

Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова

Физический факультет

На правах рукописи

Смехова Алевтина Геннадьевна

**РАЗВИТИЕ МЕТОДА РЕЗОНАНСНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО
ОТРАЖЕНИЯ ВБЛИЗИ $L_{2,3}$ КРАЕВ ПОГЛОЩЕНИЯ
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МАГНИТНЫХ МУЛЬТИСЛОЕВ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2006

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Синхротронные источники рентгеновского излучения сделали возможными исследования спектров резонансного рентгеновского поглощения и рассеяния вблизи краев поглощения практически любых атомов с хорошим энергетическим разрешением, что обеспечило развитие целого ряда новых методов исследования структуры и свойств самых разных объектов: от наноструктур до биологических макромолекул. Основной особенностью таких спектров является их зависимость от состояния внешних электронных оболочек резонансных атомов, что определяет чувствительность резонансных спектров поглощения и рассеяния рентгеновского излучения к электронной структуре, химическим связям, симметрии ближайшего окружения и, что наиболее привлекательно, к магнитным параметрам исследуемого атома. Таким образом, начиная с середины 90х годов прошлого века, рентгеновское излучение стало мощным новым методом исследования магнетизма. Выдающейся особенностью нового метода является его элементная селективность, а также возможность исследовать парциальные вклады в суммарный магнитный момент атома, что существенно выделяет новый метод из ряда других методов исследования магнетизма (магнитометрии, магнитооптики, нейтронографии и др.). К настоящему времени в рентгеновском диапазоне длин волн наблюдались все известные эффекты магнитооптики (МО): круговой и линейный дихроизм (XMCD и XMLD), фарадеевское вращение, эффект Фохта, магнитооптический эффект Керра в меридиональной, экваториальной и полярной геометриях (L-MOKE, T-MOKE и P-MOKE). Однако от магнитооптики видимого света магнитооптика рентгеновского излучения отличается возможностью сочетать исследование магнитных эффектов со структурными исследованиями в условиях дифракции на кристаллических структурах или зеркального отражения. В последнем случае возникает возможность исследовать магнитные свойства селективно по глубине или по периоду многослойных пленок.

Новый метод требует адекватного теоретического описания

наблюдаемых эффектов. В хорошо развитой теории рентгеноструктурного анализа, кинематической и динамической теории дифракции и полного внешнего отражения возникли новые неисследованные проблемы, связанные в первую очередь с появлением тензорных свойств у восприимчивости среды для областей энергий излучения вблизи краев поглощения. Наиболее близкой теорией для описания новых эффектов в рентгеновской оптике оказалась теория мессбауэровской дифракции и полного отражения, поскольку для ядерно-резонансного рассеяния существенна анизотропия взаимодействия излучения с резонансной средой. Кроме необходимой адаптации развитой теории отражения от анизотропной мультислойной среды к описанию эффектов, специфичных в рентгеновской оптике резонансного рассеяния, следует учесть, что теория мессбауэровского отражения использовала приближения, обусловленные скользящей геометрией эксперимента. Для случая рентгеновского резонансного отражения вблизи краев поглощения это приближение не работает, поскольку, например, для $L_{2,3}$ -краев поглощения переходных металлов эффекты отражения наблюдаются уже при больших углах скольжения.

Цель работы. Развитие теории отражения рентгеновского резонансного излучения от магнитоупорядоченных многослойных пленок. Теоретическое исследование магнитооптических эффектов в геометрии отражения в рентгеновской оптике и оптимизации условий их наблюдения. Изучение возможностей извлечения информации о магнитной и электронной структуре из резонансных спектров зеркального и брэгговского отражения вблизи краев поглощения и возможностей восстановления спектральных зависимостей компонент тензора восприимчивости в резонансной области.

Научная новизна работы. В работе впервые развита в самом общем виде теория рентгеновской рефлектометрии для анизотропных и гиротропных мультислоев, базирующаяся на тензорных свойствах резонансной восприимчивости среды. Использование формализма матриц распространения, планарных тензоров импеданса и нормальной рефракции позволило получить

общее решение для матриц отражения в наиболее компактном виде и максимально сократить время счета спектров отражения.

В рамках общего формализма проведено теоретическое рассмотрение явлений рентгеновской магнитооптики: меридионального, экваториального и полярного эффекта Керра. Выявлены оптимальные условия для исследования магнитных компонент тензора восприимчивости в различных геометриях эксперимента.

Впервые с использованием точного расчета коэффициента отражения от анизотропных периодических структур проанализирована связь смещения брэгговского пика с усредненными по периоду структуры компонентами тензора восприимчивости в геометрии меридионального эффекта Керра в динамическом и кинематическом приближении теории дифракции. Показано, что при малых углах скольжения, когда круговые поляризации можно считать собственными поляризациями задачи, могут быть восстановлены реальные части как диагональных, так и недиагональных компонент тензора восприимчивости. При больших углах, вследствие смешивания поляризаций при многократном переотражении в системе анизотропных слоев, по смещению брэгговского угла могут быть приближенно определены только диагональные компоненты тензора.

Рассчитанные по точной теории спектры резонансного брэгговского отражения обнаружили драматическое изменение формы в зависимости от изменения угла в окрестности угла Брэгга, числа повторений периода в структуре, а также распределения магнитной компоненты тензора восприимчивости по периоду. Впервые было показано, что вариации магнитного момента атомов в интерфейсах практически не сказываются на спектрах брэгговского отражения первого порядка, но существенно влияют на спектры брэгговского отражения второго порядка.

В работе впервые с целью определения профиля распределения магнитного момента по периоду структуры был проведен анализ экспериментальных спектров брэгговского отражения первого порядка вблизи

$L_{2,3}$ краев поглощения железа, измеренных на станции D1011 синхротрона МАХ-лаб в г. Лунд (Швеция), от образца $[\text{Fe}(6 \text{ ML})/\text{Co}(6 \text{ ML})]_{50}$. Было показано, что магнитный момент атомов Fe в исследованной многослойной структуре увеличен по сравнению с α -железом в центральной части слоев железа, а не только в интерфейсах, как предполагалось ранее.

Практическая значимость работы. На базе общего формализма создан пакет программ, позволяющий рассчитывать спектры и угловые зависимости отражения рентгеновского излучения любой поляризации от произвольной анизотропной мультислойной среды с известными тензорами восприимчивости слоев. Этот пакет программ размещен на сайте КФТТ физического факультета в свободном доступе. Он может быть использован для моделирования планируемого эксперимента и обработки экспериментальных спектров отражения, исследование которых в последнее время интенсивно ведется на многих синхротронах мира. Из рассмотрения различных геометрий эксперимента показано, что для исследования магнитных характеристик среды может эффективно использоваться не только меридиональный эффект Керра, но и экваториальный эффект для р- поляризованного излучения при углах скольжения $\sim 35^\circ$ или $\sim 55^\circ$.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Теория резонансной рентгеновской рефлектометрии, развитая для многослойных структур с учетом наличия магнитных недиагональных компонент тензора восприимчивости.
2. Заключение о возможности усиления в условиях когерентного рассеяния магнитных эффектов в спектрах отражения за счет диагональных компонент тензора восприимчивости.
3. Возможность восстановления диагональных компонент тензора восприимчивости по смещению угла Брэгга при отражении от периодических мультислоев в геометрии меридионального эффекта Керра при больших углах несмотря на эффект смешивания поляризаций излучения при многократном переотражении.

