Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное Агентство по образованию Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования

РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ГИДРОМЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

(РГГМУ)

УДК 551.467.3 Номер гос. регистрации Инв. № УТВЕРЖДАЮ Проректор по НР В.Н.Воробьев _____2006 г.

О Т Ч Е Т О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

Физико-химические аспекты мониторинга природной среды

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЗЕРКАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ В МАГНИТНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ

(промежуточный)

Шифр: госбюджетный

Зав. кафедрой, научный руководитель канд. физ.-мат.наук

А.П.Бобровский 2006 г.

Санкт-Петербург 2006

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Научный руководитель, доцент, канд.физмат.наук,	А.П.Бобровский (1-3)
Доцент, канд.физмат.наук	В.Г.Сыромятников (1-3)
Профессор, докт.физмат.наук	А.В.Логинов (1-3)
Профессор, докт.физмат.наук	В.И.Биненко (1-3)
Доцент, канд.физмат.наук	Т.Ю.Яковлева (1-3)
Доцент, канд.физмат.наук	А.Л.Скобликова (1-3)
Доцент, канд.физмат.наук	Н.В.Дьяченко (1-3)
Доцент, канд.физмат.наук	И.П.Арешев (1-3)
Доцент, канд.тех.наук	М.М.Белов (1-3)
Доцент, канд.физмат.наук	М.А.Мамаев (1-3)
Доцент, канд.физмат.наук	А.В.Бармасов (1-3)
Доцент, канд.физмат.наук	Т.К.Крутицкая (1-3)
Старший преподаватель	В.В.Косцов (1-3)
Старший преподаватель	А.М.Бармасова (1-3)
Нормоконтролер, ведущий инженер	В.Н.Тимофеева

$P \to \Phi \to P \to T$

Промежуточный отчет 52 с., 30 рис., 26 источников.

НЕЗЕРКАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ, МАГНИТНЫЕ МНОГОСЛОЙНЫЕ СТРУКТУРЫ, БОРНОВСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ИСКАЖЕННЫХ ВОЛН

Обнаружен эффект когерентного усиления незеркального рассеяния поляризованных нейтронов на конформно коррелированных шероховатостях межслойных границ в магнитных (периодических) Co/Ti, Fe/Al и Fe/Ge (и апериодических (Fe/Al)) многослойных структурах.

Для одной из спиновых компонент пучка наблюдались экстремумы на квазибрэгговских полосах незеркального рассеяния поляризованных нейтронов в периодических НПММС 60Fe/Al и 60Co/Ti. При этом, для образца 60Co/Ti, на полосе 2-го порядка обнаружены максимумы, превышающие по интенсивности соответствующий зеркальный пик, в то время как на полосе 3-го порядка обнаружены минимумы. Проведен детальный анализ двумерного распределения интенсивности незеркального рассеяния поляризованных нейтронов для обеих спиновых компонент как функции углов скольжения для падающей и рассеянной нейтронных волн, или поперечной и латеральной компонент переданного импульса. Установлены условия возникновения обнаруженных экстремумов, объяснена их природа и их изменение с магнитным полем.

В рамках Борновского Приближения Искаженных Волн проведено количественное описание экспериментальных данных по незеркальному рассеянию поляризованных нейтронов на периодической структуре 60Co/Ti. Параметры структуры и неидеальности, полученные при фитировании экспериментальных данных по 60Co/Ti и используемые в вычислениях при построении модельных кривых и контурной карты следующие: плотности длин рассеяния Nb (в 10⁻⁶ Å -²): $Nb^{+}(Co) = 6.48$, $Nb^{-}(Co) = -1.94$, Nb(Ti) = -1.94; толщины слоев: a(Co) = 94 Å, a(Ti) = 91 Å, *r.m.s.* шероховатость $\sigma = 20 \text{ Å}$, экспонента шероховатости h = 0.5. В вычислениях было принято, что шероховатости конформно коррелированы на всех межслойных границах, т.е. глубина конформности $\xi_{t} = \infty$.

СОДЕРЖАНИЕ

Стр.
ВВЕДЕНИЕ
1. ЗЕРКАЛЬНОЕ ОТРАЖЕНИЕ И НЕЗЕРКАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ,
СИНХРОННОГО И РЕНТРЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ИСКУССТВЕННЫХ
МНОГОСЛОЙНЫХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУРАХ
1.1. Полное внешнее отражение и преломление нейтронов на границе среды и вакуума 7
1.2. Отражение нейтронов от многослойной тонкопленочной структуры
1.3. Рассеяние нейтронного, рентгеновского и синхротронного излучений на
неидеальных межслойных границах в многослойных тонкопленочных структурах 20
2. ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЗЕРКАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ
НЕИТРОНОВ НА НЕИДЕАЛЬНЫХ МЕЖСЛОИНЫХ ГРАНИЦАХ В МНОГОСЛОИНЫХ
МАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ
2.1. Исследования на ТОREMA II
2.2. Исследования на EROS и ADAM
2.3. Обсуждение экспериментальных результатов
ЗАКЛЮЧЕНИЕ
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ
.50
ПРИЛОЖЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Искусственные Многослойные Тонкопленочные Структуры (ИМТС) нашли широкое применение в различных областях науки и техники. Дальнейший прогресс в технологии их изготовления и расширения области их применения связан с разработкой новых ИМТС и всесторонним изучением их свойств. Это подтверждается значительным ростом числа публикаций и проведением нескольких ежегодных международных научных конференций, посвященных проблемам физики ИМТС.

В нейтронной физике ИМТС используются в виде нейтронных монохроматоров (периодическая структура ИМТС) и суперзеркал (апериодическая структура ИМТС) в разнообразных нейтронно-оптических устройствах, без которых немыслим современный нейтронно-физический эксперимент. Особую роль в такого рода экспериментах играют поляризованные нейтроны, с помощью которых можно проводить исследования магнитной структуры образца, используя уникальное свойство нейтрона - наличие у него магнитного момента.

Нейтронные пучки тепловых и холодных нейтронов поляризуют, в основном, методом зеркального отражения [1, 2] под малыми углами от специальных Нейтронных Магнитных ИМТС.

Физические свойства реальных ИМТС в значительной мере зависят от степени их совершенства: однородности слоев, степени идеальности межслойных границ и т.д. Одним из основных факторов, ограничивающих эффективность применения многослойных тонкопленочных структур является шероховатость межслойных границ этих структур. Шероховатости всегда присутствуют в той или иной мере во всех многослойных структурах. Наличие шероховатостей приводит к ослаблению зеркального отражения и возникновению рассеяния в незеркальных направлениях, падающего на исследованные структуры излучения. Например, для пиков высоких порядков брэгговского отражения интенсивность диффузного рассеяния может превышать интенсивность самих зеркальных пиков. Поэтому исследование природы шероховатостей и их корреляций между границами слоев с помощью незеркального рассеяния рентгеновского, синхротронного и нейтронного излучений представляют практический и фундаментальный интерес.

Из богатого спектра экспериментальных методик, используемых для изучения монослоев и ИМТС, особый интерес представляет использование процессов зеркального отражения и незеркального рассеяния рентгеновского, синхротронного и нейтронного излучений, которые обеспечивают возможность детального изучения структуры в ее глубину без разрушения.

При этом рефлектометрия поляризованных нейтронов широко используется для того, чтобы характеризовать зависимость от глубины магнитную и ядерную плотности тонких пленок и ИМТС. Однако, данных по зеркальной рефлектометрии недостаточно для получения полной информации о латеральных характеристиках слоев (флуктуации плотности, состава, намагниченности и т.п.) и межслойных границ (корреляции шероховатостей, ступеньки роста и т.п.). Такая информация абсолютно необходима для понимания физики процессов формирования поверхностей и межслойных границ, развития флуктуаций в слоистых структурах при фазовых переходах, электронных и магнитных свойств искусственных сверхструктур и т.д., а также при использовании и совершенствовании ИМТС.

Исследования процесса незеркального рассеяния рентгеновского, синхротронного и нейтронного излучений весьма актуальны, т.к. позволяют необходимую получить информацию И определить фундаментальные характеристики состояния поверхностей монослоев и межслойных границ ИМТС (среднеквадратичная величина шероховатости, корреляционные параметры, степень конформности и диффузного размытия), их зависимости от внешних параметров и процедуры приготовления.

Известен ряд работ, посвященных этой теме. Однако, основная масса работ посвящена исследованиям с использованием рентгеновского и синхротронного изучений. Это связано, в основном, с существенно меньшей интенсивностью нейтронных пучков по сравнению с рентгеновскими и тем более с синхротронными пучками. Тем не менее, исследования с нейтронами, в особенности с поляризованными, позволяют получить дополнительную информацию как о магнитной структуре образца, так и о степени её корреляций со структурой ядерной подсистемы.

Особый интерес представляет исследование так называемых динамических эффектов рассеяния поляризованных нейтронов на ИМТС, которые приводят к различным интерференционным явлениям, наблюдаемым при резонансном усилении квазибрэгговского рассеяния. Это совершенно не изученная с помощью поляризованных нейтронов область. Динамические эффекты приводят к появлению богатой тонкой структуры в распределении диффузного рассеяния, которая чувствительна к особенностям неидеального образца.

Изучение незеркального рассеяния представляет большой интерес как с точки зрения фундаментальной науки, так и с точки зрения методической при использовании нейтронно-оптических элементов. Знание картины распределения интенсивности незеркального (диффузного) рассеяния нейтронного пучка на реальных многослойных структурах, используемых в нейтронно-физических установках в качестве нейтронно-оптических элементов позволит, в частности, оценить распределение этой интенсивности, являющейся фоновой интенсивностью в данной установке и провести комплекс мероприятий по уменьшению уровня фона на основе знания этого распределения.

Исследование незеркального рассеяния поднимает на качественно новый уровень исследования ИМТС существенно дополняя информацию, полученную при изучении зеркального отражения ИМТС. В некоторых случаях игнорирование незеркального рассеяния может привести к грубым ошибкам в интерпретации экспериментальных данных.

1. ЗЕРКАЛЬНОЕ ОТРАЖЕНИЕ И НЕЗЕРКАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ, СИНХРОННОГО И РЕНТРЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ИСКУССТВЕННЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУРАХ

1.1. Полное внешнее отражение и преломление нейтронов на границе среды и вакуума

Как известно [3], волновая функция $\Psi(\vec{r})$, которая описывает поведение нейтрона, удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_n}\Delta + \upsilon(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

(1.1)

где *^m* _{*ⁿ*} – масса нейтрона,

 $\hbar = h/2 \cdot \pi$, h – постоянная Планка,

Е – энергия нейтрона в вакууме,

$$E = \frac{(\hbar \cdot k)^2}{2 \cdot m_n} = \frac{2 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2}{m_n \cdot \lambda^2}, \qquad (1.2)$$

 λ - длина волны нейтрона,

v (*r*) – эффективный потенциал взаимодействия нейтрона со средой.

Для однородной среды потенциал имеет вид:

$$\upsilon(\vec{r}) = \upsilon_0 = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2}{m_n} \cdot \rho \cdot b_c \tag{1.3}$$

где *Р b* _с – плотность длины когерентного ядерного рассеяния среды,

ρ – плотность среды (концентрация ядер),

b _с – длина когерентного ядерного рассеяния для данной среды.

Если среда магнитная, то необходимо также учесть взаимодействие между магнитным моментом нейтрона $\vec{\mu}_n$ и магнитной индукцией среды $\vec{B}(\vec{r})$.

Потенциал взаимодействия $V_{M}(\vec{r})$ магнитного момента нейтрона с магнитной индукцией среды $B(\vec{r})$ [2, 3]:

$$\mathcal{W} = \begin{array}{c} \mathcal{W} \stackrel{}{\xrightarrow{}} \mathcal{H} \stackrel{}{\xrightarrow{}} \mathcal{W} \\ \stackrel{}{\xrightarrow{}} \mathcal{H} \stackrel{}{\xrightarrow{}} \mathcal{H} \\ \mathcal{H} \stackrel{}{\xrightarrow{}} \mathcal{H} \\ \mathcal{H} \\$$

Магнитный момент нейтрона записывается как:

 $\vec{\mu}_{n} = \gamma \cdot \beta_{n} \cdot \vec{\sigma}$ где $\beta_{n} = 5.051 \cdot 10^{-27} a \cdot m^{2}$ - ядерный магнетон, $\gamma = -1.913$ – гиромагнитное отношение, $\vec{\sigma}$ - вектор матриц Паули,
(1.5)

 $\vec{\sigma} = 2 \cdot \vec{s}$

 \vec{s} - векторный оператор спина нейтрона (спин нейтрона, как известно, равен $\frac{1}{2}$),

компоненты вектора матриц Паули:

$$\sigma_{z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \sigma_{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_{y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$
(1.6)

Распространение нейтрона, как в свободном пространстве, так и в области его взаимодействия с однородным потенциалом, описывается плоской волной. На границе между вакуумом и средой нейтронная волна преломляется. По аналогии с геометрической оптикой показатель преломления нейтронной волны, падающей на границу немагнитной среды с вакуумом, (см. Рис.1.1) определяется как [2, 3]:

$$n = \frac{k_1}{k} = \left(1 - \frac{\nu_0}{E}\right)^{\frac{1}{2}}$$
(1.7)

где k_{\perp} – волновое число прошедшей в среду нейтронной волны,

k - волновое число нейтронной волны в вакууме,

 $k = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda}$ и λ – длина волны нейтрона. При *n* << 1, из (1.2) и (1.7) получим:

$$n \approx 1 - \frac{V_0}{2E} \approx 1 - \frac{\lambda^2}{2 \cdot \pi} \cdot \rho \cdot b_c$$
(1.8)

При движении нейтронной волны из среды 1 в среду 2 на границе раздела этих сред волна также будет испытывать преломление, определяемое относительным показателем преломления $n_{1,2}$:

$$n_{1,2} = \frac{n_2}{n_1} \cong 1 - \frac{\lambda^2}{2 \cdot \pi} \cdot \left[\rho^{(2)} \cdot b_c^{(2)} - \rho^{(1)} \cdot b_c^{(1)}\right]$$
(1.9)

где n_1 и n_2 - показатели преломления сред 1 и 2, соответственно,

ρ⁽¹⁾ и ρ⁽²⁾ - концентрация ядер 1-ой и 2-ой среды, соответственно,

 $b_c^{(1)}$ и $b_c^{(2)}$ - длины когерентного ядерного рассеяния 1-ой и 2-ой среды, соответственно.

Для нейтронов, как и для света, справедлив закон Снеллиуса, описывающий преломление нейтронной волны, падающей из вакуума под углом скольжения α (см. Рис.1.1) на плоскую границу среды, имеющей показатель преломления *n*:

$$n = \frac{\cos \alpha}{\cos \beta} \tag{1.10}$$

где ^{*β*} - угол скольжения преломленной волны.



Рис.1.1. Отражение и преломление нейтронной волны на плоской границе вакуума и среды.

Из уравнений (1.7) и (1.10) следует, что при падении нейтронного пучка из вакуума на поверхность среды с $b_c > 0$ при малых углах скольжения меньших некоторого критического угла α_{sp} должно наблюдаться полное внешнее отражение нейтронов. Это явление аналогично известному в оптике явлению полного внутреннего отражения.

