

**Санкт-Петербургский Государственный  
Политехнический Университет**

**Магистерский диплом**

**студента группы 6058/1  
Нучные руководители : Д.А.Паршин, Б.П.Топерверг  
Нучный консультант U.Rücker**

**Резонансные состояния нейтрона в магнитных  
наноструктурах**

**Санкт-Петербург  
2003**

## Содержание

|           |                                                                                                   |           |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b>  | <b>Введение</b>                                                                                   | <b>5</b>  |
| <b>2</b>  | <b>Цель работы</b>                                                                                | <b>6</b>  |
| <b>3</b>  | <b>Поляризованные нейтроны как метод исследования слоистых структур</b>                           | <b>7</b>  |
| <b>4</b>  | <b>Метод резонансного усиления</b>                                                                | <b>8</b>  |
| 4.1       | Резонансные состояния . . . . .                                                                   | 8         |
| 4.2       | Эффект Ионеда . . . . .                                                                           | 9         |
| 4.3       | Брэгговские отражения от многослойной пленки . . . . .                                            | 11        |
| <b>5</b>  | <b>Применение резонансных состояний</b>                                                           | <b>13</b> |
| 5.1       | Применение резонансных состояний в физике полимеров . . . . .                                     | 14        |
| 5.2       | Мгновенная гамма-эмиссия и резонансное усиление нейтронных стоячих волн в тонкой пленке . . . . . | 16        |
| <b>6</b>  | <b>Описание теоретической модели</b>                                                              | <b>19</b> |
| <b>7</b>  | <b>Вывод основных уравнений</b>                                                                   | <b>20</b> |
| <b>8</b>  | <b>Рекуррентные соотношений для амплитуд прошедшей и отраженной волны в многослойной пленке</b>   | <b>22</b> |
| 8.1       | Явное выражение для коэффициента отражения от трехслойной пленки . .                              | 23        |
| <b>9</b>  | <b>Поведение коэффициента отражения Френеля</b>                                                   | <b>23</b> |
| <b>10</b> | <b>Резонансные состояния</b>                                                                      | <b>25</b> |
| <b>11</b> | <b>Предельные случаи резонанса</b>                                                                | <b>26</b> |
| 11.1      | Первый предельный случай - ширина первого слоя велика . . . . .                                   | 27        |
| 11.2      | Второй предельный случай - ширина первого слоя мала . . . . .                                     | 29        |
| <b>12</b> | <b>Численные симуляции</b>                                                                        | <b>30</b> |
| 12.1      | Оптимизация параметров системы, для наблюдения резонанса . . . . .                                | 31        |
| 12.2      | Ширина первого и второго слоя . . . . .                                                           | 31        |
| 12.3      | Зависимость от поглощения . . . . .                                                               | 32        |
| <b>13</b> | <b>Изготовление образцов с оптимальными параметрами</b>                                           | <b>34</b> |
| 13.1      | Методы изготовления магнитных наноструктур . . . . .                                              | 34        |
| 13.2      | Метод молекулярно-лучевой эпитаксии . . . . .                                                     | 36        |
| <b>14</b> | <b>Рефлектометр HADAS</b>                                                                         | <b>39</b> |
| <b>15</b> | <b>Эксперимент</b>                                                                                | <b>46</b> |
| 15.1      | Первые результаты . . . . .                                                                       | 49        |
| 15.2      | Результаты измерений . . . . .                                                                    | 51        |
| 15.3      | Обработка данных . . . . .                                                                        | 55        |
| 15.4      | Номинальные и реальные углы падения . . . . .                                                     | 55        |

|           |                                                                                                         |           |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 15.5      | Обработка данных, для определения экспериментальной зависимости $\mathcal{R}$ от угла падения . . . . . | 58        |
| 15.6      | Экспериментальная зависимость $\mathcal{R}$ , от угла падения . . . . .                                 | 58        |
| <b>16</b> | <b>Заключение</b>                                                                                       | <b>67</b> |
| <b>17</b> | <b>Благодарности</b>                                                                                    | <b>69</b> |
| <b>18</b> | <b>Приложение А</b>                                                                                     | <b>71</b> |
| <b>19</b> | <b>Приложение Б</b>                                                                                     | <b>77</b> |

Список наиболее часто встречающихся обозначений

$\mathfrak{R}$  - коэффициент отражения пленки  
 $R_F$  - коэффициента отражения Френеля  
 $R'_F$  - вещественная часть, коэффициента отражения Френеля  
 $R''_F$  - мнимая часть, коэффициента отражения Френеля  
 $\chi$  - френелевская фаза  
 $R$  - амплитуда отраженной волны  
 $T$  - коэффициент пропускания подложки  
 $\alpha_i$  - угол падения нейтронов  
 $\alpha_f$  - угол отражения  
 $m$  - масса нейтрона  
 $\hbar$  - постоянная Планка  
 $p_0$  - импульс нейтрона в вакууме  
 $p_c$  - критическая граница полного внешнего отражения  
 $p_1$  - импульс нейтрона в первом слое  
 $p'_1$  - вещественная часть  $p_1$   
 $p''_1$  - мнимая часть  $p_1$   
 $d_1$  - толщина первого слоя  
 $d_2$  - толщина второго слоя  
 $\varphi_1 = p_1 d_1$  - фаза нейтронной волны в первом слое  
 $\varphi_2 = p_0 d_2$  - фаза нейтронной волны во втором слое  
 $\lambda$  - длина волны нейтрона

# 1 Введение

В последние годы огромный интерес вызывают исследования в области физики так называемых магнитных структур, и в частности, тонких магнитных пленок. Принято считать, что тонкой магнитной пленкой является слой магнитного материала толщиной от нескольких ангстрем до десятков тысяч ангстрем, или структура образованная несколькими слоями магнитных и немагнитных материалов.

В настоящее время тонким магнитным пленкам посвящено множество статей и монографий, ежегодно результаты изучения физических свойств тонких пленок обсуждаются на российских и международных конференциях.

Прежде всего такой интерес связан с тем, что изучение физических свойств ферромагнитных пленок способствует решению фундаментальных проблем физики магнитных явлений, развитию теории ферромагнетизма. Исследование пленок позволяет получать новую и ценную информацию о магнитных свойствах ферромагнетиков, и углубить наши знания по многим вопросам магнетизма. Обладая рядом уникальных свойств, тонкие пленки позволяют исследовать физическую природу анизотропии ферромагнетиков, сделать выводы о процессах перемагничивания, открыть новые физические явления таких как, например, гигантское магнитосопротивление. В тонких пленках можно реализовать состояния, которые трудно получить в обычных массивных магнитных образцах.

Но кроме всего этого, магнитные наноструктуры широко применяются в микроэлектронике и вычислительной технике. Важнейшим применением является использование пленок как носителей информации. В качестве магнитной среды их используют для записи и хранения информации в запоминающих устройствах. Магнитные пленки имеют особенности, благодаря которым их использование способствует повышению плотности записи информации и быстродействия запоминающих устройств. Использование магнитных наноструктур это еще один шаг в сторону новейших нанотехнологий.

Существуют различные методы исследования такого рода структур. Наиболее привлекательные из них, это методы рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов. Оба этих метода, позволяют получать информацию о магнитной структуре на масштабах от долей до нескольких тысяч нанометров. Однако, использование методов нейтронного рассеяния ограничено слабой интенсивностью рассеянного излучения, от объектов малого размера.

В связи с этим важно найти новые, альтернативные методы усиливающие эффект рассеяния на наноструктурах.

Один из многообещающих подходов - создание резонансных уровней в тонкой пленке, который и является объектом исследования в данной работе.

Возникновению резонансных уровней, соответствует эффективное увеличение интенсивности нейтронов в тонкой пленке, что эквивалентно многократному увеличению потока в падающем пучке.

Таким образом, возникает потенциальная возможность исследования различных эффектов в тонких пленках (магнитные домены, шероховатости границ раздела сред и т.д.), за счет увеличения интенсивности.

## 2 Цель работы

Цель работы заключается в исследовании резонансного состояния нейтрона в трехслойной пленке, как одного из перспективных методов изучения свойств магнитных наноструктур. Несмотря на то, что резонансные состояния уже изучались как фундаментальное явление [1], [2], мы хотим использовать его как инструмент для изучения магнитных структур. Необходимо прояснить физический смысл резонанса и условия его возникновения. Определить параметры системы влияющие на резонансное состояние, и их оптимальные значения для эксперимента.

Приготовить образцы для экспериментального наблюдения резонанса отвечающие оптимальным параметрам.

Наконец, при помощи рефлектометрии, экспериментально наблюдать резонанс в приготовленных образцах.

Таким образом, цель работы сводится к разработке методики наблюдения резонансных состояний (от теории, до эксперимента), чтобы в дальнейшем иметь готовый инструмент для изучения свойств магнитных наноструктур. Не менее важно, научиться наблюдать резонансные состояния при наличии уже готового инструмента, чтобы в дальнейшем иметь хорошую экспериментальную базу, для исследования наноструктур при помощи резонансных состояний нейтрона внутри тонкой пленки.

### 3 Поляризованные нейтроны как метод исследования слоистых структур

Для исследования свойств многослойной магнитной системы, как основной инструмент мы выбрали поляризованные нейтроны.

Этот выбор определяется природой нейтрона, как элементарной частицы. Например, нейтральность нейтрона позволяет ему глубоко проникать в конденсированные среды и, таким образом, исследовать упорядочения ядер, в твердых телах и жидкостях. Это создает дополнительные возможности в структурном анализе и является основой структурной нейтронографии. Наличие у нейтрона магнитного момента позволяет изучать упорядочение магнитных атомных моментов, что служит основой метода магнитной нейтронографии [3].

Большинство оптических методов, применяемых для исследования тонких пленок, позволяют судить лишь о свойствах их поверхности. Нейтроны же, проникают вглубь материала и позволяют изучать такие физические свойства, как шероховатости межслойных границ, межслойную диффузию, состояние скрытых, внутренних слоев и т.д.

Свойства поверхностей, распределение атомной плотности и состава тонких пленок изучается с помощью методов нейтронной рефлектометрии. При этом используется тот факт, что при сравнительно малых углах падения нейтронного пучка по отношению к поверхности пленки, нейтронная волна в значительной мере, усредняет детали ее атомной структуры. В результате, ее взаимодействие с веществом с хорошей точностью описывается законами геометрической оптики. Главными эффектами взаимодействия нейтронной волны со средним ( оптическим ) потенциалом в этом приближении является ее зеркальное отражение от плоскости пленки и преломление на ее границе, а также границах слоев из которых она состоит.

Как и в случае обычной оптики, интенсивность отражения определяется коэффициентом отражения, а угол преломления на границе - коэффициентами преломления сред. Коэффициент отражения несет информацию о плотности длины ( амплитуды ) ядерного и магнитного рассеяния нейтронов и ее распределении в направлении перпендикулярном поверхности пленки. Длина ядерного рассеяния зависит от типа ядер и их изотопов. Знаки и величина длин рассеяния также зависят от типа ядер. Для всех известных ядер и изотопов их можно найти в соответствующих таблицах. Таким образом, измеряя зависимость коэффициента отражения от угла падения  $\alpha$  или длины волны  $\lambda$  нейтронов удастся восстановить профиль плотности вещества вдоль нормали к плоскости пленки.

Если пленка содержит слои ферромагнитных материалов, то коэффициент отражения зависит от намагниченности этих слоев, состояние которых может быть определено из измерений коэффициентов отражения нейтронов, поляризованных вдоль и против некоторого заданного направления.

Если это направление совпадает с направлением намагниченности, то для измерений доступны два коэффициента отражения: один для поляризации параллельной, и другой - антипараллельной намагниченности. В случае, когда намагниченности в разных слоях образуют неколлинеарную структуру, измеряются также коэффициенты отражения нейтронов с переворотом спина. В результате, из анализа экспериментальных данных удастся определить не только послойный профиль абсолютной величины намагниченности, но и установить ее направление в разных слоях.

Как и в обычной оптике, нейтронная волна при определенных условиях может испытывать полное отражение. Так, если она распространяется из оптически менее плотной

среды, например вакуума, в среду оптически более плотную, то при углах скольжения меньших некоторого критического значения  $\alpha_c$  происходит полное внешнее отражение. При этом нейтронная волна проникает в толщу пленки на глубину, которая уменьшается с углом падения до значений порядка нескольких сот ангстрем.

Благодаря наличию спина, магнитная среда для нейтрона является оптически активной с двумя коэффициентами преломления и отражения для разных спиновых компонент нейтронной волны. В частности, для одной из компонент критический угол может не существовать и она будет свободно проникать в магнитную среду, в то время как другая спиновая компонента испытает полное внешнее отражение. Этот эффект используется для создания и анализа пучков поляризованных нейтронов.

Следует подчеркнуть, что явление зеркального отражения связано с инвариантностью оптического потенциала относительно сдвига параллельно плоскости пленки. Эта инвариантность выражается в законе сохранения параллельной поверхности компоненты нейтронного импульса. В сочетании с законом сохранения энергии нейтрона (который при упругом отражении от "бесконечно тяжелой" пленки не может передать ей энергию) инвариантность относительно сдвига и приводит к известному правилу: угол падения равен углу отражения. Нарушение этой инвариантности из-за несовершенства поверхности, доменной структуры, и т.д. приводит явлению не зеркального рассеяния, которое широко используется для изучения свойств поверхностей и границ раздела различных сред.

## 4 Метод резонансного усиления

Как говорилось выше, для изучения внутренней структуры системы состоящей из малого числа слоев, необходимо находить методы усиления волнового поля внутри образца. Это связано прежде всего с техническими возможностями измеряющих приборов, применяющихся для подобного анализа. Интенсивность отраженной волны при полном отражении равна падающей, и потому область полного внутреннего отражения, фактически не несет никакой информации о внутреннем устройстве отображающей системы.

Между тем такая информация, зачастую, бывает весьма полезна и даже необходима. В этих случаях, как будет показано в работе, можно использовать явление резонансного усиления проникновения нейтронной волны внутрь слоистой структуры. Более того, при условии резонанса наблюдается многократное увеличение амплитуды этой волны, что позволяет надеяться на значительное усиление также и незеркального рассеяния от латеральных неоднородностей внутренних слоев системы.

Впервые усиление незеркального рассеяния на шероховатостях поверхностей за счет увеличения амплитуды волнового поля при малых углах падения наблюдалось [5] для рентгеновского излучения.

### 4.1 Резонансные состояния

Из квантовой физики мы знаем, что в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, энергия квантована. И частица, находясь в яме принимает дискретные значения энергии.

Предметом исследования является трехслойная пленка Fe/Co/Fe, представляющая потенциальную яму для нейтрона. В системе барьер-яма-барьер, могут возникать резонансные



состояния - пики в плотности вероятности внутри ямы.

Это возможно только при выполнении резонансных условий. Очевидно, что зависеть они должны в первую очередь, от толщин слоев (ширин стенок). Например, если внешнего слоя нет - ширина равна нулю, то система представляет собой потенциальный барьер и резонанса не будет.

С другой стороны, если ширина первой стенки стремиться к бесконечности, то мы получаем "классический" случай, рассмотренный в книгах [4].

## 4.2 Эффект Ионеда

Эффект заключается, в аномальном усилении диффузионного, т.е. незеркального рассеяния рентгеновского излучения от шероховатых поверхностей.

Усиление имеет место скользких углах падения, или углах близких к критическим. Это явление иллюстрируют кривые на рис.1 на котором интенсивность рассеянного пучка, измеренная для двух разных образцов, отложена в зависимости от удвоенного скользкого угла рассеяния  $2\alpha = 2\alpha_f$  при фиксированном значении суммы  $\alpha_i + \alpha_f$ .

На кривых наряду с пиком зеркального отражения, наблюдающемся при  $\alpha_i = \alpha_f$ , хорошо видны два дополнительных максимума, положение которых не зависит от угла падения. Их интенсивность зависит от значения суммы  $\alpha_i + \alpha_f$ , степени шероховатости поверхности, а положение определяется условиями:

либо  $\alpha_i \approx \alpha_c$ , либо  $\alpha_f \approx \alpha_c$ . При  $\alpha_i + \alpha_f < 2\alpha_c$  аномальные пики отсутствуют, а интенсивность зеркального пика максимальна.

Эффект Ионеда имеет простое объяснение. Появление аномального усиления диффузионного рассеяния связано с тем, что в него вносят вклад два процесса. В первом из них рассеивается волна падающая на шероховатую поверхность, а во втором - волна, которая сначала зеркально отражается от среднего оптического потенциала, и лишь затем рассеивается шероховатостями. Амплитуды этих волн сравниваются при углах падения (рассеяния) близких к критическим значениям. Причем в этой области они находятся в фазе и амплитуда рассеяния удваивается. При увеличении углов падения амплитуда отраженной волны падает и, соответственно, уменьшается ее вклад в рассеяние. С другой стороны, при углах падения (рассеяния) меньших критического, модуль амплитуды отраженной волны остается максимальным, но ее фаза изменяется таким образом, что ее вклад в суммарную амплитуду рассеяния гасит эффект от рассеяния падающей волны. В результате, эффект незеркального рассеяния максимально усилен именно при углах падения (рассеяния) близких к  $\alpha_c$ . Таким образом было установлено, что при отражении от достаточно шероховатых поверхностей угловое распределение отраженного излучения содержит две компоненты: зеркальный пик, соответствующий отражению от идеально гладкой поверхности и повторяющий распределение интенсивности в падающем пучке, и широкую диффузную компоненту, распределение интенсивности в которой определяется свойствами рассеивающей поверхности.

При углах скольжения близких к  $\alpha_c$ , угловое распределение отраженного излучения имеет симметричный вид и максимум совпадает с зеркальным пиком. Если поверхность достаточно гладкая, рассеяние практически полностью концентрируется в области пика зеркального отражения при любых  $\alpha > 0$ . При рассеянии на шероховатых поверхностях, при углах падения  $\alpha > \alpha_c$  появляются пики аномального рассеяния, что и составляет существо эффекта Ионеда. Угловое распределение имеет два пика - зеркальный, смещающийся с изменением  $\alpha$ , и диффузный, остающийся при этом в положении, соответствующем

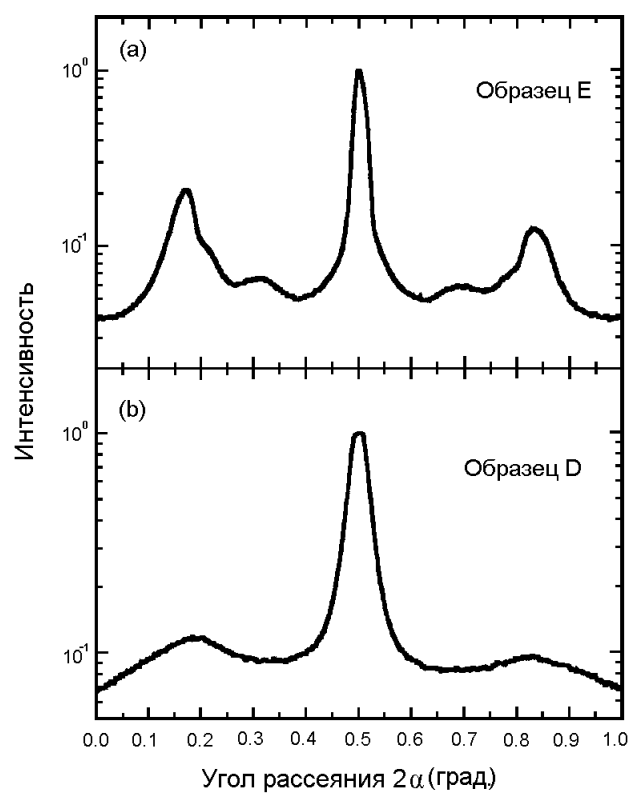


Рис. 1: Эффект Ионеды [6].

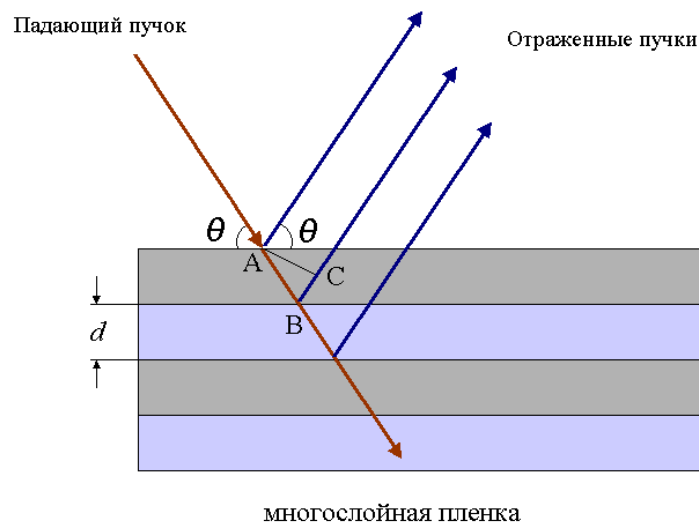


Рис. 2: Отражение излучения от системы тонких пленок.

ющем  $\alpha = \alpha_c$ .

По форме и по ширине пиков Ионеды можно судить о степени шероховатости поверхности.

Отметим, что этот эффект имеет место и при рассеянии нейтронов и тоже наблюдался экспериментально. Аномальное усиление незеркального рассеяния, т.е. эффект типа Ионеды имеет место также и в других случаях полного зеркального отражения, как например, при брэгговском отражении от периодических слоистых структур.

### 4.3 Брэгговские отражения от многослойной пленки

Особые дифракционные явления возникают при прохождении нейтронов через кристаллы, когда интерференция нейтронных волн, рассеянных на регулярно расположенных рассеивателях, приводит к усилению интенсивности волн в направлениях, соответствующих зеркальному отражению от атомных плоскостей кристалла при выполнении условия Брэгга-Вульфа.

Аналогичная ситуация возникает и при прохождении нейтронов через многослойную пленку.

Если многослойную пленку рассматривать как совокупность параллельных тонких пленок, отстоящих друг от друга на расстоянии  $d$ , то процесс дифракции можно представить как отражение нейтронов от плоскостей этих пленок. Максимумы интенсивности возникают при этом только в тех направлениях, в которых все отраженные данной системой плоскостей волны имеют одинаковые фазы.

Это возможно, если разность хода  $AB + BC$  между двумя отраженными от соседних плоскостей волнами, равная  $2d \sin \theta$  (рис.??), кратна целому числу длин волн  $\lambda$ .

Условие Брэгговского отражения имеет вид:

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (1)$$

где целое положительное число  $n$  называют порядком отражения,  $\theta$  - угол скольжения падающего луча. Если угол  $\theta$  удовлетворяет условию (1), то он называется углом Брэгга. Условие Брэгга позволяет определить расстояние между плоскостями  $d$ , так как  $\lambda$  нейтронов известна, а углы  $\theta$  измеряются экспериментально. Условие (1) получено для многослойной пленки, имеющей идеально-периодическое строение. В действительности дифрагированное излучение распространяется в конечном угловом интервале  $\theta \pm \Delta\theta$ , причем ширина этого интервала определяется числом отражающих пленок, входящих в состав многослойной пленки. Величина  $\Delta\theta$  зависит также от величины взаимодействия нейтронного излучения с атомами входящих в состав пленок и от шероховатости поверхностей пленок.

## 5 Применение резонансных состояний

Резонансное состояние является очень чувствительным методом для исследования магнитных свойств вещества. Как будет показано, положение резонанса чувствительно к ширине второго слоя. Кроме того, ширина и глубина резонанса во многом определяется свойствами верхнего и нижнего слоев.

Приведенные ниже расчеты применимы только при насыщающем магнитном поле, когда в системе нет доменов. Появлении доменной структуры в одном из слоев будет понижать его средний потенциал. Соответственно, параметры квантовой ямы будут меняться. Домены будут сдвигать положение резонанса, и в конечном итоге, могут привести к полному его исчезновению.

