



Фазовая проблема в нейтронной рефлектометрии

Е.А. Кравцов

Институт физики металлов УрО РАН

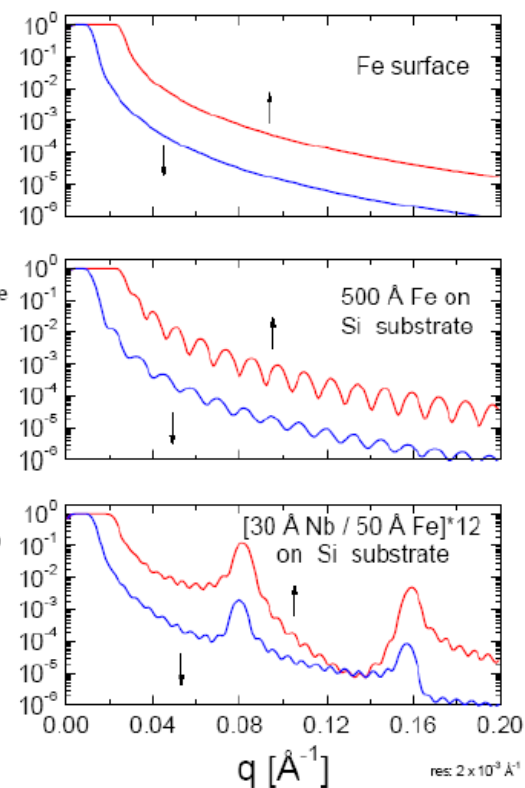
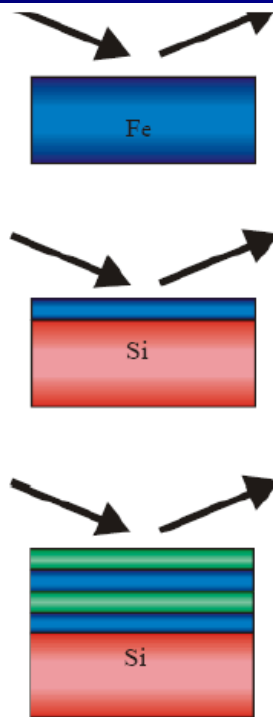
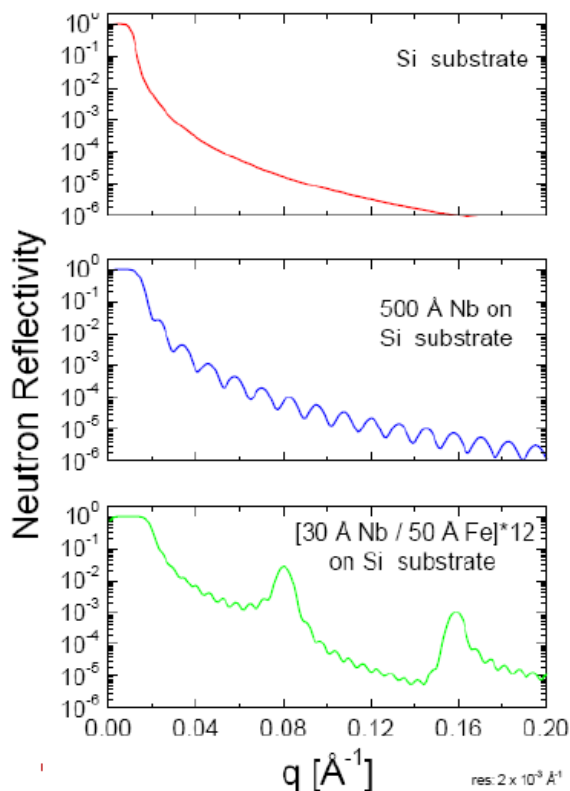
**IV Школа по физике поляризованных нейтронов,
Гатчина, 18 декабря 2015 г.**



