

РЕЗКО АСИММЕТРИЧНАЯ ДИФРАКЦИЯ КАК МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВБЛИЗИ КРАЕВ ПОГЛОЩЕНИЯ

М. А. Андреева^{a*}, *Ю. Л. Репченко*^{b**}, *А. Г. Сметова*^{a**},
К. Думенил^{c****}, *Ф. Вилхелм*^{d****}, *А. Роголев*^d

^a *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119991, Москва, Россия*

^b *Воронежский государственный университет
394036, Воронеж, Россия*

^c *Institut Jean Lamour (UMR CNRS 7198), University of Lorraine
54011, Vandoeuvre-les-Nancy Cedex, France*

^d *European Synchrotron Radiation Facility
38043, Grenoble Cedex, France*

Поступила в редакцию 22 августа 2014 г.

Проанализирована спектральная зависимость положения брэгговского максимума в условиях резко асимметричной дифракции в рамках кинематического и динамического приближений теории дифракции. Модельные расчеты выполнены для L_3 -края поглощения иттрия в монокристаллической пленке YFe_2 , они продемонстрировали возможность определения по этой зависимости магнитооптических констант (или, эквивалентно, дисперсионных поправок к атомному фактору рассеяния) для жесткого рентгеновского излучения. Проведено сравнение с экспериментальными данными, полученными для образца $\text{Nb}(4 \text{ нм})/\text{YFe}_2(40 \text{ нм}(110))/\text{Fe}(1.5 \text{ нм})/\text{Nb}(50 \text{ нм})/\text{сапфир}$ на Европейском источнике синхротронного излучения.

DOI: 10.7868/S0044451015060063

1. ВВЕДЕНИЕ

Магнитооптические константы вблизи краев поглощения рентгеновского излучения и напрямую связанные с ними дисперсионные поправки к атомному фактору рассеяния важно знать для проведения элементно- и пространственно-селективных исследований электронной и магнитной структуры атомов в мультислоях, кристаллах и сложных магнитных структурах методами XRMR (X-ray

resonant magnetic reflectometry) и DAFS (diffraction anomalous fine structure) для интерпретации волноводных и других эффектов, наблюдаемых вблизи краев поглощения [1–8]. Отметим, что эти направления исследований бурно развиваются на всех синхротронах в мире, предоставляя уникальную информацию, углубляя наши фундаментальные представления об электронной структуре конденсированных сред и природе магнетизма.

Для мягкого рентгеновского излучения преломление и поглощение, включая магнитные поправки (т.е. величины δ и β в показателе преломления $n = 1 + \delta + i\beta$) могут быть экспериментально определены из сдвига брэгговских максимумов на кривых отражения от периодических мультислоев [9–13]. Для жесткого рентгеновского излучения брэгговские максимумы возникают при дифракции

*E-mail: Mandreeva1@yandex.ru

**E-mail: kent160@mail.ru

***В настоящее время: University of Duisburg-Essen and CENIDE, 47048, Duisburg, Germany

****К. Dumesnil, F. Wilhelm

на кристаллах, но влияние преломления на их сдвиг слишком мало, чтобы его можно было использовать для определения дисперсионных поправок к показателю преломления и, соответственно, атомному фактору рассеяния. Преломление для жесткого рентгеновского излучения существенно лишь вблизи критического угла полного внешнего отражения, а брэгговское отражение от кристаллической структуры в симметричной геометрии имеет место при углах скольжения существенно больших критического. Поэтому именно рефлектометрия (зеркальное отражение при скользящих углах) наиболее успешно применяется для определения δ и β [14], в том числе и для определения магнитных добавок к показателю преломления [15]. Однако этот метод предъявляет высокие требования к поверхности исследуемых образцов и требует тщательного приготовления пленок, которое подразумевает включение буферных и защитных слоев. При этом интерпретация рефлектометрических кривых от многослойного объекта становится достаточно сложной и неоднозначной.

Можно ожидать, что влияние преломления на сдвиг брэгговских максимумов при дифракции на кристаллической структуре (и, соответственно, возможность определения дисперсионных поправок) возрастает в резко асимметричной схеме дифракции при скользящих углах падения, что позволит использовать этот более простой метод для определения магнитооптических констант. Такую возможность мы анализируем в предлагаемой статье, используя как стартовый момент обнаружение неожиданных эффектов в экспериментальных данных по рефлектометрии.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

В недавно проведенном эксперименте на ESRF (The European synchrotron radiation facility) по определению спектральных зависимостей магнитооптических констант вблизи $L_{2,3}$ -краев поглощения иттрия на образце Nb(4 нм)/YFe₂(40 нм (110))/Fe(1.5 нм)/Nb(50 нм)/сапфир [15] измерялись рефлектометрические кривые (зависимости отражения от угла скольжения) для набора энергий вблизи $L_{2,3}$ -краев поглощения иттрия. Аппаратура была настроена так, что одновременно с зеркально отраженным сигналом регистрировалось и флуоресцентное излучение от этого образца в зависимости от угла скольжения (рис. 1). Флуоресцентный детектор располагался над поверхностью образца. Эти данные не входили в основную задачу —

определение магнитных добавок к тензору восприимчивости по сдвигу осцилляций Кизиха на рефлектометрических кривых — и не представляли, на первый взгляд, никакого интереса. Флуоресцентный детектор не имел разрешения по энергии, так что регистрировалось суммарное флуоресцентное излучение всех атомов в исследуемом образце: $L_{\alpha 12}$ Y (1920.47 эВ), $L_{\beta 1}$ Y (1995.84 эВ), $K_{\alpha 1,2}$ Al (1486.27 эВ), $K_{\beta 1}$ Al (1557.45 эВ), $L_{\alpha 1,2}$ Fe (705 эВ), $L_{\beta 1}$ Fe (718.5 эВ) и со слабой эффективностью детектирования $K_{\alpha 1}$ O (524.9 эВ), для энергии падающих фотонов в интервале 2071–2095 эВ. Для такого смешанного сигнала корректная обработка затруднительна, но в целом поведение флуоресцентных кривых вполне согласуется с предположением, что основной сигнал поступает из пленки YFe₂ и подложки Al₂O₃ за исключением одной маленькой детали. На всех флуоресцентных кривых (рис. 1) имеется пичок в области малых углов скольжения, который можно было бы и проигнорировать как дефект измерительной аппаратуры, но его положение меняется при изменении энергии падающих фотонов вполне систематически и даже как-то (хотя и слабо) согласуется с резонансной зависимостью восприимчивости в исследуемой области (рис. 2).