Стоит отметить, что на сегодняшний день это является перспективным направлением, для изучения магнитных свойств тонких пленок.

Другое важное применение резонанс, находит в незеркальном рассеянии. Для изучения незеркального рассеяния от пленки состоящей из малого числа слоев, необходимо увеличить волновое поле нейтрона внутри такой системы. Так как интенсивность рассеянного пучка мала, то для экспериментального изучения незеркального рассеяния, ключевым вопросом становится усиление волнового поля нейтрона. Выше, было рассказано о двух методах - эффекте Ионеды и Брэгговской дифракции.

Возникновение резонанса является еще одним из таких методов. Поэтому, одним из важных аспектов этой работы является нахождение оптимальных условий для наблюдений резонанса.

Но резонансные состояния используются и во многих других областях науки. Например, как метод исследования полимерных слоев, на твердой подложке [7]. Резонанс находит применение и в рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии [8]. А также, применяется для создания рентгеновских и нейтронных когерентных пучков [9].

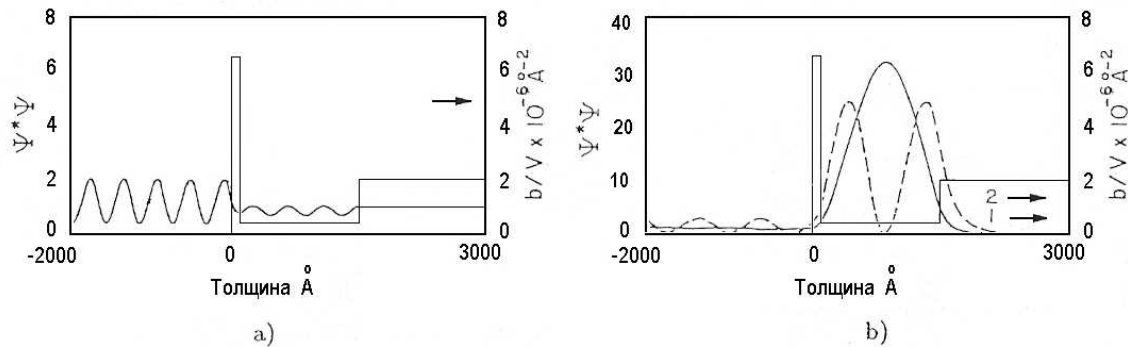


Рис. 3: Многократное усиление амплитуды стоячей волны в квантовой яме [7].

### 5.1 Применение резонансных состояний в физике полимеров

Resonantly enhanced neutron intensity in a surface segregated polymer blend, L.J.Norton, E.J.Kramer, R.A.L.Jones, F.S.Bates, H.R.Brown, G.P.Felcher and R.Kleb., J.Phys. 2 France 4 (1994), 367.

В последние годы нейтронография нашла широкое применение в физике полимеров. Авторы описывают процесс резонансного возрастания интенсивности нейтрона внутри ямы, сформированной полимером в дейтериевом растворе.

Рассматривается образец с тремя слоями, представляющий собой потенциальную яму между двумя барьерами. Если падающий нейтрон имеет энергию меньшую, чем высота первого барьера, но большую чем критическая энергия

$$E_c = \hbar^2 k_c^2 / 2m, \quad (2)$$

где  $\hbar$  - постоянная Планка,  $m$  - масса нейтрона и  $k_c$  - значение волнового вектора при котором, происходит полное отражение нейтрона.

Тогда, нейтрон туннелирует сквозь барьер и распространяется в образце. В яме плотность вероятности  $\psi^*\psi$  представляет собой стоячую волну (рис.3), вследствие интерференции между прошедшей через барьер волны и волны отраженной от границы раздела между вторым слоем и подложки.

При энергии  $E$ , меньшей чем энергия первого барьера, и удовлетворяющей условию полного внешнего отражения  $E < E_c$ , могут возникать резонансные состояния в яме.

Как видно из рисунка (рис.3), при определенных значениях ширины ямы и энергии налетающего нейтрона, имеет место аномальное увеличение волнового поля внутри ямы. Причем, волновое поле во много раз превышает поле за пределами образца.

Резонансные волновые вектора аналогичны собственным состояниям в прямоугольной потенциальной яме. Но так как потенциал имеет конечный размер, то резонансные состояния имеют определенное время жизни. Оно может быть оценено при использовании

соотношения неопределенности Гейзенберга

$$\tau \simeq \frac{m}{\hbar k \Delta k} \quad (3)$$

Ниже границы полного внешнего отражения  $k < k_c$  амплитуда отраженной от образца волны  $R = 1$ , это значит, что и коэффициент отражения  $\mathfrak{R} = |R|^2 = 1$ .

Тем не менее, если промежуточный слой может поглощать нейтроны или имеет дефекты на которых они некогерентно рассеиваются, то могут иметь место провалы  $\mathfrak{R}$  в область ниже 1.

Когерентная длина рассеяния нейтрона на ядре, является комплексной функцией  $b = \alpha + i\beta$ , где мнимая часть определяет поглощение.

В эксперименте использовали смесь полиэтиленового пропилена (polyethylene propylene, РЕР), с его дейтеризованным аналогом (dРЕР), в котором почти все атомы водорода, замещены дейтерием (тяжелым водородом). Компоненты смеси имели почти одинаковую степень полимеризации,  $N_{РЕР} = 2140$  и  $N_{dРЕР} = 2360$ ; кроме того, были растворены в толуоле. Раствор был помещен на кремниевую подложку. Потом образцы быстро охлаждали (примерно за 4 минуты), до температуры  $-55C^o$  - температуры стеклообразования для РЕР. Эксперименты с нейтронами проводились при этой температуре, во избежании изменений в системе.

На рисунке (рис.5.1) показано поведение  $\mathfrak{R}$  в зависимости от  $k$ , для такой системы. В области  $k < k_c$  наблюдаются провалы  $\mathfrak{R}$  в область меньше единицы, что соответствует двум резонансным состояниям, показанным на рис.3. На этом графике представлена зависимость  $\psi^*\psi$ , для двух резонансных волновых векторов, от ширины образца.

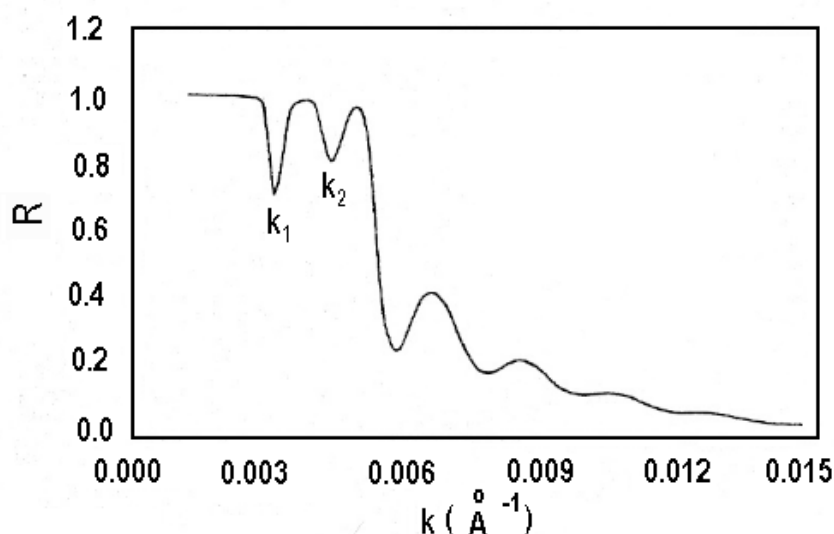


Рис. 4: Экспериментальная зависимость  $R$  от энергии падающего нейтрона [7].

## 5.2 Мгновенная гамма-эмиссия и резонансное усиление нейтронных стоячих волн в тонкой пленке

Grazing Incidence Prompt Gamma Emission and Resonance-Enhanced Neutron Standing Waves in a Thin Film, H.Zhang, P.D.Gallagher, S.K.Satija, R.M.Lindstorm, R.L.Paul, T.P.Russell, P.Lambooy and E.J.Kramer, Phys.Rev.Lett. 72,3044 (1994)

Данная работа посвящена исследованию мгновенной гамма-эмиссии, вызванной захватом нейтронов, а так же изучению коэффициента отражения нейтронов от полимерной пленки с вложенным слоем кадмия.

Нейтронные стоячие волны (neutron standing waves, NSW), в сочетании с мгновенной гамма-эмиссией, происходящей с захватом нейтронов (neutron-capture prompt gamma emission, PGE), являются мощным инструментом для исследования внутренних слоев в тонких пленках и многослойных системах. Этот метод не ограничивается использованием материалов состоящих из элементов с малым атомным номером  $Z$ , так как, большинство элементов прозрачны для термических и холодных нейтронов.

Авторы представляют краткое теоретическое описание резонансного усиления нейтронных стоячих волн (resonance-enhancement neutron standing waves, RENSX) и мгновенной гамма-эмиссий, происходящей при захвате нейтронов, а так же приводят экспериментальные данные, полученные, при использовании полимерной пленки с внутренним слоем кадмия как объекта исследования. Данные о гамма-эмиссии и коэффициенте отражения нейтронов, позволяют однозначно определить профиль потенциала полимерной пленки, и местонахождение внутреннего слоя кадмия.



Для теоретических исследований вводят следующие упрощение. В системе не учитывают поглощения ядер, некогерентное рассеяние, рассеяние на фононах и структурные неоднородности на границах разделов слоев. Каждый слой аппроксимирован однородным континуумом, и рассматривается одномерная задача. Стационарное уравнение Шредингера, описывающие состояния нейтрона при рассеянии его под углом  $\theta$  к поверхности образца

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + [k_c^2 - u(x)]\psi(x) = 0. \quad (4)$$

Где,  $k_x = (2\pi/\lambda) \sin \theta$  - нормальная составляющая падающего вектора  $\vec{k}$ ,

$$u(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ u_c, & 0 \leq x < d_c, \\ u_f, & d_c \leq x < d_c + d_f, \\ u_s, & x \geq d_c + d_f \end{cases} \quad (5)$$

где,  $u_c, u_f, u_s$  - вещественные константы, определяющие потенциал рассеяния в верхнем слое, промежуточном слое и в подложке, а величины  $d_c, d_f$  - толщины верхнего и промежуточного слоя, соответственно. Для одномерного случая, потенциал рассеивания  $u$  в каждом слое равен  $4\pi Nb$ , где  $N$  - число ядер-рассеивателей в единице объема,  $b$  - когерентная длина рассеяния нейтрона на ядре. Однако, при учете ядерного поглощения, потенциал  $u(x)$  становится комплексной функцией. Авторы предполагают, что  $u_f < k_x^2 < u_c, u_s, k_c = (u_c - k_x^2)^{1/2}, k_f = (k_x^2 - u_f)^{1/2}$  и  $k_s = (u_s - k_x^2)^{1/2}$ .

Тогда волновая функция может быть записана, в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}, & x < 0, \\ t_c e^{-k_c x} + r_c e^{k_c x}, & 0 \leq x < d_c, \\ t_f e^{ik_f x} + r_f e^{-ik_f x}, & d_c \leq x < d_c + d_f, \\ t_s e^{-k_s x}, & x \geq d_c + d_f, \end{cases} \quad (6)$$

где  $t_i$  и  $r_i$  амплитуды прошедшей и рассеянной волны, соответственно. Из уравнения (4), следует, что  $\psi^*(d\psi/dx) - \psi(d\psi^*/dx)$  не зависит от  $x$  и тогда

$$k_x(1 - |r|^2) = k_f(|t_f|^2 - |r_f|^2) = 0. \quad (7)$$

Отсюда следует,  $|r| = 1$  и  $|t_f| = |r_f|$ : это означает, что в направлении  $x$ ,  $\psi$  представляет собой стоячие волны. За пределами первого слоя  $|\psi|_{max}^2 = 4$ , а в промежуточном слое  $|\psi|_{max}^2 = 4|r_f|^2$ .

Резонансное усиление в промежуточном слое, означает что  $|r_f|^2 < 1$ . Общие выражение для  $|r_f|^2$  имеет вид

$$|r_f|^2 = \frac{4k_x^2 k_c^2}{(k_x^2 + k_c^2)(k_c^2 + k_f^2) \left| e^{(k_c d_c - i\phi_{xc})} \sin(k_f d_f + \phi_{fc} + \phi_{fs}) - e^{(-k_c d_c + i\phi_{xc})} \sin(k_f d_f - \phi_{fc} + \phi_{fs}) \right|^2}, \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \phi_{xc} &= \tan^{-1}(k_x/k_c), \\ \phi_{fc} &= \tan^{-1}(k_f/k_c) \end{aligned}$$

и

$$\phi_{fs} = \tan^{-1}(k_f/k_s)$$

В предельном случае большой  $d_c$ , другими словами при  $e^{k_c d_c} \gg 1$ , величина (8) становится большой, если  $\sin(k_f d_f + \phi_{fc} + \phi_{fs})$  стремится к нулю. То есть, если

$$k_f d_f + \phi_{fc} + \phi_{fs} = n\pi. \quad (9)$$

Условие (9), определяет резонансные состояния.

Физический смысл его таков: если мы исключим из рассмотрения  $\phi_{fc}$  и  $\phi_{fs}$ , то условие (9) будет выглядеть так,

$$k_f d_f = n\pi.$$

Где целое число  $n$ , определяет моду или гармонику.

Добавление же величин  $\phi_{fc}$  и  $\phi_{fs}$  означает увеличение ширины резонатора  $d_f$ , так как волновая функция  $\psi$  может распространяться за пределами потенциальной ямы.

Если условие (9) выполнено, то

$$|r_f|^2 = \frac{1 - u_f/u_c}{1 - u_f/k_x^2} e^{2\sqrt{u_c - k_x^2} d_c} \quad (10)$$

Из данного выражения можно сделать два вывода. Во-первых, чем больше толщина верхнего слоя  $d_c$ , тем больше  $|r_f|^2$ . Во-вторых, чем меньше значение  $k_x$  при котором возникает резонанс, тем больше  $|r_f|^2$ .

Далее, вводится нейтронное поглощение в промежуточном слое, путем появления мнимой добавки в потенциале:

$$u = u_{Re} - i u_{Im},$$

где,  $u_{Im} = 2\pi\mu/\lambda$  и  $\mu$  линейный коэффициент поглощения. Из уравнения (4),

$$d[\psi^*(d\psi/dx) - \psi(d\psi^*/dx)]/dx = -2iu_{Im}|\psi|^2$$

Если в промежуточном слое есть более чем один элемент, который поглощает нейтроны, тогда

$$1 - |r|^2 = \frac{1}{k_x} \sum_i \int_{X_i} |\psi|^2 u_{Im}^i dx = \sum_i \tau_i. \quad (11)$$

Здесь,  $\tau_i = (1/k_x) \int_{X_i} |\psi|^2 u_{Im}^i dx$  число нейтронов захваченных, в единицу времени  $i$ -ым элементом или изотопом, нормализованное к интенсивности падающего пучка.

Образец представлял собой слой Ni, нанесенный на кремниевую подложку. Далее, наносились слои поливинилового циклогексана, толщиной  $720\text{\AA}$ , с прослойкой из Gd ( $50\text{\AA}$ ).

Сверху образец покрывался дейтеризованным полистиролом.

Результаты эксперимента представлены на рисунках рис.5.2.

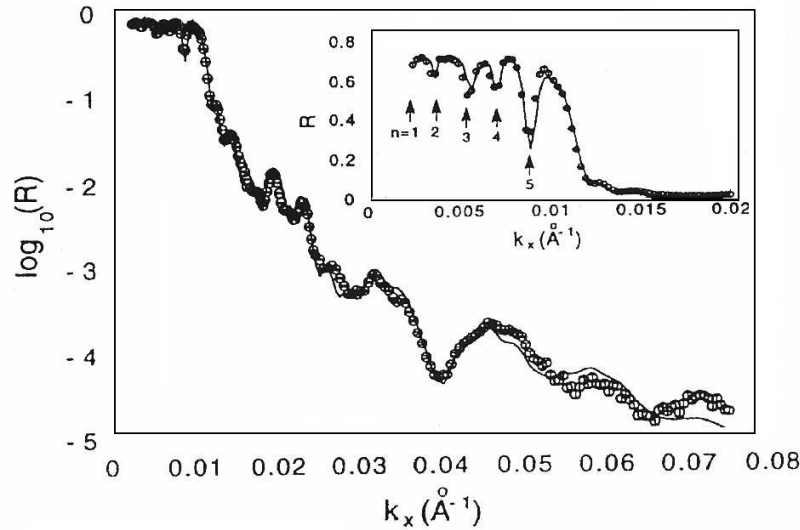


Рис. 5: Экспериментальная зависимость  $R$  от энергии падающего нейтрона [10].

## 6 Описание теоретической модели

Введем простую теоретическую модель для описания поведения коэффициента отражения трехслойной пленки при резонансе.

Стоит отметить что введенная ниже модель, представляет собой чисто теоретический интерес. Она не включает в себя такие свойства нейтрона, как магнитный момент, спинные состояния и т.д.

Тем не менее, введение такой упрощенной модели диктуется прежде всего, сложностью поставленной задачи. Для более глубокого анализа, как первый шаг, необходимо найти теоретически условия возникновения резонанса и оптимизировать параметры для его наблюдения.

Итак, рассмотрим пленку состоящую из трех слоев, расположенных на подложке, причем, первый и последний слой сделаны из одного материала. Ширина последнего слоя считается бесконечной. Пленка бесконечна в плоскости  $(x, y)$ , и имеет конечную ширину. Пусть, потенциал такой пленки, представляет собой потенциальную яму, изображенную на рис.6.

Мы будем изучать возникновение резонансных состояний в этой яме.

Каждый слой характеризуется своим коэффициентом отражения и преломления, а так же значением импульса прошедшей волны. В промежуточном слое, волна распространяется как в вакууме.

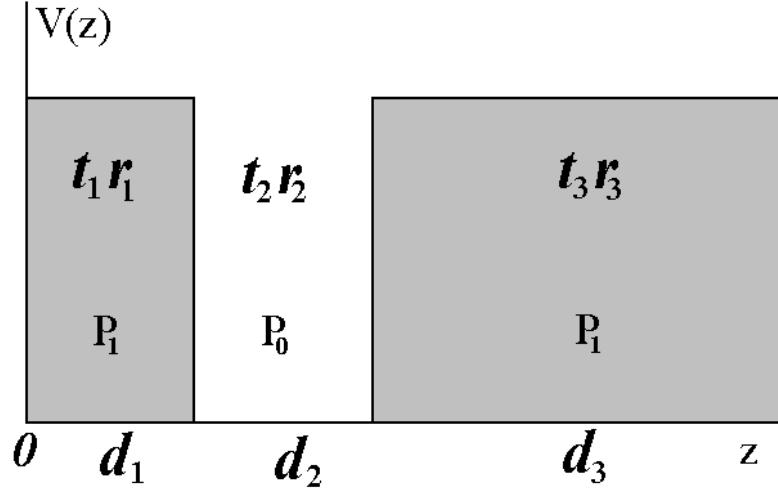


Рис. 6: Потенциал трехслойной пленки.

## 7 Вывод основных уравнений

Рассмотрим процесс рассеяния нейтрона на тонкой пленки (рис.7). Запишем уравнение Шредингера, которое описывает этот процесс.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (12)$$

Так как пленка считается бесконечной в плоскости  $(x, y)$  и имеет конечную ширину, положим, что потенциал  $V(\vec{r})$  зависит только от координаты  $z$ , то есть,

$$V(\vec{r}) = V(z).$$

Тогда, решение уравнения (12) можно записать разделив переменные

$$\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{\rho})\psi(z), \quad (13)$$

где:

$\vec{\rho}$  - поперечная координата.

Тогда, перепишем уравнение (12), в следующем виде:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) - E \right] \psi(\vec{\rho})\psi(z) = 0. \quad (14)$$

По закону сохранения энергии

$$k_i = k_f. \quad (15)$$

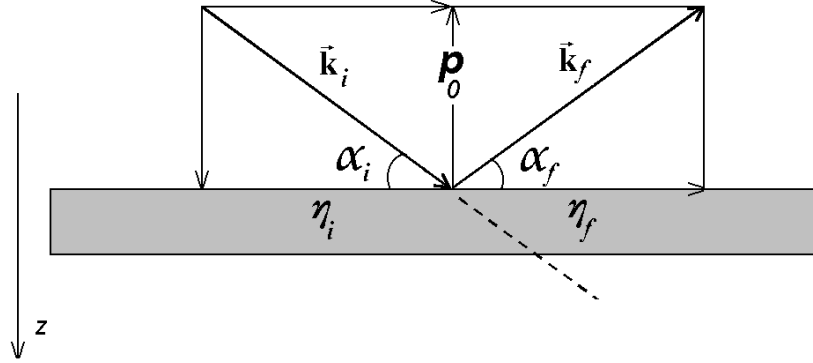


Рис. 7: Геометрия рассеяния нейтрона на тонкой пленке.

С другой стороны, так как пленка бесконечна в поперечной плоскости, мы не можем передать ей энергию в направлении перпендикулярном оси  $z$ . Отсюда:

$$\eta_i = \eta_f, \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} \eta_i &= k_i \cos \alpha_i \\ \eta_f &= k_f \cos \alpha_f \end{aligned} \quad (17)$$

Из уравнений (15)) и (17) следует, что

$$\cos \alpha_i = \cos \alpha_f \quad (18)$$

Уравнение (18) имеет два решения:

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \alpha_f \\ \alpha_i &= -\alpha_f, \end{aligned} \quad (19)$$

первое из которых описывает зеркальное, а второе незеркальное отражение.

Перепишем волновую функцию (13) в виде

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{\eta}\vec{\rho}}\psi(z). \quad (20)$$

Подставим ее в уравнение Шредингера.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \left( \frac{\hbar^2 p_0^2}{2m} - V(z) \right) \right] \psi(z) = 0, \quad (21)$$

где

$$p_0^2 = k_0^2 - \eta^2, \quad k_0 = k_i = k_f$$

Для введенной выше модели, мы имеем потенциал изображенный на рис.6.

Волновая функция в каждом слое, может быть представлена как

$$\psi_i(z) = t_i e^{ip_i(z-z_{i-1})} + r_i e^{-ip_i(z-z_{i-1})}. \quad (22)$$

Где,

$r_i, t_i$  - амплитуды отраженной и прошедшей волны, соответственно,  $p_i = \sqrt{p_0^2 - p_{ci}^2}$  - перпендикулярные поверхности компоненты волнового вектора, внутри каждого слоя,  
 $p_0 = 2(\pi/\lambda) \sin \alpha$  - проекция на ось  $z$ , падающего импульса,  
 $p_{nc} = \sqrt{(Nb)_{nN} + (Nb)_{nM}}$  - критическое значение импульса (граница полного внешнего отражения),  
 $(Nb)_{nN}, (Nb)_{nM}$  - ядерная и магнитная плотность длины рассеяния.

Как видно волновая функция зависит от амплитуды прошедшей и отраженной волны в каждом слое.

## 8 Рекуррентные соотношений для амплитуд прошедшей и отраженной волны в многослойной пленке

Напишем граничные условия для волновой функции (22):

$$\psi_n(z_n) = \psi_{n+1}(z_n) \quad (23)$$

$$\frac{d}{dz} \psi_n(z_n) = \frac{d}{dz} \psi_{n+1}(z_n) \quad (24)$$

Кроме того считается, что волна распространялась в вакууме ( $z < 0$ ), и волновая функция равна

$$\psi_0(z) = e^{ip_0 z} + R e^{-ip_0 z}, \quad (25)$$

где  $R$  - амплитуда отраженной волны.

