  $\omega_c$  otočení difrakčních rovin krystalu vůči ose soustavy byl odvozován z počtu kroků n, které provedl krokový motorek, od úhlu náklonu krystalu  $\omega_c 0 = 14.221^\circ$ , při kterém bylo detekováno maximum difrakce záření CuK $\alpha_1$ , podle vztahu  $\omega_c = \omega_c 0 + n\Delta\omega_c$ . Při převodu úhlu otočení  $\omega_c$  na vlnovou délku záření  $\lambda_c$ , pro které byla měřena spektrální hustota zářivého toku, byla pak použita Braggova rovnice (2.47). Byla přitom uvážena jen difrakce první harmonické frekvence.

Při tomto způsobu měření, v oboru vlnových délek pro které bylo měření provedeno, lze ukázat, že určení difraktující vlnové délky má přesnost lepší jak  $3 \cdot 10^{-3}$  Å, což byla *přesnost našeho jednokrystalového spektrometru*.

## 5.2. Vlastnosti použité rentgenky a jejího záření

Jako vstupní informace pro výpočet prostorového rozložení zářivého toku a hustoty spektrálního zářivého toku  $I_m(\omega_c)$  monochromatizovaného a kolimovaného svazku je nutno znát velikost ohniska rentgenky a spektrální hustotu zářivého toku z ní vycházející. Výsledky měření, keré vedly k určení těchto veličin, budou uvedeny, spolu s popisem zpracování dat, v této podkapitole.

## 5.2.1. Určení šířky čarového ohniska a prostorové rozložení zářivého toku svazku

Šířka čarového ohniska byla určena z měření prostorového rozložení zářivého toku  $I_m(X_d)$ . Princip tohoto měření byl popsán v podkapitolách 2.4. a 5.1.. Měření bylo prováděno pro různá otevření štěrbin S<sub>1</sub> a S<sub>2</sub> v intervalu  $d_{1,2} \in [0.05; 0.4]$ . Přitom byl svazek omezen vždy jen jednou ze štěrbin S<sub>1</sub>, respektive S<sub>2</sub>.

#### Šířka čarového ohniska

Nejdříve se budeme věnovat ideálnímu výsledku měření  $I_m(X_d)$  při použití velmi úzké štěrbiny detektoru. Po té uvážíme vliv šířky štěrbiny detektoru na průběh měřené závislosti. Z tohoto rozboru pak vyplyne způsob zpracování měřených dat.

Pokud je štěrbina detektoru velmi úzká, je detekovaný zářivý tok  $I_m(X_d)$  úměrný ozáření  $\Psi_x(X_d)$  (viz. podkapitola 2.4.). Podle vztahu (2.34) pak platí

$$I_m \sim \Psi_x(X_d) \sim \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varphi_f \int_{-d_f/2}^{d_f/2} dx_f H_f(x_f) \times (5.1)$$
$$H_{1,2}(x_f + \varphi_f l_{1,2}) \delta(X_d - (x_f + \varphi_f l_d)),$$

kde  $l_{1,2}$  označuje vzdálenost štěrbiny S<sub>1</sub>, nebo S<sub>2</sub>, od ohniska rentgenky podle toho, která z nich omezuje svazek. Grafem  $I_m(X_d)$  je pak lichoběžníková funkce (viz. obr. 5.1.). Pro délku ozářeného úseku na ose  $x_d$  (šířka základny zmíněné lichoběžníkové funkce)  $\Delta x_{bas}$  a šířku oblasti maximálního ozáření  $\Delta x_{max}$  pak platí

$$\Delta x_{bas} = (d_f + d_{1,2}) \frac{l_d}{l_{1,2}} - d_f \quad \Delta x_{max} = |(d_{1,2} - d_f) \frac{l_d}{l_{1,2}} + d_f|.$$
(5.2)

Jak bylo uvedeno v podkapitole 5.1., nebylo při experimentech možné vytvořit dostatečně úzkou štěrbinu detektoru  $S_d$ . Důsledkem použití konečně velké šířky štěrbiny detektoru je změna průběhu funkce  $I_m(X_d)$  oproti  $\Psi_x(X_d)$ . Lineární průběh přechází v kvadratický. Krom toho nebylo možno určit ani šířku štěrbin  $S_1$ , resp.  $S_2$ , s přesností lepší jak 0.02 mm. Proto se šířky obou dvou štěrbin použitých v experimentu staly dalšími hledanými parametry.

Zde je však možné provést proložení naměřených závislostí  $I_m(X_d)$  v oblasti lineárního nárůstu a poklesu a v oblasti maxima přímkami a ze zjištěných parametrů  $\Delta x_{bas}$  a  $\Delta x_{max}$  takto vytvořené lichoběžníkové funkce odhadnout šířku ohniska a štěrbiny S<sub>1</sub>, resp. S<sub>2</sub> podle vztahů

$$d_f = \frac{\Delta x_{bas} \mp \Delta x_{max}}{2(q-1)} \quad d_1 = \frac{\Delta x_{bas} \pm \Delta x_{max}}{2q},$$
(5.3)

kde horní znaménko platí pro  $d_f/d_{1,2} < l_d/(l_d - l_{1,2})$  a dolní pro  $d_f/d_{1,2} > l_d/(l_d - l_{1,2})$  a dále parametr q označuje poměr vzdálenosti štěrbiny detektoru od ohniska rentgenky a použité štěrbiny



Obrázek 5.1.: Naměřené prostorové rozložení zářivého toku (kroužky) a simulace naměřených dat (plná čára). Simulovaná data jsou generována pro šířku 1. štěrbiny  $d_1 = 0.12$  mm a šířku štěrbiny detektoru  $d_d = 0.25$  mm. Dále je vynesen průběh funkce ozáření  $C\Psi_x(X_d)$  pro stejné hodnoty  $l_1, l_d, d_1$ .

 $S_1$  nebo  $S_2$  od ohniska rentgenky  $q = l_d/l_{1,2}$ . Z výsledku jednoho měření však nelze určit rozměr ohniska jednoznačně, proto bylo provedeno měření několik pro různé šířky štěrbin.

