

## ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС BARD ДЛЯ АНАЛИЗА СТРОЕНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР ПО ДАННЫМ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

© 2012 г. С. Б. Астафьев<sup>1</sup>, Б. М. Щедрин<sup>1, 2</sup>, Л. Г. Янусова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт кристаллографии РАН, Москва

E-mail: bard@ns.crys.ras.ru

<sup>2</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Поступила в редакцию 21.02.2011 г.

Рассмотрены основные принципы построения программного комплекса (BARD) – базовый анализ рефлектометрических данных (Basic Analysis of Reflectometry Data), созданного с целью получения единого (стандартизованного) инструментария для анализа строения тонких многослойных пленок и наноструктур различной природы по данным рефлектометрии. Программный пакет содержит как традиционно используемые процедуры обработки данных рефлектометрии, так и оригинальные авторские разработки, основанные на новых методах проведения и анализа рефлектометрических экспериментов. Дан обзор структуры пакета, его функциональных возможностей, примеров использования и перспектив развития.

### ВВЕДЕНИЕ

В рефлектометрическом эксперименте изменяется зависимость интенсивности рассеяния зондирующего излучения от вектора рассеяния  $q_z$ , ориентированного нормально к поверхности пленки (интенсивность зеркального отражения  $I(q_z)$ ). Данные рефлектометрии содержат информацию о структурных особенностях рассеивающей среды вдоль нормали к поверхности и позволяют определять общую толщину и толщины периодов повторения слоевой упорядоченности объекта, шероховатость внешней поверхности и межслоевых границ, а также оценивать профиль электронной плотности в поперечном сечении, величину поглощения и ряд других особенностей структурной упорядоченности [1]. Необходимость проведения подобных исследований неразрушающего типа реальных неорганических, органических и биологических объектов возрастает в процессе создания сложных структур для широкого круга технических применений и развития нанотехнологий.

Рефлектометрический анализ структурных особенностей пленок проводится путем специальной математической обработки экспериментальных данных при наличии соответствующего программного обеспечения (ПО). К настоящему моменту исследователями создан ряд программ для изучения конкретных научных проблем [2, 3]. В табл. 1 представлены их основные характеристики. Но зачастую они либо чрезвычайно сложны, либо решают только отдельные, узко специализированные задачи. При этом каждая программа требует разной организации данных и набора параметров, а существующие образцы иностран-

ного программного обеспечения или жестко привязаны к рефлектометрической аппаратуре, или скрывают от исследователя применяемые алгоритмы и методы расчетов, являясь к тому же коммерческой продукцией. Это делает затруднительным широкое использование таких программ и сравнение их результатов. С учетом имеющихся разработок и возможностей будущего развития теории рефлектометрии была поставлена задача создания универсального пакета программ, использующего открытый формат данных, пригодного как для быстрых экспресс-оценок качества пленок или обработки экспериментальных данных по стандартным методикам в технологических процессах, так и для проведения всестороннего научного исследования, постановки и решения новых теоретических задач. Основные характеристики пакета BARD (Basic Analysis of Reflectometry Data) приведены в табл. 1. Сравнение с существующим ПО доказывает, что разрабатываемый пакет не только не уступает этим разработкам, но зачастую превосходит их по своим функциональным возможностям.

Программный комплекс BARD разрабатывался с целью создания единого (стандартизованного) инструментария для анализа экспериментальных данных, моделирования возможных вариантов упаковки молекул в слоистых средах и выбора оптимальных параметров для описания структурной упорядоченности. Функционально пакет сочетает как традиционно используемые процедуры обработки рефлектометрических данных, так и оригинальные авторские разработки, основанные на новых методах проведения и анализа рефлектометрических экспериментов.

Таблица 1. Сравнение общедоступных программ рефлектометрического анализа

	BARD	AFIT	drydoc lprof	Parratt	slab_fit slab_refine	wetdoc wetlay	refffit reflpol	RFIT2000	YANERA	GenX	GArefl KsRefl	Simul- Reflec	Stoch- Fit
Прямая задача рефлектометрии	+	+	— +	+	+	— +	+	+	+	+	+	+	+
Обратная задача рефлектометрии	+	+	— +	+	+	— +	+	+	+	+	+	+	+
Решение фазовой проблемы	+	—	— —	—	—	— —	—	—	—	—	—	+	—
Различные методы расчета интенсивности	+	—	— —	—	—	— —	—	+	—	—	—	—	—
Различные методы оптимизации	+	—	— —	—	—	— —	—	—	—	—	+	—	+
Различные целевые функции	+	—	— —	—	—	— —	—	—	—	—	—	—	—
Произвольный профиль плотности	+	+	— +	—	—	— —	—	—	—	+	—	+	—
Неограниченное количество слоев в пленке	+	—	— +	—	+	— +	—	+	+	+	+	+	+
Визуализация обрабатываемых данных	p	—	— —	+	—	— —	—	+	—	—	—	+	+
Графический интерфейс пользователя	p	—	— —	+	—	— —	—	+	—	—	—	+	+
Дополнительные возможности*:	+	?	?	?	?	?	?	—	?	+	?	+	—
Актуальность (поддерживается)	+	—	—	—	—	—	—	—	—	+	—	+	+

\* Дополнительные опции: поиск профиля по дополнительным критериям; вычисление дифференциальной функции Патерсона; исследование сечений функционала; определение инвариантов пленки на разных подложках; построение профиля сложных молекул; учет поляризации и других особенностей.