При заданной длине волны критический угол характеризует среду и определяется из закона Снеллиуса (1.7), в котором следует положить $\beta = 0$. Тогда для границы вакуум-среда $\sin \alpha_{sp} = \sqrt{1 - n^2} = V_0 / E$, и при $n \ll 1$, имеем:

$$\alpha_{\kappa p} \approx \sqrt{2(1-n)} \approx \lambda \cdot \sqrt{\frac{\rho \cdot b_c}{\pi}}$$
(1.11)

Для нейтронов, например, с $\lambda = 4 \text{ Å}$, для большинства материалов с $b_c > 0$ имеем $(1 - n) = (0.2 \div 3.2) \cdot 10^{-5}$, т.е. *п* слегка меньше единицы. Критический угол обычно весьма мал и, например, для тепловых нейтронов с $\lambda = 1 \text{ Å}$ $\alpha_{sp} = 0.5 \div 2.05$ мрад.

Часто вместо α_{sp} употребляется производная от α_{sp} <u>по длине волны</u>. Эта величина, т.е. граничная длина волны λ_{sp} , определяется как:

$$\lambda_{zp} = \frac{\lambda}{\alpha_{xp}} = \sqrt{\frac{\pi}{\rho \cdot b_c}}$$
(1.12)

Показатель преломления тогда записывается проще

$$n \approx 1 - \frac{\lambda^2}{2 \cdot \lambda_{ep}^2} \tag{1.13}$$

Для большинства материалов с $b_c > 0$ граничная длина волны равна $\lambda_{qp} = 488 \div 2000 \text{ Å}$, и нейтроны с $\lambda > \lambda_{qp}$ испытывают полное отражение при любом угле скольжения к поверхности.

Если среда магнитная, то необходимо учесть взаимодействие между магнитным моментом нейтрона и магнитной индукцией среды. Показатель преломления для однородно намагниченной среды, когда вектор индукции параллелен границе раздела вакуума и среды, будет выглядеть так:

$$n_{\pm} \approx 1 - \lambda^2 \cdot \left[\frac{\rho \cdot b_c}{2 \cdot \pi} \pm \frac{m_n}{4 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2} \cdot \mu_n \cdot B\right] = 1 - \frac{\lambda^2 \cdot \rho}{2 \cdot \pi} \cdot \left[b_c \pm p_m\right]$$
(1.14)

где μ_n и m_n - магнитный момент и масса нейтрона, соответственно, *B* – магнитная индукция среды,

$$p_m$$
 - длина магнитного рассеяния, $p_m = \frac{m_n \cdot \mu_n \cdot B}{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \rho}$.

знак «+» соответствует параллельной ориентации спина нейтрона и вектора магнитной индукции среды, а знак «-» – антипараллельной ориентации этих векторов.

Относительный показатель преломления для границы раздела двух сред, описываемый (1.9), в случае, если среда 1 немагнитная, а среда 2 магнитная, можно записать, используя (1.14):

$$n_{1,2} = \frac{n_2}{n_1} \cong 1 - \frac{\lambda^2}{2 \cdot \pi} \cdot [\rho^{(2)} \cdot b_c^{(2)} - \rho^{(1)} \cdot b_c^{(1)} \pm \frac{m_n}{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2} \cdot \mu_n \cdot B]$$
(1.15)

Рассмотрим подробнее процесс отражения и преломления нейтронной волны на идеально плоской границе вакуума с однородной средой. Этот процесс изображен на Рис.1.1. Нейтронная волна с волновым вектором \vec{k} под углом скольжения α падает из вакуума на плоскую границу однородной среды. При этом отражающий потенциал $v(\vec{r}) = v(z)$ зависит лишь от координаты z, направленной вдоль нормали к отражающей плоскости: $v(z) = v_0$ при z > 0, и v(z) = 0 при z < 0. Полагаем (без ущерба общности), что вектор \vec{k} находится в плоскости (z, x), т.е. $k_y = 0$. В силу однородности границы среды латеральные компоненты волновых векторов падающей k_x , отраженной $k_x^{"}$ и преломленной $k_x^{'}$ волн не меняются в этом процессе и решение уравнения (1.1) записывается в виде произведения $\Psi(\vec{r}) = \Psi(z)\Psi(x)$, где $\Psi(x) = \exp(ik_x x)$, а $\Psi(z)$ подчиняется одномерному уравнению Шредингера. Волновую функцию $\Psi(z)$ можно записать в этом случае так:

В силу непрерывности волновой функции и ее производной на границе среды получим [4]:

$$\begin{cases} 1+r=t \\ \frac{k_z}{1-r}=\frac{k_z}{k_z} \cdot t \\ k_z \end{cases}$$
(1.17)

Отсюда легко извлечь r и t:

$$r = \frac{k_z - k'_z}{k_z + k'_z} \qquad t = \frac{2 \cdot k_z}{k_z + k'_z}$$
(1.18)

Зная выражение для показателя преломления n (1.8) можно переписать выражение для r и t через n:

$$r = \frac{k \cdot \sin \alpha - k \cdot \sqrt{n^2 - \cos^2 \alpha}}{k \cdot \sin \alpha + k \cdot \sqrt{n^2 - \cos^2 \alpha}} = \frac{\sin \alpha - \sqrt{n^2 - \cos^2 \alpha}}{\sin \alpha + \sqrt{n^2 - \cos^2 \alpha}} = \frac{\sin \alpha - n \cdot \sin \beta}{\sin \alpha + n \cdot \sin \beta}$$
(1.19)

$$t = \frac{2 \cdot k \cdot \sin \alpha}{k \cdot \sin \alpha + k \cdot \sqrt{n^2 - \cos^2 \alpha}} = \frac{2 \cdot \sin \alpha}{\sin \alpha + \sqrt{n^2 - \cos^2 \alpha}} = \frac{2 \cdot \sin \alpha}{\sin \alpha + n \cdot \sin \beta}$$
(1.20)

Коэффициенты r и t – нейтронные аналоги коэффициентов Френеля в обычной оптике [5].

Коэффициент отражения нейтронной волны от среды *R* определяется как отношение плотности отраженного потока к падающему [4] или

$$R = \left| r \right|^2$$

(1.21)

Коэффициент прохождения *Т* в свою очередь определяется как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей

$$T = \frac{k_z'}{k_z} \cdot \left| t \right|^2$$

(1.22) Кроме того, в силу закона сохранения числа нейтронов

$$R + T = 1 \tag{1.23}$$

Рассмотрим выражение (1.21) для *R*. Когда $\cos^2 \alpha > n^2$ числитель и знаменатель становятся комплексными и *R* = 1. Когда $\cos^2 \alpha < n^2$, то *R* < 1. Таким образом, при углах α меньших $\alpha_{sp} \approx \sqrt{2 \cdot (1-n)}$ имеется область полного отражения, где *R* = 1. (Снова отметим, что эта область имеется только для материалов, у которых $b_c > 0$). В связи с этим можно говорить о полном отражении нейтронов и о нейтронных зеркалах – тех образцах, на которых наблюдается это явление. Как выше отмечалось, что явление полного внешнего отражения нейтронов аналогично известному в обычной оптике явлению полного внутреннего отражения. При $\alpha > \alpha_{sp}$ *R* быстро уменьшается с ростом α в соответствии с формулой (1.21). α_{sp} – критический угол полного внешнего отражения. Он определяется выражением (1.11).

На Рис.1.2 представлены коэффициенты отражения, определенные из (1.19) и (1.21), для случаев, когда $b_c > 0$ и когда $b_c < 0$ в зависимости от параметра $\frac{\alpha}{\alpha}$.



Рис.1.2. Коэффициент отражения нейтронной волны на границе вакуума и среды в зависимости от параметра $\frac{\alpha}{\alpha_{sp}}$, где α - угол скольжения падающей нейтронной волны, α_{sp} - критический угол полного внешнего отражения для данной среды. Среда характеризуется плотностью длины когерентного ядерного рассеяния b_c .

Для магнитных сред выражение для критического угла получается из (1.11) и (1.14):

$$\alpha_{\kappa p}^{\pm} \approx \lambda \cdot \sqrt{\frac{\rho \cdot b_c}{\pi} \pm \frac{m_n}{2 \cdot \pi^2 \cdot \hbar^2} \cdot \mu_n \cdot B}$$
(1.24)

Знак «+» соответствует параллельной ориентации спина нейтрона и вектора индукции среды, а знак «-» соответствует антипараллельной ориентации этих векторов. Здесь вектор магнитной индукции среды направлен вдоль границы раздела среды и вакуума. (Фактически, поле вне образца считается равным нулю. В

более общем случае, в формулу (1.24) вместо индукции В должна входить разность между её значениями внутри и вне образца.)

Как следует из (1.24) для намагниченной среды имеются два критических угла α_{sp}^{+} и α_{sp}^{-} и два соответствующих коэффициента отражения $R^{+}\left(\frac{\alpha}{\alpha_{sp}^{+}}\right)$ и $R^{-}\left(\frac{\alpha}{\alpha_{sp}^{-}}\right)$, определенных выражениями (1.19) и (1.21). Это позволяет использовать намагниченную среду для поляризации нейтронных пучков. Степень поляризации нейтронного пучка *P* определяется как [1]:

$$P = \frac{I_{+} - I_{-}}{I_{+} + I_{-}}$$

(1.25)

где *I*₊ - число нейтронов в пучке с проекциями спинов параллельных выделенному направлению в пространстве,

I₋ - число нейтронов в пучке с проекциями спинов антипараллельных этому выделенному направлению.

Пучок считается поляризованным, если *P* отлично от нуля. Если на намагниченную среду падает неполяризованный нейтронный пучок с интенсивностью *I*₀, то легко получить выражение для степени поляризации отраженного пучка:

$$P = \frac{\frac{I_0}{2} \cdot R^+ - \frac{I_0}{2} \cdot R^-}{\frac{I_0}{2} \cdot R^+ + \frac{I_0}{2} \cdot R^-} = \frac{R^+ - R^-}{R^+ + R^-}$$
(1.26)

Действительно, подобрав состав среды (магнитного зеркала) таким образом, чтобы ядерная и магнитная части потенциала были бы равны друг другу по абсолютной величине, тогда нейтроны со спином по полю будут отражаться, т.е. при этом $n^+ < 1$ и $R^+ \neq 0$, а нейтроны с антипараллельным направлением спина, вообще, не будут отражаться, т.к. при этом $n^- = 1$ и, соответственно, $R^- = 0$ из (1.19) и (1.21).

Эта идея была успешно реализована в ПИЯФ в 1975 году на высокоэффективных магнитных нейтронных зеркалах, представляющих собой поляризующее покрытие CoFe с антиотражающим подслоем TiGd, нанесенные на полированное стекло.

Явление полного внешнего отражения, несмотря на малость критических углов α_{sp} , с успехом используется в нейтроноводах – устройствах для транспортировки потоков нейтронов от исследовательского ядерного реактора к нейтроннофизической установке. В качестве нейтронных зеркал используются тонкие пленки Ni и ⁵⁸ Ni, нанесенные на полированные стеклянные подложки. Изотоп никеля - ⁵⁸ Ni имеет максимальный критический угол из всех элементов и их стабильных изотопов, $\alpha_{sp}^{ss Ni} = 2.05$ мрад/ Å.

В последнее время в нейтронно-физическом эксперименте стали активно использоваться суперзеркала - усовершенствованные нейтронные зеркала, имеющие критические углы, в 2 раза и более превышающие критический угол для зеркал с природным никелем, имеющего критический угол $\alpha_{\kappa p}^{n_{Ni}} = 1.73$ мрад/ \mathring{A} . Величины критических углов суперзеркал $\alpha_{\kappa p M}$ определяются относительным параметром *m*,

где
$$m = \frac{\alpha_{\kappa pSM}}{\alpha_{\kappa p^n Ni}}$$
.

1.2. Отражение нейтронов от многослойной тонкопленочной структуры.

Рассмотрим гипотетическую многослойную структуру произвольного вида, состоящую из набора N однородных идеальных слоев на подложке. Каждый *m*-ый слой из этого набора характеризуется толщиной d_m и потенциалом V_m или соответствующим критическим углом α_{xpm} (см. Рис.1.3).

Распределение потенциала внутри данной структуры вдоль координаты z, направленной перпендикулярно плоскости слоев вглубь структуры показано на Рис.1.4. Координата z_m , где m = 1,2... определяет границы слоев. d_m - толщина m-го слоя, определяется как $d_m = z_m - z_{m-1}$.



Рис.1.3. Поперечный разрез многослойной структуры произвольного вида.



Рис.1.4. Распределение потенциала V в произвольной многослойной структуре, состоящей из N однородных идеальных слоев на подложке в зависимости от координаты z, направленной перпендикулярно поверхности слоев вглубь структуры. z_{m-1} и z_m - координаты границ *m*-го слоя, d_m - толщина *m*-го слоя, $d_m = z_m - z_{m-1}$ где m = 1, 2... N, p_0 и p_s - нормальные компоненты волнового вектора в вакууме и подложке, соответственно.

Пусть коллимированный монохроматический пучок тепловых или холодных нейтронов с волновым вектором \vec{k}_0 падает из вакуума под малым углом α на данную структуру, как показано на Рис.1.3. Падающий пучок будет частично отражаться и преломляться на границе каждого *m*-го слоя, согласно критическому углу α_{xpm} этого слоя.

Различные отраженные волны будут интерферировать друг с другом, что приведет к возникновению максимумов и минимумов в зависимости от угла α . Для того, чтобы понять эту сложную зависимость можно представить рассматриваемую многослойную структуру в виде одномерного потенциала V(z), изображенного на Рис.1.4 и решить, как это сделано в [6, 7] уравнение Шредингера (1.1) относительно нормальной к поверхности слоев компоненты $\Psi(z, p_0)$ волновой функции $\Psi(\vec{r}, \vec{k}_0)$, где $p_0 = k_0 \cdot \sin \alpha$ - нормальная компонента волнового вектора \vec{k}_0 падающих на образец нейтронов.

Нормальная компонента волнового вектора в *m*-м слое *p*_m с учетом поглощения и рефракции выглядит как

$$p_{m} = \sqrt{p_{0}^{2} - p_{xpm}^{2} + i \cdot \delta_{m}}$$

$$= \alpha \cdot \sin \alpha$$
(1.27)

где $p_{\kappa pm} = \alpha \cdot \sin \alpha_{\kappa pm}$,

 δ_m - величина, определяющая поглощение нейтронов в *m*-м слое.

