



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
**федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

**«РОССИЙСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ГИДРОМЕТЕОРОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра Физики

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

Бакалаврская работа

На тему: Рассеяние нейтронов на многослойных наноструктурах

Исполнитель: Студент группы Ф-Б17-1
Никифоров Владимир Александрович

Руководитель: Проф. каф. физики, к.ф. – м.н., доцент
Сыромятников Владислав Генрихович

«К защите допускаю»

Заведующий кафедрой _____

(подпись)

к.ф. – м.н., доцент

Бобровский Анатолий Петрович

«___» _____ 2021г.

Санкт-Петербург

2021

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Обзор литературы	6
1.1 Формализм Парратта	6
1.1.1 Анализ и применение	6
1.1.2 Две однородные среды	7
1.1.3 Форма кривой отражения для двух сред	8
1.1.4 N – стратифицированные однородные среды	10
1.2 Поляризационный анализ рассеяния тепловых нейтронов	11
1.2.1 Рабочая установка	13
1.3 Поляризация нейтронов магнитными зеркалами	15
1.3.1 Общие положения	15
1.3.2 Отражение нейтронов от границы двух бесконечных сред.	16
1.3.3 Поляризующие многослойные периодические наноструктуры.	17
1.4 Магнитная наноструктура Fe/Co	22
1.5 Нейтронный мультимонохроматор – биполяризатор на базе магнитной многослойной структуры Fe/Co и новая схема для полного нейтронного поляризационного анализа	24
Глава 2. Постановка задачи и план исследования	27
2.1 Квантово – механическое представление	27
2.2 Выбор наиболее подходящих материалов для исследования рассеяния	29
2.3 Вывод соотношений для расчета параметров структуры мультимонохроматора – биполяризатора	29
2.4 Изучение влияния на рассеяние нейтронов параметров намагниченности материалов	30

2.5	Расчет коэффициента отражения и сравнение на разных углах	30
Глава 3. Расчет и реализация мультимонохроматора – биполяризатора		32
3.1	Материал структуры	32
3.2	Соотношения для расчетов толщин слоёв в мультимонохроматоре – биполяризаторе	36
3.3	Расчет кривых коэффициента отражения и сравнение на разных углах рассеяния	42
3.4	Исследование рассеяния нейтронов при разных параметрах намагниченности	51
Заключение		59
Список использованной литературы		61
Приложение А – Код программы для расчета периода мультинаноструктуры		63

Введение

Актуальность темы заключается в том, что экспериментальная физика требует постоянного улучшения методов исследования. Это может быть, как увеличение точности измерения, так и усовершенствование самих методов эксперимента и исследования. Первоначальные методики с развитием научного знания устаревают и на их смену приходят новые, за частую новизна заключается в уменьшении размеров установки и упрощения проведения эксперимента для более быстрого и информативного получения данных. С развитием успехов атомной и квантовой физики нужда в новых инструментах для исследования вещества только увеличивается.

Одним из таких методов является полный нейтронный поляризационный анализ. Так как установка состоит из большого числа элементов некоторые, из них можно усовершенствовать в результате чего размеры установки сильно сократятся. В настоящее время для поляризации нейтронов в качестве элементов установки используют многослойные наноструктуры. Часто такая наноструктура представляет собой монохроматор – поляризатор для нейтронной волны и состоит из периодических магнитных и немагнитных пленок.

В полном нейтронном поляризационном анализе и в поляризационной рефлектометрии, а также в исследованиях малоуглового рассеяния такие структуры на сегодняшний день применяют в качестве зеркал поляризаторов, но для полного анализа в схеме установки включены приборы для изменения направления спина нейтрона так называемые спин – флипперы, а также громоздкие системы ведущих магнитных полей.

В работе [1] представлена возможность создания принципиально нового способа для получения пучка поляризованных нейтронов в широком спектральном диапазоне, с использованием магнитной наноструктуры называемой Нейтронный Мультимонохроматор – Биполяризатор (НММБ). Используя экспериментальные данные в этой ходе работы были получены

результаты для дальнейшего теоретического исследования мультимонохроматора – биполяризатора. А также в этой работе представлен пример использования мультимонохроматора – биполяризатора в практических целях. А именно представлена новая схема нейтронного поляризационного анализа, исключая один или оба спин – флиппера из схемы установки, и использовать на их месте мультимонохроматора – биполяризатора.

Новизна и уникальность заключается в том, что с помощью мультимонохроматора – биполяризатора в установке для полного поляризационного анализа, можно уменьшить размеры установки исключив из нее один или оба спин – флиппера что значительно сократит размеры, но при этом сохранит суть методики эксперимента неизменной.

Использование таких структур может быть использовано непосредственно в нейтронно – физических установках, в связи с запуском реактора ПИК в Петербургском институте ядерной физики НИЦ КИ.

В дальнейшем будет представлен теоретический поиск и расчет структур и их параметров в соответствие с теоретическими обоснованиями для применения в данном методе.

Целью настоящей работы являлось на основе теоретических и экспериментальных данных подобрать тип структуры и материалы слоёв, из которых структура и будет состоять. На основе исследований выявить закономерности поляризации и монохроматизации пучка нейтронов исследованной структурой, а также выявления интересных особенностей, связанных с выбранным типом структуры. Рассчитать параметры, при которых наноструктура будет обеспечивать требованиям в экспериментальной установке. И в конечном итоге предложить модель модернизированного нейтронно – оптического элемента мультимонохроматора – биполяризатора на основе полученных результатов.

Глава 1. Обзор литературы

1.1 Формализм Парратта

1.1.1 Анализ и применение

Анализ отраженной интенсивности рентгеновских лучей или нейтронной волны дает плодотворный метод исследования свойств поверхности, включающий вариации электронной плотности с глубиной, например, коррозия, пористость, старение или отжиг, а также возможен, для изучения гладкости по шкале между оптическим микроскопом и электронным микроскопом. Экспериментальная установка для одного из таких методов схематически изображена на рисунке 1.1.

Метод Парратта [2] так же используется для анализа отражения нейтронной волны в нейтронной рефлектометрии.

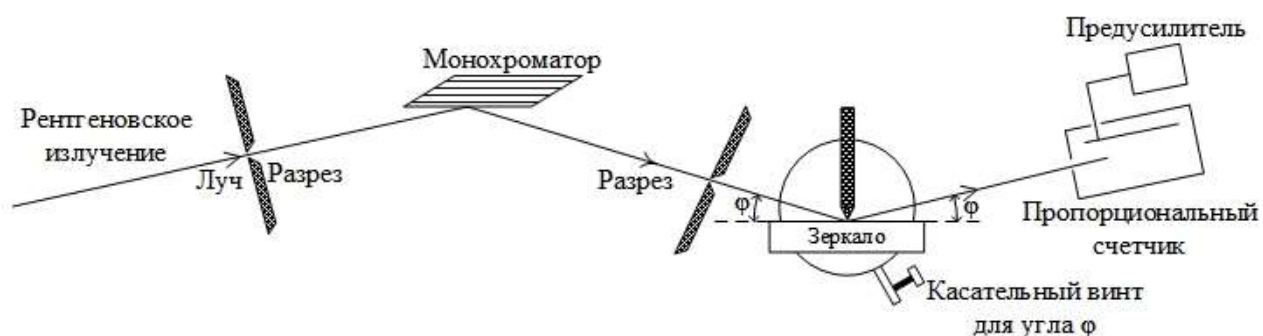


Рис. 1.1. Экспериментальная установка для исследования полного внешнего отражения рентгеновского излучения

1.1.2 Две однородные среды

Для любого угла скольжения, выражения для волнового вектора, включающего падающий луч $E_1(z_1)$, отраженный луч $E_1^R(z_1)$ и преломленный луч $E_2(z_2)$ на перпендикулярном расстоянии z в направлении перпендикулярном к поверхности представлены в системе уравнений (1.1). Схема для отражения и преломления падающего излучения для слоистых однородных сред представлена на рисунке 1.2.

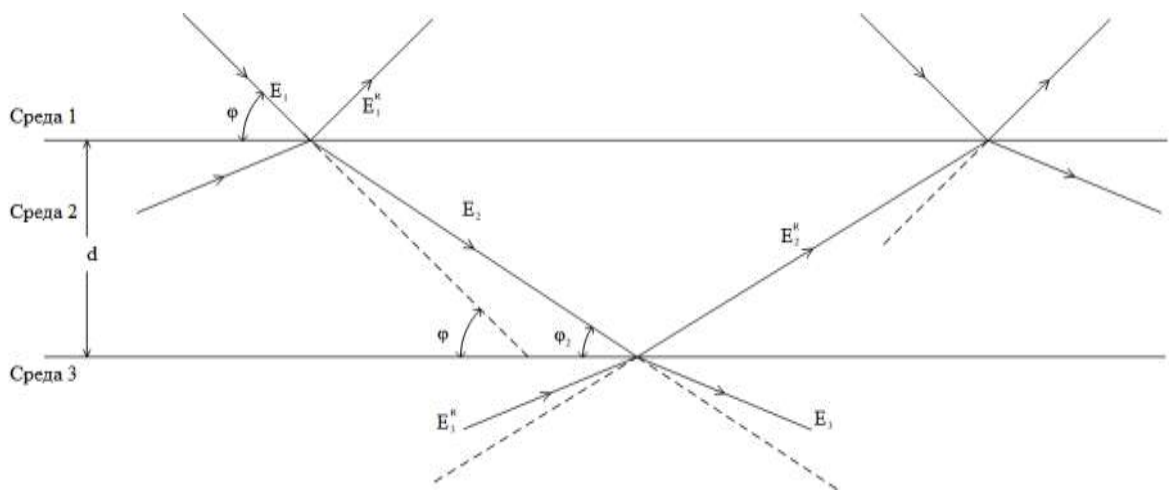


Рис. 1.2. Отражения и преломления падающего излучения для слоистых однородных сред

$$\begin{cases} E_1(z_1) = E_1(0) \exp(i[\omega t - (k_{1,x}x_1 + k_{1,z}z_1)]) \\ E_1^R(z_1) = E_1^R(0) \exp(i[\omega t - (k_{1,x}x_1 + k_{1,z}z_1)]) \\ E_2(z_2) = E_2(0) \exp(i[\omega t - (k_{2,x}x_2 + k_{2,z}z_2)]) \end{cases} \quad (1.1)$$

Где k_1 и k_2 - векторы распространения (с величиной $2\pi/\lambda_1$ и $2\pi/\lambda_2$) снаружи и внутри зеркала, x, z - плоскость падения, преломления и отражения луча, а направление y параллельно зеркальной поверхности. Для рентгеновских

лучей угол скольжения φ всегда очень мал, и можно сделать запись в виде формулы (1.2).

$$k_{2,x}^2 + k_{2,z}^2 = k_2^2 = n_2^2 k_1^2 = n_2^2 (k_{1,x}^2 / \cos^2 \varphi) \cong k_{1,x}^2 (1 - 2\delta_2 - 2i\beta_2 + \varphi^2) \quad (1.2)$$

где $(n_2 = 1 - 2\delta_2 - 2i\beta_2)$ – показатель преломления зеркала, $(n_1 = 1)$ для воздуха или вакуума, где пренебрегается второй и большей степенями δ_2 и β_2 поскольку каждая из них имеет порядок 10^{-5} или меньше. $(\beta_2 = \lambda\mu_2/4\pi)$, где μ_2 коэффициент линейного (некогерентного) поглощения зеркала.

Из граничного условия для тангенциальной составляющей волновых векторов и с приближением для малых φ , следует формула (1.3). Что для удобства записано в виде формулы (1.4).

$$k_{2,z} \cong k_1 \sqrt{(\varphi^2 - 2\delta_2 - 2i\beta_2)} \quad (1.3)$$

$$f_2 = \sqrt{(\varphi^2 - 2\delta_2 - 2i\beta_2)} \quad (1.4)$$

Выражение для преломленного луча имеет вид формулы (1.5).

$$E_2(z_2) = E_2(0) \exp[i(\omega t - k_{2,x}x_2)] \exp[ik_1 f_2 z_2] \quad (1.5)$$

1.1.3 Форма кривой отражения для двух сред

Коэффициент Френеля для отражения, можно записать в виде (1.6).

$$F_{1,2} = \frac{E_1^R}{E_2} = \frac{\sin \varphi - n_2 \sin \varphi_2}{\sin \varphi + n_2 \sin \varphi_2} \cong \frac{\varphi - f_2}{\varphi + f_2} = \frac{f_1 - f_2}{f_1 + f_2} \quad (1.6)$$

Первая часть уравнения (1.6) написана для σ – компоненты поляризации, но в рамках приближений, сделанных во второй части, нет необходимости проводить различие между σ – компонентами и π – компонентами.

Получить выражение для отношения интенсивностей, можно записав формулу (1.7).

$$f_2 = A - iB \quad (1.7)$$

Где A и B представлены как формулы (1.8) и (1.9).

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\left(\sqrt{[(\varphi^2 - \varphi_{c2}^2)^2 + 4\beta_2^2]} + \varphi^2 - \varphi_{c2}^2 \right)} \quad (1.8)$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\left(\sqrt{[(\varphi^2 - \varphi_{c2}^2)^2 + 4\beta_2^2]} + \varphi^2 - \varphi_{c2}^2 \right)} \quad (1.9)$$

Из закона Снеллиуса следует что ($n_2 = \cos \varphi / \cos \varphi_2$), а так же ($\delta_2 = \frac{1}{2} \varphi_{c2}^2$), где φ_{c2} – критический угол падения, при котором угол внутри зеркала равен нулю. Отношение отраженной интенсивности к падающей формула (1.10).

$$\frac{I_R}{I_0} = \left| \frac{E_1^R}{E_1} \right|^2 = \frac{(\varphi - A)^2 + B^2}{(\varphi + A)^2 + B^2} = \frac{h - (\varphi / \varphi_{c2}) \sqrt{2} \sqrt{(h-1)}}{h + (\varphi / \varphi_{c2}) \sqrt{2} \sqrt{(h-1)}} \quad (1.10)$$

Где h определено формулой (1.11).

$$h = \left(\frac{\varphi}{\varphi_{c2}}\right)^2 + \sqrt{\left(\left(\frac{\varphi}{\varphi_{c2}}\right)^2 - 1\right)^2 + \left(\frac{\beta}{\delta}\right)^2} \quad (1.11)$$

1.1.4 N – стратифицированные однородные среды

Теоретическое выражение для отражения для N ($N \geq 2$) слоистых однородных сред с гладкими граничными интерфейсами. При толщине каждой пластинки d_n . Толщина среды 1 (воздух или вакуум) опускается.

Непрерывность тангенциальных составляющих волновых векторов видна на рисунке 1.2 для $n - 1$, n - границы выражено в формулах (1.12) и (1.13).

$$a_{n-1}E_{n-1} + a_{n-1}^{-1}E_{n-1}^R = a_n^{-1}E_n + a_nE_n^R \quad (1.12)$$

$$(a_{n-1}E_{n-1} - a_{n-1}^{-1}E_{n-1}^R)f_{n-1}k_1 = (a_n^{-1}E_n - a_nE_n^R)f_nk_1 \quad (1.13)$$

Где a_n коэффициент амплитуды вектора E_n для полупериода глубины d_n обозначен в формуле (1.14), получается из формулы (1.5).

$$a_n = \exp\left(-ik_1f_n \frac{d_n}{2}\right) = \exp\left(-i\frac{\pi}{\lambda}f_nd_n\right) \quad (1.14)$$

В уравнениях. (1.12) и (1.13) векторные амплитуды E_{n-1} , E_{n-1}^R и E_n , E_n^R относятся к значениям в середине среднего $n - 1$. и n соответственно.

Решение (1.12) и (1.13) записывается в виде формулы рекурсии (1.15).

$$R_{n-1,n} = a_{n-1}^4 \left[\frac{R_{n,n+1} + F_{n-1,n}}{R_{n,n+1} F_{n-1,n} + 1} \right] \quad (1.15)$$

Где $R_{n,n+1} = a_n^2 (E_n^R / E_n)$ а так же $F_{n-1,n} = \frac{f_{n-1} - f_n}{f_{n-1} + f_n}$.

Решение уравнение (1.15) для (E_1^R / E_1) начиная с нижней среды, среды N , и отмечая, что $(R_{n,n+1} = 0)$, так как толщина этой среды бесконечна. Также отмечается что a_1 единственно, и, следовательно, $(R_{1,2} = E_1^R / E_1)$.

Отношение отраженной интенсивности к падающей, (I_R / I_0) представлено формулой (1.16).

$$\frac{I_R}{I_0} = \left| \frac{E_1^R}{E_1} \right|^2 \quad (1.16)$$

Далее аналогичный рекуррентный механизм будет использован для определения коэффициента отражения для нейтронной волны. Расчеты производились в специальных программах таких как Parratt32 [3] и Motofit [4].

1.2 Поляризационный анализ рассеяния тепловых нейтронов

При измерении рассеяния тепловых нейтронов поляризационно – чувствительными кристаллами, распределение рассеянных нейтронов от первоначально монохроматического поляризованного луча измеряется как функция угла, энергии и спина. Обычный прибор использующий поляризованный пучок представляет собой двух осевой дифрактометр. Измеряемая интенсивность включает интегрирование по окончательному распределению энергии и спина. Для рассеяния, из начального состояния заданного импульса и спин, и до конечного состояния с заданным импульсом и

спином. Образец выдерживают в магнитном поле, которое определяет направление поляризации как для падающих, так и для рассеянных нейтронов [5]. Поляризующие и анализирующие кристаллы могут быть рассмотрены как устройства с нулевой отражательной способностью для антипараллельного (-) спинов нейтрона. Устройства для изменения поляризации (флиппер) устанавливаются до и после образца. Когда оба флиппера выключены, луч, падающий на образец находится в параллельном (+) спиновом состоянии и только те нейтроны, которые рассеиваются без изменения спина, будут отражены анализатором.

