

Санкт-Петербургский
государственный
университет
Физический факультет
Кафедра нейтронной и
синхротронной физики

Сыромятников Владислав Генрихович

**Лекция № 10. Диффузное рассеяние
рентгеновского, синхротронного и
нейтронного излучений.**

Диффузное рассеяние рентгеновского излучения

Ioneda (1963)

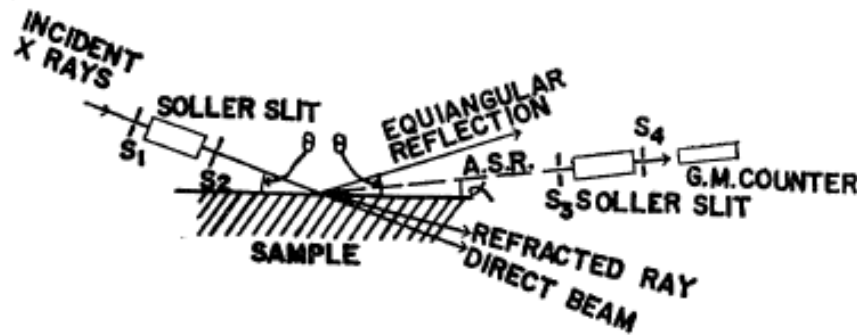
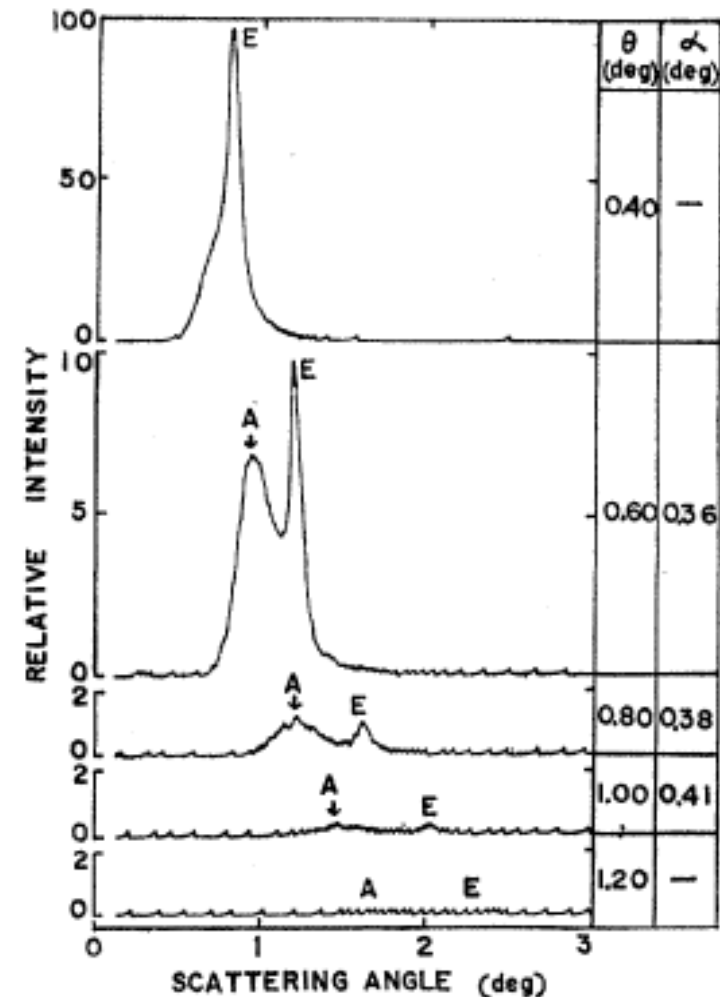
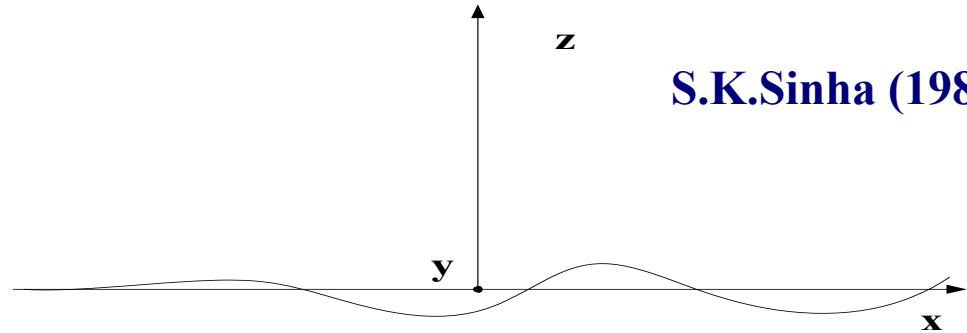
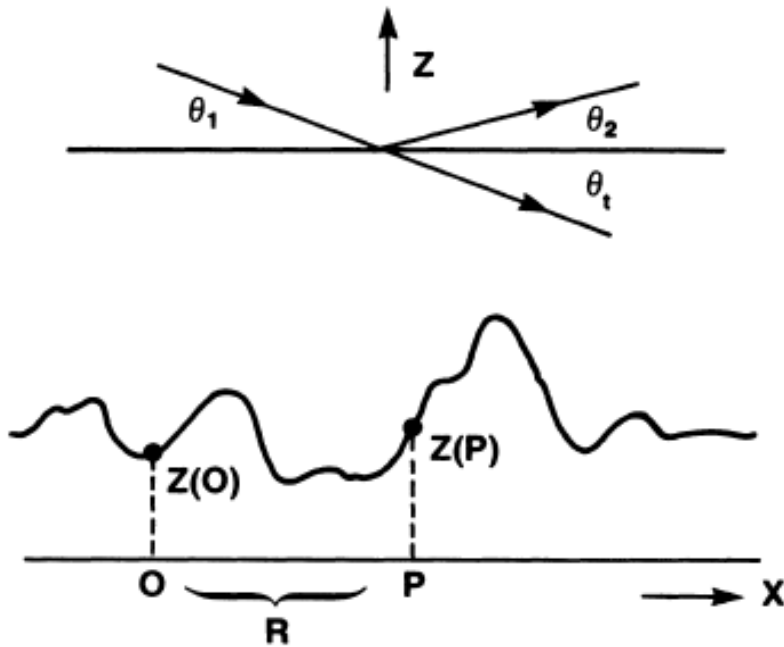


FIG. 1. Schematic view of the experimental arrangement in the incident plane.

Как установил Ioneda, при падении коллимированного пучка рентгеновского излучения на поверхность исследуемых образцов (кристаллов и тонких пленок) под углом скольжения превышающем (в 2-3 раза) критический угол материала образца, наряду с пиком зеркального, возникает пик аномального отражения. Его положение почти совпадает с критическим углом материала образца и не изменяется с изменением угла скольжения падающего пучка. Т.е. возникает диффузное рассеяние (незеркальное отражение) падающего рентгеновского излучения на неидеальной (шероховатой) поверхности образца.



Диффузное рассеяние x-гау и нейтронов на границе раздела двух сред



S.K.Sinha (1988)

Рис.1. Неидеальная поверхность раздела двух сред в разрезе.

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

Корреляционная функция

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

σ - среднеквадратичная шероховатость, определенная по всей поверхности, как $\sigma^2 = \langle z(x, y)^2 \rangle$ при $\langle z \rangle = 0$, усреднение проведено по всем точкам поверхности,
 ξ - корреляционная длина или длина обрезания (*cut-off*),
 h - показатель степени шероховатости или параметр Хурста ($0 < h < 1$).

Малым h соответствует как бы зазубренная поверхность.
 При приближении h к 1 поверхность становится более гладкой: появляются “холмы” и “долины”.

DWBA

Влияние шероховатостей на физические свойства многослойных структур

Наличие шероховатостей оказывает значительное влияние на физические свойства многослойных структур, приводит к возникновению анизотропного рассеяния в незеркальных направлениях. Такие несовершенства, в частности, уменьшают коэффициент зеркального отражения от многослойных структур. И, вообще, данные, полученные в рефлектометрическом эксперименте при рассеянии падающего на образец излучения любой исследуемой Искусственной Многослойной Магнитной Структуры (ИММС) могут заметно отличаться от расчетных данных, полученных при моделировании данного эксперимента, основанном на рассмотрении идеальной ИММС. Поэтому исследование природы шероховатостей и их корреляций между границами слоев многослойной структуры с помощью диффузного рассеяния рентгеновского, синхротронного и нейтронного излучений представляет практический и фундаментальный интерес.

Схема рассеяния нейтронного пучка на неидеальных межслойных границах в многослойной наноструктуре

