一种处理超光滑表面对软X射线散射问题的标量模型

马文军　龚再仲

摘要：本文根据标量散射理论建立了一种能在 $\sigma/\lambda\approx 1$ 条件下描述较高散射水平的标量散射模型；讨论了这一模型在低散射水平下与矢量散射模型的统一性；并给出了处理超光滑表面对软X射线散射问题所必须的几个实用数学关系。

一、引　　言

研制软X射线反射成像镜头要求在软X射线条件下研究超光滑表面（均方根粗糙度σ在几Å到十几Å）的散射特性以及根据散射测量数据计算表面各参数。这一条件相当于$\sigma/\lambda\approx 1$'其散射水平是较高的。

Elson等应用矢量散射理论讨论了$\sigma/\lambda\ll 1$及$\sigma/\lambda>1$时的散射关系[1]，这类关系用于软X射线散射时必须满足：（1）掠入射条件；（2）较低的散射水平，即散射通量$I_{散}$与镜向反射通量$I_{反}$之比满足：$I_{散}/I_{反}\ll 1$[2]。但后者在很多情况下满足不了上述的散射关系。

Aschenbach 根据标量散射理论给出过一种能描述较高水平散射的关系[2]，由于在结果中出现$\exp[-g]$因子，使之在已知表面状态时能很方便地预言散射分布，但在根据散射分布数据研究表面状态时必须对数学模型进行大量的简化，这势必导致引入一些不合理因素。本文给出的标量散射模型即能够描述 $\sigma/\lambda\approx 1$ 条件下的散射，又避开了对数学模型的简化问题。

二、标量散射模型

1．粗糙表面散射的标量解

我们所研究的表面是均方根高度σ为1nm～10nm数量级，平均表面波长S为μm数量，满足$\sigma/S\ll 1$的条件，由此假设表面是一次平滑的，从而电磁波在表面反射时满足Helmholtz方程和如下边界条件：[3]

$$\left\{\begin{array}{l}(E)_S=(1+R_F)E_1\\ \left(\dfrac{\partial E}{\partial n}\right)_S=(1-R_F)E_1\overrightarrow{k}\cdot\overrightarrow{n}\end{array}\right.\tag{1}$$

式中：E_1是入射光的电场；R_F是表面的Fresnel振幅反射系数。

由此解出远点场的复振幅E_2，略去边缘效应项，并用理想平面反射波的复振幅E_{20}进行规范化，得到散射系数：

$$\rho = \frac{E_2}{E_{20}} = \frac{F}{A}\iint e^{i\vec{v}\cdot\vec{r}_0}dx\,dy \tag{2}$$

式中：$\vec{v}=\vec{k}_入-\vec{k}_反$；$A$是表面上有效反射面积；$\vec{r}_0$如图1所示；$F$是与表面材料，入射光的偏振态及散射几何有关的因子。对于金属样品、S偏振态，在图2所示的散射几何中，F由下式给出：

$$F = \frac{1+\cos\theta_i\cos\theta_s-\sin\theta_i\sin\theta_s\cos\varphi_s}{\cos\theta_i(\cos\theta_i+\cos\theta_s)} \tag{3}$$

这时F只是散射几何的函数。

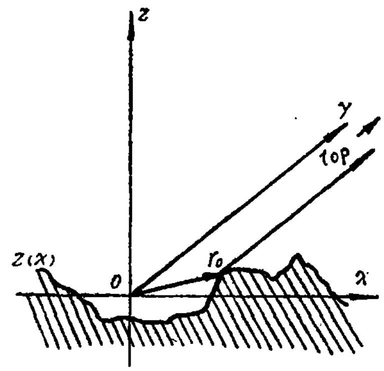

图1　表面统计模型

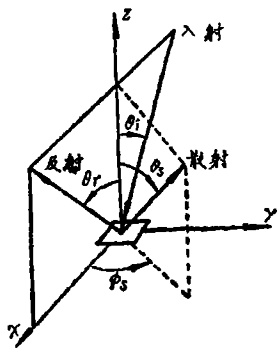

图2　散射几何

2．散射系数的统计处理

抛光后的表面是随机粗糙表面，入射光经这样的表面反射后，其反射光波服从统计规律。由下式对散射系数作系综平均：

$$\langle\rho\rho^*\rangle = \langle\rho\rangle\langle\rho\rangle + D\{\rho\} \tag{4}$$