Нейтронная рефлектометрия

Немагнитные

Магнитные





Коэффициент отражения нейтронов

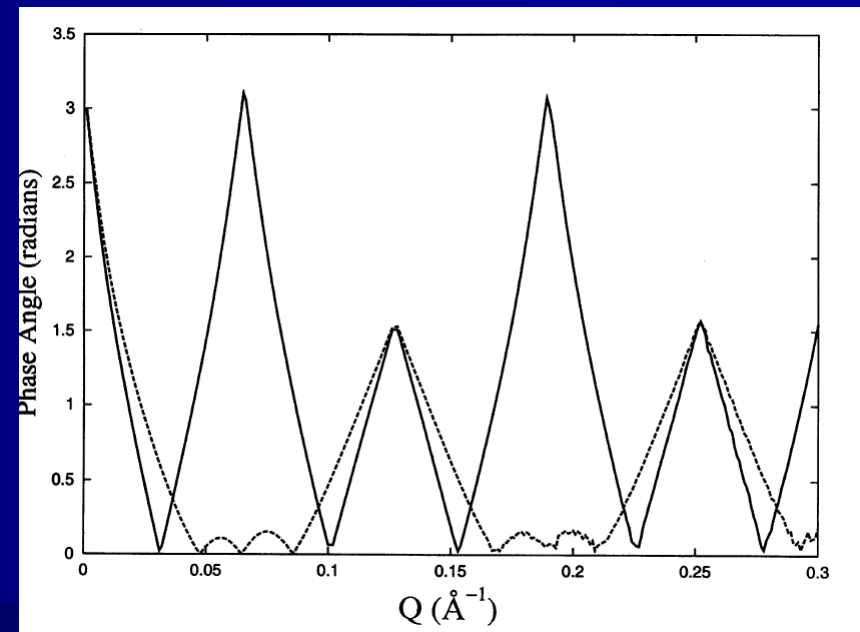
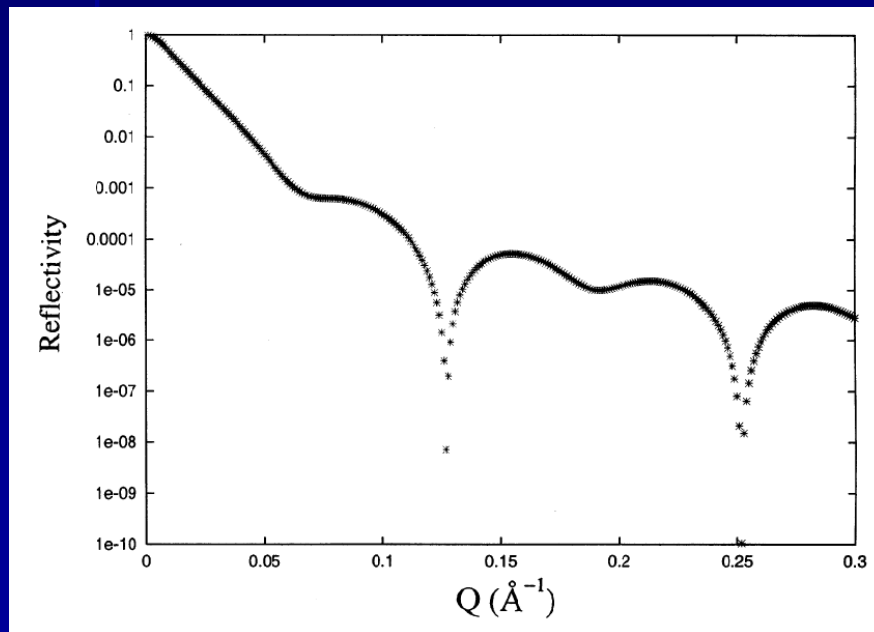
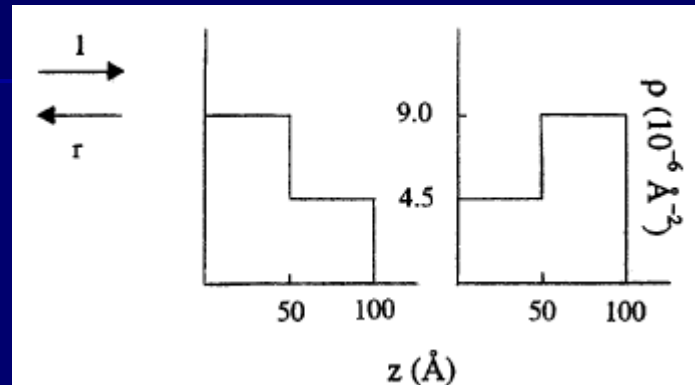
$$\text{Коэфф. отражения} = r(Q) e^{-i\varphi(Q)}$$

$$\text{Мы измеряем } R(Q) = r^2(Q)$$

Фазовая информация полностью теряется



Что мы потеряли : 1. Однозначность определения потенциала





Что мы потеряли : 2. Безмодельное решение обратной задачи рассеяния

Если известен комплексный коэффициент отражения:

- Разработан математический аппарат (уравнение Гельфанда-Левитана-Марченко), позволяющий однозначно восстановить рассеивающий потенциал
- Подход безмодельный: не требуется никакой априорной информации о свойствах образца
- Теоремы существования и единственности гарантируют единственность решения



Можно ли восстановить фазовую информацию?

- Математические методы
- Экспериментальные методы (метод опорного слоя)



Математические методы восстановления фазы: Аналитические функции

Аналитическая функция $\gamma(q) = \alpha(q) + i\beta(q) \quad q = q_z + i\kappa.$

Условия Коши-Римана $\partial\alpha/\partial q_z = \partial\beta/\partial\kappa \quad \partial\alpha/\partial\kappa = -\partial\beta/\partial q_z$

Теорема Коши

$$\oint_C \frac{\gamma(\zeta)}{q - \zeta} d\zeta = 0$$

$$\alpha(q) = -\frac{1}{\pi} \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\beta(\zeta)}{q - \zeta} d\zeta \quad \beta(q) = \frac{1}{\pi} \text{P.V.} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha(\zeta)}{q - \zeta} d\zeta$$



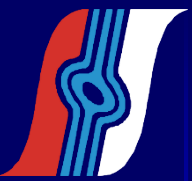
Математические методы восстановления фазы: Фаза коэффициента отражения

