

01; 05

## ДИФРАКЦИЯ НЕЙТРОНОВ В НЕИДЕАЛЬНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ

И. Ю. Голиней, В. Н. Рудько

Разработан метод расчета коэффициентов отражения и пропускания идеальных многослойных структур, используемых в качестве нейтронных монохроматоров-поляризаторов. Метод, применимый как для непоглощающих, так и поглощающих сред, позволяет учесть разброс толщин отдельных слоев и является точным для величины, обратной коэффициенту пропускания МС. Показано, что увеличение степени неидеальности МС приводит к замыканию минимумов на зависимости коэффициента отражения  $R$ , соответствующих зонам проводимости нейтронов в идеальной МС, от нормальной составляющей импульса нейтрона  $\chi$ . Амплитуда осцилляций в зависимости  $R(\chi)$  прямо связана с величиной разброса толщин слоев и может служить для ее определения.

### Введение

В последние годы появилось значительное число работ, посвященных исследованию рассеяния нейтронов многослойными структурами (МС), состоящими из чередующихся слоев двух различных веществ [1-13]. Обычная величина периода таких структур  $d \sim 10-100$  нм соответствует длинам волн ультрахолодных нейтронов. Это позволяет использовать МС для монохроматизации и поляризации тепловых нейтронов при их малоугловой дифракции. На сегодняшний день изготовлены и исследованы нейтронные монохроматоры и поляризаторы на основе различных пар материалов: Mn/Ge, Fe/Ge, Ni/Ti, Fe-Ni/V, Fe/Ag и др. [2-4, 6, 10-13]. Такие монохроматоры-поляризаторы обладают рядом уникальных свойств. В частности, наряду с большой величиной коэффициента отражения в основном брэгговском рефлексе коэффициент отражения в пиках высших порядков ослаблен более чем на два порядка, а степень поляризации пучка нейтронов, отраженных от МС из Fe/Ge или Fe/Ag, достигала в области основного брэгговского пика значения 0.99.

Теоретический анализ дифракции нейтронов в идеальной МС дан в [4, 7-9]. Для интерпретации экспериментальных данных в [4] использовалась стандартная динамическая теория рассеяния, в основе которой лежит предположение о малости безразмерной амплитуды рассеяния бислоем  $|F| \ll 1$ . Однако для МС с пленками толщиной  $\sim 10$  нм  $|F| \sim 1$ . При анализе в [7] упущен вклад процесса интерференции, приводящей к возникновению зон проводимости нейтронов в МС. Этот вклад, однако, составляет существенную часть интенсивности отраженных от МС нейтронов [13]. Последовательная динамическая теория дифракции нейтронов в МС, основанная на точных уравнениях многократного рассеяния, развита в [8, 9]. При этом точный результат для коэффициента отражения  $R$  был получен лишь для идеальной МС, в которой отсутствует разброс толщин слоев. Попытки учета влияния разброса толщин слоев на коэффициент отражения нейтронов предпринимались в ряде работ [1, 5, 8, 12]. Основная трудность здесь связана с тем, что фаза волновой функции нейтрона в отдельном слое зависит от толщины всех предшествующих слоев (считая от лицевой грани). В [1, 5] на основе численных расчетов проводилось усреднение по небольшой выборке случайных наборов толщин. В [8] проблема была сведена

к решению сложной алгебраической системы  $N$  уравнений ( $N$  — число слоев) относительно значений когерентных эффективных волн на границах бислоев. В [12] для объяснения экспериментальных результатов использовалась двумерно-мозаичная модель МС [14], в которой толщины слоев отличаются от своих средних значений как от слоя к слою поперек структуры, так и в плоскости самих слоев. При этом в расчетах использовался некий «эффективный потенциал» МС, параметры которого искались с помощью метода Монте—Карло.

Таким образом, до сих пор не существует точного решения задачи рассеяния нейтронов на неидеальной МС. В настоящей работе использован матричный метод, позволяющий точно провести усреднение величины, обратной коэффициенту прохождения  $T$  многослойной структуры, и получить хорошую оценку для коэффициента отражения  $R$  неидеальной МС. Предложенный метод позволяет достаточно просто выполнить усреднение  $1/T$  как по распределению начальных импульсов нейтронов (из-за угловой расходимости пучка), так и по разбросу толщин слоев. Показано, что увеличение неидеальности МС приводит в первую очередь к замыканию минимумов кривой зависимости коэффициента отражения от нормальной составляющей импульса нейтрона  $x$ , соответствующих зонам проводимости нейтронов в идеальной МС. Причем амплитуда осцилляций в зависимости  $R$  от  $x$  прямо связана с величиной разброса толщин слоев и может служить для ее определения.