Takto provedený odhad šířek  $d_f$ ,  $d_{1,2}$  a  $d_d$  byl pak zpřesněn fitováním simulace měřeného zářivého toku na naměřenou závislost  $I_m(X_d)$ . Jedna z naměřených závislostí detekovaného zářivého toku  $I_m(X_d)$  a její simulace jsou uvedeny na obr. 5.1.. Simulace byla provedena pro šířku ohniska  $d_f = 0.08$  mm a šířku clon  $d_1 = 0.12$  mm a  $d_d = 0.25$  mm. Dále je zde vynesena funkce ozáření  $\Psi_x(X_d)$  (výše zmíněná lichoběžníková funkce), která je dána vztahem (5.1). Aby bylo možno srovnat průběh měřené závislosti a funkce ozáření, byla funkce  $\Psi_x(X_d)$  násobena konstantou, tak že se shodují funkční hodnoty v maximu.

Zjištěná velikost ohniska byla  $d_f = (0.08 \pm 0.02)$  mm. Tato hodnota je dvojnásobkem nominální hodnoty udávané výrobcem  $d_f^{(n)} = 0.04$  mm. Malá přesnost je dána především nepřesností v určení velikostí štěrbin. Při tomto měření je nejvhodnější použít štěrbin rozměrů srovnatelných s rozměry ohniska jako např. v [Č60]. Pak lze dokonce určit i prostorové nehomogenity rozložení záře ohniska. Dalšího zlepšení přesnosti měření by bylo možno dosáhnout zvětšením vzdálenosti mezi štěrbinou detektoru a ohniskem.

#### Nedokonalé omezení svazku

Ohledně použití štěrbin se zde zmíníme ještě o jednom problému, se kterým jsme se potýkali v průběhu experimentů. V případě že byla použita jen štěrbina  $S_1$  docházelo k nedokonalému omezení svazku. Při měření prostorového rozložení byl detekován nenulový zářivý tok i v oblastech, kde bylo předpokládáno, že záření nedopadá. Hodnota zářivého toku zde dosahovala v extrémních případech až 1/1000 zářivého toku detekovaného ve středu svazku a šířka oblasti přesahovala

#### 5.2.. VLASTNOSTI POUŽITÉ RENTGENKY A JEJÍHO ZÁŘENÍ

10 mm, což odpovídalo úhlové odchylce od osy svazku  $\varphi_f \approx 3000''$ .

Výskyt tohoto pozadí při měřeních se stal četnějším s vložením multivrstev do svazku, avšak okolnosti jeho vzniku se nepodařilo systematicky podchytit. Není jasné zda se jednalo o rozptýlené záření, což by odpovídalo některým pozorováním, kdy byl zářivý tok pozadí konstantní v celém sledovaném intervalu  $X_d$ , nebo zda se jednalo o efekt otočení štěrbin a zrcadel kolem osy svazku.

Při omezení svazku štěrbinou  $S_2$  se intenzita popisovaného pozadí snížila na  $1/1 \cdot 10^4$  intenzity ve středu svazku. To byl další důvod, proč bylo štěrbiny  $S_2$  za zrcadly používáno.

#### Souhrn

Při simulacích prostorového rozložení zářivého toku a spektrální hustoty zářivého toku bude v dalších odstavcích této kapitoly používán zjištěný rozměr ohniska  $d_f = 0.08$  mm.

### 5.2.2. Spektrální hustota zářivého toku primárního svazku

V této podkapitole budou uvedeny a diskutovány výsledky měření spektrální hustoty zářivého toku  $\varrho(\lambda)$  primárního svazku rentgenky. Dále bude rozšířena aproximace  $\varrho(\lambda)$ , jejíž parametry byly určeny fitováním simulace na naměřená data. Následovat bude komentář výsledků fitu. Parametrů aproximace bude dále použito v simulacích měřených závislostí  $I_m(X_d)$  a  $I_m(\omega_c)$  uvedených v příští podkapitole. Nakonec uvedeme jednoduché kritérium pro stanovení poměru intenzit spektrálních čar.

Rozbor měření spektrálního zářivého toku byl uveden v podkapitolách 2.5. a 5.1.. Na krystal Si v tomto případě dopadal svazek záření vycházející přímo z rentgenky. Svazek byl přitom omezen štěrbinou S<sub>2</sub> tak, aby bylo dosaženo malé divergence, která umožňuje přesnější stanovení spektrální hustoty zářivého toku primárního svazku  $\varrho(\lambda)$ .

#### Výsledky měření spektrálního zářivého toku

Naměřená spektrálního hustota zářivého toku při otevření štěrbiny  $d_2 = 0.10 \, mm$  je uvedena v grafu na obr. 5.2., kde jsou také popsány jednotlivé identifikované spektrální čáry.

Ve spektru se kromě předpokládaných spektrálních čar série CuK vyskytují i čáry wolframu serie L. Kromě čar WL $\alpha$  byly detekovány také čáry WL $\beta_1$  s vlnovou délkou  $\lambda = 1.2845 \text{ Å}$ , která však ve spektru na obr. 5.2. není zanesena. Její spektrální hustota zářivého toku byla asi  $3 \times$  menší než pro čáru WL $\alpha_1$ . Její příspěvek k celkovému zářivému toku je však v monochromatizovaném svazku zanedbatelný. Reflektivita použitých zrcadel je pro tuto vlnovou délku při úhlu dopadu  $\omega = 1770''$  ještě menší, než pro čáry CuK $\beta$ , které jsou navíc intenzivnější (viz. obr.5.3.).

Při našem zkoumání vlastností svazku jsme se omezili na interval vlnových délek  $\lambda \in [1.36; 1.58]$  Å, kde se nacházejí nejintenzivnější čáry spektra rentgenky.