Решение уравнения Шредингера ищется в каждом слое в виде суперпозиции плоских волн с волновыми векторами, нормальными к поверхности [8]:

$$\Psi_0(z) = \exp(i \cdot p_0 \cdot z) + R \cdot \exp(-i \cdot p_0 \cdot z) \qquad z \le 0$$
(1.28)

- волновая функция для вакуума, $\Psi_1(z) = t_1 \cdot \exp(i \cdot p_1 \cdot z) + r_1 \cdot \exp(-i \cdot p_1 \cdot z) \qquad 0 \le z \le z_1 \qquad (1.29)$

- волновая функция для 1-го слоя,

$$\Psi_2(z) = t_2 \cdot \exp[i \cdot p_2 \cdot (z - z_1)] + t_2 \cdot \exp[(-i \cdot p_2 \cdot (z - z_1))] \qquad z_1 \le z \le z_2$$
(1.30)

- волновая функция для 2-го слоя,

$$\Psi_m(z) = t_m \cdot \exp[i \cdot p_m \cdot (z - z_{m-1})] + r_m \cdot \exp[(-i \cdot p_m \cdot (z - z_{m-1}))] \qquad z_{m-1} \le z \le z_m \qquad (1.31)$$

- волновая функция для *m*-го слоя,

где m = 1, 2, ..., N,

N-число слоев,

^{*t*} _{*m*} - коэффициент прохождения *m*-го слоя,

^г^{*m*} - коэффициент отражения от *m*-го слоя.

$$\Psi_t(z) = T \cdot \exp[(i \cdot p_s \cdot (z - z_N)] \qquad z_N \le z \qquad (1.32)$$

- волновая функция в подложке

$$p_{s} = \sqrt{p_{0}^{2} - p_{sps}^{2} + i \cdot \delta_{s}}$$
(1.33)

$$p_{\kappa ps} = \alpha \cdot \sin \alpha_{\kappa ps}$$

где ^{*а*} _{крз} - критический угол подложки,

б _{*s*} - величина, определяющая поглощение нейтронов в подложке.

Затем используется условие непрерывности волновых функций и их производных на границах слоев.

Следуя [8] и по аналогии с [6, 7] для каждого слоя *m* с нормальной компонентой волнового вектора в слое p_m и толщиной слоя $d_m = z_m - z_{m-1}$ можно ввести характеристическую матрицу \hat{S}_m :

(1.34)

$$\hat{S}_{m} = \begin{pmatrix} c_{m} & \frac{p_{0}}{p_{m}} \cdot s_{m} \\ \frac{p_{m}}{p_{0}} \cdot s_{m} & c_{m} \end{pmatrix}$$
(1.35)

$$r_{\text{T},\text{R}} \begin{cases} c_m = \frac{1}{2} \cdot [1 + \exp(i \cdot p_m \cdot d_m)] \\ s_m = \frac{1}{2} \cdot [1 - \exp(i \cdot p_m \cdot d_m)] \end{cases}$$
(1.36)

Матрица \hat{S}_m и фазовый множитель $\exp(-i \cdot p_m \cdot d_m)$ связывают значения волновых функций $\Psi_m(z)$ и $\Psi_{m+1}(z)$ и их производных на границах слоя m в точках z_{m-1} и z_m :

$$\begin{pmatrix} \Psi_{m+1}(z_m) \\ \Psi'_{m+1}(z_m) \end{pmatrix} = \exp(-i \cdot p_m \cdot d_m) \cdot \hat{S}_m \cdot \begin{pmatrix} \Psi_m(z_{m-1}) \\ \Psi'_m(z_{m-1}) \end{pmatrix}$$
(1.37)

Полная характеристическая матрица рассматриваемой системы из *N* слоев выражается, соответственно, в виде:

$$\hat{S}_{1N} = \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \cdot \dots \cdot \hat{S}_N = \begin{pmatrix} S^{11} & S^{12} \\ S^{21} & S^{22} \end{pmatrix}$$
(1.38)

Таким образом, многослойную структуру можно заменить приведенной однослойной с эффективными нормальной компонентой волнового вектора и толщиной, зависящими от параметров слоев p_m и d_m . Коэффициент отражения нейтронного пучка от данной многослойной структуры определяется через элементы матрицы \hat{S} в виде [8]:

$$R = \left| \frac{(S^{11} - S^{21}) \cdot p_0 + (S^{12} - S^{22}) \cdot p_s}{\Delta} \right|^2$$
(1.39)

где

$$\Delta = (S^{11} + S^{21}) \cdot p_0 + (S^{12} + S^{22}) \cdot p_s$$
(1.40)

После преобразований можно получить коэффициенты t_m и r_m , а значит и в явном виде волновую функцию *m*-го слоя $\Psi_m(z)$ (1.31) [8]:

$$\begin{cases} t_{m} = \{(S_{mN}^{11} p_{m} + S_{mN}^{21} p_{0}) \cdot p_{0} + (S_{mN}^{12} p_{m} + S_{mN}^{22} p_{0}) \cdot p_{s}\} \cdot \frac{\exp(\Phi_{m1})}{p_{m} \cdot \Delta} \\ r_{m} = \{(S_{mN}^{11} p_{m} - S_{mN}^{21} p_{0}) \cdot p_{0} + (S_{mN}^{12} p_{m} - S_{mN}^{22} p_{0}) \cdot p_{s}\} \cdot \frac{\exp(\Phi_{m1})}{p_{m} \cdot \Delta} \end{cases}$$
(1.41)

где

*p*_{*l*} и *d*_{*l*} - нормальная компонента волнового вектора и толщина *l*-го слоя, соответственно;

 $\Phi_{m-1} = \sum_{l=1}^{m-1} p_l \cdot d_l;$

 $p_{0}, p_{m}, p_{s}, \mu \Delta$ - определены выше;

 S_{mN}^{11} , S_{mN}^{12} , S_{mN}^{21} , S_{mN}^{22} - матричные элементы матрицы \hat{S}_{mN} , полученной после перемножения известных матриц:

$$\hat{S}_{mN} = \hat{S}_m \cdot \hat{S}_{m+1} \cdot \dots \cdot \hat{S}_{N-1} \cdot \hat{S}_N$$

(1.43)

Этот матричный формализм получил широкое распространение для расчета коэффициентов отражения нейтронов от многослойных структур произвольного вида. Этот метод аналогичен матричному методу первоначально развитому в обычной оптике для анализа многослойных систем диэлектрических пленок [5].

Рассмотрим частный случай многослойной структуры, изображенной на Рис.1.3, когда структура периодическая или мультибислойная, т.е. состоит из чередующихся слоев двух различных материалов (аморфных или поликристаллических) А и В с соответствующими потенциалами V_1 и V_2 , определенными из (1.3) и толщинами слоев d_1 и d_2 , а также подложки с потенциалом V_s . Поперечный разрез такой структуры представлен на Рис.1.5. Распределение потенциала V в такой периодической структуре в зависимости от координаты z, перпендикулярной плоскости слоев и направленной вглубь структуры, представлен на Рис.1.6 для $V_2 < 0$.



Рис.1.5. Поперечный разрез многослойной периодической тонкопленочной структуры.

Структура создается вакуумным напылением или магнетронным осаждением атомов материалов A и B послойно на гладкую подложку, например, стеклянную. Период структуры $D = d_1 + d_2$ и N – число пар слоев.

Также структуру можно представить как одномерный искусственный кристалл с постоянной решетки *D* [3, 7]. В этом случае отраженная интенсивность будет иметь максимумы при выполнении условия Брэгга:

$$m \cdot \lambda = 2 \cdot D \cdot \sin \theta \tag{1.44}$$

где θ - угол скольжения; m = 1, 2, 3, ...

Это обстоятельство было использовано в работе [9], где сообщалось о создании новых нейтронных монохроматоров на основе многослойной структуры чередующихся плоскопараллельных слоев Mn и Ge. Теория, свойства и применение нейтронных многослойных неполяризующих монохроматоров обсуждены в ряде работ. Такие монохроматоры обладают рядом преимуществ по сравнению с кристаллическими: высокий коэффициент отражения $R \sim 1$, вклад 2-го порядка составляет менее 1% от вклада 1-го порядка, возможностью использования их в области холодных нейтронов, недоступной для кристаллических монохроматоров.



Рис.1.6. Распределение потенциала V на многослойной периодической тонкопленочной структуре в зависимости от координаты z, перпендикулярной плоскости слоев и направленной вглубь структуры. V_s - потенциал подложки.

Матричный метод применим также для расчета неидеальных монохроматоров, у которых межслойные границы размыты, например, из-за интердиффузии атомов материалов соседних слоев, т.е. слои неоднородны по нормальной координате, но однородны при этом вдоль плоскости слоев. В этом случае распределение потенциала V(z) будет иметь вид, изображенный на Puc.1.7. V(z) можно разбить на ряд малых участков, как показано на этом рисунке, так что внутри каждого участка можно считать V(z) и, соответствующий ему показатель преломления постоянными или пренебречь изменением потенциала. Затем для каждой такой области подготовить соответствующую характеристическую матрицу, затем матрицы перемножить и проделать описанные выше действия с целью получения коэффициента отражения.



Рис.1.7. Распределение потенциала V для многослойной периодической тонкопленочной структуры с неидеальными межслойными границами в зависимости от координаты z, перпендикулярной плоскости слоев и направленной вглубь структуры.

Если один из материалов мультибислойной структуры – ферромагнитный, то нейтронный пучок, отраженный от такой структуры будет поляризованным, т.е. количество отраженных нейтронов со спином по полю будет отличаться от количества нейтронов со спином против поля при равном их количестве, падающих на структуру, в соответствии с (1.26).

Рассмотрим этот случай подробно на примере периодической мультибислойной структуры Fe/Ag [10]. Слои железа, намагниченные до насыщения в их плоскости характеризуются потенциалами V_{Fe}^+ и V_{Fe}^- вида:

$$V_{Fe}^{\pm} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2}{m_n} \cdot \rho_{Fe} \cdot (b_{cFe} \pm p_m)$$
(1.45)

где ρ_{Fe} - концентрация атомов железа,

b _{*сFe*} - длина когерентного ядерного рассеяния железа,

^р _т - длина магнитного рассеяния атомов железа для насыщенного состояния,

^т - масса нейтрона.

Знаки «+» и «-» для параллельной и антипараллельной ориентации спина нейтрона по отношению к направлению вектора магнитной индукции в слое железа, соответственно. Слои серебра характеризуются потенциалом ^V 48 вида (1.3):

$$V_{Ag} = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2}{m_n} \cdot \rho_{Ag} \cdot b_{Ag}$$
(1.46)

где ρ_{Ag} - концентрация атомов серебра,

b сАg - длина когерентного ядерного рассеяния серебра.

Для (+) спиновой компоненты V(z) аналогично распределению потенциала на Рис.1.6. Таким образом, для этой компоненты будет иметь место брэгговское отражение при выполнении условия (1.44).

Для (-) спиновой компоненты для магнитно насыщенных слоев железа справедливо соотношение:

$$V_{Fe}^{-} \cong V_{Ag}^{-} \cong V_{s}$$

(1.47)

Таким образом, для (-) спиновой компоненты нейтрона эта многослойная структура может быть представлена как монослой толщиной $D \times N$ с потенциалом V равным V_{Fe} или V_{Ag} . В таком случае брэгговское отражение невозможно. Такое значительное отличие в отражательной способности для нейтронов разных спиновых компонент позволяет использовать подобные периодические многослойные структуры, в которых один слой ферромагнитный, а другой немагнитный, в качестве монохроматоров-поляризаторов пучков тепловых и холодных нейтронов.

Толщины слоев в работе [10] для структуры Fe/Ag использовались следующие: для железа $d_{Fe} = 108 \text{ Å}$ и для серебра $d_{Ag} = 86 \text{ Å}$. Это четвертьволновые толщины, т.е. для них выполнялось условие:

$$d_{Fe,Ag} = \frac{\lambda_B}{4 \cdot \theta \cdot \sqrt{1 - \left[\frac{\lambda_B}{\theta \cdot \lambda_{ep(Fe^+,Ag)}}\right]^2}}$$
(1.48)

где θ - угол скольжения (Рис.1.5),

λ_{*cp*(*Fe*⁺,*Ag*)} - граничные длины волн для (+) спиновой компоненты нейтрона для насыщенного состояния слоев железа и слоев серебра, соответственно,

λ^{*B*} - длина волны, соответствующая брэгговскому максимуму 1-го порядка.

Такой выбор толщин слоев соответствует максимальному коэффициенту отражения в основном (m = 1) брэгговском рефлексе при фиксированном положении рефлекса и числе пар слоев монохроматора *N*. Так, для данной структуры при N = 20 экспериментальные величины коэффициента отражения и поляризации в основном рефлексе при его относительной ширине $\frac{\Delta \lambda_B^+}{\lambda_B^+} \cong 0.11$ близки к 1 и составили

 $R_B^+ \cong 0.92$ и $P \cong 0.98$, соответственно. Расчетная зависимость коэффициента отражения R^+ для (+) спиновой компоненты нейтронного пучка от переданного импульса Q, представлена на Рис.1.8 для этой структуры. На $Q = 0.04 \ A^{-1}$ находится брэгговский пик 1-го порядка, на $Q \cong 0.072 \ A^{-1}$ брэгговский пик 2-го порядка, на $Q \cong 0.022 \ A^{-1}$ край плато полного отражения. Между этим плато и брэгговским пиком 1-го порядка находится, так называемая интерференционная область, представляющая собой совокупность локальных максимумов и минимумов, обусловленных интерференцией волн, отраженных от разных слоев структуры или эта область связана с возникновением уровней зоны проводимости нейтронов в данной многослойной структуре. Край плато области полного отражения для данной структуры задается средним потенциалом структуры V:



Рис.1.8. Расчетная зависимость коэффициента отражения R^+ (+) спиновой компоненты пучка от переданного импульса Q для монохроматора-поляризатора, состоящего из 20 пар слоев Fe(108 Å)/Ag(86 Å). Слои железа намагничены до насыщения.

Когда на данный монохроматор под скользящим углом θ падает коллимированный нейтронный пучок (см. Рис.1.5), имеющий широкое спектральное распределение (как правило, максвелловское), то наряду с основным вкладом брэгговского пика 1-го порядка в интенсивность отраженного пучка, дают также побочные вклады области: полного отражения, интерференционная и 2-го порядка. Для повышения эффективности работы монохроматоров такого типа необходимо уменьшать вклад этих областей дающих немонохроматические нейтроны в отраженную интенсивность по сравнению с полезным вкладом монохроматических поляризованных нейтронов от брэгговского пика 1-го порядка.

1.3. Рассеяние нейтронного, рентгеновского и синхротронного излучений на неидеальных межслойных границах в многослойных тонкопленочных структурах

Рассмотренные выше тонкопленочные структуры имели идеально плоские границы с прямоугольными нейтронно-оптическими потенциалами. Реальные структуры неидеальны в той или иной степени. Вдоль границ слоев существует область, где материалы соседних слоев перемешаны вследствие взаимной диффузии атомов слоев. При этом даже могут образовываться немагнитные области (магнитно «мертвые» слои) на границе ферромагнитного слоя и немагнитного материала, как, например, для структур Co/Ti и Fe/Si. Форма распределения потенциала для реальных структур утрачивает свою прямоугольность, как показано в предыдущем разделе на Рис.1.7. Если при этом можно разбить данную межслойную область на множество параллелепипедов или параллельных слоев с выбором толщин таким образом, что внутри каждого из этих тонких слоев значение потенциала можно принять постоянной величиной, тогда задача вычисления коэффициента отражения от такой структуры решается с помощью матричного метода, как обсуждалось выше. В общем случае ситуация гораздо сложнее. Поверхность пленки или поверхность межслойной границы в тонкопленочной структуре не плоская. Ее можно описать в виде флуктуации координаты *z* границы раздела двух сред относительно её некоего среднего положения с $\langle z \rangle$ = const, т.е. как функцию латеральных координат x и y, так что $\delta z = z - \langle z \rangle = \delta z(x,y)$. На Рис.1.9 схематично показан разрез такой поверхности вдоль латеральной координаты x для $\langle z \rangle = 0$. Величина $\delta z(x,y)$ называется шероховатостью поверхности. Т.е. шероховатостью называется отклонение реальной поверхности от идеально гладкой поверхности. Шероховатость присуща в той или иной степени всем тонкопленочным структурам. Она возникает в процессе роста структуры и может меняться в зависимости от внешних воздействий. Важно уметь правильно характеризовать ее, чтобы правильно определять свойства тонкопленочных структур и интерпретировать результаты исследований, проводимых на этих структурах.