Примечание. + — наличие свойства/возможности, — — отсутствие, p — планируется, ? — нет данных.

## ОБЩАЯ СТРУКТУРА BARD

Комплекс предназначен для обработки рефлектометрических данных с целью изучения строения многослойных структур, а также для моделирования рефлектометрического эксперимента.

Пакет программ организован в виде набора рабочих и сервисных программных модулей, допускающих возможность модификации и последующего расширения с целью получения разносторонних и гибких решений в рамках поставленной задачи моделирования и анализа рефлектометрических кривых слоистых структур.

К основным расчетным модулям относятся программы вычисления рефлектометрических кривых для конкретных моделей структур (прямая задача), а также программы поиска моделей, наилучшим образом описывающих эксперимен-

тально полученные кривые рассеяния (обратная задача). В пакете предусмотрено несколько вариантов алгоритмов для решения прямых и обратных задач, что позволяет выбирать наиболее подходящий вариант для каждого конкретного случая либо, применяя несколько вариантов расчетов, отбирать наиболее устойчивые решения.

К сервисным программам можно отнести те, которые, не решая прямую или обратную задачи рефлектометрии, тем не менее позволяют получить ту или иную дополнительную информацию об исследуемой структуре или кривой рассеяния (в графической или цифровой форме).

В настоящее время пакет программ реализован в виде консольного приложения на платформе Windows. В качестве языка программирования для расчетных модулей использован FORTRAN; управление, ввод/вывод и сервисные процедуры

разработаны на Delphi, визуализация результатов осуществляется средствами Matlab.

### ОСНОВНЫЕ ВИДЫ РЕШАЕМЫХ ЗАДАЧ

В настоящее время в BARD программно реализованы модули, позволяющие решать следующие виды задач.

Первым шагом исследования структуры пленки является *построение ожидаемой (стартовой) модели профиля электронной плотности* для выбранного разбиения образующих пленку молекул на внутренние подслои.

Ступенчатая модель профиля электронной плотности пленки по нормали к ее поверхности (или подложке) предусматривает разбиение пленки на однородные слои, в каждом из которых электронная плотность характеризуется постоянным значением. Такую модель можно построить, задавая предполагаемое количество слоев и для каждого слоя наборы соответствующих значений параметров: его толщину  $d$ , пропорциональные электронной плотности  $\delta$  и поглощению  $\beta$ , и при необходимости параметр шероховатости интерфейса (толщину нарушенного слоя между соседними слоями разной плотности, где возможно непрерывное изменение параметров  $\delta$  и  $\beta$ ). В пакете предусмотрено автоматическое вычисление параметров слоев и формирование файлов моделей на основании структурных формул образующих пленку молекул путем описания количества и сортов атомов в элементарном объеме каждого слоя. Задавая несколько вариантов разбиения молекул на слои, можно легко составить несколько непротиворечивых стартовых моделей исследуемой пленки, при этом будут также построены соответствующие распределения плотности.

*Вычисление рефлектометрической кривой по модели профиля электронной плотности пленки* — прямая задача рефлектометрии. В комплексе BARD предусмотрено несколько вариантов решения данной задачи.

В ряде случаев (при анализе рефлектометрической кривой вдали от критического угла полного внешнего отражения) применимо кинематическое приближение теории рассеяния, и для расчета интенсивности рассеяния можно использовать фурье-преобразование электронной плотности [4, 5]. Этот подход, реализованный в BARD как “метод Фурье”, позволяет использовать расчетную кривую в сочетании с дополнительными аналитическими выкладками для получения структурных оценок.

“Методом Паррата” названа в BARD программная реализация другого алгоритма, впервые предложенного Парратом [6] и использующего динамическую теорию расчета интенсивности зеркального рассеяния с учетом многократного

рассеяния волн, преломленных и отраженных на каждой из границ между областями разной плотности.

“Матричный метод” — еще одна программная реализация решения прямой задачи, использующая аппарат матричной оптики, что наиболее эффективно для анализа пленок, состоящих из множества повторяющихся однотипных наборов слоев [7].

Реализованные алгоритмы предусматривают возможность решения задачи как без учета, так и с учетом шероховатости интерфейсов и используют ступенчатую модель профиля плотности.

Наиболее востребованной при исследовании структур является обратная задача рефлектометрии: *восстановление профиля электронной плотности по измеренной кривой рассеяния*. Такое восстановление обычно выполняется путем минимизации определенной целевой функции (функционала), задающей характер связи между измеренными значениями интенсивности рассеяния и точками расчетной кривой. При этом проблема неоднозначности решения, скорость сходимости процесса минимизации и устойчивость получаемых решений существенно зависят от выбора целевой функции и метода минимизации для каждого конкретного типа анализируемой рефлектометрической кривой.

В программном комплексе BARD в настоящее время реализованы два различных метода минимизации, каждый из которых имеет свои характерные особенности и оптимальные условия применимости:

- *модифицированный метод Левенберга–Маркварда* [8, 9], достоинством которого является хорошая сходимость даже на многоэкстремальных поверхностях при условии существования и непрерывности первых и вторых производных целевой функции;

- *метод симуляции отжига* [10] — стохастический метод, допускающий нахождение глобального минимума и не требующий знания производных функционала.