Была предпринята попытка (неудавшаяся) описать такую зависимость изменением критического угла полного внешнего отражения от какой-либо границы раздела при варьировании энергии фотонов. Хорошо известно, что вблизи критического угла возникает всплеск вторичного излучения [16–18]. Проанализировали также возможность формирования волноводного режима в пленке YFe₂ [19], при котором возникают локальные (по углу и по пространству) усиления возбуждающего поля в образце и соответствующие пики в выходе вторичного излучения, как это иллюстрирует рис. 3. Параметры структуры для расчета были выбраны идеальными для формирования стоячей волны (увеличена оптическая плотность Nb, т. е. $\text{Re } \chi_{\text{Nb}}$, и уменьшено поглощение в слое YFe₂). Из рис. 3 видно, что пучности поля возникают для углов, существенно больших критического угла полного отражения, что противоречит нашим экспериментальным данным. Кроме того, идеальные параметры волноводной структуры не соответствовали оптическим характеристикам образца, полученным в работе [15].

Самым существенным опровержением волноводного объяснения пичков явилась слабая зависимость смещения пичков от энергии фотонов в этой модели. Близкая к линейной экспериментальная зависимость положения пичков от энергии падающих фо-

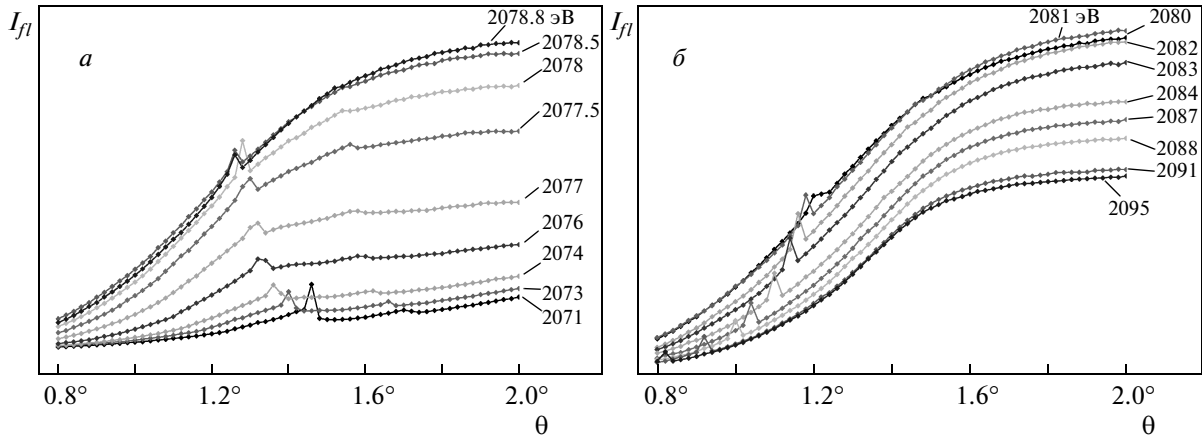


Рис. 1. Экспериментальные зависимости выхода флуоресцентного излучения от образца Nb(4 нм)/YFe₂(40 нм (110))/Fe(1.5 нм)/Nb(50 нм)/сапфир как функции угла скольжения θ падающего излучения, измеренные для набора энергий фотонов вблизи L_3 -края поглощения иттрия

тонов, интерпретируемая в простейшем приближении $2d \sin \theta = n\lambda$, дает значение $d \approx 0.4$ нм. Это обстоятельство привело к мысли, что кроме флуоресцентного излучения в детектор случайно попало дифрагировавшее на кристалле YFe₂ излучение. Используя пакет PowderCell [20], нашли, что для наших очень больших длин волн ($\lambda = 0.591-0.598$ нм) все же существует единственное дифракционное отражение (111) от структуры C15 (YFe₂) с параметром решетки $d = 0.4255$ нм. Обнаруженный эффект простимулировал рассмотрение влияния преломления на положение дифракционного пика в условиях резко асимметричной дифракции в скользящей геометрии.

3. ТЕОРИЯ

В простейшем случае без учета преломления положение брэгговского максимума определяется законом Вульфа–Брэгга

$$2d \sin(\theta + \psi) = n\lambda, \tag{1}$$

где θ — угол скольжения для падающего излучения, ψ — угол между поверхностью кристалла и атомно-кристаллическими плоскостями (рис. 4), d — межплоскостное расстояние, n — порядок отражения. При скользящих углах падения имеем

$$\sin(\theta + \psi) \approx \theta \cos \psi + \sin \psi,$$

что дает линейную зависимость положения угла Брэгга от длины волны (или обратно пропорциональную от энергии фотона E_{ph}).