Для исследования свойств неидеальных границ раздела используется как зеркальное, так и незеркальное рассеяние рентгеновского, синхротронного и нейтронного излучений в отличие от идеально гладких поверхностей, где используется зеркальное отражение.

В работах [11, 12] с помощью незеркального рассеяния этих видов излучений исследовались свойства неидеальных границ раздела тонких пленок.

В работе [13] было установлено, что при падении коллимированного пучка рентгеновского излучения на поверхность исследуемых образцов (кристаллов и тонких пленок) под углом скольжения превышающем (в 2 - 3 раза) критический угол материала

образца, наряду с пиком зеркального, возникает пик аномального отражения. Его положение почти совпадает с критическим углом материала образца и не меняется с изменением угла скольжения падающего пучка на образец. Т.е. возникает незеркальное или диффузное рассеяние падающего излучения на шероховатой поверхности образца. Этот эффект и пик аномального отражения названы в честь, открывшего их И.Ионеды [13].

В ряде работ исследовались неидеальные поверхности жидкостей и пленок жидкостей. Для неидеальных поверхностей вводится C(X, Y) - корреляционная функция высот неидеальной поверхности. Она полностью характеризует неидеальную гауссову поверхность. В работе [11] она введена в следующем виде:

 $C(X,Y) \equiv \langle z(0,0)z(X,Y) \rangle = \sigma^2 \exp[(-R/\xi)^{2h}]$ (1.50)

где X и Y - относительные координаты неидеальной поверхности и $R = \sqrt{X^2 + Y^2}$;

 σ - среднеквадратичная шероховатость, определенная по всей поверхности, как $\sigma^2 = \langle z (x, y)^2 \rangle$ при $\langle z \rangle = 0$. Здесь усреднение проведено по всем точкам поверхности;

 ξ - корреляционная длина или длина обрезания (cut-off), которая позволяет выходить на насыщение функции *C*(*X*,*Y*) при больших *R*;

h – экспонента шероховатости или параметр Хурста, причем $0 \le h \le 1$.

Структура грубой поверхности и шероховатости сильно зависит от h. Малым h соответствует как бы зазубренная поверхность. При приближении h к l поверхность становится более гладкой: появляются "холмы" и "долины". h = l/2 соответствует случаю случайных блужданий. Таким образом, корреляционная функция C(X,Y) с параметрами σ , ξ и h полностью описывает гауссову поверхность. Справедливость данной формы корреляционной функции высот подтверждается рядом исследований неидеальных



Рис.1.9. Неидеальная поверхность раздела двух сред в разрезе.

поверхностей, полученных из экспериментов по рассеянию рентгеновского излучения.

Дифференциальное сечение незеркального (диффузного) рассеяния рентгеновского и нейтронного излучения на грубой (неидеальной) поверхности в Борновском (кинематическом) Приближении (БП) получено в работе [11]:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\partial u\phi} = \left(\frac{N \cdot b}{q_z}\right)^2 \cdot \exp\left[-\left(q_z \cdot \sigma\right)^2\right] \cdot S \cdot \iint_S dXdY \cdot \left[\exp\left(q_z^2 \cdot C\left(X,Y\right)\right) - 1\right] \cdot \exp\left[-i \cdot \left(q_x \cdot X + q_y \cdot Y\right)\right]$$
(1.51)

где C(X,Y) – корреляционная функция, определяемая (1.50);

*q*_x, *q*_y, *q*_z - компоненты переданного импульса; *S* – площадь проекции неидеальной поверхности на плоскость (*x*, *y*);

N – концентрация атомов в пленке; *b* – длина когерентного ядерного рассеяния.

Если поверхность идеально гладкая, то $\sigma = 0$ и из (1.50) и (1.51) следует, что $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{_{\partial u\phi}} = 0$, т.е. незеркальное рассеяние для идеально гладкой поверхности отсутствует, и наоборот, если наблюдается незеркальное рассеяние, то поверхность неидеальна и имеется шероховатость и ее можно характеризовать корреляционной функцией (1.50). Зеркальную часть сечения рассеяния можно преобразовать в коэффициент отражения [11]:

 $R(q_z) = R_F(q_z) \cdot exp(-q_z^2 \cdot \sigma^2)$ (1.52) где $R_F(q_z)$ – френелевский коэффициент отражения для идеальной поверхности, определяемый выражением (1.21).

Таким образом, для неидеальной поверхности раздела двух сред, имеющей величину среднеквадратичной шероховатости σ , для френелевского коэффициента отражения возникает ослабляющий множитель типа фактора Дебая-Валлера, обусловленный шероховатостью. Влияние этого множителя растет с ростом q_z .

БП справедливо, когда рассеяние мало, т.е. вдали от области полного отражения, когда коэффициент отражения существенно меньше единицы. Из анализа зеркального рассеяния можно определить только параметр σ , а остальные параметры ξ и h, определяются из анализа данных незеркального или диффузного рассеяния. Таким образом, мы рассмотрели шероховатую поверхность для которой разность высот [z(X,Y) - z(0,0)] - гауссова случайная переменная. Случаи негауссовых поверхностей включают в себя наличие островков на поверхности, ям, пятен коррозии, ступенек на поверхности и т.д. Далее мы будем рассматривать только гауссовы поверхности.

В реальной многослойной тонкопленочной структуре межслойные границы также неидеальны, как поверхность тонкого монослоя и поверхность толстого монослоя, соответствующего полубесконечной среде. Они имеют шероховатости, т.е. границы в той или иной мере не плоские. Такие межслойные шероховатости возникают в процессе роста структуры, а также, как уже отмечалось, в процессе каких-либо воздействий на нее. Такие несовершенства оказывают значительное влияние на физические свойства многослойной структуры, в частности, уменьшают коэффициент зеркального отражения от многослойных структур. В связи с этим возникает необходимость в правильном определении этих несовершенств. По аналогии с рассмотренным выше процессом рассеяния нейтронов на одной неидеальной границы многослойной структуры. Считая, что поверхности этих границ подчиняется гауссову распределению, можно ввести параметры σ , ξ и h. В многослойной структуре можно выделить основные 4 типа шероховатостей, как это сделано в [14]:

а) полностью коррелированная или конформная межслойная шероховатость;

б) некоррелированная межслойная шероховатость;

в) частично коррелированная межслойная шероховатость;

г) частично коррелированная кумулятивная межслойная шероховатость.

Для случаев a), б), в) величина среднеквадратичной шероховатости, усредненная по межслойной границе, одинакова для всех межслойных границ этой многослойной структуры. Для случая г) эта величина растет при удалении от подложки.

Эти типы шероховатостей схематично представлены на Рис.1.10. Как правило, мы имеем дело с частично коррелированными шероховатостями в многослойной

структуре, когда шероховатость распространяется от подложки к верхним слоям структуры. Можно обсуждать рассеяние на таких межслойных границах, используя понятие корреляционной функции высот между различными межслойными границами многослойной структуры. Т.е. можно обобщить, как это сделал Sinha, корреляционную функцию высот для неидеальной границы полубесконечной среды, определяемой уравнением (1.50) на случай многослойной структуры, принимая во внимание возможность корреляции между флуктуациями высот различных межслойных границ *i* и *j* в виде:

$$C_{ij}(\vec{R}) = \left\langle \delta z_i(\vec{r}) \, \delta z_j(\vec{r} + \vec{R}) \right\rangle = \sigma^2 \cdot \exp\left[-\left(\frac{R}{\xi_{lat}}\right)^{2\cdot h} \right] \exp\left[-\frac{|z_i - z_j|}{\xi_\perp} \right]$$
(1.52)

где $\delta z_i(\vec{r})$ и $\delta z_j(\vec{r} + \vec{R})$ - флуктуации высот неидеальных поверхностей *i*-ой и *j*-ой межслойных границ относительно усредненных идеальных плоскостей, определенных координатами z_i и z_j ;

 $R = \sqrt{x_j^2 + y_j^2}$ - латеральная координата в усредненной плоскости z_j с координатами x_j и y_j ;

*ξ*_⊥ - корреляционная длина для шероховатости в перпендикулярном направлении к межслойным границам;

 σ - среднеквадратичная шероховатость усредненная по всей структуре,

*ξ*_{lat} - усредненная по всей структуре длина корреляции шероховатости в плоскости слоя.

Множитель $\exp\left[-\frac{|z_i - z_j|}{\xi_{\perp}}\right]$ отражает степень коррелированности шероховатостей межслойных границ многослойной структуры или степень конформности шероховатостей межслойных границ, определяемая параметром ξ_{\perp} .



Рис.1.10. Схематическое представление шероховатостей межслойных границ в многослойной структуре [14]: а) полностью коррелированная или конформная межслойная шероховатость; б) некоррелированная межслойная шероховатость; в) частично коррелированная межслойная шероховатость; г) частично коррелированная межслойная шероховатость; г) частично коррелированная межслойная шероховатость. Для случаев а), б), в) величина среднеквадратичной шероховатости, усредненная по межслойной границе, одинакова для всех межслойных границ этой многослойной структуры. Для случая г) эта величина растет при удалении от подложки.

Знание точного вида корреляционных функций многослойной структуры очень важно, т.к. это основная характеристика многослойной неидеальной структуры. Проблеме определения оптимального вида корреляционной функции посвящен ряд работ.

В работе [12] было обобщено выражение для сечения диффузного рассеяния нейтронного и рентгеновского излучений в БП для случая одиночной неидеальной поверхности, полученное в [11] на случай многослойной структуры с неидеальными межслойными границами:

$$\begin{pmatrix} \frac{d\sigma}{d\Omega} \\ \frac{\partial q_z}{\partial u\phi} = \frac{S}{q_z^2} \cdot \sum_{i,j=1}^{N} \exp\left\{-\frac{1}{2} \cdot q_z^2 \cdot [\sigma_i^2 + \sigma_j^2 + \delta^2(i-j)]\right\} \cdot \Delta \rho_i \cdot \Delta \rho_j \cdot \exp[i \cdot q_z \cdot (z_i - z_j)] \cdot E_{ij}(\vec{q}) \quad (1.54)$$
Figure
$$E_{ij}(\vec{q}) = \iint_{S} dXdY \cdot \left\{\exp[q_z^2 \cdot C_{ij}(R)] - 1\right\} \cdot \exp[-i \cdot (q_x \cdot X + q_y \cdot Y)];$$

 σ_{i} и σ_{j} - среднеквадратичные шероховатости *i*-ой и *j*-ой межслойных границ; $\Delta \rho_{i}$ и $\Delta \rho_{j}$ - контрасты плотности длины рассеяния на *i*-ой и *j*-ой границах, соответственно;

 z_i и z_j - средние координаты *i*-го и *j*-го слоя, соответственно; $R \equiv \sqrt{X^2 + Y^2}$;

 $\delta\,$ - среднеквадратичная ошибка напыления в толщине слоя. Эта ошибка нарастает от слоя к слою.

Если нет корреляций между межслойными границами то $C_{ij}(R) = 0$ для $i \neq j$, тогда двойная сумма в уравнении (1.54) уменьшается до суммы по индивидуальным слоям по *i* от 1 до *N*. Когда $C_{ij}(R) \neq 0$, это более общий случай, тогда имеют место межслойные корреляции и в пространстве q_x , q_y , q_z будут образовываться области значительного усиления незеркального (диффузного) рассеяния, обусловленного фазовым фактором $\exp[i \cdot q_z \cdot (z_i - z_j)]$ в уравнении (1.54) для постоянных величин q_z на значениях, соответствующих максимумам в зеркальном отражении на позициях, соответствующих брэгговским максимумам многослойной структуры для случая многослойной структуры [12], а для монослоя на подложке – максимумы или осцилляции Kiessig'a (Kiessig's fringes), которые появляются при отражении рентгеновских лучей от тонких пленок при углах скольжения вблизи критического, при этом возникает интерференция между волнами, отраженными от границ пленки, что приводит к возникновению максимумов и минимумов в коэффициенте отражения. При этом можно одновременно определить и толщину пленки и ее электронную плотность.

В работах [12, 15, 16] анализ незеркального рассеяния рентгеновского и синхротронного излучений в многослойных структурах проводился в рамках обобщения на случай многослойных систем версии (и ее модификаций) Борновского Приближения Искаженных Волн (БПИВ или DWBA), предложенной в работе [11] для случая одиночной грубой поверхности. БПИВ - стандартное приближение, используемое в квантовой механике для решения соответствующих задач рассеяния. БПИВ является более общим по сравнению с БП и оно в отличие от последнего позволяет при учете рассеяния в неидеальной многослойной структуре, анализировать рассеяние в области полного отражения и вблизи рефлексов, имеющих коэффициент отражения близкий к 1. К сожалению, вычисления сечения диффузного рассеяния в БПИВ сложны и громоздки [12, 15], что сильно затрудняет фитирование экспериментальных данных.

2. ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЗЕРКАЛЬНОГО РАССЕЯНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ НА НЕИДЕАЛЬНЫХ МЕЖСЛОЙНЫХ ГРАНИЦАХ В МНОГОСЛОЙНЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ

2.1. Исследования на ТОREMA II.

Как отмечалось выше, известен ряд работ, посвященных исследованиям незеркального рассеяния рентгеновского излучения на неидеальных межслойных границах в периодических многослойных структурах, тогда как подобные исследования с поляризованными нейтронами не проводились.

В 1994 году Сыромятниковым В.Г. такие исследования были начаты и впервые наблюдался эффект когерентного усиления незеркального (диффузного) рассеяния поляризованных нейтронов на неидеальных межслойных границах магнитных многослойных структур.

Измерения проводились на нейтронном рефлектометре TOREMA II в исследовательском центре GKSS (Геестахт, Германия). Общий вид и схема установки приведены на Рис.2.1 и 2.2, соответственно. Этот прибор состоит из следующих частей (см. Рис.2.1): слабо фокусирующий монохроматор, состоящий из пяти кристаллов пиролитического графита (PG), и установленный на угол 37 градусов к нейтроноводу NG-1, выбирает нейтроны с длиной волны $\lambda = 4.3 \text{ Å}$ и $\delta \lambda / \lambda = 0.02$ ИЗ белого пучка нейтроновода. Фокусировка плоскости В перпендикулярной плоскости рассеяния позволяет увеличить светосилу прибора без ущерба для разрешения. Для измерений с поляризованными нейтронами в пучок вдвигается суперзеркальный поляризатор нейтронов, который обеспечивает поляризацию не хуже чем 0.98. Выходящий из него пучок имеет только одну спиновую компоненту. Коллимационная база ограничена системой щелей с варьируемыми размерами и производит пучок в горизонтальной плоскости с малой угловой расходимостью (типично, лучше чем 1 мрад). Угловая расходимость в вертикальной плоскости составляет 27 мрад.