В BARD также предоставлена возможность выбора нескольких целевых функций.

- *Целевая функция наименьших квадратов (ФНК)*. В литературе часто называется  $\chi^2$ -критерием и широко используется в различных оптимизационных задачах [8]:

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w_j (I_j^{exp} - I_j^{mod})^2,$$

где  $N$  — количество точек кривой интенсивности  $I(q_z)$ , используемых в процессе минимизации;  $w_j$  — весовые коэффициенты;  $I_j^{exp}$  — экспериментально измеренные значения интенсивности рас-

сеяния для соответствующих векторов рассеяния  $q_z$ ;  $I^{mod}$  — значения интенсивности рассеяния от модели профиля, вычисленные для тех же векторов рассеяния  $q_z$ .

— *Целевая функция наименьших модулей (ФНМ)*. Ранее было показано [11, 12], что данный функционал более эффективен, если весовые коэффициенты невозможно оценить достаточно точно:

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum_j w_j |I_j^{exp} - I_j^{mod}|.$$

— *Целевая функция максимальных модулей (ФММ)*:

$$\Phi = \max(w_j |I_j^{exp} - I_j^{calc}|).$$

Данный функционал определяет наилучшее приближение функции  $I^{exp}$  по Чебышеву — “Чебышевская норма” [13]. Разрабатывая теорию полиномов, наименее отклоняющихся от нуля, он показал, что наименьшее максимальное отклонение имеют те, для которых минимальна именно эта целевая функция.

В программном комплексе BARD дополнительно реализован метод, улучшающий процесс сближения кривых с резкими перепадами высот, что позволяет учитывать возможные искажения рефлектометрических данных за счет различных погрешностей измерения [14]. Предусмотрена возможность выбора диапазона сглаживания для каждой конкретной кривой, позволяющего доводить до конца процесс сближения кривых, получая разумные значения параметров математической модели пленки.

При решении задачи восстановления поперечного профиля электронной плотности  $\rho(z)$  часто требуется использовать дополнительную информацию для проверки или подтверждения гипотез о ее строении. Так, например, в BARD можно по экспериментальным значениям интенсивности рассеяния рассчитать такие структурные инварианты тонких многослойных пленок, как функцию Патерсона и автокорреляционную функцию  $Q(u)$  [15], пропорциональную квадрату  $\rho(z)$ :

$$Q(u) = \left(\frac{\lambda^2}{8\pi^2}\right)^2 \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} q^2 I(q) \exp(-iqu) dq = \\ = 2 \int_0^D \delta(z) \delta(z+u) dz,$$

а также средневзвешенную электронную плотность для свободновисящей (в отсутствие подложки) пленки:

$$\rho_{av} = \frac{1}{D} \int_0^D \rho(z) dz = \frac{1}{D} \sqrt{\int_{U_{min}}^{U_{max}} Q(u) du}.$$

Знание инвариантов рефлектометрических кривых может быть полезно для проверки адекватности профиля электронной плотности, рассчитываемого традиционными методами.

В BARD также заложены алгоритмы для вычисления непосредственно амплитуды рассеяния свободновисящей пленки в случае обеспечения специфической модели рефлектометрического эксперимента, основанной на гипотезе идентичности структуры пленок, сформированных на разных подложках по одной технологии [16, 17]. В этом случае данных об интенсивности рассеяния от двух–трех пленок одной структуры на разных подложках оказывается достаточно для вычисления амплитуды рассеяния от собственно пленки, откуда возможно определить профиль электронной плотности в поперечном сечении.

Еще более интересную информацию о структурных особенностях многослойной пленки можно получить, вычисляя дифференциальную функцию Патерсона:

$$P_F(z) = k_2 \int_{-\infty}^{+\infty} q_z^4 I(q_z) \exp(iq_z z) dq_z = \\ = k_4 \int_0^D \frac{d\rho(u)}{du} \frac{d\rho(u+z)}{du} du.$$

Выделение структурной информации о слоистых пленках путем анализа особенностей данной функции, в том числе с применением метода совмещения сдвинутых систем пиков, подробно описано в [18].

Получить дополнительную информацию позволяют реализованные в BARD алгоритмы вычисления одномерных и двумерных сечений целевой функции (функционала невязок между экспериментальной и расчетными кривыми) по заданным параметрам. Для отображения сечений функционала используется связь со средой Matlab. Такие графики позволяют оценивать устойчивость получаемых решений, делать вывод об их однозначности, а в ряде случаев — точно определять важнейшие параметры исследуемого объекта (например, однородная пленка на подложке).

Список описанных выше типов задач, решаемых в комплексе BARD, представлен в сводной табл. 2.