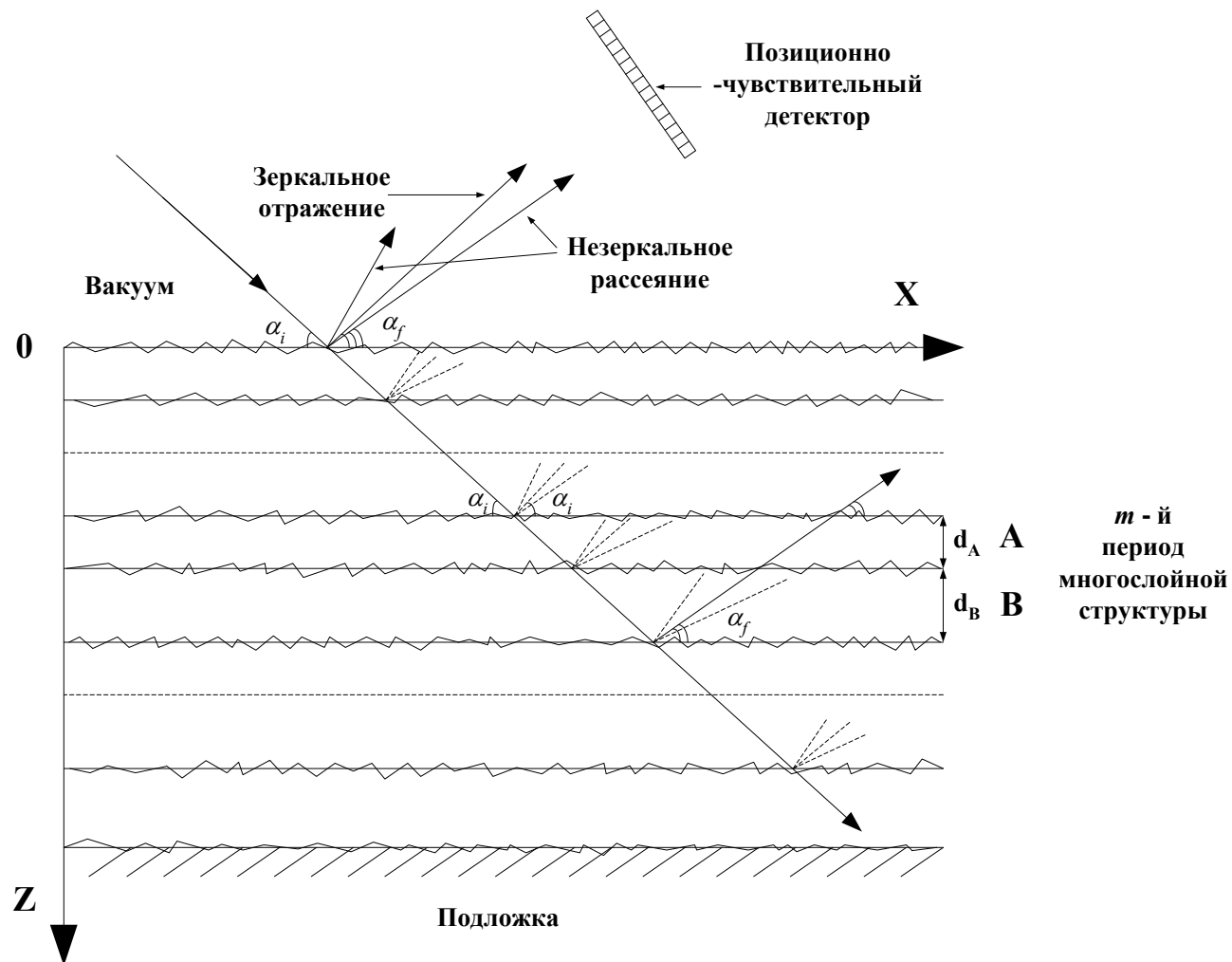
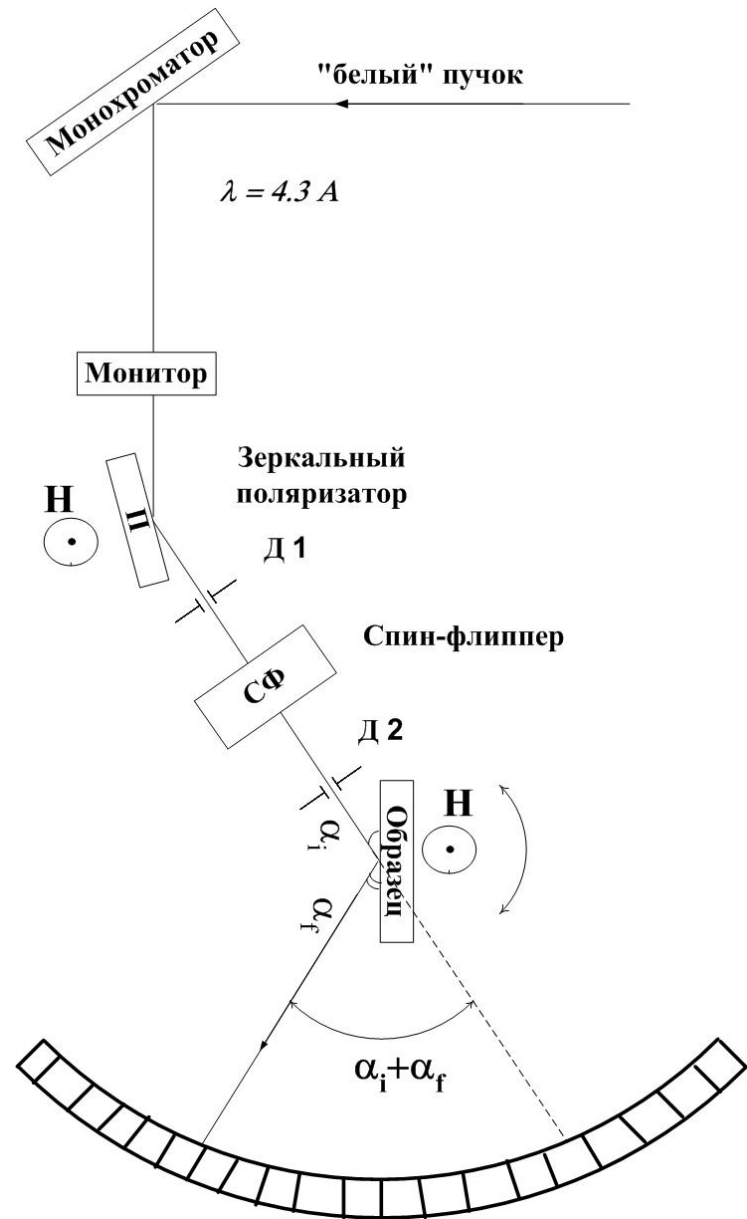
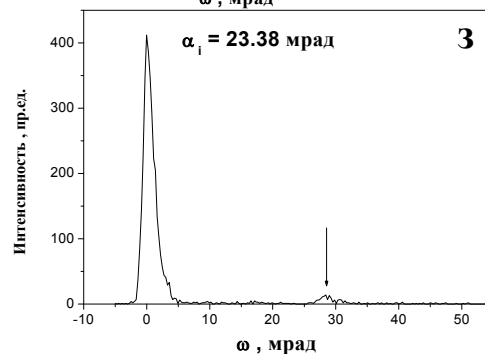
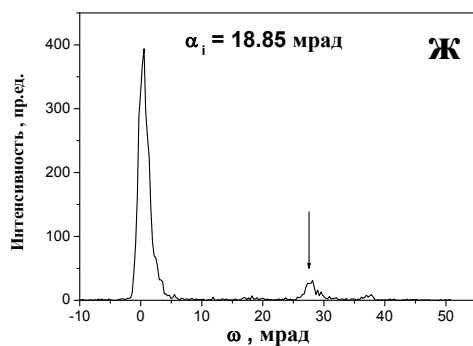
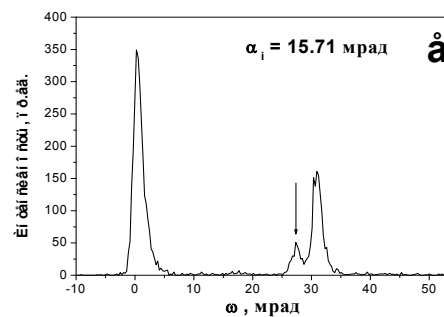
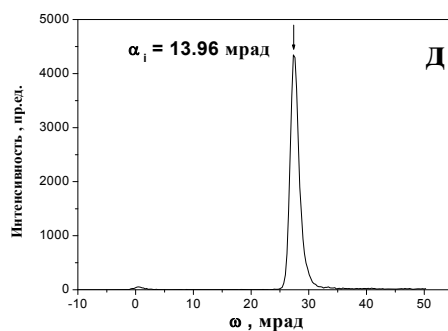
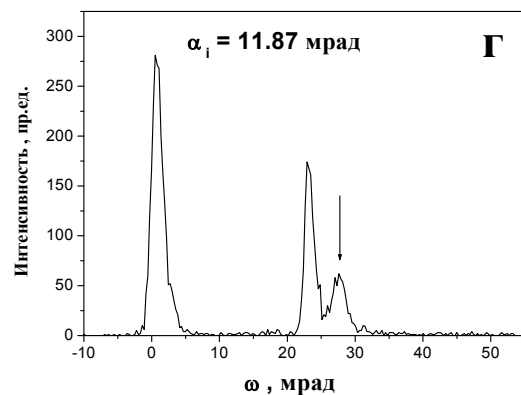
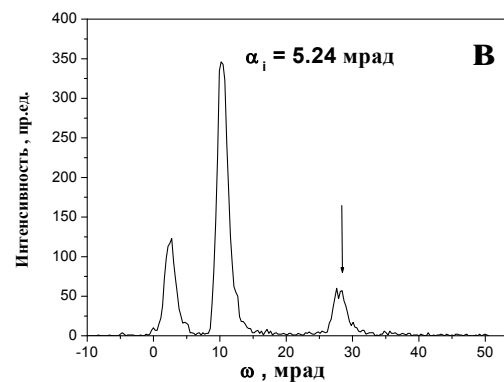
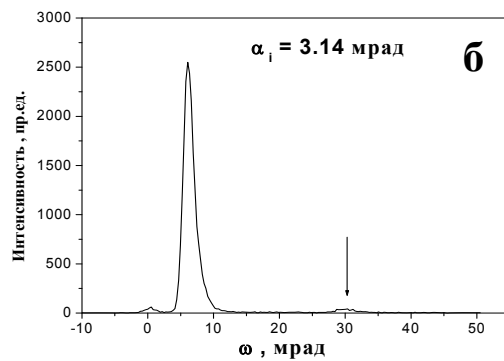
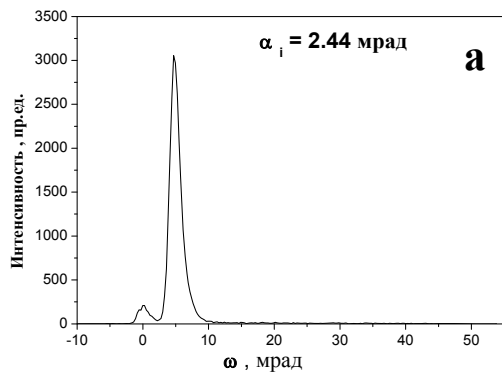


Схема нейтронного рефлектометра TOREMA II – NeRo



Профили (+) спиновой интенсивности («кино») на детекторе для образца ПММНС 20Co/Ti

V.G.Syromyatnikov (1994)



$$\alpha_i + \alpha_f \cong 2\alpha_{1B}$$

$$Q_z \cong Q_{1B} = \frac{2\pi}{D}$$

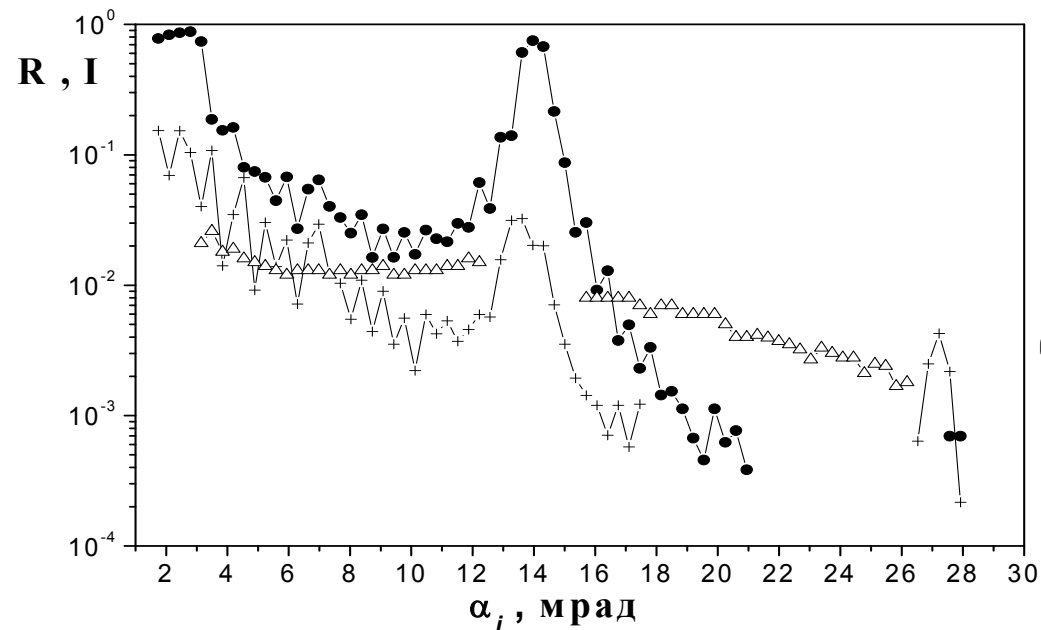


Рис. Экспериментальные зависимости коэффициентов зеркального отражения и нормированной интенсивности квазибрэгговского пика для ПМС 20Co/Ti

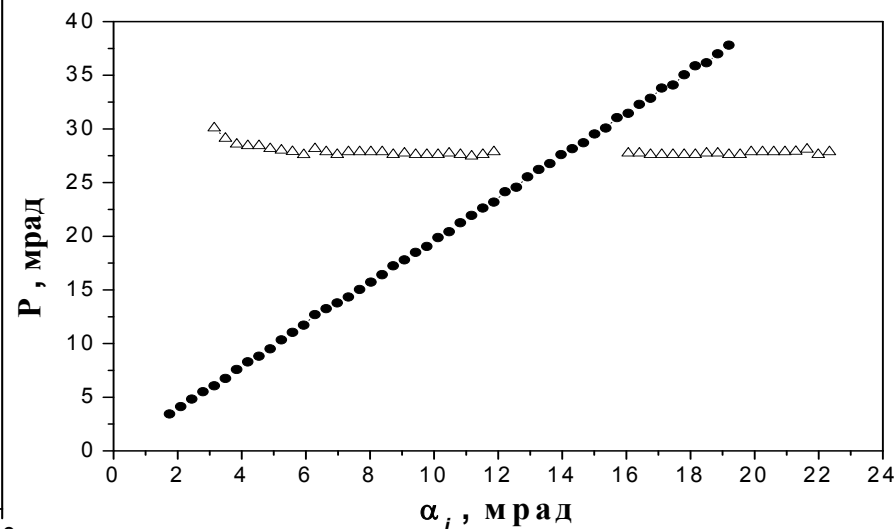


Рис. Координаты центров зеркального и квазибрэгговского пиков.

Борновское приближение искаженных волн (DWBA или БПИВ)

S.K.Sinha (1988)

Б.П.Топерверг (1994-1999)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \quad f \sim \langle \Psi^f | V | \Psi^i \rangle$$

$$V(\vec{r}) = V^{(0)}(\vec{r}) + V^{(1)}(\vec{r}) = \sum_{m=1}^N V_m(\vec{r}) = \sum_{m=1}^N [V_m(z) + \delta V_m(\vec{r})]$$

$$V(\vec{r}) = V_{nuc}(\vec{r}) + V_{mag}(\vec{r})$$

$V_m(z)$ и $\delta V_m(\vec{r})$ невозмущенная и возмущенная части потенциала $V_m(\vec{r})$

$$V_m(z) = V_m \cdot \theta(z_m - z) \cdot \theta(z - z_{m-1}) = \begin{cases} V_m & , \text{ для } z_{m-1} \leq z \leq z_m \\ 0 & , \text{ для других } z \end{cases} \quad \langle \delta V_m(\vec{r}) \rangle = 0$$

$$\begin{cases} |\Psi^i(\vec{r})\rangle = \Psi^i(z) \cdot \exp[i \cdot (k_x \cdot x + k_y \cdot y)] \\ |\Psi^f(\vec{r})\rangle = \Psi^f(z) \cdot \exp[-i \cdot (k_x \cdot x + k_y \cdot y)] \end{cases} \quad |\Psi_i\rangle \quad |\Psi_f\rangle$$

$$\Psi^i(z) = \sum_{m=1}^N \Psi_m^i(z) \cdot \theta(z_m - z) \cdot \theta(z - z_{m-1}) \quad \Psi^f(z) = \sum_{m=1}^N \Psi_m^f(z) \cdot \theta(z_m - z) \cdot \theta(z - z_{m-1})$$

$$\Psi_m^i(z) = t_m^i \cdot \exp(i \cdot p_m^i \cdot z) + r_m^i \cdot \exp(-i \cdot p_m^i \cdot z) \quad \Psi_m^f(z) = t_m^f \cdot \exp(i \cdot p_m^f \cdot z) + r_m^f \cdot \exp(-i \cdot p_m^f \cdot z)$$

$$p_m^i = \sqrt{p_{oi}^2 - p_{mc}^2} \quad p_m^f = \sqrt{p_{of}^2 - p_{mc}^2} \quad p_{mc} = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda} \sin \alpha_{mc}$$

$$p_{oi} = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda} \sin \alpha_i \quad p_{of} = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda} \sin \alpha_f$$