Рис.2.1. Общий вид нейтронного рефлектометра TOREMA II в поляризационной моде.



Рис.2.2. Схема нейтронного рефлектометра ТОREMA II в поляризационной моде.

Для адаптации нейтронной интенсивности к чувствительности и эффективности детекторной системы служит аттенюатор, сделанный из слабопоглощающих пластинок различной толщины. Спин-флиппер Мезея изменяет направление спина нейтронов на 180 градусов. Юстировочный стол образца позволяет образцу перемещаться вертикально и горизонтально, а также поворачиваться с точностью лучше чем 0,17 мрад. Нейтроны отраженные зеркально на угол α_i , и рассеянные на образце на угол α_i регистрируются многоканальным одномерным позиционночувствительным детектором, состоящим из трех труб, заполненных (газом) He³. Полная длина установки доходит до 5 метров (центр NG-1 – детектор).

Образец помещался во внешнее магнитное поле H = 115 Э. При положении "флиппер выключен" направление спинов нейтронов совпадало с направлением вектора индукции в магнитных слоях многослойных структур. Угловая расходимость пучка, падающего под углом скольжения α_i на образец в плоскости рассеяния составила 0.2 мрад в нашем эксперименте. Угол скольжения α_i изменялся при повороте образца с постоянным шагом.

На Рис.2.3 представлена схема процесса рассеяния нейтронного пучка на неидеальных межслойных границах в многослойной структуре при измерениях на TOREMA II. Нейтронный пучок, падающий под малым углом скольжения α_i на многослойную структуру проходит вглубь ее, отражаясь и преломляясь на каждой

границе, ослабевая проходит структуру и выходит из торца подложки. Кроме этих процессов, которые имеют место и на структуре с идеально плоскими границами, показанными на рисунке прямыми линиями, пучок на каждой границе испытывает рассеяние на шероховатостях межслойных границ структуры, как показано на рисунке пунктиром. Нейтроны, отраженные зеркально на угол α_i , нейтроны, вышедшие из торца подложки, пройдя через всю структуру и нейтроны, рассеянные в незеркальных направлениях, например, на угол α_i , регистрируются многоканальным одномерным позиционно-чувствительным детектором, фрагмент, которого показан на этом рисунке.

В данном разделе представлены результаты исследований эффекта когерентного усиления незеркального (диффузного) рассеяния поляризованных нейтронов на неидеальных межслойных границах магнитных многослойных структур на двух образцах Периодических Многослойных Структур (ПМС): 20Co/Ti (20 пар чередующихся слоев Со и Ti с равными толщинами слоев $d_1 = d_2 = 75 \text{ Å}$) и 12Fe/Ge (12 пар чередующихся слоев Fe и Ge с толщинами слоев $d_1 = 118 \text{ Å}$ и $d_2 = 82 \text{ Å}$, соответственно). Образец ПМС 12Fe/Ge был приготовлен электронным термическим распылением.



Рис.2.3. Схема процесса рассеяния нейтронного пучка на неидеальных межслойных границах в многослойной структуре.

Образец ПМС 20Со/Ті был приготовлен магнетронным распылением материалов Со и Ті поочередно на антиотражающий поглощающий слой, содержащий Gd. Толщина этого слоя 3000 ^A. Для всех образцов использовались хорошо полированные стеклянные подложки с размерами 5х80х210 мм³.

На Рис.2.4 представлены графики зависимости интенсивности зеркально отраженной и рассеянной на образце 20Co/Ti от угла скольжения $\omega = \alpha_i + \alpha_f$ для восьми входных углов скольжения $\alpha_i = 2.44, 3.14, 5.24, 11.87, 13.96, 15.71, 18.85,$ 23.38 мрад для нейтронов (+) спиновой компоненты. Первый левый пик на этих рисунках соответствует пучку, прямо прошедшему через образец. Из-за рефракции в стеклянной подложке положение этого пика немного сдвинуто от начала координат, которое соответствует положению центра падающего пучка. Сильный пик, показанный на Рис.2.4в на угле $\omega = 2^{\alpha_i} = 10.48$ мрад соответствует зеркальному отражению, в то время как более слабый пик, на угле $\omega = \alpha_i + \alpha_f = 28.01$ мрад. является предметом нашего пристального внимания. Это квазибрэгговский пик незеркального (диффузного) рассеяния. Этот пик появляется при угле $\alpha_i = 3.14$ мрад (Рис.2.4б) большем, чем критический угол $\alpha_c \cong 3.1$ мрад полного внешнего отражения от образца, соответствующий среднему потенциалу структуры. Как известно [3], брэгговские дифракционные пики возникают в периодической многослойной структуре при условиях $Q_z = 2 \cdot \pi \cdot m/D$; $Q_x = Q_y = 0$; где D – период структуры; m – целое число; Q_x, Q_y, Q_z - компоненты переданного импульса. Здесь же мы наблюдаем явление, когда брэгговский пик имеет место при конечных $Q_x u Q_y$ величинах Поэтому здесь уместно использовать термины: квазибрэгговское рассеяние и квазибрэгговский пик. На Рис.2.4а на $\alpha_i = 2.44$ мрад в области полного внешнего отражения мы можем видеть только два пика: сильный зеркально отраженный пик на угле $\omega = 2^{\alpha_i} = 4.88$ мрад и пик, соответствующий пучку прошедшему через образец. На Рис.2.4г показана ситуация, когда пик зеркального отражения приближается к положению квазибрэгговского пика. На следующем рисунке (Рис.2.4д) демонстрируется явление брэгговского отражения 1го порядка, которое имеет место при угле скольжения $\alpha_i = \alpha_{1B} = \lambda/2 \cdot D$, где D = $d_1 + d_2$ - период ПМС. В последнем случае результирующее отражение очень сильно возрастает, а пики зеркального отражения и квазибрэгговского рассеяния полностью перекрываются. На Рис.2.4е пик зеркального отражения находится в положении немного превышающем положение квазибрэгговского пика. С увеличением угла скольжения α_i интенсивность зеркального отражения значительно падает (Рис.2.4ж) и практически приближается к нулю, как показано на Рис.2.43. Однако квазибрэгговский пик, начиная уменьшаться на углах $\alpha_i > \alpha_{1B}$ все же наблюдаем вплоть до углов скольжения, соответствующих зеркальному пику брэгговского отражения второго порядка α_{2B} при $\alpha_i = \alpha_{2B}$. Следует отметить также, что квазибрэгговский пик почти не наблюдаем для нейтронов (-) спиновой компоненты.

На этом образце были проведены также измерения на установке для исследования малоуглового рассеяния поляризованных нейтронов ВЕКТОР (ПИЯФ, Гатчина) с длиной волны нейтронов в падающем пучке $\lambda = 9 \text{ Å}$ и $\Delta \lambda / \lambda = 0.075$ [8]. Для каждого из нескольких углов скольжения α_i наблюдалась та же картина из трех пиков [8]: прямо прошедший, зеркально отраженный и незеркальный



Рис.2.4. Профили интенсивностей зеркально отраженной, незеркально рассеянной и прямо прошедшей через образец, построенные как функции угла $\omega = \alpha_i + \alpha_f$ для 8 значений входного угла α_i : а – 2.44 мрад; б – 3.14 мрад; в - 5.24 мрад; г – 11.87 мрад; д - 13.96 мрад; е - 15.71 мрад; ж – 18.85 мрад; з - 23.38 мрад для (+) спиновой компоненты нейтронов для ПМС 20Со/Ті. Здесь α_f - выходной угол скольжения, ω = 0 соответствует положению центра прямого пучка. Стрелкой показано положение

квазибрэгговского пика.

место на $\omega = 2^{\alpha_{1B}} = 56$ мрад, т.е. эффект подтверждается, а отличие в α_{1B} связано лишь с отличием в длинах волн, используемых в этих установках. На Рис.2.5 представлены зависимости коэффициента зеркального отражения R⁺ (точки) и интенсивности незеркального рассеяния I (треугольники), нормированной на интенсивность падающего пучка как функции угла скольжения α_i для нейтронов (+) спиновой компоненты. На этом же рисунке, так же представлена зависимость коэффициента отражения для нейтронов (-) спиновой компоненты (крестики) R^- от угла скольжения α_i . Этот коэффициент отражения намного слабее, чем для (+) спиновой компоненты, вследствие того, что потенциалы слоев для этой компоненты при приложенном насыщающем поле практически равны, т.е. $V_1 = V_2$ и оптический отсутствует, контраст между слоями поэтому многослойная структура воспринимается нейтроном, как монослой. Графики R⁺ и *R*велут себя одинаковым образом, за исключением одной детали: брэгговский пик второго порядка для нейтронов (-) спиновой компоненты больше чем для (+) компоненты нейтронов. Это объясняется наличием магнитно «мертвых» слоев на межслойных границах. Об этом будет более подробно написано в следующем разделе. В отличие от поведения кривых зеркального отражения интенсивность квазибрэгговского пика почти не зависит от α_i в широком диапазоне углов скольжения и плавно спадает при $\alpha_i > \alpha_{1B}$.

Другая особенность, характеризующая квазибрэгговский пик показана на Рис.2.6, где представлены зависимости положений центров пиков зеркального отражения (точки) и квазибрэгговского рассеяния (треугольники) в зависимости от угла скольжения α_i .



Рис.2.5. Экспериментальные зависимости коэффициентов зеркального отражения для ПМС 20Со(75 A)/Ті(75 A) для (+) спиновой компоненты нейтронов R^{+} (точки) и (-) спиновой компоненты нейтронов R^{-} (крестики), как функции угла скольжения $^{\alpha}{}_{i}$. Экспериментальная зависимость нормированной интенсивности I (треугольники) квазибрэгговского пика, как функция угла скольжения $^{\alpha}{}_{i}$ для (+)

спиновой компоненты нейтронов.



Рис.2.6. Положения центров пиков *P* для зеркально отраженного (точки) и незеркально рассеянного (треугольники) пучков на ПМС 20Co(75 Å)/Ti(75 Å) представлены, как функции угла скольжения α_i для (+) спиновой компоненты нейтронов.

Положения центров зеркальных пиков меняются, как и положено, в соответствии с геометрией данных измерений $\theta - 2\theta$ или $\alpha_i - 2\alpha_i$. Положения центров квазибрэгговских пиков практически неизменны и совпадают с углом брэгговского отражения 1-го порядка от одномерной многослойной структуры с периодом решетки *D*. Следует отметить, что для измеренных в этом цикле экспериментов, на этой установке, образцов ПМС Со/Ті с 1 и 3 бислоями, квазибрэгговские пики не были зарегистрированы, в отличии от этих систем с 10, 12 и 20 бислоями.

На Рис.2.7а,б в логарифмическом (Log¹⁰) масштабе представлены контурные карты распределения интенсивности нейтронного пучка, рассеянного на образце ПМС 20Со/Ті для (+) (Рис.2.7а) и (-) (Рис.2.7б) спиновых компонент пучка в координатах α_i и α_f . Логарифмическая шкала интенсивности представлена справа Проведены процедуры усреднения сглаживания ОТ рисунка. И экспериментальным точкам. Усреднение проводилось на массиве данных $\alpha_i - \alpha_f$ по прямоугольникам 5×13 ($\alpha_i \times \alpha_f$). На этих рисунках показана динамика перераспределения интенсивности, рассеянной на этом образце между прямо прошедшим через образец, зеркально отраженным от него и рассеянным в незеркальном направлении пучками при изменении α_i в широком диапазоне. Каждая вертикальная линия параллельная оси ординат ^{*а f*} - срез, который представляет собой картину распределения интенсивности подобную, представленным на Рис.2.4(а-з) для соответствующих углов α_i , как функцию угла α_f = ω - α_i. Широкая полоса №1, пересекающая нижнюю половину контурной карты под углом -45 градусов относительно линии $\alpha_f = 0$, соответствует прямо прошедшему пучку через структуру и вышедшему из торца подложки. Для этой

полосы справедливо соотношение $\alpha_i = -\alpha_f$. Полоса №2, идущая под углом +45 градусов относительно линии $\alpha_f = 0$, в верхней половине контурной карты, представляет собой интенсивность зеркально отраженного пучка. Для этой полосы справедливо соотношение $\alpha_i = \alpha_f$. Полоса №3 (перпендикулярная полосе №2) полностью обусловлена незеркальным рассеянием. Для этой полосы справедливо соотношение $\alpha_{i} + \alpha_{f} \cong 2\alpha_{1B}$. Появление полосы №3 есть проявление эффекта когерентного усиления незеркального рассеяния поляризованных нейтронов на конформно коррелированных шероховатостях межслойных границ в магнитных периодических многослойных структурах, когда шероховатости межслойных границ полностью или частично скоррелированы в направлении перпендикулярном плоскостям слоев и когда удовлетворяется условие брэгга для нормальной, к плоскостям слоев, компоненты переданного импульса. Это первое наблюдение этого эффекта на поляризованных нейтронах. Аналогичное явление наблюдалось при рассеянии рентгеновского и синхротронного излучений на многослойных структурах с неидеальными межслойными границами [17-20] при сканировании детектором при постоянном угле скольжения ^{*а*} и при измерениях в режиме кривой качания, т.е. при сканировании по углу образцом при неизменном положении детектора. Появление полос усиления незеркального рассеяния следует, как уже обсуждалось в разделе 1.3, из выражения (1.54), полученного в Борновском Приближении, для дифференциального сечения диффузного рассеяния рентгеновского и нейтронного излучений. На Рис.2.76 представлена контурная карта для (-) спиновой компоненты. Здесь видны только две полосы: №1 - прямо прошедшая и №2 - зеркально отраженная.



Рис.2.7а,б. Распределения зеркальной и незеркальной интенсивностей в логарифмическом (Log ¹⁰) масштабе для (+) (Рис.2.7а) и для (-) (Рис.2.7б) спиновых компонент нейтронов, измеренные на ПМС 20Co(75 Å)/Ti(75 Å). α_i и α_f - входной и выходной углы скольжения, соответственно.

Рассмотрим теперь ПМС 12Fe/Ge. На Рис.2.8 представлены для этого образца экспериментальные зависимости коэффициентов отражения для (+) спиновой компоненты пучка R^+ (кружки) и для (-) спиновой компоненты пучка R^- (треугольники) как функции входного угла скольжения α_i . Данные кривые получены в той же геометрии, что и для образца 20Co/Ti (Puc.2.5). На обеих кривых отчетливо видны области полного отражения и брэгговские пики 1-го и 2-го порядков для обеих компонент, но для (-) спиновой компоненты коэффициент отражения значительно меньше, чем для (+) спиновой компоненты вследствие того, что оптический контраст между слоями железа и германия для (-) спиновой компоненты для (+) спиновой компоненты он достаточен для получения коэффициента отражения R^+ близкого к 1 даже для 12 пар слоев.