在高度分布是高斯分布情况下，分别对散射系数ρ取平均值及方差$D\{\rho\}$得到：

$$\langle\rho\rho^*\rangle = \exp[-g]\cdot\frac{2\pi}{A}[2\pi\delta(v_x,\ v_y)+F^2\sum_m\frac{g^m}{m!}\int_0^\infty J_0(r\tau)\cdot C^m(\tau)\cdot\tau d\tau] \tag{5}$$

式中J_0是零阶 Bessel 函数；$C(\tau)$是表面自相关函数；$g=(v_z\sigma)^2$。这一表达式把反射光分解为镜向反射光和散射光两大主要部分。g和$C(\tau)$包含着表面的全部统计性质。

在X射线散射条件下，通常满足$g<1$条件，这时可以通过对适当项级数求和来描述散射，从而关系式（5）建立了表面信息与散射光、反射光的基本关系。

3．归范化

基本关系式（5）所给出的是理想情况下的理论表达式，不能直接用于散射测量，其原因是(1) 理想平面反射波的复振幅及$|E_0|^2$无法得到，(2) 实验测量指出表面散射强度服从瑞利散射规律，散射光强$I_s\propto\frac{1}{\lambda^4}$。因此要用标量散射模型来描述散射分布，必须进行适当的规范化，选择实验上能够实现的规范化因子。

我们选取镜向反射光强作归范化因子。把（5）式第一项对接收器孔径立体角$\Delta\omega$积分，

得到镜向反射光强：

$$I_{sp}=\exp[-g]\cdot\frac{(2\pi)^2}{Ak^2\cos\theta_i} \tag{6}$$

用I_{sp}对（5）式进行规范化，得到散射到立体角$d\omega$内的光强为：

$$\frac{1}{I_{sp}}\left(\frac{dI}{d\omega}\right)_{s,i}=k^2\cos\theta_i\cdot\frac{F^2}{2\pi}\left[\sum_{m=1}^{\infty}\frac{g^m}{m!}\int J_0(r\tau)C^m(\tau)\tau d\tau\right] \tag{7}$$

这就是标量散射模型的数学表述，它给出了相对散射强度的角分布与表面形貌参量之间的关系。由于$F\propto\frac{1}{\lambda}$，上式给出的散射分布正比于$\frac{1}{\lambda^4}$，满足瑞利散射规律。

在$m=1$情况下，我们可以清楚地看到这一模型的物理意义，自相关函数的零阶Besse变换等价于表面形貌函数的傅里叶变换，这表明，具有相同表面频率的表面形貌成份，对同一散射角的相对强度作出贡献，表面粗糙度对散射的角分布起权重调节作用。

4．标量与矢量散射关系的统一性

标量散射关系和矢量散射关系是由不同的理论出发．对同一物理问题进行的描述，因此探讨其统一性很有必要。首先在光滑极限下化简标量关系：

$$\frac{1}{I_{sp}}\left(\frac{dI}{d\omega}\right)_s=k^2\cos\theta_i\cdot F^2\cdot v_z^2\cdot W(r) \tag{8}$$

其中：$W(r)$是表面两维功率谱密度；

$$\begin{cases}r^2=p^2+q^2\\ p=k(\sin\theta_s\cdot\cos\varphi_s-\sin\theta_i)\\ q=k(\sin\theta_s\cdot\sin\varphi_s)\end{cases} \tag{9}$$

对于金属样品，S偏振，入射面内的散射光，有：

$$\frac{1}{I_{sp}}\left(\frac{dI}{d\omega}\right)_s=k^4\frac{\cos\theta_i[1+\cos(\theta_i+\theta_s)]^2}{\cos^2\theta_i}W(r) \tag{10}$$

在光滑极限下，矢量散射关系为：

$$\frac{1}{I_iQ}\left(\frac{dI}{d\omega}\right)_s=4k^4\cos\theta_i\cos\theta_s W(r) \tag{11}$$

由于光学量级的粗糙度引起的散射主要集中在小角，与之对应，引入小角条件：

$\theta_i\approx\theta_s$

我们在此条件下探讨其统一性，这时标量散射关系为：

$$\frac{1}{I_{sp}}\left(\frac{dI}{d\omega}\right)=4k^4\cos^3\theta_i W(r) \tag{12}$$

