

На правах рукописи

УДК 548.732

Репченко Юрий Леонидович

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ ЯВЛЕНИЙ
ВБЛИЗИ КРАЕВ ПОГЛОЩЕНИЯ В УСЛОВИЯХ ОТРАЖЕНИЯ
РЕНТГЕНОВСКОГО СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ
ОТ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР

Специальности: 01.04.07 – физика конденсированного состояния
05.13.18 - математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

Диссертация
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научные руководители:
доктор физико-математических наук,
профессор Домашевская Э.П.,
доктор физико-математических наук,
в.н.с. Андреева М.А.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
Глава I. РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В ИССЛЕДОВАНИЯХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК.....	10
§ 1. Тонкая структура рентгеновского поглощения вблизи краёв. Исследования электронной структуры атомов в среде.....	10
§ 2. Рентгеновский круговой дихроизм в окрестности краев поглощения. Новая информация в теории магнетизма.....	17
§ 3. Рентгеновская рефлектометрия: структурные и магнитные исследования.....	23
§ 4. Метод стоячих рентгеновских волн в условиях зеркального отражения.....	32
§ 5. Методы восстановления компонент тензора восприимчивости.....	39
§ 6. Теория магнитной рентгеновской рефлектометрии.....	46
Глава II. КИНЕМАТИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ В ТЕОРИИ РЕФЛЕКТОМЕРИИ.....	51
§ 1. Скалярный случай.....	52
§ 2. Матричные рекуррентные соотношения.....	54
§ 3. Кинематическая формула для матричного коэффициента отражения в случае планарной намагниченности слоев и ее обобщение.....	59
§ 4. Анализ пределов применимости кинематической теории отражения в анизотропном случае при разных упрощениях.....	65
Основные результаты и выводы Главы II:	71

Глава III. ПРОБЛЕМЫ ИНТЕРПРЕТАЦИИ СПЕКТРОВ XANES, ИЗМЕРЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ ТЕУ ПРИ РАЗНЫХ УГЛАХ СКОЛЬЖЕНИЯ	72
§ 1. Влияние оптических эффектов на форму спектров ТЕУ XANES	74
§ 2. Интерпретация спектра ТЕУ XANES для плёнки GaInP.....	86
Основные результаты и выводы Главы III:	92
Глава IV. РЕЗКО АСИММЕТРИЧНАЯ ДИФРАКЦИЯ КАК МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ КОНСТАНТ ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ВБЛИЗИ КРАЕВ ПОГЛОЩЕНИЯ...	93
§ 1. Интерпретация аномальных всплесков интенсивности на кривых выхода флуоресцентного излучения от плёнки YFe ₂	94
§ 2. Теория резко асимметричной дифракции. Кинематическое приближение.....	99
§ 3. Динамическая теория резко асимметричной дифракции в общем некомпланарном случае.....	102
§ 4. Динамическая теория резко асимметричной дифракции в компланарном случае.....	109
§ 5. Моделирование спектральной зависимости положения максимума дифракционного отражения в условия резко ассиметричной дифракции.....	111
Основные результаты Главы IV:	121
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ	122
ПРИЛОЖЕНИЕ.....	124
ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА	141
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА	163

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы

Технологический прогресс активно стимулирует поиск новых материалов для полупроводниковой промышленности, спинтроники, магнетoeлектроники, рентгеновской оптики. Одним из направлений развития нанотехнологии является создание ультратонких многослойных наноструктур, которые проявляют ферромагнитные, антиферромагнитные, волноводные, магниторезистивные, магнитоэлектрические, магнитооптические, сверхпроводящие или другие важные свойства. Эффекты гигантского магнетосопротивления, аномального магнитоотражения и туннельного магнетосопротивления, имеющие место в магнитоупорядоченных многослойных структурах, весьма чувствительны к структурным параметрам их отдельных нанослоев: толщинам, однородности, качеству интерфейсов, межслойной интердиффузии отдельных элементов и т.д., - поэтому важную роль в изучении подобных наноструктур играет рентгеновское излучение. Активное использование синхротронных источников излучения значительно расширило возможности рентгеновских исследований, благодаря высокой яркости источника, простоте подстройки длины волны излучения к краям поглощения отдельных элементов, созданию поляризаторов излучения, развитию техники детектирования. На синхротронах, кроме совершенствования дифракционных и интерферометрических методов, интенсивно развивается рентгеновская спектроскопия поглощения вблизи краев поглощения (XANES – X-ray Absorption Near Edge Structure и XMCD – X-ray Magnetic Circular Dichroism), чувствительная к состояниям внешних электронных оболочек резонансных атомов и позволяющая изучать электронную структуру, химические связи, симметрию ближайшего окружения и, что наиболее привлекательно, магнитную структуру, селективно по элементам. В сочетании с рефлектометрическими или дифракционными методами эти исследования

вблизи краев поглощения дополняются пространственной селективностью с разрешением до долей нанометров.

Резонансные и анизотропные эффекты, существенные вблизи краев поглощения, требуют адекватного теоретического описания, необходимого для понимания экспериментальных данных. Происходящее при этом существенное усложнение теории рефлектометрии и дифракции делают актуальными не только совершенствование теории, но и её упрощения для экспрессного анализа экспериментальных данных. Решению некоторых из этих задач и посвящена настоящая работа.

Цели и задачи

-Развитие теории рентгеновской рефлектометрии на случай отражения поляризованного рентгеновского излучения от многослойных структур с учетом их анизотропии, возникающей вблизи краев поглощения, в кинематическом приближении.

-Анализ пределов применимости кинематической теории отражения в анизотропном случае при разных упрощениях.

-Анализ трансформаций резонансной «белой» линии в спектре полного выхода электронов вблизи края поглощения фосфора (TEY XANES – Total Electron Yield X-ray for Absorption Near Edge Spectroscopy), наблюдаемых при изменении угла падающего рентгеновского излучения.

-Объяснение аномальных всплесков интенсивности на угловых кривых выхода флуоресценции, наблюдаемых для плёнки YFe_2 , при возбуждении излучением с энергией фотонов вблизи края поглощения иттрия.

-Развитие теории резко асимметричной дифракции в кинематическом и динамическом приближениях и объяснение сдвигов брэгговского пика в функции энергии фотонов, варьирующейся вблизи краев поглощения, при скользких углах падения рентгеновского излучения.

Научная новизна и практическая значимость работы

В работе впервые развита в кинематическом приближении теория рентгеновской рефлектометрии для анизотропных мультислоев. Был использован формализм матриц распространения, планарных тензоров импеданса и нормальной рефракции, что позволило получить общее решение для матриц отражения в наиболее компактном виде.

Впервые дано объяснение искажений спектров TEY XANES при скользящих углах падающего излучения, что потребовало учета двух неравновесных спектральных вкладов – резонансного и нерезонансного, но промодулированного стоячей рентгеновской волной, - в суммарную зависимость выхода электронов от энергии падающих фотонов. Разработанный пакет программ, позволяющий обрабатывать экспериментальные данные, получаемые в условиях отражения от многослойных структур по полному выходу электронов - размещен на сайте КФТТ физического факультета МГУ в свободном доступе [A14].

Был предложен метод определения спектральной зависимости магнитно-оптических констант вблизи краев поглощения для жесткого рентгеновского излучения, основанный на дифракции излучения в резко ассиметричной схеме со скользящим углом падения.

Положения, выносимые на защиту

1. Необходимость учета преобразования поляризации проходящей и рассеянной волны в кинематической теории резонансной рентгеновской рефлектометрии.
2. Заключение о влиянии относительного вклада резонансного и нерезонансного поглощения в спектральную зависимость интенсивности TEY XANES при скользящих углах падения, когда в среде формируется стоячая рентгеновская волна.

3. Возможность определения магнито-оптических констант для жесткого рентгеновского излучения вблизи краёв поглощения по сдвигу брэгговских максимумов в условиях резко асимметричной дифракции.

Достоверность результатов диссертации обеспечивается использованием универсальных законов и уравнений классической физики для взаимодействия рентгеновского излучения с многослойными кристаллами, а также хорошим совпадением результатов измерения и компьютерного моделирования.

Внедрение научных результатов.

Работа над диссертацией проводилась в рамках научно-исследовательских тематик кафедры физики твердого тела и наноструктур ФГБОУ ВПО «ВГУ» и кафедры физики твердого тела МГУ имени М.В. Ломоносова, была частично поддержана Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2014-2016 годы. Проект № 757 и Задание № 3.1868.2014/К и грантами РФФИ № 12-02-00924 и № 15-02-01502.

Апробация работы:

Основные результаты работы были доложены на следующих конференциях и совещаниях:

1. Международный молодежный научный форум «ЛОМОНОСОВ-2012», Москва, апрель 2012.
2. 11th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging «ХТОР 2012», Санкт-Петербург, сентябрь 2012.
3. Конференция «Рентгеновская оптика — 2012», Черноголовка, октябрь 2012

4. Шестой международный научный семинар «Современные методы анализа дифракционных данных и актуальные проблемы рентгеновской оптики», Великий Новгород, август 2013.
5. Международная балтийская школа по физике твердого тела «International Baltic School II», Калининград, октябрь 2013.
6. Fifth joint BER II and BESSY II users meeting, Берлин, декабрь 2013.
7. 12th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging «ХТОР 2014», Villard-de-Lans, сентябрь 2014.
8. Конференция «Рентгеновская оптика — 2014», Черногоровка, октябрь 2014.

Публикации

По результатам данной диссертационной работы опубликовано 13 [A1-A13] печатных работ, из которых 3 статьи опубликованы в изданиях, входящих в утвержденный ВАК перечень ведущих рецензируемых научных изданий, 10 тезисов и материалов докладов.

Личный вклад автора:

Основные результаты, изложенные в диссертации, получены соискателем лично или при его непосредственном участии.

Структура и объем диссертации:

Диссертация состоит из введения, четырех глав, основных выводов, приложения и содержит 166 страниц текста, включая 18 страниц приложения, 64 рисунка и список литературы из 202 наименований.

Первая глава содержит общую характеристику рентгеновских методов, применимых к анализу свойств тонких пленок, таких как рентгеновская

рефлектометрия, исследования ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения, рентгеновского кругового магнитного дихроизма, магнитного резонансного рассеяния, метод стоячих рентгеновских волн, метод рентгеновской магнитной резонансной рефлектометрии.

Учёт магнитных свойств, исследуемых многослойных рентгеновских плёнок, вносит радикальное усложнение в теорию рентгеновской магнитной резонансной рефлектометрии. **Во второй главе** разработан приближённый метод, позволяющий ускорить расчёт и упростить интерпретацию получаемых результатов.

Резонансные эффекты могут так же вносить определённые сложности в интерпретацию получаемых экспериментальных данных и даже ограничивать область их применения. **В третьей главе** рассмотрено влияние резонансного и нерезонансного поглощения на форму спектров рентгеновского поглощения вблизи края.

В главе четыре развита теория некопланарной резко асимметричной дифракции и предложен метод, позволяющий определять магнито-оптические константы для жесткого рентгеновского излучения вблизи краёв поглощения. Метод основан на дифракции рентгеновского излучения в резко асимметричной геометрии.

Глава I. РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В ИССЛЕДОВАНИЯХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК

Данная глава представляет собой литературный обзор современного состояния рентгенооптических исследований с применением спектрального анализа, дающих уникальную информацию для энергий фотонов вблизи краев поглощения. Приведены примеры различных экспериментов, в которых наиболее ярко продемонстрированы современные технические возможности исследования химического и магнитного состояния исследуемых объектов. Дан также анализ состояния теории магнитной рентгеновской рефлектометрии и очерчены проблемы, имеющиеся в интерпретации экспериментальных данных.

§ 1. Тонкая структура рентгеновского поглощения вблизи краев.

Исследования электронной структуры атомов в среде.

Исследование ближней тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения вблизи краев поглощения (XANES – X-ray Absorption Near Edge Spectroscopy; для мягкого рентгеновского излучения чаще применяется термин NEXAFS – Near Edge X-Ray Absorption Fine Structure) является элементарно-селективным методом изучения валентной зоны, спин-орбитальных взаимодействий, симметрии ближнего окружения твёрдых тел и т.д.[1-4] В общем случае ab-initio расчёты спектров поглощения достаточно сложны и часто недостоверны, они основываются на полной информации об электронной структуре твердого тела в основном и возбужденном состоянии (см. обзор в статье [2]). Тем не менее, можно получить очень полезную информацию уже из качественного вида этих спектров.

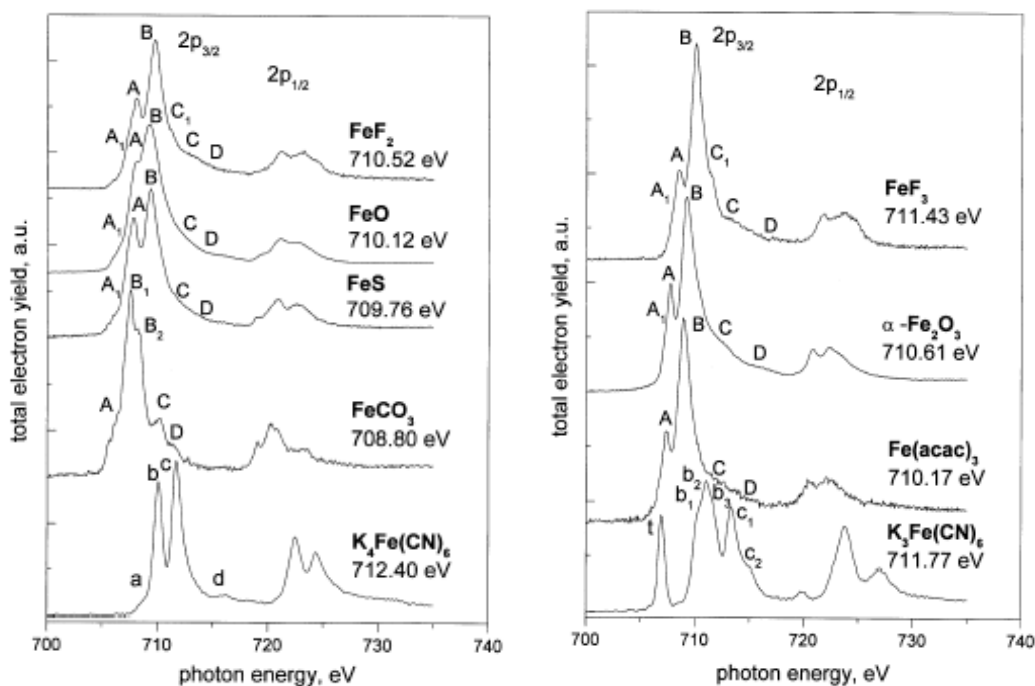


Рис 1.1.1. Спектры поглощения Fe содержащих соединений снятые вблизи $L_{2,3}$ – краёв поглощения из работы [3]. Слева соединения, в которых атомы железа двухвалентны, справа – трехвалентны.

Например, на приведенном Рис.1.1.1 хорошо видно, что спектры различных соединений железа с разной валентностью атомов железа имеют вполне характерные особенности и могут использоваться как «fingerprints» в химическом анализе.

После того как в начале 20-го века была описана структура атомной оболочки, рентгеновская спектроскопия поглощения была впервые использована для изучения структуры вещества. Наблюдаемая тонкая структура вблизи краёв поглощения была впервые объяснена в общих представлениях теорией Косселя [4]. Структуры находящиеся вдали от края поглощения на десятки электрон-вольт были теоретически объяснены Кронигом [5]. Позже они были названы дальней тонкой структурой рентгеновского поглощения (EXAFS - Extended X-ray absorption fine structure).

В 1970х, когда исследования дальней тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения были развиты в мощный метод для структурных исследований, спектры вблизи краев поглощения, хотя и измеряли

автоматически, но не анализировали, так как они считались слишком сложными. Исключением были молекулы с маленьким порядковым номером в периодической таблице Менделеева, чьи К – оболочки обладали энергией связи в районе 120-750 эВ (углерод: 285 эВ, азот: 400 эВ, кислород: 535 эВ и фтор: 685 эВ), которые могли возбуждаться с помощью характеристических потерь энергии электронов [6-7]. Спектр N₂ снятый методом характеристических потерь энергии электронов (ISEELS - inner shell electron energy loss spectroscopy) [8] послужил исходным моментом для первых количественных расчётов ближней тонкой структуры спектров [9]. К настоящему времени достигнут существенный прогресс в понимании ближней тонкой структуры в молекулах, неорганических и органических соединениях монокристаллических и аморфных твёрдых тел [10-12].

Первые спектры вблизи краев поглощения кислорода хемосорбированных молекул [CO, а также NO на Ni(100)] были измерены в 1981 году [13]. Целью подобных измерений было сравнить спектры вблизи К-края поглощения, снятых методом выхода электронов и выхода ионов [14]. Важной предпосылкой для измерения подобных спектров было создание источника высокоинтенсивного монохроматического мягкого рентгеновского излучения в интервале 250-1000 эВ [15-16]. Регистрация поглощения осуществлялась методом полного выхода электронов, разработанным ранее [17-20]. Более подробный анализ спектров CO, NO, N₂ был проведён в 1982 в работе [21], в которой были получены выражения для анизотропии резонансного поглощения на основе теорий Дэвенпорта [22], Уоллеса и Дилла [23].

В 1983 в ходе изучения CO, муравьиной кислоты (НСООН) и метанола (СН₃ОН) на подложке Cu(100) было обнаружено [24], что положение в спектре пиков, соответствующих σ-орбиталям (так называемых «σ резонансных форм»), чувствительно к длине межмолекулярных связей; интенсивность низко энергетических «π резонансных форм» чувствительна к гибридизации межмолекулярных связей. В том же году на примере молекул

бензола (C_6H_6) и пиридина (C_5H_5N) хемосорбированных на подложке Pt(111) [25] было показано, что из спектров поглощения можно определять ориентацию подобных групп молекул.

В 1985-1986 годах был продемонстрирован метод измерения спектров поглощения с помощью регистрации флуоресцентного излучения, сначала для К – края поглощения серы (2740 эВ) [26-27], а затем и для К – края поглощения углерода (285 эВ) [28-29]. Это позволило проводить подобные эксперименты под давлением [30].