$$V^{(1)}(\vec{r}) = \sum_{m=0}^{N-1} V_m(\vec{r})$$

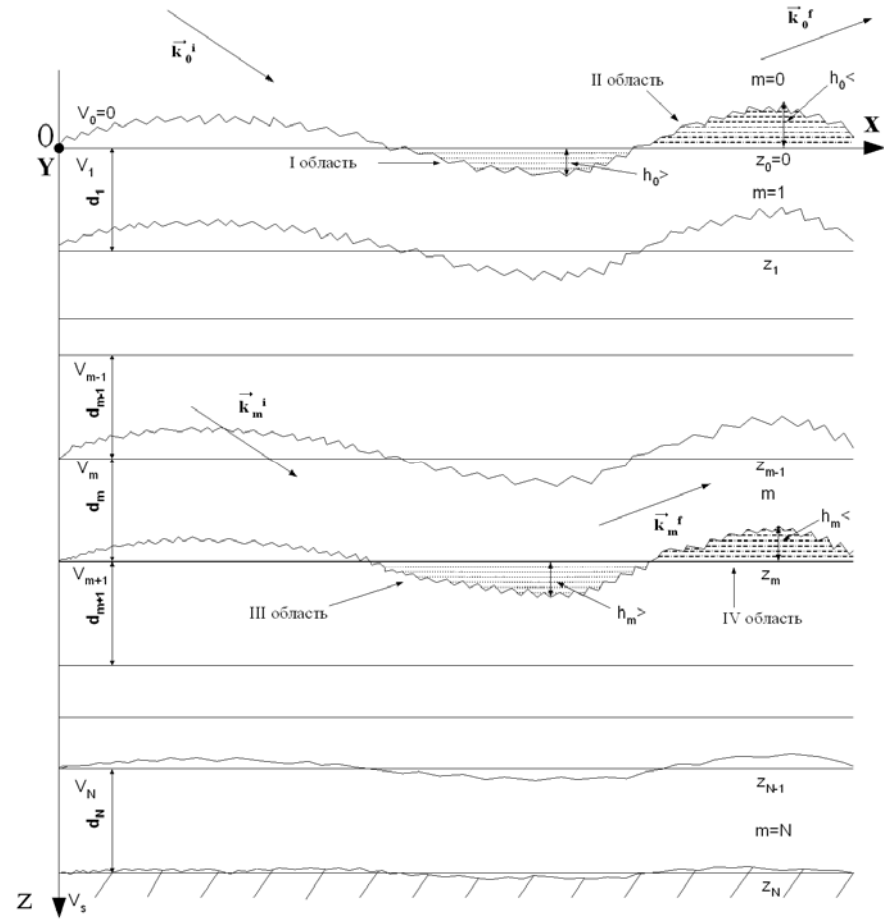
$$f(p_{0i}, p_{of}, q_x, q_y) = \sum_{m=1}^N f_m(p_m^i, p_m^f, q_x, q_y) = \sum_{m=1}^N \langle \Psi_m^f | V_m | \Psi_m^i \rangle$$

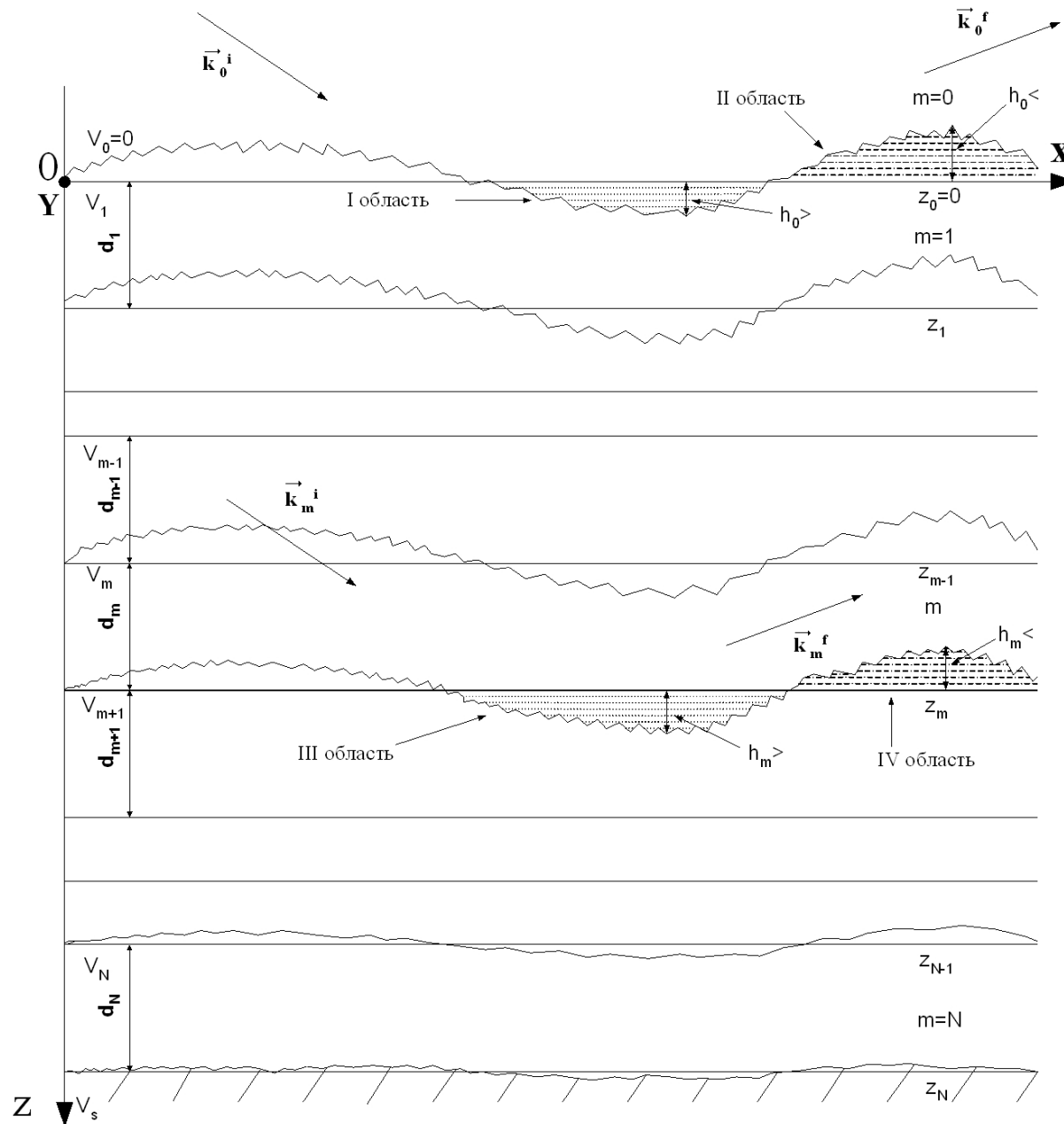
$$f_m = \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2}{m} \cdot \int dx dy \cdot \exp[-i \cdot (q_x \cdot x + q_y \cdot y)] \int dz \cdot \Psi_m^i(z) \cdot V_m \cdot \Psi_m^f(z)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{m,n=0}^N \langle f_m^*(p_m^i, p_m^f, q_x, q_y) f_n(p_n^i, p_n^f, q_x, q_y) \rangle$$

$$V_m(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2}{m} \cdot \delta_m & , z \in \langle z_m, z_m + h_m(x, y) \rangle \text{ для } h_m(x, y) > 0 \\ & \text{для областей типа III (Рис.3.2.2)} \\ \frac{2 \cdot \pi \cdot \hbar^2}{m} \cdot \delta_m & , z \in \langle z_m + h_m(x, y), z_m \rangle \text{ для } h_m(x, y) < 0 \\ & \text{для областей типа IV (Рис.3.2.2)} \\ 0 & , \text{ в других местах} \end{cases}$$

$$\delta_m = (Nb)_{m+1} - (Nb)_m$$





Для описания полученных на TOREMA II результатов Б.П.Топерверг развил теорию рассеяния поляризованных нейтронов на неидеальных межслойных границах многослойных магнитных наноструктур в рамках Борновского Приближения Искаженных Волн (DWBA).

Дифференциальное сечение диффузного (незеркального) рассеяния, в DWBA на произвольной многослойной наноструктуре в щелевой геометрии (усреднение по плоскости y):

$$\frac{d\bar{\sigma}^y}{d\Omega} = \lambda \cdot S \cdot \sum_{m,n=1}^{N+1} \delta_m \cdot \delta_n^* \cdot C_{m-1,n-1}(q_x, q_z) \cdot (t_m^f + r_m^f) \cdot (t_m^i + r_m^i) \cdot \left[(t_n^f + r_n^f) \cdot (t_n^i + r_n^i) \right]^*$$

где $\delta_m = (N \cdot b)_m - (N \cdot b)_{m-1}$; S – площадь засветки образца; λ - длина волны нейтрона;

$t_{m,n}^{f(i)}$ и $r_{m,n}^{f(i)}$ - коэффициенты пропускания и отражения волновых функций для идеальной многослойной наноструктуры, определенные на границах m -го и n -го слоев для выходной и входной волн, соответственно;

$C_{mn}(q_x, q_z)$ - фурье-преобразование корреляционной функции $C_{mn}(\rho)$, описывающей неидеальные межслойные границы наноструктуры;

q_x и q_z - компоненты переданного волнового вектора.

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$C_{mn}(\rho) = \langle h_m(0), h_n(\rho) \rangle = \sqrt{\sigma_m^2 \cdot \sigma_n^2} \cdot \exp \left[- \left(\frac{\rho}{\xi_{mn}} \right)^{2 \cdot h_0} \right] \quad \sigma_{m(n)} = \sqrt{\langle [h(\rho_{m(n)})]^2 \rangle}$$

$$0 < h_0 < 1;$$

$$\xi_{mn} = \xi_0 \cdot \exp \left[- \frac{|m-n|}{\Lambda_0} \right] \quad C_{mn}(q_x, q_z) = \frac{2 \cdot \sigma_0^2 \cdot \xi_{mn}}{(q_z^2 \cdot \sigma_0^2 + 1)^2 + (q_x \cdot \xi_0)^2}$$

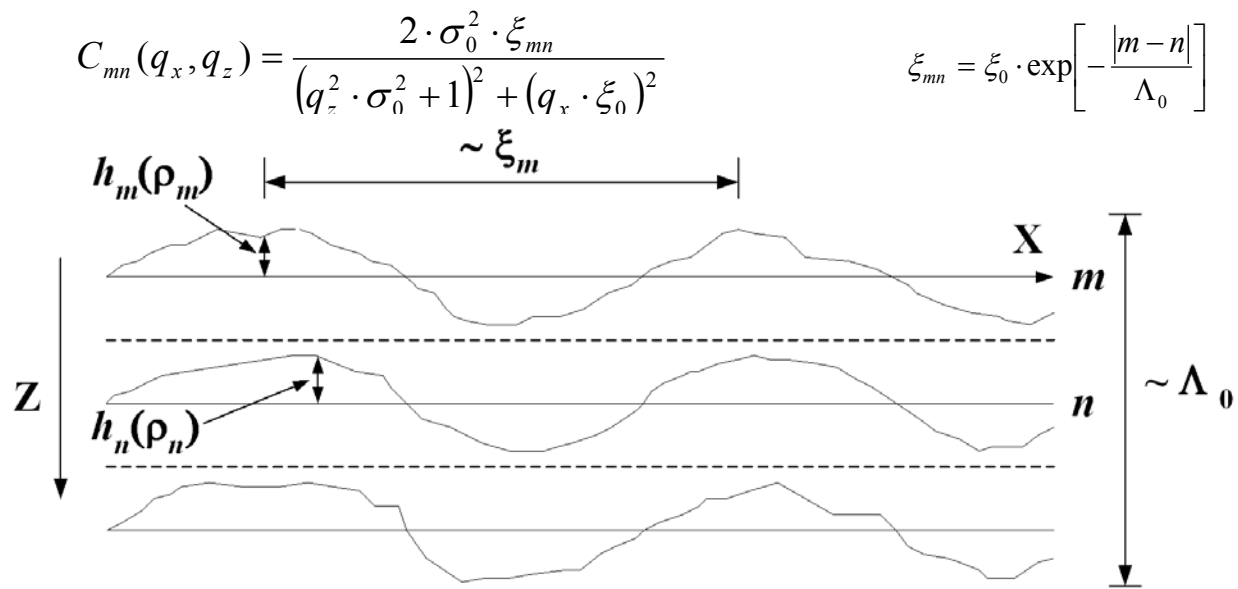


Рис.1. Конформные шероховатости $\Lambda_0 \neq 0$ и $C_{mn}(\rho) \neq 0$ для $m \neq n$

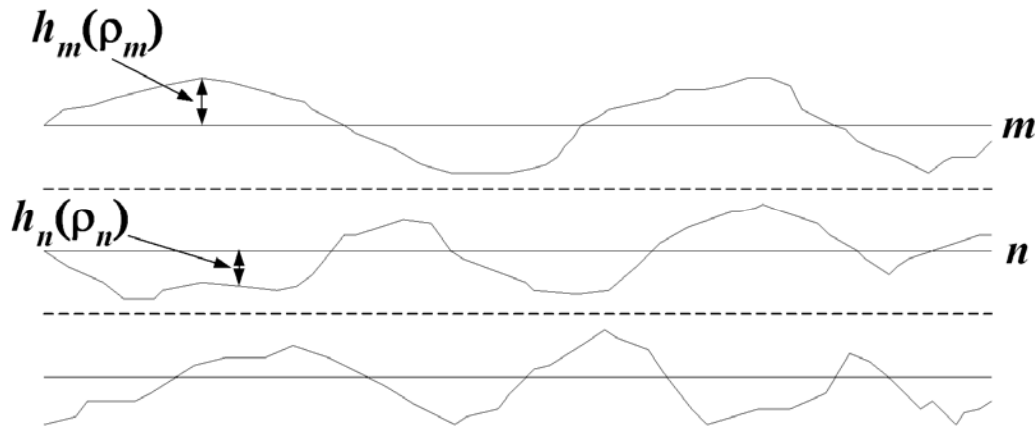


Рис.2. Полностью некоррелированные шероховатости. $\Lambda_0 = 0$ и $C_{mn}(\rho) = 0$ для $m \neq n$.