$$\ln R(q) = \frac{1}{2} \ln r(q) + i\phi(q)$$

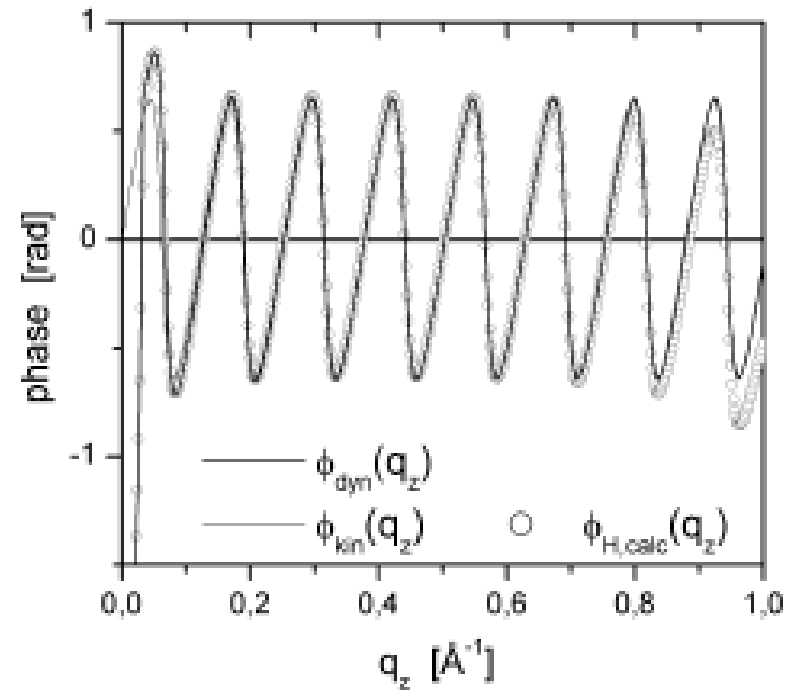
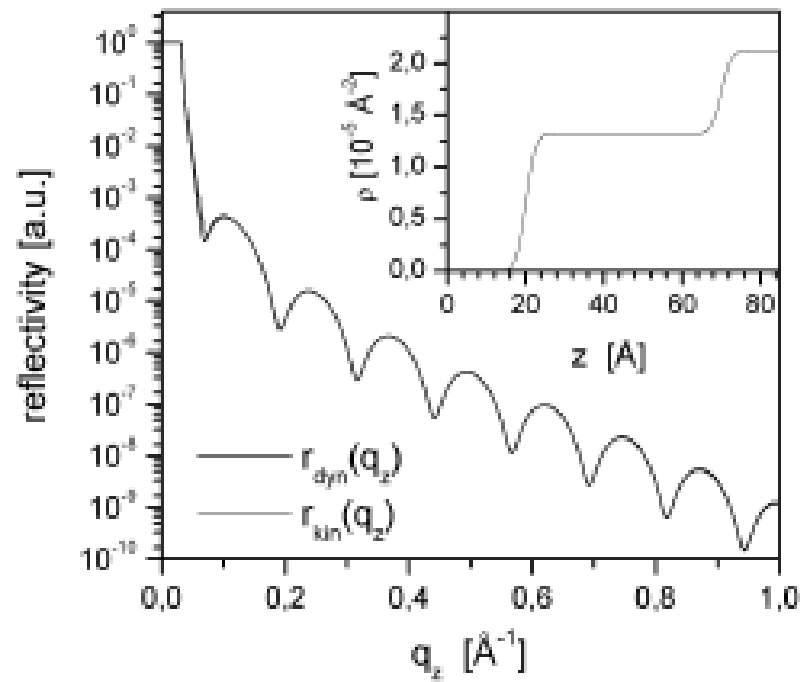
$$[\ln R(q) - \ln R(0)]/q$$

$$\phi_H(q_z) = \phi(0) - \frac{q_z}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\ln r(q') - \ln r(q_z)}{q'^2 - q_z^2} dq'$$

$$\phi_H(q_z) = -\frac{q_z}{\pi} \int_0^{q_{max}} \frac{\ln r(q') - \ln r(q_z)}{q'^2 - q_z^2} dq' + \Delta\Phi_H(q_z, q_{max})$$