В некоторых случаях простой «метод отпечатка» (fingerprint method) позволяет определить из спектра поглощения наличие в растворах и расплавах частиц химических веществ, а так же оценить степень проявления их химических свойств. Так в работе [31] был представлен метод определения окислительно-восстановительных свойств и ближайшего окружения Fe в составе минералов и силикатных расплавов по форме предкраевых структур спектра поглощения для К-края Fe. В работе исследовались 30 образцов, имеющих в составе ион Fe^{2+} окруженный 4-12 атомами O, либо ион Fe^{3+} окруженный 4-6 атомами O. Для анализа окисленных свойств и нахождения координационного числа использовались такие характеристики предкраевых структур К-края как положение центра тяжести компонент спектра (разница позиции центра тяжести для ионов Fe^{2+} и Fe^{3+} 1.4 ± 0.1 эВ) и их интегральная интенсивность. Наименьшая интегральная интенсивность наблюдалась для centrosymmetric кристаллов. Было показано, что, если учитывать геометрию кристалла для каждого состояния, в минералах, содержащих в различных пропорциях ионы Fe^{2+} и Fe^{3+} , можно оценить их количественное соотношение Fe^{3+}/Fe^{2+} , разработанным в данной работе методом.

В другой работе [32] были получены спектры поглощения частиц, содержащих атомы магния, для энергий вблизи К – края поглощения Mn. По положению края было определено, что средняя валентность этих частиц ~ 2.2 . Методом главных компонент (PCA principal component analysis) удалось

установить, что исследуемые частицы состоят из трёх компонент: Mn_3O_4 , $MnSO_4 \cdot H_2O$, $Mn_5(PO_4)_2/[PO_3(OH)]_2 \cdot 4H_2O$ (MnPhos). С помощью аппроксимации методом наименьших квадратов удалось найти процентное содержание этих компонент (рис 1.1.2).

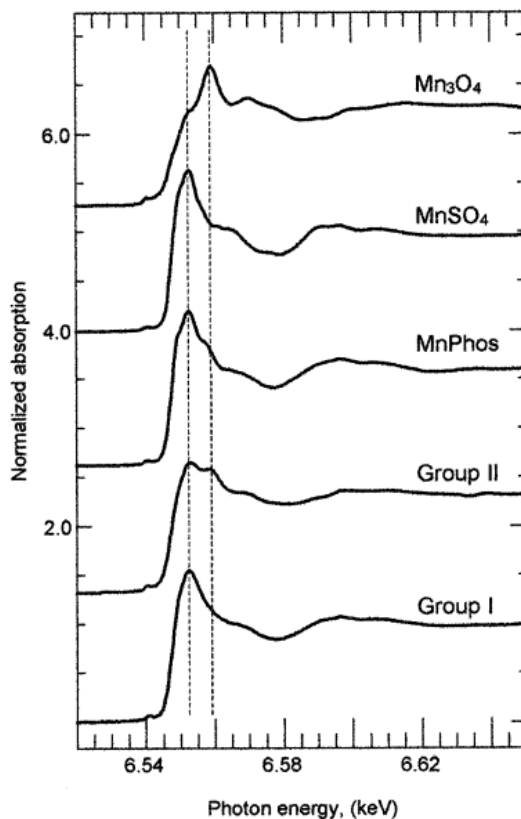


Рис 1.1.2. Нормированные спектры поглощения, полученные вблизи К – края поглощения Mn для трёх идентифицированных Mn – содержащих компонент в частицах, эмитированных из МТТ, а так же 2 характерных спектра поглощения полученных частиц. К первому типу (Group I) относятся частицы содержащие 4-9 % Mn_3O_4 . Ко второй группе (Group II) относятся частицы содержащие 15-22% Mn_3O_4 .

К достоинствам метода ближней тонкой структуры спектров рентгеновского поглощения можно отнести возможность наблюдать изменение химических свойств твёрдых тел в процессе выращивания, химических реакций, фазовых переходов. В работе [33] исследовались *in situ* спектры поглощения трёхкомпонентный катализатор Pd/ACZ вблизи К –

края поглощения Pd в процессе циклического нагревания до 850°C и охлаждения до 100°C. Кварцевый реактор, в котором проводился эксперимент был оснащён масс спектрометром. Полученные экспериментальные данные позволили определялась степень окисления палладия. А именно было установлено, что во время первого цикла нагревания снижение количества частиц PdO начиналось в районе 500°C и далее в процессе циклов охлаждения и нагревания степень окисления Pd не восстанавливалось в исходное состояние. Смешанную Pd²⁺/Pd степень окисления можно было наблюдать во втором цикле нагревания и охлаждения.

Как уже отмечалось, теоретические расчеты спектров поглощения достаточно сложны, особенно для многокомпонентных соединений, соединений с промежуточной валентностью и нано-объектов. Главную сложность при *ab initio* расчётах спектров поглощения представляет определение конечного состояния электрона. Разные подходы были использованы для решения этой задачи. Первая группа методов была основана в работах Де Грута [34]. Расчёты велись в рамках теории мультиплетов для поглощающего атома в кристалле. Второй подход использовал приближение локальной электронной плотности. Расчёты велись как в приближении бесконечных кристаллов [35], так и для кластеров с применением теории многократного рассеяния (the multiple scattering theory MST) [36-37]. Обычно теория MST включает важную аппроксимацию: muffin-tin структуру потенциала, необходимого для разложения волновых функций. В этом приближении потенциал описывается сферическими функциями в окрестности атомов, а в межатомных областях представляется блоховскими функциями. Точность результатов, полученных этим методом, будет зависеть от размера итерационной области. Развиваются также различные подходы в теории MST, которые позволяли обойтись без muffin-tin приближения [38-40].

Другим важным методом решения уравнения Шрёдингера является метод конечных разностей (the finite differences method FDM), который использует приближение локальной плотности электронов (local density approximation) [41]. Этот метод требует больших вычислительных мощностей и поэтому лишь в 1994 году [42] удалось впервые рассчитать зонную структуру атома методом FDM.

В работе [43] была разработана новая схема вычисления спектров поглощения, основанная на FDM. В этом подходе расчёт конечного состояния производится в прямом пространстве. Уравнение Шрёдингера решается в дискретной форме на узловых точках трёхмерной сетки. Искомыми являются значения волновых функций электрона в точках сетки. Для расчёта данным методом была разработана программа FDMNES [44].

Примером *ab initio* расчётов спектров поглощения с помощью программного пакета FDMNES является работа [45]. В ней приведены краткие описания используемой в расчётах теоретической модели, кода программы и основных приближений (the multiple scattering theory MST и the finite differences method FDM). Был реализован самосогласованный подход в рамках теории многократного рассеяния. Метод реализован следующим образом: берётся начальная предполагаемая электронная плотность. Далее из решения уравнения Шрёдингера получаем новые электронные состояния и соответствующую им новую электронную плотность. Эта процедура повторяется до достижения конвергенции. Будучи уверенными в том, что мы получили правильные электронные состояния, производим последнюю итерацию и расчёт спектра поглощения. При сравнении с экспериментальными спектрами, измеренными на К-крае поглощения меди Cu, рутила TiO₂, нитрата бора BN и оксида кальция CaO, было показано, что применение самосогласования в расчётах влияет умеренно на форму спектра в районе предкрая К – края поглощения, то есть вблизи уровня Ферми. Так для случаев, где имеют место несферические эффекты, расчёты методом

конечных разностей даёт лучший результат, чем самосогласованный расчет в рамках теории многократного рассеяния (рис 1.1.3).

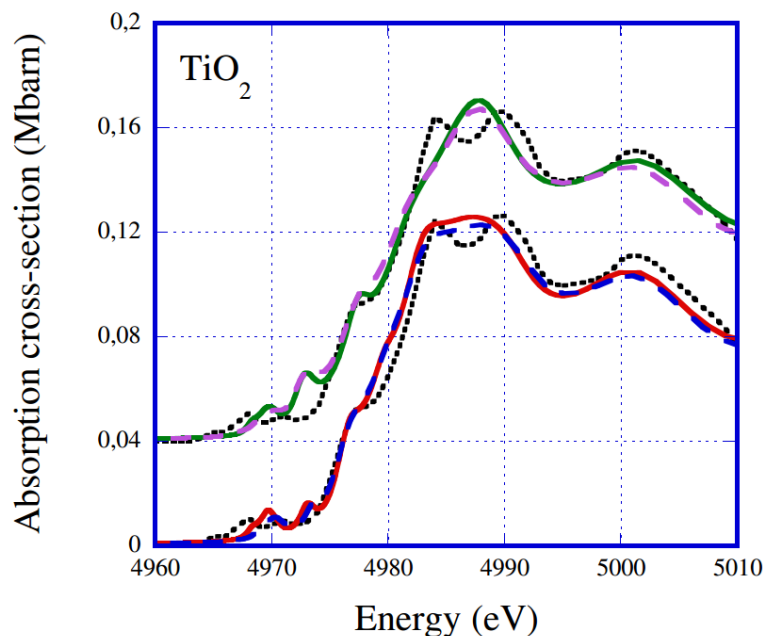


Рис 1.1.3. Спектр поглощения вблизи K – края поглощения Ti рутила TiO₂.

Точками обозначены экспериментальные данные. Нижние кривые - сравнение экспериментального спектра с рассчитанным спектром в рамках метода конечных разностей; верхние кривые - сравнение экспериментального спектра с рассчитанным спектром в рамках теории многократного рассеяния. Сплошные линии соответствуют моделированию с применением самосогласования; штриховые моделированию без применения самосогласования.

§ 2. Рентгеновский круговой дихроизм в окрестности краев поглощения. Новая информация в теории магнетизма.

На протяжении многих лет считалось, что исследовать магнетизм с помощью рентгеновского излучения невозможно, так как взаимодействие рентгеновского излучения с магнитным моментом очень слабое по величине [46].

Все же, точные вычисления эффекта, приведенные в работе *P.M. Platzman* и *N. Tzoar* в 1970 году [47], позволили надеяться, что эффект может быть наблюдаем. И в 1972 годах *F. de Bergevin* и *M. Brunel* впервые наблюдали «магнитные» максимумы в дифракции на антиферромагнитном кристалле NiO, а затем на некоторых других ферромагнитных и ферримагнитных кристаллах, хотя наблюдаемые максимумы были очень слабыми [48].

Радикально ситуация с магнитными исследованиями изменилась, когда эксперименты начали проводиться в резонансных (вблизи краев поглощения) для исследуемых образцов диапазонах энергий на синхротронах. В 1985 году *M. Blume* [49] показал, что сечение резонансного магнитного рассеяния может быть на порядки больше, чем в нерезонансном случае. Удачный эксперимент по наблюдению резонансного магнитного рассеяния на никеле был осуществлен в работе [50]. Полное теоретическое описание магнитного рассеяния было дано в работах *J.P. Hannon, G.T. Trammell et al., P. Carra, B.T. Thole, et al.* [51-53].

Экспериментальное наблюдение достаточно больших эффектов в рентгеновском магнитном рассеянии привело к созданию мощных методов, позволяющих элементарно-селективно изучать магнетизм и магнитные материалы. Одним из таких методов является XMCD (XMCD – *X-Ray Magnetic Circular Dichroism*).

XMCD – это разница между двумя спектрами рентгеновского поглощения (XAS), полученных для левой и правой круговой поляризации падающего излучения. Один из первых экспериментов методом XMCD, в котором были получены спектры для d-переходных металлов (рис. 1.2.1), был произведён в 1987 году *G. Schütz, W. Wagnerye et al* и был опубликован в работе [54].

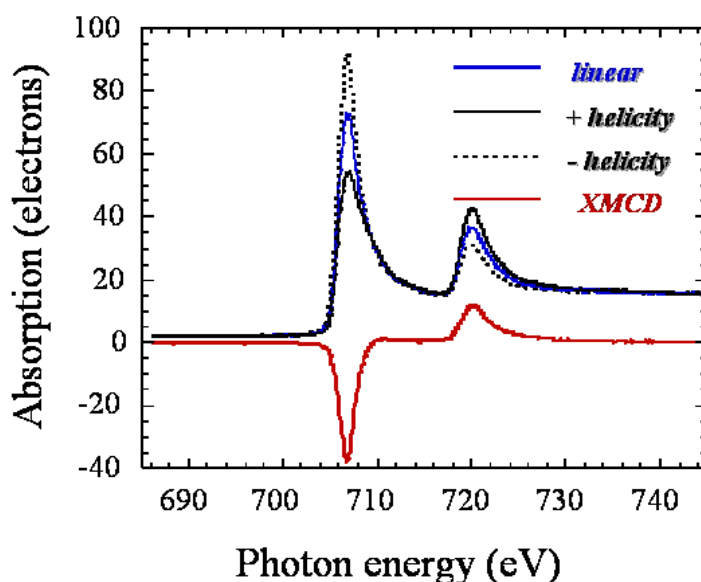


Рис 1.2.1 XAS и XMCD спектры, измеренные вблизи $L_{2,3}$ – краев поглощения атомов Fe для металлического железа [54].

Для резонансных спектров вблизи краев поглощения рентгеновского излучения возможно также наблюдать эффект линейного дихроизма, важного для исследования антиферромагнитных структур, кроме того в нецетросимметричных структурах проявляются эффекты естественного дихроизма и другие эффекты хиральности.

Важно, что метод XMCD является элементарно- и орбитально-селективным методом. Кроме того, квантово-механические правила переходов между уровнями с известными спиновыми и орбитальными моментами (правила сумм [52] и [53]) позволяют разделить магнитный момент исследуемого атома на спиновую и орбитальную составляющие. Это новая для теории магнетизма информация.

XMCD может быть использован как метод исследования фундаментальных характеристик магнитных материалов – кривых намагниченности, величины коэрцитивной силы и петель гистерезиса – поэлементно для отдельных составляющих слоистых структур и сплавов, в функции температуры, давления и т.д. Таким образом, в настоящее время рентгеновское резонансное поглощение стало источником уникальной

информации в исследовании магнетизма. В лекциях [55] изложена основная концепция эффекта рентгеновского кругового дихроизма.

В статье [56] элементарно-селективно исследовались магнитные свойства монокристаллической магнитной структуры $\text{Yb}_{14}\text{MnSb}_{11}$. Были получены спектры кругового магнитного дихроизма вблизи $N_{4,5}$ – краёв поглощения Yb; $L_{2,3}$ – краёв поглощения Mn; $M_{4,5}$ – краёв поглощения Sb. В ходе исследований удалось обнаружить: большую величину магнитного дихроизма вблизи $L_{2,3}$ – краёв поглощения Mn; маленький магнитный момент у атомов Sb, антипараллельный относительно магнитного момента в атомах Mn; и отсутствие магнитного момента у атомов Yb (рис. 1.2.2). Сравнением с теоретическими моделями удалось установить, что ион Mn имеет заряд $2+$.

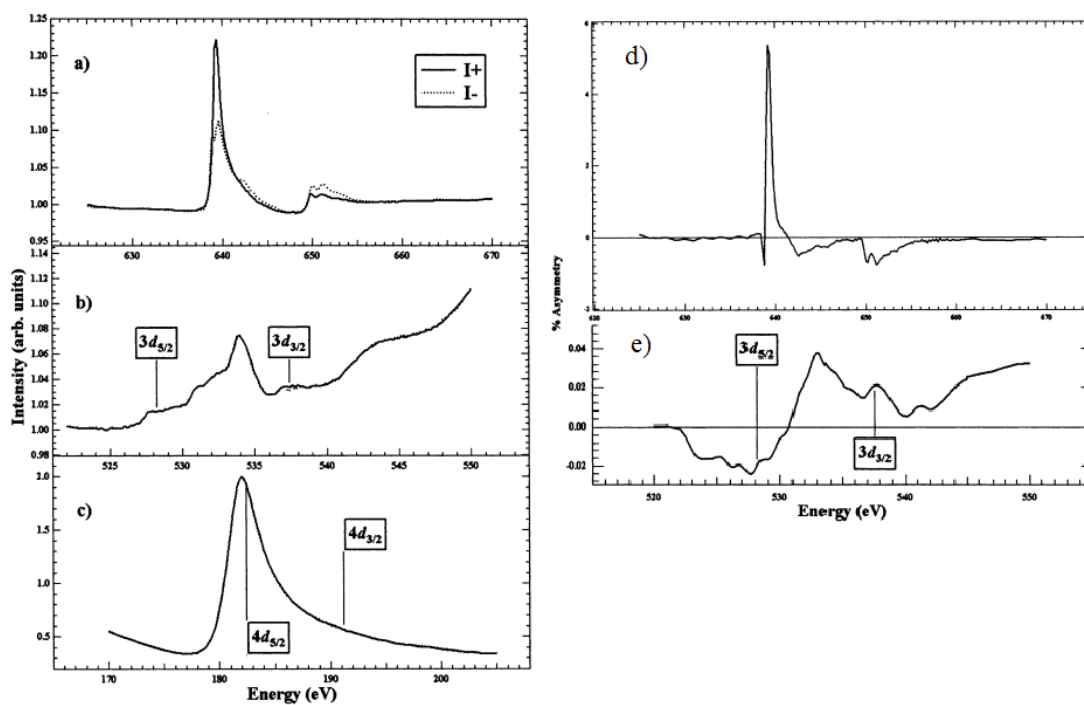


Рис. 1.2.2. Спектры поглощения излучения правой и левой круговой поляризации в структуре $\text{Yb}_{14}\text{MnSb}_{11}$ для энергий: а) вблизи $L_{2,3}$ – краёв поглощения Mn, б) $M_{4,5}$ – краёв поглощения Sb, в) вблизи $N_{4,5}$ – краёв поглощения Yb. Спектры XMCD полученные для энергий: д) вблизи $L_{2,3}$ – краёв поглощения Mn, е) $M_{4,5}$ – краёв поглощения Sb.