#### Aproximace $\rho(\lambda)$ a určení jejich parametrů

Abychom dostali kvantitativní popis spektra rentgenky, bylo provedeno fitování parametrů spektrálních hustoty  $\varrho(\lambda)$  zářivého toku charakteristických čar  $H_i$ ,  $w_i$  a  $\lambda_i$  (viz. vztah (2.39)). Spektrální hustota spojitého záření  $\varrho_c(\lambda)$  (viz. vztah (2.38)) byla aproximována po částech lineární funkcí, jejíž funkční hodnoty  $\langle \varrho_c(\lambda_1), \ldots, \varrho_c(\lambda_n) \rangle$  v okrajových bodech lineárních úseků byly také fitovány. Dalším fitovaným parametrem byla šířka štěrbiny S<sub>2</sub>. Z měřených dat použitých pro fit byla vypuštěna



Obrázek 5.2.: Měřená spektrální hustota zářivého toku (kroužky)  $\rho(\lambda) \approx I_m(\omega_c)$  záření rentgenky při otevření štěrbiny S<sub>2</sub>  $d_2 = 0.10 \text{ mm}$  a fitovaný spektrální zářivý tok (plná čára). Na horní souřadnicové ose x jsou vyznačeny difrakční úhly  $\omega_c$  pro příslušnou vlnovou délku  $\lambda$  a difrakci Si (1, 1, 1).



Obrázek 5.3.: Simulovaná závislost reflektivity multivrstvy M3 na vlnové délce monochromatického záření pro úhel dopadu  $\omega = 1770''$ , který přibližně odpovídá poloze 1. BM záření CuK $\alpha_1$ .

v grafu vyznačená oblast rozšíření u charakteristické čáry  $CuK\alpha_1$ . Pro vlnové délky v této oblasti nebyla v citované literatuře nalezena charakteristická spektrální čára ani pro měď ani pro wolfram.

Výsledky fitování pro charakteristické čáry spektra jsou uvedeny v tab. 5.1.. V tabulce uvedené hodnoty jsou však orientační, mají nižší přesnost, než je dosahováno u experimentálních uspořádání určených výhradně k rtg spektroskopii (dvoukrystalové spektrometry). To je dáno především rozšířením charakteristických čar vlivem velké divergence svazku (viz. diskuze v podkapitole 5.1.). Nejvíce jsou jím ovlivněny fitované hodnoty samotných šířek čar  $w_i$ , jejichž odhadované relativní chyby jsou až 40 %. Přesto se však jejich hodnoty shodovaly pro čáry CuK $\alpha$  a WL $\alpha_1$  s hodnotami uváděnými v literatuře [Blo57, Gro84] s přesností lepší jak 10 %.

Průměrná střední hodnota fitované spektrální hustoty zářivého toku spojitého záření pro vlnové délky mezi absorpční hranou CuK a charakteristickou čarou CuK $\alpha_1$  byla  $\bar{\varrho_c}(\lambda) = 1.3 \cdot 10^{-3}$ . Přitom je vhodné znovu připomenout, že veškerý difraktovaný zářivý tok byl přisouzen difrakci první harmonické frekvence odpovídající difrakčnímu úhlu  $\omega_c$ .

Čára	$\lambda_i$ [Å]	$H_i$ [a.u.]	$2w_i$ [Å]	$I_r$
$CuK\beta_5$	1.3815	$1.3 \cdot 10^{-3}$	$2.2 \cdot 10^{-3}$	0.57
$CuK\beta_{1,3}$	1.3921	0.11	$5.4 \cdot 10^{-4}$	11
$CuK\beta_3$	1.3926	0.067	$1.2 \cdot 10^{-3}$	14
$WL\alpha_1$	1.4764	0.028	$1.3 \cdot 10^{-3}$	6.5
$WL\alpha_2$	1.4874	$3.1 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	0.63
$CuK\alpha_1$	1.5406	0.79	$6.4 \cdot 10^{-4}$	100
$CuK\alpha_2$	1.5444	0.39	$7.0 \cdot 10^{-4}$	49

Tabulka 5.1.: Zjištěné parametry spektrální hustoty zářivého toku charakteristických čar nemonochromatizovaného svazku (viz. vztah (2.39)) a relativní intenzity čar  $I_r$  vztažené k intenzitě čáry CuK $\alpha_1$ .

#### Intenzity charakteristických spektrálních čar

V tabulce 5.1. jsou dále uvedeny relativní intenzity  $I_r$  charakteristických čar vztažené k intenzitě čáry CuK $\alpha_1$ , přičemž pod intenzitou čáry je třeba rozumět

$$I_i = \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \, \frac{H_i}{1 + (\frac{\lambda - \lambda_i}{w_i})^2} = \pi H_i w_i. \tag{5.4}$$

Je patrné že příspěvek čáry WL $\alpha_1$  k celkovému zářivému toku vystupujícímu z rentgenky nelze zanedbat. Její přítomnost je o to nepříznivější, že její vlnová délka je blízká vlnovým délkám dubletu CuK $\alpha$  a bude při reflexi na multivrstvách méně potlačena než záření CuK $\beta$  (viz. obr. 5.3.).

Porovnáním hodnot intenzit čar z tab. 5.1. s hodnotami v tab. 2.1. zjistíme dobrou shodu relativní intenzity u čáry CuK $\alpha_2$ . Avšak u čáry CuK $\beta$ , pokud bereme její intenzitu z tab. 5.1. jako součet příspěvků od čar  $\beta_{1,3}$ ,  $\beta_3$  a  $\beta_5$ , je o 30 % větší než je uvedeno v [Blo57]. Fitování těchto čar bylo však značně problematické, neboť při měření použitým spektrometrem byly jejich maxima neoddělena.

Rychlou informaci o relativní intenzitě spektrálních čar bylo možno v použitém experimentálním uspořádání získat i přímo z měřených dat. Podle vztahu (2.51) dostáváme při divergenci svazku  $\delta'_h \approx 100''$  šířku pásma vlnových délek, pro které je splněna Braggova podmínka,  $\delta \lambda \approx 3 \cdot 10^{-3}$  Å. Tato oblast je tedy asi třikrát širší než šířka spektrálních čar  $w_i$  a v oblasti maxima dané čáry je detekovaný zářivý tok přibližně úměrný intenzitě čáry. Relativní odchylka takto určené intenzity je přibližně -10% pro nejužší čáry CuK $\alpha$  a -20% pro čáry CuK $\beta$  a WL $\alpha$ . Tímto způsobem byly určovány relativní intenzity charakteristických spektrálních čar uvedené v následující podkapitole.