Рис.2.8. Экспериментальные зависимости коэффициентов зеркального отражения для ПМС 12Fe(118 \mathring{A})/Ge(82 \mathring{A}) для (+) спиновой компоненты нейтронов R^+ (кружки) и для (-) спиновой компоненты нейтронов R^- (крестики), как функции входного угла скольжения α_i .

На рисунках 2.9а,6 представлены в логарифмическом (Log 10) масштабе контурные карты распределения рассеянной на этом образце интенсивности в координатах (α_i , α_f) для спинов нейтронов, ориентированных параллельно направлению намагниченности образца (Рис.2.9а) и против него (Рис.2.9б) [21]. Карты построены таким же способом, что и для образца 20Со/Ті. На картах могут быть выделены 4 характерные полосы, обозначенные цифрами №1-4. Полоса №1 соответствует пучку, прошедшему через образец и вышедшему из торца подложки. Полоса №2 - зеркально отраженная часть пучка. Она содержит брэгговские максимумы: 1-го порядка на угле $\alpha_i = \alpha_{1B} \approx 12.6$ мрад и 2-го порядка на угле α_i = α_{2B} ≈ 21.6 мрад. Полоса №3 - полностью обусловлена незеркальным рассеянием И аналогичная имеет ΤV же природу, что И полоса для вышерассмотренного образца 20Co/Ti. Эта полоса также удовлетворяет условию α_{i} + $\alpha_f \approx 2\alpha_{1B}$ и слабо искривлена из-за рефракции вблизи критуглов полного отражения $\alpha_c \approx 7$ мрад, как для α_i , так и для α_f . Эта полоса отсутствует на Рис.2.96 для (-) спиновой компоненты. Эта полоса не так заметна, как аналогичная полоса для 20Co/Ti. Заметно ослабление интенсивности («выедание») в полосе №1 при $\alpha_i \approx \alpha_{1B}$, обусловленное сильным отражением в зеркальный канал при условии сохранения интенсивности, участвующей в рассеянии.

Следует отметить также, что в случае идеальных межслойных границ только полосы №1 и №2 были бы представлены, а полоса №3 существует только благодаря конформности шероховатостей межслойных границ.



Рис.2.9а,б. Распределения зеркальной и незеркальной интенсивностей в логарифмическом (Log ¹⁰) масштабе для (+) (Рис.2.9а) и для (-) (Рис.2.9б) спиновых компонент нейтронов, измеренные на ПМС $12Fe(118 \text{ }^{\text{A}})/Ge(82 \text{ }^{\text{A}})$. α_i и α_f - входной и выходной углы скольжения, соответственно.

2.2. Исследования на EROS и ADAM.

Для более углубленного изучения явления незеркального рассеяния поляризованных нейтронов на магнитных многослойных структурах, нами были проведены измерения на двух похожих магнитных многослойных системах: Fe/Al и Co/Ti.

Вследствие того, что эффект незеркального рассеяния увеличивается квадратично с ростом количества межслойных границ, на которых шероховатость конформно коррелирована [8], мы приготовили специально два образца, имеющих максимально возможное число пар слоев для получения образцов хорошего качества, на напылительной установке A700Q фирмы Leybold-Heraeus. Оба образца 60Co/Ti и 60Fe/Al содержат 60 пар чередующихся слоев, напыленных непосредственно на стеклянные подложки с размерами 5х32х100 мм³. Для первого

образца – это слои железа и алюминия с толщинами слоев $d_1 = 121 \text{ Å}$ и $d_2 = 91 \text{ Å}$, соответственно. Для второго образца – это слои кобальта и титана с толщинами слоев $d_1 = 101 \text{ Å}$ и $d_2 = 84 \text{ Å}$, соответственно.

Номинальные толщины слоев d_1 и d_2 выбраны для каждого образца четвертьволновыми, т.е. такими, чтобы обеспечить максимальный коэффициент отражения при выполнении условия брэгга первого порядка. Специальная пропорция изотопов железа (концентрация в атомных % для ⁵⁴Fe : 28% ± 0.4%, для ⁵⁶Fe : 70.1% ± 0.4%, для ⁵⁷Fe : 1.65% ± 0.10%, для ⁵⁸Fe : 0.23% ± 0.05%), использованная в системе Fe/Al позволяла сделать оптический потенциал слоев железа в насыщенном состоянии близким к потенциалу алюминия для (-) спиновой компоненты нейтрона. Такая пропорция изотопов железа используется в нейтронных поляризаторах на кремнии. Таким образом, для идеальной структуры в зеркальном отражении для (-) спиновой компоненты не должно было быть брэгговского отражения. То же самое справедливо и для системы Co/Ti, но без подбора изотопов, т.к. потенциал слоев кобальта в насыщенном состоянии равен потенциалу слоев титана для (-) спиновой компоненты нейтрона.

Исследования проводились при насыщающем магнитном поле на времяпролетном рефлектометре EROS (в поляризационной моде) в Лаборатории Леона Бриллюэна в международном научном центре Сакле (Франция). В результате проведенных исследований на данных образцах 60Со/Ті и 60Fe/Al были обнаружены сильные пики на квазибрэгговских полосах для обоих образцов [22].

Как отмечалось выше, метод поляризационной нейтронной рефлектометрии очень эффективен для исследования образцов магнитных ИМТС. Этот метод особенно удобен для изучения таких свойств тонких пленок и ИМТС, как гигантское магнетосопротивление (GMR), обменная связь между ферромагнитными слоями, интердиффузия, доменная структура и т.д. Известно, что межслойные шероховатости оказывают значительное влияние на различные свойства магнитных ИМТС и они могут быть успешно изучены в экспериментах по незеркальному рассеянию поляризованных нейтронов. Как отмечалось выше, ряд замечательных особенностей был наблюден в картинах рассеяния, если шероховатости на межслойных границах периодических ИМТС конформно коррелированы [8, 21, 22]. Магнитное незеркальное рассеяние поляризованных нейтронов может обеспечить не только информацию о корреляциях между атомными шероховатостями, но и о корреляциях в распределении магнитных моментов в слоях и в межслойных границах (магнитная шероховатость), а также об эволюции этого распределения в процессе намагничивания магнитных ИМТС.

В данном разделе далее обсуждаются результаты магнитно-полевых зависимостей картин незеркального рассеяния, полученные на одном из этих образцов - 60Co/Ti [23] на нейтронном рефлектометре ADAM. Измерения проводились с целью подтверждения результатов, полученных на рефлектометре EROS и изучения динамики изменения сильных пиков на квазибрэгговской полосе 2-го порядка в зависимости от приложенного магнитного поля. ADAM (Advanced Diffractometer for Analysis Materials) – новый высокоинтенсивный the поляризационный нейтронный рефлектометр, установленный на высокопоточном реакторе в международном научном центре Институте Лауэ - Ланжевена (ИЛЛ, Гренобль, Франция). ADAM – нейтронный рефлектометр с фиксированной длиной волны, который сочетает в себе высокий поток (в том числе и вследствие использования фокусирующего монохроматора) с высоким разрешением по Q. На этом рефлектометре достижимы коэффициенты отражения вплоть до 10⁻⁸ и интервал по Q простирается не менее чем до 5 нм⁻¹. Схема нейтронного рефлектометра ADAM в поляризационной моде представлена на Рис.2.10. В приборе используется фокусирующий монохроматор *M*, состоящий из высококачественных кристаллов пиролитического графита, установленный в нейтроноводе H53 реактора ИЛЛ. Монохроматор фокусирует пучок с длиной волны $\lambda = 4.41 \text{ Å}$ и $\Delta \lambda / \lambda = 0.006$ в вертикальной плоскости. Для подавления вкладов нейтронов с λ/n (n = 2.3...) установлен Ве-фильтр Ве, охлаждаемый жидким азотом. В качестве поляризатора П падающего пучка и анализатора, рассеянного на образце пучка используются поляризующие суперзеркала CoFe/Si на кремниевой подложке. При этом пучок не меняет свое направление при переходе из неполяризующей моды в поляризующую. Диафрагмы *Д*₁ и *Д*₂ формируют угловую расходимость, падающего на образец пучка. В схеме используются два спин-флиппера СФ Мезея. Зеркально отраженные на угол α_i и рассеянные на угол α_f на образце нейтроны, проходя через диафрагму Д₃, регистрируются детектором. В качестве детектора Дет. используется одиночный счетчик с заполнением He³, установленный в защите на юстировочном столике. Образец помещается в зазор электромагнита (электромагнит на этом рисунке не показан), так что плоскость рассеяния горизонтальная. Электромагнит помещается на юстировочный стол образца с двумя подвижками: поворот и перемещение поперек пучка. Измерения коэффициента зеркального отражения проходят в стандартной геометрии θ - 2θ , тогда как измерения незеркального рассеяния можно проводить с использованием других геометрий сканирования, например, θ - сканирование при $Q_z = const$ или кривые качания. Программное обеспечение прибора позволяет осуществлять проведение исследований полностью в автоматическом режиме, включая изменение ширин щелей диафрагм *Д*₁, *Д*₂ и Д₃. Такая схема нейтронного рефлектометра с анализом поляризации рассеянного пучка и с использованием фокусирующего монохроматора PG, поляризатора и анализатора на кремниевых пластинах, впервые была использована Маршаком (NIST, USA) и явилась развитием поляризационной нейтронной рефлектометрии, начало которой, как отмечается в литературе, положил Фельчер (ANL, USA).



Рис.2.10. Схема нейтронного рефлектометра ADAM в поляризационной моде.

Для данных измерений, падающий коллимированный пучок имел угловую расходимость 0.1^0 и поляризацию 0.96. В начале были проведены измерения коэффициентов зеркального отражения (+) R^+ и (-) R^- спиновых компонент пучка от образца для брэгговского пика 1-го порядка ($Q_z \approx 0.035 \text{ Å}^{-1}$) в зависимости от

магнитного поля H, приложенного к образцу в его плоскости. Из величин R^+ и R^- легко получить, на основании выражения (1.26), величину поляризующей эффективности P. По зависимости поляризующей эффективности магнитной ПМС для брэгговского пика 1-го порядка от приложенного к этой ПМС магнитного поля, в плоскости ее слоев, можно судить о магнитном состоянии магнитных слоев данной ПМС. Действительно, коэффициент отражения нейтронного пучка от ПМС, состоящей из чередующихся слоев материалов A и B, для брэгговского пика m-го порядка этой ПМС в кинематическом приближении представлен следующим выражением [24, 25]:

$$R_{m} = \frac{4N^{2}d^{4}|F_{m}|^{2}}{m^{2}}$$

(2.1)

где N - число пар слоев,

т - порядок брэгговского отражения,

d - толщина периода ПМС,

|*F*_{*m*}| - структурный фактор бислоя.

$$\left|F_{m}\right| = \left[\left(f_{A} - f_{B}\right)\frac{\sin(ms\,\pi)}{m\,\pi}\right]^{2}$$

(2.2)

где $s = d_A / (d_A + d_B)$,

 f_A и f_B - плотности длин рассеяния слоев A и B, соответственно,

$$f_A = (Nb)_A, \quad f_B = (Nb)_B$$

Если материал А – магнитный, то из (1.14) следует:

$$f_A^{\pm} = N_A b_A \pm \frac{C}{N_A} B_A$$

(2.3)

где С – константа, определенная в (1.14),

*В*_{*A*} - магнитная индукция слоя *A*.

Используя выражения (2.1)-(2.3) и (1.26), можно получить выражение для зависимости поляризующей эффективности *P* образца магнитной ПМС для брэгговского пика 1-го порядка от магнитной индукции ^{*B*} слоев материала *A*:

$$P = \frac{\left[\left(1 + K_0 B\right) / (1 - K_0 B)\right]^2 - 1}{\left[\left(1 + K_0 B\right) / (1 - K_0 B)\right]^2 + 1}$$

(2.4)

 $\Gamma_{\mathcal{A}} \mathbf{e} \ K_0 = C / (N_A b_A - N_B b_B) \, .$

Таким образом, при приложении к образцу магнитной ПМС, в его плоскости, магнитного поля напряженностью H, в образце возникает магнитная индукция B. Величина B определяет, согласно выражению (2.4), величину поляризующей эффективности P образца для $Q_z = Q_{1B}$.

Как следует из (2.4), когда B=0, то и P=0, а при росте B от 0 до B_{\max} , P также растет от 0 до $P = P_{\max} \le 1$. Если B<0 (образец намагничен антипараллельно внешнему намагничивающему полю H), то P<0, как легко видеть из (2.4), т.к. при этом дробь в квадратных скобках становится меньше 1.

На Рис.2.11 представлена зависимость поляризующей эффективности образца P, измеренная для положения 1-го брэгговского максимума ($Q_z \cong 0.035 \text{ Å}^{-1}$) при зеркальном отражении нейтронного пучка от образца в зависимости от магнитного поля H, приложенного к образцу в его плоскости. Из рисунка следует, что образец намагничен антипараллельно, приложенному полю, если H < 19.7 Э, т.к. P < 0, и направление намагниченности образца меняется на противоположное и совпадает с направлением, приложенного поля H при H > 19.7 Э, т.к. P > 0. Образец размагничен при $H \cong 19.7$ Э, т.к. $P \cong 0$, и для H > 40 Э магнитное состояние образца близко к насыщению, т.к. $P = P_{\text{max}}$ и близко к 1.



Рис.2.11. Зависимость поляризующей эффективности для пика 1-го брэгговского максимума ($Q_z \approx 0.035 \text{ Å}^{-1}$) ПМС 60Со/Ті от магнитного поля *H*, приложенного к образцу в его плоскости.