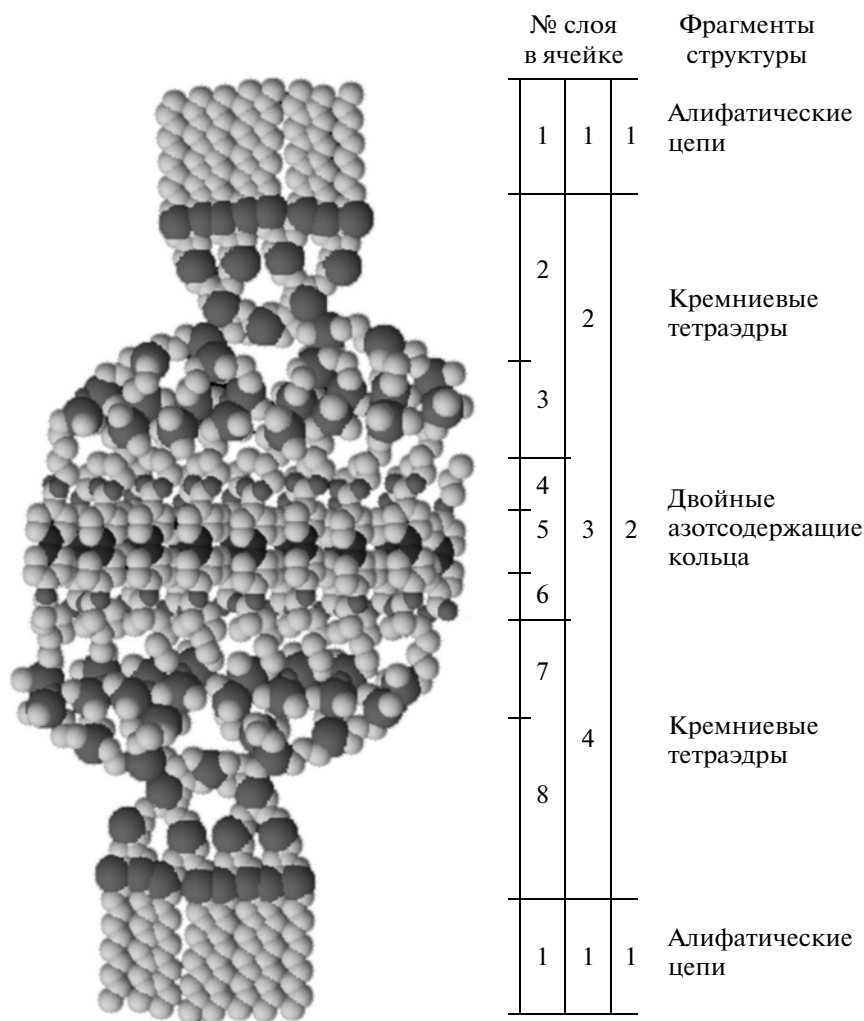
Таблица 2. Типы задач, решаемых в программном комплексе BARD

Тип задачи
<p><b>Построение (стартовой) модели</b> электронной плотности пленки</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>а) введение заданных параметров в файл по определенным в пакете правилам</li> <li>б) моделирование параметров и построение файла модели по данным о количестве и сортах атомов, образующих элементарные объемы слоев</li> </ul>
<p><b>Расчет распределения электронной плотности</b> в поперечном сечении пленки</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>а) для ступенчатой модели (без учета шероховатости)</li> <li>б) с учетом шероховатости интерфейсов</li> </ul>
<p><b>Вычисление рефлектометрической кривой</b> для заданной модели электронной плотности пленки одним из выбранных методов:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>а) методом Фурье-преобразований</li> <li>б) методом Парата</li> <li>в) методом Парата с заданной степенью сглаживания</li> <li>г) матричным методом</li> </ul>
<p><b>Восстановление профиля электронной плотности</b> по экспериментальной кривой рассеяния путем минимизации целевой функции <b>методом Левенберга-Маркварта</b>:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– с целевой <b>ФНК</b> – наименьших квадратов разностей интенсивности, экспериментальной и рассчитываемой одним из методов: <ul style="list-style-type: none"> <li>а) методом Фурье-преобразований</li> <li>б) методом Парата (толщина ячейки любая)</li> <li>в) методом Парата (толщина ячейки фиксирована)</li> <li>г) методом Парата (со сглаживанием)</li> <li>д) матричным методом</li> </ul> </li> <li>– с целевой <b>ФНК-<math>R^F</math></b> – наименьших квадратов разностей дифференциальной функции Патерсона, полученных из экспериментальных и рассчитанных методом Парата значений</li> <li>– с целевой функцией <b>ФНМ</b> – наименьших модулей разностей интенсивностей, экспериментальных и рассчитываемых методом Парата</li> <li>– с целевой функцией <b>ФММ</b> – максимальных модулей разностей интенсивностей, экспериментальных и рассчитываемых методом Парата</li> </ul>
<p><b>Восстановление профиля электронной плотности</b> по интенсивности рассеяния путем минимизации выбранной целевой функции <b>методом симуляции отжига</b></p>
<p>Вычисление <b>одномерных сечений</b> целевой функции в окрестностях минимума:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>а) найденного для целевой <b>ФНК</b></li> <li>б) найденного для целевой функции <b>ФНМ</b></li> </ul>
<p>Вычисление <b>двумерных сечений</b> целевой функции в окрестностях предполагаемого минимума по заданной паре параметров</p>
<p>Вычисление <b>Q-функции</b> (самосвертки)</p>
<p>Вычисление дифференциальной функции Патерсона</p>
<p>Вычисление интегралов:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>а) от профиля электронной плотности</li> <li>б) от Q-функции</li> </ul>
<p>Вычисление модуля амплитуды рассеяния</p>
<p>Вычисление средней и средневзвешенной электронной плотности пленки</p>