4. Возможность восстановления магнитных (недиагональных) компонент тензора восприимчивости по смещению угла Брэгга при отражении от периодических мультислоев в геометрии меридионального эффекта Керра при не слишком больших углах Брэгга.
5. Вывод о преимущественном влиянии на спектры брэгговского отражения первого порядка магнитных свойств средней части резонансных слоев и незначительной чувствительности этих спектров к магнитным параметрам интерфейсов. Отмечена необходимость привлечения отражений высших порядков для получения информации о магнитных моментах в интерфейсной области.

Апробация работы. Основные результаты работы были доложены на Совещании "Рентгеновская Оптика – 2004" (г. Нижний Новгород, май 2004), конференции Современная химическая физика. XVI симпозиум "Туапсе – 2004" (г. Туапсе, сентябрь 2004), IVth International school on Magnetism and Synchrotron Radiation (Mittelwihr, France, october 2004), Симпозиуме "Нанофизика и Нанoeлектроника" (г. Нижний Новгород, март 2005), XII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам "Ломоносов – 2005" (г. Москва, апрель 2005), 13 th International Congress of Thin Films and 8 th Conference on Atomically Controlled surfaces, interfaces and nanostructures (ACSIN-8/ICTF-13) (Stockholm, Sweden, june 2005), Moscow International Symposium on Magnetism (MISM) (Moscow, june 2005), 2й Всероссийской молодежной школе «Микро- и нанотехнологии и их применение» (г. Черноголовка, декабрь 2005) и Симпозиуме "Нанофизика и Нанoeлектроника" (г. Нижний Новгород, март 2006).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 8 статей, одно учебное пособие (в соавторстве), а также 4 тезисов перечисленных выше конференций и совещаний (всего 13 печатных работ [1 – 13]).

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, основных выводов и содержит 157 страниц, включая 3 приложения, 50 рисунков, и список литературы из 121 наименования.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы исследования, формулируются цели, задачи и новизна работы, выдвигаются защищаемые положения. Представлена структура диссертации, дана краткая характеристика ее основных разделов, апробация и количество публикаций.

Первая глава содержит обзор литературы по теме диссертации. Первая часть обзора посвящена истории возникновения нового метода исследования магнетизма: рентгеновского резонансного магнитного рассеяния. Отмечены главные преимущества нового метода: элементная селективность, возможность разделения спинового и орбитального момента атомов, возможность комбинирования исследований с дифракцией, полным отражением и микроскопией, обеспечивающих разрешение по элементарной ячейке, по глубине и по поверхности с нанометровым разрешением. Далее представлены теоретические и экспериментальные работы, посвященные эффектам рентгеновского магнитного кругового (XMCD) и линейного (XMLD) дихроизма и магнитооптическим эффектам (МО) Фарадея и Керра в рентгеновской области.

Обсуждаются новые возможности метода резонансной магнитной рефлектометрии в структурных исследованиях ультратонких пленок, нанослоев и сверхрешеток; в изучении поведения намагниченности «захороненных» слоев и профилей магнитного момента атомов вблизи межслойных границ раздела в структурах, содержащих магнитный-немагнитный, ферромагнитный-антиферромагнитный и другие последовательности слоев.

Рассматриваются эффекты, возникающие при брэгговском отражении от периодических структур. Приведены результаты восстановления резонансных оптических параметров железа по смещению положения брэгговского максимума при отражении от $[\text{Fe/V}]_n$, селективных по периоду исследований наведенного магнитного момента атомов Ce и La в структурах $[\text{Fe/Ce}]_n$ и $[\text{Fe/La}]_n$, интерфейсов в структуре металл-полуметалл $[\text{Co}_2\text{MnGe/Au}]_n$ и прочие. Обсуждаются проблемы обработки угловых зависимостей и резонансных

спектров зеркального и брэгговского отражения.

Приведены существующие на настоящее время схемы рентгеновских микроскопов и представлены результаты работ, показывающие уникальные возможности по визуализации магнитных доменов.

В заключении обзора кратко представлены используемые подходы в теоретическом описании отражения резонансного рентгеновского излучения от многослойных структур и отмечены некоторые их недостатки, сформулирована актуальность дальнейшего развития теории резонансного магнитного рассеяния, имеющего огромные перспективы в исследованиях различных магнитных структур.

В конце главы приведена постановка задачи.

Во второй главе изложена матричная теория отражения резонансного рентгеновского излучения от анизотропных мультислоев и в рамках единого формализма проанализированы магнитооптические эффекты, возникающие при различных ориентациях намагниченности относительно плоскости рассеяния, – меридиональный, экваториальный и полярный эффекты Керра. Получены приближенные аналитические формулы для собственных показателей преломления, а также для планарных тензоров нормальной рефракции и поверхностного импеданса – важных оптических характеристик слоев, позволяющих обобщить известные рекуррентные соотношения Паррата на анизотропный случай. Проанализированы также наиболее выгодные условия для наблюдения МО эффектов, связанных с особенностями магнитных характеристик исследуемых структур.

В первом параграфе приводится вид тензора диэлектрической проницаемости $\hat{\epsilon}$, описывающий влияние намагниченности среды на взаимодействие рентгеновского излучения со средой [Л1]:

$$\hat{\epsilon} = 1 + A + iB\mathbf{h}^{\times} + C\mathbf{h} \cdot \mathbf{h}, \quad (1)$$

где \mathbf{h} – единичный вектор в направлении намагниченности, \mathbf{h}^{\times} – антисимметричный тензор, дуальный вектору \mathbf{h} , A , B , C – комплексные

функции энергии. Функция B , определяющая недиагональные элементы тензора $\hat{\varepsilon}$, ответственна за магнитное взаимодействие и, в частности, ее мнимая часть характеризует магнитный круговой дихроизм (XMCD). Функция C описывает линейный магнитный дихроизм (XMLD).

Второй параграф посвящен изложению общей теории отражения, в рамках которой могут быть описаны спектры резонансного рентгеновского отражения аналогично теории, развитой в оптике видимого диапазона. Для плоскослоистых сред, которые можно описать тензором диэлектрической проницаемости $\hat{\varepsilon} = \hat{\varepsilon}(z)$, уравнения Максвелла для плоских волн можно преобразовать в уравнения для тангенциальных компонент векторов напряженностей магнитного $\mathbf{H}_t = -[\mathbf{q}[\mathbf{qH}]]$ и электрического $[\mathbf{qE}]$ полей (что удобно, так как они непрерывны на границе раздела сред):

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(z) \\ [\mathbf{qE}(z)] \end{pmatrix} = ik \hat{M}(z) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(z) \\ [\mathbf{qE}(z)] \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где \mathbf{q} – единичный вектор нормали к поверхности (ось z), а M – матрица распространения $\hat{M} = \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{B} \\ \hat{C} & \hat{D} \end{pmatrix}$, блоки которой \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} , \hat{D} являются планарными тензорами.

Если найти общее решение системы (2), то отражение от системы анизотропных слоев можно найти без вычисления собственных волн в каждом слое. Для случая однородного слоя $\hat{\varepsilon}(z) = \text{const}$, $\hat{M}(z) = \text{const}$ это решение имеет вид матричного 4x4-экспоненциала:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(z) \\ [\mathbf{qE}(z)] \end{pmatrix} = \exp(ikz \hat{M}) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(0) \\ [\mathbf{qE}(0)] \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Для системы анизотропных слоев интегральная матрица распространения L находится как произведение матричных экспоненциалов отдельных слоев.