#### Souhrn

V spektru rentgenky se kromě charakteristických čar mědi vyskytují i charakteristické čáry wolframu jejichž intenzita tvoří asi 7% intenzity čáry CuK $\alpha_1$ . V následující podkapitole 5.3. bude v simulacích použita spektrální hustota zářivého toku primárního svazku  $\varrho(\lambda)$ , která zde byla určena (viz. tab. 5.1.).

### 5.3. Vlastnosti monochromatizovaného svazku

Nyní známe intenzitu jednotlivých charakteristických čar ve spektru rentgenky a můžeme posoudit úspěšnost monochromatizace a kolimace svazku pomocí dvojic zrcadel DMA, resp. DMB. V této kapitole budou shrnuty výsledky měření vlastností svazku vystupujícího z realizované monochromatizační aparatury (viz. podkapitola 4.3.). Dále budou pro uspořádání s dvojicí zrcadel DMB srovnána naměřená data s teoretickými výpočty a bude diskutován jejich částečný nesouhlas. Cílem tohoto porovnání bude prokázat správnost najustování dvojice zrcadel do svazku.

# 5.3.1. Prostorové rozložení zářivého toku kolimovaného svazku

Na začátku tohoto odstavce si všimneme vlivu kolimace svazku zrcadel na prostorové roložení zářivého toku. Dále provedeme srovnání teoretického výpočtu s experimentálně zjištěným prostorovým rozložením zářivého toku a posoudíme správnost najustování dvojice zrcadel do svazku.

#### Kolimační účinek dvojice zrcadel v uspořádání (+,+)

Divergence svazku omezeného jedinou štěrbinou ve vzdálenosti l od ohniska je podle (2.35) svázána s její šířkou d vztahem

$$\delta_h' = (d_f + d)/l. \tag{5.5}$$

Šířka ozářeného úseku na ose detektoru je pak svázána s divergencí vztahem  $\Delta x = \delta'_h l_d - d_f$ . Dvojice zrcadel v uspořádání (+,+) je však, jak bylo ukázáno v podkapitole 3.2., úhlově disperzní element. Šířka svazku je tedy omezena vstupní úhlovou aperturou dvojice zrcadel, která je přibližně dána FWHM reflexní funkce  $\mathcal{R}_+$ . V případě použitých multivrstev bylo FWHM $\approx 120''$  (viz. podkapitola 4.2.). Rozšiřováním štěrbiny nad určitou šířku tedy již nedojde k dalšímu zřejmému rozšiřování svazku. Tento jev je patrný na obr. 5.4., kde jsou vyneseny měřené prostorové rozložení zářivého toku pro různé divergence svazku spojené s šířkami štěrbin vztahem (5.5). Při zvětšování divergence svazku dopadajícího na první multivrstvu nad  $\delta'_h = 180''$  již skutečně prakticky nedochází k rozšiřování svazku.

Šířka svazku, omezeného pouze vstupní úhlovou aperturou dvojice zrcadel, v rovině detekce záření byla při kolimaci soustavou DMA 0.50 mm a při kolimaci soustavou DMB 0.55 mm.

#### Srovnání experimentu s teoretickým výpočtem

S teoretickým výpočtem budeme srovnávat měření prostorového rozložení zářivého toku, při kterém byl svazek omezen jen rozměry multivrstev. Divergence svazku dopadajícího na multivrstvy je přibližně  $\delta'_h = 470''$ . Vstupní úhlová apertura dvojice multivrstev je tedy menší než divergence primárního svazku a v prostorovém rozložení se projeví jejich vlastní kolimační účinek.

56



Obrázek 5.4.: Naměřené prostorové rozložení zářivého toku svazku kolimovaného dvojicí zrcadel DMB při omezení svazku různě širokými štěrbinami  $S_2$ , resp. S<sub>1</sub>, tedy při různých horizontálních divergencích svazku  $\delta'_h = (d_f + d_{1,2})/l_{1,2}$  (viz. popis v grafu).

Na obr. 5.5. je vynesena naměřená závislost  $I_m(X_d)$  (kroužky) pro případ, kdy byl svazek kolimován dvojicí zrcadel DMB. Dále je zde vyneseno simulované prostorové rozložení zářivého toku (plná čára) svazku po kolimaci dvojicí zrcadel M3 a M4 (tedy zrcadel v uspořádání DMB) s parametry zjištěnými v podkapitole 4.1.. První zrcadlo mělo v simulaci náklon vůči ose soustavy  $\omega_1 = 1770''$  a druhé  $\omega_2 = 1770''$ , což odpovídá opět vzájemnému náklonu multivrstev  $\alpha = 3540''$ použitému v simulaci v podkapitole 4.2.. Dále bylo při simulaci použito spektrální složení zjištěné v podkapitole 5.2. a výpočet byl proveden podle vztahu (2.41). Vidíme zde dobrý souhlas simulovaného rozložení s naměřenou závislostí  $I_m(X_d)$ , šířka obou křivek v polovině maxima je přibližně FWHM=0.38 mm. Otevření štěrbiny detektoru při simulaci bylo  $d_d = 0.15$  mm.

Uvedením do shody maxim funkčních hodnot simulované a měřené závislosti  $I_m(X_d)$  byla zjištěna hodnota instrumentální konstanty  $I_0$  v (2.41). Dále pak bylo simulováno pro tytéž hodnoty  $I_0$  a šířek štěrbin  $d_1$  a  $d_d$ , prostorové rozložení zářivého toku v případě, že dochází k reflexi pouze na první multivrstvě v uspořádání — M3. Úhel multivrstvy s osou svazku byl zvolen  $\omega_1 = 1780''$ . Simulovaná závislost je opět vynesena na obr. 5.5. (přerušovaná čára). Šířka v polovině maxima je FWHM=0.49 mm. Tedy prokazatelně více než bylo zjištěno v experimentu.