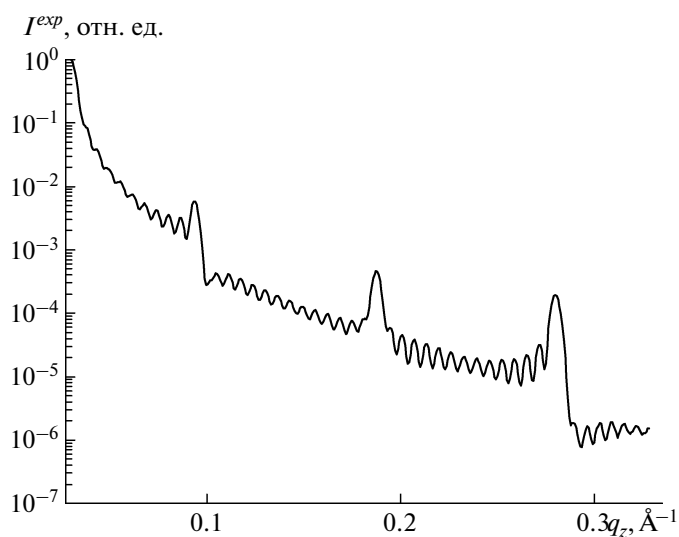
### ПРИМЕР АНАЛИЗА УПАКОВКИ РЕАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ С ПОМОЩЬЮ BARD

Возможности программного комплекса демонстрируются на примере анализа структурной упаковки пленки из жидкокристаллических блок-дендримеров с алифатическими и мезогенными концевыми группами (рис. 1).

Проведенных рентгенодифракционных исследований в объеме вещества [19, 20] оказалось недостаточно для построения модели бислоя, поэтому они были дополнены рефлектометрическим экспериментом. Данные интенсивности зеркального рассеяния от мультислойной пленки, сформированной методом центрифугирования из раствора и содержащей от 10 до 20 смектиче-



**Рис. 1.** Структурная схема бислоя из двух взаимопроникающих молекул блок-дендримера, образующих элементарную ячейку повторения в пленке, и варианты разбиения ячейки на 2, 4 и 8 подслоев.