Третий параграф посвящен нахождению тензоров отражения и пропускания системы анизотропных слоев. В общем случае слоисто-

неоднородной среды интегральная матрица распространения \mathbf{L} связывает амплитуды поля на верхней и нижней границах многослойной системы:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(D) \\ [\mathbf{qE}(D)] \end{pmatrix} = \mathbf{L}(D) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(0) \\ [\mathbf{qE}(0)] \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Если поле в слое разделить на волны в прямом и обратном направлениях, то изменение с глубиной волн, распространяющихся в одном направлении, описывается планарным тензором нормальной рефракции \hat{N}_n [Л2] (обобщение показателя преломления на анизотропный случай):

$$\mathbf{H}_t(z) = \exp(ikz \hat{N}_n) \mathbf{H}_t(0), \quad (5)$$

и между тангенциальными компонентами векторов поля может быть введена связь

$$[\mathbf{qE}(z)] = \hat{\gamma} \mathbf{H}_t(z), \quad (6)$$

где планарный тензор $\hat{\gamma}$ называют тензором поверхностного импеданса. Вводя планарные тензоры отражения \hat{r} и пропускания \hat{t} для тангенциальных компонент магнитного поля:

$$\mathbf{H}_t^r = \hat{r} \mathbf{H}_t^o, \quad \mathbf{H}_t^d = \hat{t} \mathbf{H}_t^o, \quad (7)$$

и обозначив через $\gamma^{o,r,d}$ тензоры импеданса во внешней среде и подложке для падающей, отраженной и проходящей волн соответственно, можно найти решение системы (2) в операторном виде. Например, планарный тензор отражения \hat{r} имеет вид:

$$\hat{r} = [\hat{\gamma}^d (\hat{L}_1 + \hat{L}_2 \hat{\gamma}^r) - (\hat{L}_3 + \hat{L}_4 \hat{\gamma}^r)]^{-1} [(\hat{L}_3 + \hat{L}_4 \hat{\gamma}^o) - \hat{\gamma}^d (\hat{L}_1 + \hat{L}_2 \hat{\gamma}^o)], \quad (8)$$

где \hat{L}_i – блоки интегральной матрицы \hat{L} , а индекс « \cdot » соответствует обратному планарному тензору. По известному тензору отражения \hat{r} для тангенциальных компонент несложно определить тензор отражения для полного вектора поля \hat{R} .

Вычисление матричного 4x4- экспоненциала, тензора нормальной рефракции и тензора поверхностного импеданса легко может быть выполнено,

если найдены собственные значения характеристического уравнения четвертой степени $\|\widehat{M} - \eta\| = 0$ для матрицы \widehat{M} .

В четвертом параграфе с использованием тензоров нормальной рефракции $\widehat{N}_n^{(\pm)}$ (5) для распространяющихся в прямом и обратном направлении волн выводятся матричные рекуррентные соотношения для планарных тензоров отражения \widehat{R}_n (для тангенциальных компонент магнитного поля), обобщающие рекуррентные соотношения Паррата на анизотропный случай:

$$\widehat{R}_n = \mathbf{r}_{n-1,n} + \mathbf{t}'_{n-1,n} \mathbf{r}'_{n-1,n}{}^{-1} \widehat{W} [(1 - \widehat{W})^{-1}] \mathbf{t}_{n-1,n}, \quad (9)$$

где $\mathbf{r}_{n-1,n}$ и $\mathbf{t}_{n-1,n}$ – планарные тензоры однократного отражения и пропускания на границе между слоями $(n-1)$ и (n) , $\mathbf{r}'_{n-1,n}$ и $\mathbf{t}'_{n-1,n}$ – те же тензоры отражения и пропускания для волны в обратном направлении,

$$\widehat{W} = \mathbf{r}'_{n-1,n} e^{-ikd \widehat{N}_n^{(-)}} \widehat{R}_{n+1} e^{ikd \widehat{N}_n^{(+)}}. \quad (10)$$

Расчет коэффициента отражения с помощью рекуррентной формулы (9) использует операции только с 2x2-матрицами, что ускоряет вычисления. Однако этот алгоритм менее эффективен, чем матричный, применительно к периодическим средам, так как использование степеней 4x4 интегральной матрицы распространения \mathbf{L} позволяет более быстро вычислять интегральную матрицу распространения для всей структуры в целом и находить интересующий матричный коэффициент отражения.

В пятом параграфе анализируется меридиональный эффект Керра, когда намагниченность лежит в плоскости поверхности и в плоскости рассеяния; матрица распространения \mathbf{M} в этом случае имеет вид:

$$\widehat{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 + A + C & 0 \\ \frac{iB \cos \vartheta}{1 + A} & 0 & 0 & A + \sin^2 \vartheta - \frac{B^2}{1 + A} \\ \frac{A + \sin^2 \vartheta}{1 + A} & 0 & 0 & -\frac{iB \cos \vartheta}{1 + A} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

и ее собственные значения, найденные в первом приближении:

$$\eta_{1,2,3,4} \cong \pm \sqrt{\sin^2 \vartheta + A \pm \frac{B \cos \vartheta}{1 + A}}. \quad (12)$$

В скользящей геометрии, когда можно пренебречь различием отражения для s- и p- поляризованного падающего излучения, а направления волновых векторов для падающей и отраженной волн практически совпадают с направлением намагниченности ($\cos \vartheta \approx 1$), круговые поляризации можно считать собственными волнами тензора отражения от полубесконечной среды. Коэффициенты отражения для этих собственных поляризаций будут иметь вид:

$$R_+ \cong \frac{\sin \vartheta - \sqrt{\sin^2 \vartheta + A + B}}{\sin \vartheta + \sqrt{\sin^2 \vartheta + A + B}}, \quad R_- \cong \frac{\sin \vartheta - \sqrt{\sin^2 \vartheta + A - B}}{\sin \vartheta + \sqrt{\sin^2 \vartheta + A - B}}, \quad (13)$$

а различие в интенсивностях отраженных право- и лево- кругополяризованных волн равно:

$$|R_+|^2 - |R_-|^2 \cong \frac{\operatorname{Re} A \operatorname{Re} B + \operatorname{Im} A \operatorname{Im} B}{4 \sin^4 \vartheta}. \quad (14)$$

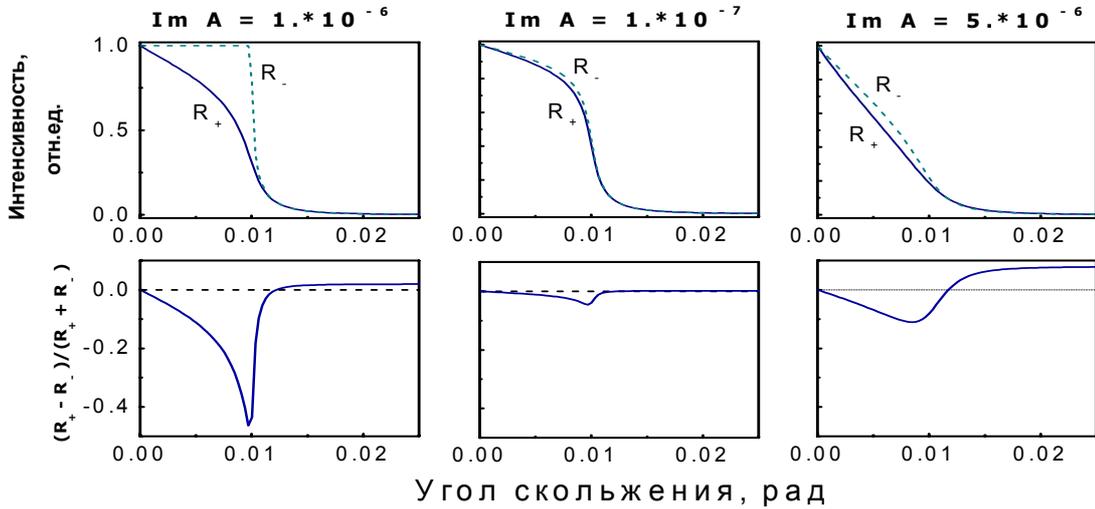


Рис. 1. Коэффициенты отражения (верхний ряд) и асимметрия отражения (нижний ряд) право- и лево- кругополяризованных волн, рассчитанные в функции угла скольжения вблизи критического угла для полубесконечной среды. Для разных столбцов изменяется только мнимая часть диагональной компоненты восприимчивости, но эффект асимметрии существенно меняется. Остальные параметры фиксированы ($\operatorname{Re} A = -10^{-4}$, $\operatorname{Re} B = \operatorname{Im} B = 10^{-6}$)

Как следует из (14), эффект кругового магнитного дихроизма в отражении определяется произведением реальных частей диагональных и недиагональных компонент тензора восприимчивости и произведением их мнимых частей. Таким образом, проявление магнитных эффектов в отражении может усиливаться или подавляться за счет немагнитной компоненты (см. рис. 1).