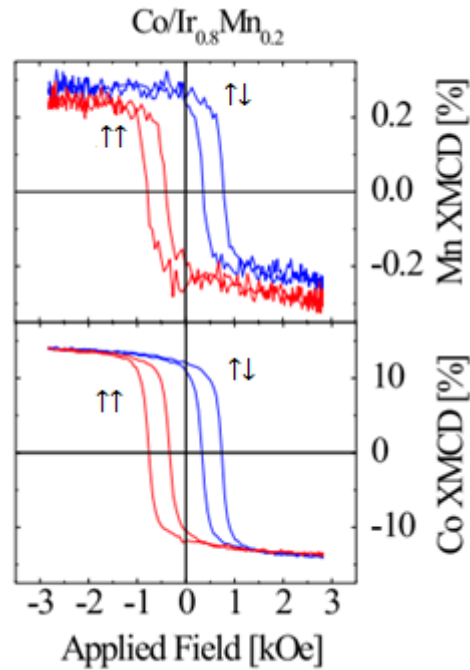


Рис .1.2.3. Петли гистерезиса по сигналу XMCD полученные для энергий вблизи L_3 – краёв поглощения Co и Mn в двух геометриях: поле смещение параллельно (на рисунке обозначенно символом $\uparrow\uparrow$) и антипараллельно (на рисунке обозначенно символом $\uparrow\downarrow$) направлению распространения рентгеновских лучей.

Другим примером показывающим возможности метода XMCD служит работа [57], в которой изучались антиферромагнитные/ферромагнитные системы NiO/Co, IrMn/Co и PtMn/CoFe. С целью выявить наличие закреплённых по внешнему магнитному полю магнитных моментов для IrMn/Co в работе были измерены петли гистерезиса по сигналу XMCD для энергий вблизи L_3 – краёв поглощения Co и Mn в двух геометриях: внешнее поле прикладывалось параллельно и антипараллельно направлению распространения рентгеновских лучей (рис. 1.2.3). Эксперимент показал наличие обменного смещения, как в антиферромагнитном, так и ферромагнитном слое. Маленький вертикальный сдвиг в петлях гистерезиса Mn, полученных для двух направлений поля, свидетельствует о том, что лишь малая часть около

$(7\pm 2)\%$ некомпенсированного магнитного момента закреплена по внешнему магнитному полю.

Метод XMCD также активно применяется для изучения магнитных свойств наночастиц. В работе [58] исследовались 18 нм кубики Fe, рассеянные на поверхности подложки Si (110). Для отдельных нанокубиков Fe различной конфигурации были получены петли гистерезиса по сигналу XMCD для энергии вблизи L_3 – края поглощения Fe (рис. 1.2.4). Установлено, что частицы Fe обладают суперпарамагнитными или ферромагнитными свойствами при комнатной температуре. Для некоторых частиц удалось обнаружить наличие магнитной анизотропии (Рис a,b), где ось лёгкого намагничивания расположена вдоль направления [100] и ось сильного намагничивания вдоль направления [110] в нанокубике Fe. В конфигурациях, таких как димеры и тримеры, коэрцитивная сила и форма петли гистерезиса существенно отличались от случая отдельно расположенных частиц, что было объяснено наличием магнитного взаимодействия между отдельными кубиками Fe (рис c,d).

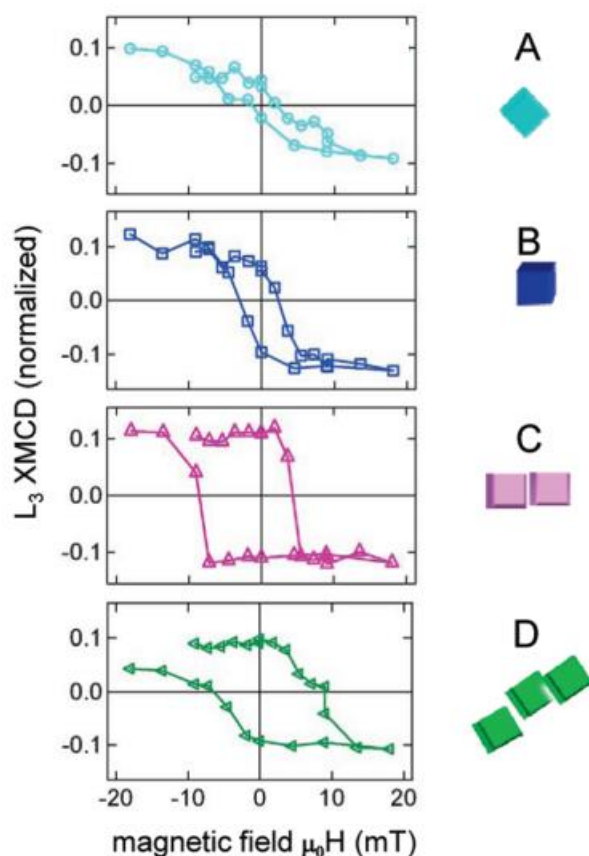


Рис. 1.2.4. Петли гистерезиса по сигналу XMCD для энергии вблизи L_3 – края поглощения Fe для: (A,B) отдельных нанокубиков Fe, (C) нанокубиков Fe обладающих конфигурацией димера, (D) нанокубиков Fe обладающих конфигурацией тримера.

§ 3. Рентгеновская рефлектометрия: структурные и магнитные исследования.

Кривые отражения рентгеновского излучения от ультратонких слоёв и многослойных плёнок обладают специфическими особенностями, позволяющими с большой точностью определять такие параметры структур: как толщина слоёв в плёнке, их оптические константы, наличие интерфейсов, периодичность многослойных структур. Ещё в 1922 году Комптоном было предсказано явление полного внешнего отражения (ПВО) [59]. Впервые толщинные осцилляции на рефлектометрических кривых наблюдались

Кизихом в 1930х [60], когда исследовались стёкла с никелевым покрытием. Профили изменения электронной плотности в многослойных структурах стало возможным изучать с появлением рекуррентного соотношения Паррата в 1954 году [61]. В дальнейшем метод развивался для учёта диффузного рассеяния, обусловленного шероховатостью слоёв и другими латеральными неоднородностями [62].

С появлением источников синхротронного излучения, стало возможным подстраивать энергию фотонов к энергии электронных переходов для конкретных элементов. Резонансная рентгеновская рефлектометрия обеспечивает атомную и химическую селективность в исследованиях электронных профилей.

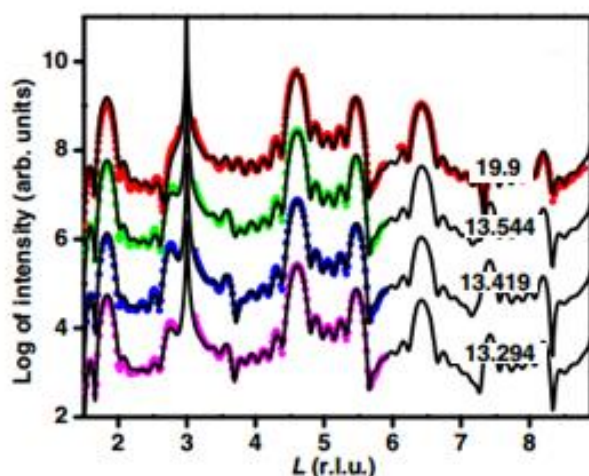


Рис 1.3.1. Экспериментальные кривые рентгеновского отражения от плёнки Bi_2Te_3 для энергий около L_3 -края поглощения Bi (13.294 эВ, 13.419 эВ, 13.544 эВ) и вдали от края поглощения для 19.9 эВ (точки). Сплошные кривые представляют результат фитирования экспериментальных кривых.

Примером структурных исследований данным методом может служить работа [63], в которой исследовались Bi_2Te_3 плёнки выращенные на $\text{Si}(111)$. Рефлектометрические исследования вблизи $\text{Bi } L_3$ – края поглощения (13.419 эВ), позволили восстановить профиль распределения атомов Bi по глубине (рис 1.3.1). Они показали, что буферный слой состоит

преимущественно из Те. Подобные исследования толстых плёнок Bi_2Te_3 также выявили формирования слоя, обогащенного Те, между подложкой и плёнкой.

Возможность работать на синхротронах с различной поляризацией излучения обеспечивает реализацию магнитных исследований многослойных структур. Поэтому появились новые методы: XRMS – *X-ray Resonant Magnetic Scattering*, а также XRMR – *X-ray Resonant Magnetic Reflectivity*, - обладающие принципиально новыми возможностями, в частности дополняющими метод XMCD селективностью по глубине.

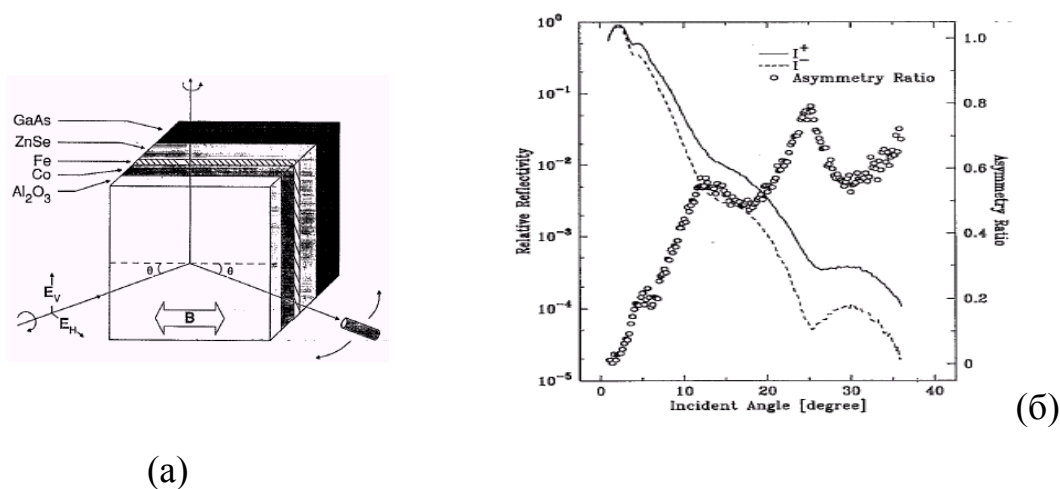


Рис. 1.3.2. (а) Схематичное изображение образца и геометрии измерений методом XRMR. (б) Кривые отражения для двух круговых поляризаций падающего излучения и их асимметрия по знаку круговой поляризации для структуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Co}/\text{Fe}/\text{ZnSe}/\text{GaAs}$ (слева) вблизи L_3 края Co.

Уже в первой работе [64], в которой измерялись кривые отражения от многослойной структуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Co}/\text{Fe}/\text{ZnSe}/\text{GaAs}$ для двух круговых поляризаций падающего излучения вблизи $L_{2,3}$ -краев поглощения Co, был продемонстрирован очень большой эффект асимметрии отражения по знаку круговой поляризации (большой «дихроизм» в отражении) - Рис. 1.3.2. Было продемонстрировано также сложное поведение $L_{2,3}$ -спектров отражения и их асимметрии для право- и лево- кругополяризованного излучения в зависимости от угла скольжения падающего излучения. Эта работа открыла

широкие возможности метода XRMR для исследования магнитной структуры многослойных пленок, представляющих огромный интерес в современной нанотехнологии.

Блестящей демонстрацией возможностей резонансной магнитной рефлектометрии были работы по исследованию профилей наведённых магнитных моментов [65-68]. Например, в [65] исследовались многослойные структуры [Ce/Fe] и [La/Fe]. Была измерена асимметрия $L_{2,3}$ спектров отражения для Ce и La соответственно в брэгговских максимумах до 9-го порядка включительно. Было найдено, что в структуре [La/Fe] на атомах La возникает наведённый магнитный момент, который в центральной области слоя практически равен нулю и заметно увеличивается на границе вблизи атомов Fe. А в структуре [Ce/Fe] наведённые магнитные моменты на атомах Ce осцилируют по глубине периода (рис. 1.3.3).

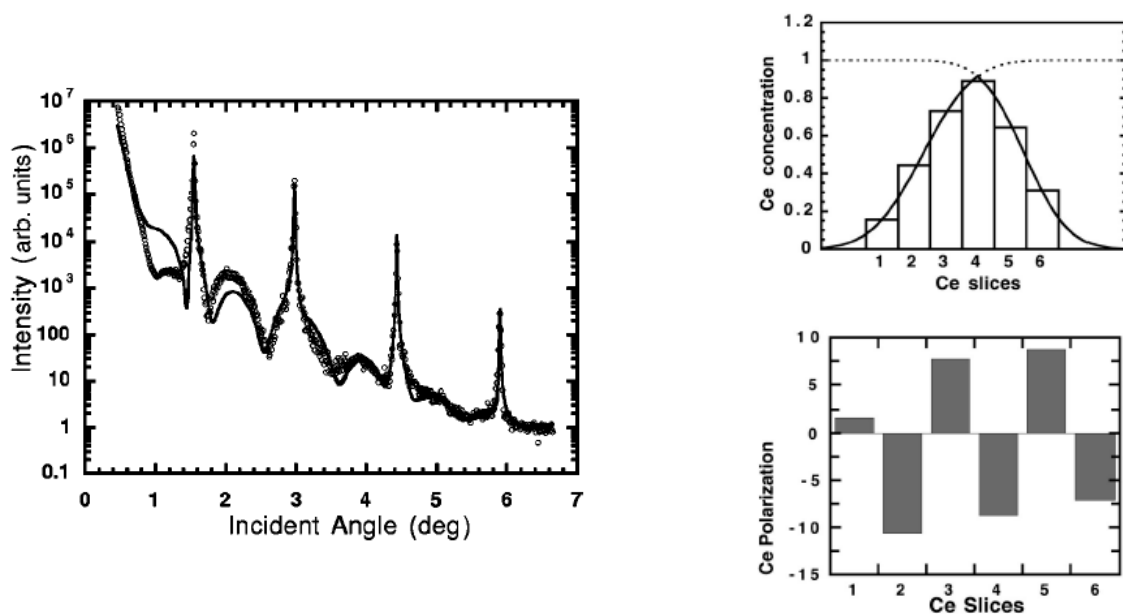


Рис. 1.3.3. Кривая отражения с брэгговскими максимумами для структуры $[Ce/Fe]_n$ вблизи L_2 края Ce (слева), теоретически рассчитанные профили изменения по глубине периода плотности резонансных атомов (справа сверху) и величины магнитного момента Ce (справа снизу)

В работе [69] восстановлен профиль намагниченности для слоев CoO в многослойной антиферромагнитной/ферромагнитной структуре $[\text{NiO}(3\text{ML})/\text{CoO}(3\text{ML})]_3/\text{Pt-Co}/\text{Pt}(111)$ методом рентгеновской рефлектометрии с использованием синхротронного излучения круговой поляризации. Измерения угловых зависимостей проводились для двух энергий фотонов в области края поглощения Co при температуре 340°K, когда имеет место перпендикулярная анизотропия намагниченности слоя Pt-Co (выше температуры блокировки T_B). На Рис.1.3.4 представлены экспериментальные и теоретические угловые зависимости полного внешнего отражения, а также асимметрии отражения по знаку круговой поляризации для разных моделей магнитного упорядочения. Для модельных расчетов кривых отражения и их асимметрии самый глубокий слой оксида кобальта, толщина которого определена при подгонке рефлектометрических кривых как 1.2 ± 0.2 нм, разделялся на три подслоя с варьируемыми толщинами и различными магнитными добавками к амплитудам рассеяния. Было показано, что модель (обозначенная на рисунке $R_{pp}0$), в которой намагниченность первого подслоя толщиной ~ 0.3 нм, прилегающего к буферному слою Co-Pt, параллельна его намагниченности, а намагниченность следующего подслоя толщиной ~ 0.7 нм антипараллельна намагниченности слоя Co-Pt, наиболее соответствует эксперименту. Последний подслоем толщиной ~ 0.2 нм в среднем оказался немагнитным.

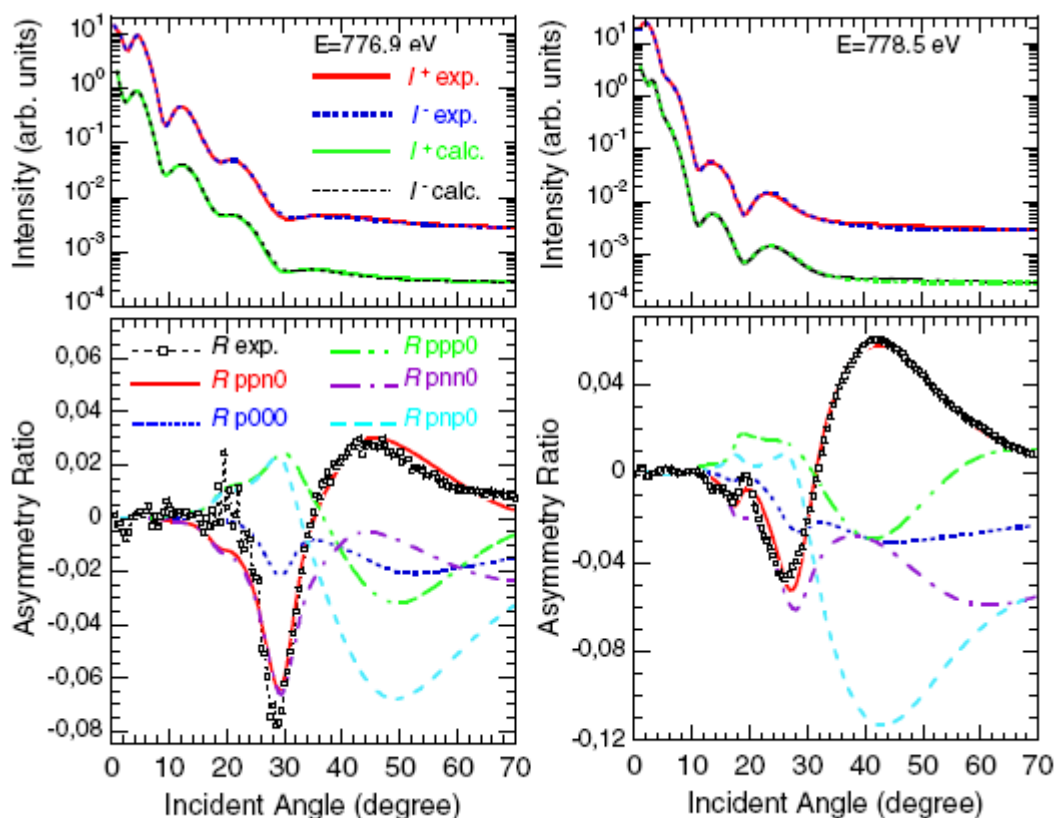


Рис. 1.3.4. Вверху: экспериментальные и рассчитанные кривые отражения для излучения левой Γ^- и правой Γ^+ круговой поляризации, полученные при энергиях излучения 776.9 эВ и 778.5 эВ.