Подложка полностью поглощает нейтроны и волновая функция нейтрона в подложке ( $z > z_{N+1}$ )

$$\psi_{N+1}(z) = T e^{ip_s(z-z_N)}, \quad (26)$$

$T$  - коэффициент пропускания подложки.

$$t_i = \frac{e^{-i\varphi_i}}{2} \left[ (1 + p_i^{-1} p_{i+1}) + (1 - p_i^{-1} p_{i+1}) \left( \frac{r_{i+1}}{t_{i+1}} \right) \right] t_{i+1} \quad (27)$$

Тогда для многослойной системы можно записать рекуррентные соотношения для амплитуд отраженной и прошедшей волны в каждом слое [11]:

$$r_i = R_i t_i \quad (28)$$

$$R_i = e^{2i\varphi_i} \frac{(1 - p_i^{-1} p_{i+1}) + (1 + p_i^{-1} p_{i+1}) R_{i+1}}{(1 + p_i^{-1} p_{i+1}) + (1 - p_i^{-1} p_{i+1}) R_{i+1}} \quad (29)$$

## 8.1 Явное выражение для коэффициента отражения от трехслойной пленки

Воспользовавшись рекуррентными соотношениями, из прошлого раздела, запишем в явном виде амплитуду отражения для трехслойной пленки. Выражение для амплитуды отраженной волны,

$$R = R_F \frac{1 - R_F^2 e^{2i\varphi_2} - (1 - e^{2i\varphi_2}) e^{2i\varphi_1}}{1 - R_F^2 e^{2i\varphi_2} - R_F^2 (1 - e^{2i\varphi_2}) e^{2i\varphi_1}} \quad (30)$$

Причем,

В промежуточном слое  $(Nb)_{nN} = (Nb)_{nM} = 0$

$p_{c1} = p_{c3} = p_s$ , и  $p_{c2} = 0$

$\varphi_1 = d_1 \sqrt{p_0^2 - p_s^2} = d_1 p_1$  - сдвиг фазы в первом слое,

$\varphi_2 = d_2 p_0$  - сдвиг фазы в промежуточном слое,

нейтрон рассматривается как частица без спина,

$R_F$  - коэффициент отражения Френеля, для нейтрона от тонкой пленки.

Остановимся более детально на том, как ведет себя  $R_F$  в зависимости от падающего импульса.

## 9 Поведение коэффициента отражения Френеля

По определению коэффициента отражения Френеля характеризует процессы, происходящие при распространении нейтрона из одной среды в другую. Он зависит от импульса нейтрона в каждой из них; в нашем случае от импульса нейтрона в вакууме и в первом слое.

$$R_F = \frac{p_0 - p_1}{p_0 + p_1}. \quad (31)$$

Ниже границы полного внешнего отражения  $R_F$  становится комплексной функцией.

Рассмотрим более детально поведение  $R_F$  именно в этой, интересующей нас области.

Перепишем комплексную функцию  $R_F$  в экспоненциальном виде:

$$R_F = e^{i\chi} = \cos \chi + i \sin \chi = R'_F + i R''_F, \quad (32)$$

где величина  $\chi$  - это так называемая, фаза Френеля.

Поведение мнимой и вещественной части фазы Френеля, показано на рис.8. Введем небольшое поглощение  $\delta$  в промежуточном слое и рассмотрим поведение  $R_F$  при  $p_0 < p_c$ .

Тогда

$$p_1 = \sqrt{p_0^2 - p_c^2 + i\delta} \quad (33)$$

становится комплексной функцией.

Вещественная и мнимая часть, соответственно, равны

$$p'_1 = \sqrt{\frac{\sqrt{(p_0^2 - p_c^2)^2 + \delta^2} + (p_0^2 - p_c^2)}{2}} \quad (34)$$

$$p''_1 = \sqrt{\frac{\sqrt{(p_0^2 - p_c^2)^2 + \delta^2} - (p_0^2 - p_c^2)}{2}} \quad (35)$$

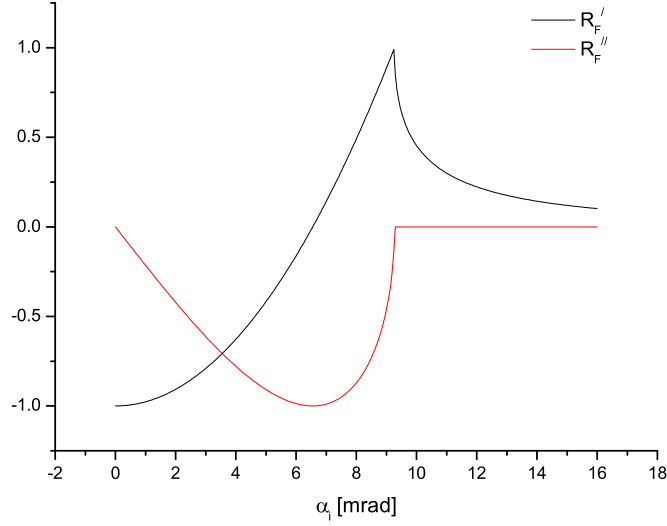


Рис. 8: Зависимость  $R_F'$  и  $R_F''$ , от начального угла падения  $\alpha_i$ .

Очевидно, что появление мнимой добавки под корнем выражения (33) приводит к тому, что фаза Френеля становится комплексной:

$$\chi = \chi' + i\chi'' \quad (36)$$

Рассмотрим поведения мнимых и вещественных частей  $\chi$  и  $p_1$ , в зависимости от падающего импульса  $p_0$ .

Если  $p_0 \leq p_c$ , то

$$\delta \ll |p_0 - p_c| \ll p_c \quad (37)$$

Разложим выражения (34) и (35) по малому параметру  $\delta$

$$p_1'' \simeq |p_0 - p_c| \quad (38)$$

$$p_1' \simeq \delta^2/p_c \ll p_1''. \quad (39)$$

Тогда вещественная и мнимая часть френелевской фазы имеет вид,

$$\chi' = -2p_1'/p_c \quad (40)$$

$$\chi'' = -2p_1''/p_c. \quad (41)$$

На границе полного внешнего отражения  $p_0 = p_c$ , поэтому

$$p_1' = p_1'' = \sqrt{\delta/2} \quad (42)$$



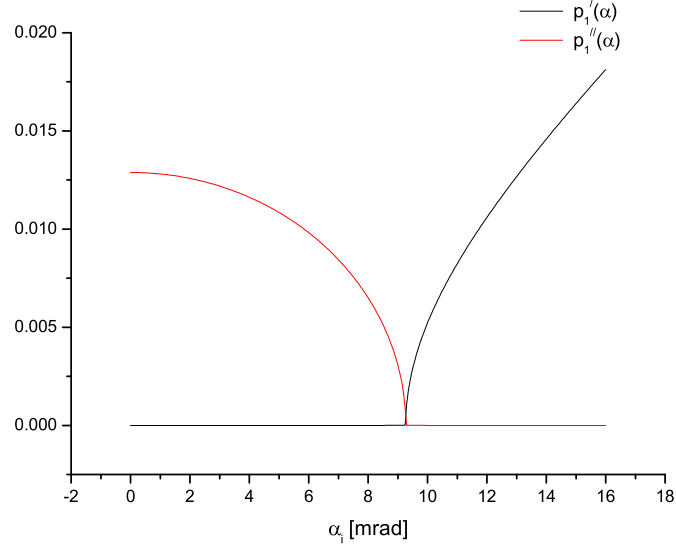


Рис. 9: Зависимость  $p'_1$  и  $p''_1$  от начального угла падения  $\alpha_i$ .

$$\chi' = \chi'' = -\sqrt{2\delta}/p_c \quad (43)$$

Если же в системе нет поглощения ( $\delta = 0$ ), то

$$p''_1 = \sqrt{p_0^2 - p_c^2} \quad (44)$$

$$p'_1 = 0 \quad (45)$$

$$\chi' = -2\sqrt{1 - p_0^2/p_c^2} \quad (46)$$

$$\chi'' = 0 \quad (47)$$

Как и следовало ожидать.

## 10 Резонансные состояния

Перепишем выражение (30) в более удобном для анализа виде:

$$R = \frac{\Lambda + i\Sigma}{\Lambda - i\Sigma}, \quad (48)$$

где

$$\Lambda = \{\sin(\chi + \varphi_2) - e^{2i\varphi_1} \sin \varphi_2\} \cos \frac{\chi}{2}. \quad (49)$$

$$\Sigma = \{\sin(\chi + \varphi_2) + e^{2i\varphi_1} \sin \varphi_2\} \sin \frac{\chi}{2}. \quad (50)$$

Запишем коэффициент отражения трехслойной пленки  $\mathfrak{R} = |R|^2$ , в следующем виде:

$$\mathfrak{R} = 1 - f(\gamma). \quad (51)$$

Здесь введен новый параметр

$$\gamma = e^{2i\varphi_1}, \quad (52)$$

а функция  $f(\gamma)$  имеет вид

$$f(\gamma) = \frac{4(\Lambda'\Sigma'' - \Lambda''\Sigma')}{(|\Lambda|^2 + |\Sigma|^2) + 2(\Lambda'\Sigma'' - \Lambda''\Sigma')}. \quad (53)$$

Сразу заметим, что если в системе отсутствует поглощение, тогда

$$\Lambda'' = \Sigma'' = 0. \quad (54)$$

Это означает, что ниже порога полного внешнего отражения,  $\mathfrak{R}$  всегда равно единице,

$$\mathfrak{R} = 1. \quad (55)$$

Другими словами, если в системе нет поглощения, то резонанс наблюдаться не будет.

## 11 Пределные случаи резонанса

В этом параграфе мы рассмотрим предельные значения для некоторых величин, входящих в выражение для  $R$ . Это значительно упрощает теоретические вычисления без потери физического смысла.

Но прежде всего найдем новые резонансные условия для такой трехслойной системы. Интересный случай, возникает когда  $\Lambda$  и  $\Sigma$  стремятся к нулю. Тогда возникает неопределенность в дроби (48), числитель и знаменатель стремятся к нулю. В противном случае, резонанс наблюдаться не будет, т.к.

$$R = 1 \quad \text{при } \Lambda \gg \Sigma$$

$$R = -1 \quad \text{при } \Lambda \ll \Sigma.$$

Из выражений для  $\Lambda$  и  $\Sigma$  видно, что они стремятся к нулю, когда

$$\chi' + \varphi_2 \simeq n\pi. \quad (56)$$

Это выражение определяет резонансные состояния в системе.

Резонансные условия зависят от сдвига фазы  $\varphi_2$  в яме (промежуточном слое), а так же от вещественной части фазы Френеля  $\chi'$ .

В последующих параграфах мы предполагаем, что  $\chi'$  и  $\chi''$  малые величины. Это значит, что рассматриваются резонансные состояния вблизи границы полного внешнего отражения. Связанно это, прежде всего, с разрешающей способностью экспериментальных приборов, с помощью которых измеряется коэффициент отражения. Поэтому, более доступны для наблюдения резонансные состояния возникающие вблизи критической границы.

## 11.1 Первый предельный случай - ширина первого слоя велика

Рассмотрим, случай, когда

$$\chi' + \varphi_2 \ll 1, \quad (57)$$

другими словами,

$$\varphi_1 = d_1 p_1 \gg 1, \quad (58)$$

или

$$\gamma = e^{-2|\varphi_1|} \ll 1. \quad (59)$$

Резонанс проявляется в аномальном падении  $\mathfrak{R}$ , ниже границе полного внешнего отражения, в область меньше единицы.

Значит, следуя определению (51), при резонансе  $f(\gamma) \rightarrow 1$ . Разложим функцию  $f(\gamma)$  вблизи резонанса, по малому параметру  $\gamma$ . Разделим мнимую и вещественную части (49) и (50).

Вещественные части,

$$\Lambda' \simeq (\chi' + \varphi_2 + \gamma \sin \chi') \cos \frac{\chi'}{2} \quad (60)$$

$$\Sigma' \simeq (\chi' + \varphi_2 - \gamma \sin \chi') \sin \frac{\chi'}{2}. \quad (61)$$

Мнимые,

$$\Lambda'' \simeq \chi'' \cos(\chi' + \varphi_2) \cos \frac{\chi'}{2} \simeq \chi'' \cos \frac{\chi'}{2} \quad (62)$$

$$\Sigma'' \simeq \chi'' \cos(\chi' + \varphi_2) \sin \frac{\chi'}{2} \simeq \chi'' \sin \frac{\chi'}{2} \quad (63)$$

Найдем квадрат модуля величины  $R$  (48),

$$|R|^2 = 1 - \frac{4(\Lambda' \Sigma'' - \Lambda'' \Sigma')}{(|\Lambda|^2 + |\Sigma|^2) + 2(\Lambda' \Sigma'' - \Lambda'' \Sigma')} \quad (64)$$

$$2\Lambda' \Sigma'' = \chi''(\chi' + \varphi_2 + \gamma \sin \chi') \sin \chi'$$

$$2\Lambda'' \Sigma' = \chi''(\chi' + \varphi_2 - \gamma \sin \chi') \sin \chi'$$

$$2(\Lambda' \Sigma'' - \Lambda'' \Sigma') = 2\chi'' \gamma \sin^2 \chi'$$

$$|\Lambda|^2 + |\Sigma|^2 = (\chi' + \varphi_2)^2 + \gamma^2 \sin^2 \chi' + 2(\chi' + \varphi_2)\gamma \sin 2\chi' + (\chi'')^2 \quad (65)$$

Тогда,

$$|R|^2 = 1 - \frac{4\chi'' \gamma \sin^2 \chi'}{[(\chi' + \varphi_2)^2 + \gamma^2 \sin^2 \chi' + 2(\chi' + \varphi_2)\gamma \sin 2\chi'] + (\chi'')^2 + 2\chi'' \gamma \sin^2 \chi'} \quad (66)$$

Функция в квадратных скобках, достигает минимума, при  $\varphi_2^r = -\chi' - \frac{\gamma}{2} \sin 2\chi'$ . Перепишем  $|R|^2$  через резонансное значение  $\varphi_2^r$

$$|R|^2 = 1 - \frac{4\chi'' \gamma \sin^2 \chi'}{\gamma^2 \sin^2 \chi' - \frac{\gamma^2}{4} \sin^2 2\chi' + (\chi'')^2 + 2\chi'' \gamma \sin^2 \chi'} \quad (67)$$

или

$$|R|^2 = 1 - f(\gamma) \quad (68)$$

Где,

$$f(\gamma) = \frac{4\chi''\gamma\sin^2\chi'}{(\gamma\sin^2\chi' + \chi'')^2} \quad (69)$$

Найдем такие значения  $\gamma$ , при которых функция (69) достигает максимума. Возьмем производную по  $\gamma$ .

$$\frac{\partial}{\partial\gamma}f(\gamma) = \frac{4\chi''\sin^2\chi'}{(\gamma\sin^2\chi' + \chi'')^2} - \frac{8\chi''\sin^4\chi'}{(\gamma\sin^2\chi' + \chi'')^3} \quad (70)$$

Найдем значения  $\gamma$ , при котором это уравнение обращается в ноль,

$$\chi''\gamma\sin^2\chi' + (\chi'')^2 - 2\chi''\gamma\sin^2\chi' = 0 \quad (71)$$

Оптимальное значение  $\gamma$ ,

$$\gamma_c = \frac{\chi''}{\sin^2\chi'} \quad (72)$$

При этом значении функция (69) имеет максимум  $f(\gamma) = 1$ . Другими словами,

$$f(\gamma) = \frac{4\chi''\gamma\sin^2\chi'}{\lambda(\varphi_2 - \varphi_2^r)^2 + (\gamma\sin^2\chi' + \chi'')^2}. \quad (73)$$

Из данной формулы следует, оптимальное условие для наблюдения резонанса,

$$\gamma_c\sin^2\chi' = \chi''. \quad (74)$$

Остановимся подробнее на соотношении (74).

В начале параграфа мы отметили, что величины  $\gamma$ ,  $\chi'$ ,  $\chi''$ , считаются малыми. Естественно, возникает вопрос о том насколько они малы и по сравнению с чем. Все эти величины зависят от  $p_1$ , импульса нейтрона в первом слое. Поэтому, когда мы говорим о том, что величины малы, мы не должны забывать что они зависят от одной величины -  $p_1$ . Это предполагает, наличие связи между тремя параметрами, которая и была указана выше. Тогда, при выполнении оптимального условия (74), вблизи резонанса

$$f(\gamma) = \frac{4\chi''^2}{\lambda(\varphi_2 - \varphi_2^r)^2 + 4\chi''^2}. \quad (75)$$

При резонансном значении  $\varphi_2$ , равном

$$\varphi_2^r = -\chi' - (\gamma/2)\sin 2\chi' + n\pi, \quad (76)$$

функция  $f(\gamma)$ , достигает своего максимального значения, равного единице, рис.10. При этом, коэффициент отражения

$$\Re = 1 - f(\gamma_c) = 1 - 1 \rightarrow 0. \quad (77)$$

Как видно из формулы (75), резонанс имеет экспоненциально узкую ширину,

$$W_{res} \simeq (2\chi'')^2. \quad (78)$$

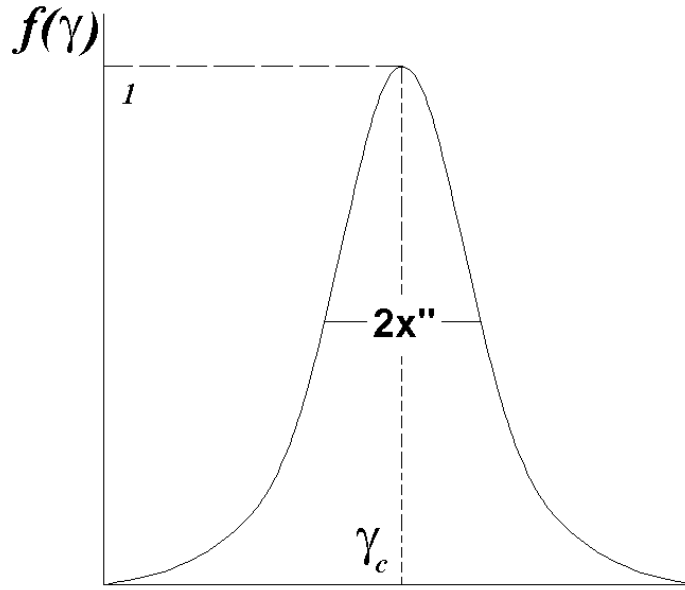


Рис. 10: Максимальное значение функции  $f(\gamma)$ .

## 11.2 Второй предельный случай - ширина первого слоя мала

Это значит что фаза, достигнутая в первом слое:

$$\varphi_1 = p_1 d_1 \ll 1 \quad (79)$$

Заметим, что для корректного расчета резонансного состояния в этом случае, мы опять должны найти малый параметр. Введем малый параметр

$$\varepsilon = 1 - \gamma < 1 \quad (80)$$

Следуя той же логике, что и в предыдущем случае, разложим функцию  $f(\varepsilon)$  вблизи резонанса.

$$f(\varepsilon) = \frac{4\chi'^2\chi''\varepsilon}{\nu(\varphi - \varphi_2^\varepsilon)^2 + 4\chi'^2\chi''\varepsilon} \quad (81)$$

Оптимальным значением параметра  $\varepsilon$ , для наблюдения резонанса, теперь будет

$$\varepsilon_c = \chi'^2/\chi''. \quad (82)$$

При этом,

$$f(\varepsilon_c) = 1. \quad (83)$$

Из чего следует,

$$\Re = 1 - f(\varepsilon_c) = 1 - 1 \rightarrow 0 \quad (84)$$

## 12 Численные симуляции

Как один из необходимых методов проверки теории, мы численно просимулировали процесс рассеяния нейтронов на тонкой пленке.

Была написана программа, в основу которой лег метод описанный в [11]. Объектом симуляции стала трехслойная пленка Fe/Co/Fe. Данная программа позволяет не только программно рассчитывать зависимость коэффициента отражения многослойной пленки, но и находить оптимальные значения толщин первого и второго слоя для экспериментального наблюдения резонанса в трехслойной пленке. Более того, программа учитывает поляризацию нейтрона и позволяет симулировать процессы как с переворотом спина, так и без. Текст программы представлен в приложении А.

Несмотря на то, что в программе не учитываются геометрические неоднородности границы раздела сред, как показал эксперимент, она с большой точностью позволяет определить положение резонансного уровня.

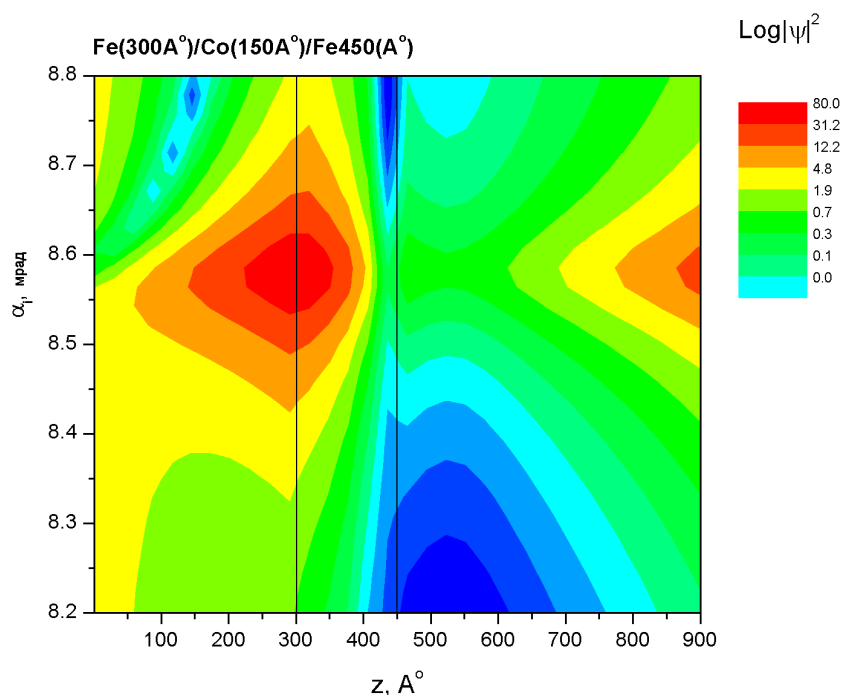


Рис. 11: Волновое поле внутри пленки, как функция от толщины слоев.

### 12.1 Оптимизация параметров системы, для наблюдения резонанса

Зададимся целью найти такие оптимальные параметры исследуемой системы, при которых проявление резонанса было бы максимальным. Под параметрами подразумевается те свойства системы, на которые мы можем непосредственно влиять. Например, при выращивание образца мы можем задаться определенной толщиной каждого слоя, или изменить поглощение, введя примеси.

### 12.2 Ширина первого и второго слоя

Рассчитаем волновое поле внутри второго слоя, в зависимости от ширины первого слоя. Теперь, задавшись толщиной первого слоя при котором волновое поле максимально, а так же, резонансным углом, определим оптимальный размер второго слоя. В результате мы получим оптимальные параметры, для наблюдения резонанса (рис.12).