Для углов падения $\approx \pi/2$ ($\cos \vartheta \approx 0$) собственными поляризациями тензора отражения от полубесконечной среды $\hat{\Gamma}$ становятся линейные s- и p-поляризации электрического поля (рис. 2). Коэффициенты отражения для собственных поляризаций имеют вид:

$$R_s \cong \frac{1 - \sqrt{1+A}}{1 + \sqrt{1+A}}, \quad R_p \cong \frac{2(1+A)(1 - \sqrt{1+A}) + C(1 - 2\sqrt{1+A})}{2(1+A)(1 + \sqrt{1+A})}. \quad (15)$$

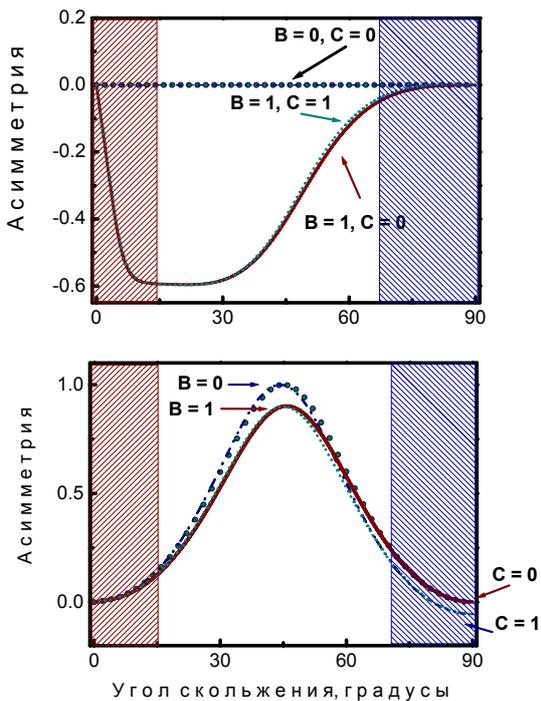


Рис. 2. Асимметрия отражения круговых (сверху) и линейных (снизу) поляризаций (L-МОКЕ)

Чувствительной к магнитной добавке является p-компонента электрического поля, и в отражении наблюдается эффект линейного дихроизма. При отсутствии функции C различия в коэффициентах отражения для s- и p-поляризаций не будет.

В остальной области углов кругополяризованные волны уже не являются собственными – происходит смешивание поляризаций в отражении, и собственными поляризациями будут эллиптические поляризации излучения, и их параметры существенно меняются с энергией вблизи резонанса.

В этом случае расчеты тензоров отражения (поляризационных матриц отражения) проводятся по общим формулам, приведенным в Гл.2, §5.

В шестом параграфе рассмотрен экваториальный эффект Керра, когда намагниченность перпендикулярна плоскости рассеяния. В этой геометрии все

блоки матрицы распространения являются диагональными матрицами, поэтому собственными волнами становятся s- и p- поляризации излучения и не происходит их смешивания. Задача о распространении, преломлении и отражении в этом случае может решаться в скалярном виде отдельно для каждой из собственных поляризаций излучения.

Для s- поляризации собственные значения матрицы \mathbf{M} и связь между тангенциальными компонентами электрического и магнитного поля ($E_x = \gamma_s H_y$) имеют вид:

$$\eta_{1,2} = \pm \sqrt{\sin^2 \vartheta + A + C}, \quad \gamma_s = \pm \frac{1}{\sqrt{\sin^2 \vartheta + A + C}}, \quad (16)$$

и коэффициент отражения от полубесконечной среды для s- поляризации находится по формуле Френеля:

$$R_s = \frac{\sin \vartheta - \sqrt{\sin^2 \vartheta + A + C}}{\sin \vartheta + \sqrt{\sin^2 \vartheta + A + C}}. \quad (17)$$

Для p- поляризации: $-E_y = \gamma_p H_x$, и аналогичные величины выражаются как:

$$\eta_{1,2} \cong \pm \sqrt{\sin^2 \vartheta + A}, \quad \gamma_p \cong \pm \frac{\sqrt{\sin^2 \vartheta + A}}{1 + A} + iB \cos \vartheta. \quad (18)$$

Существенно, что для этой поляризации фаза волны в среде не зависит от магнитной добавки B или C , но связь между тангенциальными компонентами электрического и магнитного поля γ_p зависит от величины и, что очень существенно, знака (!) намагниченности среды (см. рис. 3). Это приводит к известной зависимости коэффициента отражения от намагниченности среды (экваториальный эффект Керра):

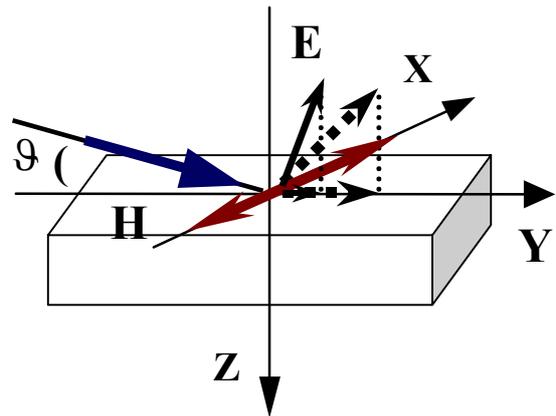


Рис 3. Намагниченность среды M слегка поворачивает вектор E_p вокруг H , и тангенциальная составляющая E_p получает добавку $\pm iB \cos \vartheta$ в зависимости от знака M

$$R_p \cong \frac{(1+A)\sin\vartheta - \sqrt{A + \sin^2\vartheta}}{(1+A)\sin\vartheta + \sqrt{A + \sin^2\vartheta}} - \frac{2iB\cos\vartheta(1+A)\sin\vartheta}{((1+A)\sin\vartheta + \sqrt{A + \sin^2\vartheta})^2}. \quad (19)$$

Именно это выражение использовалось в работах [Л3, Л4]. Первое слагаемое – это обычный френелевский коэффициент отражения для р- поляризованного излучения. Второе слагаемое описывает влияние намагниченности на коэффициент отражения.

Рассчитанный эффект для энергии 707.4 эВ (L_3 край поглощения железа) представлен на рис. 4 в функции угла скольжения. Расчет для $A = 0.00657 + i 0.01575$; величина $B = -0.00214 - i 0.00461$ [Л5] варьировалась с помощью множителя K . Видно, что исследование экваториального эффекта Керра в рентгеновском диапазоне наиболее эффективно вблизи углов $\sim 35^\circ$ и $\sim 55^\circ$.