Внизу: экспериментально полученная асимметрия отражения для излучения правой Γ^+ и левой Γ^- круговой поляризации и теоретические зависимости для разных моделей.

Другим примером магнитных исследований методом XRMR является работа [70]. В работе исследовалась сверхрешётка $\text{LaAlO}_3(001)/[\text{CaMnO}_3(10 \text{ uc}(\text{unit cell}))/\text{CaRuO}_3(N \text{ uc})]_6$, где N меняется от 4 до 10 последовательно. Удалось установить профиль распределения намагниченности по глубине в слое CaMnO_3 . Модель распределения намагниченности одинакова для всех слоёв CaMnO_3 и включает в себя немагнитный основной слой и магнитный тонкий интерфейс, толщина которого составляет 3.5 uc (1.38 нм). Как видно из рисунка (1.3.5b и 1.3.5c), именно данная модель воспроизводит

характерную форму и амплитуду асимметрии по знаку круговой поляризации для падающего излучения вблизи $L_{2,3}$ края поглощения Mn.

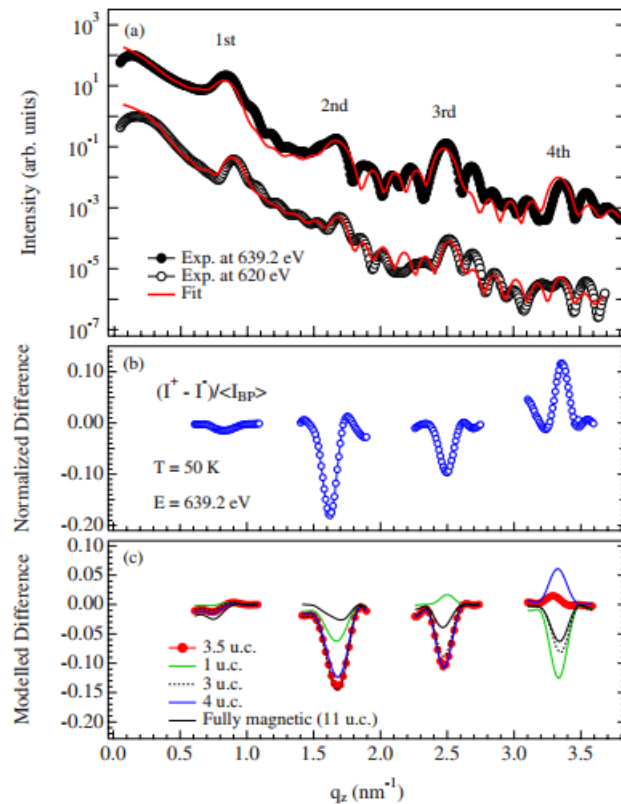


Рис 1.3.5. (a) Кривая рентгеновского отражения в функции угла скольжения ($q_z = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$), измеренная при температурах 50 K для энергии падающего излучения ($E_{ph}=639.2$ эВ) в L_3 крае поглощения Mn (верхняя кривая) и кривая, измеренная при комнатных температурах для энергии падающего излучения ($E_{ph}=620$ эВ) ниже L_3 края поглощения Mn (нижняя кривая). Тонкими линиями представлены результаты подгонки. (b) Кривые асимметрии по знаку круговой поляризации, измеренные вблизи брэгговских пиков (c) Теоретически рассчитанные кривые асимметрии отражения для разных толщин магнитного интерфейса в слоях CaMnO_3 .

В последнее время активные исследования ведутся по изучению систем со сдвигом обменного взаимодействия (exchange bias) в структурах

ферромагнетик-антиферромагнетик. Анализ асимметрии рефлектометрических кривых позволяет селективно по глубине исследовать свойства интерфейса ферромагнетик-антиферромагнетик [71-72]. В работе [73] исследовалась плёнка MnPd/Fe, в которой слой MnPd проявлял антиферромагнитные свойства при комнатной температуре (температура Нееля для подобных структур $T_N \approx 500$ К), а слой Fe - ферромагнитные свойства. Петли гистерезиса, измеренные по отраженному сигналу для энергий вблизи L_3 – края поглощения Fe и Mn, показали величину обменного смещения $H_E = -4.5$ мТ и величину коэрцитивной силы $H_C = -12.1$ мТ (рис. 1.3.6).

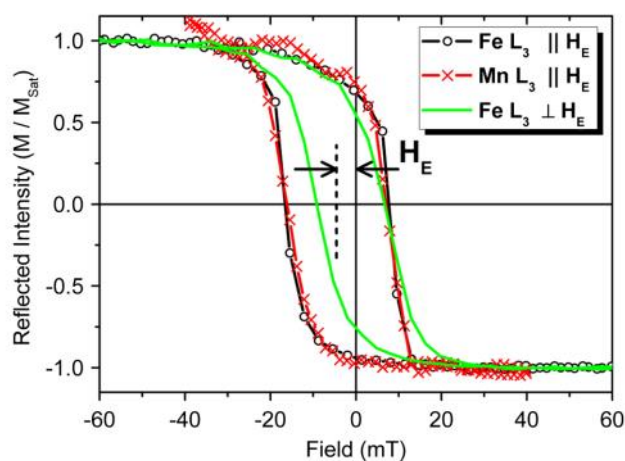


Рис 1.3.6. Петля гистерезиса, измеренная по асимметрии отражения для энергий в L_3 – краях поглощения Fe ($E_{ph} = 707.2$ эВ, $\theta = 11^\circ$) и Mn ($E_{ph} = 639.5$ эВ, $\theta = 9.5^\circ$) для параллельного и перпендикулярного направления намагниченности относительно пучка излучения.

Для исследования эффекта пиннинга для слоя MnPd, находящегося в контакте с ферромагнитным слоем Fe, были измерены кривые асимметрии отражения по направлению внешнего магнитного поля и по знаку круговой поляризации

$$\hat{A} = \frac{I_N^+ - I_S^-}{I_N^+ + I_S^-}$$

для энергий вблизи L_3 – края поглощения Mn

(рис. 1.3.7). Было установлено, что следящий за внешним полем спиновый

магнитный момент Mn присутствует в слое MnPd только на малой глубине 4 Å вблизи ферромагнитного слоя Fe; а закрепленная (запиннигованная) орбитальная составляющая магнитного момента Mn распространяется на большую глубину 13 Å.

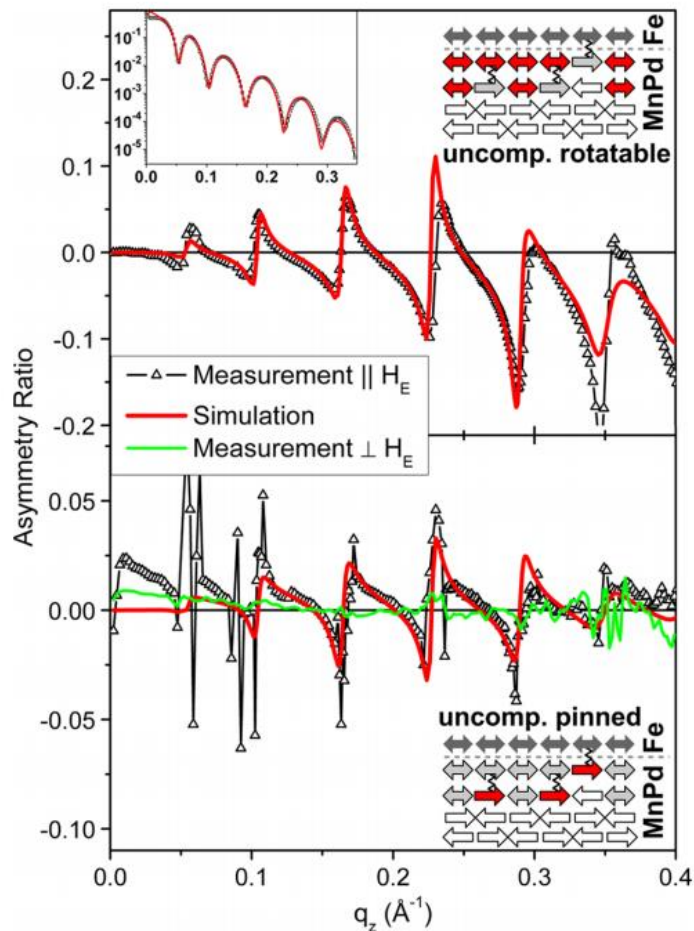


Рис. 1.3.7. Верхний график: кривая асимметрии отражения по направлению магнитного поля в функции угла скольжения для энергии вблизи L_3 – края поглощения Mn. Нижний график: кривая асимметрии отражения по направлению магнитного поля и по знаку круговой поляризации от q_z для энергии вблизи L_3 – края поглощения Mn. Для обоих графиков чёрным с символом Δ представлены экспериментальные точки, красным сплошным - аппроксимация. В правом верхнем и нижнем углу рисунка представлены модели распределения магнитных моментов в исследуемом образце.

Методом XRMР также изучаются системы сверхпроводник/ферромагнетик [74]. Эти системы интересны в плане исследования взаимодействия сверхпроводящих куперовских пар и ферромагнитно поляризованных зонных структур ферромагнитных слоёв.

§ 4. Метод стоячих рентгеновских волн в условиях зеркального отражения

В 70-80е годы прошлого столетия возникла и сформировалась новая область исследований в рентгеновской оптике (в нейтронной оптике эта идеология развивалась раньше), базирующаяся на существенном изменении характера взаимодействия излучения со средой в условиях динамической дифракции на кристаллах или при полном внешнем отражении от поверхности. Амплитуда волны в среде, являясь когерентной суперпозицией падающей и отраженной волн, отличается от амплитуды падающей волны, а ее вариации с глубиной существенно зависят от небольших изменений угла в окрестности угла Брэгга или угла полного внешнего отражения. Вторичные процессы, возбуждаемые такой стоячей волной, становятся пространственно селективными. Метод стоячих рентгеновских волн, начав свое становление в 70-80е годы прошлого столетия (см., например, обзор [75] и монографию [76]), продолжает интенсивно развиваться в настоящее время (см., например, [77-78]).

В 1972 в работе *Henke* была впервые продемонстрирована возможность извлекать из кривых выхода вторичного излучения, измеренных вблизи критического угла зеркального отражения, информацию о глубине, с которой это излучение вышло [79]. В области полного внешнего отражения глубина выхода фотоэлектронов оказывается сопоставимой с глубиной проникновения падающего рентгеновского излучения, что позволяет экспериментально определить функцию выхода фотоэлектронов (см., например [80]). Измерения выхода фотоэлектронов с энергетическим разрешением при отражении 14.4 кэВ излучения от поверхности образца железа были проведены А. Чумаковым [81]. Было показано, что поскольку

электроны при распространении в среде теряют энергию, вид угловой зависимости выхода фотоэлектронов вблизи критического угла сильно изменяется в зависимости от их результирующей энергии.

В 80х годах появились детекторы, способные регистрировать флуоресцентное излучение с хорошим разрешением по энергии вылетающих фотонов, что сделало метод стоячих волн элементарно-селективным. В геометрии скользящего падения метод позволяет определять распределение по глубине различных элементов, исследовать толщины интерфейсов, процессы диффузии различных атомов в многослойной структуре и т.д.

Например, в работе [82] исследовалась гетероструктура из четырёх слоёв Ge, разделённых слоями кремния, выращенная на буферном слое Si(100). Толщина слоёв Si была 10 нм, толщина слоёв Ge менялась и имела значения 2, 3, 5, 7, 10 и 12 монослоёв (толщина монослоя Ge 0.14 nm). Из анализа угловой зависимости выхода флуоресценции атомов Ge в условиях ПВО удалось восстановить профиль распределения атомов Ge по глубине (рис 1.4.1). Полученные результаты позволили подтвердить предположение о наличии Ge – содержащего приповерхностного слоя во всех образцах. Так же удалось выяснить, что образцы содержащие слои Ge толщиной от 2 до 10 монослоёв имеют симметричное распределение атомов Si в верхних и нижних слоях. В образце, содержащем слои Ge толщиной 12 монослоёв был обнаружен толстый переходный между подложкой и плёнкой.

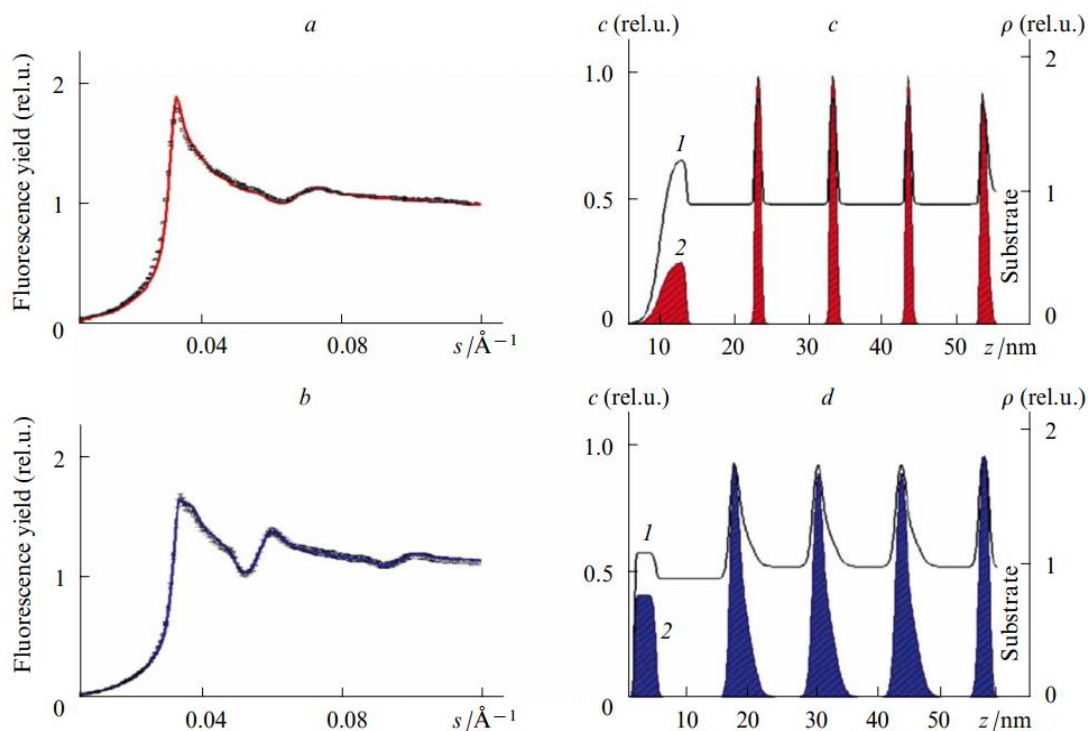


Рис 1.4.1 Угловые зависимости выхода флуоресценции из атомов Ge в гетероструктуре Si/Ge, в которых толщина слоя Ge 5 (a) и 12 монослоёв (b) и соответствующие им профили распределения по глубине электронной плотности (1) и атомов Ge (2) (c,d).

В работе [83] метод стоячих рентгеновских волн был использован для исследования миграции примесных атомов Fe, вызванных действием ионного пучка, из слоя C в слой Fe в периодической плёнке Pt(Fe)/C(Fe). Было показано как, методом стоячих рентгеновских волн можно определять направления подобных миграций. На рис 1.4.2a схематически изображено формирования стоячих рентгеновских волн для первого порядка брэгговского дифракции из периодических мультислоёв. В области переднего фронта брэгговского пика пучности стоячих рентгеновских волн находятся в слоях C. С увеличением скользящего угла падающего излучения пучности стоячих волн движутся вглубь структуры. Положим, что в центре слоя C есть один атомный слой Fe (рис 1.4.2b). Интенсивность флуоресцентного выхода будет иметь максимум на переднем фронте

брэгговского пика и минимум на заднем фронте. Если атом Fe будет диффундировать к интерфейсам с Pt, то максимум интенсивности флуоресценции будет смещаться по углу. Измеряя кривые выхода Fe-K α флуоресцентного излучения, можно определить направления миграции примесных атомов Fe.

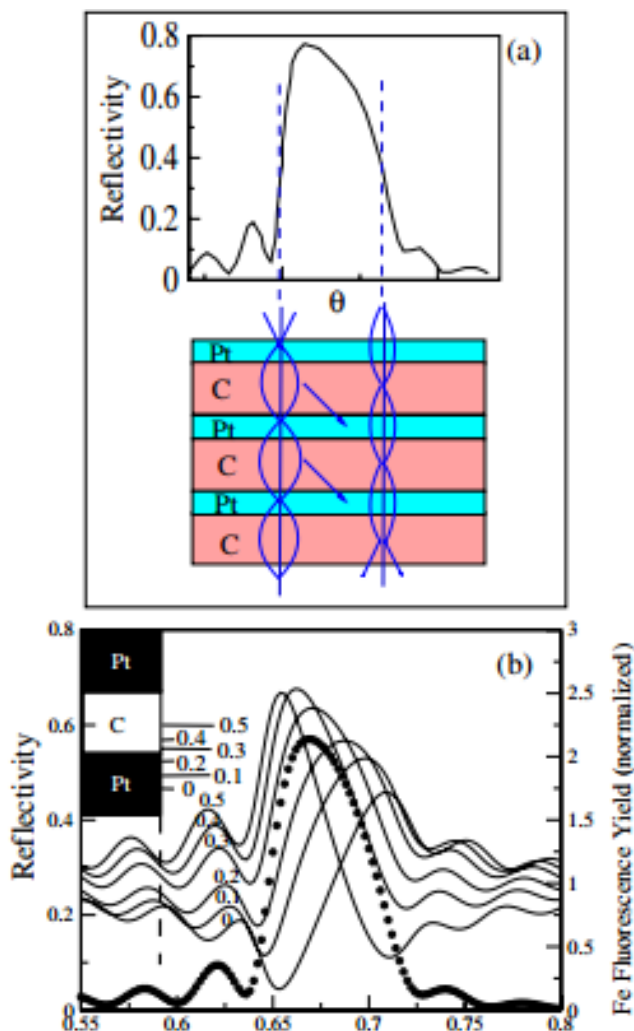


Рис 1.4.2. а) Иллюстрация формирования пучностей стоячих рентгеновских волн в периодическом образце в сопоставлении с пиком брэгговской дифракции первого порядка. б) Вариации кривых выхода Fe-K α флуоресцентного излучения, когда примесные атомы Fe мигрируют внутрь из положения «0.5» в слое C в положение «0» в слое Pt.