### Основные соотношения

Рассмотрим МС, состоящую из  $N$  слоев. Слои будем нумеровать индексом  $j=1, 2, \dots, N$ , начиная с лицевой грани МС. Пусть толщина и эффективный потенциал  $j$ -го слоя равны  $d_j$  и  $U_j$  соответственно. Пусть также  $a_j$  и  $b_j$  — коэффициенты, характеризующие волновую функцию нейтрона в  $j$ -м слое, так что на левой грани  $j$ -го слоя волновая функция равна  $a_j + b_j$ , а на правой —  $a_j e^{ik_j d_j} + b_j e^{-ik_j d_j}$ , где  $k_j = \sqrt{x^2 - 2mU_j/\hbar^2}$ . Тогда из условия непрерывности волновой функции и ее производной получаем

$$\hat{\phi}_j = \hat{S}_j \hat{Q}_{j+1} \hat{\phi}_{j+1}, \quad (1)$$

где введены обозначения

$$\hat{\phi}_j = \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix},$$

$$\hat{S}_j = \begin{pmatrix} e^{-ik_j d_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_j d_j} \end{pmatrix},$$

$$\hat{Q}_{j+1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{k_{j+1}}{k_j} & 1 - \frac{k_{j+1}}{k_j} \\ 1 - \frac{k_{j+1}}{k_j} & 1 + \frac{k_{j+1}}{k_j} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Пусть амплитуда падающей на МС волны равна 1, отраженной —  $A$ , прошедшей —  $B$ . Тогда, очевидно, можно записать

$$\hat{\phi}_1 = B \prod_{j=1}^N \hat{S}_j \hat{Q}_{j+1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

а из условия сшивки на лицевой грани МС имеем

$$\begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix} = B \hat{Q}_1 \prod_{j=1}^N \hat{S}_j \hat{Q}_{j+1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где  $\hat{Q}_1$  получается из (2) при  $j=0$ , если под  $k_0$  понимать  $x$ .

Умножив обе части уравнения (4) слева на матрицу  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ , получаем следующее выражение:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{Q}_1 \prod_{j=1}^N \hat{S}_j \hat{Q}_{j+1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Домножая далее обе части выражения (5) на сопряженные матрицы, находим

$$\frac{1}{|B|^2} = (1 \ 0) \prod_{j=N}^1 \hat{Q}_{j+1}^+ \hat{S}_j^+ \hat{Q}_1^+ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{Q}_1 \prod_{j=1}^N \hat{S}_j \hat{Q}_{j+1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Последнее выражение есть не что иное, как  $1/T$ . Аналогичным образом нетрудно получить формулу и для коэффициента отражения  $MC$

$$R = T (1 \ 0) \prod_{j=N}^1 \hat{Q}_{j+1}^+ \hat{S}_j^+ \hat{Q}_1^+ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \hat{Q}_1 \prod_{j=1}^N \hat{S}_j \hat{Q}_{j+1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Однако последняя формула менее удобна для усреднения по толщинам слоев, чем выражение (6). Для того чтобы убедиться в этом, заметим, что от толщины  $j$ -го слоя зависят лишь матрицы  $\hat{S}_j^+$  и  $\hat{S}_j$ , и рассмотрим среднее значение следующего выражения:  $\langle \hat{S}_j^+ \hat{\Lambda} \hat{S}_j \rangle_{d_j}$ , где  $\langle \dots \rangle_{d_j}$  означает величину, усредненную по распределению толщин  $j$ -го слоя (с любой необходимой функцией распределения), а  $\hat{\Lambda} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$  — некоторая матрица, элементы которой не зависят от  $d_j$ . Имеем