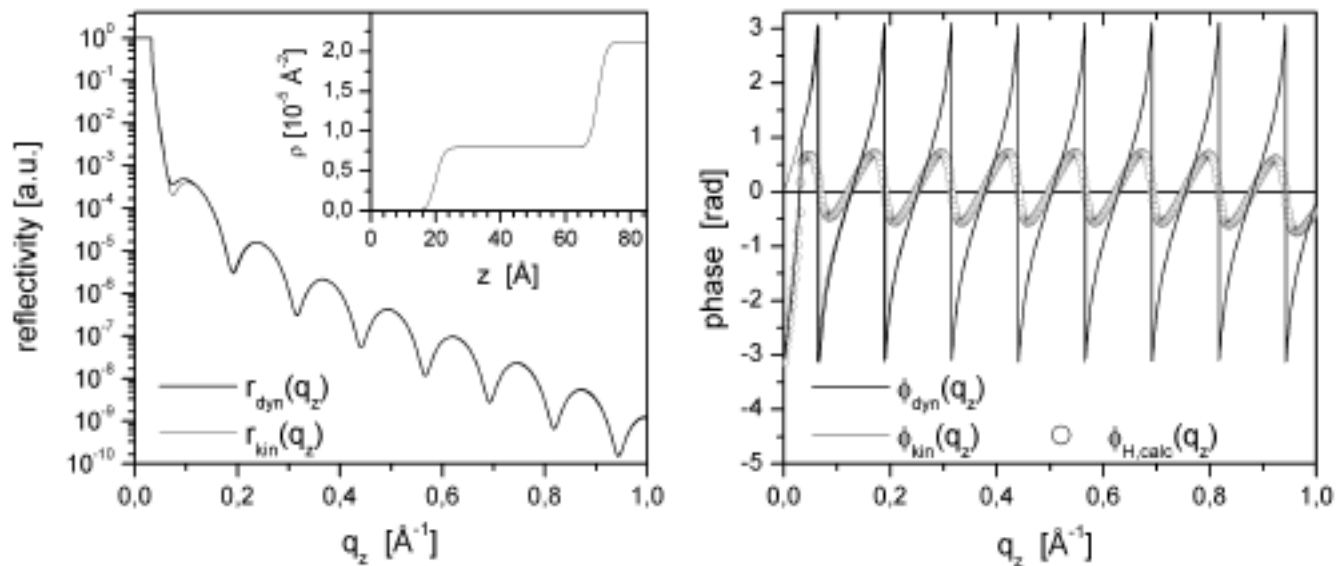


Пример восстановления фазы





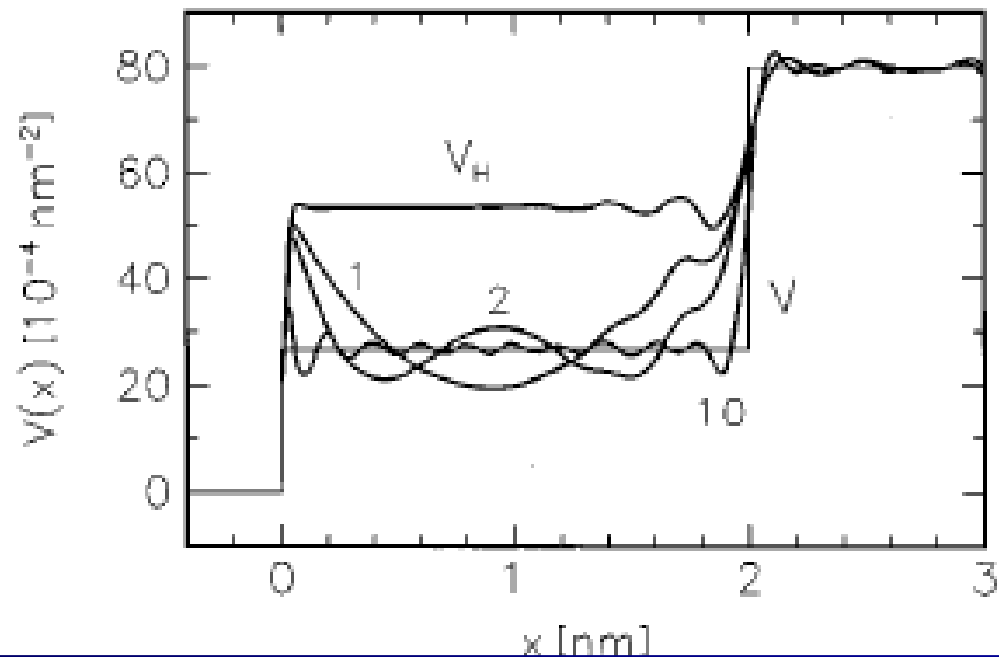
Математические методы восстановления фазы: Учет нулей коэффициента отражения



$$\phi(q) = \phi_H(q) + 2 \sum_{j=1}^N \arccos \left(\frac{2q_z \Im\{a_j\}}{q_z^2 - |a_j|^2} \right) ,$$



Как сказывается наличие нулей при восстановлении потенциала



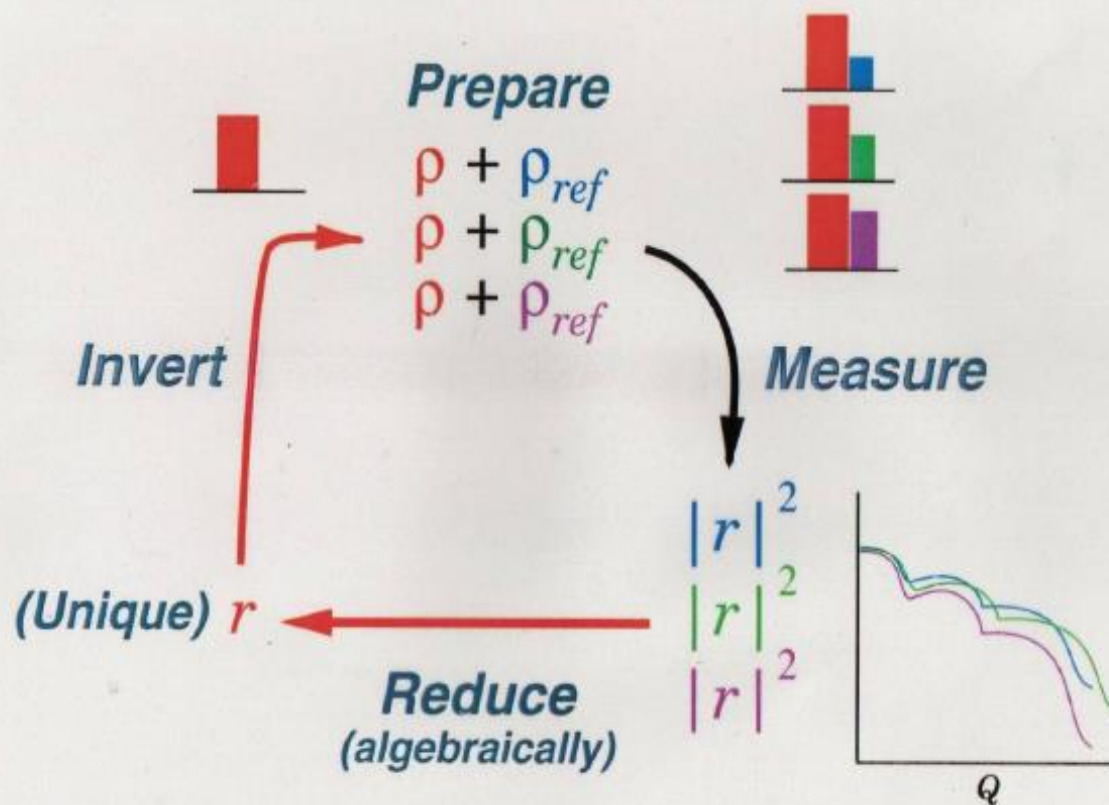
Промежуточные выводы

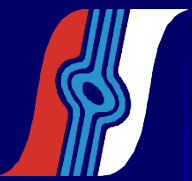


- Чисто математические методы не позволяют однозначно восстановить фазу коэффициента отражения
- При последовательном применении метода возникает проблема нулей, которая в точности эквивалентна фазовой проблеме рефлектометрии