В работе [84] были проведены исследования структуры интерфейсов для трехслойных пленок Tb/Fe/Tb и Cr/Fe/Tb, нанесенных на многослойную

периодическую структуру $[W/Si]_n$, выполняющую функцию генератора стоячих волн, причем между трехслойными пленками и периодической структурой $[W/Si]_n$ помещался клиновидный слой Si (см. рис. 1.4.3(a)). Оказалось, что верхний и нижний интерфейс ультратонкого (несколько нанометров) слоя Fe можно селективно «высвечивать» стоячей волной, выбирая оптимальную толщину прослойки Si при смещении образца. По угловой зависимости выхода флуоресценции Fe были определены шероховатости двух интерфейсов, которые оказались различными: 1.2 нм для Fe-on-Tb и 0.7 нм для Tb(Cr)-on-Fe .

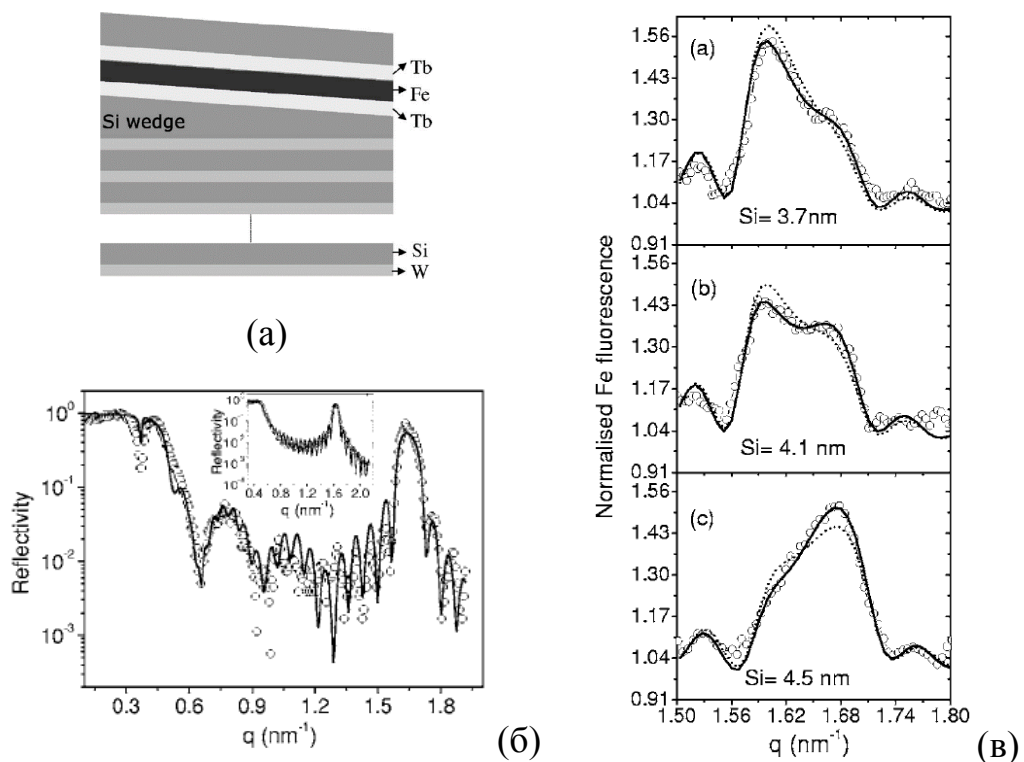


Рис. 1.4.3 (а) Схематичное изображение многослойной пленки Tb/Fe/Tb, нанесенной на генератор стоячих волн $[W/Si]_n$ и клиновидный слой Si; (б) Кривая зеркального отражения от трехслойной системы Tb/Fe/Tb. Точки соответствуют эксперименту, сплошная линия – результат фита. На вставке представлена кривая зеркального отражения от генератора стоячих волн $[W/Si]_n$; (в) Выход флуоресценции атомов Fe для трех различных толщин кремниевой прослойки. Сплошной линией обозначены результаты совместного фита представленных экспериментальных данных. Пунктирная кривая получена в предположении, что шероховатости обоих интерфейсов равны и составляют 0.95 нм.

Наибольшее усиление поля в среде возникает при формировании в отдельной пленке многослойной структуры волноводного режима за счет когерентного усиления поля, отраженного от их границ.

В работе [85] исследовались волноводные многослойные структуры типа неорганика/органика/неорганика такие, как: Si/DMPC(в гелиевой и жидкой фазе)/Ti; Si/Cr(71.5 нм)/PMMA(64.7 нм)/Cr(5 нм); GaAs/(DNA/PEI)(3 нм)/NiCr(7.1 нм). Резонансные волноводные моды TE₀, TE₁, TE₂, TE₃, TE₄ проявились в виде узких провалов на угловых зависимостях отражения (рис. 1.4.4) и острых пиков на угловых зависимостях выхода флуоресцентного излучения (Рис. 1.4.4) и дифракции в скользящей геометрии (Рис. 1.4.5а). Теоретическая аппроксимация была проведена с помощью программы IMD [86]. Наиболее хорошо волноводные свойства проявляются в случае Cr/PMMA/Cr структуры. Было показано, что усиление поля в волноводных структурах может существенно улучшить дифракционный сигнал в скользящей геометрии от ультратонких пленок и интенсивность выхода флуоресцентного-излучения.

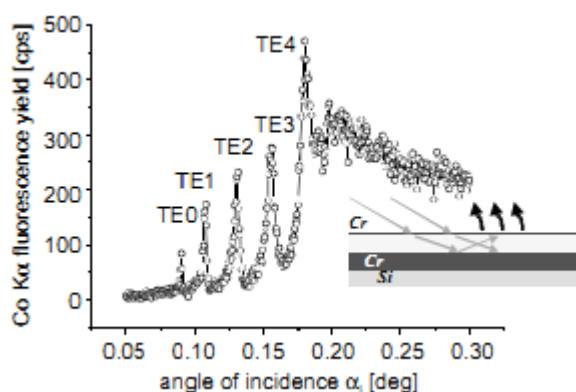


Рис. 1.4.4. Угловая зависимость выхода флуоресцентного-излучения для образца Cr/PMMA/Cr.

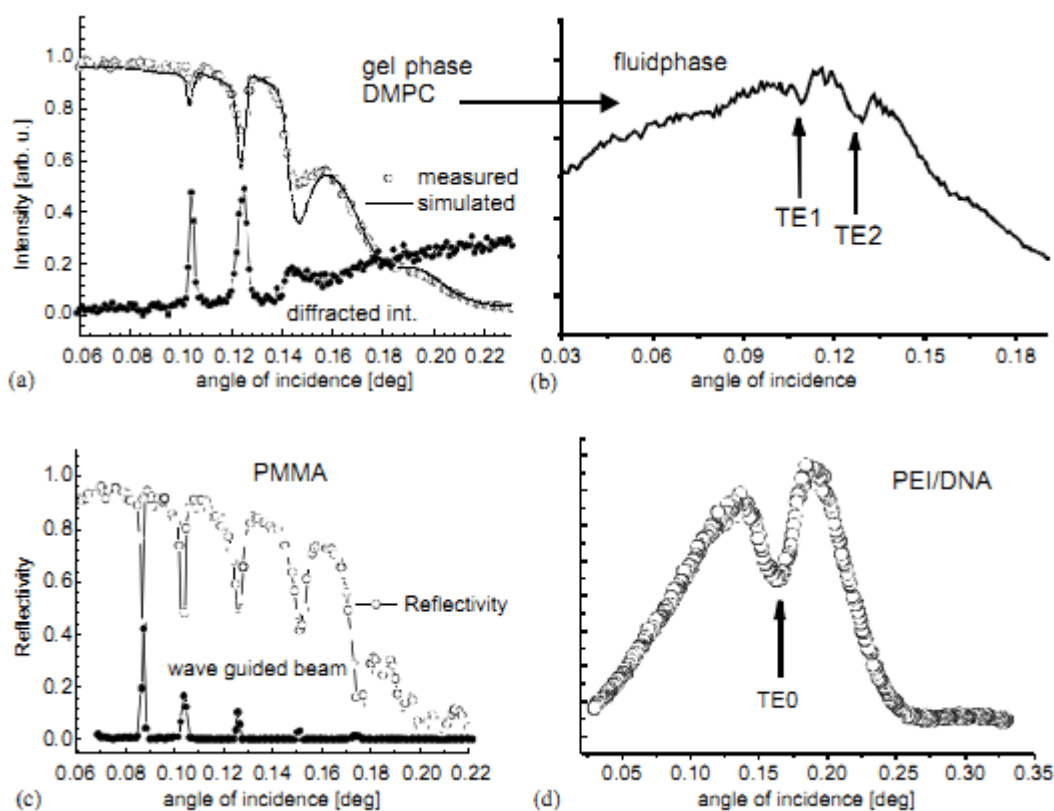


Рис. 1.4.5. Угловые зависимости отражения для четырех различных волноводных структур в области полного внешнего отражения: (a) и (b) Si/DMPC/Ti в гелиевой и жидкой фазе соответственно, (c) Cr/PMMA/Cr, (d) GaAs/(DNA/PEI)/NiCr. На рис.2 а представлена также экспериментальная зависимость дифрагированного отражения от угла скольжения. На рис.2 с представлена также интенсивность пучка в волноводе (умноженная на коэффициент 14) для структуры Cr/PMMA/Cr. Сплошная линия на рис.2а представляет теоретическую подгоночную кривую отражения, полученную с пакета IMD [86].

Теория, описывающая резонансное возбуждение волноводных мод в проводящем канале тонкоплёночного рентгеновского волновода с размытыми межслойными границами, была развита в работе [87]. Поведение коэффициента зеркального отражения от идеального тонкоплёночного РВ Si/Be/Si (с толщинами слоёв d_1, d_2, d_3) было описано на основании выражений [88]:

$$R_0=(p_{01}+F_1)/(1+p_{01}F_1), \quad (I.4.1)$$

Где

$$F_1=f_1(p_{12}+p_{23}f_2)/(1+p_{12}p_{23}f_2). \quad (I.4.2)$$

Здесь R_0 -амплитудный коэффициент отражения, $p_{mn}=(q_m-q_n)/(q_m+q_n)$ – френелевские коэффициенты отражения от резкой границы раздела двух сред с поляризуемостями $\chi^{(m)}$ и $\chi^{(n)}$; $q_m=k_0(\Theta^2+\chi^{(m)})$; $f_1=\exp(2iq_1d_1)$, $f_2=\exp(2iq_2d_2)$.

Получено выражение для определения углов скольжения Θ_i , при которых происходит резонансное возбуждение волноводных мод:

$$\varphi_{12}+\varphi_{23}+2\text{Re}(q_2)d_2=\pi(2i+1), \quad (I.4.3)$$

где $i=0,1,\dots$; φ_{12} и φ_{23} – фазы коэффициентов отражения p_{12} и p_{23} соответственно.

Согласно (I.4.1-1.4.3) углы Θ_i увеличиваются с уменьшением d_2 и с увеличением $\text{Re}(-\chi^{(m)})$. Глубина же провалов, соответствующих волновым модам, определяется $\text{Im}(\chi^{(m)})$. Было показано, что с увеличением размытия межслойных границ волноводные моды смещаются в сторону больших углов, а угловая ширина резонансных провалов увеличивается.

§ 5. Методы восстановления компонент тензора восприимчивости.

Магнитооптические константы вблизи краев поглощения рентгеновского излучения и напрямую связанные с ними дисперсионные поправки к атомному фактору рассеяния важно знать для проведения элементарно- 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 (см., например, [89-94]).

Спектры поглощения вблизи краев поглощения измеряются, как правило, в относительных величинах. Для получения абсолютной величины мнимой части рентгеновской восприимчивости $\text{Im}(\chi(E_{\text{ph}}))$ эти спектры вдали от края поглощения («на хвостах») нормируют на табличные значения из [95] (см. Главу IV). Значения реальной части восприимчивости $\text{Re}(\chi(E_{\text{ph}}))$ можно получить с помощью Крамерс-Крониг преобразований мнимой части восприимчивости, как это сделано, например, в работах [96-97]. Для определения абсолютной величины магнитной добавки к восприимчивости $\text{Im}(\Delta\chi_{\text{magn}}(E_{\text{ph}}))$ по измеренным спектрам магнитного кругового или линейного дихроизма (XMCD) используют нормировочные множители, который были получены при определении $\text{Im}(\chi(E_{\text{ph}}))$, затем также применяют преобразование Крамерс-Кронига для получения $\text{Re}(\Delta\chi_{\text{magn}}(E_{\text{ph}}))$ [98]. Проблемой данного подхода является то, что для Крамерс-Крониг преобразования необходимо знать $\text{Im}(\chi(E_{\text{ph}}))$ в широком диапазоне энергий, сужение диапазона в соответствии с экспериментально доступными данными приводит к существенным погрешностям в определении абсолютной величины $\text{Re}(\chi(E_{\text{ph}}))$. В работе [99] такой подход применялся для получения поправок на аномальную дисперсию f' и f'' для К – края поглощения Ni, Cu, Ti (см. рис. 1.5.1).

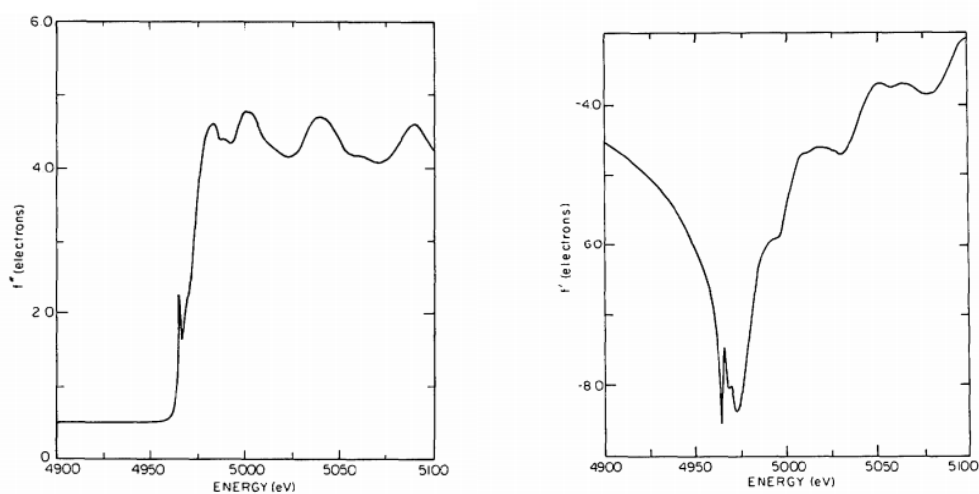


Рис 1.5.1. Поправки на аномальную дисперсию f' и f'' для К – края поглощения Ti.

Важным методом для экспериментального определения $\text{Re}\chi$ является рентгеновская интерферометрия разработанная Бонзе и Хартом в 1965 [100]. Принцип работы этого метода показан на рис 1.5.2, а также подробно описан в [100-101].

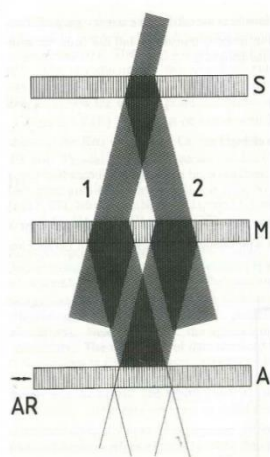


Рис 1.5.2. Принцип работы рентгеновского интерферометра. Монохроматические рентгеновские лучи разделяются с помощью светоразделителя S. В световой пучок 1 помещается образец при прохождении через который свет испытывает фазовый сдвиг и уменьшение в контрасте. Зеркала M отражают световые пучки 1 и 2 так, чтобы они накладывались друг на друга в кристалле анализаторе A.

С помощью интерферометрии удалось с высокой точностью определить $\text{Re}(\chi(E_{\text{ph}}))$ для K и L краёв поглощения многих элементов. Например, в работе [102] удалось определить $\text{Re}\chi$ для K-края Fe, Co, Ni, Zn, Se, а также L-края поглощения W и Au. Современные интерферометры позволяют определять оптические константы в диапазоне от 2 КэВ до 200 КэВ, хотя из-за сильного поглощения определять оптические константы для энергий ниже 5 КэВ значительно сложнее [103].

Другим важным методом для определения $\text{Re}(\chi_0)$, известным уже многие годы, является метод полного внешнего рентгеновского отражения с поверхности. Такая возможность была реализована уже в 1920^x годах [104]. В

случае идеального непоглощающего зеркала реальная часть рентгеновской восприимчивости определяется непосредственно из критического угла отражения рентгеновского излучения θ_c :

$$-\operatorname{Re} \chi_0 \approx \theta_c^2, \quad (\text{I.5.1})$$

Однако, в действительности рентгеновских поглощением и шероховатостью поверхности зеркала пренебрегать нельзя. Лишь в 90х годах были реализованы экспериментальные возможности и достигнута требуемое качество поверхности образца, чтобы определять оптические константы методом рефлектометрии [105]. Первое систематизированное определение методом рефлектометрии оптических констант для жёсткого рентгеновского диапазона было осуществлено в работе [106-107]. Источником систематических ошибок в данном методе служит сложность в точном определении критического угла отражения θ_c .

Для мягкого рентгеновского излучения преломление и поглощение, включая магнитные поправки, (то есть δ и β в показателе преломления $n = 1 + \delta + i\beta$) могут быть определены фитированием угловых кривых рентгеновского отражения [108], а так же из сдвига брэгговских максимумов на кривых отражения от периодических мультислоев [106,109-114]. В работе [115] по сдвигу брэгговских максимумов были определены не только диагональные компоненты тензора восприимчивости, но и недиагональные магнитные добавки. Исследовалась эпитаксиальная сверхрешётка $[\text{Fe/V}]_n$ на подложке MgO (001). Измерялось отражение вблизи $L_{2,3}$ края поглощения Fe (700 – 730 эВ) для падающего излучения правой и левой круговой поляризации. К образцу было приложено внешнее магнитное поле. Реальная и мнимая части показателя преломления определялись по сдвигу положения брэгговского пика (рис. 1.5.3) с помощью выражения [116]:

$$\delta = \left[\left(\sin \theta - \frac{\lambda}{2d} \right) \sin \theta - \delta_V \right] / D + \delta_V, \quad D = \gamma - \frac{(\beta - \beta_V) \sin^2(\pi\gamma)}{\pi^2 [\gamma\beta + (1 - \gamma)\beta_V]} \quad (\text{I.5.2})$$

где δ и β реальная и мнимая часть показателя преломления Fe. На рис. 1.5.3b приведено сравнение магнитной добавки к показателю преломления $(\delta+) - (\delta-)$, полученной из эксперимента по положению брэгговского пика, с результатами работы [98], в которой $\beta+$ и $\beta-$ были получены Крамерс-Кронинг преобразованием.