Simulace  $I_m(X_d)$  pro dvojici zrcadel DMA nebyla prováděna, ale prostorové rozložení bylo kvalitativně podobné. Lze tedy soudit, že se její nastavení do monochromatizovaného svazku lišilo maximálně úhly, které svírala osa soustavy s povrchy zrcadel.

#### Souhrn

Měřením prostorového rozložení zářivého toku byl prokázán kolimační účinek dvojic zrcadel DMA i DMB na svazek záření.



Obrázek 5.5.: Prostorové rozložení zářivého toku svazku monochromatizovaného dvojicí zrcadel DMB. Svazek byl omezen štěrbinou  $d_1 = 0.30 \text{ mm}$ . Dobrá shoda naměřených dat (kroužky) a simulace (plná čára), provedené pro otevření štěrbiny detektoru  $d_d = 0.15 \text{ mm}$  a náklon zrcadel  $\omega_1 = 1770$  a  $\omega_2 = 1770$ . Simulace prostorového rozložení zářivého toku svazku po reflexi na multivrstvě M3 (přerušovaná čára).

Shoda provedené simulace s experimentem pak potvrzuje správné najustování dvojice do monochromatizovaného svazku. Bylo by však možné namítnout, že sice svazek reflektuje pouze na jedné multivrstvě, ale jeho divergence, a tím i šířka ozářeného úseku na ose detekce zářivého toku, je soustavou multivrstev zmenšena. Rozhodnout o tom, zda svazek skutečně reflektuje na obou multivrstvách může až provedení měření spektrální hustoty zářivého toku, jehož výsledky budeme diskutovat v následujícím odstavci této podkapitoly.

### 5.3.2. Spektrální hustota zářivého toku monochromatizovaného svazku

Na rozdíl od minulých podkapitol se budeme nejdříve věnovat srovnání měřené spektrální hustoty zářivého toku monochromatizovaného svazku  $I_m(\omega_c)$  se simulací a vyvodíme z něho závěry, které budou důležité pro následující rozbor výsledků dalších měření. Dále ze srovnání vyplyne, že svazek skutečně reflektuje na obou zrcadlech uspořádání DMB. Na závěr bude diskutován monochromatizační účinek obou dvojic zrcadel na charakteristické spektrální čáry.

Rozbor měření spektrální hustoty zářivého toku byl proveden v podkapitolách 2.5. a 5.1.. V tomto případě při měření svazek vystupující z monochromatizační soustavy (viz. obr. 4.6.) dopadal na používaný krystal Si a byla opět měřena závislost difraktovaného zářivého toku  $I_m(\omega_c)$ na úhlu  $\omega_c$  svíraném difraktujícími krystalografickými rovinami a osou svazku.

#### Srovnání výsledků měření $I_m(\omega_c)$ s teoretickým výpočtem

V grafu na obr. 5.6. je vynesen výsledek měření spektrální hustoty zářivého toku  $I_m(\omega_c)$  svazku monochromatizovaného dvojicí zrcadel DMB (čtverečky) a dále jeho simulace (výpočet byl proveden opět podle vztahu (2.50)). Nejdříve se budeme věnovat výchozím parametrům simulace a pak přejdeme k samotnému srovnání výsledků měření a simulace.

Aby byla simulace konzistentní se simulacemi provedenými v předešlých podkapitolách a mohli jsme na jejím základě posoudit správnost najustování dvojice zrcadel, byly zvoleny následující podmínky:

- Měření i simulace byly provedeny pro šířku štěrbiny  $S_2 d_2 = 0.10 \text{ mm}$ . Důvod k této volbě spočíval v tom, že jsme při odvození vztahu (2.50) předpokládaly, že svazek není omezen okraji multivrstev. Přitom při dalším otevírání štěrbiny nad šířku  $d_2 = 10 \text{ mm}$  ještě stále docházelo k znatelnému zvyšování celkového zářivého toku svazku  $I^{(i)}$  (viz. odstavec 5.3.1.) a bylo velice pravděpodobné, že je předpoklad splněn.
- Při simulaci byly použity parametry aproximace  $\rho(\lambda)$  a instrumentální konstanta  $I_0$  vystupující ve vztahu (2.50), které byly určeny pří fitování měřené spektrální hustoty zářivého toku  $I_m(\omega_c)$  primárního svazku v podkapitole 5.2..
- V simulaci byly dále použity úhly mezi osou soustavy a povrchy multivrstev  $\omega_1 = 1770''$  a  $\omega_2 = 1770''$  (viz. shoda experimentu se simulací v minulém odstavci této podkapitoly).



Obrázek 5.6.: Měřená spektrální hustota zářivého toku  $I_m(\omega_c)$  (čtverečky) ve svazku monochromatizovaném dvojicí multivrstev DMB při  $d_2 = 0.10$  mm. Simulace provedená pro svazek reflektující na obou zrcadlech (plná čára) se dobře shoduje s výsledky měření na rozdíl od simulace ve které svazek reflektuje pouze na zrcadle M3 (přerušovaná čára). Neshoda průběhu spojitého záření je diskutována v textu.