Сечение диффузного рассеяния становится заметным, когда $\Lambda_0 > 0$

т.е., когда имеет место полная или частичная корреляция шероховатостей между различными межслойными границами структуры. Сечение растет с ростом Λ_0 .

Все значительные особенности в картине диффузного рассеяния обусловлены конструктивной (пики) и деструктивной (провалы) интерференцией между падающей и рассеянной волнами. Эти особенности

появляются из произведения волновых функций произведений сумм коэффициентов $t_{m,n}^{f(i)}$ и $r_{m,n}^{f(i)}$

для идеальной многослойной структуры, т.е. определяются свойствами этих функций, т.к. $C_{mn}(q_x, q_z)$

не имеет особенностей, и поэтому этот сомножитель лишь модулирует интенсивность диффузного рассеяния.

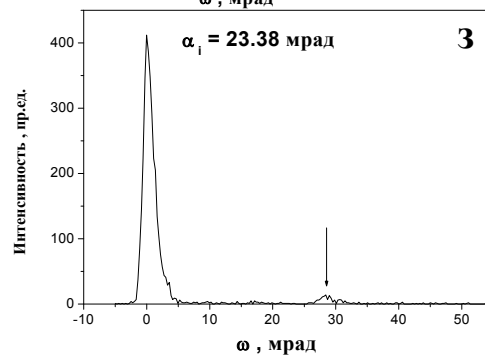
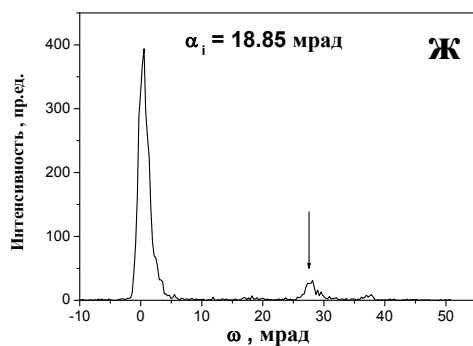
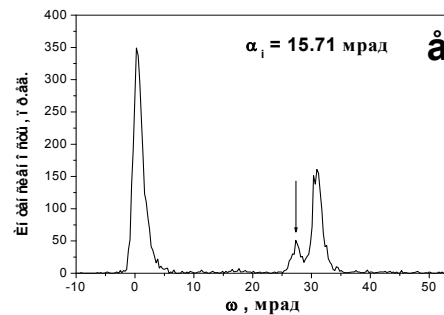
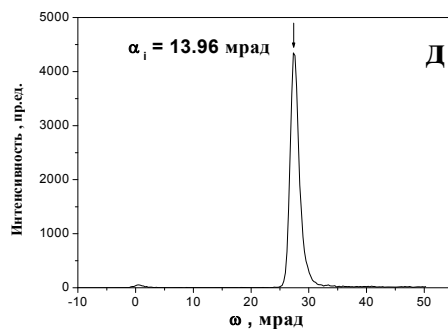
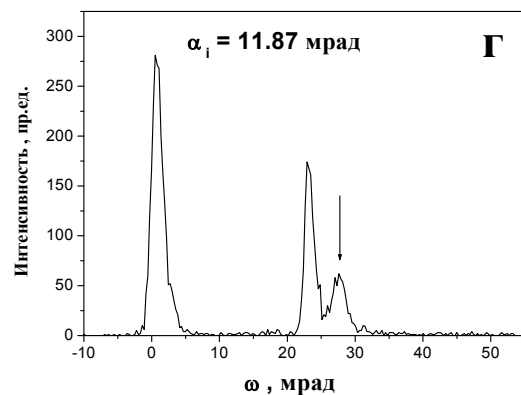
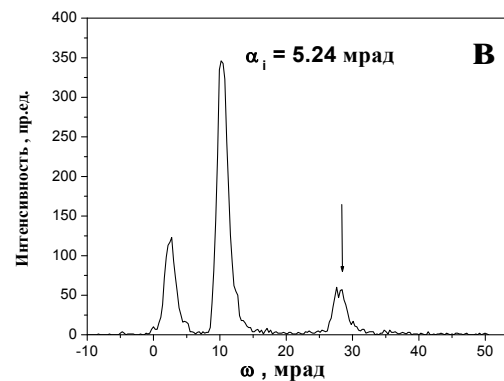
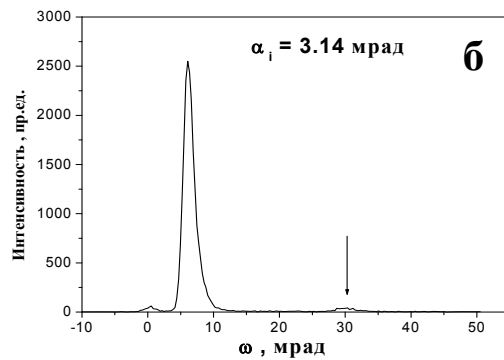
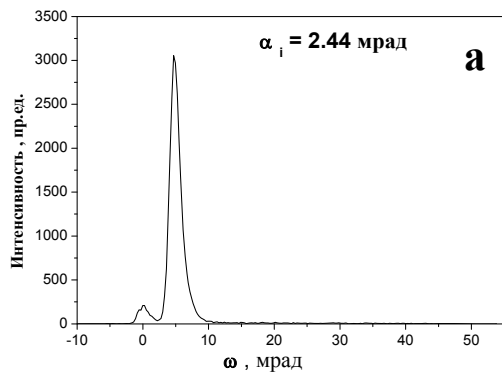
Картина диффузного рассеяния может заметно измениться в зависимости от приложенного к образцу

магнитного поля, т.к. при этом будут изменяться коэффициенты $t_{m,n}^{f(i)}$ и $r_{m,n}^{f(i)}$

из-за изменения средних оптических потенциалов магнитных слоев многослойных тонкопленочных структур.

Профили (+) спиновой интенсивности («кино») на детекторе для образца ПММНС 20Co/Ti

V.G.Syromyatnikov (1994)



$$\alpha_i + \alpha_f \cong 2\alpha_{1B}$$

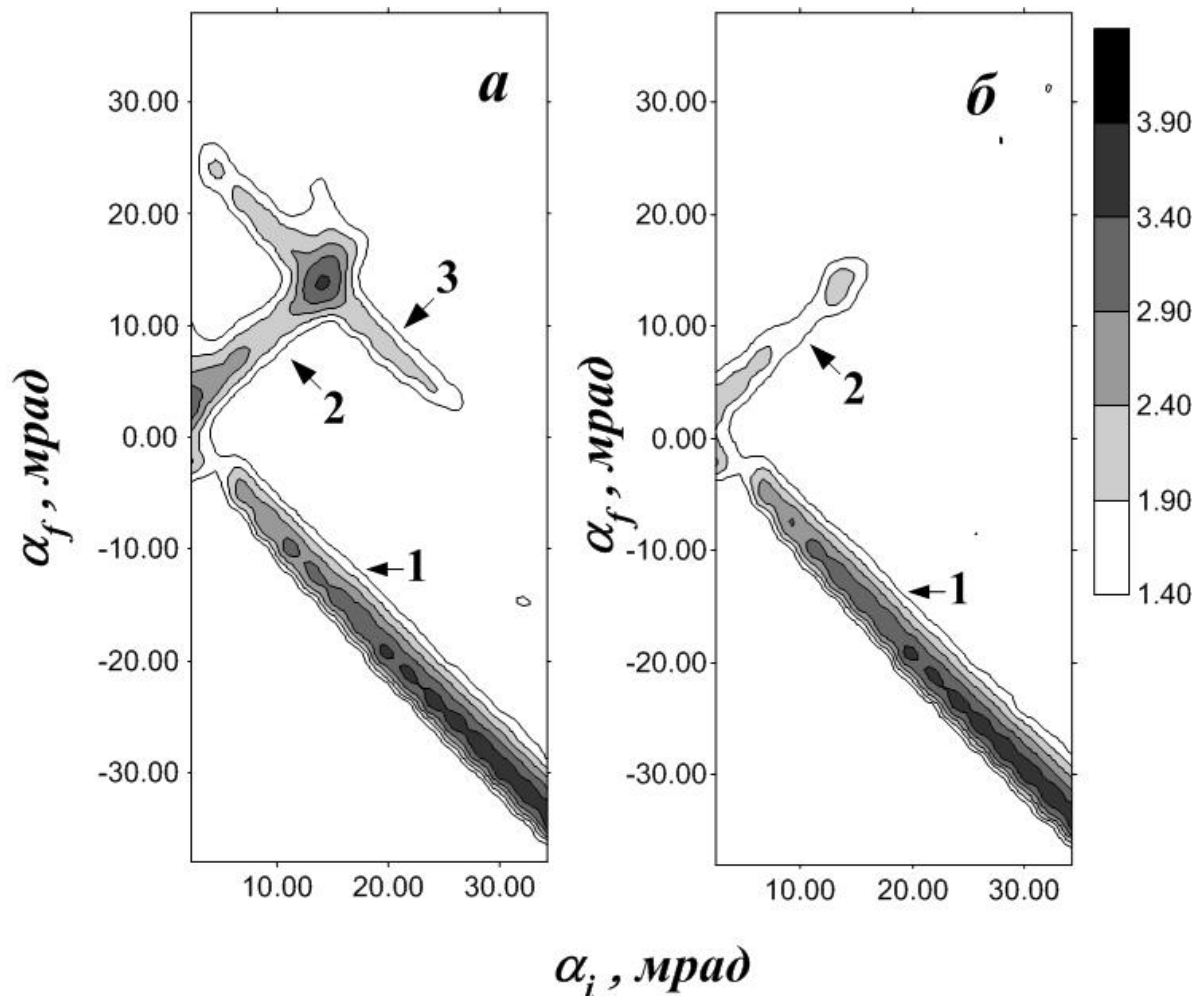
$$Q_z \cong Q_{1B} = \frac{2\pi}{D}$$

Периодическая магнитная многослойная наноструктура 20Co(75А)/Ti(75А)

$$\alpha_i + \alpha_f \cong 2\alpha_{1B}$$

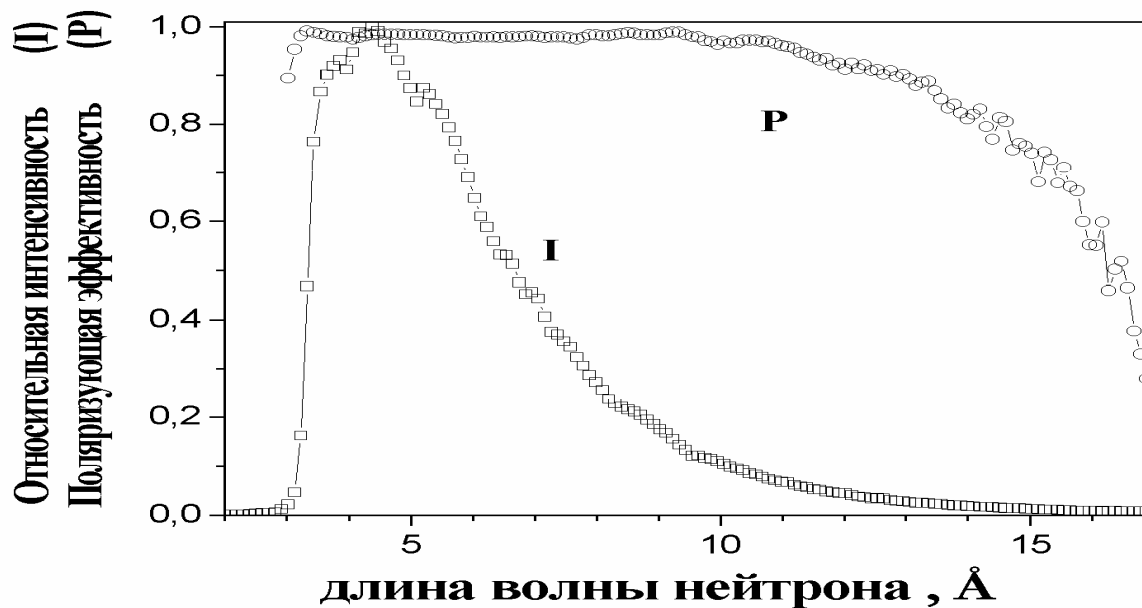
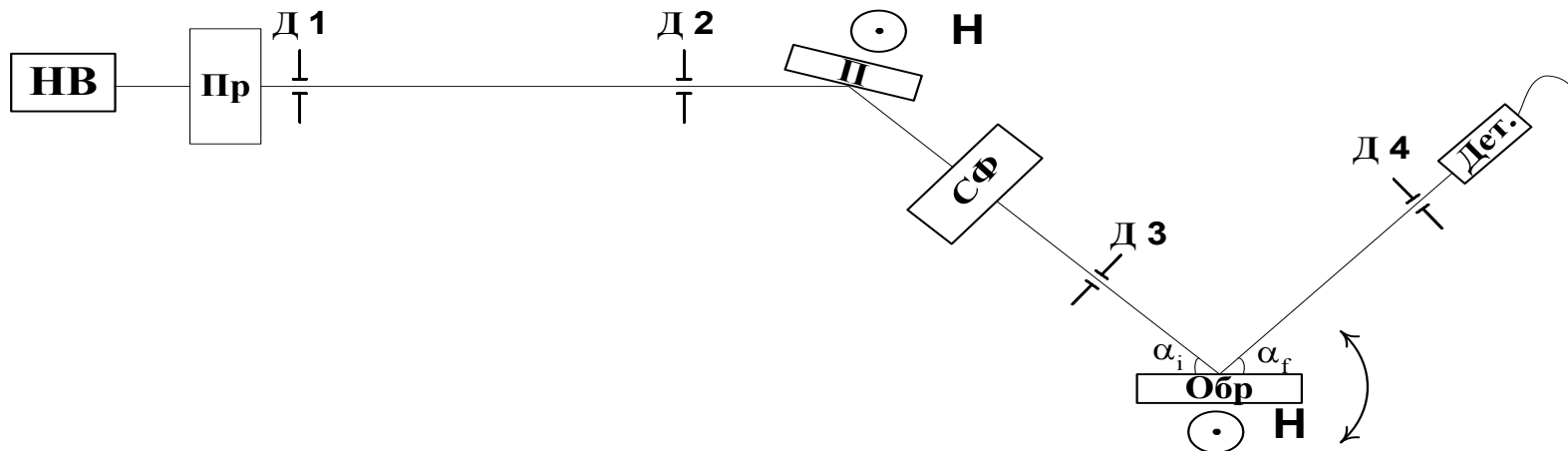
$$Q_z \cong Q_{1B} = \frac{2\pi}{D}$$