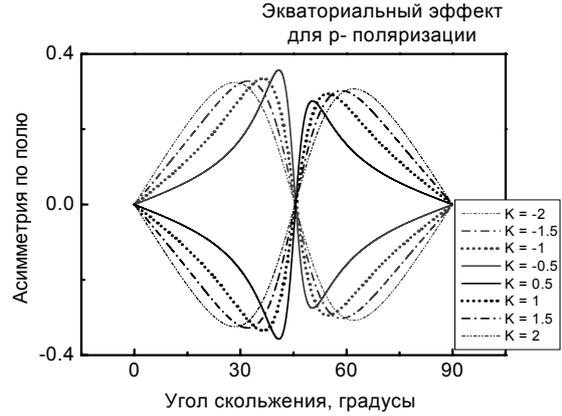


Рис. 4. Асимметрия коэффициента отражения р- поляризованной волны от полубесконечной среды (железо) по знаку намагниченности среды

Седьмой параграф посвящен полярному эффекту Керра, когда намагниченность перпендикулярна поверхности образца. Приближенные собственные значения матрицы распространения имеют вид:

$$\eta_{1,3} \cong \pm \sqrt{\sin^2\vartheta + A + C(1+A)}, \quad \eta_{2,4} \cong \pm \sqrt{\sin^2\vartheta + A}. \quad (20)$$

Тензор поверхностного импеданса вблизи нормального падения выражается как (при пренебрежении функцией C):

$$\hat{\gamma}_{\pi/2} \cong \frac{1}{\sqrt{1+A}} \begin{pmatrix} 1 & \frac{-iB}{2(1+A)} \\ \frac{iB}{2(1+A)} & 1 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Собственными поляризациями этого тензора, как и собственными поляризациями тензора отражения от полубесконечной среды $\hat{\Gamma}$, являются круговые поляризации излучения (аналогично случаю меридионального

эффекта Керра при малых углах). Коэффициенты отражения этих поляризаций выражаются как

$$R_{\pm} \cong \frac{\sqrt{1+A} - (1 \pm \frac{B}{1+A})}{\sqrt{1+A} + (1 \pm \frac{B}{1+A})} \cong \frac{1}{2} A \mp B. \quad (22)$$

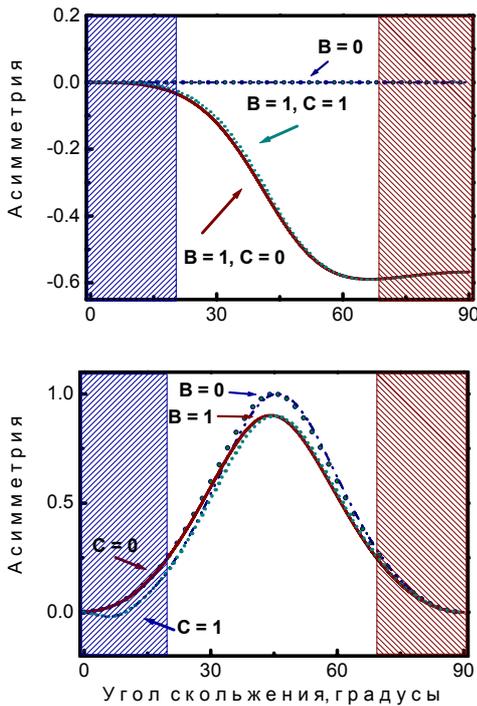


Рис. 5. Асимметрия отражения от полубесконечной среды круговых (сверху) и линейных (снизу) поляризаций (параметры среды такие же, как для рис. 4)

В области больших углов эффект кругового дихроизма достигает 60%, а магнитная добавка С незначительно влияет на коэффициенты отражения излучения как круговых, так и линейных поляризаций (рис. 5).

В области малых углов скольжения имеет место только эффект линейного дихроизма (см. рис. 5). При этом влияние функции С заметно сказывается только на отражении р-компоненты электрического поля.

В промежуточной области углов, как и в случае меридионального эффекта Керра, собственными поляризациями отражения являются эллиптические поляризации, и решение задачи на отражение проводится в тензорном виде без приближений.

Третья глава посвящена описанию созданного пакета компьютерных программ [*] для расчетов коэффициентов отражения и их поляризационных зависимостей на основе общей теории, изложенной во второй главе, численному моделированию спектров резонансного отражения и угловых зависимостей отражения поляризованного рентгеновского излучения, а также интерпретации экспериментальных спектров резонансного магнитного

брэгговского отражения вблизи $L_{2,3}$ края поглощения железа от периодической сверхструктуры $[\text{Fe} (6 \text{ ML})/\text{Co} (6 \text{ ML})]_{50}$, измеренных на синхротроне MAX-lab в г. Лунд (Швеция).

Первый параграф содержит сведения об информационном файле, описывающем модель структуры, которая используется в программе при вычислении матрицы отражения поляризованного излучения. В нем задаются: число слоев в рассматриваемой структуре, начальный и конечный номера слоев периода, число повторений периода, энергетический интервал для вычисления спектра в эВ, начальный угол скольжения, шаг и число точек для вычисления угловых зависимостей для каждой заданной энергии падающего излучения. Далее идет описание каждого из слоев структуры: название файла с энергетическими зависимостями компонент тензора восприимчивости, его толщина, варьируемые коэффициенты при каждой из компонент тензора (1), азимутальный и полярный углы намагниченности, а также параметры интерфейса: толщина, размерный параметр, вид моделирующей функции (возможные функции: линейная, Гаусс и арктангенс) и число ступенек для разбиения интерфейса. Последний параметр в каждом из слоев описывает изменение величины магнитного момента на атом вблизи интерфейса. Результирующая вариация недиагональных компонент включает изменение магнитного момента в интерфейсах в существенно сглаженном виде из-за уменьшения плотности резонансных атомов.

Во втором параграфе собраны литературные данные для комплексных функций $A(E)$, $B(E)$ и $C(E)$ в окрестности $L_{2,3}$ краев поглощения железа, полученные различными методами (из дихроизма поглощения, по фарадеевскому вращению, по сдвигу и ширине брэгговского максимума) для различных образцов: чистого железа, сверхрешеток Fe/V, Fe/Cr и Fe/C. Небольшие различия этих эмпирических зависимостей могут быть объяснены как различием исследуемых веществ, так и погрешностями в калибровке энергетической шкалы. Для дальнейших расчетов спектров отражения мы выбрали функции из работы [Л5].

Третий параграф посвящен исследованию возможности восстановления компонент тензора $\hat{\varepsilon} = 1 + \hat{\chi}$ из смещения положения брэгговского максимума. Рассмотрение проводится в рамках скалярного приближения теории отражения. Набег фазы волны при двукратном прохождении периода выражается как

$$2\Phi(\vartheta) \equiv 2 \frac{2\pi}{\lambda} \int_0^D \sqrt{\sin^2 \vartheta + \chi(z)} dz, \quad (23)$$

где D – толщина периода, λ – длина волны излучения. В кинематическом приближении мы предполагаем, что положение брэгговского максимума определяется соотношением $\text{Re}\Phi = \pi m$. Отсюда следует возможность восстановить энергетическую зависимость реальной части восприимчивости резонансного слоя по смещению брэгговского максимума ϑ_M^{kin} :

$$\bar{\delta} = \left(\sin \vartheta_M^{\text{kin}} - \frac{m\lambda}{2D} \right) \sin \vartheta_M^{\text{kin}}. \quad (24)$$

$\bar{\delta} = \gamma \delta_R + (1 - \gamma) \delta_N$, где δ_N – преломление в нерезонансном слое, δ_R – в резонансном, γ – отношение толщины резонансного слоя к D . С некоторым приближением (когда углы отражения не слишком большие, так что отличаем s- и p- поляризаций, а также смешиванием поляризаций при многократных отражениях можно пренебречь) при рассмотрении магнитных сред эту же формулу можно использовать с учетом магнитных поправок для двух круговых поляризаций излучения.