Таким образом, мы измеряем (++) интенсивность. При включенном первом флиппере падающий луч находится в (-) спиновом состоянии, но анализатор будет отражать только (+) спиновые нейтроны, так что в этом случае мы измеряем интенсивность спин-флип (- +). Аналогично при включенном втором флиппере и выключенном первом измеряем (+ -) интенсивность, и с двумя включенными флипперами мы измеряем (- -) интенсивность. Таким образом, естественно думать в терминах этих четырех интенсивностей и говорить о спин-флип – рассеяние (+ - и - +) и без переворота спина рассеяние (++ и - -).

Это другой язык, чем тот что обычно используется теоретиками при описании рассеяния поляризованных нейтронов. Полное сечение (суммированное по окончательному спиновому состоянию) и конечная поляризация рассчитываются как функция начальной поляризации.

Поляризационное уравнение – это векторное соотношение, дающее величину и направление конечной поляризации. Измеряя только составляющие конечной поляризации вдоль направления начальной поляризации.

Результаты включают эксперименты по ядерному некогерентному рассеянию, парамагнитному рассеянию, Брэгговское рассеяние и рассеяние магнонов как на ферромагнетиках, так и на антиферромагнетиках, этот метод имеет важное применение в самых разных областях.

Поляризационный анализ – универсальный инструмент для идентификации спин-зависимых процессов рассеяния. Анализируя результаты экспериментов или при планировании новых экспериментов, полезно и почти достаточно помнить, что компоненты эффективного спина, которые параллельны нейтронной поляризации производят не спин – флип рассеяние, а перпендикулярная поляризация нейтронов производит спин – флипповое рассеяние.

Области полезного применения этой методики включают разделение ядерных и магнитных Брэгговских рассеяний на антиферромагнетиках, разделение рассеяние магнонов и фононов на ферромагнетиках и антиферромагнетиков, отделение парамагнитного рассеяния от других типов некогерентного рассеяния и разделение когерентных и спин – некогерентных ядерных рассеяние в твердых телах и жидкостях.

1.2.1 Рабочая установка

Первым прибором с использованием нейтронного поляризационного анализа является трехосевой спектрометр, установленный на реакторе с высоким потоком. Схема этой установки показана на рисунке. 1.3 [5].

Эксперимент с кристаллами Co-Fe [5], установленными в зазоре постоянного магнита, используются на первой и третьей осях для получения поляризованного монохроматического пучка и для анализа рассеянных нейтронов по энергии и спину. Образец установлен в зазоре электромагнита, расположенного на столе второй оси. Этот электромагнит имеет горизонтальную ось вращения, так что направление магнитного поля легко изменить с вертикального на горизонтальное. Направляющая ведущих полей 2 и 3 также могут быть повернуты, так что нейтроны могут выходить в поле электромагнита с вертикальным или горизонтальным направлениями спина.

В составе установки используются два устройства для переворота спина нейтрона: до образца и после него. Эти устройства называются спин – флипперы.

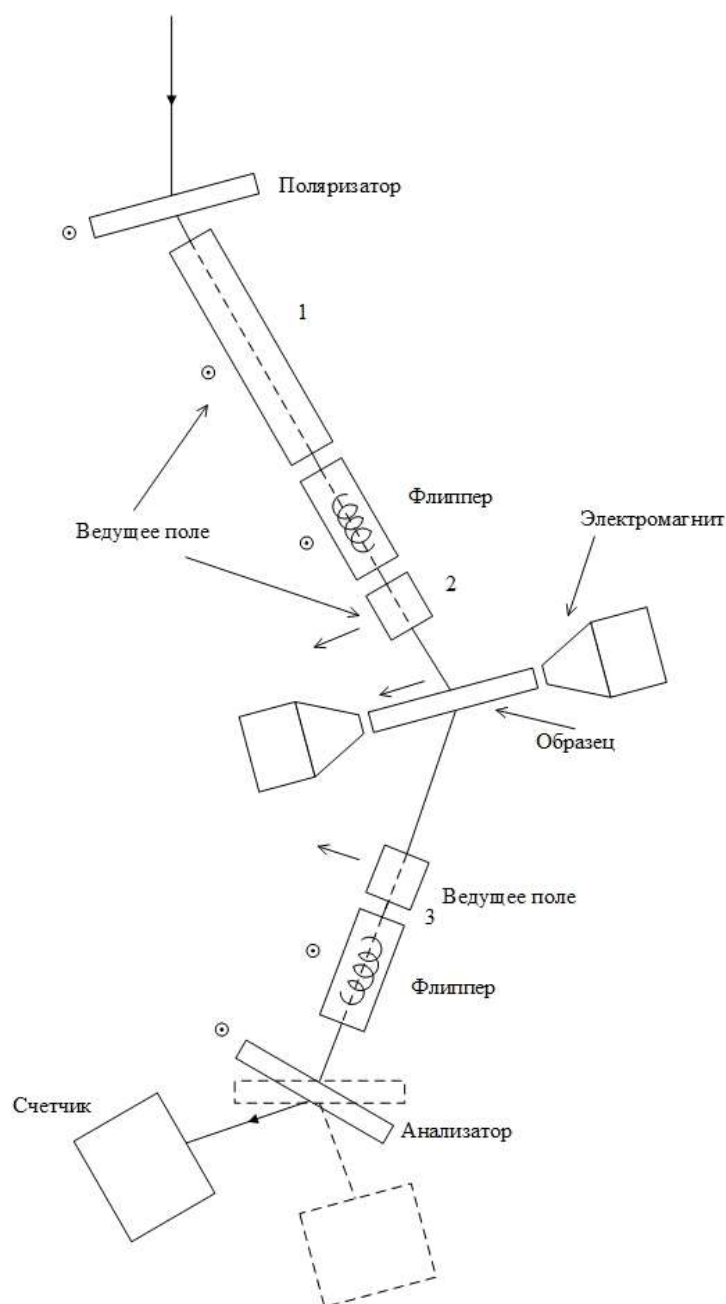


Рис. 1.3. Экспериментальная установка для нейтронного поляризационного анализа

При выключенном спин – флиппере состояние (+) направления спина нейтрона не меняется. При включенном спин – флиппере состояние (-) направление спина нейтрона меняется на противоположное. Меняя состояние

спин – флипперов можно измерить четыре интенсивности: I^{++} , I^{\pm} , I^{-+} , I^{--} . Используя такие наборы из четырёх интенсивностей, полученные при помощи поляризационного анализа для каждого параметра при воздействии на образец (например, магнитного поля или температуры), можно получить новую, а нередко, уникальную информацию о ядерной и магнитной структуре образца.

1.3 Поляризация нейтронов магнитными зеркалами

1.3.1 Общие положения

Нейтронный поляризационный анализ увеличивает чувствительность и информативность экспериментов по рассеянию нейтронов. Получить поляризованные пучки нейтронов можно с помощью магнитных зеркал, магнитных кристаллов и ^3He – поляризаторов. Неполаризованный пучок от источника падает на поляризатор, где разделяется на отраженный (спин вверх) и прошедший (спин вниз) пучки. За поляризатором устанавливают вещество с большим сечением захвата нейтронов что бы весь прошедший пучок поглотился, схематично изображено на рисунке 1.4 [6].

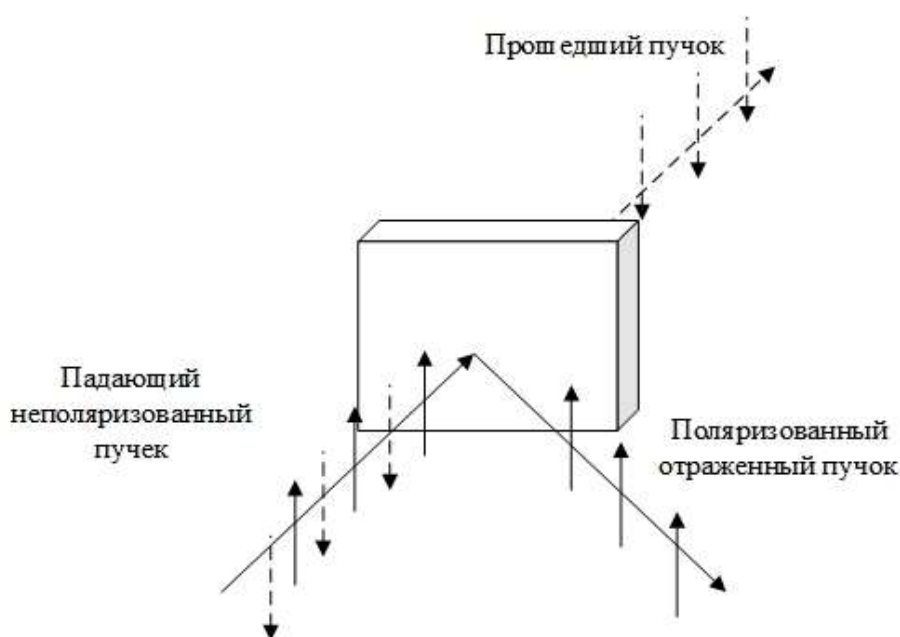


Рис. 1.4. Поляризатор нейтронов

1.3.2 Отражение нейтронов от границы двух бесконечных сред.

При распространении нейтрона его взаимодействие с однородным потенциалом описывается плоской волной, волновая функция нейтрона удовлетворяет уравнению Шредингера. Выражение для коэффициента отражения имеет вид формулы (1.17).

$$R = \left| \frac{k_z - k'_z}{k_z + k'_z} \right|^2 \quad (1.17)$$

Где k_z , k'_z - нормальные компоненты волнового вектора падающей и отраженной нейтронной волны.

Граница области полного отражения задается критическим углом α_c материала среды. Критический угол определяется формулой (1.18) для немагнитной среды. Критический угол для магнитной среды определяется формулой (1.19) [9].

$$\alpha_c = \lambda \sqrt{\frac{\rho b_c}{\pi}} \quad (1.18)$$

$$\alpha_c^\pm = \lambda \sqrt{\frac{\rho(b_c \pm p_m)}{\pi}} \quad (1.19)$$

Где ρ – число атомов в единице объёма среды; b_c – длина когерентного рассеяния материала среды; p_m - длина когерентного магнитного рассеяния материала среды. Знаки (+) и (-) для магнитного слоя соответствуют параллельной и антипараллельной ориентации спина нейтрона по отношению к направлению вектора магнитной индукции в среде.

Для описания границы области полного отражения используют также граничные длины волн. Для немагнитной среды и для магнитной среды формулы (1.20) и (1.21) соответственно.

$$\lambda_{\text{гр.}} = \lambda \sqrt{\frac{\pi}{\rho b_c}} \quad (1.20)$$

$$\lambda_{\text{гр.}}^{\pm} = \lambda \sqrt{\frac{\pi}{\rho(b_c \pm p_m)}} \quad (1.21)$$

1.3.3 Поляризующие многослойные периодические наноструктуры.

Большое внимание уделяется экспериментальным методикам с использованием нейтронного поляризационного анализа, включая рефлектометрию поляризованных нейтронов [10]. Поляризующие многослойные магнитные периодические наноструктуры дают не только поляризованный, но и монохроматический нейтронный пучок. Такая наноструктура состоит из чередующихся магнитных и немагнитных слоёв и находится во внешнем магнитном поле, направленном вдоль плоскостей слоёв структуры. Под малым углом скольжения на магнитную многослойную периодическую наноструктуру падает неполяризованный нейтронный пучок, а отражается поляризованный монохроматический нейтронный пучок. На поляризующих наноструктурах при толщине отдельных слоёв 10–1000 Å возможна интерференция нейтронных волн, отражённых от границ раздела слоёв (или брэгговское отражение), связанная не со структурным упорядочением атомов в слоях, а с периодическим расположением самих слоёв [7]. Интерференционный фильтр – зеркало, состоящий из чередующихся плоскопараллельных пар слоёв двух веществ с одинаковой толщиной, имеющих разные показатели преломления, описан в работе [11], в этой работе интерференционный фильтр использован для монохроматизации пучка

тепловых нейтронов. Аналогичный фильтр для поляризации нейтронного пучка был предложен в работе [12]. Многослойные периодические наноструктуры можно представить, как одномерный искусственный кристалл с постоянной решётки d . В этом случае отражённая интенсивность будет иметь максимумы при выполнении условия Брэгга формула (1.22) [11].

$$m\lambda = 2d \sin\theta \quad (1.22)$$

Где θ – угол скольжения, $m = 1, 2, 3, \dots$

Рассмотрев многослойную периодическую магнитную наноструктуру, представленную на рисунке 1.5, которая состоит из двух материалов: 1 – магнитный и 2 – немагнитный [7].

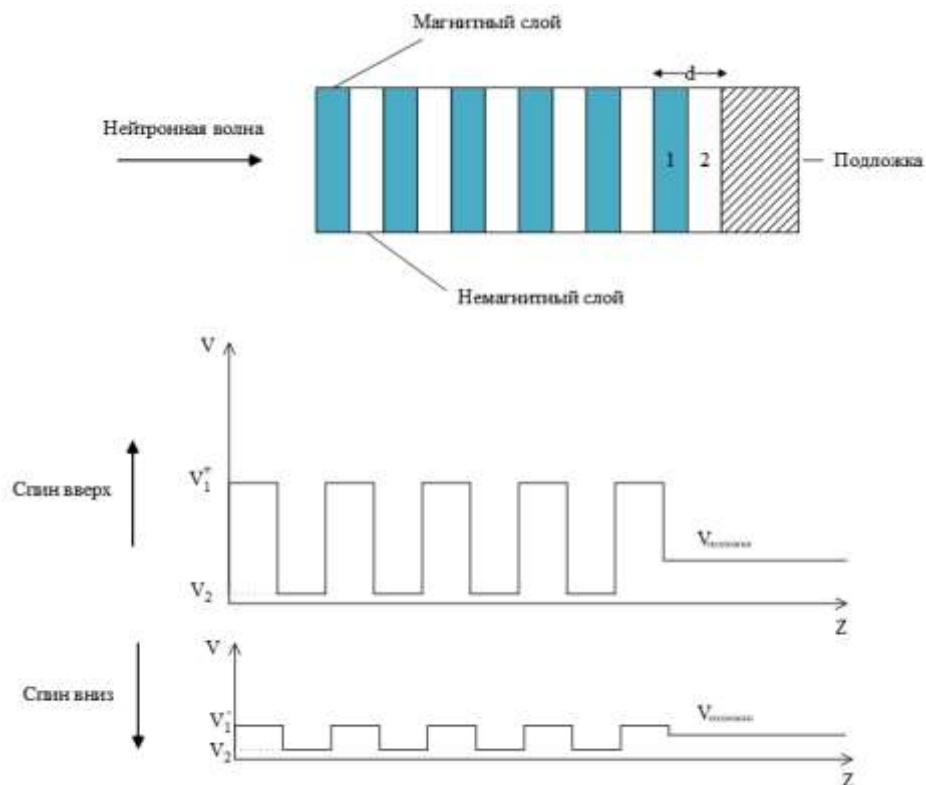


Рис. 1.5. Схема многослойной периодической магнитной наноструктуры и нейтронно-оптические потенциалы слоёв

Магнитные слои характеризуется потенциалом формула (1.23), а не магнитные слои потенциалом формула (1.24).

$$V_1^\pm = \frac{2\pi}{m_n} \hbar^2 \rho_1 (b_{c1} \pm p_{m1}) \quad (1.23)$$

$$V_2 = \frac{2\pi}{m_n} \hbar^2 \rho_2 b_{c2} \quad (1.24)$$

Где m_n – масса нейтрона, \hbar – приведённая постоянная Планка, b_{c1} и b_{c2} – длины когерентного ядерного рассеяния магнитного и немагнитного слоёв, p_{m1} – длина когерентного магнитного рассеяния магнитного слоя ρ_1 и ρ_2 – количество атомов в единице объема магнитного и немагнитного слоёв, $\rho_1(b_{c1} \pm p_{m1})$ и $\rho_2 b_{c2}$ – плотность длины когерентного рассеяния магнитного и немагнитного слоёв. Знаки (+) и (-) для магнитного слоя соответствуют параллельной и антипараллельной ориентации спина нейтрона по отношению к направлению вектора магнитной индукции в слое [6 – 8].

Чтобы получить высокий коэффициент отражения от поляризующего монохроматора для нейтронов (+) спиновой компоненты пучка и высокую поляризующую эффективность, нужно подобрать материалы слоёв, обеспечивающие большую разность потенциалов между потенциалами V_1^+ и V_2 и как можно меньшую разницу потенциалов V_1^- и V_2 .

Граница области полного отражения многослойной периодической наноструктуры определяется средним потенциалом. Средней потенциал определяется формулой (1.25).

$$\bar{V} = \frac{d_1}{d_1+d_2} V_1 + \frac{d_2}{d_1+d_2} V_2 \quad (1.25)$$

Где V_1 – потенциал первого слоя, V_2 – потенциал второго слоя, d_1 , и d_2 – толщина первого и второго слоя. Если средний потенциал меньше или равен нулю, область полного отражения отсутствует.