Экспериментальные методы восстановления фазы: Метод опорного слоя

Phase Determination with 3 References



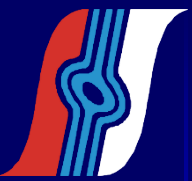


Введение опорного слоя с известными параметрами

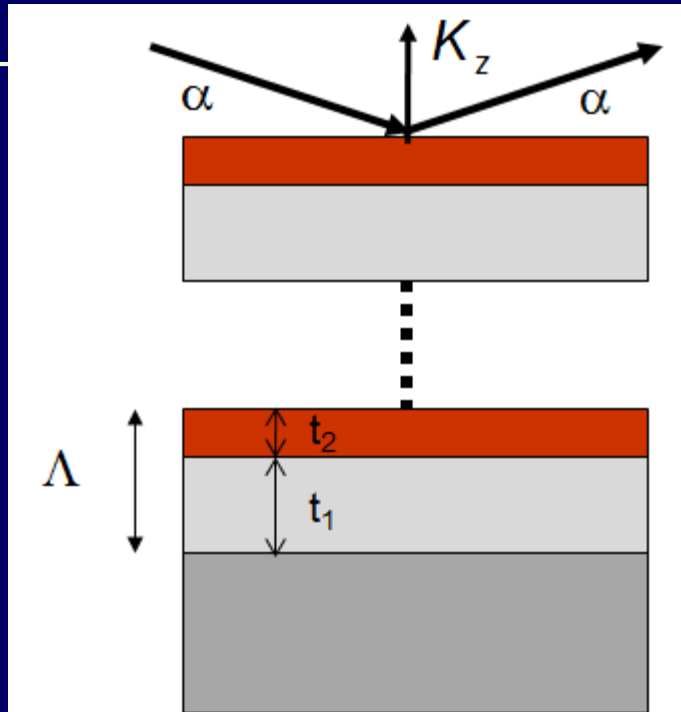
Система
с неизвестной
структурой



Свойства опорного слоя можно изменять: нужно не менее 3 измерений



Матричный формализм в рефлектометрии



$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix},$$

$$M = \prod_{j=0}^K \left[\frac{1 + \frac{q_j}{q_{j+1}}}{2} \cdot \begin{pmatrix} e^{iq_j d_j} & -r_j e^{-iq_j d_j} \\ -r_j e^{iq_j d_j} & e^{-iq_j d_j} \end{pmatrix} \right] = M_0 \cdot M_1 \cdot \dots \cdot M_K$$

Определение коэффициента отражения составной структуры



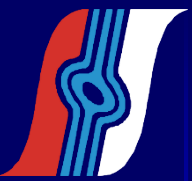
$$M = G \cdot H$$

Коэффициент отражения r_g неизвестной структуры лежит в комплексной плоскости, на круге с центром γ и радиусом ρ :

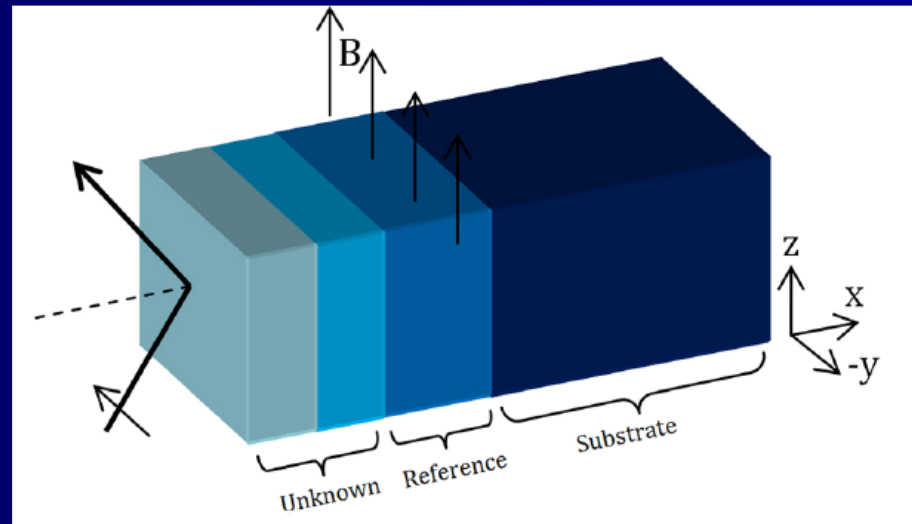
$$\gamma = \frac{Rh_{22}h_{12}^* - h_{21}h_{11}^*}{Rh_{12}h_{12}^* - h_{11}h_{11}^*}; \quad \rho = \sqrt{R} \frac{|h_{11}h_{22} - h_{12}h_{21}|}{Rh_{12}h_{12}^* - h_{11}h_{11}^*}$$

Если провести три измерения интенсивности отражения R_i ($i=1,2,3$), то r_g может быть однозначно определён, как точка пересечения трёх кругов:

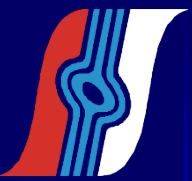
$$r_g = \frac{A_1(\gamma_2 - \gamma_3) + A_2(\gamma_3 - \gamma_1) + A_3(\gamma_1 - \gamma_2)}{\gamma_1^*(\gamma_2 - \gamma_3) + \gamma_2^*(\gamma_3 - \gamma_1) + \gamma_3^*(\gamma_1 - \gamma_2)}$$