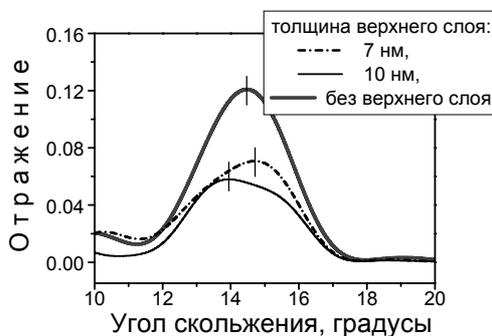


Рис. 6. Иллюстрация искажения брэгговского максимума из-за наличия верхнего слоя. Расчет для структуры $[Fe/Co]_5$ (период 3.38 нм), $E = 706$ эВ

Положение брэгговских пиков ϑ_M^{kin} на рассчитанных кривых отражения для структур с небольшим числом периодов может значительно отличаться от определенных по формуле (24) при наличии верхнего слоя. Отражение на первой границе вакуум/среда и от подложки также может исказить результат восстановления восприимчивости резонансного слоя.

Лучшее совпадение получается при сравнительно большом числе периодов, когда отражение от «нерегулярных» поверхностей раздела (первой границы и подложки), искажающее форму брэгговского пика, относительно мало.

Однако для очень большого числа периодов простейшее выражение для положения брэгговского максимума (24) также не работает. Фазу отраженной волны искажает комплексность коэффициента отражения на каждой границе (это имеет место в поглощающих средах), когда суммарный вклад отраженных волн становится значительным. С учетом последнего обстоятельства восстановление восприимчивости следует проводить по формуле [Л6]:

$$(\delta \pm \Delta\delta)_R = (1/W)((\sin \vartheta_M^{\text{din}} - m\lambda/2D)\sin \vartheta_M^{\text{din}} - \delta_N) + \delta_N, \quad (25)$$

$$W = \gamma - \frac{((\beta \pm \Delta\beta)_R - \beta_N)\sin^2(\pi\gamma)}{m^2\pi^2\bar{\beta}}, \quad (26)$$

где $\bar{\beta} = (\gamma(\beta \pm \Delta\beta)_R + (1 - \gamma)\beta_N)$, $2\beta = \text{Im}A$, $2\Delta\beta = \text{Im}B \cos \vartheta$.

Для тестирования алгоритма восстановления реальной части восприимчивости резонансного слоя мы провели вычисление кривых отражения для периодической структуры с известными функциями $\text{Re} A$ и $\text{Re} B$ в резонансном и нерезонансном слое по алгоритму, изложенному в предыдущей главе, определили точное положение брэгговского максимума (аппроксимируя его форму вблизи максимума лоренцевской кривой) и вычислили $\text{Re} A$ и $\text{Re} B$ по формулам (24) и (25). Рассматривалось брэгговское отражение первого порядка от структуры $[\text{Fe}/\text{Co}]_N$ в окрестности $L_{2,3}$ краев поглощения железа (энергия фотонов $690 \div 730$ эВ). Для расчетов мы использовали энергетические зависимости для компонент тензора восприимчивости резонансного слоя железа из [Л5] (см.п.1) и восприимчивость нерезонансного слоя Co из таблиц Хенке.

Результаты такого компьютерного эксперимента показали, что $\text{Re} A$ восстанавливается неплохо, хотя полного совпадения ни в кинематическом, ни в динамическом приближениях теории отражения получить не удалось,

особенно вблизи резонанса, где мнимая часть χ значительно возрастает (рис. 7).

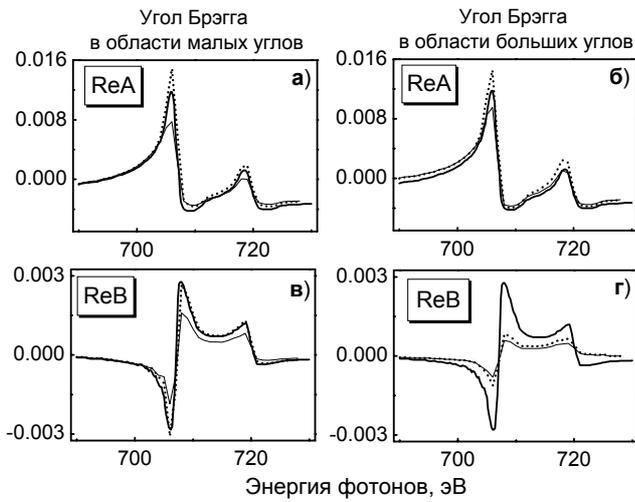


Рис. 7. Восстановление исходных функций $Re A$, $Re B$ [15] (жирные линии) по рассчитанному положению брэгговского максимума с использованием соотношений (24) (тонкие линии) и (25) (пунктирные линии). Расчет для структуры $[Fe/Co]_{50}$ с разным периодом, дающим брэгговский максимум в области малых ($D=3.38$ нм, $\vartheta_M \approx 15^\circ$) и больших ($D=1.08$ нм, $\vartheta_M \approx 54^\circ$) углов (а, в и б, г)

Эта же процедура оказалась менее успешной для магнитной (недиагональной) компоненты тензора восприимчивости, по крайней мере для больших углов скольжения, где эффект смешивания поляризаций становится существенным (рис. 7г), и скалярное приближение не работает.

В четвертом параграфе рассмотрена возможность восстановления по спектрам брэгговского отражения не только средних по периоду оптических и магнитных параметров, но и их распределения по периоду структуры. Количественный анализ формы линии спектров отражения при различных углах скольжения вблизи угла Брэгга достаточно сложен, поэтому мы рассматривали интегральную интенсивность брэгговского отражения. Непосредственный расчет продемонстрировал (см. рис. 8), что асимметрия этой величины по знаку круговой поляризации практически не чувствительна к изменениям магнитного момента в интерфейсной области для брэгговского максимума первого порядка, но приводит к существенным отличиям интегральной интенсивности брэгговского максимума второго порядка.