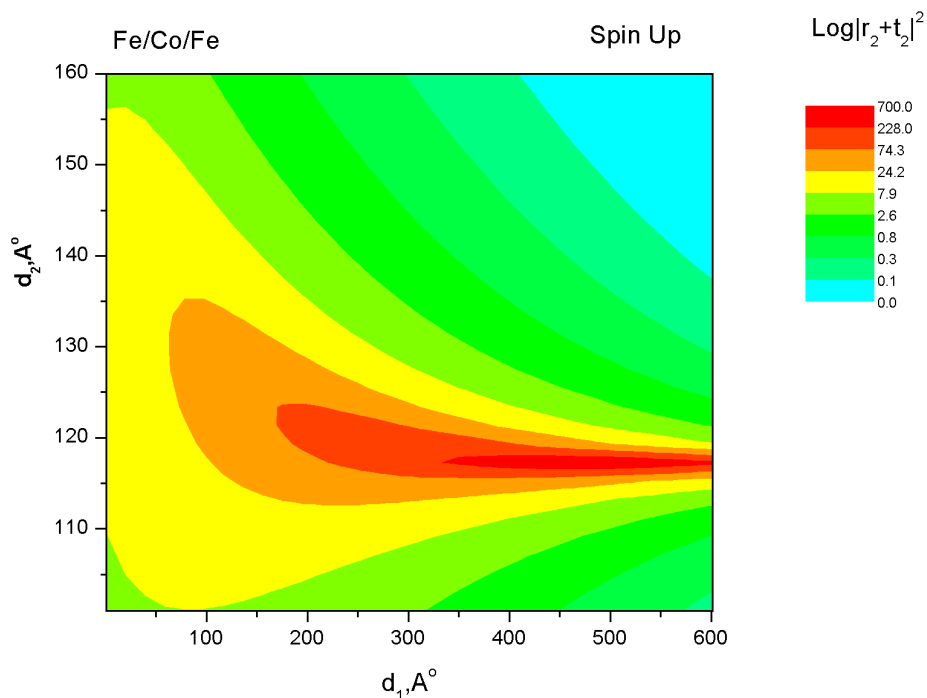


Рис. 12: Волновое поле внутри второго слоя, как функция толщины первого  $d_1$  и второго  $d_2$ , слоев.

Как видно из рис.12, мы имеем своего рода свободу в выборе толщин первого и второго слоя. Например, условия для наблюдения резонанса будут оптимальными при толщине первого слоя  $d_1 = 400 \text{\AA} \pm 50 \text{\AA}$ . Что очень важно, с точки зрения приготовления образцов. Потому как, при использовании МВЕ машины, толщина определена с точностью 20%. Но как можно видеть, это не сильно отразится на величине волнового поля, при резонансе.

Столь невысокое требование к точности толщин слоев в образце сильно упрощает процесс его приготовления.

### 12.3 Зависимость от поглощения

Рассмотрим, как меняется глубина и ширина резонанса, в зависимости от поглощения в промежуточном слое (рис.13).

Физически такая зависимость объясняется следующим образом. Попад в промежуточный слой с сильным поглощением, нейтрон не успеет многократно отразившись, намного усилить амплитуду стоячей волны, которую он продуцирует в промежуточном слое. Чем больше поглощение, тем больше вероятность того, что он будет поглощен вторым слоем,



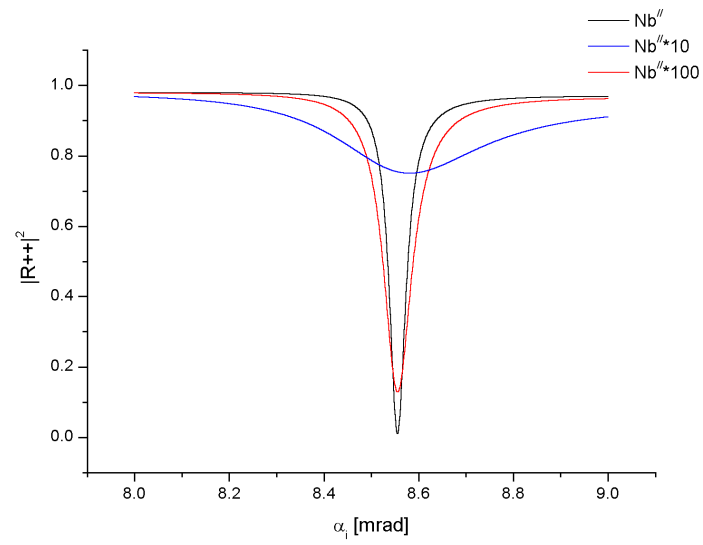


Рис. 13: Зависимость резонанса от поглощения, промежуточный слой Co,  $Nb = 8.85 \cdot 10^{-3} [A \cdot 10^{-6}]$

не успев увеличить волновое поле внутри ямы.

## 13 Изготовление образцов с оптимальными параметрами

В данном разделе мы обсудим мотивацию изготовления образцов с конкретными параметрами и методику их изготовления.

Все образцы были созданы с целью подтверждения теории, а так же с оптимальными толщинами каждого из слоев, которые были найдены с помощью численных расчетов.

### 13.1 Методы изготовления магнитных наноструктур

Как говорилось выше, образцы были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии (Molecular Beam Epitaxy), в Институте Твердого Тела, Научно-Исследовательского Центра г.Юлиха. ( Forschungszentrum Jülich, Institut für Festkörperforschung ).

Эпитаксия - процесс наращивания монокристаллических слоев вещества на подложку (кристалл), при котором кристаллографическая ориентация наращиваемого слоя повторяет кристаллографическую ориентацию подложки. Эпитаксия позволяет получать такие тонкие (1 нм - 10 мкм) однородные монокристаллические слои - так называемые, эпитаксиальные слои - любого типа проводимости и любого удельного электрического сопротивления, какие невозможно создать иным способом.

Различают гетероэпитаксию, когда вещества подложки и наращиваемого слоя различны по химическому составу и кристаллической структуре, и гомоэпитаксию (автоэпитаксию), когда подложка и наращиваемый слой одинаковы по химическому составу или отличается только примесным составом. Эпитаксия используется в технологии производства широкого класса электронных приборов и устройств для получения (в виде пленок и многослойных структур) эпитаксиальных слоев элементарных полупроводников, соединений типа  $A^{III}B^V$ ,  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{IV}B^{VI}$ , гранатов, ортоферритов, и других материалов.

Свойства эпитаксиальных слоев во многом определяются условиями сопряжения кристаллических решеток наращиваемого слоя и подложки, причем существенно их структурно-геометрическое соответствие. Легче всего сопрягаются вещества, кристаллические структуры которых одинаковы или близки (например, вещества с кристаллической структурой сфалерита и алмаза). Эпитаксия легко осуществляется, если разность постоянных решеток не превышает 10%. В этом случае тонкий выросший слой продолжает атомные плоскости подложки (возникает псевдоморфный слой). При больших расхождениях сопрягаются наиболее плотно упакованные плоскости.

При различных решетках сопрягаемых веществ в эпитаксиальных слоях возникают дислокации несоответствия. Плотностью дислокаций несоответствия можно управлять, меняя параметры решетки растущего кристалла (например, введением примесей) и получая таким образом бездислокационные эпитаксиальные слои с высокой подвижностью и малой плотностью носителей заряда.

Помимо структурно-геометрического соответствия сопряжение пар веществ зависит от температуры процесса (предельно низкая температура, при которой еще возможно ориентированное нарастание вещества), степени пересыщения осаждаемого вещества, совершенства подложки и чистоты ее поверхности. Поэтому подложку обычно подвергают механической, химической или радиационной обработке.

Эпитаксиальный слой растет за счет атомов и молекул, составляющих адсорбционный слой, и скорость роста зависит от пересыщения в этом слое [13].

Эпитаксия возможна из любой фазы: газовой, жидкой и твердой. Преимущественное раз-

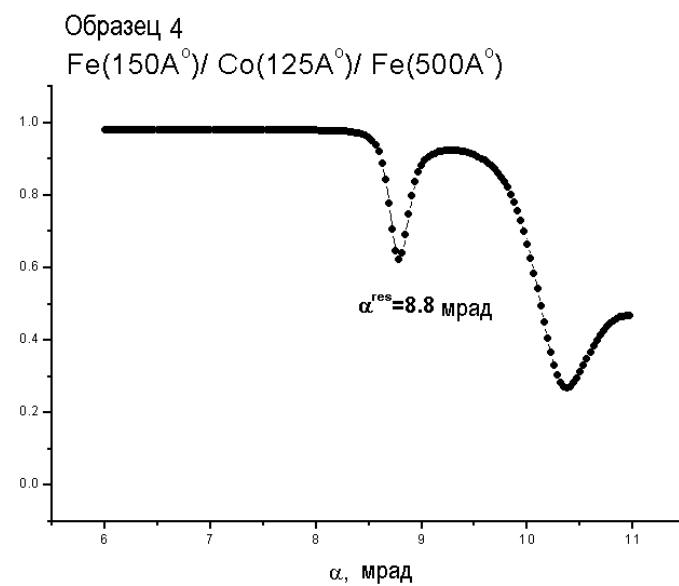
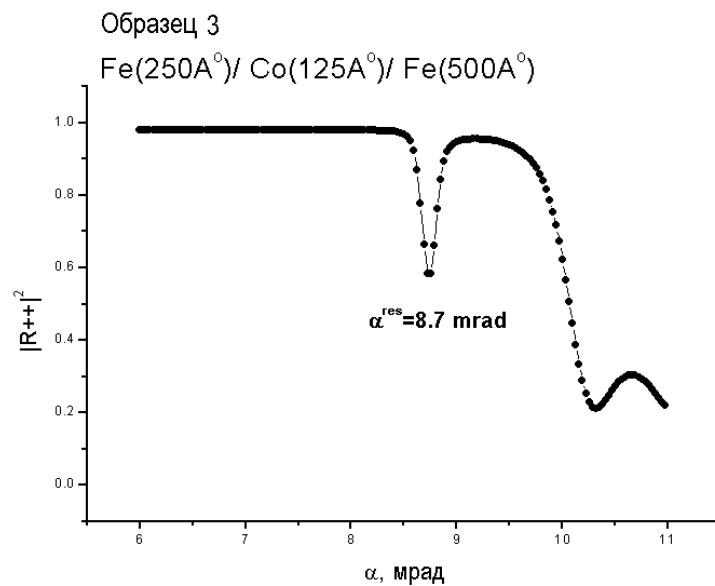
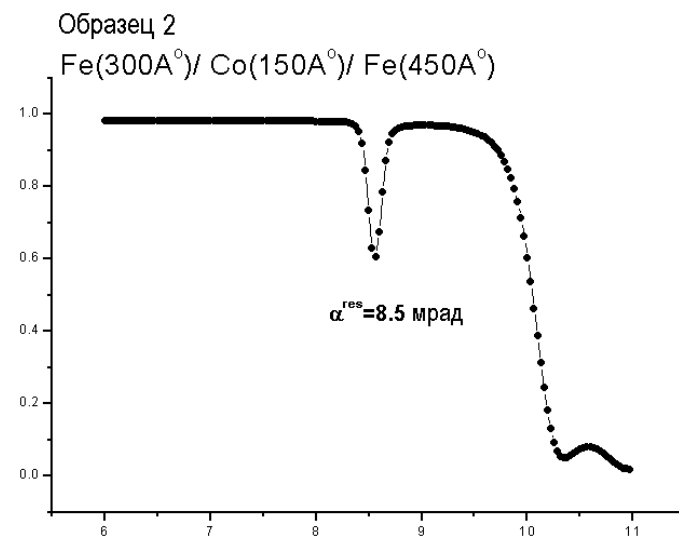
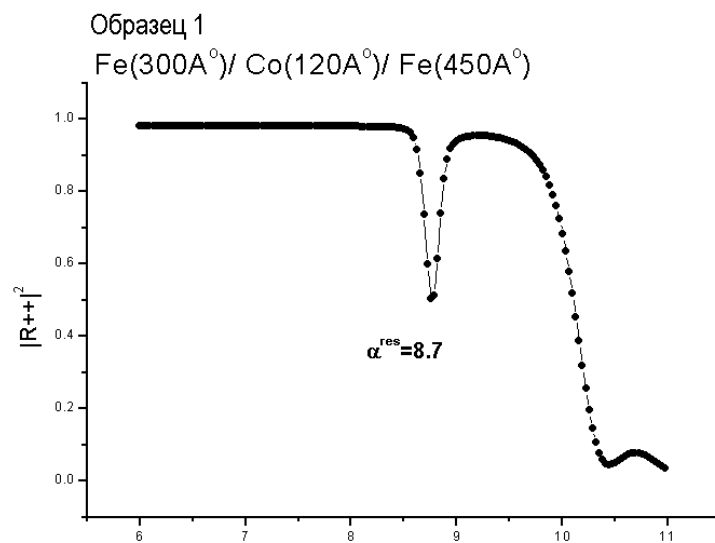


Рис. 14: Четыре образца для исследования. Численные симуляции.

витие получили газофазная и жидкофазная эпитаксия.

Методы газофазной эпитаксии делятся на химические и физические.

Химические методы основаны на осаждении газовой фазы вещества, полученного в результате химических реакций: восстановление хлоридов Si и Ge водородом, пиролитического разложения моносилана, диспропорционирования диоксидов и дихлоридов Si и Ge, и другие.

К физическим методам относятся методы термического осаждения из молекулярных пучков в вакууме, мгновенного испарения, "горячей стенки", а так же методы катодного осаждения и распыления.

### **13.2 Метод молекулярно-лучевой эпитаксии**

По методу термического осаждения из молекулярных пучков испаряемое вещество нагревается до требуемой температуры (выше или ниже температуры плавления испаряемого вещества в зависимости от упругости пара в точке плавления) в сверхвысоком вакууме ( $\leq 1,3 \cdot 10^{-8}$  Па); при этом его атомы и молекулы попадают на подложку где и происходит их конденсация.

Наиболее совершенным является электронно-лучевой способ нагрева, отчего такой метод получил название молекулярно-лучевой эпитаксии.

Этот метод позволяет в процессе осаждения контролировать структуру и состояние поверхности подложек, регулировать плотность молекулярного потока, то есть скорость роста кристаллов, обеспечивать возможность при помощи маски выполнять локальную кристаллизацию, получать резкие межслойные границы, выращивать сверхтонкие (1 - 100 нм) эпитаксиальные слои (пленки) полупроводников, диэлектриков и металлов, создавать сверхрешетки, осуществлять многослойную застройку решетки.

На основе пленок, полученных этим методом, создают оптоэлектронные интегральные схемы, фотоприемники и лазеры на гетероструктурах, фотокатоды, сверхбыстродействующие большие электронные схемы.

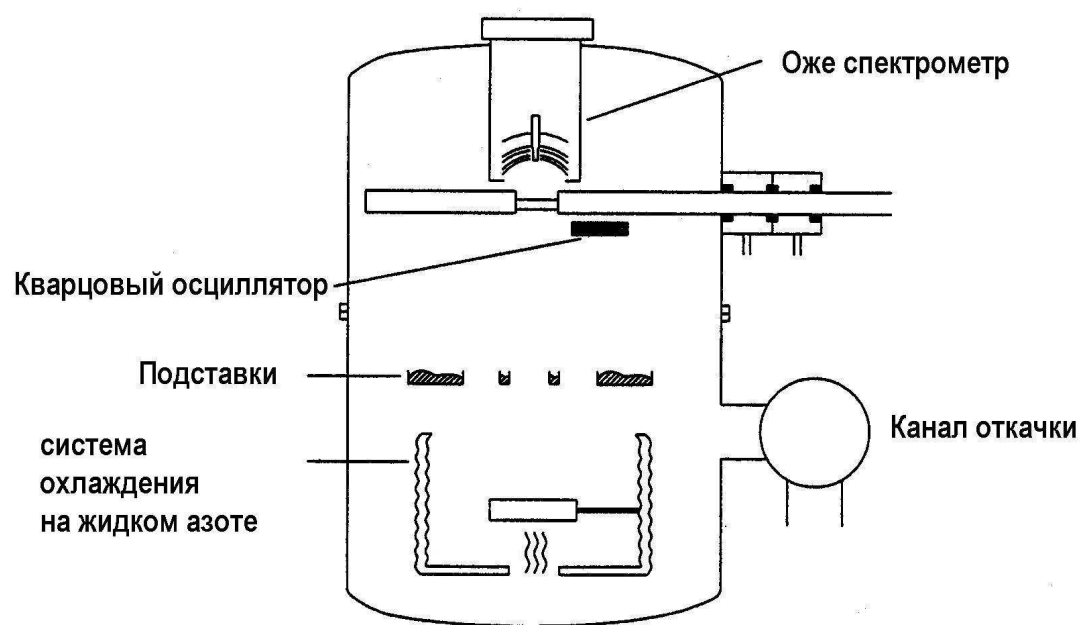


Рис. 15: Схема МВЕ машины [14].

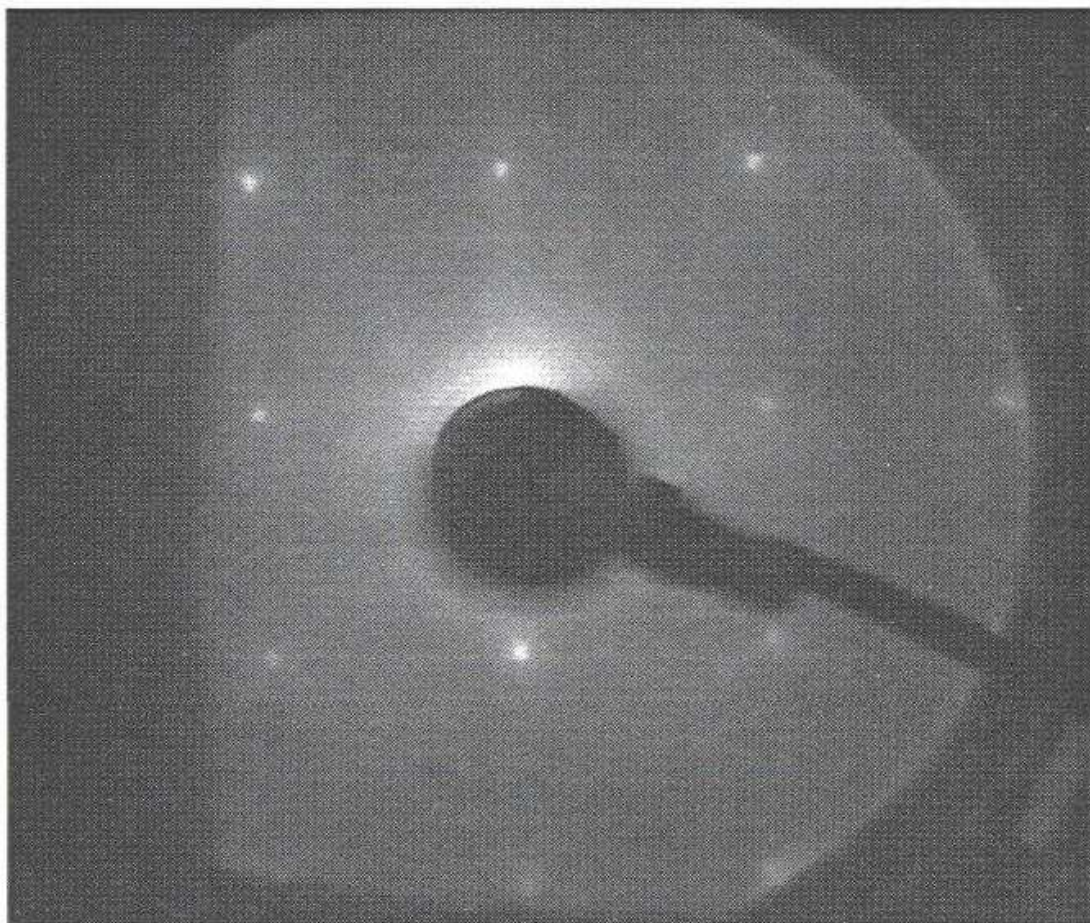


Рис. 16: LEED картинка слоя Ag толщиной 150 нм.[14]

## 14 Рефлектометр HADAS

Новый рефлектометр с анализатором поляризации был построен на основе спектрометра HADAS, в нейтроноводном зале при реакторе FRJ-2(DIDO) в НИЦ г.Юлиха. Новый прибор применяется в экспериментах связанных с измерениями коэффициента отражения, диффузионного и магнитного рассеяния нейтронов на магнитных пленках толщиной несколько нм., при малых углах падения пучка.

Спектрометр HADAS был преобразован в рефлектометр, несколько лет назад. Двойной монохроматор, на основе пиролитических графитовых кристаллов, выводит монохроматический пучок нейтронов из нейтроновода. Монохроматор помещен в магнитное поле, необходимое для формирования двух направлений спина нейтрона. В магнитном поле, нейтрон имеет две проекции, по полю, и против поля (вверх и вниз).

Монохроматический пучок отклоняется от нейтроновода на 230 мм, и коллимируется в горизонтальном направлении двумя щелями. В вертикальном направлении пучок фокусируется первым монохроматором. Отраженный от образца пучок попадает на двухмерный (2D) позиционно чувствительный, сцинтилляционный детектор, который находится внутри плеча рассеяния, на расстоянии 1.6 метра, от образца. Активная часть детектора представляет собой круг, диаметром 80 мм. Размер минимального элемента отображения (пикселя) детектора, равен 0.4 мм. Этот детектор позволяет изучать коэффициент зеркального отражения, и диффузионное рассеяние, одновременно. Рефлектометр работает с нейтронами, длина волны которых составляет  $4.52\text{\AA}$ . Для поляризации пучка, в поляризаторе (ФОТО!) используются N суперзеркал и анти-отражающие слои Gd:Td, расположенные под ними. При данной длине волны, эти суперзеркала, имеют коэффициент отражения около 90% для нейтронов с определенной поляризацией, и поляризационную способность, около 95%, для углов падения от  $0.44^\circ$ , до  $1.09^\circ$ .

Поляризатор расположен между двумя коллимирующими щелями (рис.18), на расстоянии примерно 25мм относительно траектории неполяризованного пучка. Для облучения поляризатора пучком нейтронов, первая щель, и второй монохроматор должны быть смещены на 25мм, по направлению к нейтроноводу. Угол между поляризованным и неполяризованным пучком, которые падают на образец, составляет  $1.6^\circ$ .

Поляризатор помещен между полюсами электромагнита, который намагничивает до насыщения слои в суперзеркалах, ориентирует магнитные моменты атомов нужным образом, и задает поляризацию первичного пучка нейтронов. Поэтому, становится возможным выделение двух спиновых состояний в пучке, без введения спин-флиппера, между образцом и поляризатором.

Спин-флиппер, помещенный в плече рассеивания, меняет ориентацию спина на противоположную. Назначение спин-флиппера в следующем: при регистрации пучка с определенной поляризацией, детектируется число нейтронов, с этой поляризацией. Число (плотность потока) нейтронов вылетающих из нейтроновода, известно. На детекторе фиксируется только то число нейтронов, спины которых имеют определенное направление, вдоль или против магнитного поля. Остальная часть, с другим спином, не фиксируется. Для того, чтобы получить информацию о той части нейтронов, которые имеют противоположное направление спина, и нужен спин-флиппер. Он меняет ориентацию спинов падающих нейтронов, относительно внешнего поля, на противоположную. Тогда, детектируется уже те нейтроны, которые ранее не попадали на детектор.