$$\Lambda_0 \neq 0$$

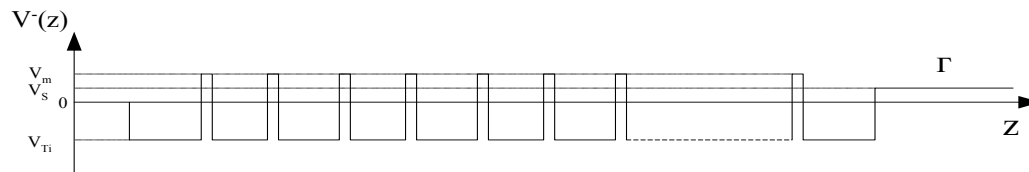
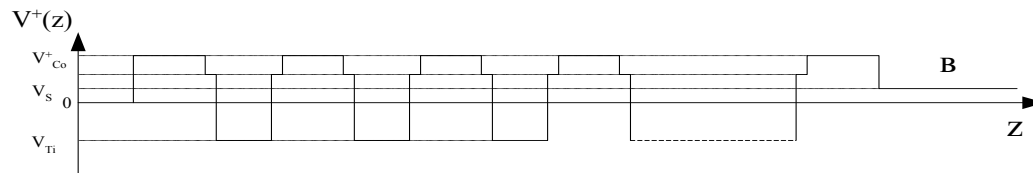
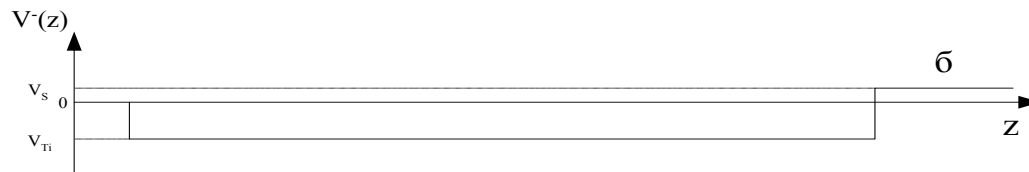
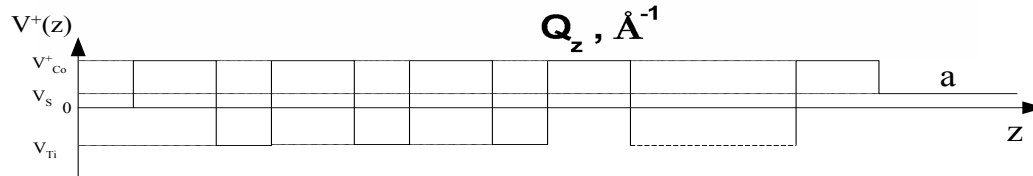
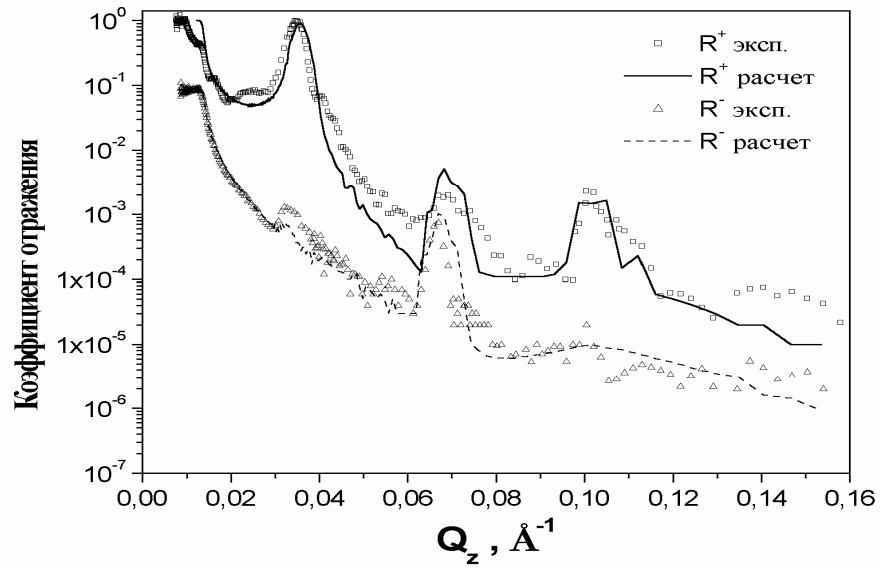


Контурные карты распределения зеркальной и незеркальной интенсивностей в логарифмическом масштабе для (+) (Рис.а) и для (-) (Рис.б) спиновых компонент нейтронов, рассеянных на ПМС 20Co/Ti

Нейтронный рефлектометр EROS (LLB, France)

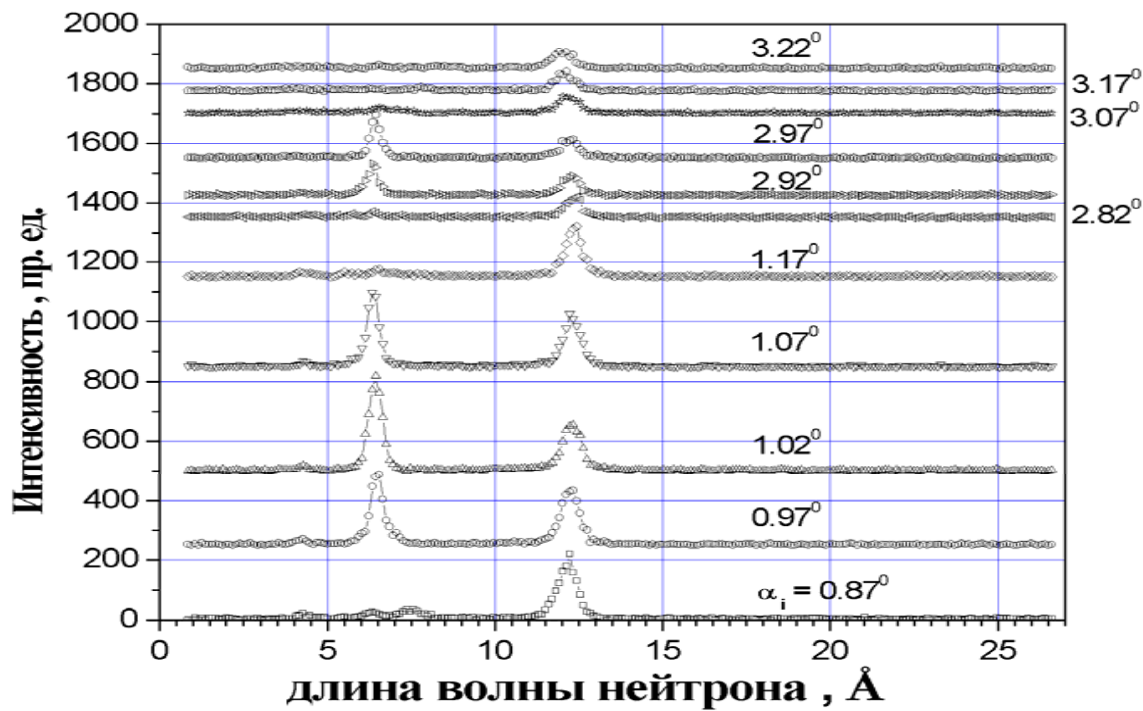
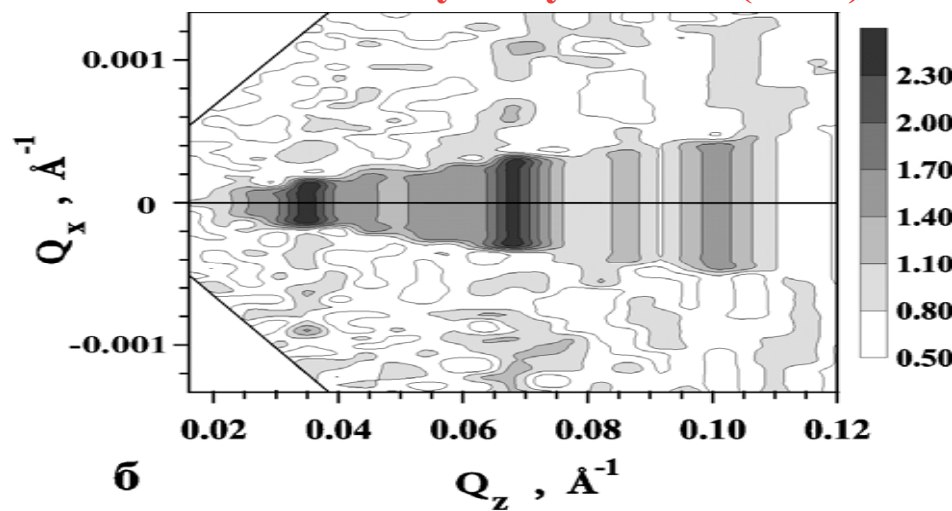
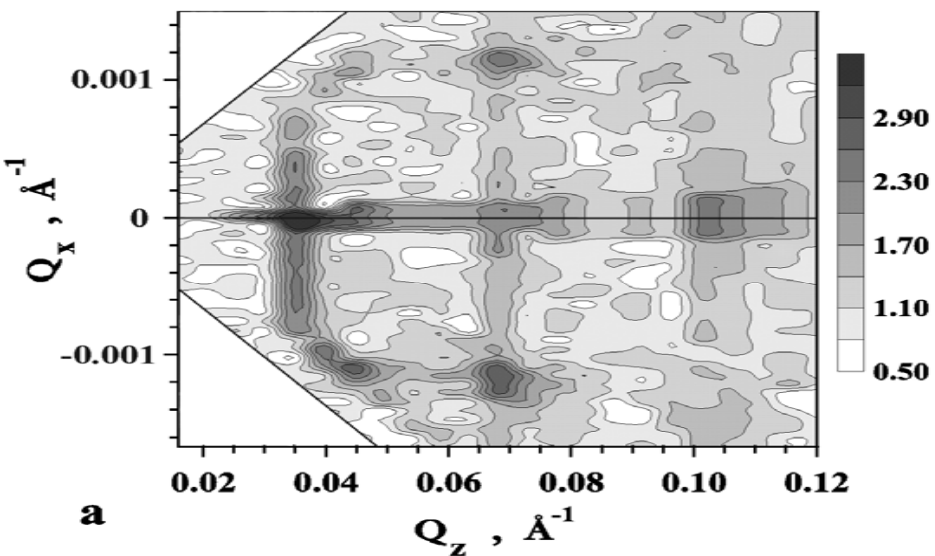


ПМС 60Co/Ti



ПМС 60Co/Ti

V.G.Syromyatnikov (1997)



$$\theta = \alpha_i + \alpha_f = 4.0^\circ$$

Оси квазибрэгговских полос определяются уравнением:

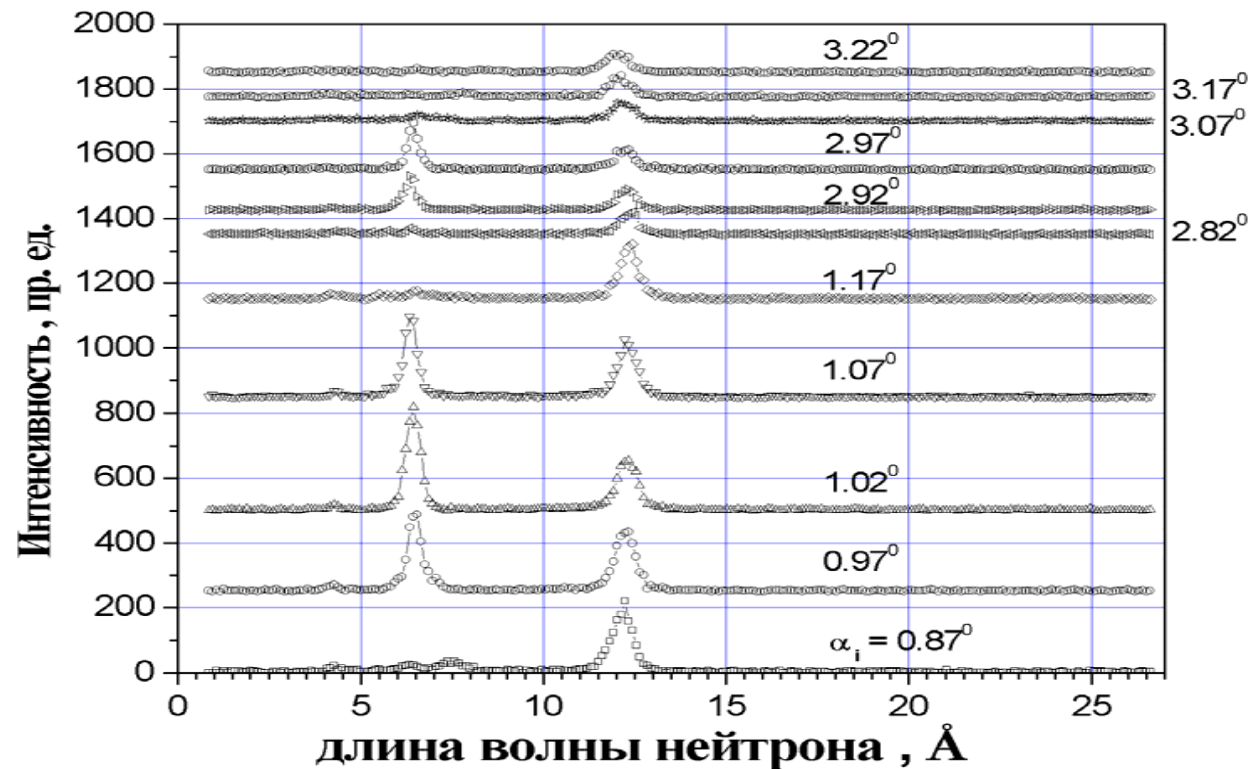
$$Q_z = k_{zi} - k_{zf} \cong Q_B, \text{ где } Q_B = 2\pi n/d.$$

$$Q_{z1B}^+ \cong 0.0346 \text{ \AA}^{-1}$$

$$\theta_{1B} = \frac{\lambda \cdot Q_{z1B}^+}{4 \cdot \pi} \cong 1^\circ$$

$$\alpha_f \cong 3.0^\circ \quad \alpha_f = \alpha_{3B}^+$$

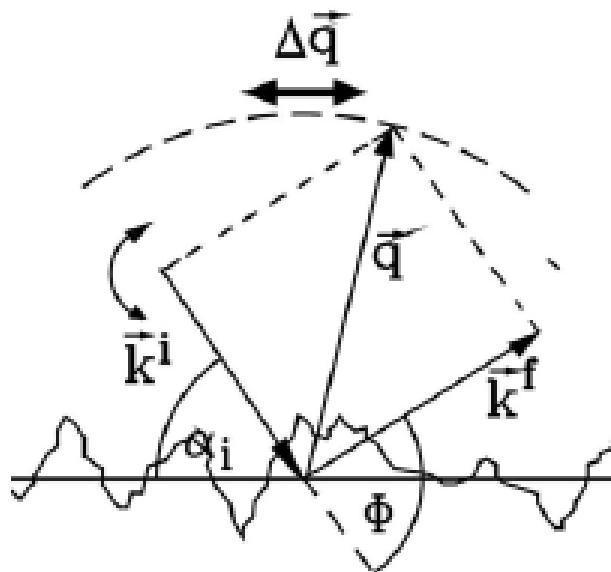
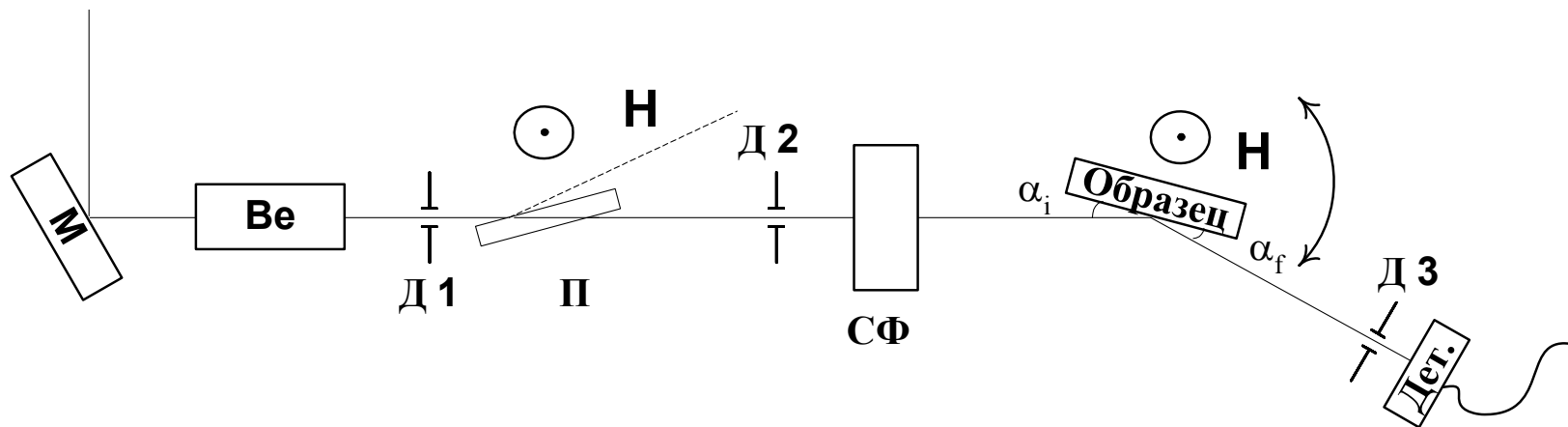
$$\theta = \alpha_i + \alpha_f = 4.0^\circ$$



Таким образом, анализируя данные, можно сделать вывод, что появление сильных пиков на квазибрэгговской полосе 2-го порядка происходит, когда выполняются одновременно условия брэгговского отражения для падающего и рассеянного на образце пучков, но для разных порядков: 1-го и 3-го, и наоборот, 3-го и 1-го.

Нейтронный рефлектометр ADAM (ILL, France)

$$\lambda = 4.41 \text{ \AA}$$



Rocking scans

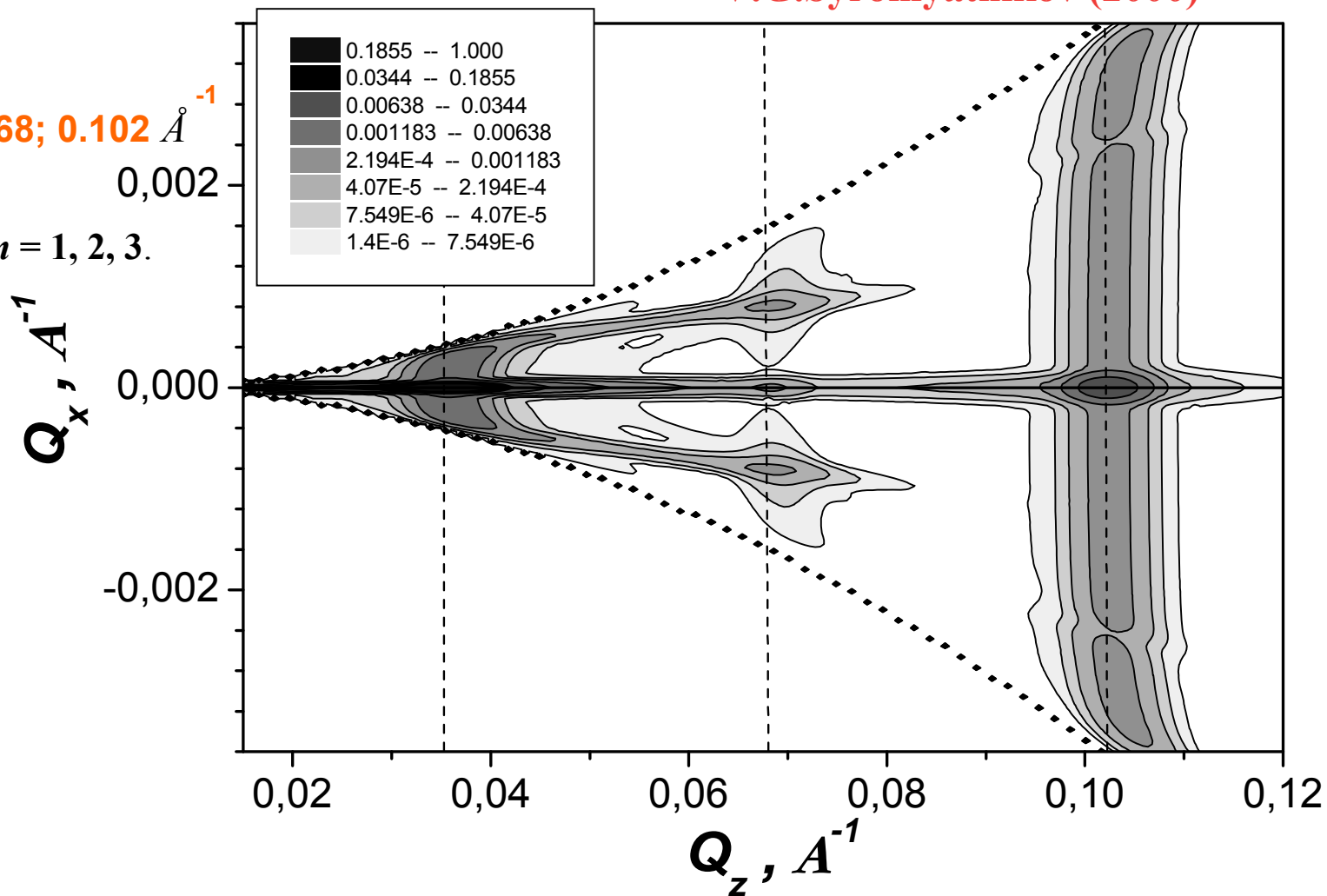
Периодическая магнитная многослойная наноструктура 60Co/Ti

V.G.Syromyatnikov (2000)

ADAM

$$Q_z = 0.035; 0.068; 0.102 \text{ \AA}^{-1}$$
$$Q_z \approx \frac{2\pi n}{D}, \quad n = 1, 2, 3.$$

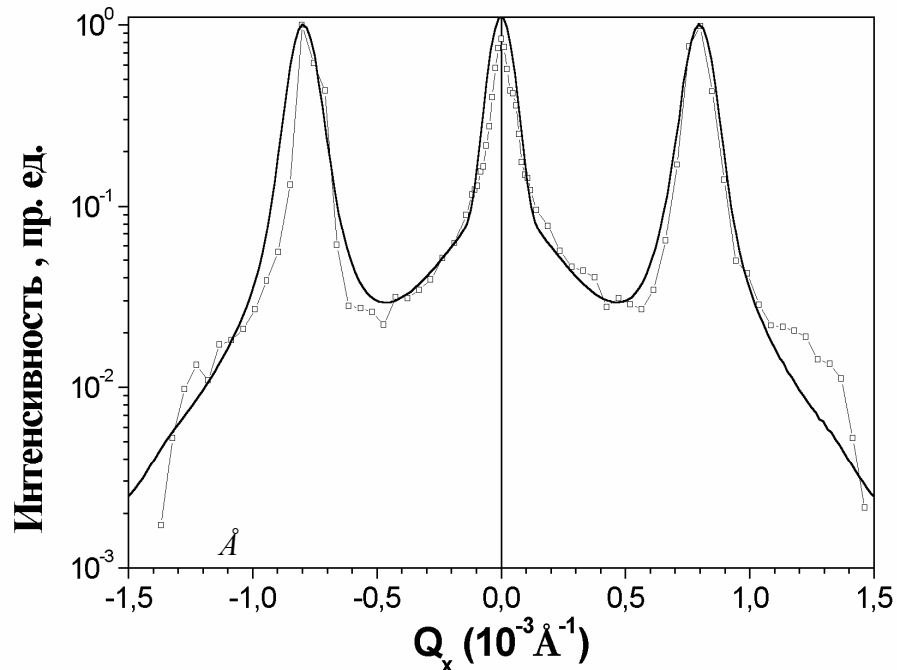
$$\Lambda_0 \neq 0$$



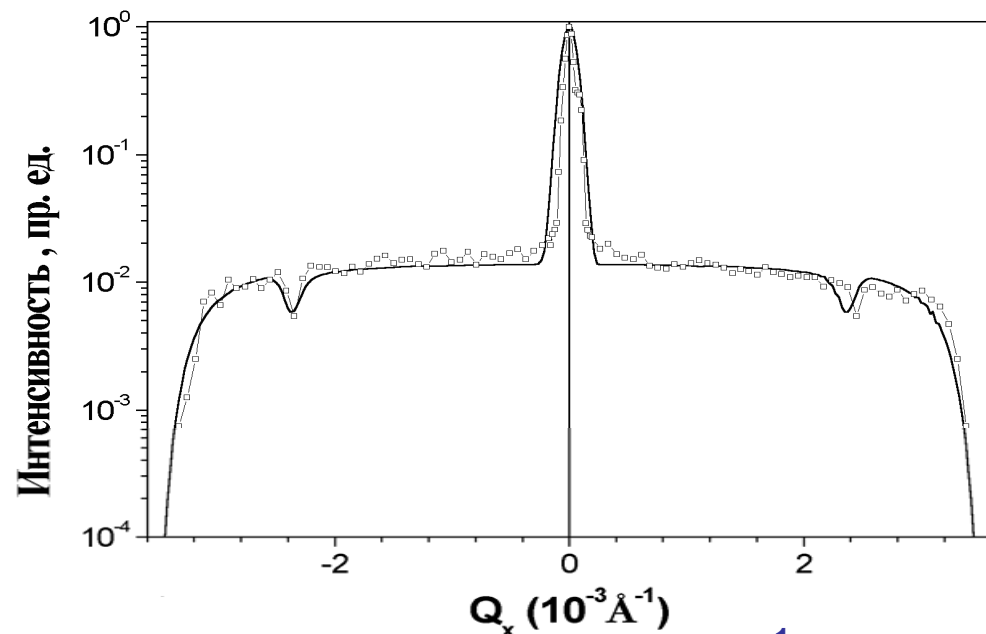
Контурная карта расчетного распределения зеркальной и диффузной интенсивностей для (+) спиновой компоненты нейтронного пучка, рассеянного на ПМС 60Co/Ti.