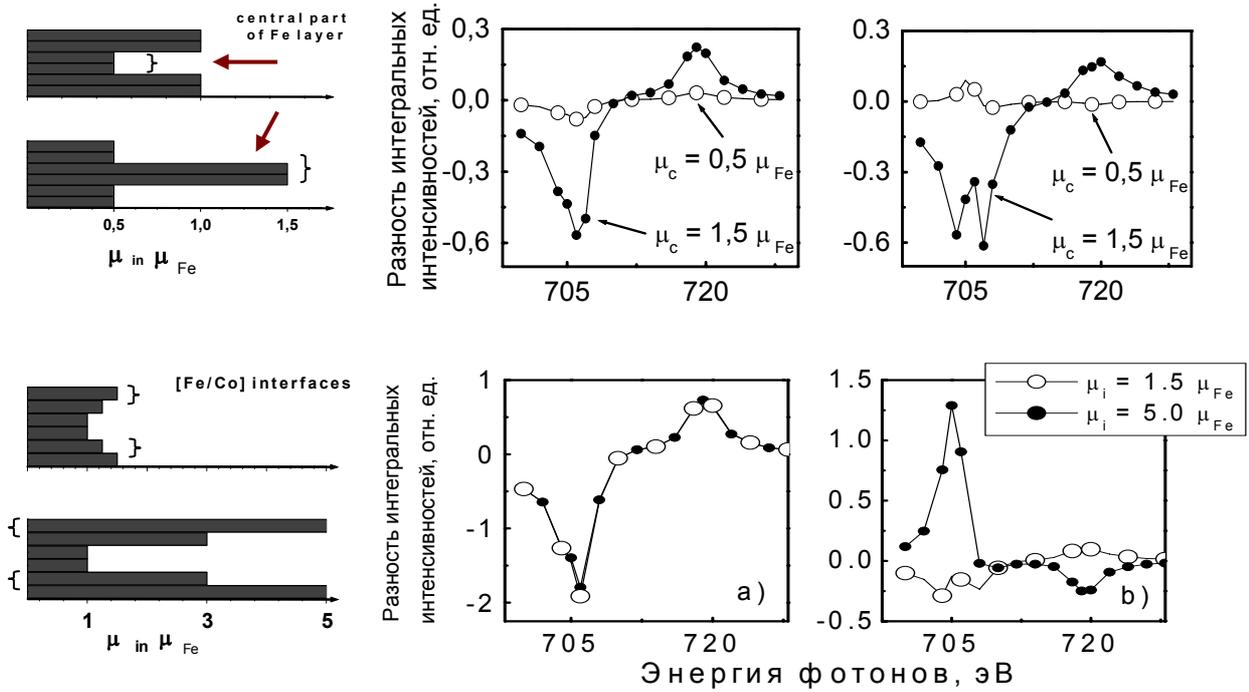


Рис. 8. Разность нормированных интегральных интенсивностей для право- и лево-кругополяризованного излучения в окрестности первого (слева) и второго (справа) брэгговского максимума для структуры $[Fe/Co]_{50}$ с периодом 3.38 нм для энергий вблизи $L_{2,3}$ краев поглощения железа. Расчеты проведены для различных величин магнитного момента в центре μ_c и в интерфейсах μ_i резонансного слоя железа

В пятом параграфе теоретические подходы, развитые в работе, применены к обработке экспериментальных данных. Измерения проводились с образцом $[Fe(6ML)/Co(6ML)]_{50}$ (период 1.08 нм) в окрестности первого брэгговского максимума на синхротроне в г. Лунд, Швеция (В. Lindgren, G. Andersson, M. Bjork) (рис. 9).

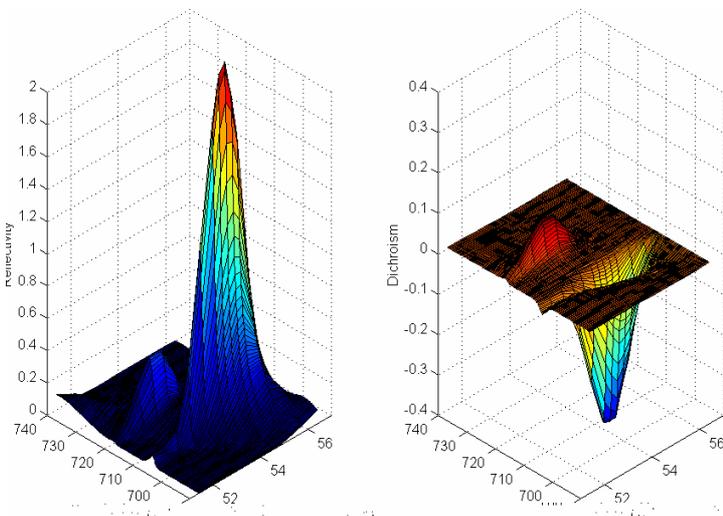


Рис. 9. Экспериментальные спектры резонансного брэгговского отражения вблизи $L_{2,3}$ краев поглощения Fe от $[Fe(6ML)/Co(6ML)]_{50}$: сумма (слева) и разность (справа) отражений для двух круговых поляризаций излучения. Эффект «дихроизма» в отражении оказался очень большим

Первым шагом в обработке этих экспериментальных данных было восстановление $\text{Re } A$ по положению брэгговского максимума ϑ_M^{exp} . Результат, представленный на рис. 10, качественно соответствует функции $\text{Re } A$ из работы [Л5], полученной методом фарадеевского вращения для чистого железа.

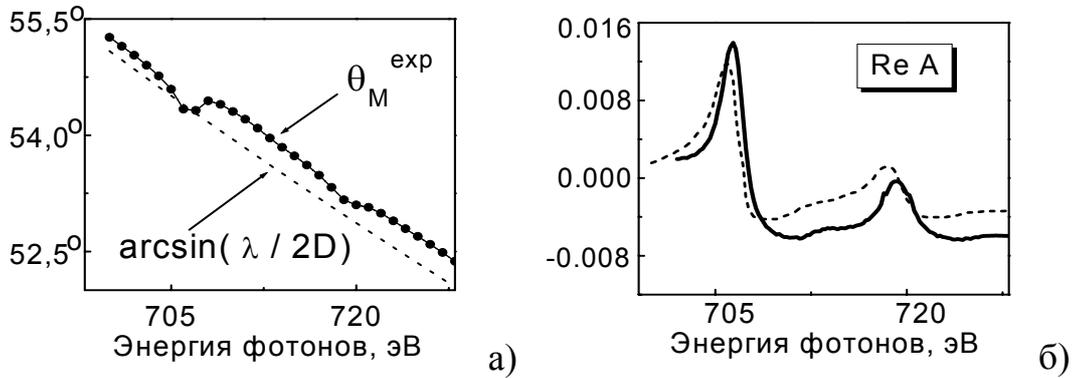


Рис. 10. Экспериментальное положение брэгговского максимума (а) и восстановленная по формуле (25) функция $\text{Re } A$ для исследуемого образца (б, сплошная линия). Данные из работы [Л5] представлены пунктирной линией (б)

Как было показано в предыдущем параграфе, где теоретически рассчитывалась разность нормированных интегральных интенсивностей для двух круговых поляризаций излучения, брэгговский максимум первого порядка сильно зависит от величины магнитного момента в центре резонансного слоя.

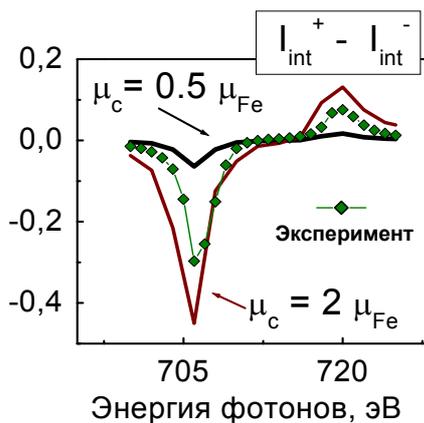


Рис. 11. Теоретически рассчитанные разности нормированных интегральных интенсивностей брэгговского максимума для право- и лево- кругополяризованного излучения для разных значений магнитного момента в середине резонансного слоя (сплошные линии). Символы представляют экспериментальные данные

Варьируя в расчетах магнитную добавку в тензоре восприимчивости для резонансных слоев железа и сравнивая результат с экспериментальными данными, мы получили (рис. 11), что магнитный момент железа в середине

слоев Fe в сверхрешетке $[\text{Fe}(6\text{ML})/\text{Co}(6\text{ML})]_{50}$ равен $\sim 2.7 \pm 0.1 \mu_B$ (в чистом железе $\mu_{\text{Fe}} = 2.2 \mu_B$). Ранее предполагалось, что увеличение среднего магнитного момента для таких образцов обусловлено только увеличением магнитного момента в интерфейсах с Co.

В *Приложении 1* рассмотрена процедура нахождения корней характеристического уравнения для произвольной 4x4 матрицы по методу Фаддеева (коэффициенты характеристического уравнения) и Ньютона (корни).