То есть, при помощи спин-флиппера, можно узнать сколько нейтронов в пучке имеют ту или иную проекцию спина. Более того, это позволяет делать выводы о том, поглощает

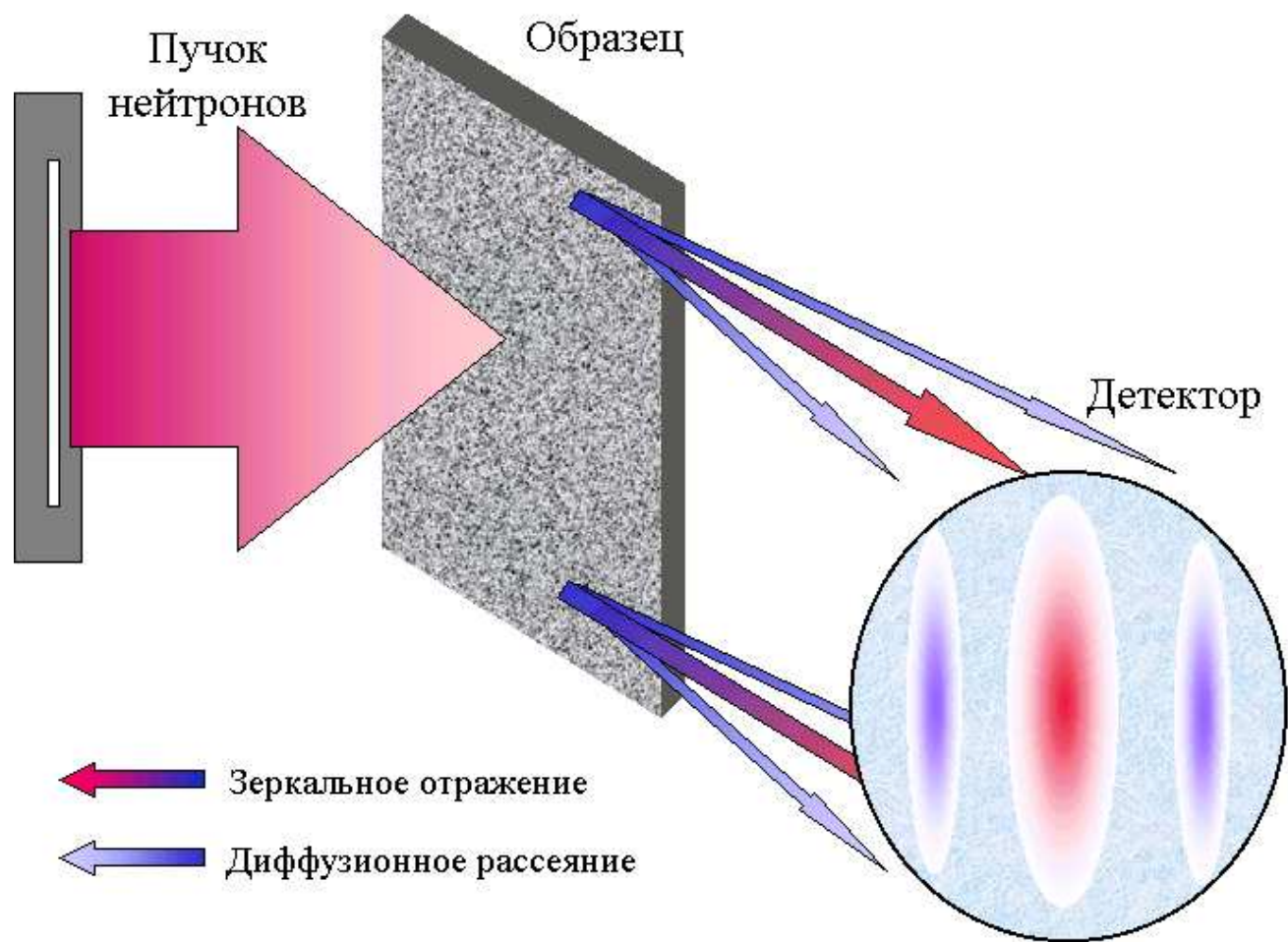


Рис. 17: Диффузионное и зеркальное рассеяние образца (масштаб образца изменен для наглядности).



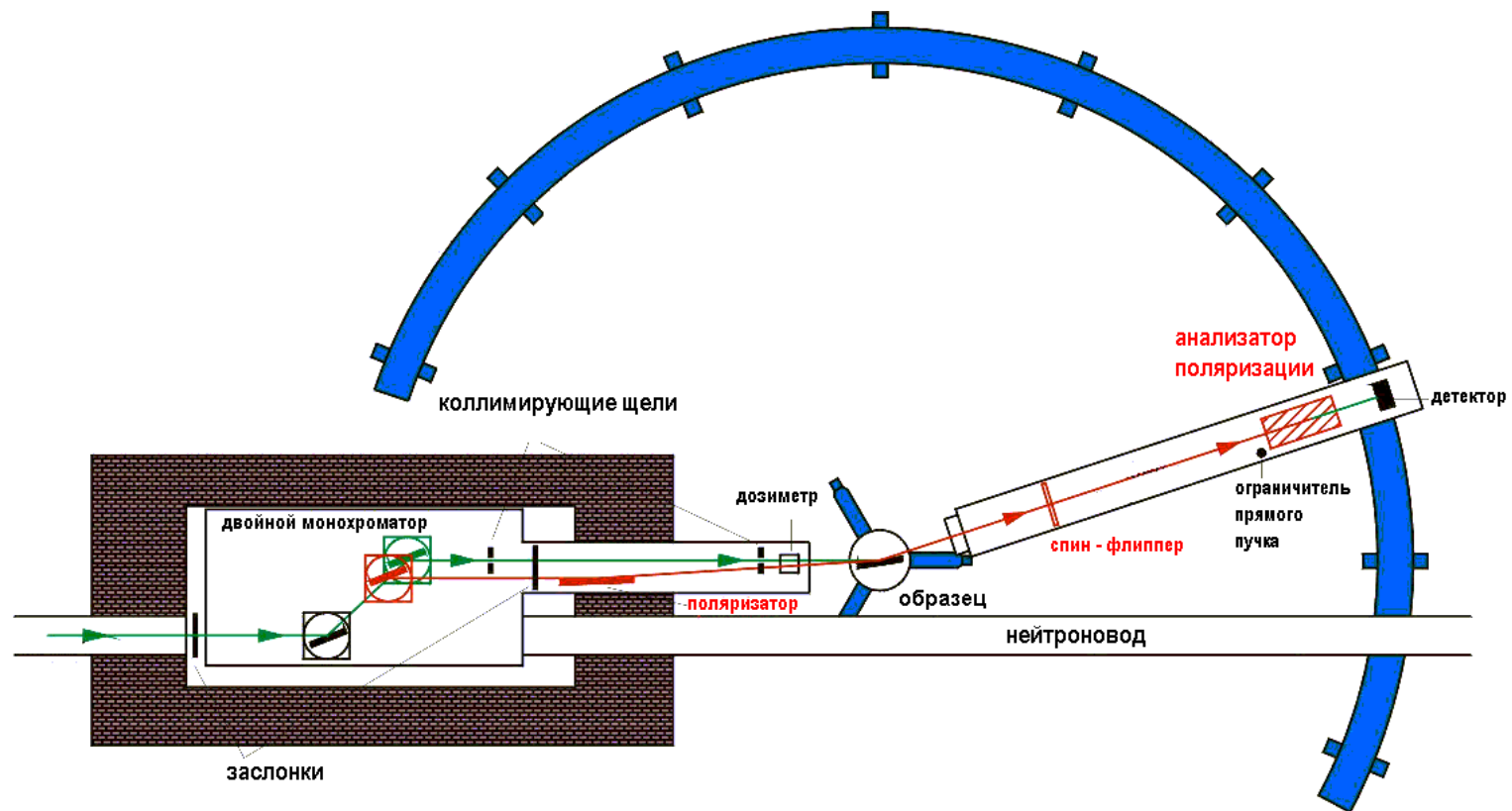


Рис. 18: Схема рефлектометра HADAS [16].

ли исследуемый образец нейтроны или нет.

Между спин-флиппером и анализатором, расположен ограничитель прямого пучка (beamstop).

Объектом исследования является диффузионное магнитное рассеяние. В связи с этим, первичный пучок не несет в себе какую-либо значительную информацию. Тем не менее интенсивность первичного пучка, намного превосходит интенсивность диффузионно рассеянных пучков, изучением которых мы занимаемся. Если же первичный пучок попадет на детектор, то он покроет активную часть детектора, и рассеянный пучок уступающий по интенсивности прямому будет не различим на детекторе. Поэтому, делают так, чтобы первичный пучок не попадал на детектор. В этом и состоит назначение поглотителя первичного пучка.

И анализатор, и поляризатор не отражают нейтроны, поляризация которых по направлению противоположна направлению магнитного поля. Анализатор, включает в себя тридцать поляризующих суперзеркал толщиной 0.21мм, и длиной 200мм. Некоторые из зеркал, разделены клиновидными алюминиевыми прокладками. Как видно из рисунка(19), каждое из суперзеркал, отражает пучок, который покрывает только некоторую часть детектора. В совокупности же, они полностью покрывают детектор отраженными пучками. Клиновидные пластины алюминий, и изогнутость зеркал, необходимы для фокусировки пучка на детекторе. Другими словами, нам необходимо добиться таких углов падения на зеркала, при которых они "работают". Иначе, ничего отражаться не будет. Такое устройство анализатора не позволяет свободно распространяться нейтронам внутри него, не испытывая, как минимум, хотя бы одного отражения.

Остановимся подробнее на разрешающей способности анализатора.

Объектом изучения является диффузионное рассеяние на доменах и на внутренних шероховатостях образца. Итак, пучок нейтронов проходит через коллимационные щели, и теперь считается двумерным. Разрешающая способность прибора, есть способность прибора давать раздельное изображение двух близких друг к другу точек объекта. Оно определяется как наименьшее линейное ( или угловое ) расстояние между двумя точками, начиная с которого их изображения сливаются и перестают быть различимыми.

Детектор (фото 20) сделан на основе сцинтилляционных кристаллов.

Сцинтилляторы - это люминофоры, в которых под действием ионизирующих излучений возникают световые вспышки - сцинтилляции.

В следствии горизонтального расположения суперзеркал и геометрии коллимированного пучка, только изменение вертикальной координаты нейтрона, фиксируется на детекторе. Изменение продольной координаты несет в себе информацию о магнитном и диффузионном рассеянии. Разрешающая способность детектора есть то минимальное расстояние между двумя точками, при котором он их различает. Поэтому, как видно из рис.21, разрешение прибора не снижается при введении в конструкцию анализатора. Нейтроны проходящие через образец снизу и соответственно сверху, падают под разными углами на зеркала анализатора. Диапазон углов падения, при которых можно наблюдать хорошую поляризацию, ограничен высотой образца. С помощью мотора можно менять угол наклона анализатора по горизонтали.

Основная проблема сцинтилляционного детектора, состоит в чувствительности к жесткому гамма-излучению, которое испускается при захвате нейтронов Cd или Gd. В поляризационном анализаторе нейтроны с "ненужной"поляризацией, поглощаются в Cd:Ti анти-отражающем слое. В результате возникает фоновое гамма-излучение, которое коррелирует с другими каналами поляризации. Для экранирования этого излучения, между анализатором и детектором, установлен Bi-фильтр, толщиной 100мм. Этот кристалл про-

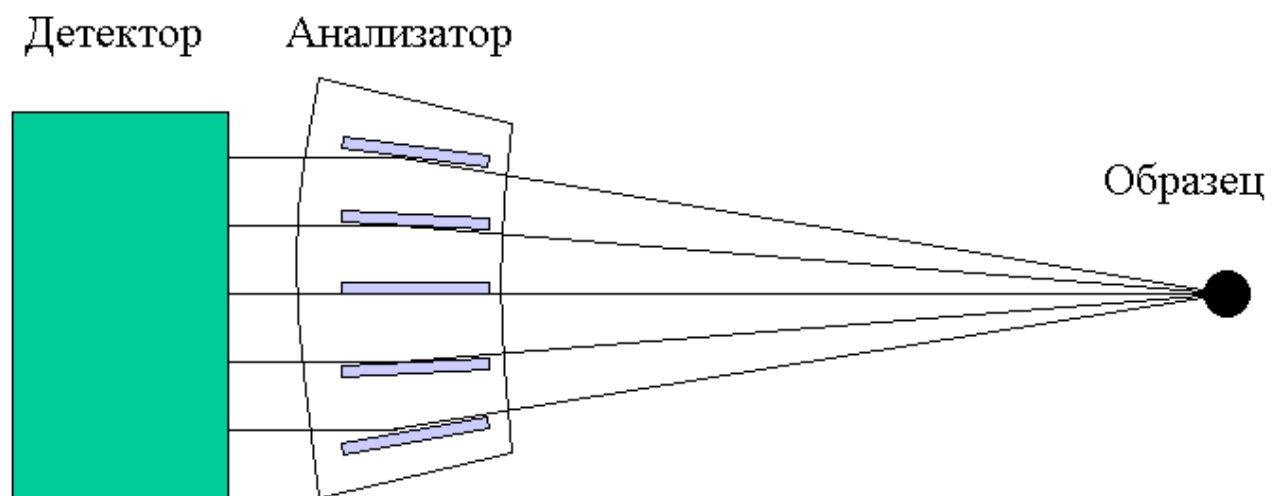


Рис. 19: Расположение суперзеркал в анализаторе, позволяющие покрыть всю активную часть детектора.

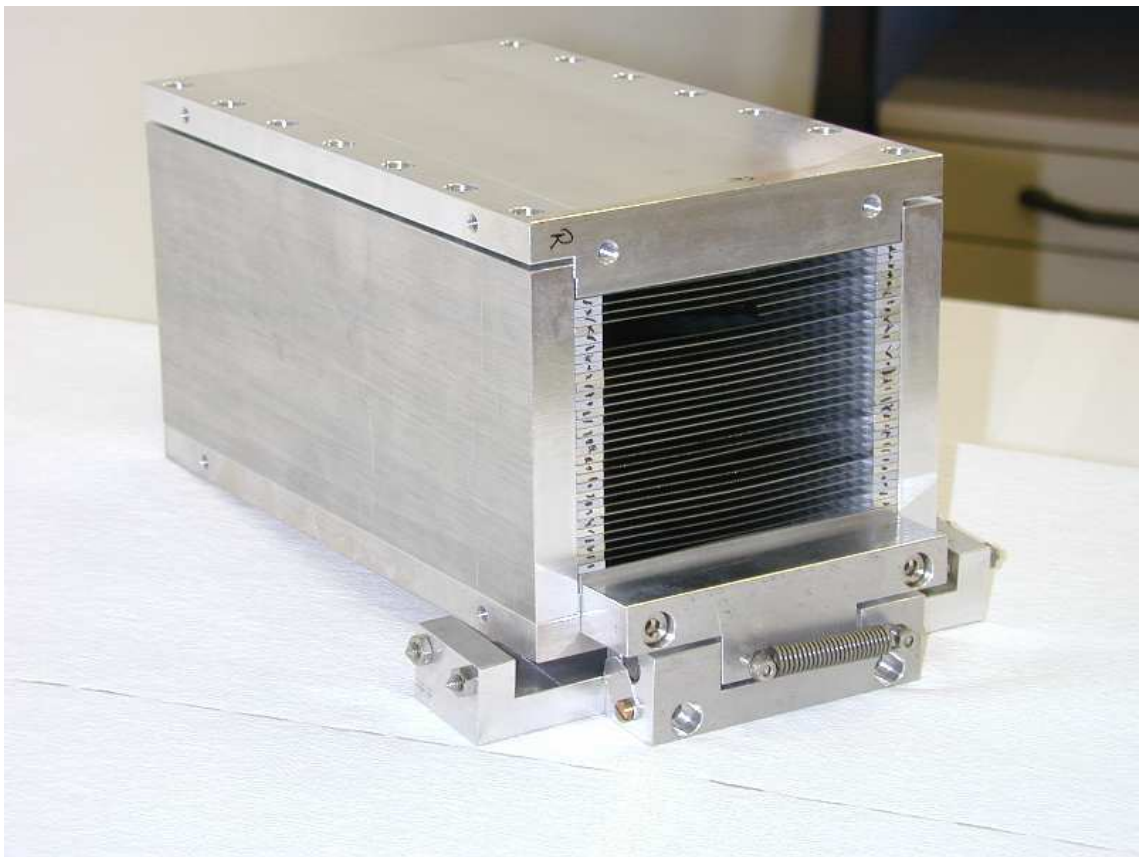


Рис. 20: Поляризационный анализатор рефлектометра HADAS [15]

зрачен для нейтронов с выбранной длиной волны, и в то же время, поглощает жесткое гамма-излучение. В то же время он поглощает и фоновое излучение, от окружающей среды, соседних установок, и т.д.

Во избежании рассеяния нейтронов, на воздухе, камеру с монохроматором и поляризатором, заполняют гелием и создают вакуум в плече рассеяния.

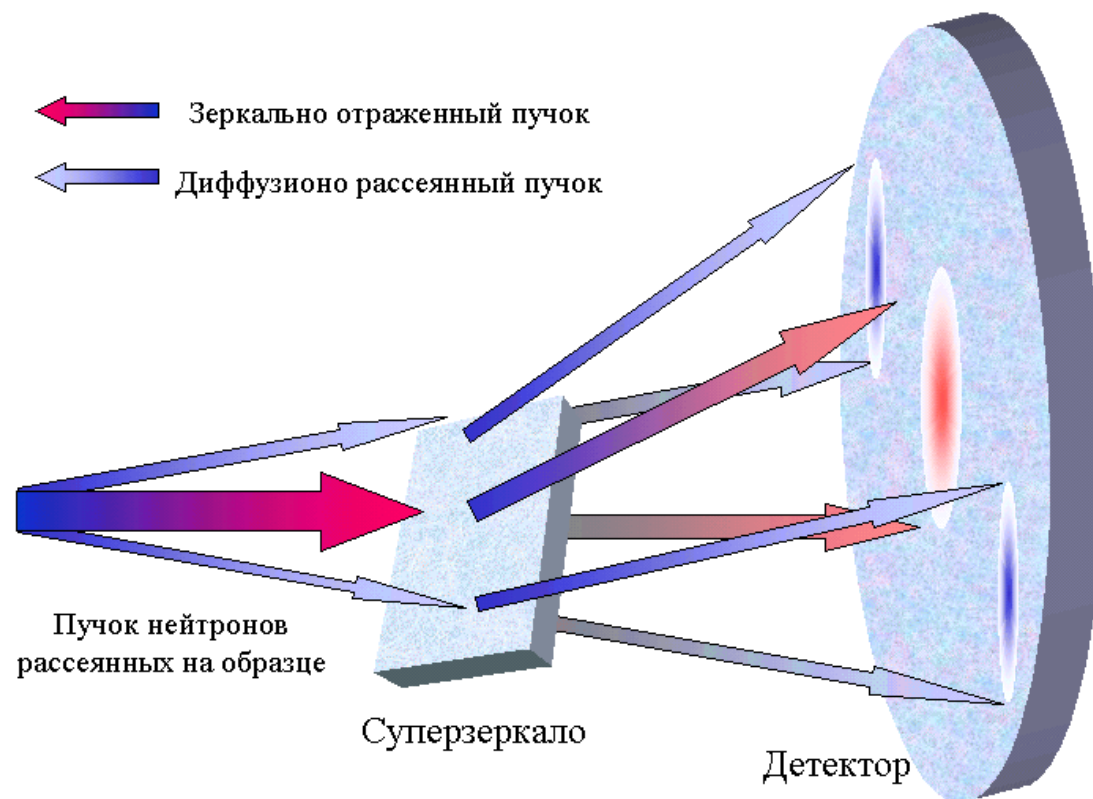


Рис. 21: Взаимодействие суперзеркала и пучка нейтронов.

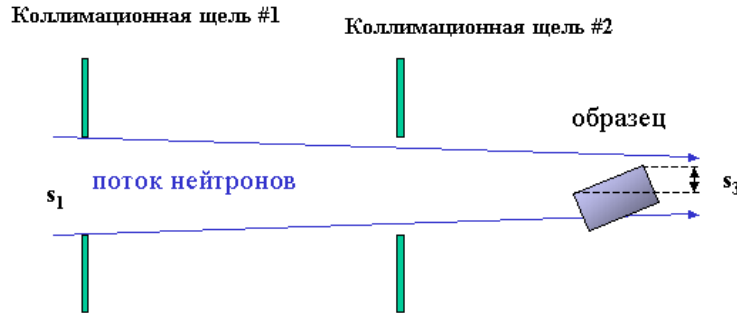


Рис. 22: Геометрия эксперимента.

## 15 Эксперимент

Цель эксперимента состояла в обнаружении резонансных состояний с помощью измерения коэффициента отражения трехслойной пленки Fe/Co/Fe.

Эксперимент проводился с 12.05.03 – 19.05.03, на рефлектометре HADAS, в Институте Твердого Тела, Научно-Исследовательского Центра г.Юлиха, Германия (Forschungszentrum Jülich, Institut für Festkörperforschung).

В этом разделе мы обсудим все детали проведенного эксперимента. Введем необходимые термины и понятия, ключевые для экспериментов с поляризованными нейтронами.

Образец помещался в коллимированный нейтронный пучок и в насыщающие магнитное поле. Исходя из геометрических размеров образца, пучок фокусировался только первой коллимирующей щелью  $s_1$ . Вторая щель  $s_2$  оставалась открытой во время измерений. Такую постановку эксперимента диктовал размер образца: его проекция  $s_3$  на ось перпендикулярную направлению падающего пучка.

$$s_3 = l \sin \alpha, \quad (85)$$

(где  $l$  - длина образца в направлении падающего пучка) и определяла коллимацию нейтронного пучка

Исходя из этого угловое разрешение определялось только размером первой щели  $s_1$ , вертикальной проекцией образца  $s_3$ , а так же расстоянием между первой коллимирующей щелью и образцом  $L = 1.6\text{м}$ .

$$\Delta\alpha = \frac{s_1 + s_3}{2L} \quad (86)$$

Другими словами, зная величины  $L$  и  $s_3$ , как константы, угловое разрешение полностью определялось размером первой коллимирующей щели  $s_1$ .

Рассмотрим какие неопределенности в измерениях, существуют в такого рода экспериментах. Они играют важную роль в эксперименте; приводя к отличию, теоретических расчетов от проведенных экспериментов.

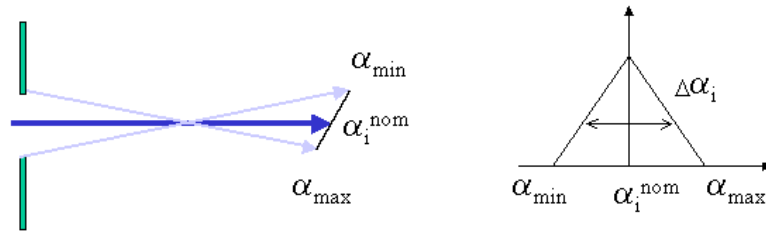


Рис. 23: Угловое разрешение и разрешающая функция.

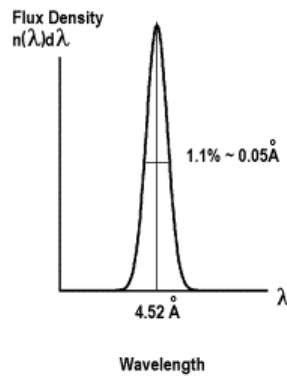


Рис. 24: Распределение плотности потока нейтронов как функция длины волны.

Во-первых, это длина волны падающих нейтронов. Отметим, что длина волны определена с довольно высокой точностью:  $\lambda = 4.52\text{\AA} \pm 0.05\text{\AA}$ . Погрешность измерения при этом  $\pm 1.1\%$ . Тем не менее, это надо учитывать при переходе от начального импульса, к углам падения:  $p_0 = (2\pi/\lambda) \sin \alpha$ . Распределение плотности потока падающих нейтронов по длинам волн описывается функцией распределения Гаусса (рис.24).

Во-вторых, угловое разрешение. Оно определяется размером коллимирующей щели. Чем больше щель, тем хуже разрешение. Фактически, мы имеем распределение углов падения в диапазоне от  $\alpha_{min}$  до  $\alpha_{max}$ , которое описывается треугольной функцией (рис.23). Угловое разрешение играет существенную роль в наших экспериментах. Мы покажем позже, какое именно разрешение нам нужно, и обсудим проблемы связанные с высоким угловым разрешением. Но мы учитывали этот фактор в численных расчетах, свернув теоретическую зависимость коэффициента отражения от угла падения с разрешающей функцией что, естественно, понизило ожидаемый эффект.