Ze srovnání měřené spektrální hustoty zářivého toku  $I_m(\omega_c)$  (čtverečky) a simulace (plná čára) v okolí maxim záření CuK $\alpha$  je patrná dobrá kvalitativní shoda. Na prvý pohled je však zřejmý

rozdíl v oblasti spojitého záření pro vlnové délky  $\lambda < 1.5$  Å. Pro  $\lambda < 1.48$  Å pak zůstává hodnota  $I_m(\omega_d)$  prakticky konstantní. Zde se nabízejí dvě vysvětlení této neshody:

- a) Jak jsme se již zmínili v podkapitole 5.1., byla v simulaci veškerá měřená spektrální hustota zářivého toku primárního záření připisována vlnovým délkám první harmonické frekvence při difrakci na krystalu Si. V experimentu však difraktovaly pravděpodobně i vyšší harmonické frekvence, pro které je reflektivita multivrstev odlišná. Avšak s klesající vlnovou délkou reflektivita multivrstvy při konstantním úhlu dopadu svazku klesá (viz. obr. 5.3.) a očekávali bychom tedy ještě větší potlačení spojitého záření oproti simulaci. Z tohoto hlediska se tato varianta jeví jako méně pravděpodobná.
- b) Druhým zdrojem neshody by mohlo být nedokonalé omezení svazku o němž jsme se zmiňovali v podkapitole 5.2.. To se v některých případech projevovalo jako rozptýlené záření s rovnoměrným směrovým rozložením zářivosti. Na krystal tedy dopadá záření v mnohem širším oboru úhlů dopadu, než je divergence svazku  $\delta'_h$  určená clonami, a je tedy splněna difrakční podmínka pro širší spektrum vlnových délek. Toto vysvětlení se zdá býti mnohem uspokojivější, neboť konstantní hodnota  $I_m(\omega_c)$  by skutečně odpovídala rovnoměrnému směrovému rozložení zářivosti.

Jednoznačně rozhodnout mezi těmito dvěmi možnostmi by mohlo však jedině měření energiově disperzním detektorem (např. pin-diodou). Dále označme průměrnou hodnotu zářivého toku v diskutované oblasti vlnových délek  $\bar{I}$ . Budeme s ní nakládat jako s pozadím, které je nutno odečíst od měřených hodnot spektrálních zářivých toků  $I_m(\omega_c)$  při difrakci. Budeme se zabývat výhradně jen korigovanou funkcí měřené spektrální hustoty zářivého toku

$$I'_m(\omega_c) = I'_m(\omega_c) - \bar{I} \tag{5.6}$$

V tab. 5.2. nyní srovnejme relativní intenzity  $I_r^{(m)\prime}$  charakteristických čar CuK $\beta_{1,3}$  +CuK $\beta_3$  a WL $\alpha_1$  v monochromatizovaném svazku, které byly zjištěny z měření (označeno DMB2) a simulace (SDMB2). Intenzity charakteristických spektrálních čar byly určovány z hodnot zářivého toku  $I'_m(\omega_c)$  v jim náležejících maximech (viz. diskutované kritérium v odstavci 5.3.1.). Simulace SDMB2 byla přitom provedena pro reflexi svazku na obou zrcadlech uspořádání DMB. Vidíme opět dobrou shodu simulace s experimentem. Ta svědčí o přiměřenosti aproximací, které byly provedeny při odvození vztahu (2.50). Dále jsou v tab. 5.2. pod označením SSMB2 uvedeny relativní intenzity spektrálních čar pro případ, že by svazek reflektoval pouze na multivrstvě M3 pod úhlem  $\omega_1 = 1780''$ . Relativní intenzity čar CuK $\beta$  a WL $\alpha_1$  by v tomto případě byly asi 10–krát větší než bylo zjištěno měřením. To potvrzuje správnost najustování dvojice zrcadel DMB do monochromatizovaného svazku.

#### Další výsledky měření $I_m(\omega_c)$ monochromatizovaného svazku

Měření spektrální hustoty zářivého toku bylo prováděno i při větších divergencích svazku než  $\delta'_h = 100''$  v měření DMB2. Jak je patrné z porovnání výsledků měření DMB2 a DMB5, resp. DMA3 a DMA6, nedochází k znatelné změně  $I_r^{(m)'}$  (v rámci přesnosti měření) ani pro horizontální divergence svazku větší jak 250''. Zde bychom však očekávali nárust relativní intenzity čar CuK $\beta$ , neboť záření může nyní dopadat pod úhly, při kterých se značně zvětšuje reflektivita uspořádání  $\mathcal{R}_+$  pro tyto vlnové délky. To by mohlo svědčit o tom, že divergence svazku byla omezována multivrstvami.

Výsledky měření spektrální hustoty zářivého toku svazku monochromatizovaného dvojicí zrcadel DMA, při otevření štěrbiny  $d_2 = 0.10 \text{ mm}$ , jsou vyneseny v grafu na obr. 5.7. (plná čára). Dále je v grafu vynesena měřená spektrální hustota zářivého toku nemonochromatizovaného svazku

Označení	Štěrbina	$\delta'_h$	$CuK\beta_{1,3}+CuK\beta_{1,3}$		$WL\alpha_1$	
	[mm]	[″]	$I_r^{(m)\prime}$	$q_r$	$I_r^{(m)\prime}$	$q_r$
DMB2	$d_2 = 0.1$	100	0.04	$2\cdot 10^{-3}$	0.3	0.05
SDMB2	$d_2 = 0.1$	100	0.04		0.4	
SSMB2	$d_2 = 0.1$	100	0.9		1.2	
DMA3	$d_2 = 0.1$	100	0.02	$1 \cdot 10^{-3}$	0.1	0.02
DMA6	$d_1 = 0.14$	350	0.03	$1 \cdot 10^{-3}$	0.2	0.03
DMB5	$d_1 = 0.08$	250	0.04	$2 \cdot 10^{-3}$	0.3	0.05

Tabulka 5.2.: Relativní intenzity  $I_r^{(m)} = I_m(\lambda_i)/I_m(CuK\alpha_1)$  a koeficienty monochromatizace  $q_r$  vybraných charakteristických čar v monochromatizovaném svazku pro různé divergence svazku  $\delta'_h$ . Počáteční písmeno S v označení je vyhrazeno pro simulaci, poslední písmeno A, resp. B, rozlišuje údaje pro dvojici zrcadel DMA, resp. DMB.

(přerušovaná čára), při stejném otevření štěrbiny detektoru. Monochromatizační efekt dvojice DMA je zřejmý. Jak je patrno z tab. 5.2. je relativní intenzita čar  $CuK\beta$  a  $WL\alpha$  pro uspořádání DMA ještě menší, než v případě dvojice zrcadel DMB. Vzhledem ke složitosti monochromatizačních soustav však nelze jednoznačně říci, zda je to důsledkem nehomogenity multivrstvy M3, která je součástí DMB.