В случае кинематической дифракции с учетом преломления волновой вектор в среде равен

$$\mathbf{k}_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \{0, \cos \theta, \sin \theta'\}, \quad |\mathbf{k}_1| = \frac{2\pi}{\lambda} \left(1 + \frac{\chi}{2}\right),$$

где

$$\sin \theta' = \eta = \sqrt{\sin^2 \theta + \chi}, \tag{2}$$

η — нормальная компонента волнового вектора в единицах $2\pi/\lambda = \omega/c$,

$$\chi = 2\delta + 2i\beta = \frac{\lambda^2}{\pi} \rho f \tag{3}$$

— восприимчивость среды, ρ — плотность атомов, f — атомный фактор рассеяния на нулевой угол. В выражении (3) представлена известная связь между восприимчивостью, показателем преломления и атомным фактором рассеяния для рентгеновского излучения, отмеченная в начале статьи.

Для набега фазы при отражении от кристаллических плоскостей на одном периоде должно быть

$$\exp[-2i \operatorname{Re}(k_{1h}d)] = e^{2\pi i}, \tag{4}$$

где k_{1h} — проекция (комплексного) волнового вектора преломленной волны на нормаль к отражающим плоскостям, т. е. на направление вектора обратной решетки

$$\mathbf{h} = \frac{2\pi}{d} \{0, -\sin \psi, -\cos \psi\}.$$

Косинус угла между векторами \mathbf{h} и \mathbf{k}_1 (или минус синус угла между направлением преломленной волны и отражающей кристаллической плоскостью) равен

$$\frac{\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{h}}{k_{1h}} = \cos \alpha = \frac{-\cos \theta \sin \psi - \operatorname{Re}(\sin \theta') \cos \psi}{1 + \chi/2}. \tag{5}$$

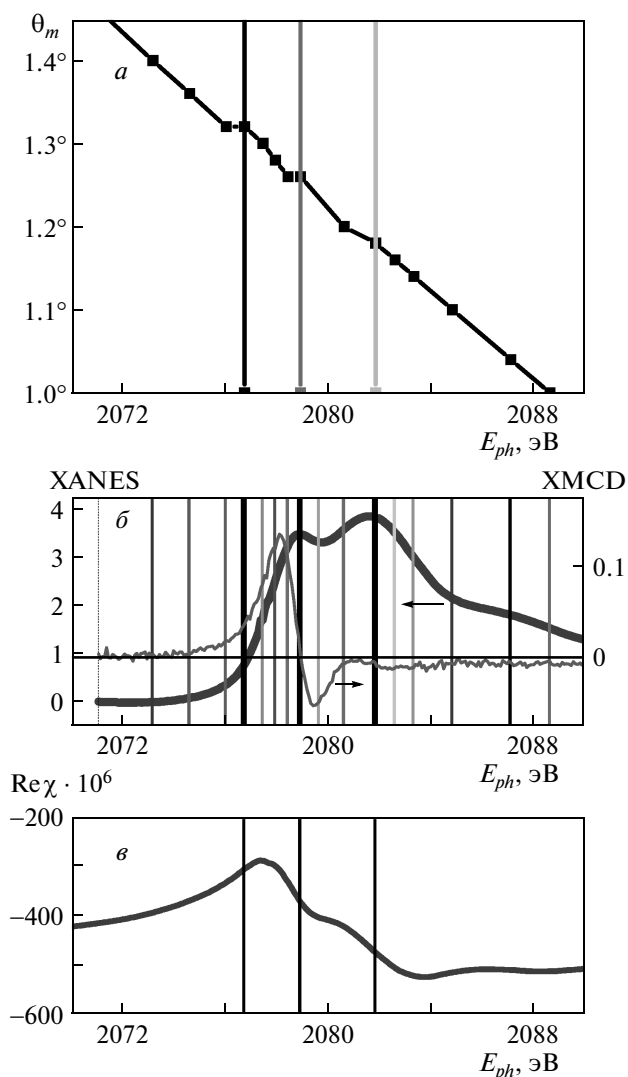


Рис. 2. а) Угол скольжения θ_m , при котором наблюдался пик на кривых флуоресцентного выхода, в зависимости от энергии падающих фотонов вблизи L_3 -края поглощения иттрия (вертикальные линии обозначают некоторые резонансные особенности); б) экспериментальные зависимости поглощения, XANES (жирная кривая) и кругового дихроизма, XMCD (тонкая кривая) для нашего образца (вертикальные линии обозначают энергии падающих фотонов, для которых одновременно измерялись рефлектометрические и флуоресцентные кривые); в) зависимость действительной части восприимчивости, полученная при подгонке рефлектометрических кривых в работе [15]