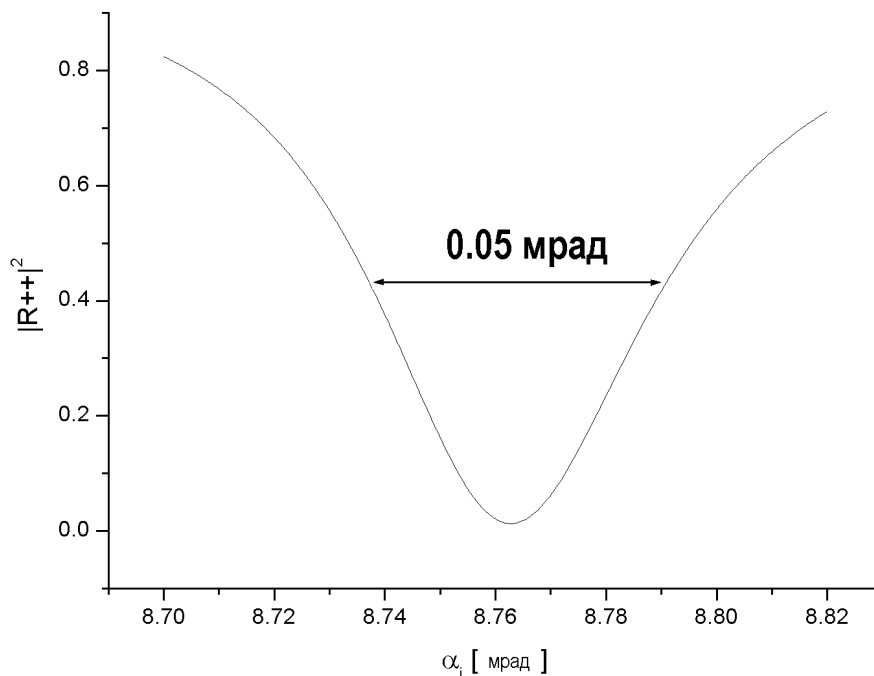


Рис. 25: Необходимое угловое разрешение. Численные симуляции.

И, наконец, третье. Это разрешающая способность детектора. На сегодняшний день не существует правдоподобного описания разрешающей функции детектора. В какой-то степени это случайный процесс. Это не очень существенный фактор при работе с низким угловым разрешением. Но при переходе к высоким угловым разрешениям он играет довольно значимую роль, и является одной из главных неполного соответствия результата эксперимента с теорией.

Необходимое угловое разрешение было выбрано исходя из численных расчетов. Все ожидаемые резонансы, в среднем, имеют толщину на полувисоте, около 0.05 мрад (рис.25).

Такое разрешение соответствует размеру коллимирующей щели 0.04мм. Очень важно было найти оптимальное соотношение между высоким угловым разрешением и временем наблюдения. При высоком разрешении - малом размере первой коллимирующей щели, число нейтронов рассеивающихся на поверхности пленки мало. Соответственно, чем больше разрешение, тем больше должно быть время измерений. Для измерения всех образцов у нас была неделя работы на установке HADAS. Поэтому, так важно было найти компромисс между высоким угловым разрешением, позволяющим увидеть резонанс и между временем наблюдения. Именно, по этой причине первый



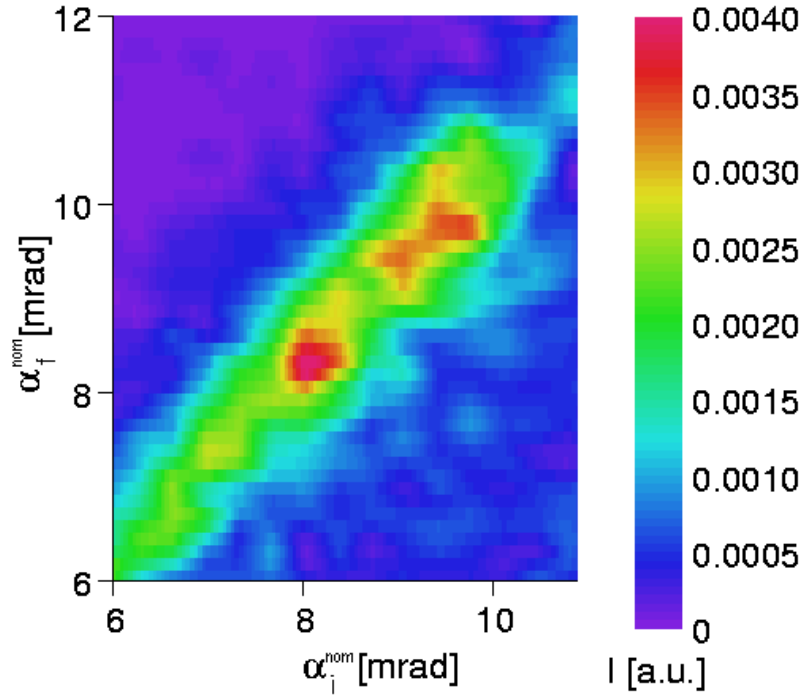


Рис. 26: Результаты сканирования образца №1, при низком угловом разрешении ( $\Delta\alpha_i = 0.1\text{мрад.}$ ) .

образец измерялся при низком угловом разрешении и за довольно короткий срок.

### 15.1 Первые результаты

Первый измерения были проведены с образцом №1 при низком угловом разрешении. Мы поместили образец в насыщающие магнитное поле. Размер первой коллимирующей щели выбирался из необходимого углового разрешения. Длина образца вдоль направления распространения пучка составляет около 1 см. Максимальный угол наклона в пучке составлял 10 мрад. Это означает что проекция образца на направление перпендикулярное распространению нейтронного пучка  $s_3 = 0.1$  мм, и исходя из необходимого разрешения выбирали размер первой щели.

Мы решили не ограничиваться измерением только  $+/+$  поляризационного канала. Интересно было наблюдать явления происходящие и в других каналах. Были все измерены четыре поляризационных канала; сканирование заняло около часа.

Даже без предварительной обработки данных, результат измерений был успешным (рис.26).

Первое что удалось обнаружить кривую зеркального отражения. Это прежде всего гово-

рит о том, что образец действительно отражает нейтроны при углах малых падения. Как результат диффузионного рассеяния на шероховатостях, кривая имеет конечную толщину.

В результате измерений была обнаружена граница полного внешнего отражения, когда интенсивность отраженного пучка стремится к нулю. Выше этой границы, нейтроны начинают проходить сквозь пленку, и только малая часть падающего пучка отражается. На цветной карте это означает смену цвету, соответствующего слабой интенсивности.

И, наконец, удалось обнаружить провал в интенсивности кривой зеркального отражения, ниже критического порога  $\alpha_c$ , что означает наличие резонансного состояния для нейтрона внутри такой пленки. Резонанс был обнаружен в процессе рассеяния без переворота спина, то есть, когда спин падающего и отраженного пучка направлены вдоль магнитного поля (так называемый спин  $+/+$  канал). Как обрабатывать полученные результаты, мы расскажем немного позже. Но даже без предварительной обработки, видно что резонанс и граница полного внешнего отражения имеют место в предсказанных теоретически углах падения.

Итак, удалось обнаружить

- кривую зеркального отражения образца,
- границу полного внешнего отражения,
- резонанс при ожидаемых углах падения.

Важность первого измерения состоит в том, что теперь мы научились проводить стандартную процедуру измерений для образцов представляющих собой трехслойную пленку Fe/Co/Fe. Все остальные измерения проводились аналогично, с каждым из существующих образцов. Эксперимент с низким угловым разрешением, показал что резонанс существует только в  $+/+$  поляризационном канале. Это снимает необходимость измерений в других каналах для остальных образцов, что существенно экономит время.

Остановимся подробнее на том, почему резонанс проявляется только в  $+/+$  канале. Причины такого поведения следующие.

Рассеяние нейтрона в веществе описывается полной длиной рассеяния

$$b^{tot} = b_N \pm b_M \quad (87)$$

где  $b_N$  и  $b_M$  ядерная и магнитная длины рассеяния нейтрона соответственно. А знак зависит от направления спина нейтрона: плюс - спин направлен по полю, минус - спин направлен против магнитного поля. Тогда потенциал взаимодействия нейтрона с веществом равен

$$V(z) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} N b^{tot}, \quad (88)$$

где,  $\hbar$  - постоянная Планка,  $m$  - масса нейтрона,  $N$  - число ядер рассеивателей в единице объема.

Рассчитаем энергию налетающих нейтронов в зависимости от угла падения:

$$E_i = \frac{2\pi^2\hbar^2}{m} \left( \frac{\sin \alpha_i}{\lambda} \right)^2 \quad (89)$$

Длина волны используемых нейтронов в эксперименте  $\lambda = 4.52 \text{ \AA}$ , тогда энергия нейтронов зависит от угла падения  $\alpha_i$ . При углах падения  $\alpha_i < \alpha_c$ , и при выполнении условия:

$$E_i < V(z), \quad (90)$$

при такой энергии нейтрон способен проникать в пленку и образовывать связанные состояния.

Как уже говорилось, потенциал  $V(z)$  зависит от спинового состояния нейтрона (рис.27). Для слоя железа  $Nb^{tot} = 13.07 \text{ \AA}^{-2} 10^{-6}$ , для спина нейтрона направленного по полю. Тогда, условие (90) будет выполняться для углов падения  $\alpha_i < \alpha_c$ . Для нейтрона с противоположным спином слой железа представляет собой более низкий потенциальный барьер  $Nb^{tot} = 3.11 \text{ \AA}^{-2} 10^{-6}$ , соответственно граница полного внешнего отражения  $\alpha_c$  для спинового состояния направленного против магнитного поля, меньше чем для нейтрона со спином направленного по полю. Воспользуемся такой методикой расчета. Представим потенциал  $V(z)$ , в виде:

$$V(z) = \beta \left( \frac{Nb^{tot}}{\pi} \right), \quad (91)$$

где,  $\beta = 2\pi^2 \hbar^2 / m$  - константа,  $m$  - масса нейтрона,  $\hbar$  - постоянная Планка.

При малых углах падения  $\sin \alpha_i = \alpha_i$ , тогда перепишем энергию падающего нейтрона (89), через константу  $\beta$

$$E_i = \beta \left( \frac{\alpha_i}{\lambda} \right)^2 \quad (92)$$

Так как, в эксперименте  $\lambda$  считается константой, то справедливость условия (90) определяется только свойствами вещества -  $Nb^{tot}$ , и начальным углом падения нейтрона -  $\alpha_i$ . Для спинового состояния нейтрона вверх условие (90) выполняется до углов падения  $\alpha_c \approx 9.8$  мрад. Но для спинового состояния нейтрона вниз, условие (90) выполняется до критического значения  $\alpha_c \approx 4.6$  мрад. То есть граница полного внешнего отражения зависит от спинового состояния нейтрона.

Стенки потенциальной ямы образованной трехслойной пленкой Fe/Co/Fe, для спинового состояния нейтрона вниз, не достаточно высоки для образования связанного состояния внутри такой ямы.

## 15.2 Результаты измерений

После одной недели эксперимента мы получили набор данных, который позволял сделать выводы об успехе эксперимента даже без предварительной обработке результатов. Обработке полученных данных мы посвятим следующие разделы.

На рис.28 представлены результаты измерений для всех четырех образцов. Как и в случае с измерением образца №1 мы обнаружили кривую зеркального отражения, границу полного внешнего отражения, а так же провалы в интенсивности на этих кривых, отвечающие резонансному состоянию. На всех картинках кривая зеркального отражения размыта, за счет диффузионного рассеяния.

Отличия формы и ширины кривых для разных образцов объясняется прежде всего геометрией образцов. Каждый образец имеет, свои характерные особенности, которые и проявляются на картинках.

Измерения проводились при высоком угловом разрешении 0.05 мрад, с размером первой коллимирующей щели 0.04 мм. Размер каждого образца определялся прежде всего размером подложки. При изготовлении образцов мы использовали подложки прямоугольной формы, с шириной 1см. Поэтому для всех образцов мы выбирали именно такой размер щели.

Если сравнить результаты сканирования при низком (рис.26) и высоком (рис.28) угловом

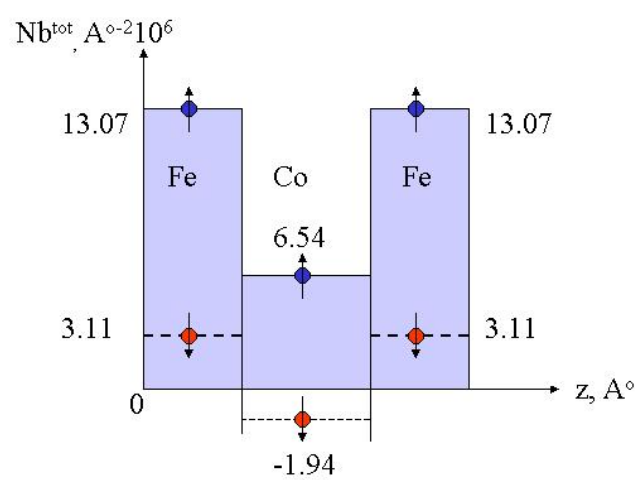


Рис. 27: Квантовая яма Fe/Co/Fe, для нейтрона с различными направлениями спина.

разрешении, то видны многие различия.

Так как, время наблюдений возросло примерно в двадцать раз (с одного, до двадцати часов) интенсивность отраженного пучка возросла. Этот факт имеет тот неоспоримый плюс, что кривая зеркального отражения видна гораздо четче, и провалы в ее интенсивности наблюдаются визуально. Более того при малых углах падения, мы имеем большую интенсивность на кривой зеркального отражения, чем при низком угловом разрешении. Объясняется это прежде всего тем, что время наблюдений многократно возросло. Другими словами, в каждом угловом положении образец наблюдался больше. При первом сканировании 30 сек., на каждое положение, при втором 650 сек. Поэтому, детектор регистрировал большее число отраженных нейтронов. Данные карты представляют собой интенсивность отраженного пучка, как функцию от угла падения  $\alpha_i$  и угла отражения  $\alpha_f$ . Зеркальному отражению соответствует диагональ  $\alpha_f = \alpha_i$ . Интенсивность есть число нейтронов, отразившихся от поверхности образца при данном угле падения, нормированная на начальный поток и проекцию образца в направлении перпендикулярном распространению пучка. Технические возможности рефлектометра позволяли оценивать число нейтронов в падающем и отраженном потоке. Процедура нормировки была необходима по ряду причин.

Коэффициент отражения, в этом случае, интерпретируется как отношение интенсивностей отраженного и падающего пучков. Если они равны, тогда  $\mathcal{R} = 1$ , резонансу же соответствует значение  $\mathcal{R} < 1$ , это означает что часть нейтронов была поглощена внутри образца, полностью соответствуя теоретическим предсказаниям. Благодаря этому факту и стало возможным наблюдать резонансные состояния на кривой зеркального отражения. Если число нейтронов приходящих на детектор становится меньше, это означает что они задерживаются пленкой, иначе говоря вероятность обнаружения их в промежуточном слое  $\mathcal{S}_0$  возрастает.

Остановимся на том что происходит когда образец поворачивается в пучке нейтронов. Очевидно, что чем больше угол поворота образца в пучке, тем больше нейтронов приходят на поверхность и отразившись, фиксируются детектором. Таким образом, при малом угле наклона, когда образец находится почти параллельно направлению распространения пучка нейтронов, мы можем фиксировать лишь малую часть нейтронов отразившихся от поверхности. Чтобы учесть этот факт при восстановлении экспериментальной зависимости коэффициента отражения от угла падения, нам необходимо нормировать отраженную интенсивность на интенсивность падающего потока. В связи с тем что образец находится внутри нейтронного пучка имеющего конечную толщину, использовать показания счетчика, который фиксирует средние число нейтронов выходящих из нейтроновода, мы не можем.

Для того чтобы учесть, какая часть нейтронного пучка падает на образец мы должны нормировать начальный поток на продольную проекцию образца в пучке:

$$s_3 = l \sin \alpha_i \quad (93)$$

где  $l$  - длина образца в направлении распространения нейтронного пучка. Для всех образцов этот размер определялся подложкой, и принимался равным 1 см., для каждого из образцов.

Слабая интенсивность зарегистрированного сигнала, объясняется прежде всего высоким угловым разрешением, в следствие которого число нейтронов, отразившихся от образца, невелико по сравнению с начальным потоком.

Как видно из представленных данных, для каждого образца удалось найти кривую зер-

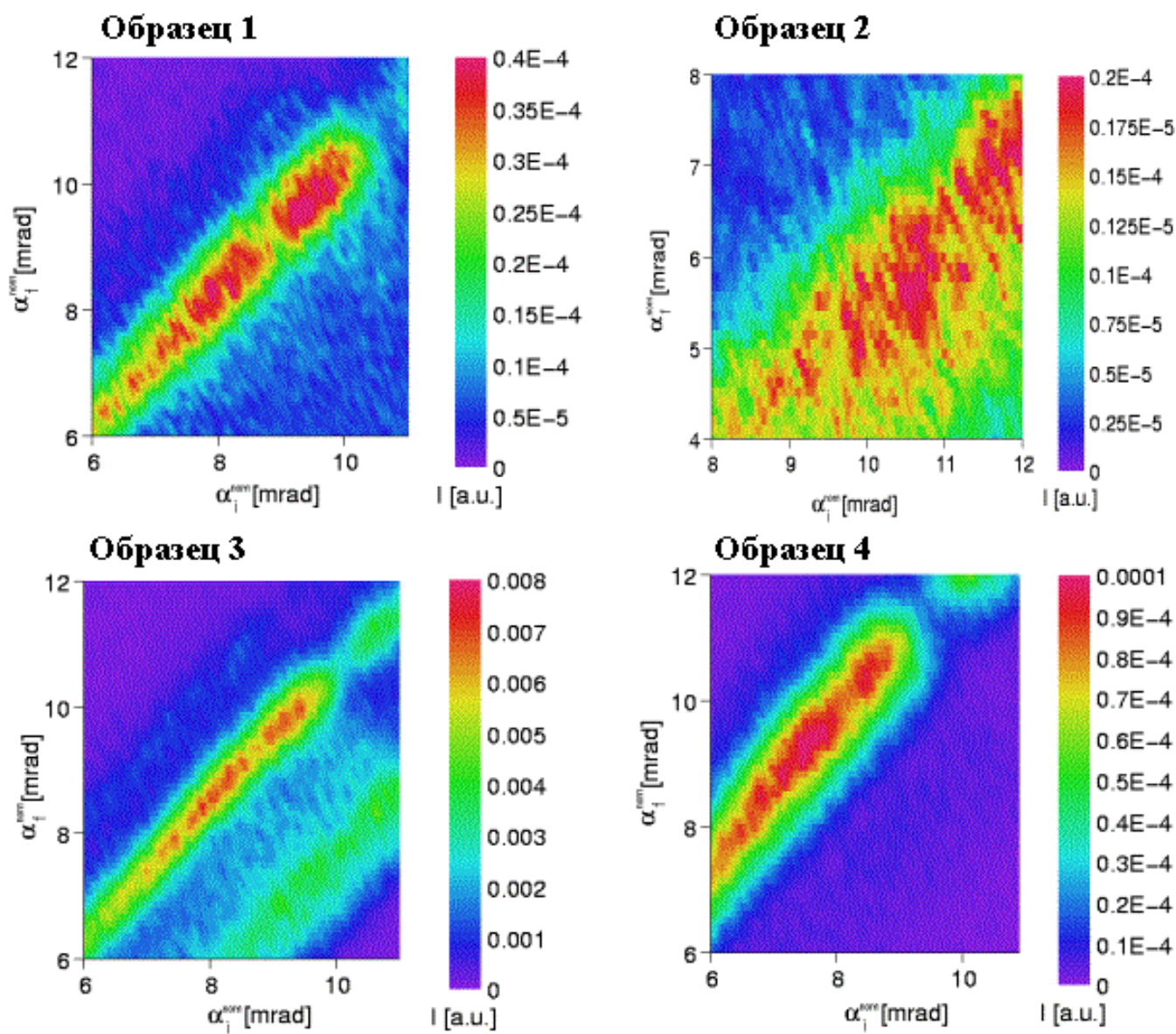


Рис. 28: Результаты измерения четырех образцов, на рефлектометре HADAS.

кального отражения, границу полного внешнего отражения и, что самое главное, провал в интенсивности (резонансное состояние). Кроме того, мы можем сделать некоторые выводы о качестве выращенных образцов. При наличии идеально плоской поверхности образца, зеркальное отражение находится на диагонали  $\alpha_f = \alpha_i$ , и как правило не широкое. Ширина и сдвиг кривой, говорят о неоднородностях и дефектах некоторых образцов.

### 15.3 Обработка данных

Мы попытаемся понять и интерпретировать данные полученные в результате эксперимента. Сделаем выводы о геометрии образцов, и постараемся объяснить все полученные результаты. И, как итог, сравним экспериментальные данные, с теоретическими расчетами.

### 15.4 Номинальные и реальные углы падения

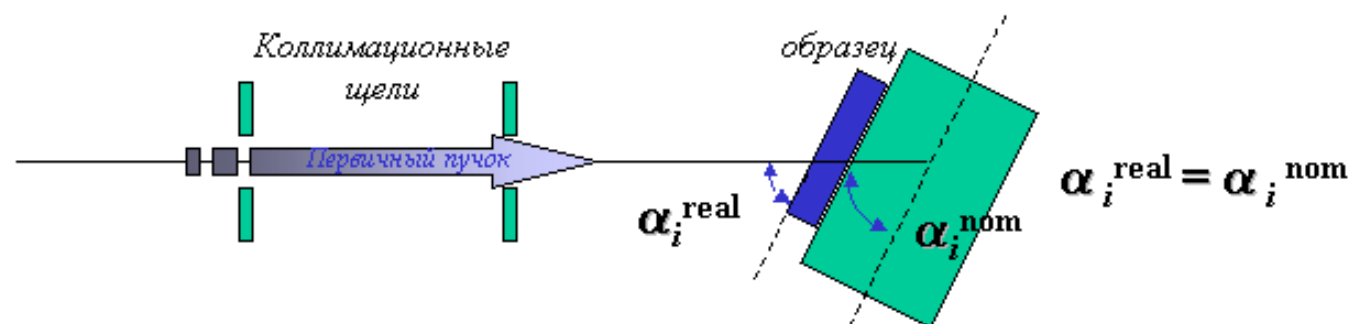
Специфика работы с рефлектометром HADAS заключается в установлении связи между номинальными и реальными величинами. Одной из важнейших характеристик является угол падения пучка. Именно от него зависят резонансные состояния нейтрона в квантовой яме. Номинальным углом падения назовем те значения углов падения, которые определяет HADAS. На практике, положением образца управляют три мотора. С их помощью образец помещается в пучок и изменяется угол его наклона в пучке.

Поэтому, все те величины, которые измеряются в процессе эксперимента, определяются положением моторов, регулирующих угол наклона образца в пучке. Как видно из рис.28 для образца №3, например, кроме кривой зеркального отражения ( $\alpha_i = \alpha_f$ ), существует подобная ей структура, но при условии  $\alpha_i \neq \alpha_f$ , что естественно, противоречит определению кривой зеркального отражения. Все это свидетельствует о том, что реальный угол падения не всегда равен номинальному и, в частности, зависит от поверхности образца. Поэтому необходимо найти связь между номинальным и реальным значением углов.

Причины искривления поверхности могут быть разными. Например, можно предположить что в процессе изготовления, некоторые из слоев оседали неравномерно, и не совсем параллельно подложки. Кроме того, возможны механические деформации образца, в процессе установки его в первичный пучок, или при извлечении из МВЕ машины. Как следствие высокого углового разрешения, мы фиксировали даже самые незначительные дефекты образцов. Несмотря на наличие такого сорта дефектов, они не мешали наблюдать ожидаемый эффект. Целью эксперимента, было изучение кривой зеркального отражения, но наряду с этим мы сделали и заключения о качестве образцов.

Более наглядно это поясняет рис.29. идеально плоского образца, параллельного плоскости подложки, номинальный угол равен реальному. Но подложка могла быть деформирована, например, могла иметь изгиб. В этом случае, номинальный угол падения не равен реальному. Этим и объясняется зона засветки образца №1, лежащая ниже кривой зеркального отражения. Она свидетельствует о том, что образец №1, будучи облучаемым пучком нейтронов падающих под номинально определенным углом падения, отражал нейтроны от изогнутой поверхности в разные углы отражения, что и фиксировал детектор. Аналогично, можно сделать неутешительный вывод о том, что образец №2 был относительно сильно изогнут, по сравнению с другими тремя образцами. Тем не менее, и для него удалось обнаружить провал в интенсивности при предсказанном угле падения.