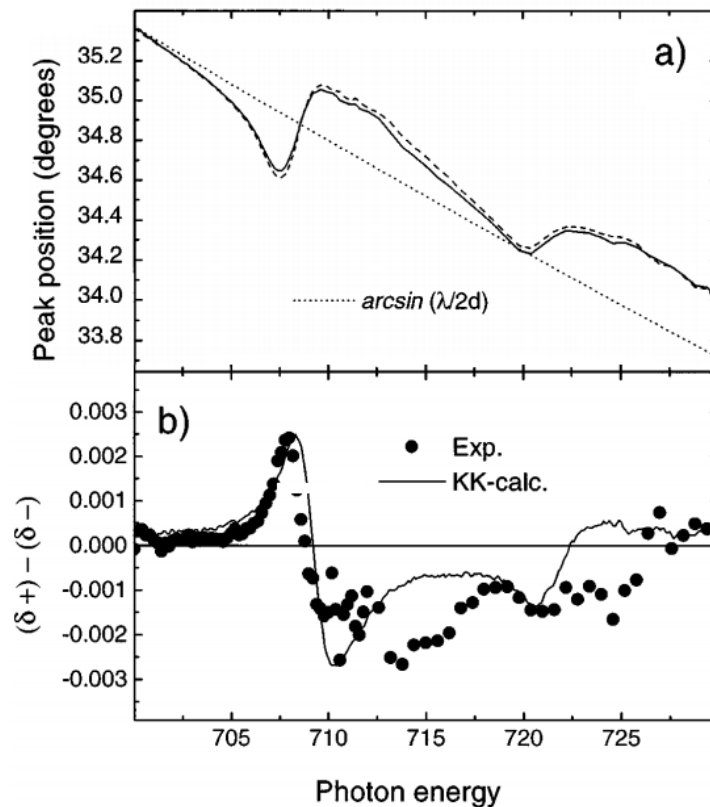


Рис. 1.5.3. (a) Угловое положение брэгговского пика отражения от сверхрешётки $[Fe/V]_n$ как функции энергии фотонов падающего излучения. Сплошная и пунктирная линии соответствуют двум противоположным направлениям намагниченности в плоскости образца вдоль направления $\langle 100 \rangle$. (b) сравнение $(\delta+) - (\delta-)$, полученных из (a) Крамерс-Кронинг преобразованием $(\beta+) - (\beta-)$.

Интересная интерферометрическая схема недавно была предложена в работе [117], использующая схему резко асимметричной дифракции со скользящим углом выхода излучения.

Задача определения магнитных добавок к восприимчивости $\Delta\chi_{magn}$ представляется наиболее важной. В работе [118] на станции ID12 ESRF (Европейский источник синхротронного излучения) измерены рефлектометрические кривые для правой и левой поляризации синхротронного излучения от пленки YFe_2 для набора энергий вблизи $L_{2,3}$ края поглощения Y в условиях, внешнее поле намагничивало образец в плоскости пленки и в плоскости рассеяния (практически вдоль пучка синхротронного излучения).

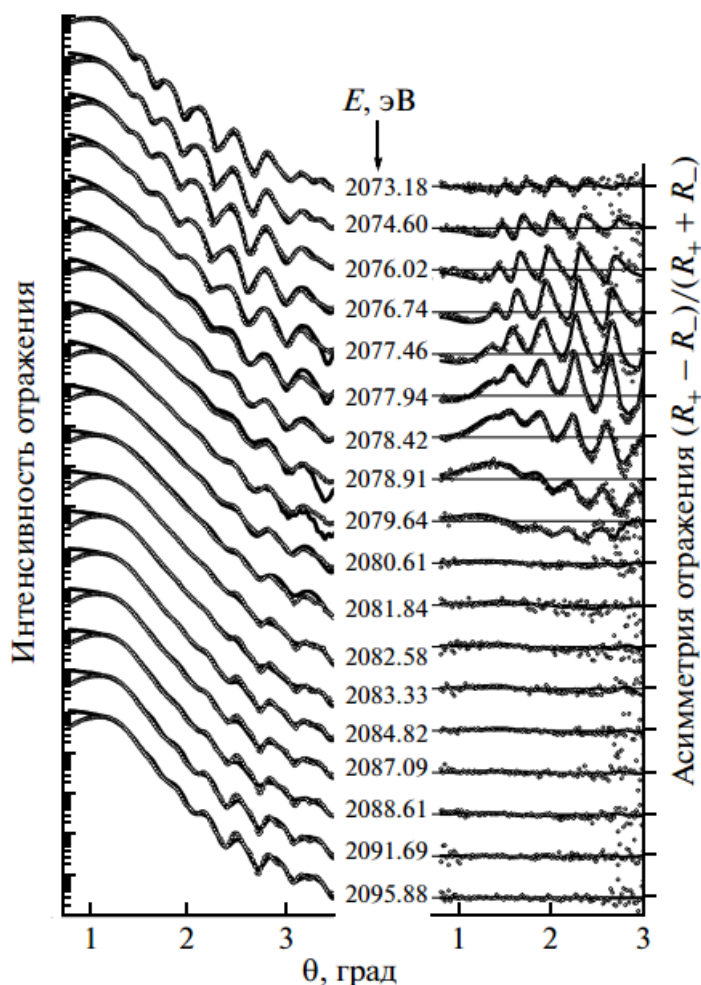


Рис. 1.5.4. Серия угловых кривых отражения (левая часть графиков) и их асимметрии по знаку круговой поляризации (правая часть графиков), измеренных для 19 энергий фотонов вблизи L_3 края поглощения Y . Значения энергий указаны в середине графика. Кривые приведены со сдвигом по оси ординат. Символы – эксперимент, сплошные линии – подгонка.

Различия кривых отражения для левой и правой поляризации излучения R^+ и R^- практически не видны на графиках рис. 1.5.4, но кривые их асимметрии по знаку круговой поляризации $(R^+ - R^-)/(R^+ + R^-)$ существенно видоизменяются при малых вариациях энергии вблизи $L_{2,3}$ края поглощения Y. Их анализ позволил восстановить оптические константы и магнитные добавки к восприимчивости, отвечающие за возникновение наведенного магнитного момента на атомах иттрия в соединении YFe_2 .

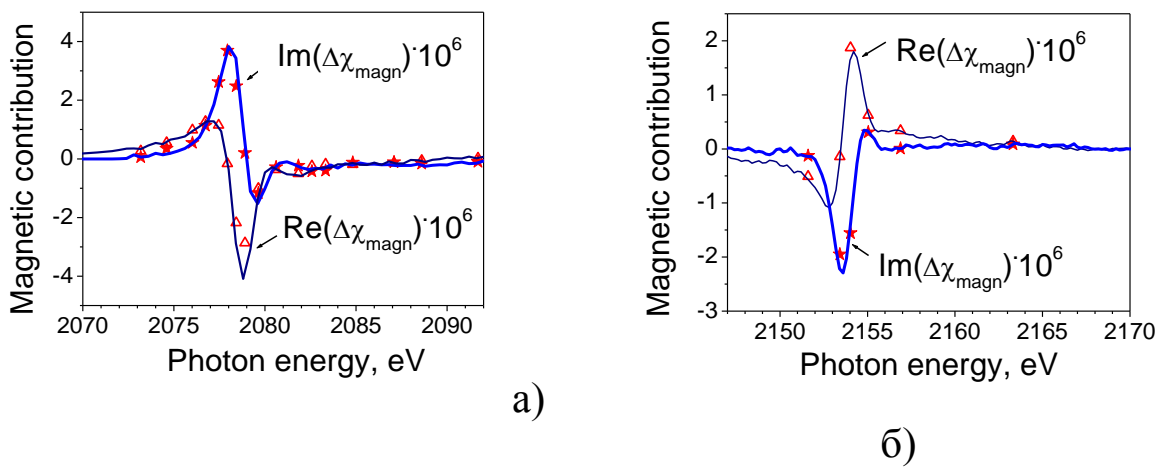


Рис. 1.5.5. Энергетические зависимости магнитной добавки к восприимчивости вблизи краев поглощения L_3 а) и L_2 б) в соединении YFe_2 , полученные при подгонке рефлектометрических данных: каждый символ представляет результат подгонки кривой отражения и кривой ее асимметрии по знаку круговой поляризации для соответствующей энергии. Сплошные линии – зависимости, полученные из измеренных спектров поглощения и дихроизма, после соответствующей нормировки “хвостов” на табличные значения и их преобразования Крамерса–Кронига (для реальных частей).

§ 6. Теория магнитной рентгеновской рефлектометрии

Наиболее простое рассмотрение магнитных эффектов в рефлектометрии использовалось в ранних работах [65,90,119] для получения профилей (по глубине слоя) спиновой поляризации 5d электронных оболочек церия и лантана в многослойных структурах $[\text{Ce/Fe}]_n$ и $[\text{La/Fe}]_n$. Задача решалась в кинематическом «скалярном» приближении с учетом малости углов скольжения и при намагниченности многослойной структуры в направлении пучка излучения. Ассиметрия отражения по знаку круговой поляризации описывалась выражением:

$$R = \frac{-2\tau_c \cos^3 \theta [F_r M_r - F_i M_i]}{\cos^3 \theta |M^2| - \left(1 - \frac{K\tau_c \sin 2\theta}{2} |F^2|\right)}, \quad (\text{I.6.1})$$

где

$$F(q, E) = F_r - iF_i, \quad (\text{I.6.2})$$

$$M(q, E) = M_r - iM_i \quad (\text{I.6.3})$$

структурный фактор и магнитная добавка соответственно, K соотношение амплитуд σ и π компонент вектора электрического поля, $\tau_c = 2K/(1 + K^2)$ степень круговой поляризации.

В общем случае поляризационные эффекты приводят к перемешиванию поляризации излучения при отражении и преломлении на границах слоев, поэтому для описания экспериментов по XRMR необходима общая теория рефлектометрии. Магнитное рассеяние, существенное вблизи краев поглощения магнитных атомов, вносит радикальное усложнение в теорию рефлектометрии, поскольку рентгеновская восприимчивость среды при наличии такого рассеяния становится в общем случае тензором. В оптике хорошо развита теория эллипсометрии, в которой выводятся 4x4-матрицы распространения для тангенциальных компонент поля, каждый элемент которой Δ_{ij} является функций элементов оптической 6x6-матрицы [120-121].

Универсальный алгоритм преобразования тангенциальных компонент электрического и магнитного поля излучения в тензорной формулировке предложен в работе [122]. Этот алгоритм основан на операторном методе Фёдорова [123-124], и в отличие от координатного метода [120-121] он позволяет получить решения в удобной для анализа компактной форме. Этот метод применен для случая рентгеновского отражения от магнитных мультислоев в работах М.А. Андреевой и А.Г. Смеховой [125-127]. Более подробно этот наиболее общий метод описывается в Главе II. Развитый в работе С.А. Степанова с соавторами [127] формализм собственных волн для решения этой задачи отличается большей громоздкостью и недостаточной общностью. В работе [125] изучалось, какими «магнитными» компонентами тензора рентгеновской восприимчивости определяется асимметрия спектров отражения для круговых или линейных поляризаций падающего излучения. Было показано также, что при отражении от периодических структур L_3 -спектр, измеренный в брэгговском максимуме первого порядка, слабо зависит от намагниченности в интерфейсах, и характеризует в основном намагниченность (и, соответственно, магнитный момент) средней части магнитных слоев. Брэгговский максимум второго порядка более чувствителен к магнитным свойствам в межслойных интерфейсах.

В работе [126] при анализе спектров и угловых зависимостей отражения для энергии фотонов вблизи $L_{2,3}$ - края поглощения Fe от структуры $[Fe/Co]_n$ была продемонстрирована возможность определения «магнитных» компонент тензора рентгеновской восприимчивости по спектральной зависимости положения брэгговского пика первого порядка.

Существенное усложнение теории рентгеновской рефлектометрии с учетом магнитных эффектов делает интерпретацию реальных экспериментальных данных чрезвычайно времязатратным процессом, что делает актуальным упрощение расчетов. Такие попытки были предприняты, например, в работах [129-132].

В работе [129] 4x4-матрицы распространения с некоторыми упрощениями приведены к виду «суперматриц», известных в теории рефлектрометрии поляризованных нейтронов [132], для упрощения интегральных выражений. В работе [94] показано, что переход к собственным волнам круговой поляризации максимально упрощает счет в геометрии меридионального эффекта Керра при малых углах скольжения.

В статье [131] была развита теория отражения рентгеновского излучения от многослойных структур по аналогии с теорией двухволновой динамической дифракции, когда вдали от критического угла полного внешнего отражения точными вычислениями эффектов преломления можно пренебречь. Тензор диэлектрической проницаемости для рассматриваемого случая полагался гармонической функцией с периодом, равным периоду структуры: $\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 \cos qz$ и $\varepsilon = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 \cos qz$, где q – волновое число структуры, ε – недиагональный элемент тензора диэлектрической проницаемости. В этой работе было получено выражение для диагональных и недиагональных элементов матрицы отражения для полярного, мериди и экваториального магнитооптического эффекта Керра в кинематическом приближении. Проведена оценка возможности измерения магнитооптических эффектов в многослойных структурах без использования синхротронного излучения.

Интересный подход был применен в работе [133] для интерпретации кривых отражения вблизи M_5 края поглощения Dy от пленки диспрозия с геликоидальным магнитным упорядочением, а именно, использовалась смесь динамического (для изотропной части рассеяния) и кинематического (для магнитной части рассеяния) приближения. Применимость такого упрощения для рассмотрения анизотропного рассеяния, когда поляризация излучения преобразуется при отражении и преломлении, анализируется нами в главе II.

Подытоживая литературный обзор, мы можем заключить следующее. В настоящее время технические возможности метода рентгеновской рефлектометрии чрезвычайно обширны. Это и возможности высокоинтенсивного синхротронного излучения, позволяющего проводить измерения с потерей интенсивности отраженного сигнала на 7-8 порядков, это использование монохроматоров, определяющих высокое разрешение по длине волны излучения (по энергии фотонов) на рефлектометрических кривых, это возможность работать с практически любой поляризацией излучения для исследования разнообразных эффектов дихроизма, двупреломления и других поляризационных эффектов в отражении. Отметим, что самым существенным достижением рентгеновской оптики в последние годы стало безусловно развитие различных спектроскопических методов, предоставляющих элементарно- и оболочечно селективную информацию об исследуемых структурах, в том числе о магнитных характеристиках объектов. Спектроскопия в сочетании с рефлектометрией или дифракцией дает не только элементарно, но и пространственно селективную информацию о магнитной структуре и химических связях. Все известные эффекты в рентгеновской оптике зеркального отражения до последнего времени анализировались применительно к угловым зависимостям рефлектометрических кривых или выхода фотоэлектронов или флуоресцентного излучения. Спектральный анализ этих зависимостей, особенно с учетом анизотропии рассеяния, при скользких углах падающего излучения, успешно реализуемый в последние годы вблизи краев поглощения, также содержит много проблемных моментов, требующих разработки и интерпретации, чему и посвящена данная диссертационная работа.

Сформулируем **цели и задачи**, решению которых посвящена данная диссертационная работа.

- Развитие теории рентгеновской рефлектометрии на случай отражения поляризованного рентгеновского излучения от многослойных структур с

учетом их анизотропии, возникающей вблизи краев поглощения, в кинематическом приближении.

- Анализ пределов применимости кинематической теории отражения в анизотропном случае при разных упрощениях.

- Анализ трансформаций резонансной «белой» линии в спектре полного выхода электронов вблизи края поглощения фосфора (TEY XANES – Total Electron Yield X-ray for Absorption Near Edge Spectroscopy), наблюдаемых при изменении угла падающего рентгеновского излучения.

- Объяснение аномальных «пиков» на угловых кривых выхода флуоресценции, наблюдаемых для плёнки YFe_2 , при возбуждении излучением с энергией фотонов вблизи края поглощения иттрия.

- Развитие теории резко асимметричной дифракции в кинематическом и динамическом приближениях и объяснение сдвигов брэгговского пика в функции энергии фотонов, варьирующейся вблизи краев поглощения, при скользящих углах падения рентгеновского излучения.

Глава II. КИНЕМАТИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ В ТЕОРИИ РЕФЛЕКТОМЕРИИ

Рентгеновская резонансная магнитная рефлектометрия предоставляет уникальную элементарно- и пространственно-селективную информацию о магнитном упорядочении в многослойных пленках. Магнитное рассеяние, существенное вблизи краев поглощения магнитных атомов, вносит радикальное усложнение в теорию рефлектометрии, поскольку рентгеновская восприимчивость среды при наличии такого рассеяния становится в общем случае тензором. Правильная интерпретация экспериментальных данных является очень важной при таких исследованиях. В обзорной части работы были представлены различные подходы к вычислению коэффициентов отражения для произвольных слоистых анизотропных пленок: - формализм собственных волн и формализм 4×4 -матриц распространения. Поскольку счет с комплексными матрицами достаточно времязатратный, процедура подгонки экспериментальных спектров становится чрезвычайно долгой и даже безрезультатной для очень сложных многослойных структур, предполагающих введение большого числа подгоночных параметров – компонент тензора восприимчивости вместо одной скалярной величины в каждом слое.

Попытки упрощения алгоритма расчета коэффициентов отражения присутствуют практически в каждой работе, посвященной обработке эксперимента. Но принимаемым приближениям не всегда можно доверять. Анализ применимости различных приближений посвящена, например, работа [130]. Магнитная анизотропия, изменяющаяся по глубине структуры, приводит к сложной поляризационной зависимости отражения, а анализируется, как правило, очень маленькая величина: асимметрия отражения по поляризации (см., например, [118]), - чрезвычайно чувствительная к погрешностям счета.