$$\langle \hat{S}_j^+ \hat{\Lambda} \hat{S}_j \rangle_{d_j} = \begin{pmatrix} \alpha \langle e^{2i \operatorname{Im} k_j d_j} \rangle_{d_j} & \beta \langle e^{2i \operatorname{Re} k_j d_j} \rangle_{d_j} \\ \gamma \langle e^{-2i \operatorname{Re} k_j d_j} \rangle_{d_j} & \delta \langle e^{-2i \operatorname{Im} k_j d_j} \rangle_{d_j} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Теперь становится ясным, что среднее значение величины  $\langle 1/T \rangle_{d_1, d_2, \dots, d_N}$  легко получить, начиная усреднение выражения (6) «с центра». Сначала вычисляется  $\hat{\Lambda}_1 = \langle \hat{S}_1^+ \hat{Q}_1^+ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{Q}_1 \hat{S}_1 \rangle_{d_1}$ , затем, используя формулу (8),  $\hat{\Lambda}_2 = \langle \hat{S}_2^+ \hat{Q}_2^+ \hat{\Lambda}_1 \hat{Q}_2 \hat{S}_2 \rangle_{d_2}$  и т. д. вплоть до  $\hat{\Lambda}_N = \langle \hat{S}_N^+ \hat{Q}_N^+ \hat{\Lambda}_{N-1} \hat{Q}_N \hat{S}_N \rangle_{d_N}$  и

$$\left\langle \frac{1}{T} \right\rangle_{d_1, d_2, \dots, d_N} = (1 \ 0) \hat{Q}_{N+1}^+ \hat{\Lambda}_N \hat{Q}_{N+1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

### Обсуждение результатов

Описанная выше процедура удобна для вычислений. Величина  $\langle 1/T \rangle_{d_1, d_2, \dots, d_N}$  вычисляется точно. Нами был проведен расчет соответствующего спектра для  $MC$  на основе пары  $Mn/Ge$ . Для сравнения результатов расчета с экспериментальными данными мы оценили величину коэффициента отражения  $R$  как

$$R = 1 - \left\langle \frac{1}{T} \right\rangle_{d_1, d_2, \dots, d_N}^{-1}. \quad (10)$$

Данная формула при отсутствии поглощения дает хорошее приближение для коэффициента отражения. Это связано, на наш взгляд, со следующими обстоятельствами. Для реально используемых  $MC$   $N \sim 20$ , и в тех областях, где проявляется тонкая структура зависимости  $R$  от  $x$ , величина коэффициента отражения обычно невелика  $R < 0.3$ . Поэтому значение  $1/T$  лежит в пределах от 1 до 1.4, следовательно, при усреднении  $1/T$  по распределению толщин слоев мы оперируем с равновеликими величинами. В области же, где  $R$  сравнительно велико ( $R=0.5-0.9$  и  $1/T=2-10$ ), благоприятствующим фактором является плавность зависимости  $R(x)$ . Единственной областью, где можно ожидать больших относительных погрешностей вычисления  $T$  (но не  $R$ ), является область малых значений  $x$ , в которой  $R \rightarrow 1$ . Впрочем, точное значение  $T$  в этой области на сегодняшний день не представляет экспериментального интереса.

Можно показать, что значение коэффициента отражения неидеальной МС, определяемое из соотношения (10), равно

$$R = \frac{(1 \ 0) \left\langle \prod_{j=N}^1 \hat{Q}_{j+1}^+ S_j^+ \hat{Q}_1^+ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \hat{Q}_1 \prod_{j=1}^N S_j \hat{Q}_{j+1} \right\rangle_{d_1, d_2, \dots, d_N} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}{\left\langle \frac{1}{T} \right\rangle_{d_1, d_2, \dots, d_N}} \quad (11)$$

В этом выражении числитель вычисляется аналогично тому, как это сделано для  $\langle 1/T \rangle_{d_1, d_2, \dots, d_N}$  (9). Выражение (11) может быть также получено из формулы (7), если провести в последней усреднение независимо числителя и зна-