В *Приложении 2* приведена формула Сильвестра для вычисления функций от произвольной матрицы через ее собственные значения, дана аналитическая формула для 2x2-матричного экспоненциала, а также рассмотрена возможность вычисления 4x4-матричного экспоненциала через ее 2x2-блоки.

В *Приложении 3* изложен итерационный метод *Л.М. Барковского* для нахождения тензоров поверхностного импеданса и нормальной рефракции.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Построена общая теория резонансной рентгеновской рефлектометрии, развитая с учетом наличия магнитных недиагональных компонент тензора восприимчивости слоев. Получены приближенные аналитические формулы для собственных показателей преломления, а также для планарных тензоров нормальной рефракции и поверхностного импеданса – важных оптических характеристик слоев, на базе которых проведено обобщение известных рекуррентных соотношений Паррата на анизотропный случай.
2. Проанализированы условия наблюдения эффектов, возникающих при различных ориентациях намагниченности относительно плоскости рассеяния: меридионального, экваториального и полярного эффектов Керра. Показано, что эффект “дихроизма” в меридиональном эффекте Керра может быть существенно усилен за счет диагональных компонент тензора восприимчивости, но одновременно это исключает прямое экспериментальное наблюдение «магнитных добавок» к тензору восприимчивости.

3. С помощью математического моделирования проанализирована возможность восстановления компонент тензора восприимчивости по смещению угла Брэгга при отражении от периодических мультислоев в геометрии меридионального эффекта Керра в кинематическом и динамическом приближении теории отражения. Показано, что диагональные компоненты тензора могут быть приближенно получены по смещению угла Брэгга, но только при достаточно большом числе периодов в сверхструктуре. Недиagonальные магнитные компоненты могут быть восстановлены, если угол Брэгга не очень большой. В области больших углов недиагональные магнитные компоненты не могут быть восстановлены вследствие смешивания поляризаций в геометрии меридионального эффекта Керра.
4. Показано, что резонансные спектры брэгговского отражения первого порядка практически не зависят от магнитных параметров интерфейсов, поэтому для получения этой информации необходимо привлекать отражения высших порядков.
5. Анализ экспериментальных спектров резонансного (вблизи $L_{2,3}$ края поглощения железа) магнитного брэгговского отражения, измеренных на синхротроне MAX-lab для периодической сверхструктуры $[\text{Fe}(6\text{ML})/\text{Co}(6\text{ML})]_{50}$, позволил сделать заключение, что магнитный момент атомов железа даже в центральной части слоев в рассматриваемой сверхструктуре увеличен по сравнению с чистым α -железом.

Цитируемая литература:

- [Л1] *Ф.И. Федоров*. Теория гиротропии. Минск: «Наука и техника». 1976. 456с.
- [Л2] *Л.М. Барковский, Г.Н. Борздов, В.И. Лаврукович* Тензорный импеданс и преобразование световых пучков системами анизотропных слоев. II. Косое падение. // ЖПС. 1976. т. 25. с.526 – 531.
- [Л3] *H. Höchst, D. Rioux, D. Zhao, D. Huber* Magnetic linear dichroism effects in reflection spectroscopy: A case study at the Fe $M_{2,3}$ edge // J. Appl. Phys. 1997. V. 81. p.7584 – 7588.

- [Л4] *O. Zaharko, P.M. Oppeneer, H. Grimmer, M. Horisberger, H.-Ch. Mertins, D. Abramsohn, F. Schäfers, A. Bill, H.-B. Braun* Exchange coupling in Fe/NiO/Co film studied by soft x-ray resonant magnetic reflectivity // *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. p.134406.
- [Л5] *J.B. Kortright, S.-K. Kim* Resonant magneto-optical properties of Fe near its 2p levels: Measurement and applications // *Phys. Rev. B.* 2000. V. 62. p.12216.
- [Л6] *M. Sacchi* Resonant magnetic scattering of polarized soft X-Rays // *Rassegna Scientifica.* 1999. V. 4. p.3 – 13.

Основные идеи и результаты диссертации отражены в публикациях:

- [1] *E.A. Gan'shina, O.Yu. Gorbenko, A.G. Smekhova, A.R. Kaul, N.A. Babushkina, L.M. Belona* Transverse Kerr effect in the $(\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x)_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ ceramics // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2000. V. 12. p.2857 – 2866.
- [2] *А.Г. Смехова, М.А. Андреева* О применимости правила сумм в рефлектометрии резонансного рентгеновского излучения для исследования магнитных мультислоев // *Материалы совещания «Рентгеновская оптика-2004».* Нижний Новгород. ИФМ РАН. 2004. с.138.
- [3] *A.G. Smekhova, M.A. Andreeva* About application of "the sum rules" to the X-ray resonant reflectivity spectra for magnetic multilayer investigation // *Abst. IVth International school on Magnetism and Synchrotron Radiation.* Mittelwihr. France. 2004. p. 33.
- [4] *А.Г. Смехова, М.А. Андреева* О применимости правила сумм в рефлектометрии резонансного рентгеновского излучения для исследования магнитных мультислоев // *Известия РАН. Серия физическая.* 2005. т. 69. № 2. с.259.
- [5] *М.А. Андреева, А.Г. Смехова* Анализ спектров резонансного магнитного рассеяния рентгеновских лучей от магнитных многослойных структур // *Материалы симпозиума «Нанофизика и нанoeлектроника».* Нижний Новгород. ИФМ РАН. 2005. том. 2. с. 282 – 283.
- [6] *А.Г. Смехова* "Интерпретация спектров резонансного магнитного рассеяния рентгеновских лучей от магнитных многослойных структур" // *Тезисы докладов XII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам "Ломоносов -2005".* Москва. МГУ. 2005. в печати.
- [7] *M.A. Andreeva, A.G. Smekhova* Theoretical analysis of the spectra of X-ray resonant magnetic reflectivity // *Abstract Book of 13th International Congress of Thin Films and 8th Conference Atomically Controlled surfaces, interfaces and nanostructures (ACSIN-8/ICTF-13).* Stockholm. Sweden. 2005. p.118.
- [8] *M.A. Andreeva, A.G. Smekhova, B. Lindgren, M. Bjorck, G. Andersson* Depth selective investigations of magnetic multilayers by X-Ray resonant magnetic reflectivity // *Book of Abstracts of Moscow International Symposium on Magnetism (MISM).* Moscow. Russia. 2005. p. 237 – 238.

- [9] *М.А. Андреева, А.Г. Смехова* Анализ спектров резонансного магнитного рассеяния рентгеновских лучей от магнитных многослойных структур // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2006. № 2. с.83 – 88.
- [10] *M.A. Andreeva, A.G. Smekhova, B. Lindgren, M. Bjorck, G. Andersson* Depth selective investigations of magnetic multilayers by X-Ray resonant magnetic reflectivity // Journ. of Magn. Magn. Mater. 2006. V. 300. p.e371 – e374.
- [11] *M.A. Andreeva, A.G. Smekhova* Theoretical analysis of the spectra of X-ray resonant magnetic reflectivity // Appl. Surf. Science. 2006. in press.
- [12] *М.А. Андреева, В.А. Бушуев, Е.Н. Овчинникова, А.П. Орешко, И.Р. Прудников, А.Г. Смехова.* Численные эксперименты в задачах рентгеновской оптики. М.: Физический факультет МГУ. 2005. 149 с.
- [13] *М.А. Андреева, Е.Н. Овчинникова, А.Г. Смехова, Б. Линдгрэн, М. Бьорк* Рентгеновская резонансная рефлектометрия магнитных нанослоев // Материалы X симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». Нижний Новгород. ИФМ РАН. 2006. том. 1. с. 120 – 123.

[*] <http://solst.phys.msu.ru/andreeva/index.html>