Aby bylo možno kvantitativně posoudit monochromatizační efekt, byl v tab. 5.2. zaveden koeficient monochromatizace charakteristické čáry  $q_r$ , který je roven podílu její relativní intenzity v monochromatizovaném a primárním svazku  $q_r = I_r^{(m)'}(\lambda_i)/I_r(\lambda_i)$ . Pro čáru CuK $\beta$  je koeficient monochromatizace  $q_r \approx 1 \cdot 10^{-3}$  přirozeně menší než u čáry wolframu  $q_r \approx 0.03$ , neboť je v oboru vlnových délek více vzdálena od propouštěného záření CuK $\alpha$ .

#### Souhrn

Shoda měřených relativních intenzit charakteristických spektrálních čar a simulace měření potvrdila správnost najustování dvojic zrcadel DMA a DMB do monochromatizovaného svazku. Úhly  $\omega_1$  a  $\omega_2$ , které svíraly povrchy multivrstev s osou soustavy, byly přibližně rovny středům úhlové polohy 1. BM pro záření CuK $\alpha$ . Pro dvojici multivrstev DMB bylo konkrétně zjištěno  $\omega_1 = (1770 \pm 5)''$  a  $\omega_2 = (1770 \pm 5)''$ .

Dále však neshoda mezi měřenou spektrální hustotou zářivého toku a teoretickým výpočtem v oblasti spojitého záření (viz. obr. 5.6.) ukázala, že se buď v oblasti za monochromátorem vyskytuje záření, s rovnoměrným úhlovým rozložením spektrální zářivosti, nebo má v spojitém záření relativně vysoký podíl krátkovlná část spektra s vlnovými délkami  $\lambda < 0.7$  Å. Druhá hypotéza je však z fyzikálního hlediska hůře obhajitelná (viz. diskuze). Mezi těmito variantami nelze bez energiově disperzního měření rozhodnout. Nakonec bylo potvrzeno, že ve vytvořené aparatuře docházelo k prostorovému omezení svazku uspořádním multivrstev a tím i k omezení divergence svazku.



Obrázek 5.7.: Měřená spektrální hustota zářivého toku  $I_m(\omega_c)$  svazku monochromatizovaného dvojicí multivrstev DMA (plná čára) a nemonochromatizovaného svazku (přerušovaná čára) při  $d_2 = 0.10 \text{ mm}$ . Ze srovnání je patrný monochromatizační účinek multivrstev. Vysoká hodnota  $I_m(\omega_c)$  v oblasti spojitého záření je komentována v textu.

## Kapitola 6

## Závěr

Cílem této práce bylo vytvořit pomocí soustavy periodických multivrstev a štěrbin monochromatizovaný svazek záření  $CuK\alpha$  a jeho vlastnosti porovnat s teoretickým modelem. Od původního záměru vytvořit svazek kolimovaný ve dvou směrech bylo však upuštěno. Realizace experimentálního uspořádání by byla technicky velice náročná. Přitom bylo třeba kapacitu dílen přednostně věnovat na podporu projektu GAČR, který byl během řešení diplomové práce schválen.

V první části této práce jsou v paraxiálním přiblížení geometrické optiky odvozeny vztahy pro měřenou spektrální hustotu zářivého toku a prostorové rozložení zářivého toku svazku monochromatizovaného a kolimovaného v jednom směru soustavou clon a periodických multivrstev. Řadou aproximací jsou vztahy zjednodušeny do tvarů, které umožňují s využitím počítače v rozumném čase simulovat výsledky zmíněných dvou experimentů. Při výpočtu jsou přitom uváženy rozměry ohniska rentgenky a spekulární reflektivita multivrstev.

Experimentální část diplomové práce spočívala ve vytvoření monochromatizační aparatury a zjištění vlastností svazku záření z ní vystupující. K monochromatizaci bylo použito *čtveřice* rovinných periodických multivrstev  $20 \times (Ni - N/C - N)$  s periodou 104 Å až 107 Å. Jejich struktura a homogenita byly zkoumány měřením spekulární reflektivity záření CuK $\alpha_1$ . Reflektivita multivrstev v 1. BM přesahovala ve všech případech 92%, jejich úhlová poloha byla 1750" až 1800" a FWHM 140" až 160". Na základě zjištěné struktury bylo pak možné simulovat reflektivitu i pro jiné vlnové délky záření. Vzhledem k tomu, že úhlové polohy 1. Braggových maxim čar CuK $\alpha$  a CuK $\beta$  se u těchto vrstev nepřekrývají, je možno je použít k monochromatizaci záření.

Multivrstvy byly dále po dvojicích najustovány do vlnově a úhlově disperzních poloh (+,+)s cílem dosáhnout maximální propustnosti monochromatizačního uspořádání pro dublet čar CuK $\alpha$ . Vstupní úhlová apertura obou uspořádání byla přibližně FWHM=120" a reflektivita pro záření CuK $\alpha_1$  80%.

Monochromatizační a kolimační účinek dvojic multivrstev byl zkoumán v experimentálním uspořádání, k tomu účelu realizovaném. Výsledky měření vlastností obou svazků, monochromatizovaných první, resp. druhou, dvojicí zrcadel, byly přibližně shodné. *Relativní intenzita čáry* byla pro  $CuK\beta$   $I_r = 0.03$  a pro čáru WL $\alpha$   $I_r = 0.3$ . Intenzity jsou přitom vztaženy k intenzitě čáry CuK $\alpha_1$   $I_r = 100$ .