В случае, когда потенциал магнитного слоя сравнивается с потенциалом немагнитного слоя, для нейтронов (-) спиновой компоненты потенциал по всей толщине структуры становится однородным, без ступенек. В результате отсутствует брэгговское отражение нейтронов данной спиновой компоненты пучка. Таким образом нейтронный пучок становится поляризованным, так как отражается только одна спиновая компонента пучка. Кроме того, магнитные многослойные периодические наноструктуры дают монохроматический пучок за счет отражения от границ слоёв структуры. Условие Брэгга [6 – 8] с учетом рефракции формула (1.26).

$$m\lambda_{mB}^{\pm} = 2d_1\theta \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_{mB}^{\pm}}{\theta\lambda_{гр.1}^{\pm}}\right)^2} + 2d_2\theta \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_{mB}^{\pm}}{\theta\lambda_{гр.2}^{\pm}}\right)^2} \quad (1.26)$$

где m – порядковый номер брэгговского отражения; d_1 – толщина магнитного слоя; d_2 – толщина немагнитного слоя; $\lambda_{гр.1}^{\pm}$ – граничная длина волны магнитного слоя для (+) и (-) спиновых компонент пучка соответственно; $\lambda_{гр.2}^{\pm}$ – граничная длина волны немагнитного слоя; λ_{mB}^{\pm} – длина волны брэгговского пика m -го порядка для (+) и (-) спиновых компонент пучка соответственно; θ – угол скольжения. На рисунке 1.6 [6 – 8], показана схема отражения нейтронного пучка от идеальной периодической наноструктуры, состоящей из двух чередующихся материалов с показателями преломления n_1 и n_2 .

Ширина пика и коэффициент отражения зависят от величины периода наноструктуры: чем больше величина периода, тем больше ширина пика и

коэффициент отражения в брэгговском пике 1-го порядка и меньше расстояние между этим пиком и границей области полного отражения. В кинематическом приближении коэффициент отражения нейтронной волны от многослойной наноструктуры для брэгговского максимума m -го порядка определяется формулой (1.27) [13].

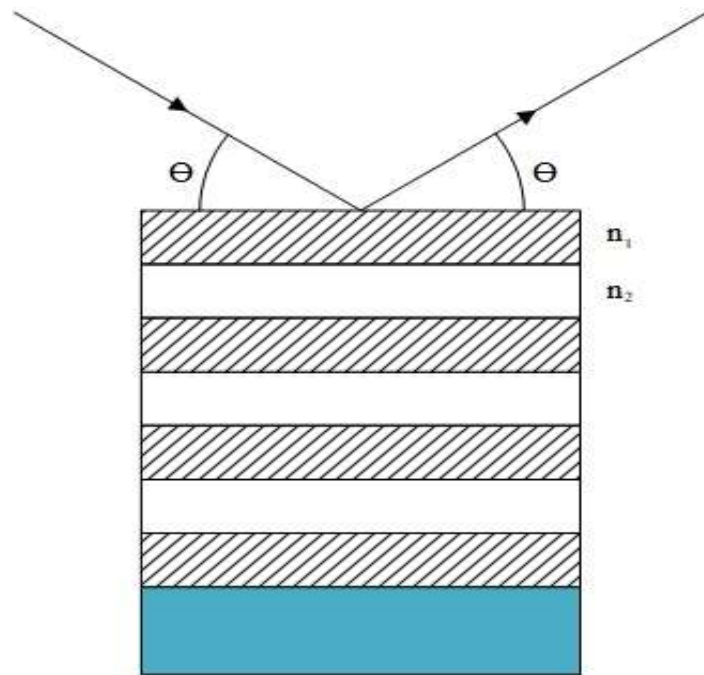


Рис. 1.6. Схема отражения нейтронного пучка от периодической наноструктуры

$$R_m = \frac{4N^2 d^4 |F|^2}{m^2}, |F|^2 = \left[(f_i - f_j) \frac{\sin(ms\pi)}{m\pi} \right]^2 \quad (1.27)$$

Где N – число пар слоёв; d – величина периода наноструктуры; F – структурный фактор бислоя; $s = d_i / (d_i + d_j)$; $d = d_i + d_j$; d_i и d_j – толщина i -го и j -го слоёв; f_i и f_j – плотности длины когерентного рассеяния i -го и j -го слоёв [6 – 8].

1.4 Магнитная наноструктура Fe/Co

Рассмотрим многослойную периодическую магнитную наноструктуру Fe/Co, которая состоит только из магнитных слоёв. Многослойные нейтронные монохроматоры – поляризаторы, такие как Fe/Ag [14] и Co/Ti [15], состоят из чередующихся слоёв магнитного и немагнитного материала. Многослойный нейтронный монохроматор – поляризатор NiFe/V [16] состоит из чередующихся слоёв магнитного материала, с разным потенциалом в слоях. Такая периодическая наноструктура была приготовлена в ПИЯФ методом магнетронного напыления на стеклянную подложку, такая структура состояла из 20 пар чередующихся слоёв железа толщиной 100 Å и кобальта толщиной 110 Å, которые были нанесены на полированную стеклянную подложку. Эксперимент показал, что пики отражения (+) и (-) компоненты спина нейтронного пучка, от такой структуры, близки по величине, но смещены друг относительно друга. На рисунке 1.7 показана схема многослойной периодической магнитной наноструктуры Fe/Co [6 – 8].

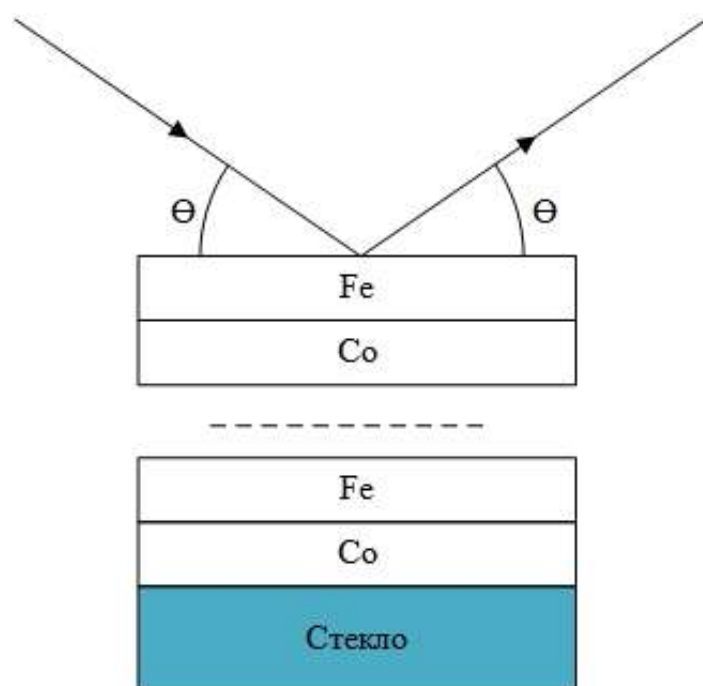


Рис. 1.7. Схема многослойной периодической магнитной наноструктуры Fe/Co

С ростом магнитной индукции в слоях образца изменяется также граничный переданный импульс, который определяет край области полного внешнего отражения на кривой коэффициент отражения нейтронного пучка от структуры. Средний нейтронно-оптический потенциал этой структуры \bar{V}^{\pm} представлен формулой (1.28).

$$\bar{V}^{\pm} = \frac{d_{Fe}}{d_{Fe}+d_{Co}} V_{Fe}^{\pm} + \frac{d_{Co}}{d_{Fe}+d_{Co}} V_{Co}^{\pm} \quad (1.28)$$

Выражения для граничных переданных импульсов для железа, кобальта и многослойной периодической магнитной наноструктуры Fe/Co представлено формулой (1.29), выражения для координат брэгговского максимума первого порядка для (+) и (-) спиновых компонент нейтронного пучка представлены, соответственно формулами (1.30) – (1.31).

$$Q_{гр}^{\pm} = 4 \sqrt{\frac{\pi d_{Fe}}{d_{Fe}+d_{Co}} (\rho_{Fe} b_{cFe} \pm C B_{Fe}) + \frac{\pi d_{Co}}{d_{Fe}+d_{Co}} (\rho_{Co} b_{cCo} \pm C B_{Co})} \quad (1.29)$$

$$\frac{2\pi}{Q_{B1}^{\pm}} = d_{Fe} \sqrt{1 - \left(\frac{Q_{грFe}^{\pm}}{Q_{B1}^{\pm}}\right)^2} + d_{Co} \sqrt{1 - \left(\frac{Q_{грCo}^{\pm}}{Q_{B1}^{\pm}}\right)^2} \quad (1.30)$$

$$Q_{гр Fe,Co}^{\pm} = 4 \sqrt{\pi (\rho_{Fe,Co} b_{cFe,Co} \pm C B_{Fe,Co})} \quad (1.31)$$

С увеличением магнитной индукции в слоях структуры координата брэгговского максимума первого порядка для (+) спиновой компоненты нейтронного пучка Q_{B1}^{+} увеличивается, а координата брэгговского максимума

первого порядка для (-) спиновой компоненты нейтронного пучка Q_{B1}^- , наоборот, уменьшается [8].

Для магнитной индукции $B = 0$ значения Q_{B1}^+ и Q_{B1}^- совпадают. Разность $Q_{B1}^+ - Q_{B1}^-$ линейно увеличивается с ростом индукции B . $Q_{гр}^+$ также увеличивается с ростом B , а $Q_{гр}^-$ при этом уменьшается [8].

1.5 Нейтронный мультимонохроматор – биполяризатор на базе магнитной многослойной структуры Fe/Co и новая схема для полного нейтронного поляризационного анализа

Идею использования уникальных свойств наноструктуры Fe/Co предложил В.Г. Сыромятников [1]. Предлагалось с помощью этой наноструктуры после отражения от нее нейтронного пучка получить набор близко расположенных монохроматических пиков одинаковых по величине, но имеющих противоположную поляризацию.

Для реализации этой идеи В.Г. Сыромятников предложил новый нейтронно – оптический элемент – нейтронный мультимонохроматор – биполяризатор (НММБ). НММБ состоит из набора из 12 периодических наноструктур Fe/Co напыленных на стеклянную подложку, причем величина периода периодической наноструктуры монотонно растет при удалении от подложки. Слои железа и кобальта в каждой периодической структуре имеют одинаковую толщину, это устраняет брэгговские пики второго порядка для каждой периодической структуры.

Каждая периодическая многослойная магнитная наноструктура имеет значительное количество идентичных бислоев.

Каждая периодическая наноструктура НММБ имеет два брэгговских пика первого порядка кривой отражения для (+) и (-) спиновых компонент пучка, с коэффициентами отражения, близкими к единице. Значение периода структуры были выбраны так, чтобы брэгговские пики первого порядка для (+) спиновой

компоненты нейтронного пучка этой структуры был максимально близок к брэгговскому пику первого порядка для (-) спиновой составляющей компоненты нейтронного пучка соседней структуры. Таким образом, на кривой зависимости коэффициента отражения от переданного импульса получился набор плотно стоящих чередующихся брэгговских пиков первого порядка с противоположной поляризацией.

Для нейтронного рефлектометра можно использовать новую схему полного поляризационного анализа, где в качестве монохроматора – поляризатора будем использовать вышеуказанный НММБ на основе многослойных периодических наноструктур. Новая схема анализа полной нейтронной поляризации для рефлектометра без спин – флиппера перед образцом показана на рисунке 1.8. В этой схеме измерение четырех спектральных интенсивностей (++, +-, -+, --) происходит при двух состояниях спин – флиппера после образца. Это позволяет уменьшить суммарное время измерения

Поляризатор для рефлектометра в новой схеме анализа, выполненной в виде двойного НММБ, показан на рисунке 1.9. Пучок неполяризованных нейтронов с широким спектральным распределением попадает на первое зеркало НММБ.

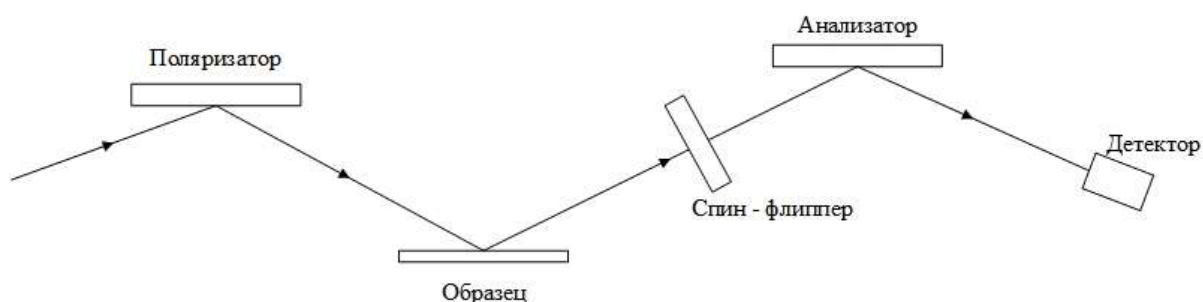


Рис. 1.8. Схема полного нейтронного поляризационного анализа для рефлектометра без спин – флиппера перед образцом

Распределение интенсивности отраженного луча представляет собой набор поляризованных и монохроматических пиков с монотонно растущей длиной волны. Пики плотно расположены на длине волны. В этом наборе для соседних

по длине волны пиков поляризация противоположная. Это множество отражается от второго зеркала под тем же углом. Выходной луч будет иметь такое же направление, как падающее на НММБ. Второе отражение позволяет сделать края всех пиков более резкими, что уменьшит частичное перекрытие краев соседних пиков, что позволит увеличить поляризацию всех пиков. В то же время интенсивность пиков уменьшится незначительно, так как коэффициенты отражения пиков близки к единице.

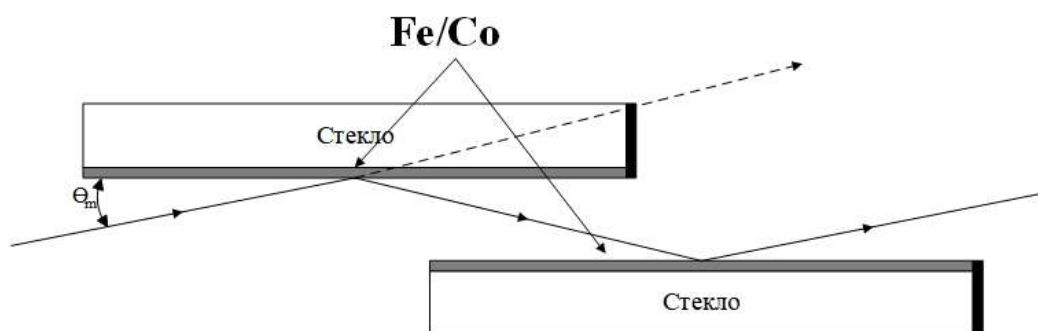


Рис. 1.9. Поляризатор рефлектометра для новой схемы поляризационного анализа, выполненного в виде двойного НММБ

Глава 2. Постановка задачи и план исследования

В статье о НММБ [1] В.Г. Сыромятниковым предлагалось также не использовать в схеме нейтронного поляризационного анализа спин-флипперы, причем поляризатор и анализатор являются одинаковыми НММБ. При этом размеры установки могут быть значительно уменьшены. Появляется возможность создания компактной ячейки полного поляризационного анализа с использованием только одной магнитной системы – магнитной системы образца. Измерение четырех спиновых состояний интенсивности происходит при соответствующей установке углов поляризатора и анализатора, причем каждый из этих углов имеет два одинаковых значения.

В данной работе планируется развить эту идею и провести расчеты нескольких магнитных мультиструктур (НММБ) на основе, полученных В.Г. Сыромятниковым, соотношения для связи координат соседних брэгговских пиков с противоположной поляризацией и соотношения для определения величины периода в мультиструктуре.

В работе требуется исследовать эти мультиструктуры, а также показать, что, используя приготовленные на основе этих соотношений мультиструктуры, в качестве поляризатора и анализатора, можно осуществить полный нейтронный поляризационный анализ для время – пролетного метода, для нескольких длин волн нейтронов проводя измерения только на двух углах поляризатора и анализатора без использования спин-флипперов.

2.1 Квантово – механическое представление

Первое с чего следует начать это ознакомление с физической моделью распространения нейтронной волны в среде. Это необходимо для лучшего понимания с чего начинать расчеты структур. Нейтрон подчиняется уравнению

Шредингера, запись которого в стационарной форме представлена формулой (2.1), как и другие частицы описывается в виде волны.

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \quad (2.1)$$

Где ψ – волновая функция, m – масса нейтрона, U – потенциал поля, E – энергия нейтрона.

В нашем случае постановку задачи можно описать как набор чередующихся потенциальных барьеров или потенциальных ям, или их комбинации в зависимости от типа выбранных материалов структуры. Подобное описание уже прилагалось в параграфе 1.3.3. Так как решение такого рода задачи по поиску коэффициента отражения нейтронной волны, уже всего для одного слоя становиться слишком объемным было решено использовать программные пакеты Parratt32 [3] и Motofit [4]. Это решение обоснованно простотой использования программ и их признанностью в научном сообществе, частым использованием во многих исследованиях и многократным подтверждением истинности результатов, а также сложностью написания самостоятельной программы для расчетов.