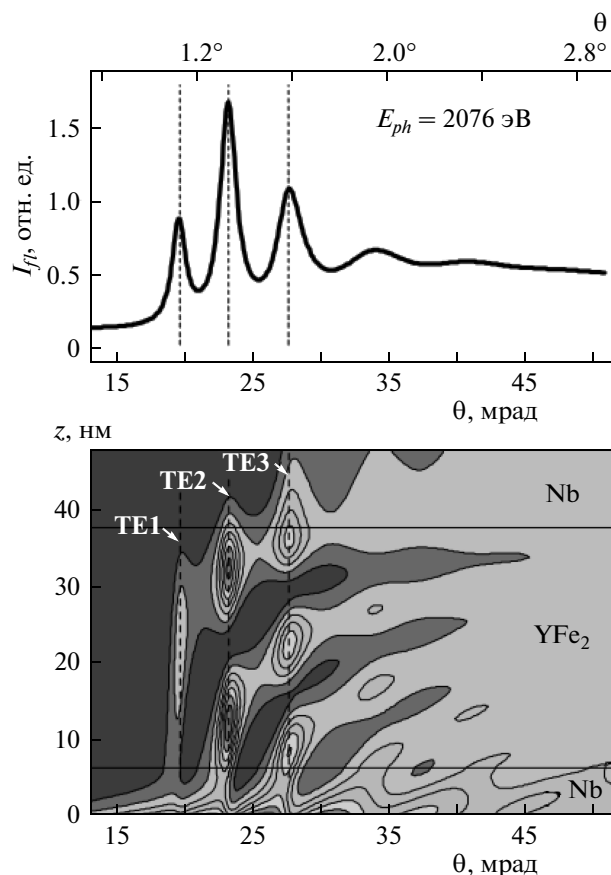


Рис. 3. а) Попытка объяснить возникновение пиков на кривых выхода флуоресцентного излучения формированием волноводной моды в пленке YFe_2 ; б) квадрат модуля амплитуды поля рентгеновской стоячей волны в структуре $Nb/YFe_2/Nb$ как функция угла скольжения θ и глубины z — наибольшая интенсивность поля соответствует наиболее темным (красным в цветном варианте) областям

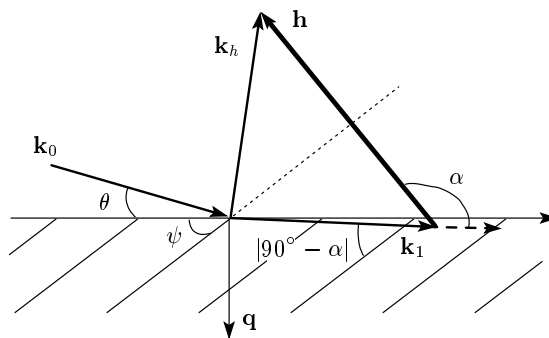


Рис. 4. Рассматриваемая геометрия резко асимметричной дифракции

Таким образом,

$$-\operatorname{Re} k_{1h} = \frac{2\pi}{\lambda} [\cos \theta \sin \psi + \operatorname{Re}(\sin \theta') \cos \psi], \quad (6)$$

и мы получаем обобщение формулы Вульфа–Брэгга на случай резко асимметричной дифракции в виде

$$\sin \psi \cos \theta_m + \cos \psi \operatorname{Re} \sqrt{\sin^2 \theta_m + \chi(E_{ph})} = \frac{\lambda}{2d}. \quad (7)$$

Это уравнение для определения угла скольжения $\theta_m(E_{ph})$, при котором возникает брэгговское отражение, решаем методом Ньютона, не используя процедуру приближенного вычисления квадратного корня. Отметим, что в работах [9–13, 21] квадратный корень в уравнении (7) вычислялся приближенно (что справедливо только вдали от критического угла, но это не соответствует нашему случаю), поэтому считалось, что в кинематическом приближении величина $\operatorname{Im} \chi(E_{ph})$ не влияет на положение брэгговского максимума. Точное решение уравнения (7) учитывает $\operatorname{Im} \chi(E_{ph})$, однако влияние поглощения в этом алгоритме все же невелико.

Мнимая часть фазового сдвига, $2 \operatorname{Im}(k_{1h}d)$, искажает форму брэгговского пика, и, если поглощение асимметрично относительно θ_m , максимум сдвигается. В кинематическом приближении форму и, соответственно, точное положение брэгговского максимума дает функция Лауэ (как сумма бесконечной геометрической прогрессии для амплитуд волн, рассеянных кристаллическими плоскостями [22]). В нашем случае представляем ее в виде

$$I = \left| \frac{t}{1 - \exp(-2ik_{1h}d)} \right|^2, \quad (8)$$

где t — амплитуда преломленной волны, которая для случая границы между внешней средой и полубесконечным кристаллом определяется формулой Френеля $t = 2 \sin \theta / (\sin \theta + \eta)$.

Динамическая теория резко асимметричной дифракции рассматривалась ранее в основном для решения задач управления пучками рентгеновского излучения. Были получены приближенные выражения для ширины, сдвига и расходимости дифрагированного пучка [23–26]. Эффект усиления влияния преломления на эти параметры был продемонстрирован и даже использовался для разделения близких дифракционных максимумов от пленки и подложки [27]. Для нашей задачи будем решать дисперсионное уравнение динамической теории четвертой степени, не пренебрегая квадратичными по преломлению добавками к квадратам волновых векторов, и

находить положение брэгговского пика $\theta_m(E_{ph})$ как экстремум модуля в квадрате амплитуды дифрагированной волны.

В динамической теории с учетом пространственной периодичности кристалла диэлектрическую восприимчивость $\chi(\mathbf{r})$ представляют рядом Фурье,

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_h \chi_h \exp\left(-i\frac{\omega}{c} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{r}\right), \quad (9)$$

что в двухволновом случае дает для амплитуд плоских проходящей \mathbf{E}_1 и дифрагированной \mathbf{E}_2 волн уравнения связи вида

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_1 &= (1 + \chi_0)\mathbf{E}_1 + \chi_h\mathbf{E}_2, \\ \mathbf{D}_2 &= (1 + \chi_0)\mathbf{E}_2 + \chi_{\bar{h}}\mathbf{E}_1. \end{aligned} \quad (10)$$

Уравнения Максвелла для плоских волн $\exp[i(\omega/c)\hat{\mathbf{k}}_i \cdot \mathbf{r} - i\omega t]$ имеют вид

$$\mathbf{D}_i = -\hat{\mathbf{k}}_i \times \mathbf{H}_i, \quad \mathbf{H}_i = \hat{\mathbf{k}}_i \times \mathbf{E}_i \quad (11)$$