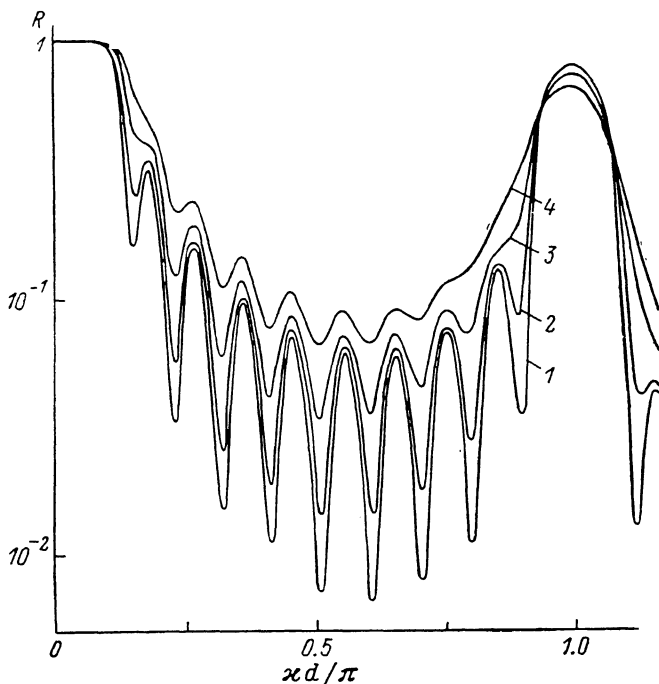


Рис. 1. Зависимость коэффициента отражения  $R$  неидеальной многослойной структуры на основе пары Mn/Ge от безразмерной нормальной составляющей импульса падающих нейтронов  $x d / \pi$  для ряда значений среднеквадратичного отклонения толщин слоев  $\sigma_{d/2}$  при  $\sigma_x d / \pi = 0.01$ .

$2\sigma_{d/2}/d$ : 1 — 0, 2 — 0.05, 3 — 0.10, 4 — 0.15.

менателя (представив  $T$  в виде  $1/(1/T)$ ). Выражения (9) и (11) применимы для расчета  $R$  и  $T$  не только для непоглощающих МС, но и в случае наличия поглощения нейтронов средой (т. е. когда потенциалы взаимодействия нейтронов со слоями являются комплексными).

На рис. 1, 2 представлены результаты численных расчетов коэффициента отражения неидеальной многослойной структуры, полученные после усреднения  $R$  по распределениям толщин отдельных слоев и начальных импульсов нейтронов. Графики построены в виде зависимостей  $R$  от безразмерной нормальной составляющей импульса падающих на МС нейтронов  $x d / \pi$ , где  $d$  — период МС. Для конкретности была рассмотрена МС на основе пары Mn/Ge, исследованная в работе [4] и характеризующаяся параметрами  $N=20$ ,  $d=18$  нм и номинальным ожиданием толщин слоев  $d/2$ . Нами предполагалось, что толщины отдельных слоев и начальные значения нормальных составляющих импульсов нейтронов распределены по нормальным законам со среднеквадратичными отклонениями  $\sigma_{d/2}$  и  $\sigma_x$  соответственно.

На рис. 1 приведены зависимости  $R$  от  $x d / \pi$  для ряда значений  $\sigma_{d/2}$  при фиксированной величине  $\sigma_x$ , а на рис. 2 —  $R(x d / \pi)$  для ряда значений  $\sigma_x$  при фиксированной величине  $\sigma_{d/2}$ . Из рис. 1, 2 видно, что при возрастании как  $\sigma_{d/2}$ , так и  $\sigma_x$

замываются минимумами зависимости  $R(x)$ . Характер происходящих изменений качественно понятен. Так, увеличение  $\sigma_{d/2}$  (и, следовательно, степени беспорядка) непосредственно ведет к падению прозрачности в области зон проводимости нейтронов в идеальной МС, средний уровень коэффициента отражения при этом возрастает. Происходит также уширение основного брэгговского пика. Если же степень беспорядка фиксированна, происходит увеличение угловой расходимости падающего пучка нейтронов, то уменьшение амплитуды осцилляций в зависимости  $R$  от  $x$  не сопровождается заметным изменением среднего уровня коэффициента отражения.