Данные программы предназначены для расчета коэффициентов отражения рентгеновского и нейтронного излучений от многослойных наноструктур. Они широко используются в исследовательских целях. Эти программы будут использоваться для расчета необходимых кривых коэффициента отражения. В своей сути они используют формализм Парратта который уже был представлен в предыдущих главах [2 – 4].

2.2 Выбор наиболее подходящих материалов для исследования рассеяния

Для выбора наиболее подходящих материалов необходимо провести расчеты кривых по отражению для (+) и (-) спиновых компонент пучка для каждого из возможных материалов. После чего сравнить их и выбрать наиболее подходящий, так, чтобы пики отражения на графике были максимально близки по величине коэффициента отражения, не накладывались друг на друга в большей мере и не находились бы слишком близко друг к другу.

Также при выборе наиболее подходящей структуры необходимо использовать такие параметры структуры для расчета, чтобы картина отражения была удобна для анализа.

2.3 Вывод соотношений для расчета параметров структуры мультимонохроматора – биполяризатора

На этом шаге воспользовавшись условием Брэгга с учетом рефракции необходимо получить соотношения для расчета толщин слоёв в мультимонохроматоре – биполяризаторе так, чтобы под разными углами скольжения при одной и той же длине нейтронной волны, после отражения от мультинаноструктуры нейтронного пучка, получить одинаковые по величине, но имеющих противоположную поляризацию пики отражения. То есть чтобы брэгговский пик первого порядка для одного значения поляризации под одним углом, совпадал с последующим брэгговским пиком первого порядка с противоположной поляризацией, но уже под следующим углом, который связан с предыдущим, что позволит рассчитывать значения второго угла.

И таким образом с помощью рассчитанного мультимонохроматора – биполяризатора можно было убрать спин – флипперы и использовать новую схему полного поляризационного анализа в широком спектральном диапазоне, только за счет изменения угла скольжения падающей нейтронной волны.

Обоснованно это тем, что, когда угол скольжения на мультимонохроматоре – биполяризаторе до и после образца один и тот же, можно получить (++) или (--) интенсивности, а если рассчитанные углы скольжения на мультимонохроматоре – биполяризаторе перед и после образца будут противоположными, можно получить (+-) или (-+) интенсивности на одной нейтронной длине волны, и тем самым проводить полный поляризационный анализ убрав спин – флипперы. После этого рассчитать параметры структуры, по полученным соотношениям, которые будут использованы в дальнейшем для построения кривых коэффициента отражения от величины нормальной компоненты переданного импульса в дальнейшем.

2.4 Изучение влияния на рассеяние нейтронов параметров намагниченности материалов

Для каждой из выбранных структур рассчитать параметры намагниченности и сравнить результаты при разном уровне потенциала в слое. А также построить графики при разных значениях намагниченности слоя и сравнить их. Здесь можно получить выводы об уровне намагниченности и ее связи с наложениями брэгговских пиков первого порядка отражения разных спиновых компонент друг на друга, что поможет в дальнейших расчетах подобрать оптимальные параметры для наблюдения нужного эффекта мультимонохроматора – биполяризатора.

2.5 Расчет коэффициента отражения и сравнение на разных углах

Рассчитать параметры мультимонохроматора – биполяризатора по выведенным соотношениям, и после учитывая эти параметры произвести расчеты кривых отражения параллельно и антипараллельно направленных спиновых компонент нейтронного пучка в зависимости от величины нормальной

составляющей переданного импульса. Затем произведём перерасчет значений отражения в зависимости от нейтронной длины волны под двумя углами скольжения, сравнить, как разнополяризованные пики накладываются друг на друга на одной длине волны. Это необходимо чтобы удостовериться в верности модели, и обосновать тем самым, возможность использования НММБ в исследовательской нейтронно – физической установке.

Глава 3. Расчет и реализация мультимонохроматора – биполяризатора

3.1 Материал структуры

Перед тем как приступить к расчетам были проанализированы несколько возможных материалов для составляющих наноструктуры монохроматора – биполяризатора. Выбор пары материалов диктовался таким образом, чтобы разность величины плотности длины рассеяния Nb^+ и Nb^- для различных случаев намагниченности и антинемагниченности первого и второго слоёв была максимальна. Но при этом второй слой не обязательно должен быть магнитным материалом.

При заданных параметрах количества пар слоёв и толщин слоёв, максимальная разность плотности длины рассеяния позволит добиться максимального коэффициента отражения для брэгговского пика первого порядка для параллельного (+) и антипараллельного (-) направления спинов нейтрона. Это является прямым следствием из формулы (1.27).

В дальнейшем обозначения коэффициентов отражения различных спиновых компонент пучка на графиках будет следующим: для спиновой компоненты пучка параллельной ведущему магнитному полю – R^+ , для спиновой компоненты пучка антипараллельной ведущему магнитному полю – R^- .

Комбинации материалов, подходящих требованиям, первично оказалась следующей:

- (Fe/NiMo – 1) первый слой железо, второй слой сплав никеля и молибдена;
- (Co/Si) первый слой кобальт, второй слой кремний;
- (Fe/Co) первый слой железо, второй слой кобальт;

- (Fe/NiMo – 2) первый слой железо, второй слой сплав никеля и молибдена, но с отличающимися от первого параметром плотности длины рассеяния;
- (CoFe/Cu) первый слой сплав железа и кобальта, второй слой медь;
- (CoFe/Co) первый слой сплав железа и кобальта, второй слой кобальт.

Параметры плотности длины рассеяния для этих материалов указаны в таблице 3.1, в ней Nb^+ – плотности длины рассеяния для магнитной составляющей направленной параллельно и Nb^- – плотности длины рассеяния для магнитной составляющей направленной антипараллельно.

Таблица 3.1 – Характеристики (параметры) материалов

Комбинация материала	Nb^+ - для первого слоя, $10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	Nb^+ - для второго слоя, $10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	Nb^- - для первого слоя, $10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	Nb^- - для второго слоя, $10^{-6}, \text{Å}^{-2}$
Fe/NiMo – 1	13.13	7.915	2.93	7.915
Co/Si	6.46	2.07	-1.97	2.07
Fe/Co	13.13	6.46	2.93	-1.97
Fe/NiMo – 2	13.13	7.21	2.93	7.21
CoFe/Cu	10.2	6.52	2.07	6.52
CoFe/Co	10.2	6.46	2.07	-1.97

Проведя расчеты с помощью программы Parratt32, для толщин слоёв равной 50 Å и количеством пар слоёв равным двумстам. Были получены следующие результаты кривых коэффициента отражения для (+) и (-) спиновой компоненты отраженных нейтронов от нормальной компоненты переданного импульса, графики результатов представлены на рисунке 3.1. Кривые для каждой из комбинации материалов представлены для (+) и (-) компонент на одном

графике, где величины коэффициента отражения параллельной составляющей (+) спина обозначена R^+ и антипараллельной (-) составляющей обозначена R^- .

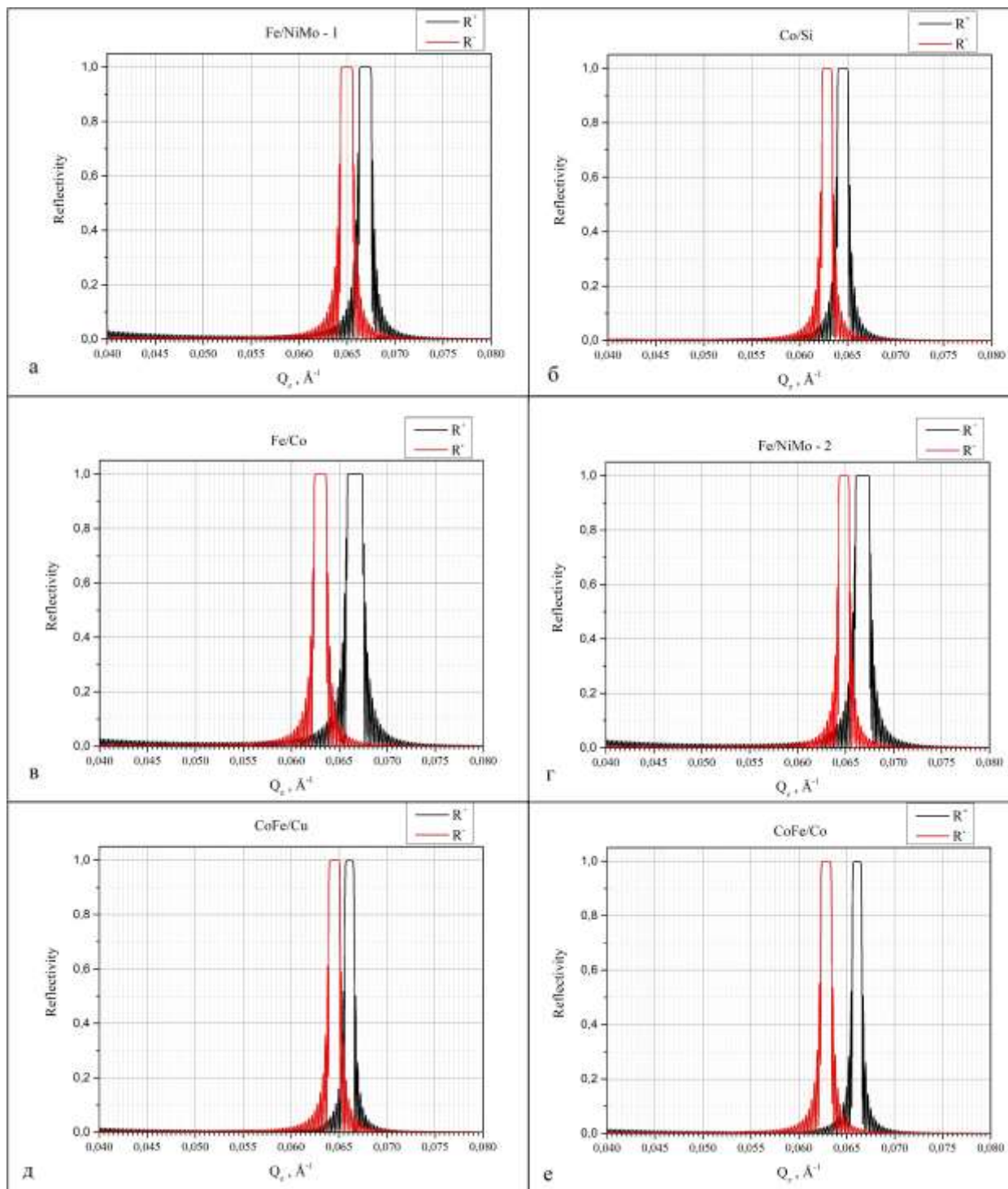


Рис. 3.1. Расчетные коэффициенты отражения в зависимости от нормальной составляющей переданного импульса для шести случаев комбинаций материалов

На графиках представлены брэгговские пики первого порядка для каждой из комбинации наноструктур соответственно, (а) – (Fe/NiMo – 1) первый слой железо, второй сплав никеля и молибдена, (б) – (Co/Si) первый слой кобальт, второй слой кремний, (в) – (Fe/Co) первый слой железо, второй слой кобальт, (г) – Fe/NiMo – 2) первый слой железо, второй слой сплав никеля и молибдена, но с отличающимися от первого параметром плотности длины рассеяния, (д) – (CoFe/Cu) первый слой сплав железа и кобальта, второй слой медь, (е) – (CoFe/Co) первый слой сплав железа и кобальта, второй кобальт.

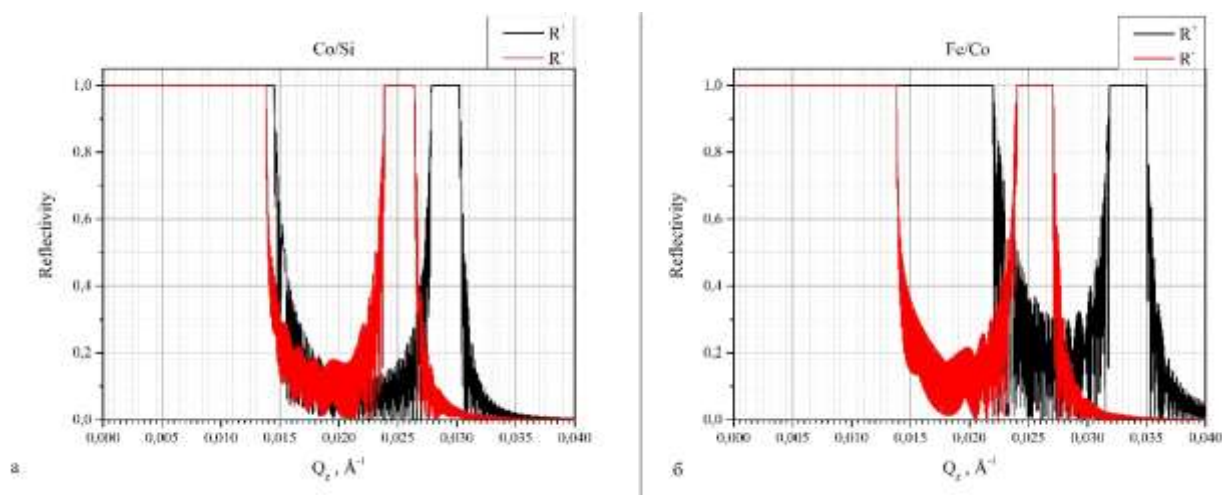


Рис. 3.2. – коэффициент отражения в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса для двух наноструктур (Co/Si)(а) и (Fe/Co)(б), при значении толщин слоёв $d = 125 \text{ \AA}$ и количестве пар слоёв $N = 200$

Проанализировав результаты наиболее подходящей комбинацией материалов оказалась наноструктура (Co/Si) и (Fe/Co). Именно у этих комбинаций структур наблюдаются нужные свойства, пики слабо перекрываются и при этом отстоят друг от друга не слишком близко по величине переданного импульса, так же форма пиков весьма схожа. Остальные комбинации не подошли, так как эти условия не соблюдались, что отчетливо видно из графиков кривых отражения.

Графики подробной формы коэффициента отражения в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса для двух наноструктур (Co/Si)(а) и (Fe/Co)(б), при значении толщин слоёв $d = 125 \text{ \AA}$ и количестве пар слоёв $N = 200$ представлены на рисунке 3.2.

3.2 Соотношения для расчетов толщин слоёв в мультимонохроматоре – биполяризаторе

Что бы рассчитать наложение брэгговских пиков первого порядка под разными углами, положим связь координат пиков (+) компоненты по переданному импульсу для последующего пика связанным с координатой по переданному импульсу предыдущего пика (-) компоненты через коэффициент k большой единице. Такая связь представлена формулой (3.1). Углы на которых в последующем будет наблюдаться совпадение пиков соседних периодов с противоположной поляризацией, так же связаны соотношением ($\theta_2 = \theta_1/k$), и именно на таких углах связанных через коэффициент k будут совпадать разнополяризованные пики.

$$Q_{2B}^+ = \frac{Q_{1B}^-}{k} \quad (3.1)$$

Где Q_{1B}^- – координата импульса брэгговского пика первого порядка для (-) отраженной спиновой компоненты в первом наборе толщин слоёв в наноструктуре, а Q_{2B}^+ – координата импульса брэгговского пика первого порядка для отраженной (+) спиновой компоненты последующего периода структуры.