(в выражениях (9), (11) и далее используем волновые векторы и вектор обратной решетки $\boldsymbol{\tau}$ в единицах $2\pi/\lambda = \omega/c$, т. е. $\boldsymbol{\tau} = (\lambda/2\pi)\mathbf{h}$, $\hat{\mathbf{k}}_2 = \hat{\mathbf{k}}_1 + \boldsymbol{\tau}$). Из (10), (11) получаем систему уравнений относительно амплитуд поля \mathbf{E}_1 и \mathbf{E}_2 , которая в простейшем случае для σ -поляризации, когда все векторы \mathbf{E}_i перпендикулярны плоскости рассеяния и можно работать со скалярными амплитудами, имеет вид

$$\begin{aligned} (1 + \chi_0)E_1 + \chi_h E_2 &= \hat{\mathbf{k}}_1^2 E_1, \\ (1 + \chi_0)E_2 + \chi_{\bar{h}} E_1 &= \hat{\mathbf{k}}_2^2 E_2. \end{aligned} \quad (12)$$

(В общем случае векторы \mathbf{E}_i не перпендикулярны волновым векторам $\hat{\mathbf{k}}_i$, поэтому для других поляризаций и анизотропных сред удобнее писать систему динамических уравнений для поперечных векторов \mathbf{D}_i или \mathbf{H}_i [28, 29]).

Система (12) имеет решение при условии

$$(1 - \hat{\mathbf{k}}_1^2 + \chi_0)(1 - \hat{\mathbf{k}}_2^2 + \chi_0) - \chi_{\bar{h}}\chi_h = 0. \quad (13)$$

Это дисперсионное уравнение является уравнением четвертой степени относительно поправки на преломление $\xi = \eta - \sin \theta$, поскольку

$$\hat{\mathbf{k}}_1^2 = (\hat{\mathbf{k}}_0 + \xi\mathbf{q})^2 = 1 + 2\xi \sin \theta + \xi^2, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{k}}_2^2 &= (\hat{\mathbf{k}}_1 + \boldsymbol{\tau})^2 = (\hat{\mathbf{k}}_0 + \xi\mathbf{q})^2 + 2\boldsymbol{\tau} \cdot (\hat{\mathbf{k}}_0 + \xi\mathbf{q}) + \boldsymbol{\tau}^2 = \\ &= 1 + 2\xi \sin \theta_h + \xi^2 + \delta, \end{aligned} \quad (15)$$

где $\hat{\mathbf{k}}_0$ — волновой вектор падающей волны в единицах ω/c ($|\hat{\mathbf{k}}_0|^2 = 1$), \mathbf{q} — единичный вектор нормали

к поверхности, $\sin \theta_h = \sin \theta + \tau \cdot \mathbf{q}$, θ_h — угол выхода дифрагированной волны, $\delta = \tau \cdot (\tau + 2\hat{\kappa}_0)$ — отклонение от точного угла Брэгга. Если в (15) пренебречь ξ^2 (поскольку $\sin \theta_h$ достаточно велик) можно с достаточной точностью ограничиться решением уравнения (13) третьей степени по ξ , но это не слишком упрощает компьютерное решение задачи.

Граничная задача для определения амплитуд зеркально отраженной E_R от полубесконечного кристалла и дифрагированной волн E_h связывает тангенциальные компоненты электрического и магнитного полей излучения внутри и вне кристалла, что в нашем случае приводит к системе уравнений

$$\begin{aligned} E_0 + E_R &= \sum_i E_1^{(i)}, \\ \sin \theta (E_0 - E_R) &= \sum_i (\sin \theta + \xi^{(i)}) E_1^{(i)}, \\ E_h &= \sum_i E_2^{(i)}, \\ -\sin \theta_h E_h &= -\sum_i (\sin \theta_h + \xi^{(i)}) E_2^{(i)}. \end{aligned} \quad (16)$$

Для решения системы (16) следует учесть, что в кристалле амплитуды $E_2^{(i)}$ дифрагированных волн связаны с амплитудами $E_1^{(i)}$ проходящих волн соотношением, следующим из (12):

$$E_2^{(i)} = -\frac{1 - \hat{\kappa}_1^{(i)2} + \chi_0}{\chi_h} E_1^{(i)} = -\frac{\chi_{\bar{h}}}{1 - \hat{\kappa}_2^{(i)2} + \chi_0} E_1^{(i)}. \quad (17)$$

Кроме того, анализ корней уравнения (13) показывает, что в нашем случае резко асимметричной дифракции для полубесконечной среды только один корень из четырех имеет физический смысл. При этом два первых уравнения в системе (16) становятся независимыми от двух последующих, и они фактически дают формулу Френеля для зеркально отраженной E_R и единственной преломленной $E_1^{(1)}$ волн (но в динамическом случае нормальная компонента волнового вектора в среде $\eta = \sin \theta + \xi^{(1)}$ определяется из уравнения (13), а не формулой (2)). Для дифрагированной волны $E_2^{(1)}$ преломление не существенно, поскольку волновой вектор дифрагированной волны образует достаточно большой угол с поверхностью (см. рис. 4), так что можно вместо двух последних уравнений в системе (16) положить $E_h = E_2^{(1)}$. С учетом (17) это полностью решает задачу вычисления амплитуды дифрагированной волны как функции угла скольжения θ падающего излучения и нахождения ее экстремума.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ

Численное моделирование мы провели для пленки YFe_2 вблизи L_3 -края поглощения иттрия ($E_{ph} = 2071\text{--}2095$ эВ, $\lambda = 0.5986\text{--}0.5918$ нм). Для отражения от кристаллических плоскостей (111) с межплоскостным расстоянием $d = 0.4255$ нм для рассматриваемого интервала длин волн идеальный угол Брэгга составляет $44.71\text{--}44.06^\circ$. Для того чтобы дифракция возникала при скользящем угле падения, мы выбрали угол $\psi = 43.9^\circ$. Спектральные зависимости действительной и мнимой частей восприимчивости $\chi_0(E_{ph})$ мы взяли из работы [15]. Фурье-компоненты $\chi_{h,\bar{h}}(E_{ph})$ вычислялись для структуры $C15$ ($Fd3mO_7^7$, атомы Y в положении $8a$, атомы Fe в положении $16d$) с использованием [30].