### #1 Идеально плоский образец



### #2 Изогнутый образец

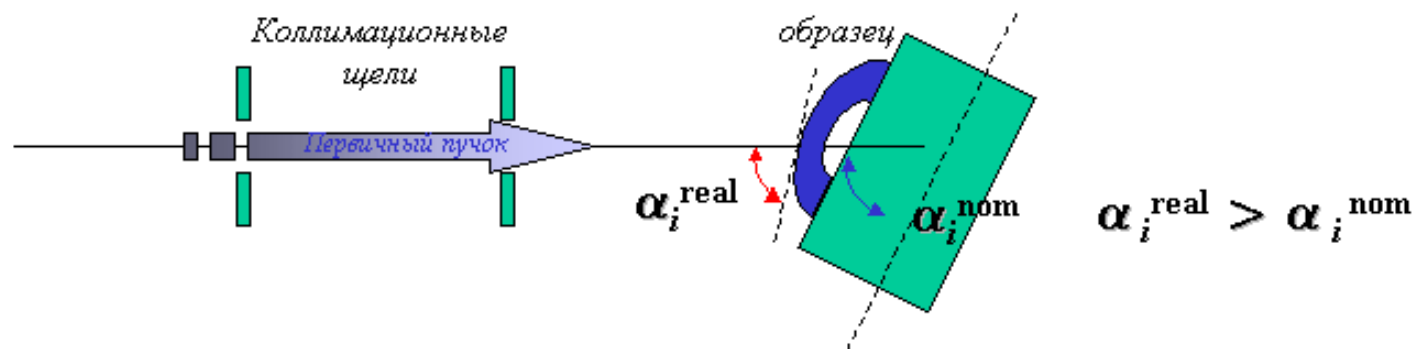


Рис. 29: Геометрия идеально плоского и изогнутого образцов.



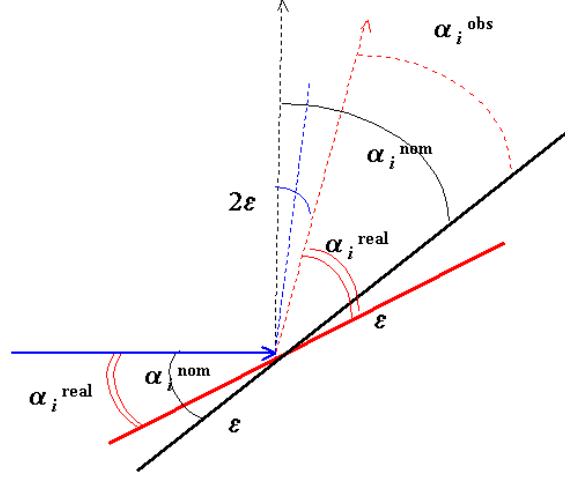


Рис. 30: Связь между реальным и номинальным углами падения.

Хочется еще раз подчеркнуть, что подобного рода артефакты относятся к дефектам образцов, и никоим образом не влияют на физику наблюдаемых явлений.

Но объяснение полученных результатов и их интерпретация, является неотъемлемой частью любого эксперимента. Кроме того установка связи, между реальными и номинальными значениями углов падения необходима для восстановления зависимости  $\Re$ , от угла падения.

Связь между реальным и номинальным углом падения может быть найдена исходя из простых геометрических соображений (рис.30). Пусть образец отличается от идеально плоской поверхности на угол  $\varepsilon$ . Тогда,

$$\alpha_i^{real} = \alpha_i^{nom} - \varepsilon \quad (94)$$

С другой стороны,

$$\alpha_f^{obs} = \alpha_i^{real} - \varepsilon. \quad (95)$$

При зеркальном отражении  $\alpha_i^{real} = \alpha_f^{real}$ , и из соотношения

$$\alpha_i^{real} + \alpha_f^{real} = 2\alpha_i^{real}, \quad (96)$$

находим

$$\alpha_i^{real} = \frac{\alpha_i^{nom} + \alpha_f^{obs}}{2} \quad (97)$$

Это выражение очень важно и понадобится нам при восстановлении зависимости  $\Re$  от реального угла падения.

Далее мы будем заменять обозначение  $\alpha_f^{obs}$  на  $\alpha_f^{nom}$ , имея ввиду, что не всегда  $\alpha_f^{nom} = \alpha_i^{nom}$ .

Как легко видеть из рис.28, образец №3 имеет две части, каждая из которых зеркально отражает нейтроны. При пересчете в реальные углы падения, можно сделать печальный вывод о том, что в процессе изготовления подложка была надломлена. Поверхность этого образца отвечает рисунку 31. Стоит отметить, что данный артефакт связан с деформацией малой части подложки, которая изломана относительно основной части. Такой вывод можно сделать исходя из того, что интенсивность отраженная от артефакта мала, а значит большинство нейтронов отразилось, именно от плоской части образца.

### 15.5 Обработка данных, для определения экспериментальной зависимости $\mathfrak{R}$ от угла падения

Для сопоставления эксперимента и теоретических расчетов, восстановим зависимость коэффициента отражения от реального угла падения.

Для этого пересчитаем все номинальные углы падения в реальные. При этом возникает существенный вопрос о том, какая интенсивность относится к реальным углам падения. Дело в том, что теоретическая интенсивность определена лишь для номинальных углов, которые не всегда равны реальным. Для того чтобы оценить, какая интенсивность приходится на реальные углы падения, воспользуемся некоторыми знаниями из области теории вероятности.

Предположим, что реальное значение угла лежит между в промежутке, между двумя значениями  $\alpha_i^{nom}$  (рис.32)

Введем вероятность  $x$  того, что угол  $\alpha^{real}$  равен углу  $\alpha_k^{nom}$

$$x = 1 - \frac{\alpha^{real} - \alpha_k^{nom}}{\alpha_{k+1}^{nom} - \alpha_k^{nom}}. \quad (98)$$

Тогда вероятность того, что угол  $\alpha^{real}$  принадлежит к углу  $\alpha_{k+1}^{nom}$ , равна  $(1-x)$ . При определенной интенсивности, для номинальных углов  $I_k(\alpha_k^{nom})$  и  $I_{k+1}(\alpha_{k+1}^{nom})$ , интенсивность при реальном угле падения будет равна

$$I(\alpha^{real}) = xI_k(\alpha_k^{nom}) + (1-x)I_{k+1}(\alpha_{k+1}^{nom}) \quad (99)$$

Для восстановления зависимости  $\mathfrak{R}$  от  $\alpha_i^{real}$  мы так же использовали условие.

$$|\alpha_f^{obs} - \alpha_i^{nom}| < 1. \quad (100)$$

Связанно это прежде всего с тем, что кривая зеркального отражения не является линией, а имеет конечную толщину.

Причиной этому служат, шероховатости границ раздела сред, которые приводят к диффузному рассеянию. Поэтому и надо собрать информацию о всей интенсивности в данном диапазоне.

Таким образом, мы можем восстановить зависимость  $\mathfrak{R}$  от реального угла падения.

### 15.6 Экспериментальная зависимость $\mathfrak{R}$ , от угла падения

Итак, воспользовавшись описанной выше процедурой, мы получили экспериментальную зависимость коэффициента отражения, от угла падения.

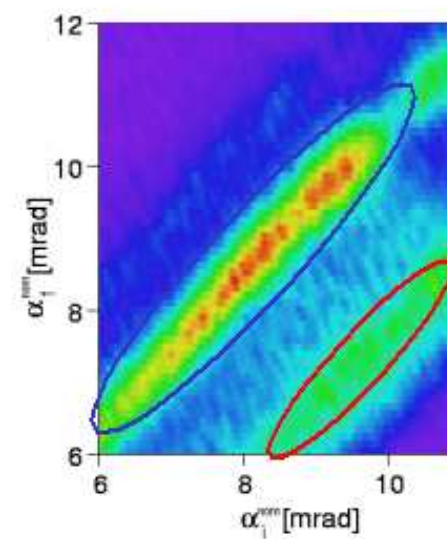
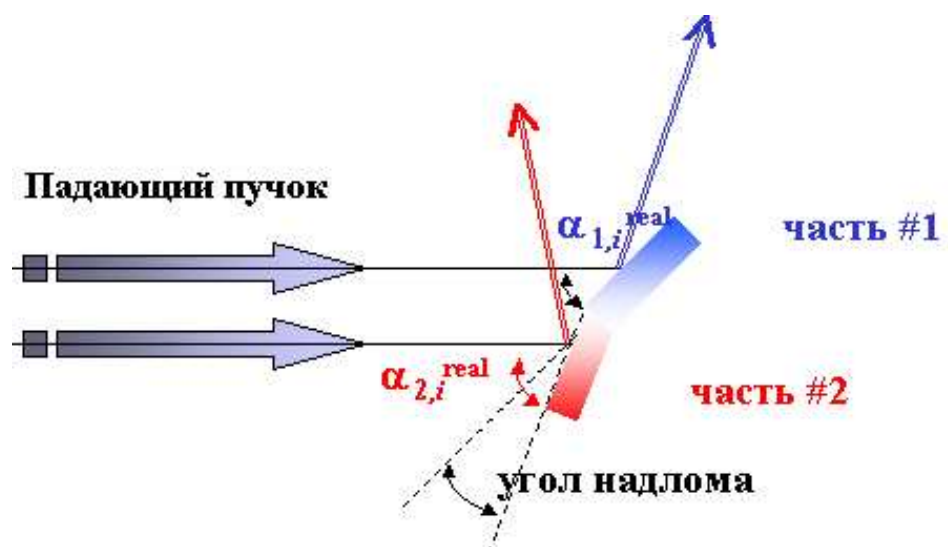


Рис. 31: Геометрия образца №3.



Рис. 32: Реальный угла падения, заключенный между двумя номинальным.

Еще раз напомним мотивацию приготовления образцов с данными параметрами. Образцы №1 и №3, имеют одинаковую толщину промежуточного слоя  $120\text{\AA}$ . Положение резонанса по условию (56) не должно зависеть от толщин первого и третьего слоев железа. Частично мы обнаружили этот эффект на цветных картах (рис.28). Численные симуляции таких цветных карт являются не тривиальными, именно поэтому так важно восстановить зависимость коэффициента отражения от угла падения. Кроме того, такие кривые позволяют явно сравнить теоретические расчеты с проведенным экспериментом. Как видно из рис.33, резонанс для образцов №1 и №3 имеет место в предсказанных теорией углах падения, и местоположение не зависит от толщины слоев железа.

Мы ввели в рассмотрение статистическую ошибку в измерении числа нейтронов приходящих из нейтронвода. Чем больше время, наблюдения тем меньше поправка в точности определения потока.

Сразу оговоримся, что не полное соответствие теоретической модели и проведенного эксперимента, выражающиеся в том, что обе кривые не совпадают выше критического порога, говорит о несоответствии номинальной и реальной толщины слоев железа. Как уже говорилось, при помощи МВЕ машины готовятся образцы с номинальной толщиной. Существуют программы, позволяющие рассчитывать реальные толщины каждого из слоев путем численных расчетов.

Как правило они используют результаты измерений во всех четырех каналах поляризации, при низких угловых разрешениях и в интервале углов падения превышающем границу полного зеркального отражения. Ограниченность во времени, не позволила провести такого рода измерения для каждого из образцов, на предмет определения точной толщины слоев в каждом из них. Анализ поведения  $R$  за порогом полного внешнего отражения, позволяет делать выводы о толщинах слоев железа.

Тем не менее, мы сознательно, пока, не стали прибегать к их использованию.

Основная идея заключалась в том, чтобы проверить, насколько точно работает "чистая" теория и как точно может она предсказать будущий эксперимент. Вследствие чувствительности положения резонанса к толщине второго слоя, мы можем аппроксимировать экспериментальные данные, и сделать вывод о реальной толщине второго слоя, не прибегая к использованию дополнительного программного обеспечения.

Это является важным аргументом, в пользу построения самодостаточной методики наблюдения резонансных состояний в магнитных наноструктурах.

Как видно, экспериментальные кривые соответствуют толщине промежуточного слоя около  $100\text{\AA}$  на рис.33.

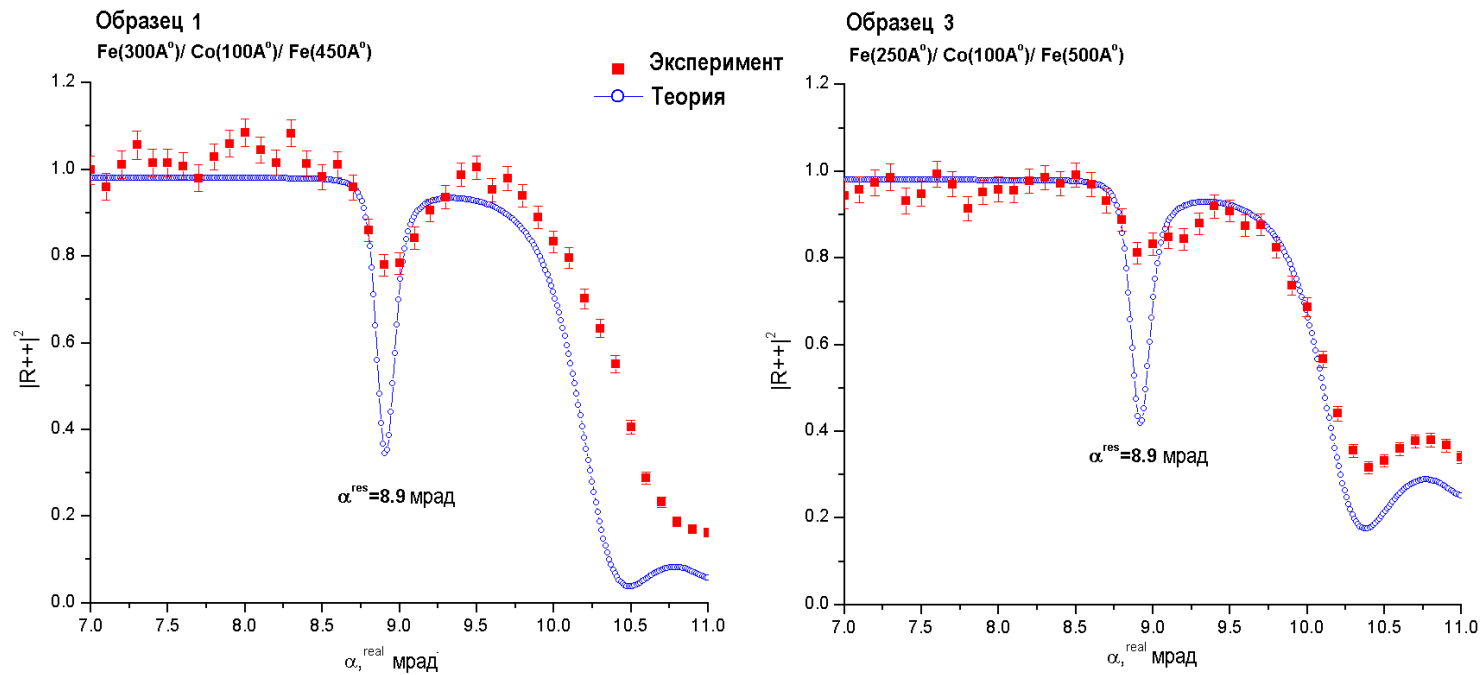


Рис. 33: Экспериментальная зависимость  $\mathfrak{R}$  от угла падения, для образцов №1 и №3.

Это соответствует допустимой ошибке при работе с МВЕ машиной. Как было показано из численных симуляций мы имеем некоторую "свободу выбора" в толщине второго слоя. Резонанс имеет место даже если реальная толщина слоя отличается на  $25\text{\AA}$  от номинальной. В этом и заключается преимущество данной методики. Нам нет необходимости точно определять толщины слоев используя дополнительные методы, достаточно использовать программы приведенные в приложениях.

Зная допустимую ошибку в толщине слоя при работе с МВЕ машиной, нам не было необходимости точно определять толщины железа. Важнейшим аспектом измерений образцов №3 и №1 являлось точность определения толщины промежуточного слоя.

Наши программы позволили определить реальные толщины слоев кобальта в обоих образцах. Тем не менее, чтобы окончательно убедиться в том, что наши расчеты соответствуют действительности, как альтернативу, мы использовали дополнительное программное обеспечение. Оно было написано специально для обработки данных рефлектометра HADAS, на предмет определения реальных толщин слоев в тонкой пленке.

Проведенная аппроксимация (рис.34) показала справедливость наших выводов о толщине промежуточного слоя в двух образцах. И позволила определить реальные толщины слоев железа в каждом из них. Можно сделать важный вывод:

теоретическая модель достаточно точно определяет положение резонансного уровня, даже без учета неоднородностей и шероховатостей слоев.

После этого мы рассчитали реальные толщины всех слоев. И, как видно из результатов аппроксимации (рис.34), промежуточные слои обоих образцов, одинаковы с погрешностью  $\pm 2\text{\AA}$ , а толщины слоев Fe отличаются от теоретически рассчитанных.

Хотя еще раз повторю, что определение реальных толщин железа, не было основной целью. Основная цель заключалась в определении реальной толщины промежуточного слоя Co.

Исходя из результатов проведенных измерений с образцами №1 и №3, мы можем сделать вывод о том, что наши численные симуляции с хорошей точностью позволяют определить толщину промежуточного слоя.

Сравнение образцов №2 и №4 имело целью доказать обратный случай, что согласно резонансному условию

$$\chi' + \varphi_2 \simeq n\pi, \quad (101)$$

положение резонанса зависит от толщины промежуточного слоя. Причем, толщины слоев железа выбирались и на этот раз разными. Образец №2 - Fe( $300\text{\AA}$ )/Co( $150\text{\AA}$ )/Fe( $450\text{\AA}$ ), образец №4 - Fe( $150\text{\AA}$ )/Co( $125\text{\AA}$ )/Fe( $500\text{\AA}$ ).

Благодаря исследованиям двух предыдущих образцов, мы можем с уверенностью сказать о том, что толщины промежуточных слоев действительно разные.

Теоретический расчет показал что и в случае этих двух образцов реальные толщины промежуточных слоев отличаются, от номинальных. Это легко видеть, даже по экспериментальным зависимостям  $\mathcal{R}$ , от угла падения. Положение резонанса меняется, он смещается в зависимости от толщины промежуточного слоя. В отличие от предыдущего случая, мы не стали точно определять толщины слоев железа. Мы знаем что реальные толщины этих слоев отличаются от номинальных, но на положение резонанса они не влияют.

Поведение кривая для образца №2 (рис.35), является следствием того что поверхность была изогнута. Именно, поэтому интенсивность рассеянного пучка не концентрировалась в области  $\alpha_i = \alpha_f$ . Но провал при предсказанном угле падения все же имеет место.

Мы специально выбрали так сильно различающиеся толщины, чтобы быть уверенными,

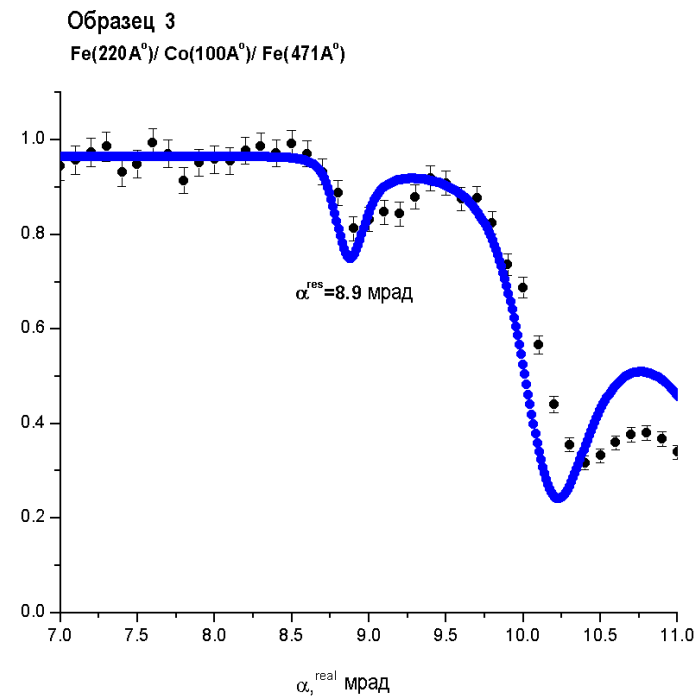
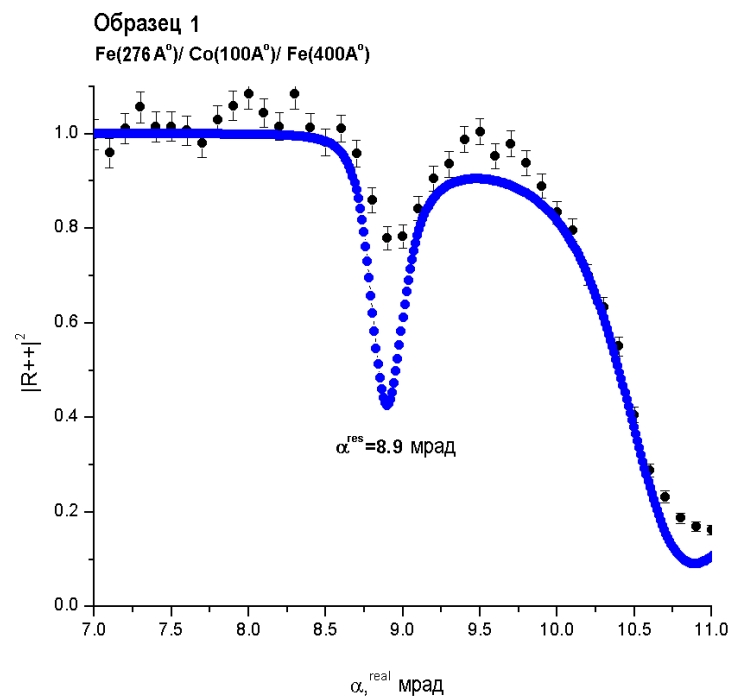


Рис. 34: Экспериментальные и расчетные кривые для образцов №1 и №3.

что слои действительно отличаются по толщинам.

Поведение теоретических и экспериментальных кривых для обоих образцов, и для реальных толщин, представлены на рис.35. Как можно видеть положение резонанса меняется.