矢量散射关系为：

$$\frac{1}{I_iQ}\left(\frac{dI}{d\omega}\right)_s=4k^4\cos^3\theta_i W(r) \tag{13}$$

由于在小角散射条件下$Q\approx R_p(\theta_i)$在不考虑逆反射情况下，有$I_iQ\approx I_{sp}$，说明矢量散射模型和标量散射模型在小角散射极限下具有统一性。

5. 掠入射软X射线条件下的标量散射关系

通常，物质对X射线的折射率都小于1，在掠入射条件下，物质表面对入射X射线发生全反射，因此，软X射线反射镜多设计在掠入射条件下工作。作为标量散射理论的主要应用，本文推导了掠入射软X射线散射条件下的标量散射关系。由掠入射条件，使用X射线散射的习惯几何表示法，引入

$$\begin{cases} \alpha = \frac{\pi}{2} - \theta_i \\ \varphi = \theta_s - \theta_i \\ \gamma = \varphi_s \end{cases} \tag{14}$$

则（7）式化为：

$$\frac{1}{I_{sp}}\left(\frac{dI}{d\omega}\right)_s = \frac{2\pi}{\lambda^2} \cdot \alpha F^2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{g^m}{m!} \int_0^{\infty} J_0(r\tau) C^m(\tau) \tau d\tau \tag{15}$$

式中： $F = 1 + \frac{\varphi}{2\alpha} + \frac{\gamma^2}{4\alpha^2 + 2\alpha\varphi}$

$r = k\sqrt{\varphi^2\alpha^2 + \gamma^2}$

在一维情况下，由（15）式对γ积分，得：

$$\frac{1}{I_{sp}}\left(\frac{dI}{d\theta}\right)_s = \frac{2F\alpha}{\lambda} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{g^m}{m!} \int_0^{\infty} \cos(\tau\varphi\alpha k) C^m(\tau) \tau d\tau \tag{16}$$

(15)(16) 两式分别给出了两维和一维X射线散射分布与表面特征参量之间的关系。

在抛光表面中普遍存在着高斯型和指数型自相关函数，对于高斯型自相关函数，散射光分布为：

$$I_{st} = \frac{2F^2\alpha}{\lambda} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{g^m}{m!\sqrt{m}} \exp\left[-\left(\frac{\varphi}{\theta_m}\right)^2\right] \tag{17}$$

其中： $\theta_m = \frac{2\sqrt{m}}{Tk\alpha}$

对于指数型自相关函数，散射光分布为：

$$I_{st} = \frac{2F^2\alpha}{\lambda} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{g^m}{m!\,m} \frac{1}{1 + \left(\frac{\varphi}{\theta_m}\right)^2} \tag{18}$$

其中： $\theta_m = \frac{m}{kT\alpha}$

在已知表面统计参数的情况下，由（17）(18）两式可以很方便地预言散射分布；反之，由测量散射分布来计算表面形貌参量时，也要由这两个关系式来估计带宽极限对散射测量的影响。

三、结 束 语

本文虽然是根据散射测量的需要，得出的 $\sigma/\lambda \approx 1$ 条件下的散射关系，但在推导基本关系式的过程中并没有对波长λ引入限制，并且在 $\sigma/\lambda \ll 1$的低散射条件下讨论了与矢量散射关系的统一性，因此本文得到的标量散射模型的基本关系也适用于可见光条件下超光滑表面的散射。

参考文献

[1] J.M.Elson, J.M.Bennett; Opt.Eng., 1979, 18, No.2(Mar.), 116—124.
[2] B.Aschenbach, H.Bräuninger, A.Ondrusch, P.Predehl; SPIE, 1981, 316, 187—193.
[3] Beckmann; «The Scattering of Electromagnetic Waves from Rough Surface», Pergamon Press 1963 17—28.

A Scalar Model for Soft X-ray Scattering from Supersmoothed Surface

Ma Wenjun Gong Zaizhong

Abstract

A scalar model which can describe high level scattering was set up by scalar scattering theory under the condition of $\sigma/\lambda \doteq 1$. The unity between the scalar and the vector relation was discussed on the lower scattering level and some applicable relations for soft X-ray scattering from supersmoothed surface were presented.