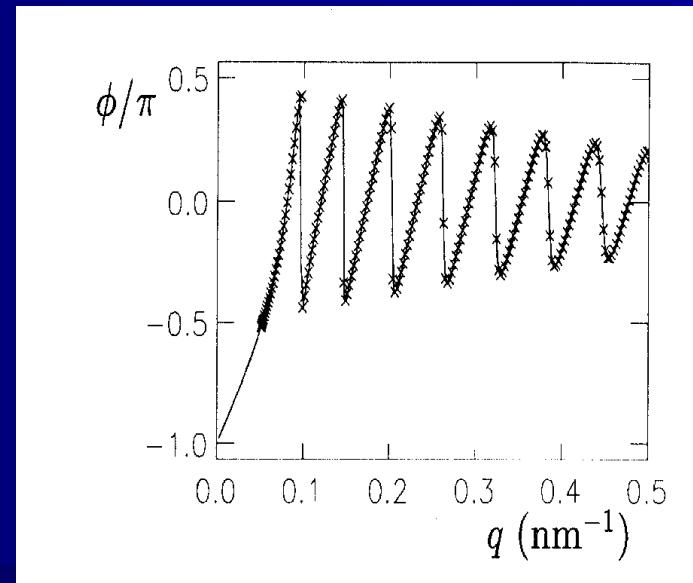
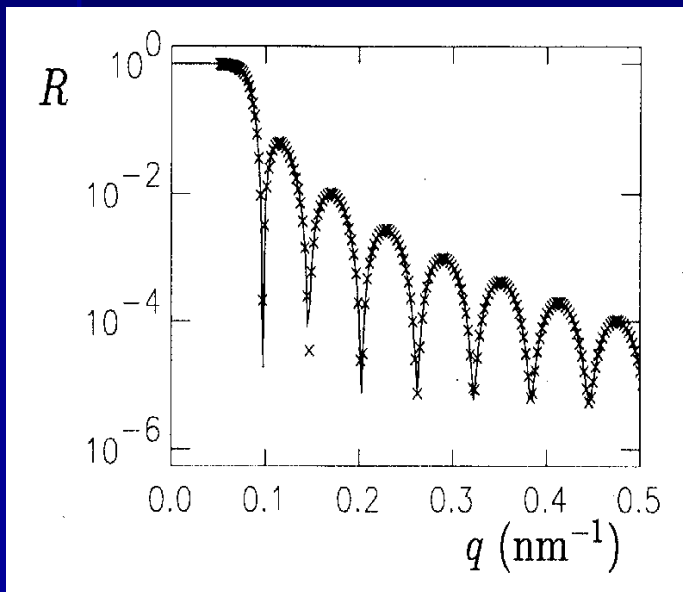
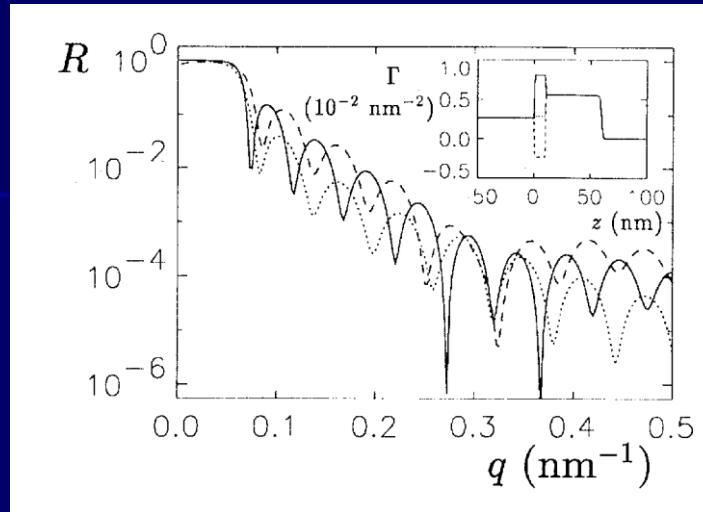
Как сделать эти три различных измерения Способ 1: использование магнитного опорного слоя

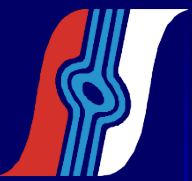


Проводятся 3 измерения с поляризованными нейтронами:
 R_+ и R_- при приложении магнитного поля в плоскости образца
 R при приложении магнитного поля перпендикулярно плоскости образца



Пример реализации метода Si//Co(50nm)/Au(100nm)





Способ 2: опорный слой из материала с зависящей от энергии длиной рассеяния

TABLE A.4 Radiative-Capture Cross Sections and Resonance Energies of Naturally Occurring Nuclides Having (n,γ) Resonances at Thermal Neutron Energies

Nuclide	σ_γ (b)	E_0 (meV)
^{113}Cd	20,600	178
^{149}Sm	42,080	97.3
^{151}Eu	9100	321
^{155}Gd	61,100	26.8
^{157}Gd	259000	31.4
^{176}Lu	2065	141.3
^{180}Ta	563	200

Gd – наиболее обещающий кандидат

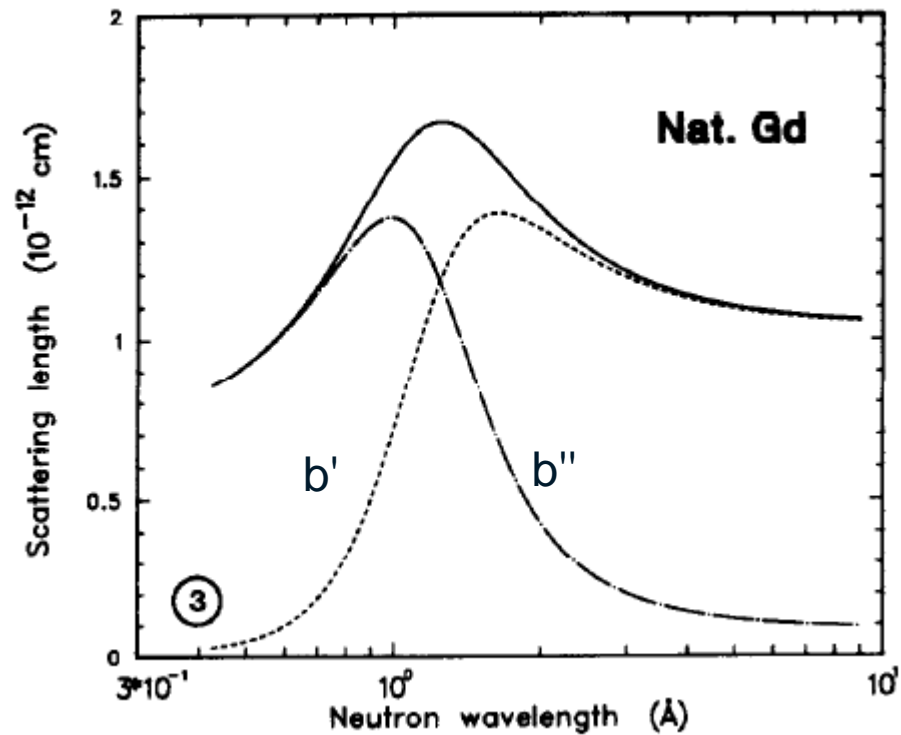
RESONANCE EFFECTS IN NEUTRON SCATTERING LENGTHS OF RARE-EARTH NUCLIDES

J. E. LYNN* and P. A. SEEGER

Los Alamos National Laboratory
Los Alamos, New Mexico 87545

and

Argonne National Laboratory
Argonne, Illinois 60439



Длины рассеяния для Gd (теория)