Из условия Брэгга с учетом рефракции формула (3.2), можно вывести соотношения для связи толщин слоёв и координат импульса брэгговского пика первого порядка отраженной (-) компоненты, таких, что координаты пика

отраженной (+) компоненты для набора следующих чередующихся слоёв, но с другой толщиной слоёв такой, что бы эти пики в дальнейшем совпали, если бы отражение происходило под разными малыми углами, связанными тем же соотношением через коэффициент k . Развитие этой идеи будет представлено после расчета кривых коэффициента отражения для получившейся наноструктуры монохроматора – биполяризатора

$$m\lambda_{mB}^{\pm} = 2d_1\theta \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_{mB}^{\pm}}{\theta\lambda_{гр.1}^{\pm}}\right)^2} + 2d_2\theta \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_{mB}^{\pm}}{\theta\lambda_{гр.2}^{\pm}}\right)^2} \quad (3.2)$$

$$\text{Где } m = 1, d_1 = d_2 = d, Q_B^+ = \frac{4\pi}{\lambda_B^+}, Q_B^- = \frac{4\pi}{\lambda_B^-}; Q_{1гр.}^+ = \frac{4\pi}{\lambda_{1гр.}^+}; Q_{2гр.}^+ = \frac{4\pi}{\lambda_{2гр.}^+}.$$

Вывод формулы для расчета представлен ниже. Толщины слоев в каждом периоде структуры одинаковы.

$$\lambda_B^{\pm} = 2d \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_B^{\pm}}{\lambda_{гр.1}^{\pm}}\right)^2} + \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_B^{\pm}}{\lambda_{гр.2}^{\pm}}\right)^2} \right)$$

$$Q_B^+ = \frac{4\pi}{2d \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_B^+}{\lambda_{гр.1}^+}\right)^2} + \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_B^+}{\lambda_{гр.2}^+}\right)^2} \right)}$$

$$d = \frac{2\pi}{Q_B^+ \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_B^+}{\lambda_{гр.1}^+}\right)^2} + \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_B^+}{\lambda_{гр.2}^+}\right)^2} \right)}$$

$$d = \frac{2\pi}{\left(\sqrt{Q_B^{+2} - Q_B^{+2} \left(\frac{\lambda_B^+}{\lambda_{гр.1}^+}\right)^2} + \sqrt{Q_B^{+2} - Q_B^{+2} \left(\frac{\lambda_B^+}{\lambda_{гр.2}^+}\right)^2} \right)}$$

Подставляя связь граничных длин волн и импульса имеем:

$$\frac{\lambda_B^+}{\lambda_{гр.1}^+} = \frac{\frac{4\pi}{Q_B^+}}{\frac{4\pi}{Q_{1 гр.}^+}} = \frac{Q_{1 гр.}^+}{Q_B^+}$$

$$d = \frac{2\pi}{\left(\sqrt{Q_B^{+2} - Q_{1 гр.}^{+2}} + \sqrt{Q_B^{+2} - Q_{2 гр.}^{+2}}\right)}$$

$$Q_{2B}^+ = \frac{Q_{1B}^-}{k}$$

$$d = \frac{2\pi}{\left(\sqrt{\left(\frac{Q_{1B}^-}{k}\right)^2 - Q_{1 гр.}^{+2}} + \sqrt{\left(\frac{Q_{1B}^-}{k}\right)^2 - Q_{2 гр.}^{+2}}\right)}$$

$$Nb_1^+ = \frac{\pi}{\lambda_{гр.1}^{+2}}; Nb_2^+ = \frac{\pi}{\lambda_{гр.2}^{+2}}$$

Окончательный результат представлен формулой (3.3).

$$d = \frac{2\pi}{\left(\sqrt{\left(\frac{Q_{1B}^-}{k}\right)^2 - 16\pi Nb_1^+} + \sqrt{\left(\frac{Q_{1B}^-}{k}\right)^2 - 16\pi Nb_2^+}\right)} \quad (3.3)$$

Из полученного соотношения для d , для второго периода, можно получить соотношение для координаты брэгговского пика первого порядка Q_{2B}^- (-) компоненты, для этого же периода. В дальнейшем расчеты по этим формулам для параметров наноструктуры будут выполнены рекуррентно. Вывод так же производится из условия Брэгга с учетом рефракции формула (3.2) и так же представлен ниже.

$$\lambda_B^- = 2d \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2} + \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2} \right)$$

Возведем обе части уравнения в квадрат и после преобразования получим:

$$\left(\frac{\lambda_B^-}{2d}\right)^2 = \left(1 - \left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2 + 2\left(1 - \frac{1}{2}\left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2 + \frac{1}{4}\left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2\left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2\right) + 1 - \left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2\right)$$

Пренебрегая членами четвертого порядка в силу малости получаем:

$$\left(\frac{\lambda_B^-}{2d}\right)^2 = \left(1 - \left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2 + 2\left(1 - \frac{1}{2}\left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2\right) + 1 - \left(\frac{\lambda_B^-}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2\right)$$

Преобразуя далее получим:

$$\frac{2}{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2d}\right)^2 + \left(\frac{1}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2 + \left(\frac{1}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2} = \lambda_B^{-2}$$

Учитывая ($Q_B^- = \frac{4\pi}{\lambda_B^-}$) получим:

$$\frac{4\pi}{Q_B^-} = \sqrt{\frac{2}{\frac{1}{8}\left(\frac{1}{d}\right)^2 + \left(\frac{1}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2 + \left(\frac{1}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2}}$$

Преобразуя далее получим:

$$Q_B^- = \sqrt{\left(\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 + 8\pi^2\left(\left(\frac{1}{\lambda_{гр.1}^-}\right)^2 + \left(\frac{1}{\lambda_{гр.2}^-}\right)^2\right)\right)}$$

$$Nb_1^- = \frac{\pi}{\lambda_{гр.1}^{-2}}; Nb_2^- = \frac{\pi}{\lambda_{гр.2}^{-2}}$$

Окончательный вид выражения координаты нормальной компоненты переданного импульса для брэгговского пика первого порядка для (-) спиновой компоненты для второго периода мультимонохроматора имеет вид формулы (3.4). Это соотношение также справедливо и для последующих периодов.

$$Q_B^- = \sqrt{\left(\left(\frac{\pi}{d}\right)^2 + 8\pi(Nb_1^- + Nb_2^-)\right)} \quad (3.4)$$

Получив готовые соотношения можно начать расчеты. Для этого использовался программный пакет Mathcad. Используя возможности расчета циклов, была написана программа для расчета по готовым соотношениям, фрагмент кода программы представлен в приложении А – код программы для расчета периода мультинааноструктуры на рисунке А.1.

Рассчитанные параметры для комбинации наноструктур (Co/Si) и (Fe/Co). Начальные параметры для расчета параметров наноструктур были таковы $k=1.11$, $d = 35 \text{ \AA}$, $Q_B^- = 0.08977$.

Результаты расчета представлены в таблицах 3.2 и 3.3. Схематично наноструктуры [1] монохроматора – биполяризатора для (Co/Si) представлены на рисунке 3.3(а), и для (Fe/Co) на рисунке 3.5(б), где D – периоды слоёв с одинаковыми толщинами слоёв.

Таблица 3.2 – Результаты расчета для наноструктуры (Co/Si)

Расчет параметров наноструктуры Co/Si				
$Nb_1^+ = 6.46 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$; $Nb_2^+ = 2.07 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$				
$Nb_1^- = -1.97 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$; $Nb_2^- = 2.07 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$				
№	d	Qb+	Qb-	Количество пар слоёв в наноструктуре
1	35	-	0.08977	400
2	39.4998	0.08087	0.07955	400
3	44.78342	0.07167	0.07017	200
4	51.09154	0.06322	0.06151	200
5	58.79277	0.05541	0.05346	200
6	68.49588	0.04816	0.04589	200
7	81.3061	0.04134	0.03867	100
8	99.52831	0.03484	0.0316	100

Таблица 3.3 – Результаты расчета для наноструктуры (Fe/Co)

Расчет параметров наноструктуры Fe/Co				
$Nb_1^+ = 13,13 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$; $Nb_2^+ = 6,46 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$				
$Nb_1^- = 2,93 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$; $Nb_2^- = -1,97 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$				
№	d	Qb+	Qb-	Количество пар слоёв в наноструктуре
1	35	-	0.08977	400
2	40.39962	0.08087	0.07792	400
3	47.18156	0.0702	0.06677	200
4	56.21308	0.06015	0.0561	200
5	69.2373	0.05054	0.04564	100
6	90.98125	0.04112	0.03488	100

Величина периода D в мультиструктуре растет по мере удаления периодической структуры от подложки. Схематично представлено на рисунке 3.3.

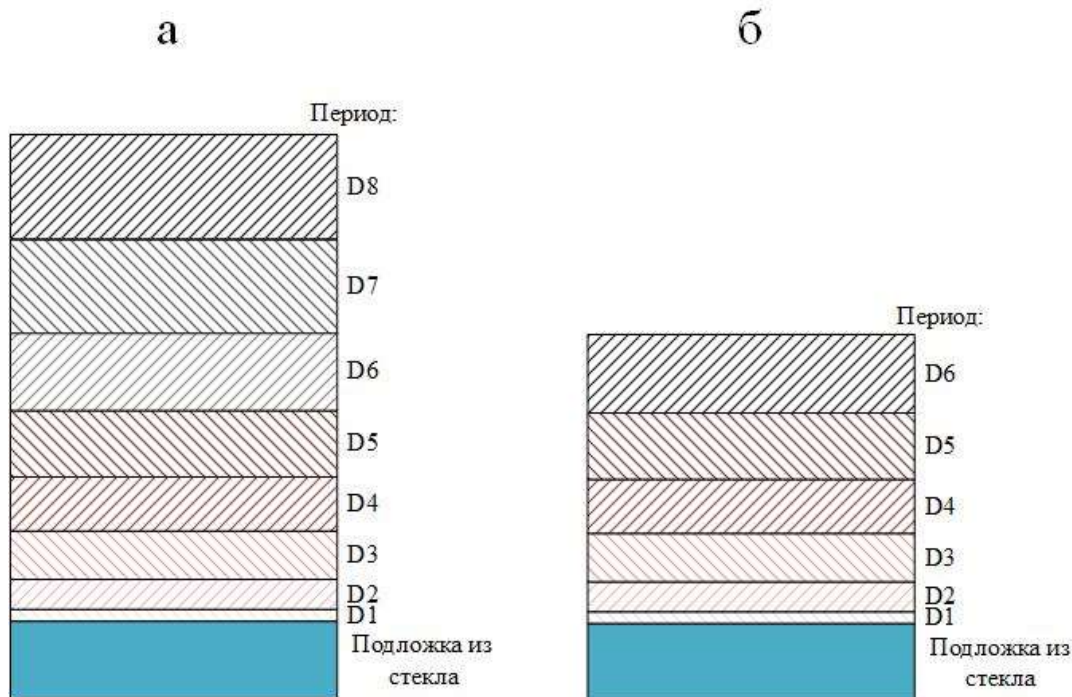


Рис. 3.3. Схематическое изображение наноструктуры монохроматора – биполяризатора для (Co/Si) (а) и для (Fe/Co) (б)

3.3 Расчет кривых коэффициента отражения и сравнение на разных углах рассеяния

По полученным результатам были проведены расчеты кривых коэффициента отражения в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса для двух мультинаноструктур. Расчеты производились в программном пакете Motofit, так как в этой программе нет ограничения на количество пар слоёв для расчетов. В данных расчетах использовалась подложка из стекла с плотностью длины рассеяния соответствует $Nb = 3.80 * 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$, значения же плотностей для длин рассеяния для чередующихся слоёв мультинаноструктуры указывались в соответствии с типом материала слоя и его потенциалом.

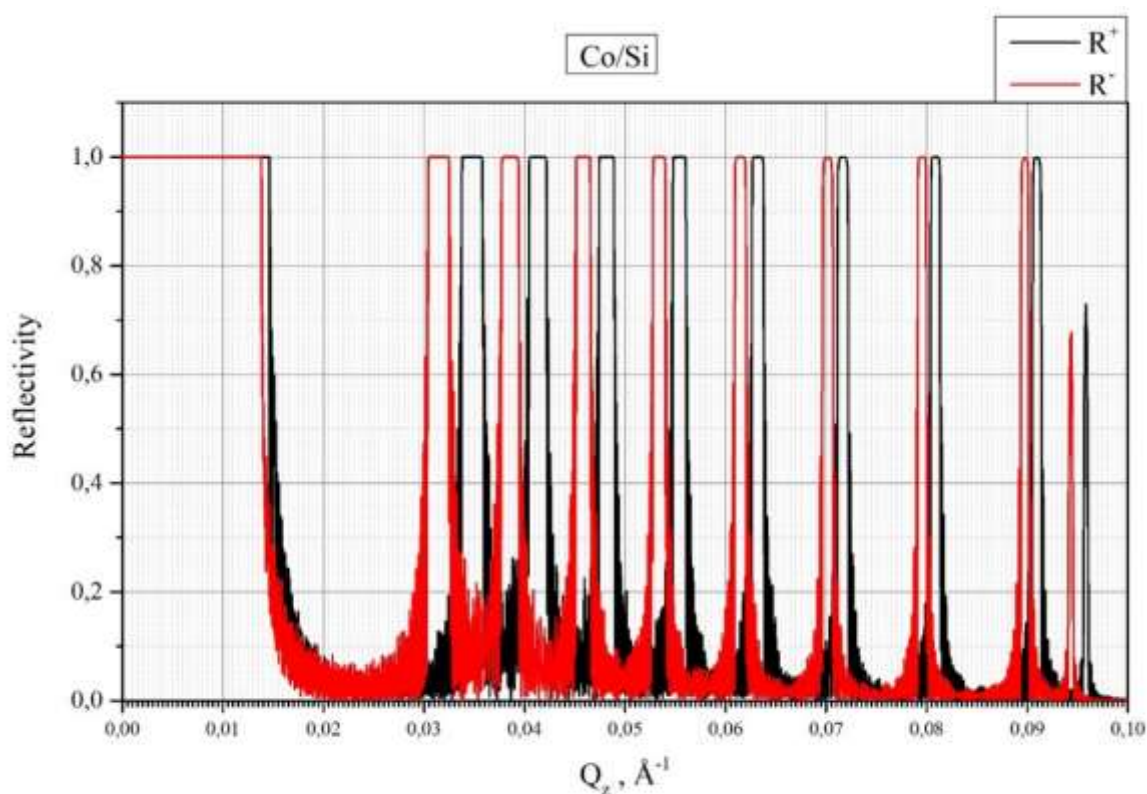


Рис. 3.4. Кривые коэффициента отражения в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса мультимонохроматора – биполяризатора на основе (Co/Si)

Расчетные кривые коэффициента отражения в полном диапазоне от нулевого значения нормальной компоненты переданного импульса и до первого брэгговского пика третьего порядка периодической структуры с наибольшим периодом для мультинаноструктуры (Co/Si) представлены на рисунке 3.4. На графике можно наблюдать восемь брэгговских пиков первого порядка, в соответствии с расчетным количеством периодов в мультинаноструктуре. На графике представлен коэффициент отражения для (+) и (-) спиновой компоненты, R^+ – отражение параллельно направленного спина и R^- – для антипараллельного направленного спина соответственно.

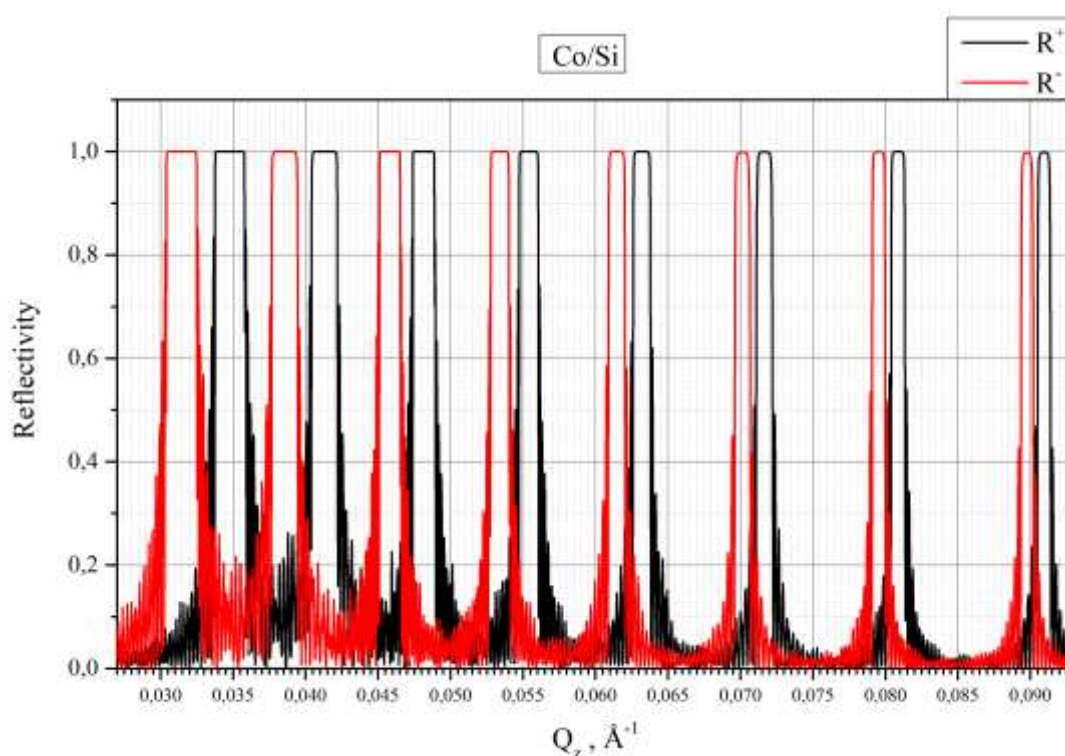


Рис. 3.5. Кривые коэффициента отражения в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса мультимонохроматора – биполяризатора на основе (Co/Si) в области брэгговских пиков первого порядка

Так же для удобства восприятия и большей информативности были построены графики в области брэгговских пиков первого порядка рисунок 3.5.

На этом графике координаты нормальной компоненты переданного импульса для брэгговских пиков первого порядка найти проще и в дальнейшем на графиках будет использоваться области брэгговских пиков первого порядка.

После расчета коэффициента отражения для (+) и (-) спиновой составляющей в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса, для получения конечного результата необходимо пересчитать эту кривую в кривую зависимости коэффициента отражения от длины волны. Это делается путем пересчета значений нормальной компоненты переданного импульса в соответствии с формулой (3.5), для выбранного угла θ .

$$\lambda = \frac{4\pi \cdot \theta}{Q_z} \quad (3.5)$$

Где λ – длина волны нейтронного излучения, θ – малый угол скольжения (миллирадианы или мрад), Q_z – значение нормальной компоненты переданного импульса. Как оговаривалось ранее интересующий результат будет находиться на двух углах, связанных соотношением $\theta_2 = \theta_1/k$, где k тот же коэффициент что связывал координаты нормальной компоненты переданного импульса брэгговских пиков первого порядка соседних периодов мультимонохроматора (+) и (-) отраженной компоненты спина нейтрона.

Таким образом взяв один малый угол можно рассчитать значения следующего угла так, чтобы брэгговские пики разнонаправленных спиновых компонент совпадали для одной длины волны, в чем и заключается особенность данного исследования. Взяв для расчетов значения первого угла скольжения $\theta = 15$ мрад и рассчитав из соотношения $\theta_2 = \theta_1/k$ второй угол, где $k = 1.11$, получаем второй угол $\theta = 13.5135$ мрад для перерасчета в зависимость коэффициента отражения от нейтронной длины волны. Наложив кривые коэффициента отражения под разными углами друг на друга что представлено

на рисунке 3.6, можно видеть наложения брэгговских пиков первого порядка для восьми нейтронных длин волн, при этом наложение пиков наблюдается у противоположных спиновых компонент, как и было теоретически предсказано выше.