Уравнение (13) решалось с помощью программного пакета Wolfram Mathematica, который дал аналитическое решение уравнения четвертой степени (слишком громоздкое, чтобы его здесь привести), и далее численный результат по вводимым параметрам. Для энергии $E_{ph} = 2082$ эВ результат приведен на рис. 5. Наглядно показано, что только один корень $\hat{\kappa}_1^{(1)}$ в нашей геометрии имеет смысл. Волновой вектор $\hat{\kappa}_1^{(2)}$ имеет небольшую отрицательную мнимую часть при положительной действительной части нормальной составляющей и не имеет физического смысла; для $\hat{\kappa}_1^{(3)}$ волна направлена из среды, эта волна возбуждается в пленке при наличии нижней границы; $\hat{\kappa}_1^{(4)}$ имеет слишком большую действительную часть, соответствующая интенсивность дифрагированной волны, согласно (17), пренебрежимо мала. Отметим, что величина $\eta^{(1)}$ очень мало отличается от $\eta = \sqrt{\sin^2 \theta + \chi}$, что может быть обусловлено относительно малой величиной $\chi_h \chi_{\bar{h}}(E_{ph})$ для нашей структуры.

Для сравнения кинематики и динамики мы рассчитали форму дифракционного максимума $|E_h(\theta)|^2$ по формуле (8) и по динамической теории (рис. 6). (Отметим, что вычисленный «динамический» дифракционный максимум полностью совпадает с рассчитанным по формулам из работы [23].) Видно, что форма дифракционного максимума в кинематическом и динамическом приближениях различается, но положение брэгговского максимума θ_m в обоих приближениях почти совпадает. В нашей задаче интересно именно положение брэгговского максимума θ_m в зависимости от энергии фотонов E_{ph} , представленное на рис. 7, 8. Эти расчетные зависимости демонстрируют существенно более сильную зависимость положения брэгговского пика от эффекта преломления, чем наблюдалась в эксперименте.

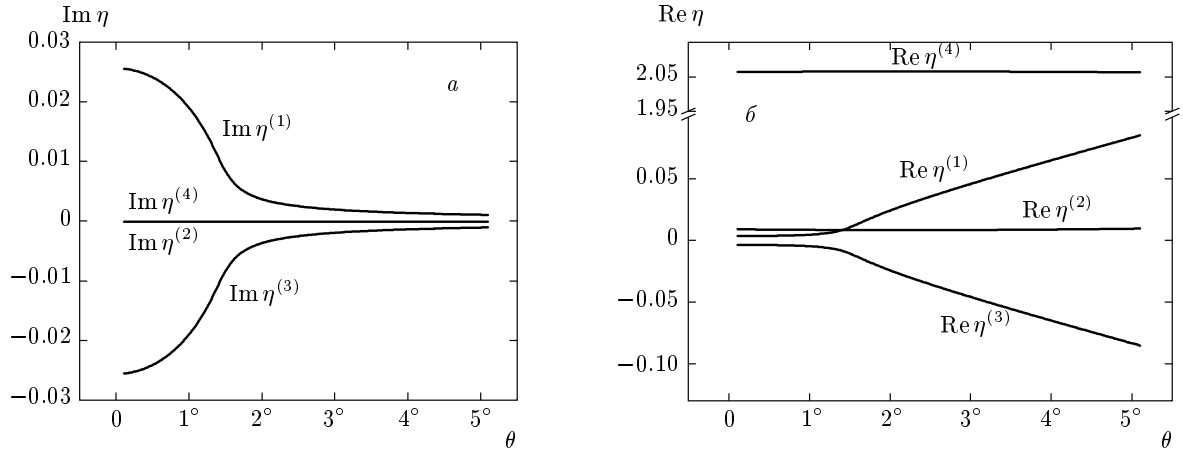


Рис. 5. Корни уравнения (13) для энергии фотонов $E_{ph} = 2082$ эВ

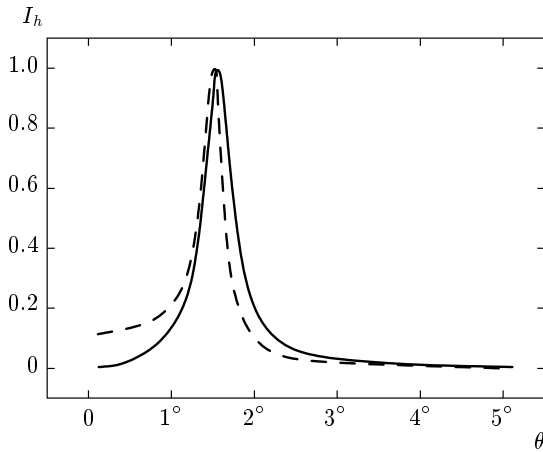


Рис. 6. Нормированные кривые дифракционного отражения (111) (в функции угла скольжения θ) от кристалла YFe_2 для $E_{ph} = 2082$ эВ, рассчитанные по формуле (8) — штриховая кривая, и по динамической теории (13)–(17) — сплошная кривая в условиях резко асимметричной дифракции для $\psi = 43.9^\circ$