$$\lambda = 1 \text{ \AA} \quad Nb = (5.96 - i 2.32) \times 10^{-6}$$

$$\lambda = 1.8 \text{ \AA} \quad Nb = (2.87 - i 4.18) \times 10^{-6}$$

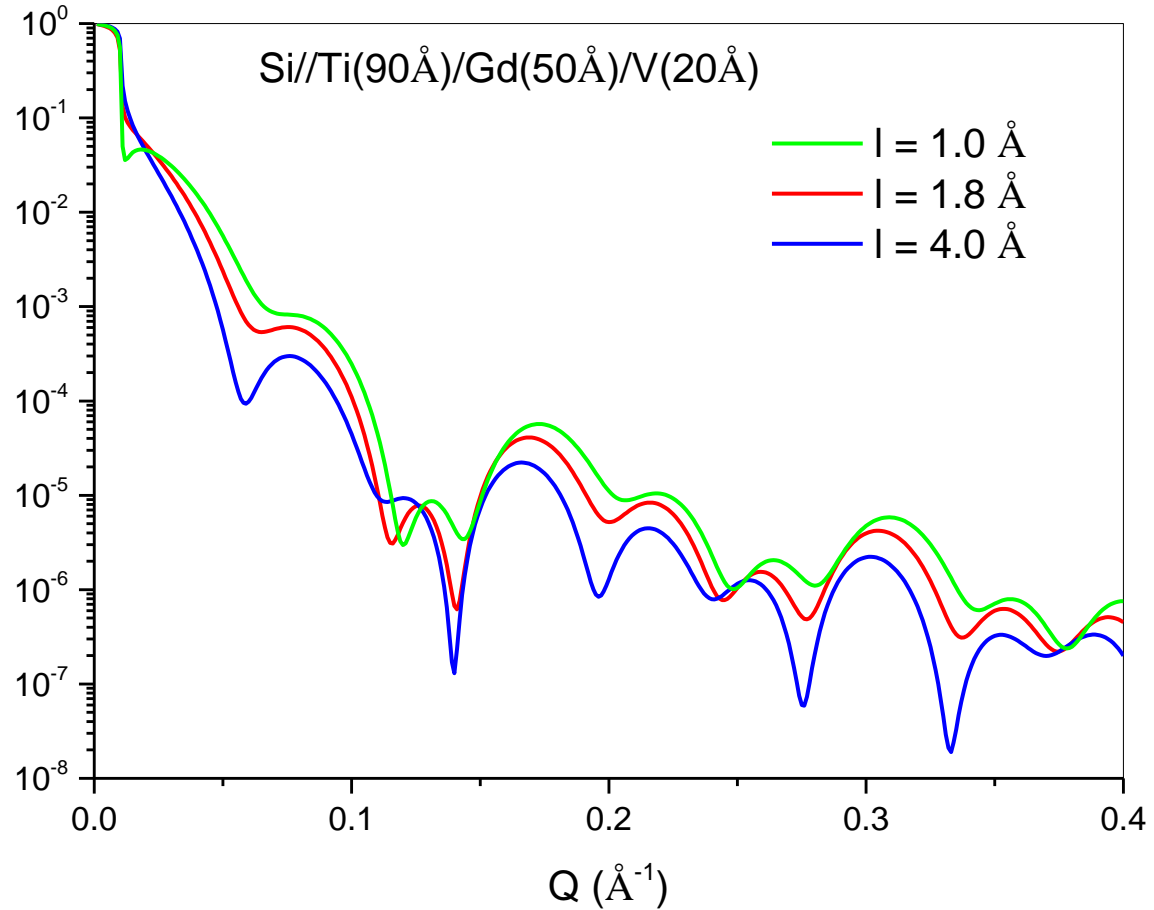
$$\lambda = 3 \text{ \AA} \quad Nb = (1.72 - i 3.73) \times 10^{-6}$$