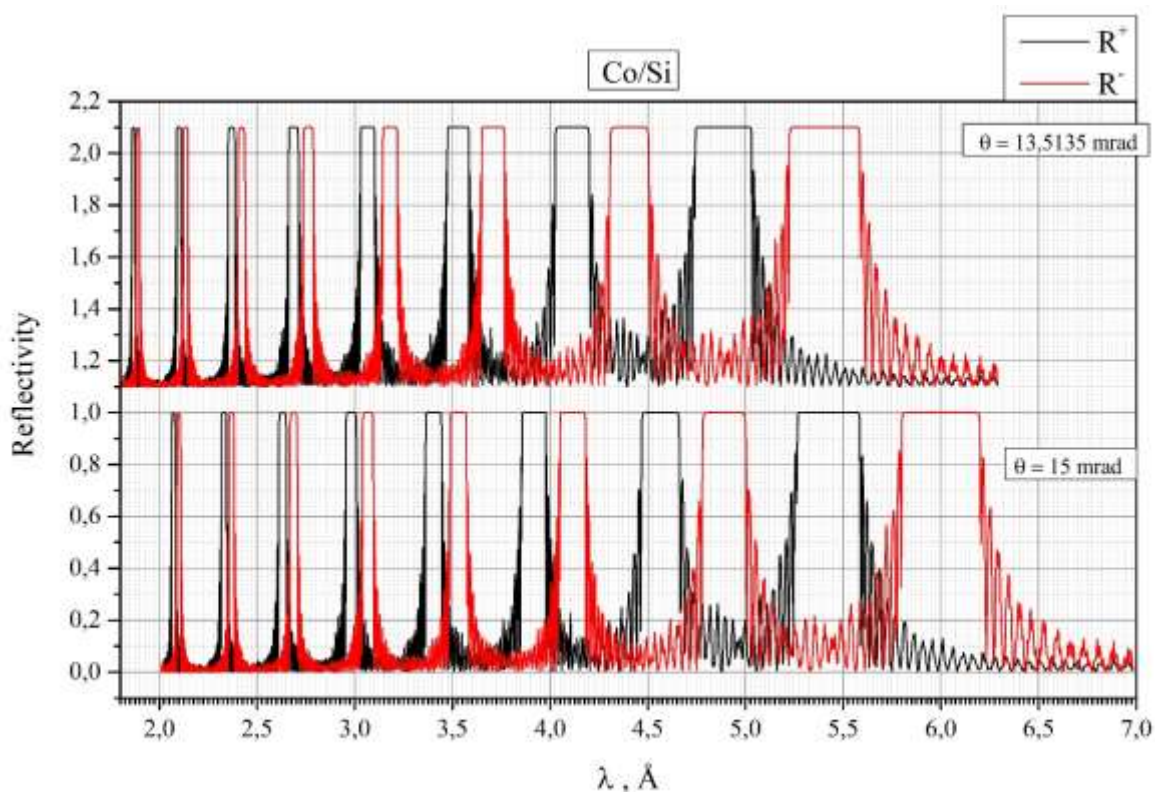


Рис. 3.6. Кривые коэффициента отражения (+) и (-) спиновой компоненты в зависимости от нейтронной длины волны на разных углах мультимонохроматора – биполяризатора на основе (Co/Si) для углов скольжения $\theta = 15$ мрад и $\theta = 13.5135$ мрад

Таким образом пересчитав значения коэффициента отражения уже в зависимости от длины нейтронной волны на разных углах можно графически получить значения совпадения пиков отражения разных спиновых компонент на разных углах.

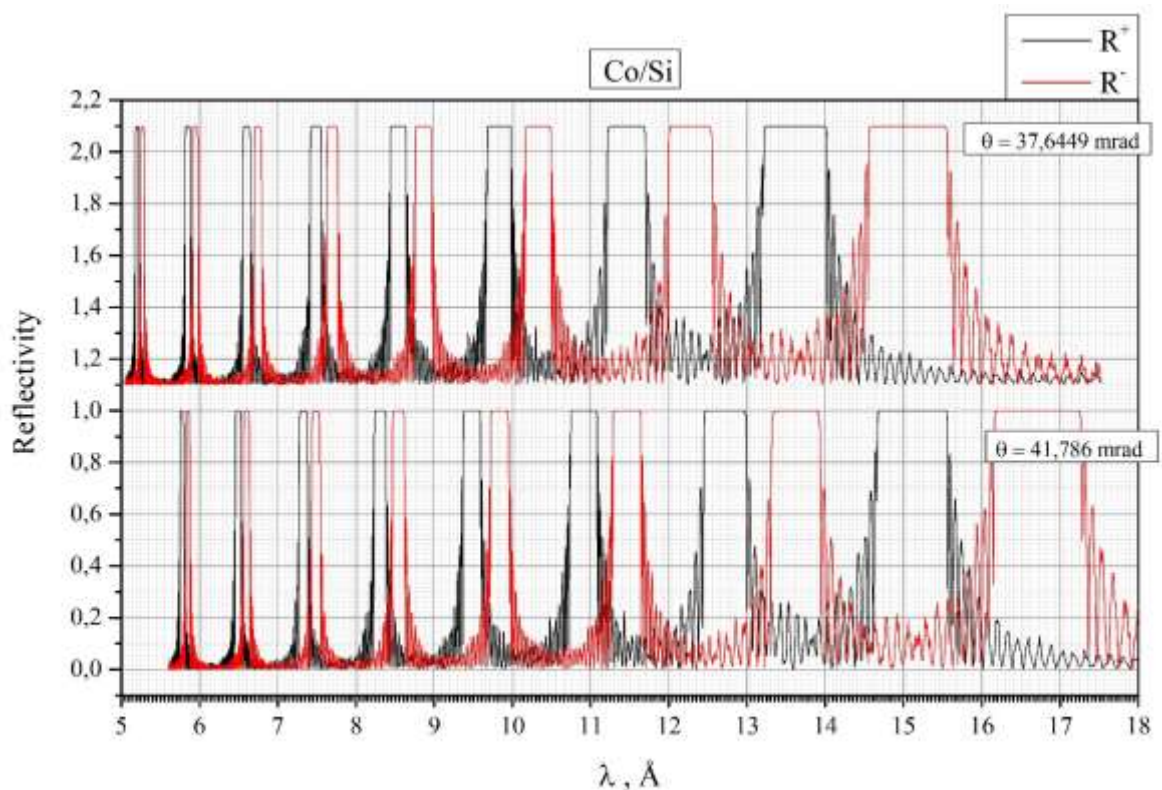


Рис. 3.7. Кривые коэффициента отражения (+) и (-) спиновой компоненты в зависимости от нейтронной длины волны на разных углах мультимонохроматора – биполяризатора на основе (Co/Si) для углов скольжения $\theta = 41.786$ мрад и $\theta = 37.6449$ мрад

Так же был проведен расчет для значения еще двух пар углов. Это необходимо для того, чтобы увидеть, как данная расчетная мультинаноструктура, будет охватывать весь спектральный диапазон длин волн от 2 до 20 Å, часто используемый в полном поляризационном анализе. Расчетные кривые для углов $\theta = 41.786$ мрад и $\theta = 37.6449$ мрад представлены на рисунке 3.7, а так же для углов $\theta = 115.7146$ мрад и $\theta = 104.2473$ мрад представлены на рисунке 3.8.

Нейтронные длины волн при совпадении брэгговских пиков первого порядка во всем спектральном диапазоне поляризационного анализа для (Co/Si) указаны в таблице 3.4, и как можно наблюдать что с помощью данной

мультинаноструктуры можно проводить исследования для широкого спектрального диапазона. И как уже оговаривалось ранее можно получить четыре спиновые интенсивности меняя угол скольжения на мультимонохроматоре – биполяризаторе. Если на НММБ перед образцом и после образца угол скольжения будет один и тот же, можно получить (++) и (--) интенсивности на одной нейтронной длине волны, а если рассчитанные углы будут противоположные, то в зависимости от их значения можно получить (+-) или (-+) интенсивности на одной нейтронной длине волны.

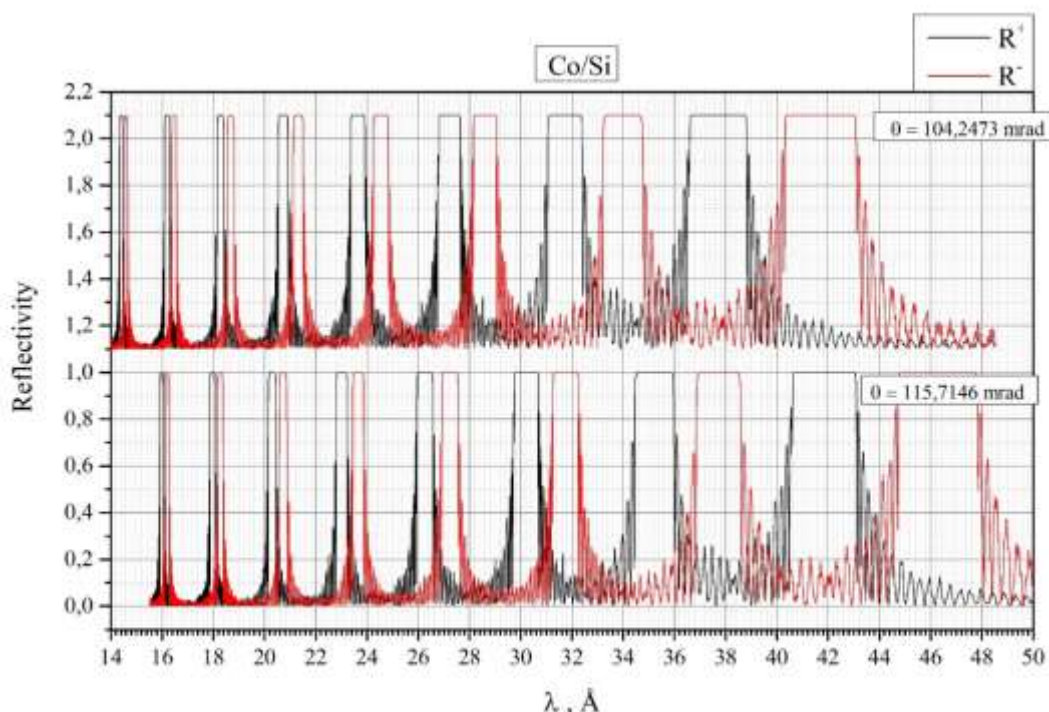


Рис. 3.8. Кривые коэффициента отражения (+) и (-) спиновой компоненты в зависимости от нейтронной длины волны на разных углах мультимонохроматора – биполяризатора на основе (Co/Si) для углов скольжения $\theta = 115.7146$ мрад и $\theta = 104.2473$ мрад

Расчетные кривые коэффициента отражения в полном диапазоне от нулевого значения нормальной компоненты переданного импульса и до первого

бэрегговского пика третьего порядка периодической структуры с наибольшим периодом для мультинаноструктуры (Fe/Co) представлены на рисунке 3.9. На графике можно наблюдать шесть брэгговских пиков первого порядка, в соответствии с расчетным количеством периодов в мультинаноструктуре.

Таблица 3.4 – нейтронные длины волн при совпадении пиков (+) и (-) спиновой компоненты на разных углах для наноструктуры (Co/Si)

Совпадение пиков отражения на разных углах и длин волн			
№	λ , Å	R^+ , θ , мили радиан	R^- , θ , мили радиан
1	2.100	13.5135	15
2	2.375	13.5135	15
3	2.675	13.5135	15
4	3.075	13.5135	15
5	3.550	13.5135	15
6	4.125	13.5135	15
7	4.875	13.5135	15
8	5.375	15	13.5135
9	5.850	37.6449	41.786
10	6.600	37.6449	41.786
11	7.500	37.6449	41.786
12	8.550	37.6449	41.786
13	9.850	37.6449	41.786
14	11.45	37.6449	41.786
15	13.600	37.6449	41.786
16	15.000	41.786	37.6449
17	16,200	104.2473	115.7146
18	18,300	104.2473	115.7146
19	20,700	104.2473	115.7146
20	23,600	104.2473	115.7146
21	27,400	104.2473	115.7146
22	31.800	104.2473	115.7146
23	38.000	104.2473	115.7146
24	42.000	115.7146	104.2473

На графике представлен коэффициент отражения для (+) и (-) спиновой компоненты, R^+ – отражение параллельно направленного спина и R^- – для

антипараллельного направленного спина соответственно, графики в области брэгговских пиков первого порядка рисунок 3.10.

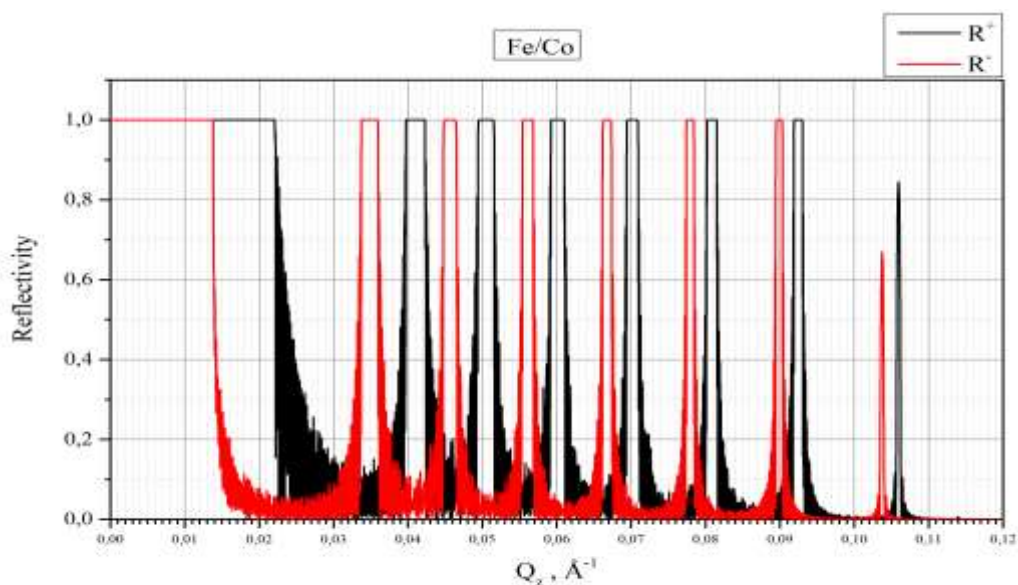


Рис. 3.9. Кривые коэффициента отражения в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса мультимонохроматора – биполяризатора на основе (Fe/Co)

После расчета коэффициента отражения для (+) и (-) спиновой составляющей в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса, для получения конечного результата необходимо пересчитать эту кривую в кривую зависимости коэффициента отражения от длины волны. Для (Fe/Co) аналогично (Co/Si). Взяв для расчетов значения первого угла скольжения $\theta = 15$ мрад и рассчитав из соотношения $\theta_2 = \theta_1/k$ второй угол, где $k = 1.11$, получаем второй угол $\theta = 13.5135$ мрад для перерасчета в зависимость коэффициента отражения от нейтронной длины волны.

Наложив кривые коэффициента отражения под разными углами друг на друга что представлено на рисунке 3.11, можно видеть наложения брэгговских пиков первого порядка для шести нейтронных длин волн, при этом наложение

пиков наблюдается у противоположных спиновых компонент, как уже обсуждалось выше.