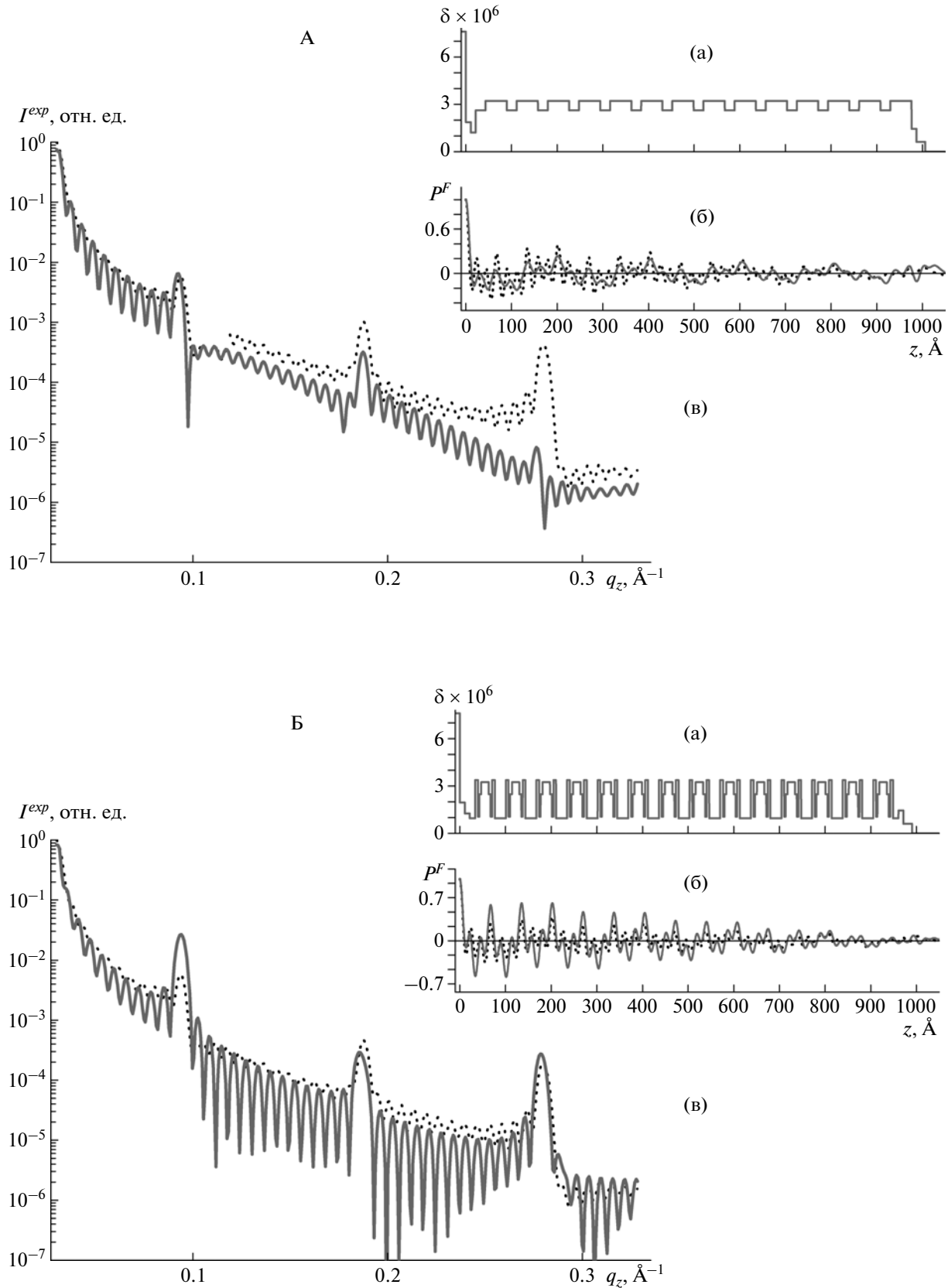


**Рис. 2.** Экспериментальная рефлектометрическая кривая от многослойной пленки блок-дендримера на кремниевой подложке.

ских слоев, параллельных кремниевой подложке, были получены на установке с вращающимся анодом (Rigaku RA-N300) в диапазоне векторов рассеяния  $0.03\text{--}0.33 \text{ \AA}^{-1}$  (рис. 2).

На рефлектометрической кривой видны брегговские отражения трех порядков, характеризующие период повторения мотива на поперечном профиле электронной плотности, и осцилляции Киссига, соответствующие общей толщине пленки. По этим данным получена примерная толщина пленки  $L \cong 975 \text{ \AA}$ , период повторения одинаковых наборов слоев (периода ячейки)  $D = 67.3 \text{ \AA}$  и количество таких повторений ( $N = 14$ ).

Найденный период превосходит длину одиночной молекулы, но оказывается меньше суммы длин двух молекул ( $\geq 78 \text{ \AA}$ ), из чего можно предположить, что молекулы упакованы в симметричные бислои с взаимопроникновением азобензольных групп, обладающих большой реакцион-



**Рис. 3.** Два варианта стартовых моделей с четырнадцатью повторяющимися ячейками, состоящими из двух (А) и восьми (Б) подслоев: профили электронной плотности (а); соответствующие им дифференциальные функции Патерсона (б) и рефлектометрические кривые (сплошные линии) в сравнении с кривыми, полученными из эксперимента (точки) (в).

ной способностью. Проверка этой гипотезы требовала восстановления распределения электронной плотности в поперечном сечении пленки. Поиск оптимальной модели осуществлялся с помощью BARD в несколько этапов.

*Формирование возможных стартовых моделей профиля электронной плотности.* На основании химической формулы в бислое из симметрично расположенных и, возможно, взаимопроникающих молекул были выделены структурные фрагменты, которые послужили основой для формирования нескольких наборов слоев в ячейке повторения, отвечающих разным моделям. Варианты построения ячеек из двух, четырех и восьми слоев схематически показаны на рис. 1. Параметры электронной плотности для стартовых моделей оценивались в BARD на основании подсчета количества электронов в каждом слое ячейки, задания площади, занимаемой ячейкой в плоскости слоя, и средней электронной плотности пленки [15], а также количества повторений ячеек и толщин слоев, подбираемых путем моделирования структурной упаковки фрагментов и анализа особенностей дифференциальной функции Патерсона [18]. Полученные таким образом варианты 2- и 8-слойных стартовых моделей приведены на рис. 3.

*Поиск модели путем оптимизации целевой функции.* Оптимизация проводилась для моделей с разным количеством слоев и с использованием различных целевых функций, доступных для вычислений в комплексе BARD. Сравнивались расчеты модельных интенсивностей, выполнявшиеся различными способами: методом Фурье и методом Парата, а также со сглаживанием целевой функции в процессе оптимизации. Решение обратной задачи рефлектометрии на данном примере было существенно затруднено низкой информативностью экспериментальных данных, измеренных в малом диапазоне векторов рассеяния ( $0 < q_z < 0.33 \text{ \AA}^{-1}$ ). Но несмотря на это, использование комплекса BARD позволило принять в качестве решения три модели с разной детализацией профиля. Одна из них предполагала упаковку с повторениями одинаковых элементарных ячеек, где варьировались только параметры подслоев ячейки по типу одномерного кристалла. Вторая — допускала возможность нарушений упаковки от слоя к слою, что требовало в процессе минимизации варьирования гораздо большего числа параметров (отдельно для каждого слоя). Третья — предполагала наличие дефектов упаковки не только в поперечном сечении, но и в плоскости слоя, приводящих к размыванию экспериментальной кривой, для учета которого использовался алгоритм поиска модели со сглаживанием на каждом шаге минимизации.