Интенсивность магнитного незеркального диффузного рассеяния измерялась в геометрии углового сканирования образца (кривые качания или поперечные диффузные сканирования TDS (см., например, [20]) при трех фиксированных положениях детектора (Рис.2.12-2.14), которые были определены положениями брэгговских отражений 1-го, 2-го и 3-го порядков с $Q_z \cong 0.035$; 0.067; 0.101 Å⁻¹, соответственно. Значения Q_z брэгговских пиков для этого образца были определены на EROS. Эти измерения проведены для обеих спиновых компонент пучка и трех характерных значений магнитного поля H, приложенного к образцу (Рис.2.11): 1) $H_1 = 19.7 \ \Im$ – размагниченное состояние, $P \cong 0$ и $B \cong 0$; 2) $H_2 = 22.9 \ \Im$ – частично размагниченное состояние, $P \cong 0.5$ и $B \cong 0.27B_{max}$ (получено из (2.4)); 3) $H_3 = 1730 \ \Im$ – насыщенное состояние образца, $P = P_{max}$ и $B = B_{max}$. Данные представлены в виде зависимостей интенсивности I незеркального (диффузного) рассеяния от параллельной к плоскости образца компоненты переданного импульса Q_x . Как следует из Рис.2.12 кривые качания для брэгговского отражения 2-го порядка для H_3

(квадраты) для (+) спиновой компоненты имеют заметные особенности – два пикасателлита при $Q_x \cong \pm 0.0008 \, \text{\AA}^{-1}$ с интенсивностью даже выше чем зеркальный пик при $Q_x = 0$. Сателлит при $Q_x \cong -0.0008 \, {\mathring{A}}^{-1}$ возникает, когда $\alpha_i = \alpha_{1B}^+ \cong 0.68^{-0}$ и α_f $=\alpha_{3B}^+ \cong 2.05^{\circ}$. Сателлит при $Q_x \cong +0.0008 \text{ Å}^{-1}$ возникает, когда $\alpha_i = \alpha_{3B}^+ \cong 2.05^{\circ}$ и $\alpha_f =$ $\alpha_{1B}^{+} \cong 0.68^{-0}$. Таким образом, мы получили результат, совпадающий с результатом, полученным на EROS'е, т.е. сателлиты, здесь, на ADAM'е, есть сильные пики на EROS'е, т.к. они возникают тоже при выполнении условий брэгга для входной и выходной волн, одновременно, но для разных порядков. Следует отметить значительное изменение интенсивности сателлитов при изменении магнитного поля от H_1 до H_3 . Для малых полей H_1 и H_2 интенсивность рассеяния, измеренная в промежутке между основным пиком и сателлитами для обеих спиновых компонент, заметно выше чем при H_3 . Можно также увидеть увеличение рассеяния и на других кривых качания: для брэгговского отражения 1-го порядка при H₁ и H₂ (Рис.2.13) для обеих спиновых компонент, и для брэгговского отражения 3-го порядка (Рис.2.14) для (-) спиновой компоненты при H₁ (крестики). Во-первых, это может быть объяснено тем фактом, что в этих полях число магнитных неоднородностей увеличивается они вносят дополнительное рассеяние. И во-вторых, И неколлинеарностью между векторами индукции на межслойных границах и начальной поляризацией нейтрона. Следует рассмотреть и другие (после сателлитов) особенности в незеркальном рассеянии, наблюденные на кривых качания для брэгговского отражения 3-го порядка (Рис.2.14) для (+) спиновой компоненты при Н₃ (квадратики) и при H₂ (верхние треугольники), заметные провалы для $Q_x \cong \pm 0.0024 \text{ Å}^{-1}$, которые также имеют место, когда удовлетворяются условия брэгга для падающей и рассеянной нейтронных волн. Сателлит при $Q_x \simeq$ -0.0024 Å $^{-1}$ возникает, когда $\alpha_i = \alpha_{1B}^+ \cong 0.68^{-0}$ и $\alpha_f = \alpha_{5B}^+ \cong 3.41^{-0}$. Сателлит при $Q_x \cong$ +0.0024 Å ⁻¹ возникает, когда $\alpha_i = \alpha_{5B}^+ \cong 3.41^0$ и $\alpha_f = \alpha_{1B}^+ \cong 0.68^0$. Следует отметить, что интенсивность зеркального пика (кривые качания брэгговского отражения 2-го порядка (Рис.2.12)) для (-) спиновой компоненты при H_3 (ромбики) больше почти в 4 раза, чем аналогичный пик для (+) спиновой компоненты (квадратики). Это возникает, опять таки, вследствие образования магнитно «мертвых» слоев на межслойных границах в структуре Со/Ті, как обсуждалось в предыдущем разделе для образца 20Со/Ті.



Рис.2.12. Кривые качания для брэгговского отражения 2-го порядка ($Q_z \simeq 0.067 \, \text{\AA}^{-1}$), как функции Q_x (Q_x и Q_z - параллельная и перпендикулярная плоскости образца компоненты переданного импульса, соответственно) для обеих спиновых компонент нейтрона и для трех характерных величин магнитного поля H, приложенного к образцу 60Co/Ti в его плоскости.



Рис.2.13. Кривые качания для брэгговского отражения 1-го порядка ($Q_z \cong 0.035 \, \text{\AA}^{-1}$), как функции Q_x (Q_x и Q_z - параллельная и перпендикулярная плоскости образца компоненты переданного импульса, соответственно) для обеих спиновых компонент нейтрона и для трех характерных величин магнитного поля H, приложенного к образцу 60Co/Ti в его плоскости. Кривые сдвинуты друг относительно друга вдоль оси ординат для удобства восприятия.



Рис.2.14. Кривые качания для брэгговского отражения 3-го порядка ($Q_z \cong 0.101 \, \text{\AA}^{-1}$), как функции Q_x (Q_x и Q_z - параллельная и перпендикулярная плоскости образца компоненты переданного импульса, соответственно) для обеих спиновых компонент нейтрона и для трех характерных величин магнитного поля H, приложенного к

образцу 60Со/Ті в его плоскости. Кривые сдвинуты друг относительно друга вдоль оси ординат для удобства восприятия.

2.3. Обсуждение экспериментальных результатов.

Проведенные Сыромятниковым В.Г. исследования незеркального рассеяния поляризованных нейтронов на многослойных магнитных структурах, инициировали сотрудника ПИЯФ Б.П.Топерверга на создание теории, объясняющей это явление. Такая теория была создана в рамках Борновского Приближения Искаженных Волн (БПИВ).

Как известно, дифференциальное сечение нейтронного рассеяния записывается следующим уравнением:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \tag{2.5}$$

где f - амплитуда рассеяния. В Борновском Приближении амплитуда выглядит так: $f \sim \langle \Psi^{f} | V | \Psi^{i} \rangle$ (2.6)

где Ψ^{i} и Ψ^{f} - волновые функции, описывающие падающую и рассеянную нейтронные волны, соответственно;

V – потенциал рассеяния, где $V(\vec{r}) = V_N(\vec{r}) + V_{mag}(\vec{r})$,

 $V_{N}(\vec{r})$ и $V_{mag}(\vec{r})$ - ядерная и магнитная части потенциала рассеяния, соответственно.

В Борновском Приближении Искаженных Волн выражение для ^{*f*} для многослойной структуры, состоящей из *N* слоев с неидеальными межслойными границами:

$$f = \sum_{m=1}^{N} f_m = \sum_{m=1}^{N} \left\langle \Psi_m^{f} \left| V_m \right| \Psi_m^{i} \right\rangle$$
(2.7)

где $V_m(\vec{r}) = V_m(z) + \delta V_m(\vec{r})$ - потенциал рассеяния на *m*-м слое структуры;

 $V_m(z)$ - невозмущенная часть потенциала (зависит только от координаты, направленной перпендикулярно поверхности образца вглубь структуры), соответствующая рассеянию на структуре с идеальными (гладкими) границами;

*δ V*_{*m*}(*r*) - флуктуирующая (возмущенная) часть потенциала; определяется шероховатостью (или другими дефектами межслойных границ);

 Ψ_{m}^{i} и Ψ_{m}^{f} - волновые функции, описывающие падающую и рассеянную нейтронные волны, соответственно, в *m*-м слое структуры с идеальными (гладкими) границами;

После подстановки выражения для амплитуды рассеяния в общем виде, выражение для дифференциального сечения незеркального (диффузного) рассеяния в БПИВ на произвольной многослойной структуре с неидеальными межслойными границами будет очень сложным и громоздким. Это сильно затрудняет работу с ним.

После сложных преобразований и упрощений получим проинтегрированное в у -плоскости выражение для дифференциального сечения незеркального (диффузного) рассеяния, в БПИВ, на произвольной многослойной структуре, соответствующее стандартному случаю нейтронных измерений с одиночным счетчиком (щелевая геометрия) [8, 26]:

$$\frac{d\overline{\sigma}^{y}}{d\Omega} = \lambda \cdot S \cdot \sum_{i,j=1}^{N+1} \delta_{i} \cdot \delta_{j}^{*} \cdot C_{i-1,j-1}(q_{x},q_{z}) \cdot (t_{i}^{f} + r_{i}^{f}) \cdot (t_{i}^{i} + r_{i}^{i}) \cdot \left[(t_{j}^{f} + r_{j}^{f}) \cdot (t_{j}^{i} + r_{j}^{i}) \right]$$
(2.8)

где $\delta_i = (N \cdot b)_i - (N \cdot b)_{i-1}$; *S* – площадь засветки образца; λ – длина волны нейтрона; $t_{i,j}^{f(i)}$ и $r_{i,j}^{f(i)}$ – коэффициенты пропускания и отражения волновых функций для идеальной многослойной структуры, определенные на границах *i*-го и *j*-го слоев;

 $C_{ij}(q_x, q_z)$ - фурье-преобразование корреляционной функции $C_{ij}(\rho)$;

q _{*x*} и *q* _{*z*} - компоненты переданного импульса.

Межслойные границы неидеальных многослойных структур характеризуются $C_{ij}(\rho)$

корреляционными функциями высот (отклонений) *h* на *i* и *j* межслойных границах многослойной структуры:

$$C_{ij}(\rho) = \left\langle h_i(0), h_j(\rho) \right\rangle = \sqrt{\sigma_i^2 \cdot \sigma_j^2} \cdot \exp\left[-\left(\frac{\rho}{\xi_{ij}}\right)^{2n_0}\right]$$
(2.9)

где *^р* - относительная латеральная координата;

 σ_{i} и σ_{j} - среднеквадратичные шероховатости, усредненные по всем точкам на *i*-ой и *j*-ой межслойных границах структуры, соответственно, и определенные как:

$$\sigma_{i(j)} = \sqrt{\left\langle \left[h(\rho_{i(j)})\right]^2 \right\rangle}; \qquad (2.10)$$

$$h_0 - \text{экспонента шероховатости} (0 < h_0 < 1);$$

$$\xi_{ij} = \xi_0 \cdot \exp\left[-\frac{|i-j|}{\Lambda_0}\right]; \qquad (2.10)$$

ξ[°] - средняя латеральная корреляционная длина шероховатости, усредненная по всем границам структуры;

Λ₀ - корреляционная длина шероховатостей перпендикулярно плоскостям слоев, которая определяет степень конформности структуры.

Можно выделить два варианта развития шероховатостей в направлении перпендикулярном плоскостям слоев структуры. Это конформные шероховатости, когда $\Lambda_0 \neq 0$ *u* $C_{ij}(\rho) \neq 0$ *для* $i \neq j$ (Рис.2.15) и полностью некоррелированные шероховатости, когда $\Lambda_0 = 0$ *u* $C_{ij}(\rho) = 0$ *для* $i \neq j$ (Рис.2.16).

Используя выражение (2.8) и свертывая результаты расчетов с экспериментальным разрешением для ADAM'а была построена контурная карта для образца 60Co/Ti распределения зеркальной и незеркальной (диффузной) интенсивностей для (+) спиновой компоненты нейтронного пучка и для магнитно насыщенного состояния слоев кобальта. Это распределение представлено на Рис.2.17 для $\lambda = 4.41 \text{ Å}$. Точечными линиями отмечены кривые, при которых α_i или α_f равны нулю. На этом рисунке воспроизведены в деталях все особенности карты, измеренной экспериментально на этом образце на EROS.

1)



Рис.2.15. Конформные шероховатости. $\Lambda_0 \neq 0$ и $C_{ij}(\rho) \neq 0$ для $i \neq j$.



Как демонстрировалось и теоретически объяснялось в 1.3, 2.1 (ТОRЕМА II) и в [8, 21-23], незеркальное рассеяние получает значительное когерентное усиление, если компонента Q_z переданного импульса, перпендикулярная поверхности образца сравнивается с периодом ПМС - D, т.е. если $Q_z \cdot D \approx 2 \cdot \pi \cdot n$, где n - целое число. Это следует и из (2.8). Это усиление обусловлено корреляцией шероховатостей на различных межслойных границах в направлении перпендикулярном плоскостям слоев. В результате, распределение незеркального (диффузного) рассеяния, построенное в координатах плоскости { Q_x , Q_z } организовано в квазибрэгговские полосы, идущие перпендикулярно зеркальному «хребту» { $Q_x = 0$ } и пересекающими его в точках брэгговских отражений. Об образовании квазибрэгговских полос говорилось в разделе 1.3.

В отличие от [22], эксперимент, выполненный на нейтронном рефлектометре ADAM [23] в ILL, являясь продолжением эксперимента на EROS, нацелен на более тщательное исследование наиболее существенных фракций карты, представленной на Рис.2.17.

Вертикальными пунктирными линиями на Рис.2.17 отмечены в пределах квазибрэгговских полос 1-го, 2-го и 3-го порядков линии с $Q_z \cong 0.035$; 0.068; 0.102 Å⁻¹ вдоль которых были сняты на образце 60Со/Ті экспериментальные кривые качания на нейтронном рефлектометре ADAM. Вдоль этих линий было также проведено фитирование, полученных экспериментальных точек к теоретической модели из [8], построенной в рамках БПИВ с учетом разрешения. Результаты представлены на Рис.2.18-2.20 [26].



Рис.2.17. Расчетное распределение зеркальной и незеркальной интенсивностей для (+) спиновой компоненты нейтронного пучка, рассеянного на ПМС 60Со/Ті с учетом экспериментального разрешения. Q_x и Q_z – параллельная и перпендикулярная компоненты переданного импульса, соответственно. Точечными линиями отмечены кривые, при которых α_i или α_f равны нулю.



Рис.2.18. Кривые качания для полос квазибрэгговского рассеяния 1-го порядка, полученные при соответствующих постоянных величинах $Q_z \cong 0.035$; 0.068; 0.102 Å⁻¹ для образца 60Со/Ті. Линии, соответствующие этим величинам Q_z , показаны пунктиром на Рис.2.17. Квадратики - экспериментальные данные для кривых

качания. Непрерывные линии - результат моделирования по теоретической модели, описанной в тексте.



Рис.2.19. Кривые качания для полос квазибрэгговского рассеяния 2-го порядка, полученные при соответствующих постоянных величинах $Q_z \cong 0.035$; 0.068; 0.102 $^{\text{A}}$ - 1 для образца 60Со/Ті. Линии, соответствующие этим величинам Q_z , показаны пунктиром на Рис.2.17. Квадратики - экспериментальные данные для кривых качания. Непрерывные линии - результат моделирования по теоретической модели, описанной в тексте.



Рис.2.20. Кривые качания для полос квазибрэгговского рассеяния 3-го порядка, полученные при соответствующих постоянных величинах $Q_z \cong 0.035$; 0.068; 0.102 Å⁻¹ для образца 60Со/Ті. Линии, соответствующие этим величинам Q_z , показаны пунктиром на Рис.2.17. Квадратики - экспериментальные данные для кривых качания. Непрерывные линии - результат моделирования по теоретической модели, описанной в тексте.

Непрерывные линии на этих рисунках - результат фитирования. Как видно из этих рисунков, БПИВ хорошо описывает экспериментальные данные. Распределение интенсивности вдоль первой квазибрэгговской полосы на Рис.2.18 почти не зависит от Q_x , кроме диапазона, где или входной угол скольжения α_i или выходной угол скольжения α_f - меньше критического угла полного отражения α_c . В этом диапазоне, интенсивность резко понижается до нуля. Несоответствия между теорией и данными на минимальных и максимальных значениях Q_x обусловлены тем, что не учтены, должным образом, поправки на засветку образца для углов близких к горизонту.