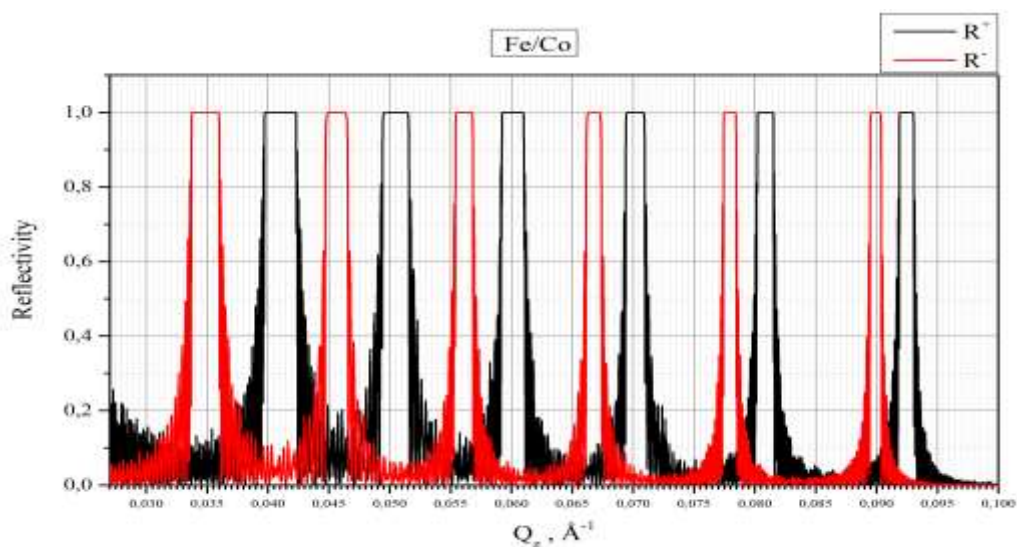


Рис. 3.10. Кривые коэффициента отражения в зависимости от нормальной компоненты переданного импульса мультимонохроматора – биполяризатора на (Fe/Co) в области брэгговских пиков первого порядка

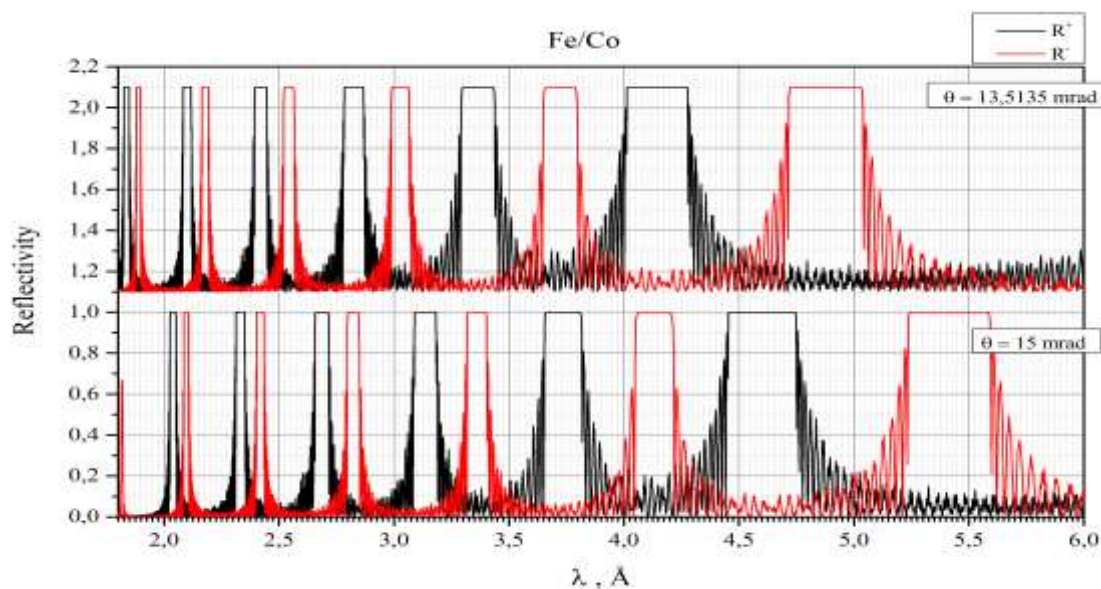


Рис. 3.11. Кривые коэффициента отражения (+) и (-) спиновой компоненты в зависимости от нейтронной длины волны на разных углах мультимонохроматора – биполяризатора на основе (Fe/Co) для углов скольжения $\theta = 15 \text{ мрад}$ и $\theta = 13.5135 \text{ мрад}$

Таблица 3.5. – Нейтронные длины волн при совпадении пиков (+) и (-) спиновой компоненты на разных углах для наноструктуры (Fe/Co) первый слой железо, второй слой кобальт

Совпадение пиков отражения на разных углах и длин волн			
№	λ , Å	R^+ , θ , мили радиан	R^- , θ , мили радиан
1	2.100	13.5135	15
2	2,425	13.5135	15
3	2,825	13.5135	15
4	3,750	13.5135	15
5	3,750	15	13.5135
6	4,200	13.5135	15

Мультинаноструктурой (Fe/Co) впоследствии было решено не заниматься и оставить ее исследования для следующих работ. Длины нейтронных волн при совпадении пиков на разных углах для мультинаноструктуры (Fe/Co) указаны в таблице 3.5.

3.4 Исследование рассеяния нейтронов при разных параметрах намагниченности

Так как параметры пиков отражения зависят от намагниченности было решено исследовать как будет менять форма кривых, а также расстояние между пиками если изменять намагниченность слоёв. Данное исследования может помочь правильно истолковать результаты, а также показать интересные закономерности наноструктур.

Так как величина плотности длины рассеяния зависит от индукции слоя через соотношение, представленное формулой (3.6), можно рассчитать ее значение через относительную намагниченность, то есть представить B в виде отношения B/B_{max} , где B_{max} – максимальная индукция слоя, а B – значение индукции в слое.

$$Nb^{\pm} = \rho(b_c \pm p_m) = \rho b_c \pm \frac{m_n \mu_n}{2\pi \hbar^2} B \quad (3.6)$$

Где m_n – масса нейтрона, μ_n – магнитный момент нейтрона, \hbar – приведённая постоянная Планка, b_c – длина когерентного ядерного рассеяния магнитного слоёв, B – магнитная индукция в слое. Наибольший интерес представляет наноструктура (Co/Si) так как в ней присутствует немагнитный материал кремний. Рассчитанные параметры представлены в таблице 3.6.

Таблица 3.6 – параметры наноструктуры (Co/Si) при различных значениях относительной намагниченности слоёв

$Nb_1^+, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	$Nb_1^-, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	$Nb_{Si}, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	B/B_{max}	$\Delta Nb^+, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	$\Delta Nb^-, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$
6.458	-1.973	2.07	1	4.388	4.043
5.404	-0.919	2.07	0.75	3.334	2.989
4.35	0.135	2.07	0.5	2.28	1.935
3.296	1.189	2.07	0.25	1.226	0.881
2.415	2.07	2.07	0.0409	0.345	0
2.243	2.243	2.07	0	0.173	0.173
2.07	2.415	2.07	-0.0409	0	0.345
1.189	3.296	2.07	-0.25	0.881	1.226
0.135	4.35	2.07	-0.5	1.935	2.28
-0.919	5.404	2.07	-0.75	2.989	3.334
-1.973	6.458	2.07	-1	4.043	4.388

Так как кремний немагнитный материал величина плотности длины рассеяния у него не меняется при изменении поля. Проведя расчеты кривых коэффициента отражения наноструктуры (Co/Si) при различных значениях намагниченности при толщинах слоёв $d = 50 \text{ Å}$ и количестве пар слоёв $N = 200$, были получены следующие результаты, график кривых при различных значениях относительной намагниченности в полном диапазоне представлен на рисунке 3.12.

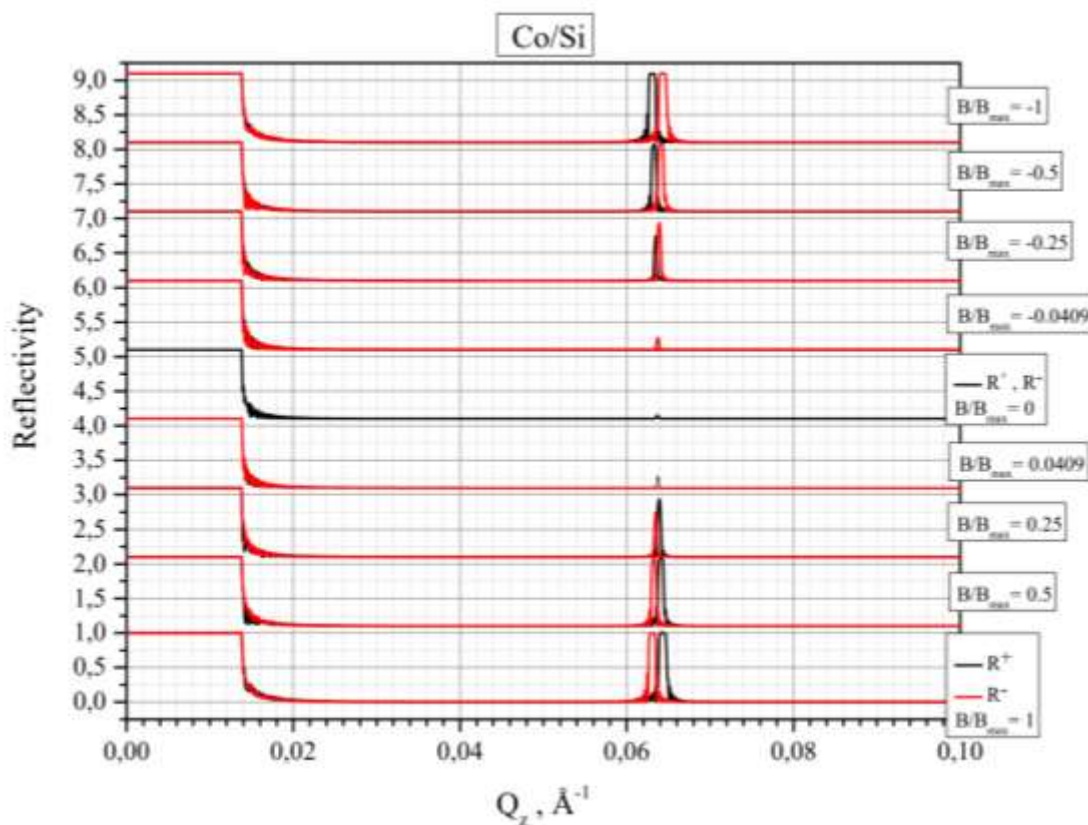


Рис. 3.12. – Расчетные кривые коэффициента отражения нейтронного пучка от многослойной периодической магнитной наноструктуры (Co/Si) в зависимости от переданного импульса для (+) и (-) спиновых компонент пучка для нескольких значений магнитной индукции B в слоях наноструктуры в полном виде

Замечена интересная особенность, при изменении относительной намагниченности слоя брэгговские пики первого порядка начинают сближаться, а также утончаться и при нулевой намагниченности кобальта вовсе практически пропадают. И при дальнейшем изменении относительной намагниченности на противоположную (+) и (-) отраженная спиновая компонента меняются местами и имеют ту же форму. Нагляднее это можно наблюдать области брэгговских пиков первого порядка на рисунке 3.13. связано это с тем что разность плотности длины рассеяния очень мала и в соответствии с формулой (1.27) коэффициент отражения будет очень мал.

Еще одна интересная особенность наблюдается при значениях относительной намагниченности при $B = \pm 0.0409$ в этом случае одна из отраженных спиновых компонент вовсе пропадает так как величина плотности длины рассеяния в слое кобальта становится равной плотности длины рассеяния в слое кремния, и брэгговский пик первого порядка вовсе не будет появляться так как в этом случае структурный фактор формула (1.27) становится равным нулю.

На рисунке 3.14 представлены зависимости разностей параметров ΔNb^+ и ΔNb^- для обеих спиновых компонент пучка от отношения магнитной индукции к ее максимальному значению для магнитной наноструктуры (Co/Si). На графике видно скачкообразное изменение, вызванное этими эффектами.

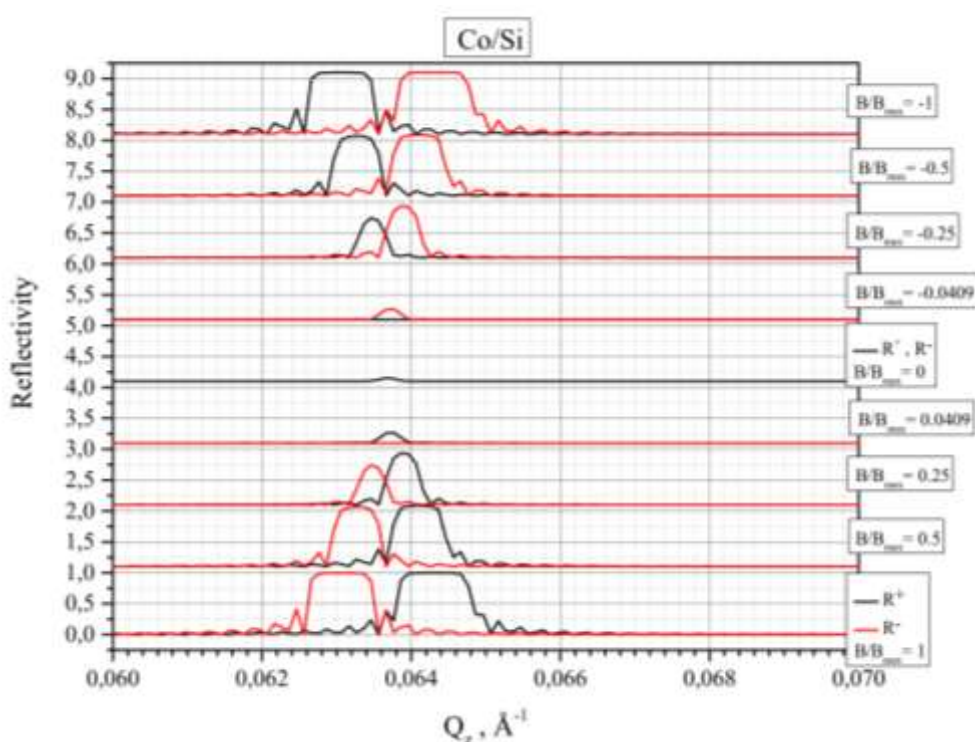


Рис. 3.13. Расчетные кривые коэффициента отражения нейтронного пучка от многослойной периодической магнитной наноструктуры (Co/Si) в зависимости от переданного импульса для (+) и (-) спиновых компонент пучка для нескольких значений магнитной индукции B в слоях наноструктуры в области брэгговских пиков первого порядка

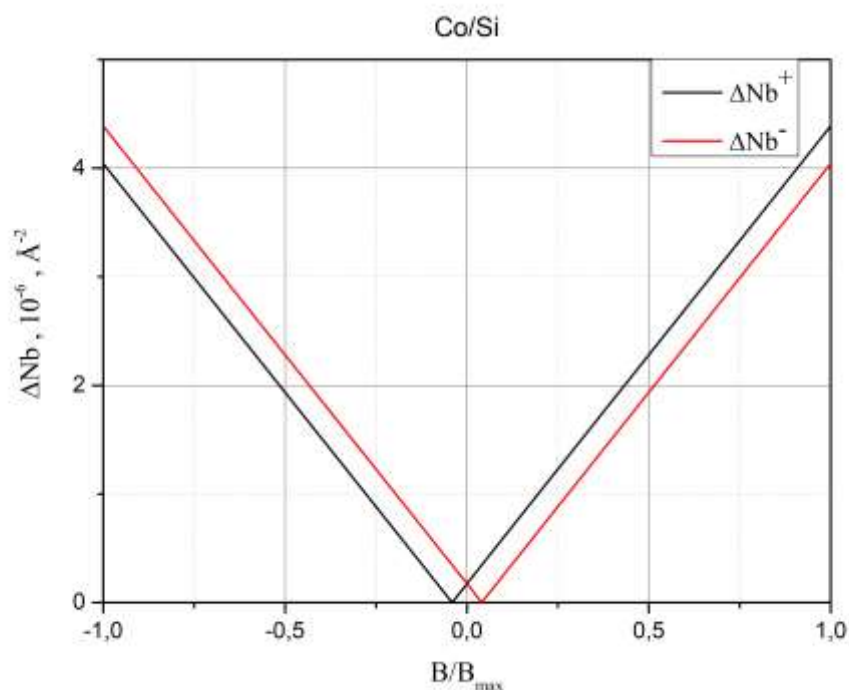


Рис. 3.14. Зависимости разностей параметров ΔNb^+ и ΔNb^- для обеих спиновых компонент от отношения магнитной индукции к ее максимальному значению для магнитной наноструктуры (Co/Si)

Аналогичные исследования были проведены и для структуры (Fe/Co). Расчетные характеристики при разной относительной намагниченности слоёв представлены в таблице 3.7.

Таблица 3.7 – Параметры наноструктуры (Fe/Co) при различных значениях относительной намагниченности слоёв

$Nb_1^+, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	$Nb_1^-, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	$Nb_2^+, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	$Nb_2^-, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	B/B_{max}	$\Delta Nb^+, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$	$\Delta Nb^-, 10^{-6}, \text{Å}^{-2}$
13.133	2.932	6.458	-1.973	1	6.675	4.905
11.857	4.207	5.404	-0.919	0.75	6.453	5.126
10.582	5.482	4.35	0.135	0.5	6.232	5.347
9.307	6.757	3.296	1.189	0.25	6.011	5.568
8.032	8.032	2.243	2.243	0	5.789	5.789
6.757	9.307	1.189	3.296	-0.25	5.568	6.011
5.482	10.582	0.135	4.35	-0.5	5.347	6.232
4.207	11.857	-0.919	5.404	-0.75	5.126	6.453
2.932	13.133	-1.973	6.458	-1	4.905	6.675

Аналогично наноструктуре (Co/Si) расчет кривых для наноструктуры (Fe/Co) проводился при толщинах слоёв $d = 50 \text{ \AA}$ и количестве пар слоёв $N = 200$, график кривых при различных значениях относительной намагниченности в полном диапазоне представлен на рисунке 3.15. Подобные расчеты были представлены для структуры Fe/Co в работе[7].