Полученные независимыми методами решения, хотя и имели некоторые различия, но в це-

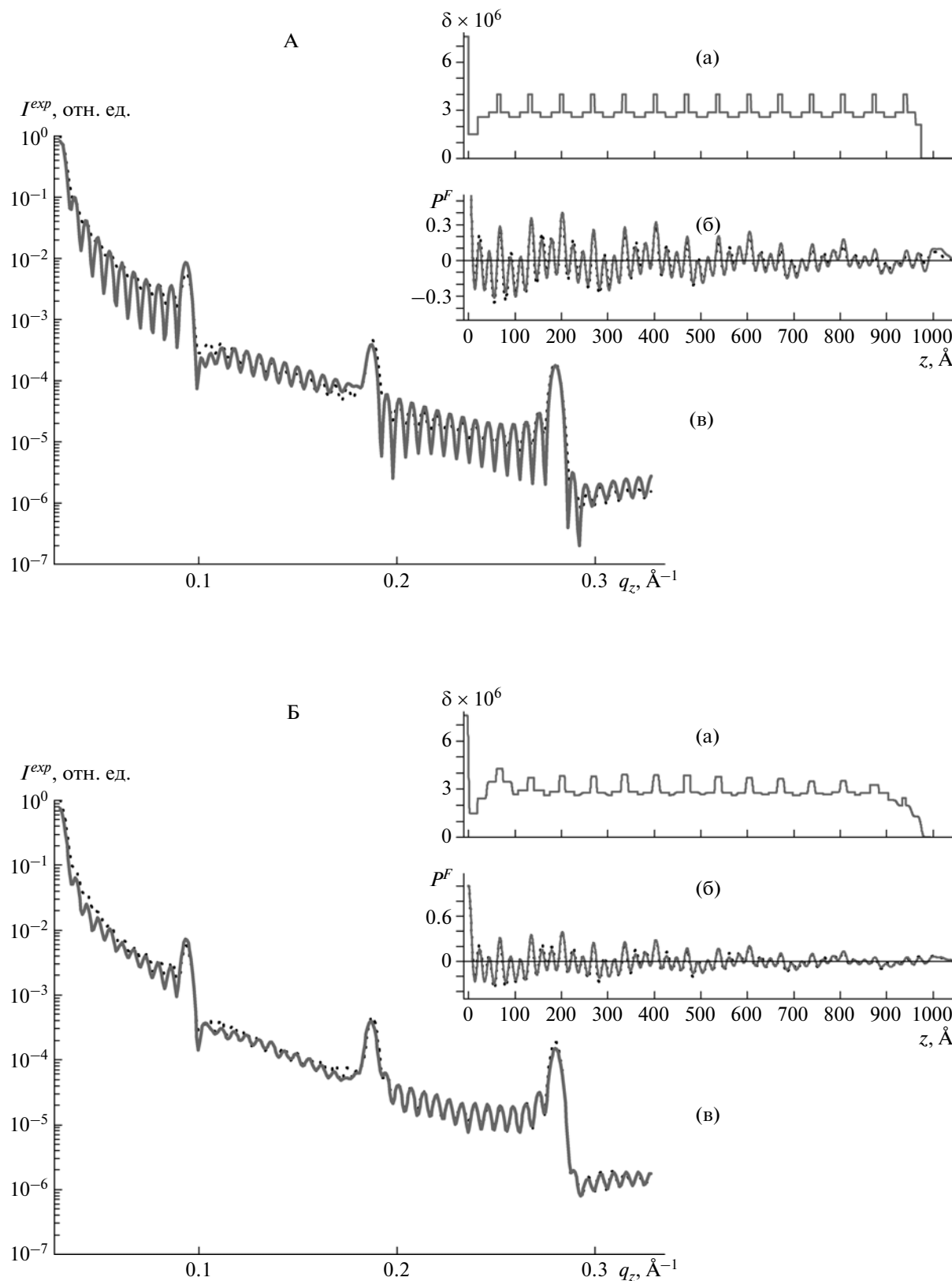
лом выявили общую тенденцию распределения электронной плотности. Причем профиль плотности, найденный для модели со сглаживанием, визуально мало отличался от решения для модели с большим числом варьируемых параметров. Результаты оптимизации для двух наиболее различающихся моделей приведены на рис. 4.

Восстановление профиля плотности несколькими независимыми методами, а также сравнение дифференциальных функций Патерсона, средних плотностей и других структурных параметров моделей позволяет объективно судить о соответствии найденных решений реальной структуре пленки. Выявленные расхождения значений параметров могут указывать на наличие небольших дефектов упаковки как в плоскости, так и вдоль нормали к пленке. Однако можно считать подтвержденными преобладание бислоевой упаковки молекул дендримера в реальной пленке и образование устойчивых молекулярных пар с частичным взаимопроникновением азобензольных групп, приводящих к уменьшению слоевого периода по сравнению с удвоенной длиной молекулы.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренный пример дает наглядное представление об основных шагах обработки рефлектометрических данных и практических задачах, решаемых с помощью BARD. Программный комплекс позволяет исследовать строение тонких многослойных пленок и наноструктур различной природы с помощью набора взаимно увязанных программных инструментов для решения как прямой задачи рефлектометрии (моделирования возможной структурной упаковки для анализа соответствующих интенсивностей зеркального рассеяния на основе априорной информации об образующих пленку молекулах), так и обратной задачи (поиска модели, дающей оптимальное приближение соответствующей расчетной кривой к имеющимся экспериментальным данным). Наличие нескольких минимизационных функционалов (ФНК, ФНМ, ФММ) в сочетании с разными методами минимизации (метод Левенберга—Марквардта, метод симуляции отжига, метод минимизации со сглаживанием) и моделирования интенсивности рассеяния (метод Фурье, метод Парата, матричный метод) позволяет пользователям гибко изменять путь решения в соответствии с особенностями задачи для получения наилучшего приближения модельных кривых к экспериментальным данным. Этому способствует единая стандартизованная система организации входных и выходных данных, позволяющая проводить расчеты в нужной последовательности и контролировать результат на каждом этапе вычислений. Ряд специальных сервисных про-