$$\lambda = 4 \text{ \AA} \quad Nb = (0.44 - i 3.04) \times 10^{-6}$$

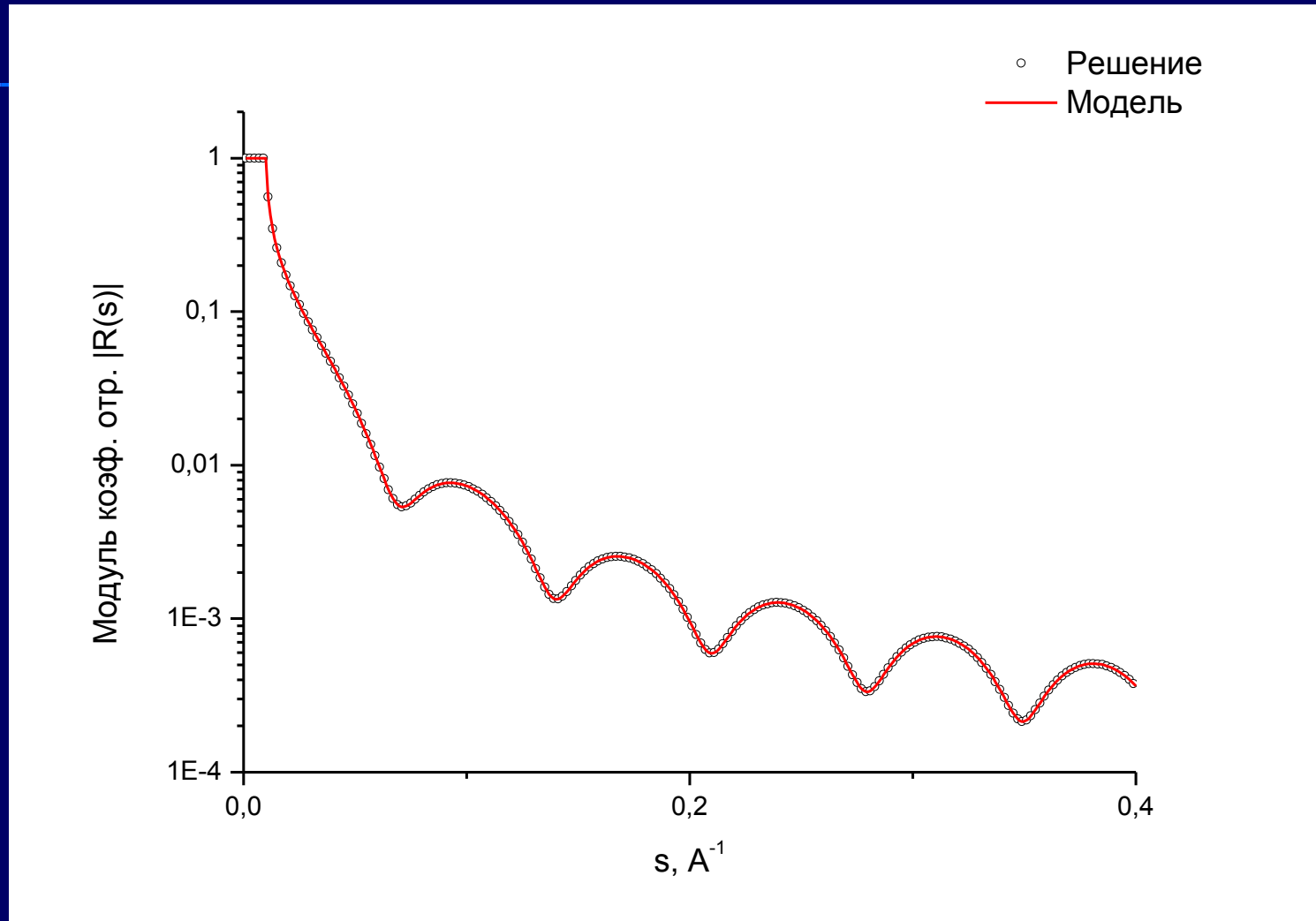
Принципиальное отличие от рентгена: резонансные эффекты проявляются в сильном изменении вещественной части длины рассеяния



Численный пример

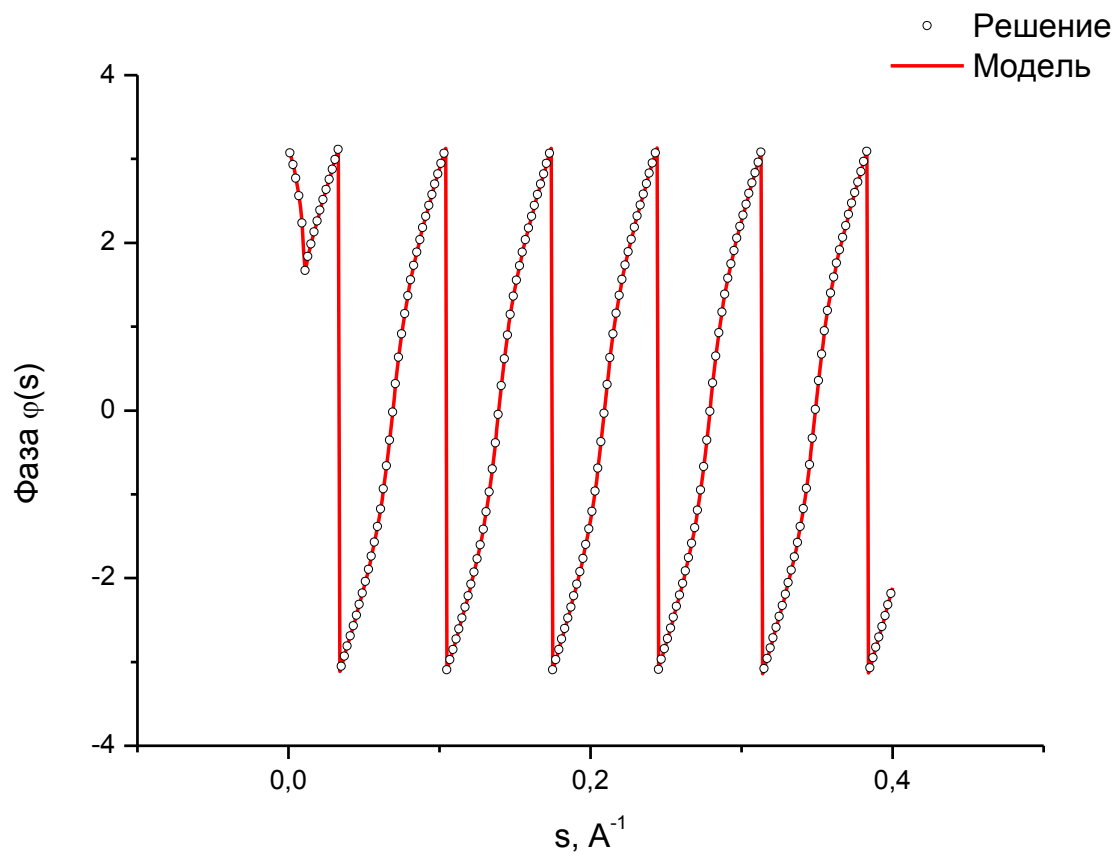


Восстановление модуля коэфф. отражения: Si//Ti(90 Å)/Gd(50 Å)/V(20 Å)





Восстановление фазы коэфф. отражения: Si//Ti(90 Å)/Gd(50 Å)/V(20 Å)



Выводы



Нейтронная рефлектометрия принципиально не позволяет однозначно определить рассеивающий потенциал

Математические методы восстановления фазы приводят к вычислительным проблемам

Восстановление фазы отраженного сигнала, используя магнитный слой либо слой Gd как reference layer – реально работающий метод, который ограничен выбором систем

Есть настоятельная необходимость в развитии комбинированных подходов, сочетающих оба метода