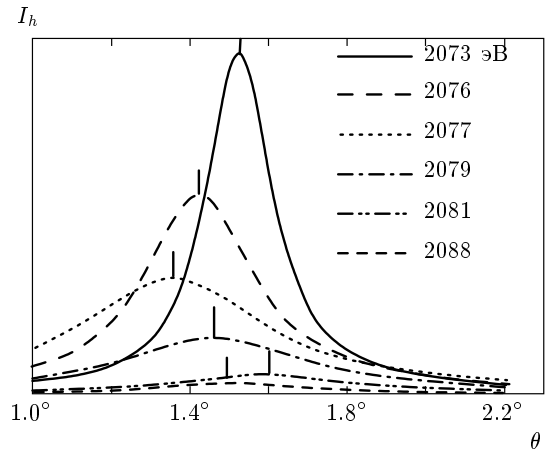


Рис. 7. Кривые дифракционного отражения от кристалла YFe_2 для нескольких энергий фотонов вблизи L_3 -края поглощения иттрия. Расчет по динамической теории. Вертикальные черточки отмечают положения максимумов, которые представлены на рис. 8 в зависимости от энергии фотонов

Экспериментальные значения положения всплесков интенсивности представлены на рис. 8 точками. Отметим, что эксперимент не предполагал исследования рассматриваемого эффекта, так что образец не был монокристаллическим вблизи поверхности. Наблюдаемая слабая зависимость положения пиков от резонансного преломления была случайным артефактом. Слабый эффект может быть объяснен тем, что пленка YFe_2 была закрыта слоем ниобия, и при скользких углах, когда излучение проникает на глубину 3–5 нм, сигнал мог быть полу-

чен только от интерфейса Nb/ YFe_2 . Верхний слой ниобия, по свидетельству технологов, имел мелкокристаллическую структуру; при этом интерфейс Nb/ YFe_2 также мог быть достаточно разупорядочен. Это объясняет также и то, что ориентация самой пленки YFe_2 соответствовала $\langle 011 \rangle$, при этом теоретически плоскости (111) должны были составлять угол с поверхностью примерно 35.3° . Но в этом случае при скользких углах мы бы не имели брэгговского отражения для межплоскостного расстояния $d = 0.4255$ нм. Так что случайно зафиксированные брэгговские отражения могут быть объясне-

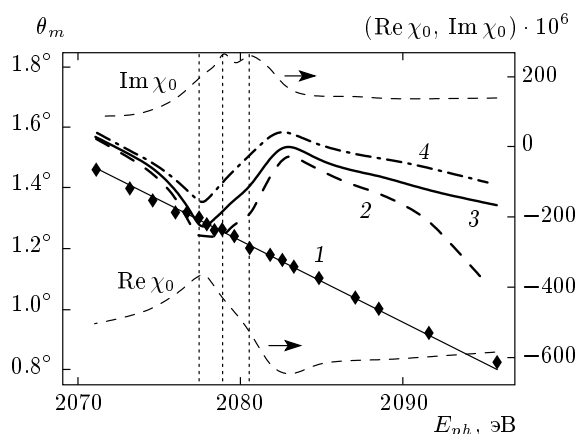


Рис. 8. Значения угла скольжения θ_m , при котором должен наблюдаться максимум брэгговского пика от идеального кристалла YFe_2 , в зависимости от энергии фотонов вблизи L_3 -края поглощения иттрия, рассчитанные по обычному закону Вульфа – Брэгга (1) — линия 1, по обобщенной формуле (5) — линия 2, с использованием функции Лауэ (8) — линия 3, и по динамической теории — линия 4. Точками представлены экспериментальные значения положения пиков для образца $\text{Nb}(4 \text{ нм})/\text{YFe}_2(40 \text{ нм } \langle 110 \rangle)/\text{Fe}(1.5 \text{ нм})/\text{Nb}(50 \text{ нм})/\text{сапфир}$. Для сравнения на этом же рисунке приведены зависимости $\text{Re } \chi_0, \text{Im } \chi_0$

ны как искажениями элементарной ячейки YFe_2 при внедрении атомов Nb, так и поликристаллизацией структуры YFe_2 в интерфейсной области. Восприимчивость в интерфейсной области также должна иметь ослабленную резонансную зависимость. Для такой несовершенной структуры нельзя было ожидать существенной резонансной зависимости положения брэгговских пиков от энергии фотонов, следующей из теории. Теоретические расчеты демонстрируют, что для экспериментов с идеальным кристаллом эта зависимость действительно может быть использована для восстановления магнитооптических констант.

Наибольший интерес в современных синхротронных исследованиях представляют магнитные эффекты в рассеянии, наблюдаемые вблизи краев поглощения. С учетом магнитного рассеяния рентгеновского излучения восприимчивость среды становится тензором, при этом определение недиагональных компонент этого тензора, отвечающих за магнитные эффекты в рассеянии, наиболее важно. Теория отражения и дифракции в общем случае существенно усложняется, но в некоторых случаях, например при скользком падении и ориентации намагниченности в плоскости рассеяния,

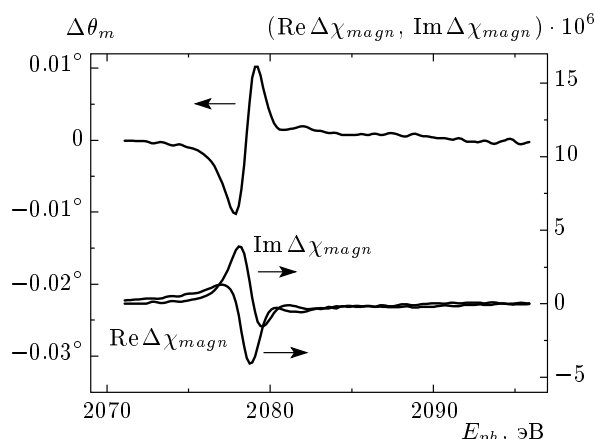


Рис. 9. Разность положений брэгговских пиков для правой и левой круговых поляризаций падающего излучения, рассчитанная для кристалла YFe_2 вблизи L_3 -края поглощения иттрия. Для сравнения приведены спектральные зависимости $\Delta\chi_{magn}(E_{ph})$ из работы [15]