**Рис. 4.** Результаты восстановления распределения электронной плотности в поперечном сечении пленки, дающие наилучшее соответствие экспериментальной и расчетной рефлектометрических кривых: модель (А) с повторением 14 одинаковых 4-слойных ячеек (10 варьируемых параметров), модель (Б) с тем же количеством слоев, но допускающая независимые вариации плотности каждого слоя, вызванные возможными дефектами упаковки (88 варьируемых параметров): профиль плотности (а), дифференциальные функции Патерсона (б), соответствующие модельной (сплошная линия) и экспериментальной (точки) кривым рассеяния (в).

грамм, входящих в инструментарий программного комплекса (таких, как вычисление дифференциальной функции Патерсона, функции самосвертки и разных типов усредненных значений электронной плотности по нормали к пленке, а также построение одномерных и двумерных сечений целевой функции, поперечного профиля электронной плотности и др.), позволяет получать из экспериментальных данных дополнительную информацию для оценки адекватности получаемых решений и планировать новые методы проведения и анализа эксперимента для образцов однотипных пленок на разных подложках.

Из анализа существующего в настоящее время программного обеспечения можно заключить, что BARD с его функциональным потенциалом займет достойное место среди аналитических инструментов исследования и планирования рефлектометрических экспериментов.

Для расширения знакомства пользователей с особенностями и возможностями программного комплекса BARD в сети Интернет создана страница проекта по адресу: <http://www.crys.ras.ru/~BARD> (в настоящее время страница находится в стадии становления и функционирует в тестовом режиме). В перспективе планируется расширение набора программных инструментов пакета и развитие обратной связи с пользователями для решения возникающих экспериментальных и теоретических задач.

Авторы заинтересованы в развитии сотрудничества с научными коллективами, связанными в своей исследовательской деятельности с нейтронной и рентгеновской рефлектометрией.

Авторы выражают благодарность Б.И. Островскому за предоставление экспериментальных рефлектометрических данных для многослойной пленки дендримеров (рис. 2), использованных для демонстрации работоспособности пакета.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: Иностранная литература, 1950. 572 с.
2. Analysis Programs for Reflectivity Data at the Institut Laue-Langevin. <http://www.ill.eu/html/instruments-support/computing-for-science/cs-software/all-software/ref-analysis/>
3. Software for Neutron Reflection Data Analysis. [http://material.fysik.uu.se/Group\\_members/adrian/reflect.htm](http://material.fysik.uu.se/Group_members/adrian/reflect.htm)
4. Sinha S.K., Sirota E.B., Garoff S., Stanley H.B. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. P. 2297.
5. X-ray and Neutron Reflectivity / Eds. Daillant J., Gibaud A. Springer, 2009. 348 p.
6. Parrat L.G. // Phys. Rev. 1954. V. 95. P. 359.
7. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 720 с.
8. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985. 509 с.
9. Dennis J., Gay D., Welsch R. // ACM Trans. Math Software. 1981. V. 7. P. 348.
10. Kirkpatrick S., Gelatt C.D., Vecchi M.P. // Science. 1983. V. 220. P. 671.
11. Мудров В.И., Кушко В.Л. Методы обработки измерений. М.: Радио и связь, 1983. 303 с.
12. Щедрин Б.М. Математические модели для изучения строения вещества дифракционными методами. Дис. ...д-ра физ.-мат. наук. М.: МГУ, 1991.
13. Математическая энциклопедия / Под. ред. Виноградова И.М. Т. 5. С. 851. М.: Советская энциклопедия, 1984. 1248 с.
14. Астафьев С.Б., Щедрин Б.М., Янусова Л.Г. // Поверхность. Рентген. синхротрон. и нейтр. исслед. 2004. С. 39.
15. Астафьев С.Б., Щедрин Б.М., Янусова Л.Г. // Кристаллография. 2006. Т. 51. С. 133.
16. Астафьев С.Б., Щедрин Б.М., Янусова Л.Г. // Прикладная математика и информатика. М.: МГУ, 2005. № 21. С. 19.
17. Астафьев С.Б., Борисова С.Ф., Щедрин Б.М., Янусова Л.Г. // Кристаллография. 2006. Т. 51. С. 730.
18. Астафьев С.Б., Щедрин Б.М., Янусова Л.Г. // Кристаллография. 2010. Т. 55. С. 134.
19. De Jeu W.H., Komp A., Obraztsov E. et al. // Soft Matter. 2009. V. 5. P. 4922.
20. Лысачков А.И., Островский Б.И., Сульянов С.Н. и др. // VI Нац. конф. РСНЭ-2007. Москва, 12–17 ноября 2007 г. Сб. тезисов. С. 131.