Кривые качания (rocking scans) для брэгговских отражений

ADAM



2-го порядка $Q_z = 0.068 \text{ \AA}^{-1}$



3-го порядка $Q_z = 0.102 \text{ \AA}^{-1}$

Параметры структуры 60Co/Ti, использованные при построении контурной карты, полученные при фитировании: плотности длин рассеяния

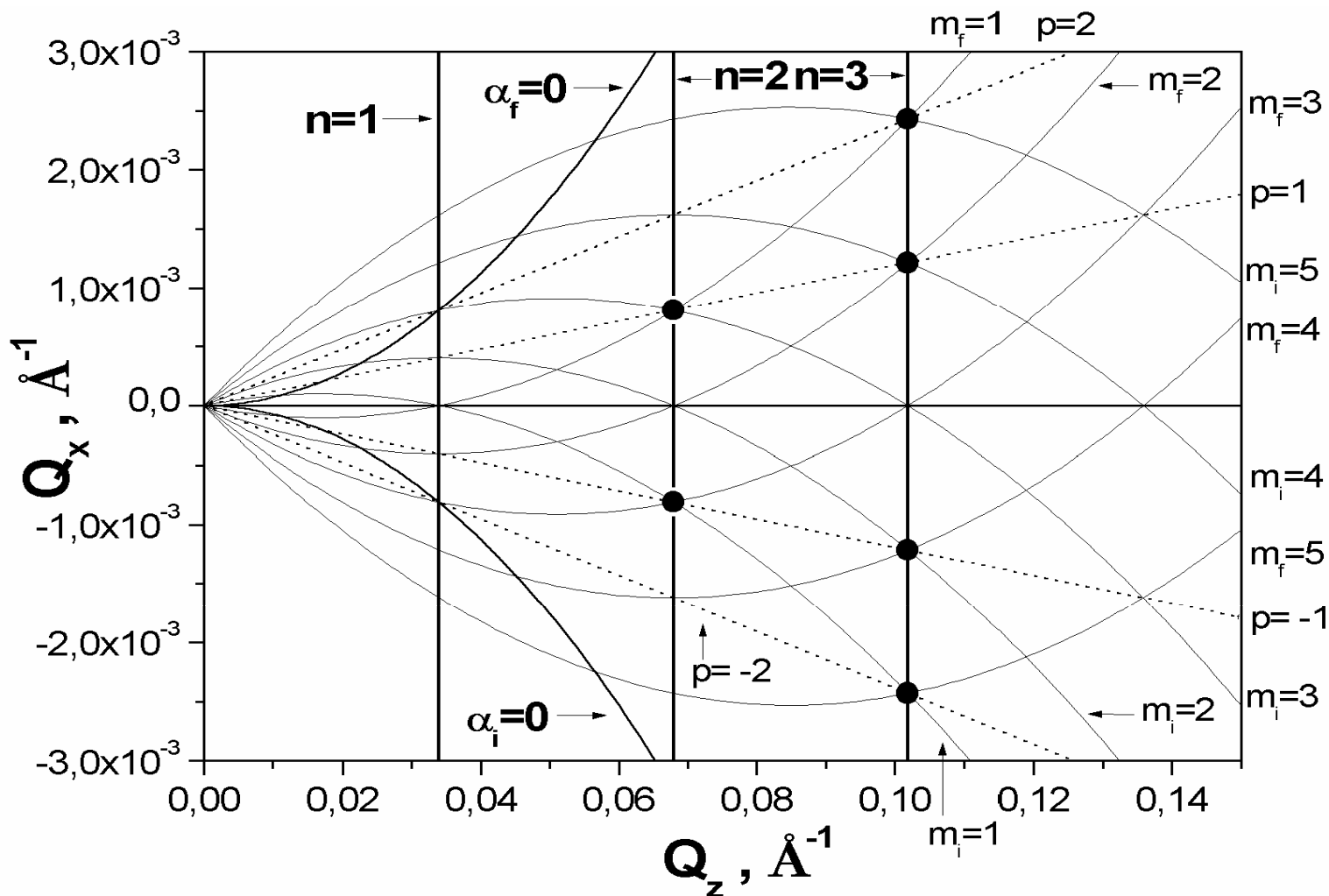
Nb (в 10^{-6} \AA^{-2}): $Nb^+(\text{Co}) = 6.48$, $Nb^-(\text{Co}) = -1.94$, $Nb(\text{Ti}) = -1.94$; толщины слоев: $a(\text{Co}) = 94$, $a(\text{Ti}) = 91$

; глубина конформности структуры $L_0 = 11100$, величина среднеквадратичной шероховатости $\sigma = 20$

; показатель степени шероховатости $h = 0.5$.

Схема расположения экстремумов на контурной карте для ПМС 60Co/Ti

V.G.Syromyatnikov (2000)



$$\begin{cases} Q_z = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda} \cdot (\alpha_i + \alpha_f) \\ Q_x = \frac{\pi}{\lambda} \cdot (\alpha_i^2 - \alpha_f^2) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha_i = \frac{Q_z}{2 \cdot k_0} + \frac{Q_x}{Q_z} \\ \alpha_f = \frac{Q_z}{2 \cdot k_0} - \frac{Q_x}{Q_z} \end{cases}$$

условие Брэгга для входной волны

$$\alpha_i = \frac{m_i \cdot \lambda}{2 \cdot D} \Rightarrow Q_x = -\frac{1}{2 \cdot k_0} \cdot \left(Q_z - \frac{\pi \cdot m_i}{D} \right)^2 + \frac{1}{2 \cdot k_0} \cdot \left(\frac{\pi \cdot m_i}{D} \right)^2$$

Семейство парабол пересекает ось Q_z при $Q_z = \frac{2 \cdot \pi \cdot m_i}{D}$

условие Брэгга для выходной волны

$$\alpha_f = \frac{m_f \cdot \lambda}{2 \cdot D} \Rightarrow Q_x = \frac{1}{2 \cdot k_0} \cdot \left(Q_z - \frac{\pi \cdot m_f}{D} \right)^2 - \frac{1}{2 \cdot k_0} \cdot \left(\frac{\pi \cdot m_f}{D} \right)^2$$

Семейство парабол пересекает ось Q_z при $Q_z = \frac{2 \cdot \pi \cdot m_f}{D}$

определим координаты точек пересечения парабол этих двух семейств с «обычными» квазибрэгговскими полосами, т.е. с линиями параллельными оси Q_x , у которых $Q_z = \frac{2 \cdot \pi \cdot n}{D}$

$$Q_x = \pm \frac{\pi \cdot \lambda}{D^2} \cdot n \cdot (n - m)$$

m - номер порядка брэгговского отражения для рассеянной и падающей волн, причем знак «+» используется для рассеянной волны, а знак «-» для падающей.

Отсюда, если $\alpha_i = \frac{m \cdot \lambda}{2 \cdot D}$, то $\alpha_f = \frac{\lambda}{2 \cdot D} (2 \cdot n - m)$

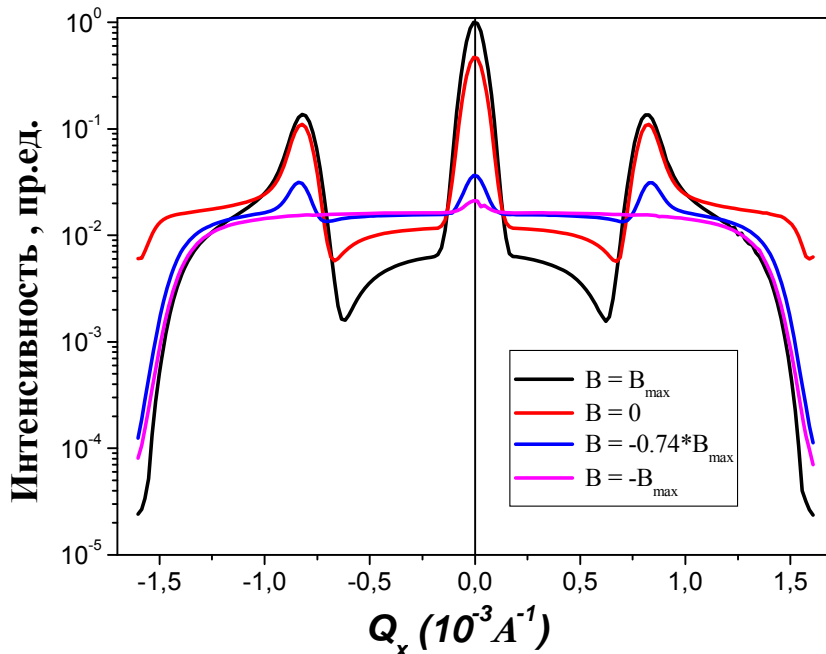
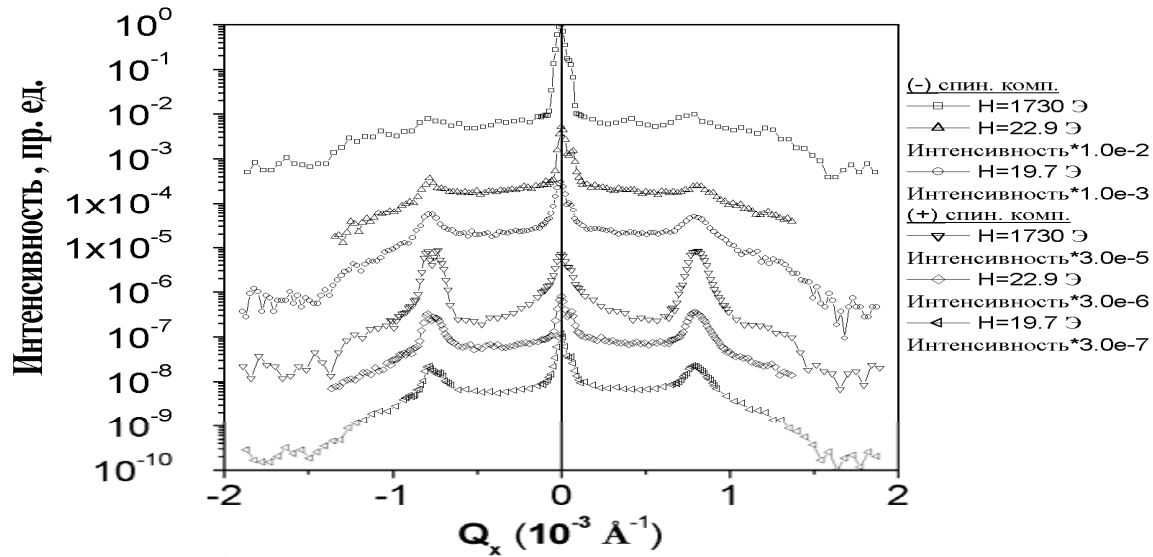
Справедлива и обратная ситуация.

В результате, можно сделать важный вывод: **когда на «обычной» квазибрэгговской полосе выполняются условия Брэгга для падающей волны, то обязательно выполняются условия Брэгга и для рассеянной волны, но другого порядка.**

Это особые точки на «обычных» квазибрэгговских полосах. В них происходят значительные изменения интенсивности диффузного рассеяния, т.е. в этих точках наблюдаются **локальные экстремумы** в распределении интенсивности диффузного рассеяния.