для волн круговой поляризации оказывается возможным использовать «скалярную» теорию отражения [31]. При этом в расчетах следует использовать восприимчивость с «магнитными» добавками, $\chi \pm \Delta\chi_{magn}$, где знаки « \pm » соответствуют правой и левой круговым поляризациям падающего излучения. Влияние «магнитного» преломления на положение дифракционных максимумов проанализировано для значений $\Delta\chi_{magn}(E_{ph})$ из работы [15]. Рассчитанная зависимость разности положений брэгговских пиков для двух круговых поляризаций, $\Delta\theta_m = \theta_m(E_{ph}^+) - \theta_m(E_{ph}^-)$, воспроизводит в общих чертах (обращенную) форму действительной части величины $\Delta\chi_{magn}(E_{ph})$ (рис. 9). Результат, представленный на рис. 9, показывает, что зависимость $\theta_m(E_{ph}^+) - \theta_m(E_{ph}^-)$ вполне наблюдаема даже для таких небольших значений наведенных магнитных моментов, как это имеет место на атомах Y в структуре YFe_2 .

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ показывает, что для идеальной структуры влияние преломления на положение дифракционного максимума в условиях резко асимметричной дифракции весьма значительно. Расчет положения дифракционного пика для правой и левой круговых поляризаций с учетом магнитной добавки к восприимчивости из работы [15] показывает, что и магнитный эффект в условиях резко асимметричной дифракции для жесткого рентгеновского излучения наблюдаем.

Таким образом, резко асимметричная дифракция может быть хорошим методом для определения магнитооптических констант в диапазоне длин волн жесткого рентгеновского излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 09-02-01293, 13-02-00760-а, 15-02-01502). Эксперимент на ESRF проведен в рамках проекта MI 925.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. Е. Дмитриенко, Е. Н. Овчинникова, Кристаллография **48**, S59 (2003).
2. N. Jaouen, G. van der Laan, T. K. Johal et al., Phys. Rev. B **70**, 094417 (2004).
3. A. Bergmann, J. Grabis, A. Nefedov et al., J. Phys. D **39**, 842 (2006).
4. S. Brück, G. Schütz, E. Goering et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 126402 (2008).
5. N. Hosoi, T. Ohkochi, K. Kodama, and R. Yamagishi, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 094716 (2009).
6. E. Kravtsov, D. Haskel, S. G. E. te Velthuis et al., Phys. Rev. B **79**, 134438 (2009).
7. J. W. Freeland, J. Chakhalian, A. V. Boris et al., Phys. Rev. B **81**, 094414 (2010).
8. М. А. Андреева, Е. Р. Домашевская, Е. Е. Одицова и др., J. Synchr. Rad. **19**, 609 (2012).
9. M. Sacchi, C. Hague, L. Pasquali et al., Phys. Rev. Lett. **81**, 1521 (1998).
10. M. Sacchi, C. Hague, E. Gullikson, and J. Underwood, Phys. Rev. B **57**, 108 (1998).
11. M. Sacchi, Rassegna Scientifica **4**, 3 (1999).
12. М. А. Андреева, А. Г. Смехова, В. Lindgren et al., J. Magn. Magn. Mater. **300**, e371 (2006).
13. М. А. Андреева, А. Г. Смехова, Поверхность. Рентг., синхр. и нейтр. исслед. вып. 2, 83 (2006).
14. R. L. Blake, J. C. Davis, D. E. Graessle et al., in *Resonant Anomalous X-ray Scattering, Theory and Applications*, ed. by G. Materlik, C. J. Sparks, and K. Fischer, Elsevier, New York (1994), p. 79.
15. А. Г. Смехова, М. А. Андреева, Е. Е. Одицова и др., Кристаллография **55**, 906 (2010).
16. B. L. Henke, Phys. Rev. A **6**, 94 (1972).
17. M. J. Bedzyk, G. M. Bommarito, and J. S. Schildkraut, Phys. Rev. Lett. **62**, 1376 (1989).
18. B. N. Dev, A. K. Das, S. Dev et al., Phys. Rev. B **61**, 8462 (2000).
19. Ю. Л. Репченко, *Материалы международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2012»*, секция «Физика», подсекция «Физика твердого тела», Москва (2012), с. 40.
20. <http://powdercell-for-windows.software.informer.com/2.4/>.
21. A. Rosenbluth and P. Lee, Appl. Phys. Lett. **40**, 466 (1982).
22. В. И. Иверонова, Г. П. Ревкевич, *Теория рассеяния рентгеновских лучей*, Изд-во МГУ (1972), с. 49.
23. S. Kishino and K. Kohra, Jpn. J. Appl. Phys. **10**, 551 (1971).
24. F. Rustichelli, Phil. Mag. **31**, 1 (1975).
25. O. Brümmer, H. R. Höcher, and J. Nieberr, Phys. Stat. Sol. (a) **37**, 529 (1976).
26. А. В. Андреев, УФН **145**, 113 (1985).
27. U. Pietsch and W. Borchard, J. Appl. Cryst. **20**, 8 (1987).
28. З. Г. Пинскер, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах*, Наука, Москва (1974), с. 20.
29. М. А. Андреева, Р. Н. Кузьмин, *Мессбауэровская гамма-оптика*, Изд-во МГУ (1982), с. 149.
30. Int. Tables for X-ray Crystallography, Vol. 1, p. 340 (1969).
31. Е. Е. Одицова, М. А. Андреева, Поверхность. Рентг., синхротр. и нейтр. исслед. вып. 11, 46 (2010).