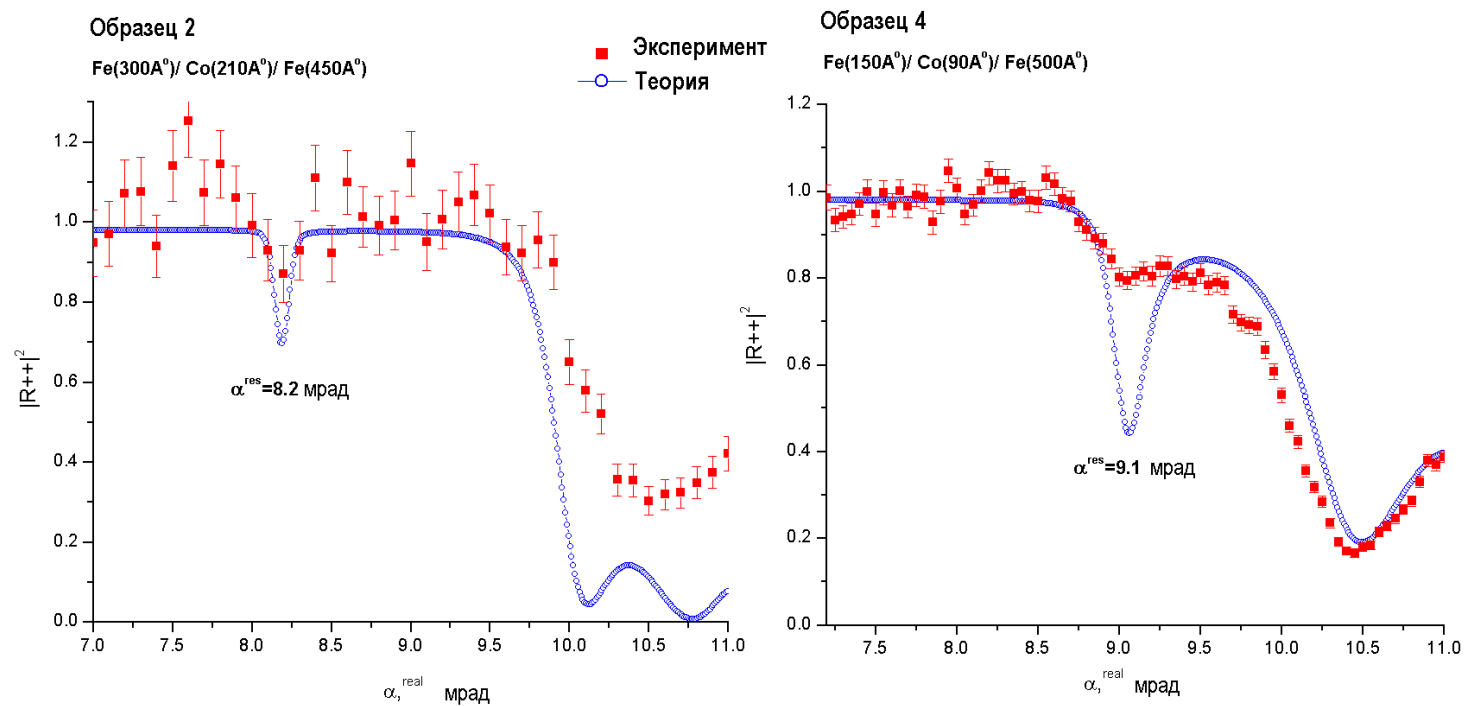


Рис. 35: Экспериментальные и теоретические зависимости  $\mathcal{R}$  от угла падения, для образцов №2 и №4.

Из анализа поведения теоретической и экспериментальной зависимостей  $\Re$  от  $\alpha_i^{real}$  можно сделать вывод о том, что описанная теоретическая модель позволяет с хорошей точностью определять положение резонанса. Кроме того, мы подтвердили резонансное условие (56).

## 16 Заключение

Итогом данной дипломной работы является теоретическое и экспериментальное изучение резонансных состояний в тонкой пленке - как одного из перспективных методов изучения магнитных наноструктур.

В теоретической части работы, были исследованы причины возникновения резонанса. Введена простая теоретическая модель, позволяющая судить о физических причинах возникновения резонанса. Описаны параметры влияющие на положение резонансного уровня. Для поведения коэффициента отражения трехслойной системы, резонансные состояния определены как провалы в область меньшую единицы, ниже порога полного внешнего отражения. Было изучено как влияют физические свойства тонкой пленки на ширину и глубину провала. Показано, что ширина такого провала зависит от поглощения в промежуточном слое. Что является мощным инструментом для изучения структуры скрытых слоев.

Выведенное резонансное условие, для трехслойной пленки позволяет делать вывод о том, что положение резонанса определяется толщиной промежуточного слоя. Рассмотрены предельные случаи резонанса. Дано определение оптимальным параметрам для экспериментального наблюдения резонансных состояний при помощи рефлектометрии. Все расчеты были проведены при насыщающем поле, когда в слоях отсутствует доменная структура.

Численные симуляции, явились необходимым шагом от описания теоретической модели, до проведения эксперимента. Они подтвердили теоретические расчеты и позволили найти оптимальные значения толщин трехслойной пленки, для наблюдения резонанса на кривой  $\mathcal{R}$ , в зависимости от угла падения. Резонансное состояние было численно исследовано и в зависимости от поглощения в промежуточном слое. Кроме того, они показали насколько чувствительны резонансные состояния к толщинам слоев.

В качестве образцов были выбраны трехслойные пленки Fe/Co/Fe, а в качестве метода их изготовления молекулярно-лучевая эпитаксия. Выбор этого метода диктуется тем, что на сегодняшний день молекулярно-лучевая эпитаксия является одним из наиболее удачных способов приготовления тонких слоистых структур. Кроме того, на экспериментальной базе НИЦ г.Юлиха, накоплен огромный опыт в приготовлении таких пленок.

Важнейшим и завершающим этапом этой работы, стало проведение эксперимента на рефлектометре HADAS, с выращенными образцами. Эксперименты с поляризованными нейтронами подтвердили наличие резонанса.

Было измерено распределение интенсивности рассеянного пучка как функция угла падения и отражения. Удалось обнаружить для каждого из образцов кривую зеркального отражения, и границу полного внешнего отражения. По ширине и интенсивности кривой зеркального отражения можно сделать вывод о геометрии образца. Например, данные полученных при измерении образца №3, после предварительной обработки позволяют говорить о том, что образец не идеально плоский, а имеет надлом подложки. Интерпретация полученных в ходе эксперимента данных, позволила восстановить экспериментальную зависимость  $\mathcal{R}$  от угла падения нейтронного пучка, и провести сравнительный анализ с теоретической зависимостью. Резонанс действительно имел место при предсказанных теорией значениях угла падения. Тем самым, подтвердился тот факт, что несмотря на простоту описанной модели, она позволяет с хорошей точностью предсказывать возникновение резонансных состояний нейтрона в магнитных наноструктурах.

Эксперимент подтвердил тот факт, что положение резонанса зависит от толщины проме-

жужельного слоя, и что оно не чувствительно к толщине слоев железа.

Сравнение и аппроксимация теоретической кривой  $\chi$  с экспериментальной, привело нас к выводу о том, что в реальности толщины слоев отличаются от тех которые мы хотели приготовить.

Главным итогом проведенной работы стало построение методики наблюдения резонансных состояний в магнитных наноструктурах. Важность построение этой методики, объясняется применением резонансных состояний нейтрона как одного из перспективных методов исследования магнитных наноструктур.

Все расчеты и эксперименты были проведены в насыщающем поле, когда в слоях не возникало доменов. При возникновении доменов средний потенциал пленки будет меняться, а значит будут меняться параметры потенциальной ямы, в которой возникают связанные состояния нейтрона.

А это значит, что и положение, и ширина резонансного уровня будет меняться. Все эти изменения мы теперь можем фиксировать на рефлектометре, и интерпретировать полученные данные. А благодаря тому что физическая причина возникновения резонанса и параметры от которых он зависит исследованы, мы можем делать выводы о физических свойствах магнитных наноструктур.

## **17 Благодарности**

Кроме моих научных руководителей, я бы хотел сердечно поблагодарить всех тех людей, благодаря которым, стало возможным написание этого диплома - A.Ioffe, E.Kentzinger и Th.Brückel.

## Список литературы

- [1] A.A.Seregin, Zh.Eksp.Teor.Fiz.73(1977)1634
- [2] K.A.Steinhauser, Phys.Rev.Lett.44(1980)1306
- [3] Ю.А.Изюмов, Р.П.Озеров, Магнитная нейтронография, Наука, 1966
- [4] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика, Москва, 1959
- [5] Y.Yoneda, Phys.Rev.131(1963)2010
- [6] S.Logothetidis, Y.Panayiotatos, C.Gravalidis, P.Patsalas, A.Zoy, Materials Science and Engineering B (2003)1
- [7] L.J.Norton et al.,J.Phys.2 France 4(1994)397
- [8] Y.P.Feng, S.K.Shina, E.E.Fullerton, G.Grüber, D.Abernathy, D.P.Siddons and J.B.Hastings, Appl.Phys.Lett.67(1995)3647
- [9] F.Pfeiffer, V.Leiner, P.Hoghoj and I.Anderson, Phys.Rev.Lett.88(2002)055507
- [10] H.Zhang, P.D.Gallagher, S.K.Satija,R.M.Lindstorm, R.L.Paul,T.P.Russell, P.Lambooy and E.J.Kramer, Phys.Rev.Lett.72(1994)3044
- [11] B.P.Toperverg, "Polarized Neutron Reflection and Off-Specular Scattering" in Polarized Neutron Scattering, Forschungszentrum Jülich, Series "Mater and Materials", Vol.12 (2002)
- [12] B.P.Toperverg, Physica B 297(2001)160
- [13] В.Г.Казаков, Соросовский образовательный журнал №1 (1997)107
- [14] U.Rücker, Schichtsysteme aus ferromagnetischen Mettalen und magnetischen Halbleitern, Diplomarbeit, Universität Köln, FZ Jülich (1994)
- [15] U.Rücker, W.Bergs,B.Alefeld,E.Kentzinger,Th.Brückel, Physica B 297 (2001)140
- [16] U.Rücker, W.Bergs,B.Alefeld,E.Kentzinger,Th.Brückel, Physica B 276-278 (2000)95

## 18 Приложение А

Программа рассчитывает  $r_n$   $t_n$ , для произвольного числа слоев. Для процессов с переворотом спина, и без рассчитывается  $\mathcal{R}$ .

Входной файл Res.dat

0.0 Pix incident polarization  
(polariser)

-0.96 Piy

0.0 Piz

0.0 Pix outgoing polarization (analyser)

1.0 Piy

0.0 Piz

4.53 wavelength (in Angstroem)

8.0 min. angle of incidence (in mrad)

9.0 max. angle of incidence (in mrad)

400 number of points in  $\alpha_{hi}$  and  $\alpha_{lo}$

3 number of layers (excluding substrate)

300.0 thickness in (A) | Fe 8.09 real part of nuclear SLD Nb' (in  $A^{*-2}$ ) \*1e6

5.5d-4 imaginary part of nuclear SLD Nb'' (in  $A^{*-2}$ ) \*1e6

4.98 magnetic SLD Np (in  $A^{*-2}$ ) \*1e6

0.0  $\delta\alpha_{hi}$  [deg.] (0 on y, 90 on x)

150 thickness in (A) | Co

2.30 nucl. SLD Nb'

8.85d0 nucl. SLD Nb''

4.24 magn. SLD

0.0  $\delta\alpha_{hi}$

450.0 thickness | Fe

8.09 real part of nuclear SLD Nb'

5.5d-4 SLD Nb'' nuclear

4.98 SLD Nb magnetic

0.0  $\delta\alpha_{hi}$

2.15 substrate's real part of nuclear SLD Nb' (in  $A^{*-2}$ ) \*1e6 | Si

1.44d-5 substrate's Nb'' imaginary part of nuclear SLD Nb'' (in  $A^{*-2}$ ) \*1e6

0.0 magnetic scattering length density Np (in  $A^{*-2}$ ) \*1e6

0.0  $\delta\alpha_{hi}$  [deg.] (0 on y, 90 on x)

Остальные программы симуляций, были написаны на основе нижеследующей.

Program resscat

implicit none

integer maxlay, maxalpha

```

parameter(maxlay=50,maxalpha=600)
integer i,j,k,l,nn,nlay,n0,ji,jf,i1,i2,ch,sd
real*8 rpi,lambdai,alphaimin,alphaimax,alphafmin,alphafmax,d(maxlay)
real*8 alphai(maxalpha),dalphai,alphaf(maxalpha),dalphaf
real*8 nbr(maxlay+1),nbi(maxlay+1),np(maxlay+1)
real*8 deltaphi(maxlay+1),poli(3),polf(3)
real*8 csi,c(maxlay+1),s(maxlay+1),cg,cg2,sg2,gamma,s0,c0,eta,bgr
real*8 poi,pof,refl(2,2,maxalpha)
real*8 qy,qz,In,fpara,delta
complex*16 ci
complex*16 nb(maxlay+1,2),pc2(maxlay+1,2)
complex*16 nb0(maxlay+1,2),pc20(maxlay+1,2)
complex*16 pi(maxlay+1,2,maxalpha),pf(maxlay+1,2,maxalpha)
complex*16 pi0(maxlay+1,2,maxalpha),pf0(maxlay+1,2,maxalpha)
complex*16 phii(0:maxlay+1,2,maxalpha)
complex*16 phii0(0:maxlay+1,2,maxalpha)
complex*16 phif(0:maxlay+1,2,maxalpha)
complex*16 phif0(0:maxlay+1,2,maxalpha)
complex*16 pi0(maxalpha),pi02(maxalpha)
complex*16 pf0(maxalpha),pf02(maxalpha)
complex*16 A(0:maxlay,2),B(0:maxlay,2)

complex*16 R(0:maxlay+1,2,maxalpha)

complex*16 ri(maxlay+1,2,maxalpha),ti(0:maxlay+1,2,maxalpha)
complex*16 rf(maxlay+1,2,maxalpha),tf(0:maxlay+1,2,maxalpha)
! complex*16 tti(maxlay+1,2,maxalpha),ttf(maxlay+1,2,maxalpha)
complex*16 cc(maxlay,2,2),ss(maxlay,2,2),gg(maxlay,2,2)
complex*16 fxp(maxlay,maxlay),fyp(maxlay,maxlay)
complex*16 fxm(maxlay,maxlay),fym(maxlay,maxlay)
complex*16 fperp
open(unit=333,file='ch.dat',type='replace')
rpi=dacos(-1.0d0)
ci=dcmplx(0.0d0,1.0d0)

! *** READ INPUT FILE ***
open(5,file='RES.ent')
read(5,*)poli(1)
read(5,*)poli(2)
read(5,*)poli(3)
write(6,300)'Incident polarization: ',(poli(i),i=1,3)
read(5,*)
write(6,*)
read(5,*)polf(1)
read(5,*)polf(2)
read(5,*)polf(3)
write(6,300)'Outgoing polarization: ',(polf(i),i=1,3)

```



```

read(5,*)
write(6,*)
read(5,*)lambda
write(6,200)'wavelength', lambda
read(5,*)alphaimin
write(6,200)'min. angle of incidence (in mrad)=',alphaimin
alphaimin=alphaimin/1000.d0
read(5,*)alphaimax
write(6,200)'max. angle of incidence (in mrad)=',alphaimax
alphaimax=alphaimax/1000.d0
read(5,*)alphafmin
write(6,200)'min. angle of exit (in mrad)=',alphafmin
alphafmin=alphafmin/1000.d0
read(5,*)alphafmax
write(6,200)'max. angle of exit (in mrad)=',alphafmax
alphafmax=alphafmax/1000.d0
read(5,*)nn
write(6,*)'number of points in alphai and alphaf=',nn
if (nn.gt.maxalpha) stop 'nn > maxalpha'
read(5,*)
write(6,*)
read(5,*)nlay
write(6,*)'number of layers (excluding substrate)=',nlay
if (nlay.gt.maxlay) stop 'nlay > maxlay'
do i=1,nlay
read(5,*)
write(6,*)
write(6,*)'layer',i
read(5,*)d(i)

write(6,200)'thickness (in A)=',d(i)
read(5,*)nbr(i)
write(6,200)'real(Nb) (in A**-2)*1e6 = ',nbr(i)
nbr(i)=nbr(i)*1d-6
read(5,*)nbi(i)
write(6,200)'im(Nb) (in A**-2)*1e6 = ',nbi(i)
nbi(i)=nbi(i)*1d-6
read(5,*)np(i)
write(6,200)'Np (in A**-2)*1e6 = ',np(i)
np(i)=np(i)*1d-6
read(5,*)deltaphi
write(6,200)'deltaphi=',deltaphi
deltaphi=deltaphi*rpi/180.d0
enddo
read(5,*)
write(6,*)
write(6,*)'substrate'

```

```

read(5,*)nbr(nlay+1)
write(6,200)'real(Nb) (in A**-2)*1e6 = ',nbr(nlay+1)
nbr(nlay+1)=nbr(nlay+1)*1d-6
read(5,*)nbi(nlay+1)
write(6,200)'im(Nb) (in A**-2)*1e6 = ',nbi(nlay+1)
nbi(nlay+1)=nbi(nlay+1)*1d-6
read(5,*)np(nlay+1)
np(nlay+1)=np(nlay+1)*1d-6
write(6,200)'Np (in A**-2)*1e6 = ',np(nlay+1)
read(5,*)deltaphi(nlay+1)
write(6,200)'deltaphi=',deltaphi(nlay+1)
deltaphi(nlay+1)=deltaphi(nlay+1)*rpi/180.d0
read(5,*)
write(6,*)
read(5,*)csi
close(5)

cg=dcos(gamma)
cg2=cg**2
sg2=dsin(gamma)**2

! *** CALCULATE TOTAL SCATTERING LENGTH DENSITIES AND CRITICAL
VALUES*** ! *** FOR EACH LAYER, INCLUDING THE SUBSTRATE ***
do i=1,nlay+1
c(i)=dcos(deltaphi) nb(i,1)=dcmplx(nbr(i),0.d0)-dcmplx(0.d0,nbi(i))+dcmplx(np(i)*c(i),0.d0)

nb(i,2)=dcmplx(nbr(i),0.d0)-dcmplx(0.d0,nbi(i))-dcmplx(np(i)*c(i),0.d0)

do j=1,2
pc2(i,j)=dcmplx(4.d0*rpi,0.d0)*nb(i,j)

enddo
enddo

open(unit=1,file='refli.dat',type='replace')
open(unit=2,file='mytype.out',type='replace')
write(1,501)'alpha[mrad]', ' R++ ', 'R+1', ' R-+ ', ' R+- ', ' R- '

dalphai=(alphaimax-alphaimin)/real(nn-1)
! *** START ITERATION FOR DIFFERENT ALPHAIS ***

do k=1,nn

alphai(k)=alphaimin+(k-1)*dalphai

! *** CALCULATE INCIDENT AND OUTGOING WAVENUMBERS PIO ***
pi0(k)=dcmplx((2.d0*rpi*dsin(alphai(k))/lambda),0.d0)

```

```

pi02(k)=pi0(k)*pi0(k)

! *** SPIN UP (+): j=1/ SPIN DOWN(-): j=2 ***
do j=1,2

! *** CALCULATE WAVEVECTOR INSIDE LAYERS ***

do i=1,nlay+1

pi(i,j,k)=cdsqrt(pi02(k)-pc2(i,j))
pi0(i,j,k)=cdsqrt(pi02(k)-pc20(i,j))
phii(i,j,k)=pi(i,j,k)*dcmlpx(d(i),0.d0)

enddo

phii(1,j,k)=pi(1,j,k)*dcmlpx(d(1)+100,0.d0)

phii(0,j,k)=dcmlpx(0.d0,0.d0)
phii0(0,j,k)=dcmlpx(0.d0,0.d0)

! *** CALCULATE AMPLITUDES "A" AND "B" ***
do i=1,nlay A(i,j)=(dcmlpx(1.d0,0.d0)-(pi(i+1,j,k)/pi(i,j,k)))

B(i,j)=(dcmlpx(1.d0,0.d0)+(pi(i+1,j,k)/pi(i,j,k)))

enddo
A(0,j)=(dcmlpx(1.d0,0.d0)-(pi(1,j,k)/pi0(k)))

B(0,j)=(dcmlpx(1.d0,0.d0)+(pi(1,j,k)/pi0(k)))

! *** RECURSION CALCULATION OF REFLECTANCES "R" ***
R(nlay+1,j,k)=(0.d0,0.d0)

R(nlay,j,k)=cdexp(dcmlpx(2.d0,0.d0)*ci*phii(nlay,j,k))*A(nlay,j)/B(nlay,j)

do i=nlay-1,0,-1
R(i,j,k)=cdexp(dcmlpx(2.d0,0.d0)*ci*phii(i,j,k))*(A(i,j)+(B(i,j)*R(i+1,j,k)))/(B(i,j)+(A(i,j)*R(i+1,j,k)))

enddo enddo !*** END OF ITERATION OF j, SPIN UP/DOWN **

! *** CALCULATE REFLECTIVITIES ASSUMING ANGLE GAMMA BETWEEN
FIELD AND ! *** MEAN MAGNETIZATION ***
do ji=1,2
do jf=1,2
poi=((-1)**(ji-1))*dabs(poli(2))
pof=((-1)**(jf-1))*dabs(pol(2))
refl(ji,jf,k)=0.25d0*((cdabs(R(0,1,k))**2)*(1.0d0+cg*(poi+pof)+cg2*poi*pof)+(cdabs(R(0,2,k))**2)*(1.0d0-

```

```

cg*(poi+pof)+cg2*poi*pof)+(2.d0*dreal(dconjg(R(0,1,k))*R(0,2,k))*sg2*poi*pof) )
! enddo
enddo

write(1,500)alpha(k)*1000.d0,refl(1,1,k),refl(1,2,k),refl(2,1,k),refl(2,2,k)

! *** RECURSION FOR AMPLITUDES ***
do sd=1,2
ti(0,sd,k)=dcmplx(1.d0,0.d0)
do i=1,nlay
ti(i,sd,k)=dcmplx(2.d0,0.d0)*ti(i-1,sd,k)*cdexp(ci*phii(i-1,sd,k))/(B(i-1,sd)+A(i-1,sd)*R(i,sd,k))
ri(i,sd,k)=ti(i,sd,k)*R(i,sd,k)

enddo

enddo

enddo !*** END OF ITERATION OF k, ALPHA ***

enddo
close(1)
close (2)

300 format(a35,3f15.5)
400 format(2f10.5,2f25.20)
500 format(5d16.8)

end
В выходном файле "refli.out" содержится  $\Re$  для всех каналов поляризации, в зависимости
угла падения.

```

## 19 Приложение Б

Данная программа позволяет рассчитывать реальные углы падения, и интенсивность при этих углах.

Входной содержит номинальные углы падения и отражения, с соответствующими интенсивностями.

Результатом программы, является расчет  $\Re$ , в зависимости от реальных углов падения.

```
program real angles
! for sample23 and sample23u
! parameter m=10919

! for sample22a
parameter m=28819

! for sample22
! parameter m=26492
! for sample125

! parameter m=23807

! for sample34
! parameter m=25060

! for sample42
! parameter m=28819

! for sample124
! parameter m=25060

! for sample111
! parameter m=11277

integer i,s,j,f,r,b,p

parameter n=400

parameter alphamax = 20.0d0

! parameter alphamin=5.d0
real*8 alphai,alphaf,alphareal,Intensity, Error
real*8 realintensity(0:m), realerrorsquare(0:m), alphastep, x

open(unit=10,file='debug sample22ax.dat')
open(unit=20,file='debug sample22ay.dat')
open(unit=30,file='debug sample22az.dat')
open(unit=40,file='debug sample22aerrz.dat')
```

```

open(unit=55,file='debug sample2a.dat',type='replace')

! alphas(k)=alphamin+(k-1)*dalpha

do i=0,n
realintensity(i)=0.0d0
realerrorsquare(i)=0.0d0
enddo

alphastep =alphamax/n

! alphastep =(alphamax-alphamin)/real(n-1)

do i=1,m
read(10,*)alpha
read(20,*)alpha_f
read(30,*)Intensity
read(40,*)Error

if (abs((alpha-alpha_f)).le.2) then

alphareal=(alpha+alpha_f)/2

j=abs(int(alphareal/alphastep))
! write(*,*)j
x = 1.0-(alphareal - j*alphastep)/alphastep

realintensity (j)=realintensity(j) + x * Intensity
realerrorsquare (j) = realerrorsquare(j) + x*x * error * error

realintensity (j+1) = realintensity(j+1) + (1.0-x) * Intensity
realerrorsquare (j+1) = realerrorsquare(j+1) + (1.0-x) * (1.0-x) * error * error
endif
enddo
close (10)
close (20)
close (30)
close (40)

do s=0,n

write (55,500) s*alphastep, realintensity(s) / s, dsqrt (realerrorsquare(s))/s

enddo
close (55)

500 format(5d16.7)

```

```
501 format(1e16.3)
507 format(5d16.7,i3)

end
```