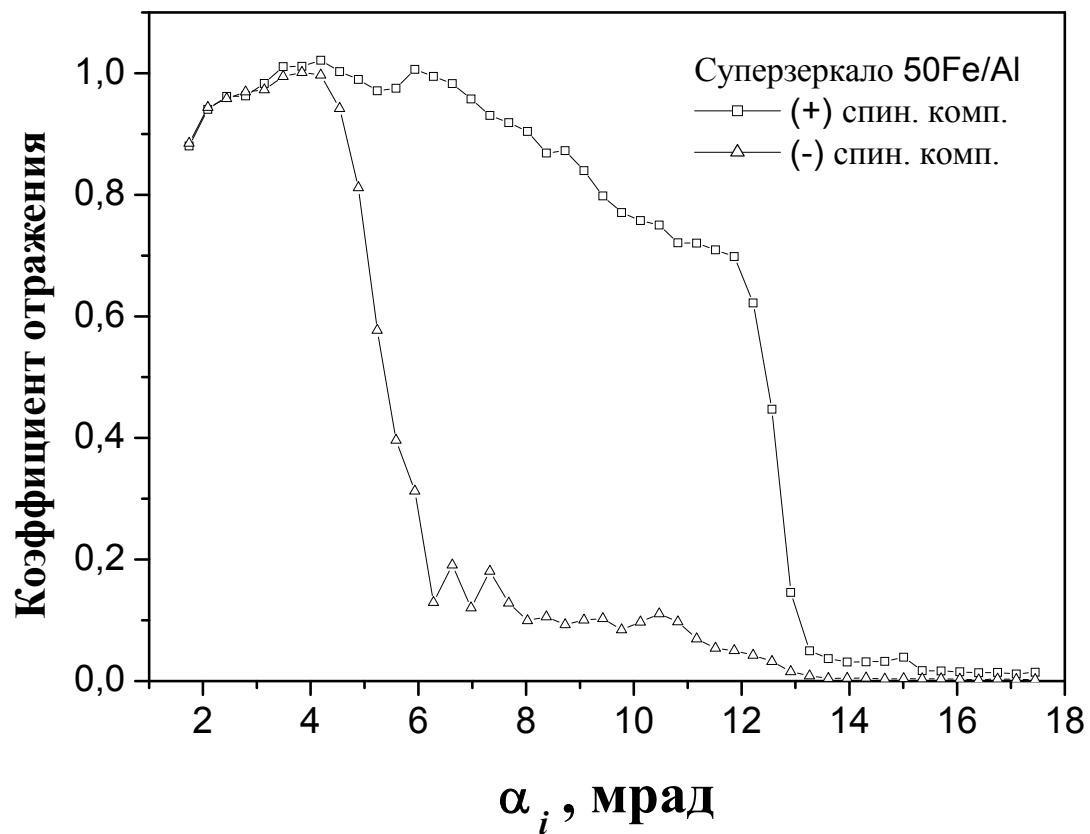
Магнитное диффузное рассеяние

Кривые качания для брэгговского отражения 2-го порядка ($Q_z = 0.068 \text{ \AA}^{-1}$)



Расчётные кривые качания для брэгговского
отражения 2-го порядка ($Q_z = 0.068 \text{ \AA}^{-1}$)

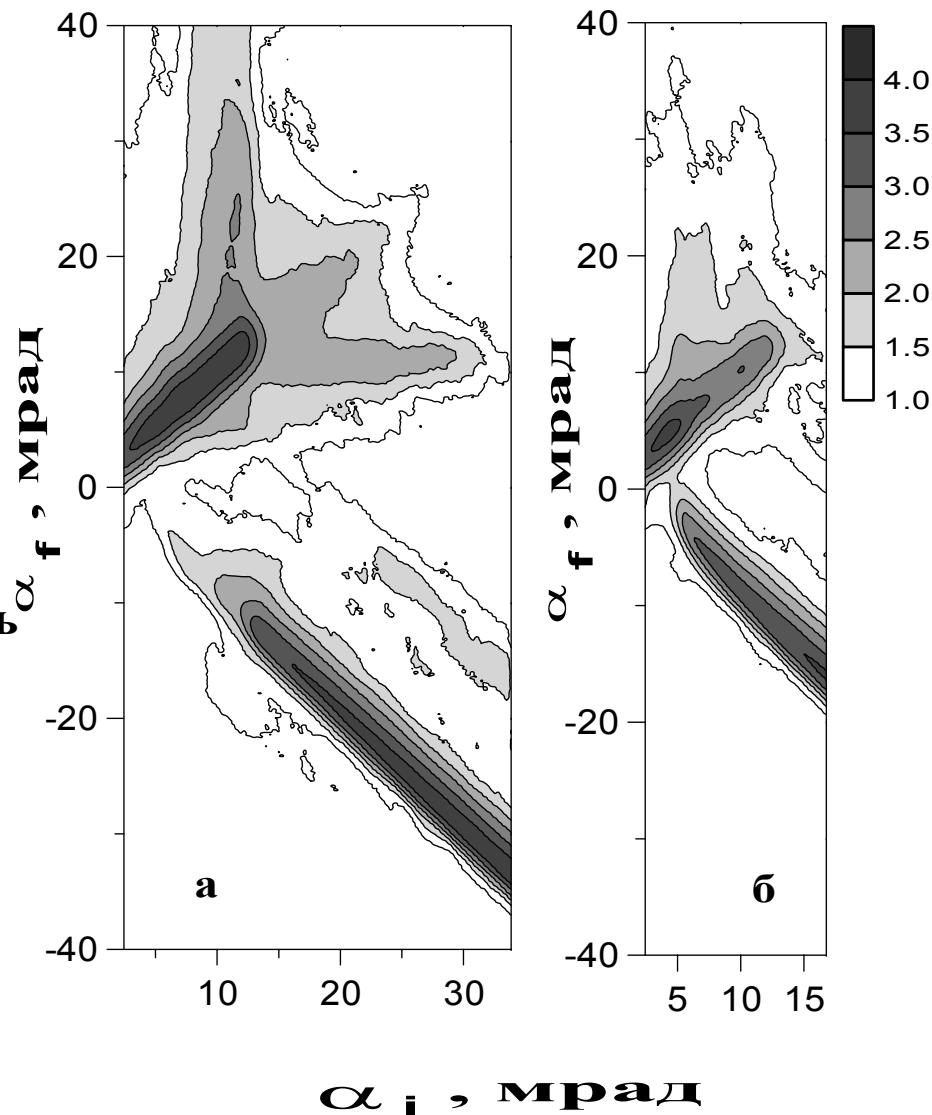
Суперзеркало 50Fe/Al



Апериодическая магнитная многослойная наноструктура 50Fe/Al (суперзеркало)

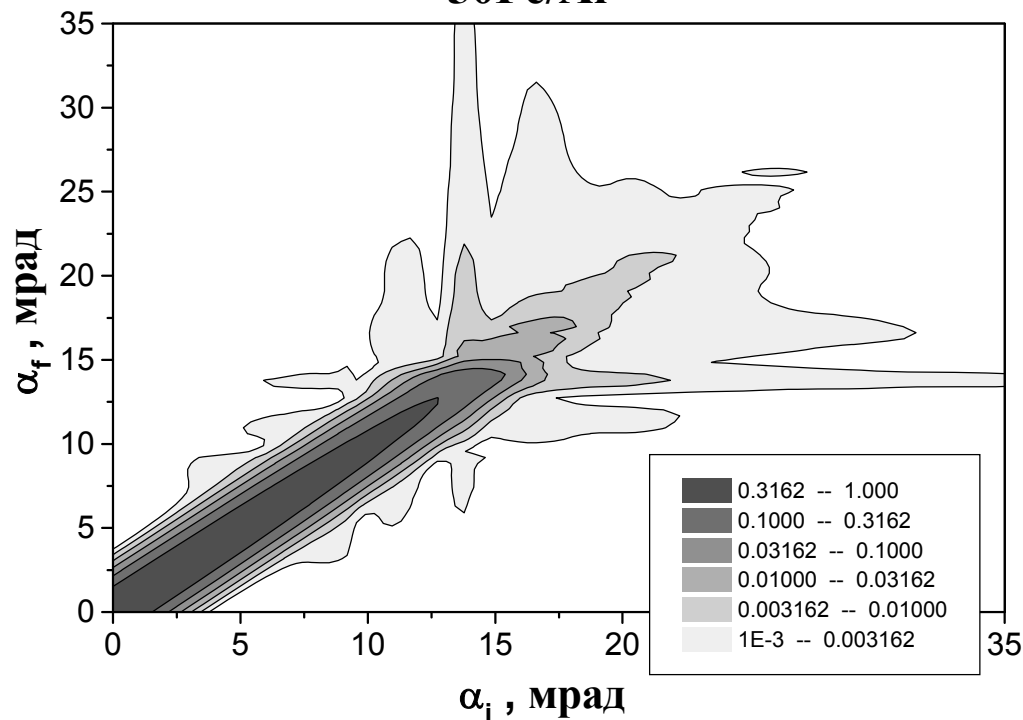
$\alpha_{s+} \cong 12.7 \text{ мрад}$
 $\alpha_{s-} \cong 5 \text{ мрад}$

Супер-Ионеда рассеяние вдоль
 линий $\alpha_i \approx \alpha_{s+}$ и $\alpha_f \approx \alpha_{s+}$



Контурные карты распределения зеркальной и незеркальной интенсивностей в логарифмическом масштабе для (+) (рис.а) и (-) (рис.б) спиновых компонент нейтронов, рассеянных на суперзеркале 50Fe/Al. α_i и α_f - входной и выходной углы скольжения, соответственно.

Апериодическая магнитная многослойная структура 50Fe/Al



Контурная карта расчетного распределения зеркальной и незеркальной интенсивностей для (+) спиновой компоненты нейтронного пучка, рассеянного на суперзеркале 50Fe/Al.

α_i и α_f – входной и выходной углы скольжения, соответственно.

Параметры, использованные при построении контурной карты, следующие: *r.m.s.* шероховатость $\sigma = 40 \text{ \AA}$, латеральная корреляционная длина $\xi_l = 500 \text{ \AA}$, глубина конформности структуры $L_0 = 150 \text{ \AA}$, показатель экспоненты шероховатости $h = 0.5$.

SM 50Fe/Al

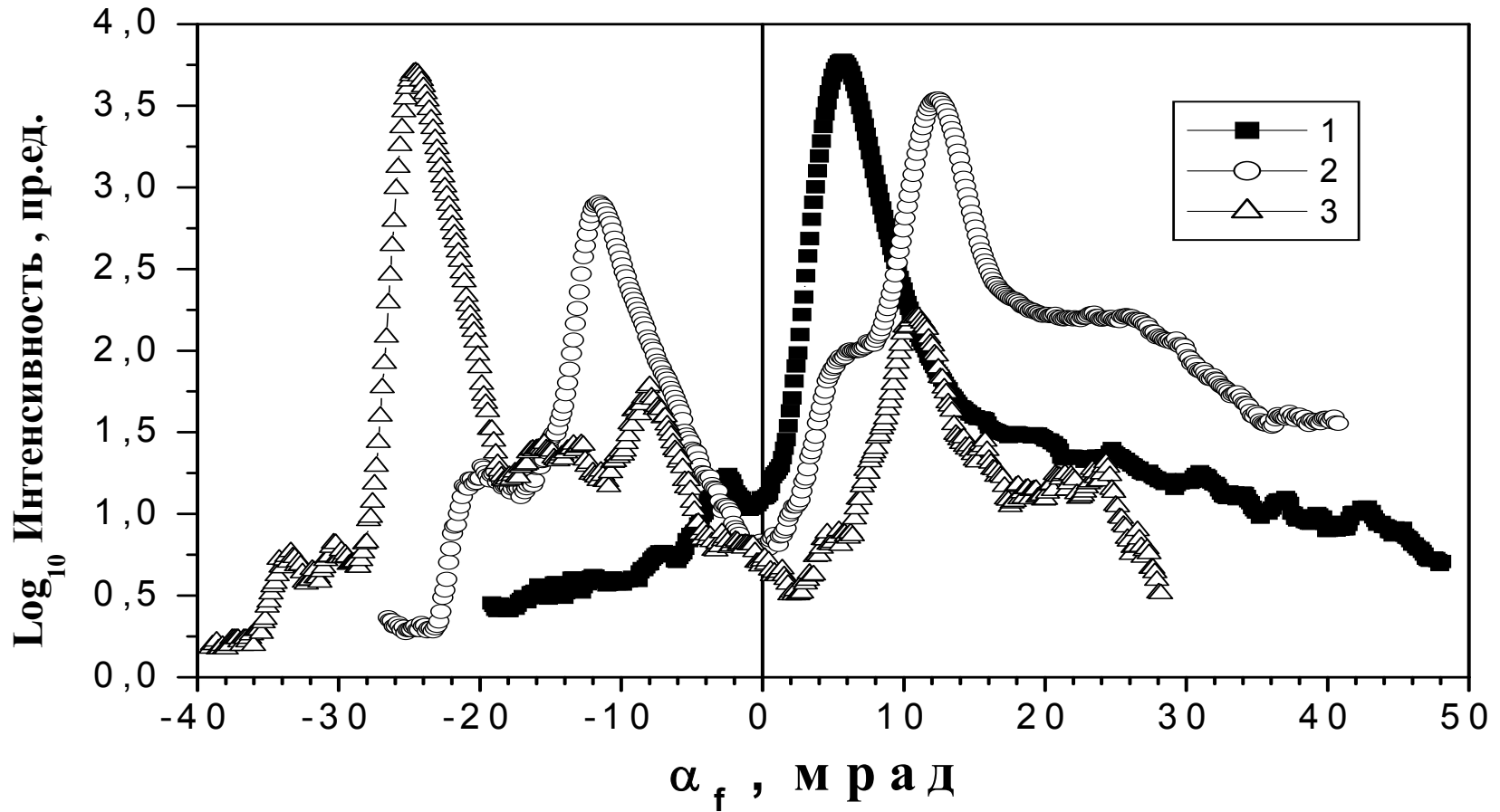


Рис. Зависимости логарифма интенсивности рассеянного пучка (+) спиновой компоненты на суперзеркале 50Fe/Al

как функции выходного угла скольжения α_f

для трех входных углов скольжения

$$\alpha_i \quad 5.24 \text{ мрад}; \quad 12.56 \text{ мрад} \quad 25.13 \text{ мрад.}$$