Рис.2.19 для кривой качания 2-го порядка, в отличие от невыразительной квазибрэгговской полосы первого порядка на Рис.2.13, весьма замечателен тем, что имеет два сателлита, расположенных на $Q_x \cong \pm 0.8 \times 10^{-3} \text{ Å}^{-1}$ симметрично относительно зеркального пика, и их интенсивность даже выше, чем пик зеркального отражения. Напротив, кривая качания для квазибрэгговской полосы 3го порядка, изображенная на Рис.2.20 имеет два провала при $Q_x \cong \pm 2.4 \times 10^{-3} \text{ Å}^{-1}$ относительно зеркального пика. Природа этих пиков и провалов будет обсуждена ниже. Оба пика на Рис.2.19 (при n = 2, m = 1; $Q_x \cong \pm 0.8 \times 10^{-3} \text{ Å}^{-1}$) и провалы на Рис.2.20 (при n = 3, m = 2; $Q_x \cong \pm 2.4 \times 10^{-3} \text{ Å}^{-1}$) хорошо воспроизведены в модельных вычислениях в рамках БПИВ, как показано непрерывными линиями на рисунках. В этих вычислениях получены при фитировании и использовались в расчетах плотности длин рассеяния Nb (в 10^{-6} Å^{-2}): Nb⁺(Co) = 6.48, Nb⁻(Co) = -1.94, Nb (Ti) = -1.94; толщины слоев: a (Co) = 94 Å, a (Ti) = 91 Å; *r.m.s.* шероховатость σ = 20 Å; экспонента шероховатости h = 0.5. Из-за ограниченного диапазона в Q_x мы не смогли найти латеральную длину корреляции ξ_{l} . В вычислениях также было принято, что шероховатости конформно коррелированы на всех межслойных границах.

Как обсуждалось в разделе 2.3, амплитуда сателлитов в зависимости от магнитного поля изменяется значительно, почти в 4 раза, при изменении поля от *H*₁ до *H*₃ (Рис.2.11). Провалы на кривых качания 3-го порядка также меняются от поля: они исчезают при H_{\perp} . Но эти изменения не так велики по сравнению с изменением амплитуды сателлитов. Изменения особенностей распределения незеркального (диффузного) рассеяния (например, сателлиты и провалы) в зависимости от магнитного поля можно объяснить изменением величины нейтронно-оптических потенциалов магнитных слоев ПМС от магнитного поля. Эти расчетами, выполненными рассуждения подтверждаются в рамках вышерассмотренной теории. На Рис.2.21 представлены расчетные кривые качания для образца 60Co/Ti для полосы квазибрэгговского рассеяния 2-го порядка (O_z \cong 0.068 Å ⁻¹) для четырех величин магнитной индукции *В* слоев кобальта данной структуры: кривая 1 - $B = B_{\text{max}}$; кривая 2 - B = 0; кривая 3 - $B = -0.74 \cdot B_{\text{max}}$; кривая 4 - $B = -B_{\text{max}}$. Кривые построены с учетом экспериментального разрешения рефлектометра ADAM.

Можно обсудить пики и провалы, представленные на Рис.2.19 и 2.20, снова при слегка отличной точке зрения. При внимательном взгляде на Рис.2.17 можно разглядеть не только «обычные» квазибрэгговские полосы на постоянных $Q_z = k_i + k_f = 2 \cdot \pi \cdot n / D$, где $k_{i(f)} = (2 \cdot \pi / \lambda) \sin \alpha_{i(f)}$, и n – целое, но также и пару других - «особых» полос, бегущих между зеркальным хребтом и левым и правым горизонтами, определенных соотношением $\alpha_{i(f)} = 0$. Для этих полос выполняется соотношение

 $Q_x = \pm const \cdot Q_z$, т.е. Q_x линейно зависит от Q_z . Это незеркальное (диффузное) рассеяние распространяется по направлениям, на которых условие брэгга удовлетворено для «особого» переданного импульса $Q_z^* = k_i - k_f = 2 \cdot \pi \cdot p / D$,



Рис.2.21. Расчетные кривые качания для образца 60Со/Ті для полосы квазибрэгговского рассеяния 2-го порядка ($Q_z \cong 0.068 \ ^{A} \ ^{-1}$) для четырех величин магнитной индукции *B* слоев кобальта данной структуры: кривая 1 - $^{B = B_{\text{max}}}$; кривая 2 - $^{B = 0}$; кривая 3 - $^{B = -0.74 \ \cdot B_{\text{max}}}$; кривая 4 - $^{B = -B_{\text{max}}}$. Кривые построены с учетом экспериментального разрешения рефлектометра ADAM.

(*p* = ± 1, ± 2), когда входная волна, проходящая через структуру испытывает сильное отражение и распространяясь далее в новом направлении через структуру, является сама источником диффузного рассеяния, испытывая рассеяние на шероховатостях межслойных границ. Чтобы понять природу этих «обычных» и «особых» полос следует проанализировать общее выражение для амплитуды рассеяния нейтронного пучка на ИМТС с неидеальными межслойными границами в БПИВ. Из анализа структуры этой амплитуды рассеяния следует, что в диффузное рассеяние вносят вклад 4 процесса, в которых происходит изменение волновых векторов, характеризующиеся 4-мя обобщенными переданными импульсами \vec{q}_v^m , где ^V =0,1,2,3. Амплитуды этих процессов пропорциональны соответственно величинам: $t_i^m \cdot t_f^m$, $t_i^m \cdot r_f^m$, $t_f^m \cdot r_i^m$ и $r_i^m \cdot r_f^m$, где $t_i^m(f)$ и $r_i^m(f)$ – коэффициенты пропускания и отражения для *m*-го слоя идеальной структуры для входной и выходной волн, соответственно. В «обычные» квазибрэгговские полосы, в основном, два вида процессов вносят вклад амплитуды, которых пропорциональны $t_i^m \cdot t_f^m$ и $r_i^m \cdot r_f^m$. Эти процессы характеризуются произведениям двумя $\vec{q}_0^m = \vec{k}_m^f - \vec{k}_m^i$ соответствующими обобщенными переданными импульсами $\vec{q}_3^m = \vec{k}_m^{\prime f} - \vec{k}_m^{\prime i}$

Для «особых» полос с $Q_z^* = k_i - k_f = 2 \cdot \pi \cdot p / D (p = \pm 1, \pm 2 \dots)$ вносят вклад тоже два процесса рассеяния амплитуды, которых пропорциональны произведениям $t_f^m \cdot r_i^m$ и

 $t_i^m \cdot r_f^m$. Эти амплитуды модулируются в анти-фазы, и их произведение относительно небольшое. Следовательно, эти «особые» полосы на Рис.2.17 намного слабее, чем «обычная» квазибрэгговская полоса первого порядка. Эти процессы характеризуются двумя соответствующими обобщенными переданными импульсами $\vec{q}_1^m = \vec{k}_m^f - \vec{k}_m^{'i}$ и $\vec{q}_2^m = \vec{k}_m^{'f} - \vec{k}_m^{i}$.

Вследствие того, что отношение между толщинами слоев в пределах бислоя близко к 1:1, все брэгговские пики четных порядков кривой коэффициента отражения почти запрещены и, следовательно, все квазибрэгговские полосы должны быть сильно подавлены. В частности, пик 2-го порядка на кривой коэффициента отражения, также как, соответствующая квазибрэгговская полоса, действительно, довольно слаб, и даже более слабый, чем «особые». В точках пересечения этой «обычной» и двух «особых» полос можно видеть 2 мощных пика. Это существенные особенности этой контурной карты.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые обнаружен эффект когерентного усиления незеркального рассеяния поляризованных нейтронов на конформно коррелированных шероховатостях межслойных границ в магнитных (периодических) Co/Ti, Fe/Al и Fe/Ge (и апериодических (Fe/Al)) многослойных структурах.

Впервые для одной из спиновых компонент пучка наблюдались экстремумы на квазибрэгговских полосах незеркального рассеяния поляризованных нейтронов в периодических НПММС 60Fe/Al и 60Co/Ti. При этом, для образца 60Co/Ti, на полосе 2-го порядка обнаружены максимумы, превышающие по интенсивности соответствующий зеркальный пик, в то время как на полосе 3-го порядка обнаружены минимумы. Впервые проведен детальный анализ двумерного распределения интенсивности незеркального рассеяния поляризованных нейтронов для обеих спиновых компонент как функции углов скольжения для падающей и рассеянной нейтронных волн, или поперечной и латеральной компонент переданного импульса. Установлены условия возникновения обнаруженных экстремумов, объяснена их природа и их изменение с магнитным полем.

Впервые в рамках Борновского Приближения Искаженных Волн проведено количественное описание экспериментальных данных по незеркальному рассеянию поляризованных нейтронов на периодической структуре 60Co/Ti. Параметры структуры и неидеальности, полученные при фитировании экспериментальных данных по 60Co/Ti и используемые в вычислениях при построении модельных кривых и контурной карты следующие: плотности длин рассеяния Nb (в 10⁻⁶ Å⁻²): $Nb^+(Co) = 6.48$, $Nb^-(Co) = -1.94$, Nb (Ti) = -1.94; толщины слоев: a (Co) = 94 Å, a (Ti) = 91 Å, r.m.s. шероховатость $\sigma = 20$ Å, экспонента шероховатости h = 0.5. В вычислениях было принято, что шероховатости конформно коррелированы на всех межслойных границах, т.е. глубина конформности $\xi_{i} = \infty$.

1. Абов Ю.Г., Гулько А.Д., Крупчицкий П.А. Поляризованные медленные нейтроны. // М.: Атомиздат, 1966. – 268 с.

2. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий. // М.: Наука, 1965. – 607 с.

3. Sears V.F. Neutron Optics. // Oxford University Press, New York, 1989. - 317 p.

4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. // М.: Наука, 1974. –752 с.

5. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. // М.: Наука, 1970. – 855 с.

6. Гукасов А.Г., Рубан В.А., Бедризова М.Н. О возможности интерференционного увеличения области «зеркального» отражения нейтронов на многослойных «квазимозаичных» структурах. // Письма в ЖТФ, 1977. - т.3, вып.3. - с.130.

7. Yamada S., Ebisawa T., Achiwa N., Akiyoshi T., Okamoto S. Neutron-optical properties of multilayer system. // Annual Report Research Reactor Institute Kyoto University, 1978. - v.11. - p.8.

8. Syromyatnikov V., Toperverg B., Schebetov A., Ebel T., Bittorf C., Kampmann R., Wagner R. Effect of coherent enhancement of nonspecular polarized neutron scattering from rough interfaces in periodic multilayered magnetic structures. // Preprint Petersburg Nuclear Physics Institute Gatchina, 1994. - № 2006. - p.37.

9. Schoenborn B.P., Caspar D.L.D., Kammerer O.F. A novel neutron monochromator. // Journal of Applied Crystallography, 1974. - v.7. - p.508.

10. Кезерашвили В.Я., Щебетов А.Ф., Песков Б.Г., Плешанов Н.К., Сороко З.Н., Сыромятников В.Г. Нейтронный многослойный монохроматор-поляризатор на основе пары Fe/Ag. I. Изготовление и исследование монохроматора-поляризатора. II. Влияние разнотолщинности слоев и угловой расходимости падающего пучка нейтронов на отражательную способность многослойного монохроматора-поляризатора. // ЖТФ. – 1987. - т.57, вып.7. - с.1372 (I), вып.8 - с.1632 (II).

11. Sinha S.K., Sirota E.B., Garoff S., Stanley H.B. X-ray and neutron scattering from rough interfaces. // Physical Review B. – 1988. - v.38, №4. - p.2297.

12. Sinha S.K. X-ray diffuse scattering as a probe for thin film and interface structure. // Journal Physique III France. - 1994. - v.4. - p.1543.

13. Yoneda Y. Anomalous surface reflection of X-rays. // Physical Review. – 1963. - v.131, No 5. - p.2010.

14. Sinha S.K., Sanyal M.K., Satija S.K., Majkrzak C.F., Neumann D.A., Homma H., Szpala S., Gibaud A., Morkoc H. X-ray scattering studies of surface roughness of GaAs/AlAs multilayers. // Physica B. – 1994. - v.198. - p.72.

15. Holy V., Kubena J., Ohlidal I., Lischka K., Plotz W. X-ray reflection from rough layered systems. // Physical Review B. - 1993-I, v.47, № 23. - p.15896.

16. De Boer D.K.G., Leenaers Ann J.G. Probing interface roughness by x-ray scattering. // Physica B. – 1996. - v.221. - p.18.

17. Holy V., Baumbach T. Nonspecular X-ray reflection from rough multilayers. // Physical Review B. - 1994-I. - v.49, №15. - p.10668.

18. Savage D.E., Kleiner J., Schimke N., Phang Y.-H., Jankowski T., Jacobs J., Kariotis R., Lagally M.G. Determination of roughness correlations in multilayer films for x-ray mirrors. // Journal of Applied Physics. – 1991. - v.69(3). - p.1411.

19. Bruson A., Dufour C., George B., Vergnat M., Marchal G., Mangin Ph. Interference effect in non-specular scattering from multilayers. Interpretation of the rocking curves. // Solid State Communications. – 1989. - v.71, №12. - p.1045.

20. Kortright J.B. Nonspecular x-ray scattering from multilayer structures. // Journal of Applied Physics. – 1991. - v.70, № 1. - p.3620.

21. Syromyatnikov V., Toperverg B., Deriglazov V., Schebetov A., Ebel T., Kampmann R., Wagner R. Non-specular polarized neutron scattering from rough interfaces in periodic multilayered magnetic structures. // Physica B. – 1997. - v.234-236. - p.475.

22. Syromyatnikov V.G., Menelle A., Toperverg B.P., Soroko Z.N., Schebetov A.F. Off- specular polarised neutron scattering from rough interfaces in Co/Ti and Fe/Al multilayered structures. // Physica B. – 1999. - v.267-268. - p.190.

23. Syromyatnikov V.G., Toperverg B.P., Siebrecht R., Menelle A., Pleshanov N.K., Pusenkov V.M., Schebetov A.F., Soroko Z.N., Ul'yanov V.A. Observation of peculiarities in magnetic off-specular polarised neutron scattering from rough interfaces in Co/Ti periodic multilayer. // Physica B. – 2000. - v.276-278. - p.700.

24. Saxena A.M. and Schoenborn B.P. Multilayer neutron monochromators. // Acta Cryst. – 1977. - v.A33, part 5. - p.805.

25. Sears V.F. Theory of multilayer neutron monochromators. // Acta Crystallographica. – 1983. - v.A39. - p.601.

26. Syromyatnikov V.G., Toperverg B.P., Kentzinger E., Deriglazov V.V., Kampmann R., Pleshanov N.K., Pusenkov V.M., Schebetov A.F., Siebrecht R., Ul'yanov V.A. Off-specular polarized neutron scattering from periodic Co/Ti and aperiodic Fe/Al magnetic multilayers. // Physica B. – 2001. - v. 297/1-4. - p.175.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ВЫПИСКА из протокола № 7 заседания кафедры физики от 28.12.2006

Слушали: Отчет по научно-исследовательской работе по госбюджетной теме «Физико-химические аспекты мониторинга природной среды» в 2006 г.: «Исследование незеркального рассеяния поляризованных нейтронов в магнитных многослойных структурах».

Постановили: Утвердить отчет кафедры физики по научно-исследовательской работе по госбюджетной теме «Физико-химические аспекты мониторинга природной среды» «Исследование незеркального рассеяния поляризованных нейтронов в магнитных многослойных структурах.

Председатель заседания, заведующий кафедрой физики

А.П.Бобровский

Секретарь заседания Л.Н.Белова