В данной главе будет развит формализм для расчета коэффициентов отражения от магнитоупорядоченных мультислоев в матричном кинематическом приближении, а также проведено сравнение результатов вычисления асимметрии отражения от различных магнитоупорядоченных многослойных структур по точной теории и в разных приближениях, используемых в некоторых экспериментальных работах, и в рамках развитого формализма.

§ 1. Скалярный случай

Как показано в работе [130], попытки так упростить 4x4 матрицу распространения, чтобы для вычисления интегральных матриц можно было использовать метод суперматриц [94], не всегда приводят к правильному результату, поскольку в этом подходе трудно заранее определить, какой элемент матрицы существенно влияет на результат. Для выведения правильной кинематической формулы в анизотропном случае, мы используем способ перехода от точных формул к кинематическому описанию, известный в изотропном случае [134-135]. Этот переход базируется на упрощении рекуррентных соотношений Паррата следующим образом.

В тех случаях, когда задачу можно решать для одной известной поляризации излучения, для описания отражения с учетом магнитного рассеяния рентгеновского излучения можно применять хорошо известный алгоритм Паррата [61]:

$$R_{j-1,j} = \frac{r_{j-1,j} + R_{j,j+1} e^{2i\Phi_j}}{1 + r_{j-1,j} R_{j,j+1} e^{2i\Phi_j}}, \quad (\text{II.1.1})$$

вводя специфичную для данной поляризации магнитную добавку $\Delta\chi_m$ к восприимчивости среды в каждом слое. В (II.1.1) $r_{j-1,j}$ – амплитуда

френелевского отражения и $R_{j-1,j}$ – коэффициент многократного отражения на границе между $j-1$ и j слоем, $\Phi_j = \kappa \eta_j d_j$ – фазовый сдвиг отражённой волны в слое j , толщина которого d_j , η_j – проекция волнового вектора (в единицах $\kappa = 2\pi/\lambda$) на нормаль к поверхности q ,

$$\eta_j = \sqrt{\sin^2 \theta + \chi_j}, \quad (\text{II.1.2})$$

θ – угол скольжения падающего излучения, $\chi_j = \chi_{0j} + \Delta\chi_{mj}$ – восприимчивость слоев.

Переход к кинематической теории в этом случае осуществляется достаточно просто [134-135]: во-первых, пренебрегают многократным отражением в каждом слое (то есть отбрасывают знаменатель в формуле Паррата) и, во-вторых, используют приближенное выражение для квадратного корня:

$$\eta_j = \sqrt{\sin^2 \theta + \chi_j} \approx \sin \theta + \frac{\chi_j}{2 \sin \theta}, \quad (\text{II.1.3})$$

определяющего нормальные компоненты волновых векторов в слое (θ – угол скольжения, χ_j – восприимчивость j -го слоя). Формула Френеля для однократного отражения при этом упрощается¹⁾:

$$r_{j-1,j} = \frac{\eta_{j-1} - \eta_j}{\eta_{j-1} + \eta_j} \approx \frac{(\chi_{j-1} - \chi_j)}{4 \sin^2 \theta}. \quad (\text{II.1.4})$$

В результате амплитудный коэффициент отражения от многослойной структуры R может быть представлен как сумма градиентов восприимчивости на границах раздела с соответствующим фазовым сдвигом:

$$R = \frac{1}{4 \sin^2 \theta} \sum_{j=1}^L (\chi_{j-1} - \chi_j) e^{i(Qz_{j-1} + \frac{\kappa}{\sin \theta} \sum_{k=1}^{j-1} \chi_k d_k)}. \quad (\text{II.1.5})$$

¹ При скользких углах падения различие формул Френеля для σ - и π - поляризаций пренебрегают.

В (II.1.5) $Q = 2\kappa \sin \theta = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$ - вектор рассеяния, $\kappa = \frac{\omega}{c}$, z_{j-1} - глубина границы раздела $j-1$ и j слоев, d_k - толщины слоев. Отметим что, как показывают непосредственные расчеты (см. далее), пренебрегать $\chi_k = \chi_{0k} + \Delta\chi_{mk}$ в показателе экспоненты, то есть поправками на преломление и поглощение в фазе складывающихся волн, нельзя, однако слабые магнитные добавки $\Delta\chi_{mk}$ в показателе экспоненты в некоторых случаях можно не учитывать. Это обстоятельство важно при рассмотрении анизотропного случая.

§ 2. Матричные рекуррентные соотношения

Для получения кинематического приближения для коэффициента отражения в случае произвольных анизотропных слоев будем также исходить из матричных рекуррентных соотношений, обобщающих известные соотношения Паррата с учетом преобразования поляризации излучения при отражении и распространении излучения.

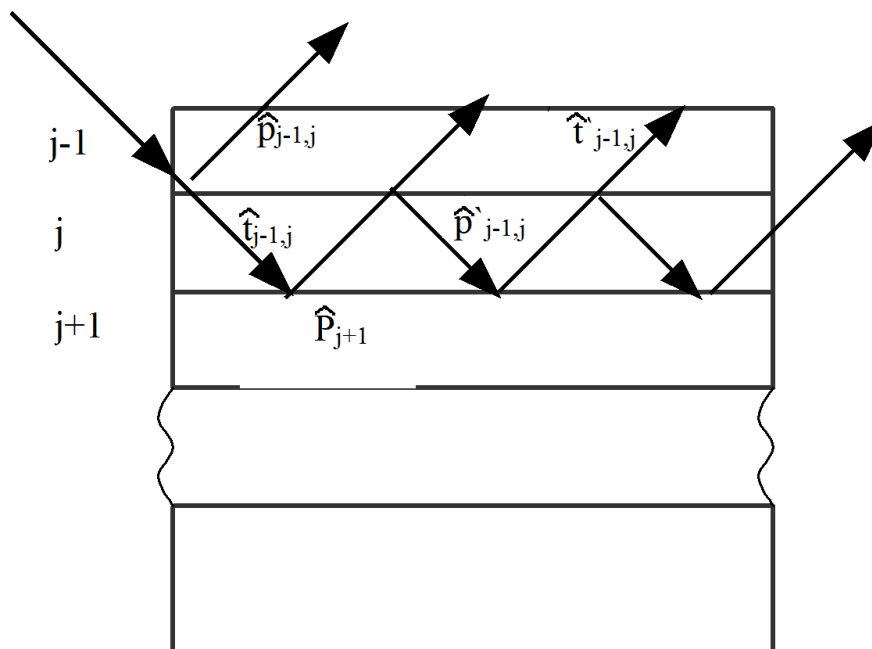


Рис. 2.2.1.

Если волна падает на границу (j - 1)-го и j-го слоев, то с учетом многократного переотражения волн в каждом нижележащем слое можно выписать бесконечную матричную прогрессию (см. рис. 2.2.1):

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_j &= \hat{p}_{j-1,j} + \hat{t}'_{j-1,j} e^{-ikd \hat{N}_j^-} \hat{P}_{j+1} e^{ikd \hat{N}_j^+} \hat{t}_{j-1,j} + \\
 &+ \hat{t}'_{j-1,j} e^{-ikd \hat{N}_j^-} \hat{P}_{j+1} e^{ikd \hat{N}_j^+} \hat{p}'_{j-1,j} e^{-ikd \hat{N}_j^-} \hat{P}_{j+1} e^{ikd \hat{N}_j^+} \hat{t}_{j-1,j} + \dots =, \\
 &= \hat{p}_{j-1,j} + \hat{t}'_{j-1,j} (\hat{p}'_{j-1,j})^{-1} [\hat{W}_j + \hat{W}_j^2 + \hat{W}_j^3 + \dots] \hat{t}_{j-1,j}
 \end{aligned}
 \tag{II.2.1}$$

где $\hat{p}_{j-1,j}$ и $\hat{t}_{j-1,j}$ – поляризационные матрицы однократного отражения и пропускания на границе между слоями (j - 1) и (j), $\hat{p}'_{j-1,j}$ и $\hat{t}'_{j-1,j}$ – те же матрицы отражения и пропускания в обратную сторону, \hat{P}_{j+1} – матричный коэффициент отражения от нижней границы j-го слоя (то есть от (j + 1)-го слоя) с учетом многократных переотражений в нижележащих слоях, значки «+» и «-» относятся к проходящим и отраженным волнам, тензоры \hat{N}_j^\pm описывают изменение амплитуд и поляризации проходящих и отраженных волн в каждом слое, а \hat{W}_j :

$$\hat{W}_j = \hat{p}'_{j-1,j} e^{-ikd \hat{N}_j^-} \hat{P}_{j+1} e^{ikd \hat{N}_j^+}.
 \tag{II.2.2}$$

Учитывая, что для матриц справедливо разложение ($\alpha < 1$)

$$(1 - \alpha)^{-1} = 1 + \alpha + \alpha^2 + \alpha^3 + \dots,
 \tag{II.2.3}$$

получаем матричные рекуррентные соотношения в виде:

$$\hat{P}_j = \hat{p}_{j-1,j} + \hat{t}'_{j-1,j} (\hat{p}'_{j-1,j})^{-1} \hat{W}_j (1 - \hat{W}_j)^{-1} \hat{t}'_{j-1,j}. \quad (\text{II.2.4})$$

Теперь необходимо получить явные выражения для $\hat{p}_{j-1,j}$, $\hat{t}_{j-1,j}$, $\hat{p}'_{j-1,j}$, $\hat{t}'_{j-1,j}$ и \hat{N}_j^{\pm} . Эти выражения, к счастью, были определены для тангенциальных компонент магнитного поля излучения в работах [122,136,137]. Поэтому общее выражение (II.2.4) мы будем вычислять для тангенциальных компонент магнитного поля, и все матрицы в (II.2.4) будут известными 2x2- матрицами.

Следует отметить что расчет коэффициента отражения по рекуррентной формуле (II.2.4) с матрицами 2x2 существенно ускоряет счет по сравнению с алгоритмом 4x4 матриц распространения. Однако этот алгоритм требует вычислений последовательно для каждой границы структуры, начиная с подложки, и для периодических многослойных структур поигрывает по времени счета матричному алгоритму (II.2.1), в котором периодичность учитывается как возведение в степень N (где N – число повторений) интегральной 4x4-матрицы распространения в одном периоде, что делается очень быстро.

Общие формулы для тензорных коэффициентов отражения и пропускания на каждой границе определяются в [122] через 2x2 - блоки 4x4-матрицы распространения, которая записывается для тангенциальных компонент электрического и магнитного поля излучения, непрерывных на границе раздела слоев (ось z является нормалью к поверхности):

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} H_x(z) \\ H_y(z) \\ -E_y(z) \\ E_x(z) \end{pmatrix} = i \frac{\omega}{c} \hat{M}(z) \begin{pmatrix} H_x(z) \\ H_y(z) \\ -E_y(z) \\ E_x(z) \end{pmatrix}, \quad \hat{M} = \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{B} \\ \hat{C} & \hat{D} \end{pmatrix}, \quad (\text{II.2.5})$$

Блоки \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} , \hat{D} являются планарными тензорами, для которых имеют место следующие тензорные соотношения [136]:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}} &= \frac{1}{\varepsilon_q} \mathbf{q}^\times \hat{\varepsilon} \mathbf{q} \circ \mathbf{a}, & \hat{\mathbf{B}} &= \frac{1}{\varepsilon_q} \hat{\mathbf{I}} \tilde{\varepsilon} \hat{\mathbf{I}} - \mathbf{b} \circ \mathbf{b}, \\ \hat{\mathbf{C}} &= \hat{\mathbf{I}} - \frac{1}{\varepsilon_q} \mathbf{a} \circ \mathbf{a}, & \hat{\mathbf{D}} &= -\frac{1}{\varepsilon_q} \mathbf{a} \circ \mathbf{q} \hat{\varepsilon} \mathbf{q}^\times.\end{aligned}\quad (\text{П.2.6})$$

где $\hat{\varepsilon}$ - тензор диэлектрической проницаемости слоя, символ « \circ » - обозначает внешнее произведение векторов, $\tilde{\varepsilon}$ - тензор, взаимный к транспонированному тензору $\bar{\varepsilon}$, \mathbf{q} - единичный вектор нормали к поверхности, вектор \mathbf{b} представляет тангенциальную компоненту волнового вектора падающей волны в единицах $\frac{\omega}{c}$ $|\mathbf{b}| = \cos\theta$, θ - угол скольжения падающего излучения, $\mathbf{a} = [\mathbf{b}\mathbf{q}]$, $\varepsilon_q = \mathbf{q} \hat{\varepsilon} \mathbf{q}$ - свертка тензора $\hat{\varepsilon}$ с векторами нормали \mathbf{q} с обеих сторон, \mathbf{q}^\times - тензор, дуальный вектору \mathbf{q} :

$$\mathbf{q}^\times = \begin{pmatrix} 0 & -q_z & q_y \\ q_z & 0 & -q_x \\ -q_y & q_x & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{I}} = -(\mathbf{q}^\times)^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{П.2.7})$$

В системе координат, представленной на рис. 2.2.2, векторы \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{q} запишутся как:

$$\mathbf{a} = (\cos\theta, 0, 0), \quad \mathbf{b} = (0, \cos\theta, 0), \quad \mathbf{q} = (0, 0, 1). \quad (\text{П.2.8})$$

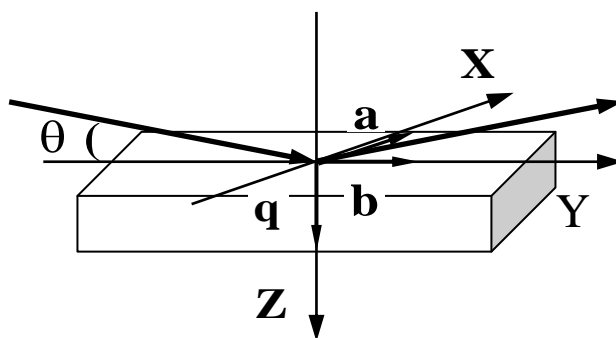


Рис. 2.2.2.

Вектор однократного отражения находится как [137]:

$$\hat{\mathbf{P}}_{j-1,j} = (\hat{\gamma}_j^+ - \hat{\gamma}_{j-1}^-)^{-1} (\hat{\gamma}_{j-1}^+ - \hat{\gamma}_j^+), \quad (\text{П.2.9})$$

где 2x2-матрицы $\hat{\gamma}^{\pm}$ представляют планарные тензоры поверхностного импеданса, которые дают связь между тангенциальными компонентами электрического и магнитного поля излучения
$$\begin{pmatrix} -E_y \\ E_x \end{pmatrix} = \hat{\gamma}^{\pm} \begin{pmatrix} H_x \\ H_y \end{pmatrix}.$$

Общее выражение для $\hat{\gamma}$ через 2x2 блоки матрицы распространения дано в [122]:

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}^{\pm} = & [(\eta_1^{\pm} + \eta_2^{\pm})\hat{B} - \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{D}]^{-1} \\ & \times [\hat{B}\hat{C} + (\hat{A} - \eta_1^{\pm}\hat{I})(\hat{A} - \eta_2^{\pm}\hat{I})] \end{aligned} \quad (\text{II.2.10})$$

где η_1^{\pm} и η_2^{\pm} собственные значения нормальных компонент волновых векторов (в единицах $\frac{\omega}{c}$). Выражение для тензоров \hat{N} имеет вид [122]:

$$\hat{N} = \hat{A} + \hat{B}\hat{\gamma}. \quad (\text{II.2.11})$$

Следуя процедуре перехода от динамического подхода к кинематическому пределу, то есть, пренебрегая многократным отражением и пренебрегая анизотропными добавками в матричных экспоненциалах, приводим (II.2.5) к выражению:

$$\hat{P} \approx \sum_{j=1}^L e^{i(Qz_{j-1} + \frac{\kappa}{\sin\theta} \sum_{k=1}^{j-1} \chi_{0k} d_k)} \hat{p}_{j-1,j}. \quad (\text{II.2.12})$$

В тех случаях, когда пренебречь магнитными поправками на преломление и поглощение нельзя, то есть нельзя заменять матричные экспоненциалы в (II.2.5) простыми экспонентами, кинематическая формула становится более сложной:

$$\hat{P} \approx \sum_{j=1}^L e^{-ik d_1 \hat{N}_1^- \dots e^{-ik d_{j-1} \hat{N}_{j-1}^-} \hat{p}_{j-1,j} e^{+ik d_{j-1} \hat{N}_{j-1}^+ \dots e^{+ik d_1 \hat{N}_1^+}}. \quad (\text{II.2.13}).$$

Отметим еще раз, что выражения (П.2.12) и (П.2.13) записаны для тангенциальных компонент магнитного поля излучения, что делает их неоправданно усложненными. Для перехода к привычным π и σ поляризациям мы попробуем упростить (П.2.12) и (П.2.13) сначала в конкретном случае.

§ 3. Кинематическая формула для матричного коэффициента отражения в конкретном случае.

Упрощения типа (П.1.3- П.1.4) для кинематического случая можно делать для конкретного вида тензоров $\hat{\chi}, \hat{\gamma}, \hat{N}$. Рассмотрим случай, когда намагниченность многослойной структуры ориентирована в плоскости поверхности (Рис. 2.3.1).

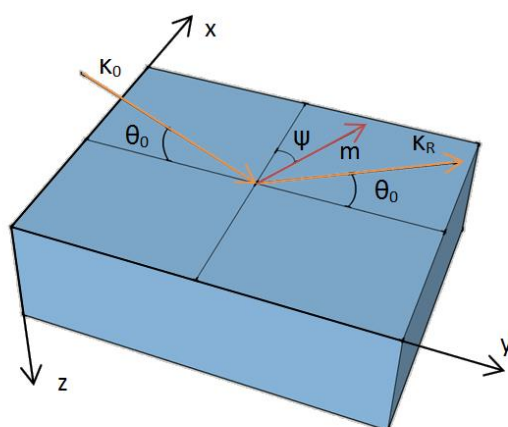


Рис. 2.3.1. Случай, когда намагниченность слоев в плоскости поверхности.

Ориентация вектора намагниченности определяется углом ψ .