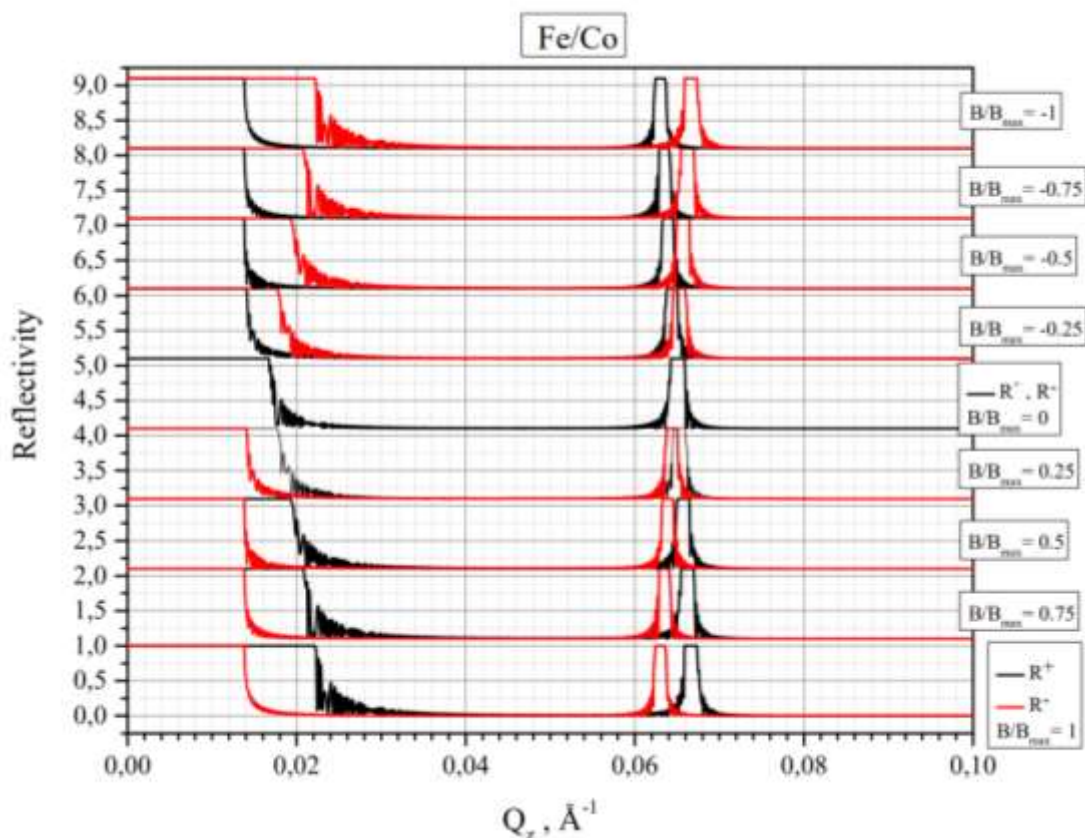


Рис. 3.15. Расчетные кривые коэффициента отражения нейтронного пучка от многослойной периодической магнитной наноструктуры (Fe/Co) в зависимости от переданного импульса для (+) и (-) спиновых компонент пучка для нескольких значений магнитной индукции B в слоях наноструктуры в полном виде

В случае со структурой (Fe/Co) можно наблюдать аналогичное явление, пики отражения для разных спиновых компонент с уменьшением абсолютного значения относительной намагниченности сближаются пока вовсе не накладываются друг на друга, и в конечном итоге если намагниченность в слоях

поменяется на противоположные пики для разных спиновых компонент поменяются местами. Более удобный урезанный вид графиков представлен на рисунке 3.16.

Как и в случае с наноструктурой (Co/Si) На рисунке 3.17 представлена зависимости разностей параметров ΔNb^+ и ΔNb^- для обеих спиновых компонент пучка от отношения магнитной индукции к ее максимальному значению для магнитной наноструктуры (Fe/Co). На графике видно плавное изменение.

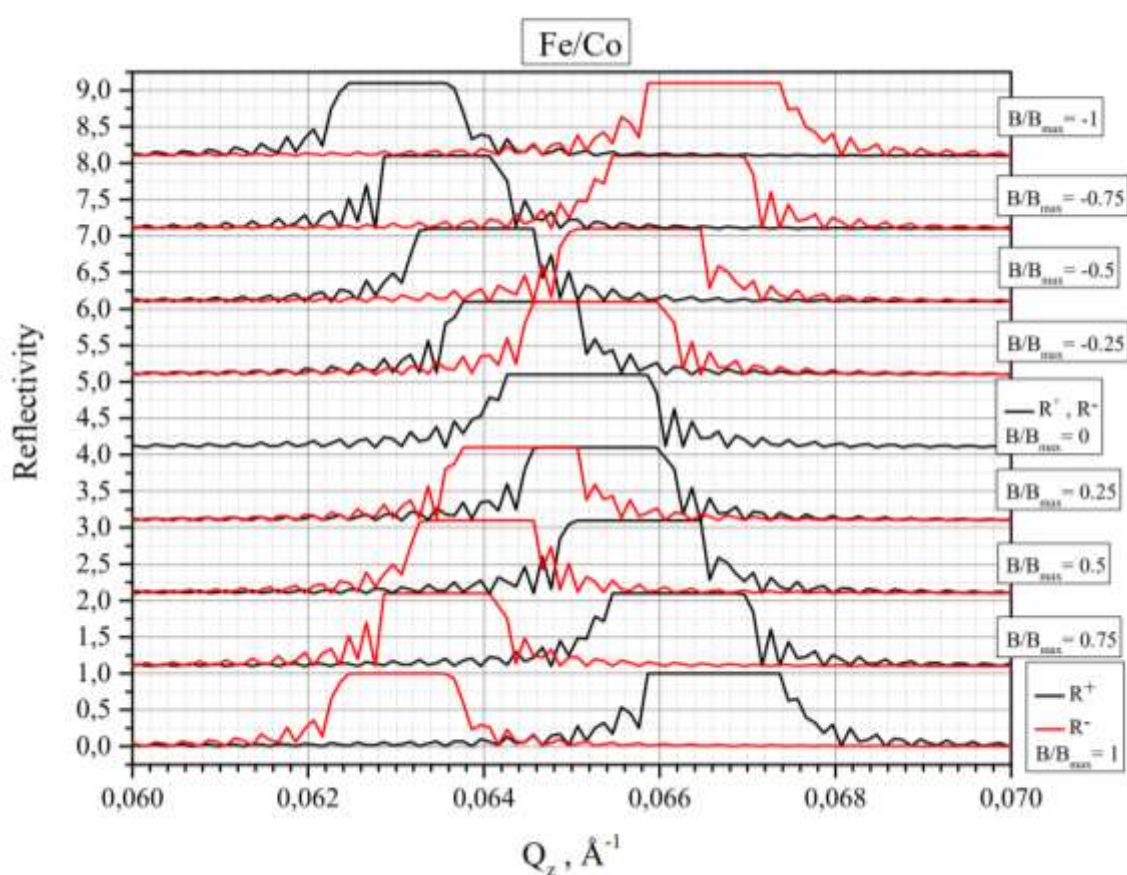


Рис. 3.16. Расчетные кривые коэффициента отражения нейтронного пучка от многослойной периодической магнитной наноструктуры (Fe/Co) в зависимости от переданного импульса для (+) и (-) спиновых компонент пучка для нескольких значений магнитной индукции B в слоях наноструктуры в области брэгговских пиков первого порядка

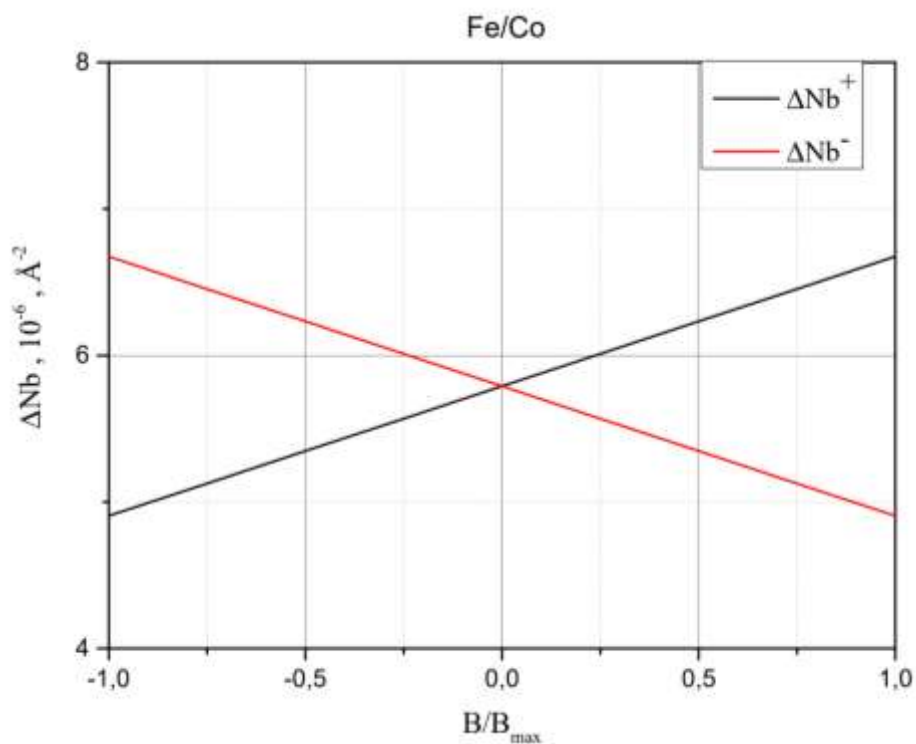


Рис. 3.17. Зависимости разностей параметров ΔNb^+ и ΔNb^- для обеих спиновых компонент от отношения магнитной индукции к ее максимальному значению для магнитной наноструктуры (Fe/Co)

Заключение

Проведя теоретическое исследование рассеяния нейтронов на многослойных периодических наноструктурах, были выявлены закономерности распределения брэгговских пиков первого порядка для отраженной (+) и (-) спиновой компоненты нейтронного пучка для различных комбинаций материалов и толщин слоёв. Выполненные расчеты на основе этих закономерностей позволили теоретически предсказать, как будет вести себя нейтронный пучок, отражаясь от мультинаноструктуры.

Так же на основе исследования была получена модель для расчета мультимонохроматора – биполяризатора (НММБ) на основе нескольких периодических наноструктур. Проведены расчеты параметров НММБ по полученной модели, и рассчитав кривые коэффициента отражения для двух НММБ на основе пар материалов (Fe/Co) и (Co/Si) по этим параметрам. На основе этих результатов и пересчета кривых в зависимость от длины волны и угла скольжения, был выявлен факт подтверждения расчетов, как и было изначально задумано, совпадения пиков отражения для противоположных спиновых компонент отраженного от таких структур нейтронного пучка.

Так же проведя исследование отражения нейтронного пучка от периодических наноструктур (Fe/Co) и (Co/Si) были выявлены эффекты схождения пиков отражения при уменьшении абсолютного значения относительной намагниченности слоёв, что может помочь в дальнейших исследованиях рассеяния нейтронов на многослойных периодических наноструктурах и в исследовании НММБ в частности, так как при их расчетах участвует значения плотности длины рассеяния, которая изменяется при изменении относительной намагниченности слоёв, и вследствие этого меняется картина рассеяния нейтронного пучка. Особенно заметные изменения наблюдались при перемагничивании структуры Co/Si, где в области близкой к

$B = 0$ пики значительно уменьшались, а при значениях $B/B_{max} = \pm 0.0409$, одна из отраженных спиновых компонент вовсе исчезала.

Получив теоретические данные о рассеянии нейтронов на рассчитанных наноструктурах НММБ на основе пар чередующихся слоёв (Fe/Co) и (Co/Si), можно предложить их в качестве поляризаторов и анализаторов для полного нейтронного поляризационного анализа. Так как ожидаемый эффект был подтвержден, для получения полного анализа интенсивностей (+, -, +, -) поляризационного анализа можно использовать НММБ отклоняя его на два угла скольжения, что, как было выяснено, позволяет получить совпадения (+) и (-) спиновой составляющей для каждой нейтронной длины волны из набора из нескольких длин волн. Это имеет не только теоретический характер, но и прикладную значимость исследования, так как с помощью НММБ можно существенно уменьшить размеры установки полного поляризационного анализа исключив из нее спин – флипперы, и появляется возможность создания компактной ячейки полного поляризационного анализа с использованием только одной магнитной системы – магнитной системы образца.

И, таким образом, благодаря новой схеме, предложенной в статье [1] и рассчитанным наноструктурам, размер установки для поляризационного анализа можно существенно сократить.

Отдельно выражаю слова благодарности научному руководителю Сыромятникову Владиславу Генриховичу за предоставление темы выпускной квалификационной работы, помощь в расчетах и анализе результатов, а также дополнительного разъяснения материала и помощи в оформлении работы.

Список использованной литературы

- 1 V.G. Syromyatnikov, Kyaw Zaw Lin. Neutron multimonochromator-bipolarizer based on magnetic multilayer Fe/Co and new scheme for the total neutron polarization analysis. *Journal of Physics: Conference Series* 862 (2017) 012016 (16 pages).
- 2 L. G. Parratt. Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays, *Physical Review*, Volume 95, Number 2, July 15, 1954 (11 pages).
- 3 Программа Parratt32 [электронный ресурс]URL: <https://parratt32.software.informer.com> (дата обращения 23.05.2021).
- 4 Nelson, A. "Co-refinement of multiple contrast neutron / X-ray reflectivity data using MOTOFIT." *Journal of Applied Crystallography*, Volume 39, Issue 2, April 2006 (Pages 273-276).
- 5 R. M. Moon, T. Riste, and w. C. Koehler, Polarization Analysis of Thermal-Neutron Scattering, *Physical Review*, Volume 181, Number 2, May 10, 1964 (12 pages).
- 6 Чжо Зо Лин, Сыромятников В.Г. // Вестник СПбГУ. Сер. 4. Физика и химия. 2016. Вып. 1. С. 25
- 7 Kyaw Zaw Lin, Сыромятников В. Г. Исследование многослойной магнитной наноструктуры Fe/Co методом нейтронной рефлектометрии // поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2016, № 12, с. 8–14.
- 8 Kyaw Zaw Lin, Сыромятников В. Г. Многослойный нейтронный монохроматор-поляризатор на основе железа // поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2016 № 7, с. 13–18.
- 9 Гуревич И. И., Тарасов Л. В. Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965. 607 с

- 10 Никитенко Ю. В., Сыромятников В. Г. Рефлектометрия поляризованных нейтронов. М.: Физматлит, 2013. 224 с.
- 11 Schoenborn B. P., Caspar D. L. D., Kammerer O. F. A novel neutron monochromator // *J. Appl. Cryst.* 1974. Vol. 7. P. 508.
- 12 Lynn J. W., Kjems J. K., Passell L., Saxena A. M., Schoenborn B. P. Iron-germanium multilayer neutron polarizing monochromators // *J. Appl. Cryst.* 1976. Vol. 9. P. 454
- 13 Saxena A. M., Schoenborn B. P. Multilayer neutron monochromators // *Acta Cryst.* 1977. Vol. A33. Part. 5. P. 805.
- 14 Кезерашвили В. Я., Щебетов А. Ф., Песков Б. Г., Плешанов Н. К., Сороко З. Н., Сыромятников В. Г. Нейтронный многослойный монохроматор-поляризатор на основе пары Fe/Ag // *Журн. техн. физики.* 1987. Т. 57, вып. 7. С. 1372–1379.
- 15 Syromyatnikov V. G., Menelle A., Soroko Z. N., Schebetov A. F. Neutron double multilayer monochromator-polarizer Co/Ti // *Physica (B).* 1998. Vol. 248, N 1–4. P. 355–357/
- 16 Гукасов А. Г., Дериглазов В. В., Кезерашвили В. Я., Кудряшов В. А., Крутов Г. А., Песков Б. Г., Сыромятников В. Г., Трунов В. А., Харченков В. П., Щебетов А. Ф. Нейтронный многослойный монохроматор-поляризатор // *Журн. эксп. теор. физики.* 1979. Т. 77, вып. 5. С. 1720.

Приложение А – Код программы для расчета периода мультинаноструктуры

```

Q :=
k ← 1.11
Q1bm ← 0.08977
Nb1p ← 6.46·10-6
Nb1m ← -1.97·10-6
Nb2p ← 2.07·10-6
Nb2m ← 2.07·10-6
d1 ← 35
for i ∈ 1..10
  for j ∈ 0..3
    Qi-1,0 ← i
    [
      Q0,1 ← 2  $\frac{\pi}{\sqrt{\left(\frac{Q1bm}{k}\right)^2 - 16\pi \cdot Nb1p} + \sqrt{\left(\frac{Q1bm}{k}\right)^2 - 16\pi \cdot Nb2p}}$ 
      Q0,3 ←  $\sqrt{\left(\frac{\pi}{Q_{0,1}}\right)^2 + 8 \cdot \pi \cdot (Nb1m + Nb2m)}$ 
    ]
    Qi,1 ← 2  $\frac{\pi}{\sqrt{\left(\frac{Q_{i-1,3}}{k}\right)^2 - 16\pi \cdot Nb1p} + \sqrt{\left(\frac{Q_{i-1,3}}{k}\right)^2 - 16\pi \cdot Nb2p}}$ 
    [
      Qi,3 ←  $\sqrt{\left(\frac{\pi}{Q_{i,1}}\right)^2 + 8 \cdot \pi \cdot (Nb1m + Nb2m)}$ 
    ]
    Qi,0 ← i + 1
    Q0,2 ←  $\frac{Q1bm}{k}$ 
    Qi,2 ←  $\frac{Q_{i-1,3}}{k}$ 
  return Q

M :=
k ← 1.11
Q1bm ← 0.08977
d1 ← 35
for i ∈ 1..11
  for j ∈ 0..3
    Mi-1,0 ← i
    M0,1 ← d1
    M0,3 ← Q1bm
    Mi,1 ← Qi-1,1
    Mi,2 ← Qi-1,2
    Mi,3 ← Qi-1,3
    M6,0 ← 7
  1
  1
return M

```

Рисунок А.1 – Код программы для расчета параметров мультинаноструктуры в Mathcad