Shoda simulací a měření prostorového rozložení zářivého toku monochromatizovaného svazku a intenzity charakteristických spektrálních čar prokázala správnost najustování dvojic multivrstev do svazku. Tato shoda svědčí o oprávněnosti aproximací, které byly provedeny při odvození vz-tahů. Výsledky výpočtů podle těchto vztahů provedené mohou sloužit jako kritérium správnosti nastavení náklonu multivrstev ve svazku. Je velice pravděpodobné, že rozdíl mezi měřením a simu-

lací spektrální hustoty zářivého toku v oblasti spojitého záření je způsoben nedokonalým omezením svazku štěrbinami. Při měření spektrální hustoty zářivého toku svazku monochromatizovaného periodickými multivrstvami v článku [KHS97] bylo však dosaženo pro spojité záření kvalitativně stejného průběhu jako v simulaci uvedené v této práci.

Pro další využití multivrstev k monochromatizaci by bylo přínosné provést optimalizaci jejich struktury tak, aby se poloha 1. BM posunula směrem k vyšším úhlům a bylo přitom dosaženo vysoké reflektivity blížící se 90%. Tak by se zvýšila prostorová vstupní apertura multivrstev a bylo by je možno beze ztrát zářivého toku využít ke kolimaci záření vystupující z větší plochy. Navíc by se tak usnadnila justace multivrstev.

Na závěr lze říci, že tato práce měla i praktický význam neboť jedna z dvojic zrcadel je použita jako monochromátor primárního záření v nové aparatuře pro rtg reflektometrii v LTFN Př.F. MU, která se buduje v rámci výše zmíněného projektu GAČR.
## Literatura

- [Bea67] J.A. Bearden. X-Ray Wavelngths, *Review of Modern Physics*, Jan 1967.
- [Blo57] M.A. Blochin, *Fizika rentgenovskich lučej*, GITTL, Moskva, 1957.
- [BRV80] J. Brož, V. Roskovec a M. Valouch, Fyzikální and matematické tabulky, SNTL, Praha, 1980.
- [BW59] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon Press, London, New York, Paris, Los Angeles, 1959, 2nd edition.
- [Cel85] J. Celý, Programové moduly pro fyzikální výpočty, UJEP, Brno, 1985, skripta.
- [cry74] W.C. Hamilton and J.A. Ibers, editors, International Tables for X-ray Crystallography, Vol. IV., Kinoch Press, Birmingham, 1974.
- [Gri95] J. Grim, Rentgenová reflektivita tenkých vrstev, 1995, diplomová práce.
- [Gro84] S. Grosswig, Entwicklung, Aufbau und Erprobung eines Verfahrens zur Absolutmessung geometrischer Gitterparameter von Einkristallen mit hoher Prözision. Die Mathematisch-Naturwissenchaflich-Technischen Fakultät der Friedrich-Schiller Universität Jena, 1984, disertační práce.
- [HGD93] B.L. Henke, E.M. Gullikson and J.C. Davis, X-ray interactions: photoabsorption, scattering, transmision, and reflection at E=50 - 30 000 eV, Z=1-92, Atomic Data and Nuclear Data Tables, 54:181, 1993.
- [HK66] Z. Horák a F. Krupka, Fyzika příručka pro fakulty strojního inženýrství, SNTL/SVTL, Praha, 1966.
- [Hol96] V. Holý, High-resolution X-ray Diffractometry of Thin Layers theoretical aspects, Masarykova Univerzita, Brno, 1996.
- [Hum88] J. Humlíček, Statistické zpracování výsledků měření, UJEP, Brno, 1988, skripta.
- [IGH95] A. Iberl, H. Göbel and H. Heinecke, Characterization of III-V heterostructures grown by selective area epitaxy using double-crystal x-ray diffractometry with high lateral resolution, J. Phys. D:Appl. Phys., 28:A172, 1995.
- [KHS97] J. Kuběna, V. Holý a J. Sobota, Göbelovo parabolické zrcadlo naše zkušenosti, Materials Structure, 4(91), 1997.
- [KSNY98] P.E. Kondrashov, I.S. Smirnov, E.G. Novolesov a S.Yu. Yablokov, Comparative analysis of diamond-like carbon and metal-carbon x-ray mirrors, *Diamond and Related Materials*, pg. 1647, Dec 1998.

- [Kub91] J. Kuběna, Dvoukrystalová rentgenová difraktometrie, Přírodovědecká fakulta MU Brno, 1991, habilitační práce.
- [Kub94] J. Kuběna, Úvod do optiky, MU, Brno, 1994, skripta.
- [Med98] M. Meduňa, Rtg reflexe hladkých povrchů křemíku, MU Brno, 1998, diplomová práce.
- [MH88] J. Musilová a V. Holý, *Metody studia struktury pevných látek*, SPN, Praha, 1988, skripta.
- [Mik97] P. Mikulík, X-ray reflectivity from palnar and structured multilayers, Grenoble MU Brno, 1997, disertační práce.
- [Par54] L. G. Parratt, Surface studies of solids by total reflection of x-rays, Phys. Rev., 95:359– 369, 1954.
- [Pin74] Z. G. Pinsker, Dinamičeskoje rassejanie rentgenovskich lučej v idealnych kristalach, Nauka, Moskva, 1974. 2. vydání.
- [PTVF92] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling a B.P. Flannary, Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [SG95] M. Schuster a H. Göbel, Parallel-beam coupling into channel-cut monochromators using curved graded multilayers, J. Phys. D:Appl. Phys., 28:A270, 1995.
- [SSG88] S.K. Sinha, E.B. Sirota and S. Garoff, X-Ray and neutron scattering from rough surfaces, *Phys. Rev.*, B 38:2297 – 2311, Aug 1988.
- [SSK93] E. Spiller, D. Stearns and M. Krumrey, Multivlayer x-ray mirrors: Interfacial roughness, scattering, and image quality, J, Appl. Phys., pg. 107 – 118, 1993.
- [Str61] J.A. Straton, Teorie elektromagnetického pole, Praha, 1961.
- [Č60] J. Čermák, Wavelength distribution of x-rays in the focus of a monochromator and estimate of the influence of this distribution on precision measurements of lattice constants, *Czech. J. Phys.*, B 10:215–224, 1960.
- [VPL92] V. Valvoda, M. Polcarová a P. Lukáč, Základy strukturní analýzy, Karolinum, Praha, 1992.