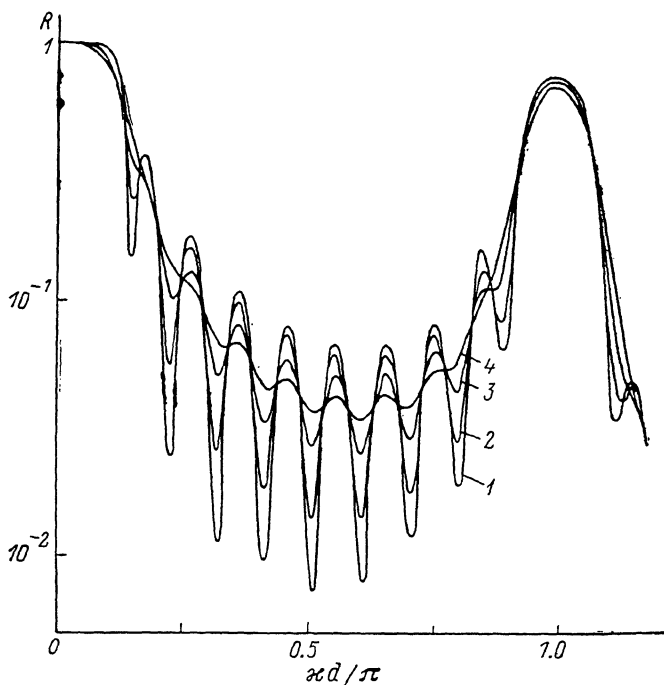


Рис. 2. Зависимость коэффициента отражения  $R$  от  $x d / \pi$  для системы из 10 слоев Mn/Ge при  $d=18$  нм и  $2 \sigma_{d/2} / d=0.05$  для ряда значений среднеквадратичного отклонения нормальных составляющих импульсов нейтронов  $\sigma_x$ .  
 $\sigma_x d / \pi$ : 1 — 0, 2 — 0.01, 3 — 0.02, 4 — 0.03.

В заключение подчеркнем, что сильная чувствительность амплитуды осцилляций зависимости  $R(x)$  в области зон проводимости нейтронов в идеальной МС от величины разброса толщин отдельных слоев может служить для определения последней. Проведенная нами обработка экспериментальных данных работ [4, 13] позволила оценить для них значение параметра  $2 \sigma_{d/2} / d$  в пределах 0.08—0.12 (при  $d \approx 20$  нм).

Отметим также, что описанный в настоящей работе метод может быть перенесен на случай расчета спектров отражения и пропускания рентгеновских лучей реальными многослойными системами.

#### Список литературы

- [1] Антонов А. В., Исаков А. И., Микеров В. И., Старцев С. А. // Письма в ЖЭТФ. 1974. Т. 20. Вып. 9. С. 632—635.
- [2] Schoenborn B. P., Caspar D. L., Kammerer O. F. // J. Appl. Cryst. 1974. Vol. 7. N 6. P. 508—512.
- [3] Lynn J. W., Kjems J. K., Passell L. et al. // J. Appl. Cryst. 1976. Vol. 9. N 6. P. 454—459.
- [4] Saxena A. M., Schoenborn B. P. // Acta Cryst. 1977. Vol. A33. N 5. P. 805—813.
- [5] Гукасов А. Г., Рубан В. А., Бедризова М. Н. // Письма в ЖТФ. 1977. Т. 3. Вып. 3. С. 130—135.
- [6] Гукасов А. Г., Дериглазов В. В., Кезерашвили В. Я. и др. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. Вып. 5. С. 1720—1726.
- [7] Sears V. F. // Acta Cryst. 1983. Vol. A39. N 5. P. 601—608.

- [8] Дзюблик А. Я., Рудько В. Н. Препринт КИЯИ. № 84-1. Киев, 1984. 28 с.
- [9] Дзюблик А. Я., Рудько В. Н. // УФЖ. 1985. Т. 30. № 2. С. 173—180.
- [10] Steyerl A., Steinhäuser K. A., Malik S. S., Achiwa N. // J. Phys. D. 1985. Vol. 18. N 1. P. 9—17.
- [11] Кезерашвили В. Я., Щebetов А. Ф., Песков Б. Г. и др. Препринт ЛИЯФ. № 1084. Л., 1985.
- [12] Кезерашвили В. Я., Щebetов А. Ф., Сороко Э. Н. и др. // Письма в ЖТФ. 1985. Т. 11. Вып. 13. С. 804—808.
- [13] Кезерашвили В. Я., Щebetов А. Ф., Песков Б. Г. и др. // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 7. С. 1372—1379.
- [14] Jaloehowski M., Mikolajczak P. // J. Phys. F. 1983. Vol. 13. N 10. P. 1973—1979.

Институт ядерных исследований АН УССР  
Киев

Поступило в Редакцию  
29 сентября 1988 г.