Тензор диэлектрической проницаемости в этом случае имеет вид [129,130]:

$$\hat{\epsilon} = 1 + \hat{\chi} = \begin{pmatrix} 1 + \chi_0 & 0 & i\Delta\chi_m \sin\psi \\ 0 & 1 + \chi_0 & -i\Delta\chi_m \cos\psi \\ -i\Delta\chi_m \sin\psi & i\Delta\chi_m \cos\psi & 1 + \chi_0 \end{pmatrix}, \quad (\text{П.3.1})$$

где $\Delta\chi_m$ - магнитная добавка к восприимчивости среды, отвечающая за круговой дихроизм (существенная вблизи краев поглощения), угол ψ определяет азимут намагниченности ($\psi=0^\circ$, если вектор намагниченности \mathbf{m} перпендикулярен плоскости рассеяния). Используя выражения (П.2.6) получим матрицу распространения в виде:

$$\hat{M}(z) = \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{B} \\ \hat{C} & \hat{D} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} a & 0 & (1+\chi_0) & 0 \\ b & 0 & 0 & \eta_0^2 \\ \frac{\eta_0^2}{1+\chi_0} & 0 & -a & -b \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{П.3.2})$$

где $a = i\Delta\chi_m \cos\theta \cos\psi$, $b = i\Delta\chi_m \cos\theta \sin\psi$, $\eta_0^2 = \sin^2\theta + \chi_0$. В (П.3.2) и далее пренебрегаем членами $\sim \Delta\chi_m^2$. Для нахождения собственных значений матрицы \hat{M} получаем биквадратное уравнение

$$\eta^4 - (2\eta_0^2 + a^2)\eta^2 + \eta_0^4 + \eta_0^2 a^2 + b^2(1+\chi_0) = 0, \quad (\text{П.3.3})$$

из которого следует:

$$\begin{aligned} \eta_{1,2}^+ &\cong +\sqrt{\eta_0^2 \pm \Delta\chi_m \cos\theta \sin\psi}, \\ \eta_{1,2}^- &\cong -\sqrt{\eta_0^2 \pm \Delta\chi_m \cos\theta \sin\psi}. \end{aligned} \quad (\text{П.3.4})$$

Из выражения (П.3.10) найдём $\hat{\gamma}^\pm$ для матрицы распространения (П.3.2):

$$\hat{A}\hat{B} = \begin{pmatrix} a(1+\chi_0) & 0 \\ b(1+\chi_0) & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{B}\hat{D} = \begin{pmatrix} -a(1+\chi_0) & -b(1+\chi_0) \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{B}\hat{C} = \begin{pmatrix} \eta_0^2 & 0 \\ 0 & \eta_0^2 \end{pmatrix};$$

$$[(\eta_1 + \eta_2)\hat{B} - \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{D}]^{-1} = \frac{1}{\text{DET}} \begin{pmatrix} \eta_0^2(\eta_1 + \eta_2) & -b(1+\chi_0) \\ b(1+\chi_0) & (1+\chi_0)(\eta_1 + \eta_2) \end{pmatrix};$$

$$\hat{\gamma} = \frac{1}{\text{DET}} \begin{pmatrix} \eta_0^2(\eta_1 + \eta_2)((\eta_1\eta_2 + \eta_0^2) - a(\eta_1 + \eta_2)) & -b(1 + \chi_0)(\eta_1\eta_2 + \eta_0^2) \\ b(1 + \chi_0)((\eta_1\eta_2 + \eta_0^2) - (\eta_1 + \eta_2)^2) & (1 + \chi_0)(\eta_1 + \eta_2)(\eta_1\eta_2 + \eta_0^2) \end{pmatrix};$$

$$\text{DET} = (1 + \chi_0)\eta_0^2(\eta_1 + \eta_2)^2, \quad (\text{II.3.5})$$

учитывая также соотношение, следующее из (II.3.4):

$$\eta_1\eta_2 + \eta_0^2 = \frac{(\eta_1 + \eta_2)^2}{2}, \quad (\text{II.3.6})$$

приводим тензоры $\hat{\gamma}^\pm$ к виду:

$$\hat{\gamma}^\pm \cong \frac{1}{2\eta_0^2} \begin{pmatrix} 2\eta_0^2 \frac{\pm \tilde{\eta}^\pm - a}{1 + \chi_0} & -b \\ -b & \pm 2\tilde{\eta}^\pm \end{pmatrix}, \quad (\text{II.3.7})$$

где $\tilde{\eta}^\pm = \frac{(\eta_1^\pm + \eta_2^\pm)}{2}$.

Для тензоров нормальной рефракции из (II.2.11) получаем

$$\mathbf{N}^\pm = \begin{pmatrix} \tilde{\eta}^\pm & -\frac{b}{2\eta_0^2} \\ \frac{b}{2} & \tilde{\eta}^\pm \end{pmatrix}. \quad (\text{II.3.8})$$

Вычисляя матричный коэффициент отражения $\hat{p}_{j-1,j}$, допустим, что на границах раздела существует слой нулевой толщины с нулевой восприимчивостью, тогда из выражения (II.2.9) получим:

$$\hat{p}_{j-1,j} = (\tilde{\gamma}_0^+ - \tilde{\gamma}_{j-1}^-)^{-1}(\tilde{\gamma}_{j-1}^+ - \tilde{\gamma}_0^+) + (\tilde{\gamma}_j^+ + \tilde{\gamma}_0^+)^{-1}(\tilde{\gamma}_0^+ - \tilde{\gamma}_j^+). \quad (\text{II.3.9})$$

Тензор поверхностного импеданса для такого слоя определяется, как

$$\hat{\gamma}_0^+ = -\hat{\gamma}_0^- = \begin{pmatrix} \sin \theta & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sin \theta} \end{pmatrix}.$$

Теперь, полученные выражения для тензоров нормальной рефракции и поверхностного импеданса, подставим в (II.3.8). Определим первое слагаемое:

$$(\bar{\gamma}_{j-1}^+ - \bar{\gamma}_0^+) = \begin{pmatrix} \frac{-\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) - a_{j-1} + \eta_{0j-1}}{1+\chi_{0j-1}} & -\frac{b_{j-1}}{2\eta_{0j-1}^2} \\ -\frac{b_{j-1}}{2\eta_{0j-1}^2} & \frac{\sin\theta - \eta_{0j-1}}{\eta_{0j-1}\sin\theta} \end{pmatrix} \quad (\text{II.3.10})$$

$$(\bar{\gamma}_0^+ - \bar{\gamma}_{j-1}^-)^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) + a_{j-1} + \eta_{0j-1}}{1+\chi_0} & \frac{b_{j-1}}{2\eta_0^2} \\ \frac{b_{j-1}}{2\eta_{0j-1}^2} & \frac{\sin\theta + \eta_{0j-1}}{\eta_{0j-1}\sin\theta} \end{pmatrix}^{-1} = \quad (\text{II.3.11})$$

$$= \frac{1}{\text{DET1}} \begin{pmatrix} \frac{\sin\theta + \eta_{0j-1}}{\eta_{0j-1}\sin\theta} & -\frac{b_{j-1}}{2\eta_0^2} \\ -\frac{b_{j-1}}{2\eta_{0j-1}^2} & \frac{\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) + a_{j-1} + \eta_{0j-1}}{1+\chi_{0j-1}} \end{pmatrix}$$

$$\text{Здесь } \text{DET1} = \frac{(\sin\theta + \eta_{0j-1})(\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) + a_{j-1} + \eta_{0j-1})}{(1+\chi_{0j-1})\eta_{0j-1}\sin\theta}.$$

$$\begin{aligned} & (\bar{\gamma}_0^+ - \bar{\gamma}_{j-1}^-)^{-1} (\bar{\gamma}_{j-1}^+ - \bar{\gamma}_0^+) = \\ & = \frac{1}{\text{DET1}} \begin{pmatrix} \frac{(\sin\theta + \eta_{0j-1})(-\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) - a_{j-1} + \eta_{0j-1})}{\eta_{0j-1}\sin\theta(1+\chi_{0j-1})} & -\frac{b_{j-1}}{\eta_{0j-1}^3} \\ -\frac{b_{j-1}}{\eta_{0j-1}(1+\chi_{0j-1})} & \frac{(\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) + a_{j-1} + \eta_{0j-1})(\sin\theta - \eta_{0j-1})}{(1+\chi_{0j-1})\eta_{0j-1}\sin\theta} \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} \frac{-\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) - a_{j-1} + \eta_{0j-1}}{\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) + a_{j-1} + \eta_{0j-1}} & -\frac{b_{j-1}(1+\chi_{0j-1})\sin\theta}{\eta_{0j-1}^2(\sin\theta + \eta_{0j-1})(\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) + a_{j-1} + \eta_{0j-1})} \\ -\frac{b_{j-1}\sin\theta}{(\sin\theta + \eta_{0j-1})(\sin\theta(1+\chi_{0j-1}) + a_{j-1} + \eta_{0j-1})} & \frac{\sin\theta - \eta_{0j-1}}{\sin\theta + \eta_{0j-1}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{II.3.12})$$

Упростим (II.3.12) согласно (II.1.3), т.е. пренебрегая в знаменателе членами $\sim \chi_0$ и $\sim \Delta\chi_m$:

$$\begin{aligned}
& (\bar{\gamma}_0^+ - \bar{\gamma}_{j-1}^-)^{-1}(\bar{\gamma}_{j-1}^+ - \bar{\gamma}_0^+) = \\
& = \left(\begin{array}{cc} \frac{-\sin\theta(1 + \chi_{0j-1}) - a_{j-1} + \eta_{0j-1}}{\sin\theta + \eta_{0j-1}} & - \frac{b_{j-1} \sin\theta}{\eta_0^2(\sin\theta + \eta_0)(\sin\theta + \eta_0)} \\ - \frac{b_{j-1} \sin\theta}{(\sin\theta + \eta_{0j-1})(\sin\theta + \eta_{0j-1})} & \frac{\sin\theta - \eta_{0j-1}}{\sin\theta + \eta_{0j-1}} \end{array} \right) \quad (\text{II.3.13})
\end{aligned}$$

Следует отметить, что подобную процедуру нельзя проделывать на ранних этапах вычисления. Так если пренебречь аналогичным образом в (II.3.7) членами $\sim \chi_0$, то мы потеряем в (II.3.13) член $\sim \chi_0 \cos 2\theta$. Используем приближения (II.1.2-II.1.3) окончательно получим:

$$(\bar{\gamma}_0^+ - \bar{\gamma}_{j-1}^-)^{-1}(\bar{\gamma}_{j-1}^+ - \bar{\gamma}_0^+) = -\frac{1}{4\sin^2\theta} \left(\begin{array}{cc} -\chi_{0j-1} \cos 2\theta + 2a_{j-1} \sin\theta & \frac{b_{j-1}}{\sin\theta} \\ b_{j-1} \sin\theta & \chi_{0j-1} \end{array} \right) \quad (\text{II.3.14})$$

Аналогичным образом найдём второй слагаемое в (II.3.9):

$$\begin{aligned}
& \hat{p}_{j-1,j} \cong \frac{1}{4\sin^2\theta} \\
& \left[\left(\begin{array}{cc} \chi_{0j-1} \cos 2\theta + 2a_{j-1} \sin\theta & - \frac{b_{j-1}}{\sin\theta} \\ -b_{j-1} \sin\theta & -\chi_{0j-1} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{cc} -\chi_{0j} \cos 2\theta + 2a_j \sin\theta & \frac{b_j}{\sin\theta} \\ b_j \sin\theta & \chi_{0j} \end{array} \right) \right] \quad (\text{II.3.15})
\end{aligned}$$

Переход от матричных коэффициентов отражения для тангенциальных компонент магнитного поля излучения к стандартным π и σ поляризациям электрического поля излучения осуществляется достаточно просто. Определим единичные векторы π - и σ -поляризации падающей и отраженной волн как

$$\begin{aligned}
& \mathbf{e}_{\sigma 1} = (1, 0, 0), \quad \mathbf{e}_{\sigma 2} = (1, 0, 0) \\
& \mathbf{e}_{\pi 1} = (0, \sin\theta, -\cos\theta), \quad \mathbf{e}_{\pi 2} = (0, -\sin\theta, -\cos\theta) \quad (\text{II.3.16})
\end{aligned}$$

тогда в этих ортах:

$$\hat{r} = \begin{pmatrix} r_{\sigma\sigma} & r_{\sigma\pi} \\ r_{\pi\sigma} & r_{\pi\pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\hat{p}_{22} & \frac{\hat{p}_{21}}{\sin\theta} \\ -\hat{p}_{12} \sin\theta & \hat{p}_{11} \end{pmatrix},$$

$$\hat{n}^{\pm} = \begin{pmatrix} n_{\sigma\sigma} & n_{\sigma\pi} \\ n_{\pi\sigma} & n_{\pi\pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N^{\pm}_{22} & \mp \frac{N^{\pm}_{21}}{\sin\theta} \\ \mp N^{\pm}_{12}\sin\theta & N^{\pm}_{11} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.3.17})$$

И общее выражение для коэффициента отражения с известными r и n с индексами запишется как:

$$\hat{R} \approx \sum_{j=1}^L e^{-ik d_1 \hat{n}_1^-} \dots e^{-ik d_{j-1} \hat{n}_{j-1}^-} \hat{f}_{j-1,j} e^{+ik d_{j-1} \hat{n}_{j-1}^+} \dots e^{+ik d_1 \hat{n}_1^+},$$

$$\hat{f}_{j-1,j} = \frac{1}{4\sin^2\theta} \begin{pmatrix} \chi_{0,j-1} - \chi_{0,j} \\ -i(\Delta\chi_{m_j} \sin\psi_j - \Delta\chi_{m_{j-1}} \sin\psi_{j-1})\cos\theta \\ i(\Delta\chi_{m_j} \sin\psi_j - \Delta\chi_{m_{j-1}} \sin\psi_{j-1})\cos\theta \\ (\chi_{0,j-1} - \chi_{0,j})\cos 2\theta - i(\Delta\chi_{m_{j-1}} \cos\psi_{j-1} - \Delta\chi_{m_j} \cos\psi_j)\sin 2\theta \end{pmatrix},$$

$$\hat{n}_j^{\pm} = \pm \begin{pmatrix} \chi_{0,j} & -\Delta\chi_{m_j} \cos\theta \sin\psi_j \\ \chi_{0,j} + \frac{\Delta\chi_{m_j} \cos\theta \sin\psi_j}{2\sin\theta} & \frac{\Delta\chi_{m_j} \cos\theta \sin\psi_j}{\sin\theta} \\ \frac{\Delta\chi_{m_j} \cos\theta \sin\psi_j}{\sin\theta} & \chi_{0,j} + \frac{\Delta\chi_{m_j} \cos\theta \sin\psi_j}{2\sin\theta} \end{pmatrix} \quad (\text{II.3.18})$$

Легко видеть, что матрицы отражения после перехода к π и σ поляризациям совпадают с матричным представлением амплитуды рассеяния, получаемой как свертка тензора восприимчивости среды с векторами поляризации падающего и рассеянного квантов.

Рассмотрев частный вид тензора восприимчивости, можно обобщить результат для общего случая тензора восприимчивости. По аналогии с выражениями (II.3.17) достаточно очевидно записать общие выражения для матричных коэффициентов однократного отражения $\hat{f}_{j-1,j}$ в ортах π и σ поляризаций на границе раздела $(j-1)/j$ слоев

$$\hat{f}_{j-1,j} = \frac{1}{4\sin^2\theta} (\hat{\chi}_{j-1}^{\perp sc} - \hat{\chi}_j^{\perp sc}), \quad (\text{II.3.19})$$

и соответствующие матричные показатели преломления для проходящей и рассеянной волны в каждом j -ом слое:

$$\hat{n}_j^{\pm} = \pm \sin \theta \pm \frac{\hat{\chi}_j^{\perp \pm}}{2 \sin \theta}, \quad (\text{II.3.20})$$

где (индекс j мы далее опускаем):

$$\begin{aligned} \hat{\chi}^{\perp \text{sc}} &= \left(\begin{array}{c} \chi_{xx} \\ -\chi_{yx} \sin \theta - \chi_{zx} \cos \theta \\ \chi_{xy} \sin \theta - \chi_{xz} \cos \theta \\ \chi_{zz} \cos^2 \theta - \chi_{yy} \sin^2 \theta + \cos \theta \sin \theta (\chi_{yz} - \chi_{zy}) \end{array} \right) \\ \hat{\chi}^{\perp +} &= \left(\begin{array}{c} \chi_{xx} \\ \chi_{yx} \sin \theta - \chi_{zx} \cos \theta \\ \chi_{xy} \sin \theta - \chi_{xz} \cos \theta \\ \chi_{zz} \cos^2 \theta + \chi_{yy} \sin^2 \theta - \cos \theta \sin \theta (\chi_{yz} + \chi_{zy}) \end{array} \right) \\ \hat{\chi}^{\perp -} &= \left(\begin{array}{c} \chi_{xx} \\ -\chi_{yx} \sin \theta - \chi_{zx} \cos \theta \\ -\chi_{xy} \sin \theta - \chi_{xz} \cos \theta \\ \chi_{zz} \cos^2 \theta + \chi_{yy} \sin^2 \theta + \cos \theta \sin \theta (\chi_{yz} + \chi_{zy}) \end{array} \right). \end{aligned} \quad (\text{II.3.21})$$

§ 4. Анализ пределов применимости кинематической теории отражения в анизотропном случае при разных упрощениях.

Как уже отмечалось, попытки упрощения алгоритма расчета коэффициентов отражения присутствуют практически в каждой работе, посвященной обработке эксперимента. Так в работе [133] проведен эксперимент с пленками диспрозия, в которых при низких температурах устанавливается геликоидальное магнитное упорядочение, и амплитуда отраженной волны без учета магнитного рассеяния вычислялся точно по обычным формулам Паррата, а “магнитная добавка” к амплитуде отраженной волны вычислялась кинематически. Применение такого «смешанного

подхода» выглядит достаточно проблематично, и мы решили проверить его сравнением с точным и полным кинематическим расчетом.

Проверку применимости кинематического и «смешанного» приближения [133] мы провели сначала для случая «скалярной» восприимчивости слоев, то есть когда не происходит смешивание поляризации при отражении и преломлении на границах слоев.

Если намагниченность слоев лежит в плоскости рассеяния и в плоскости поверхности (L-МОКЕ геометрия), то при скользких углах падения правую и левую круговую поляризацию падающего излучения можно считать собственными поляризациями задачи, и расчет можно проводить по формуле (II.1.5), полагая $\chi_k = \chi_{0k} \pm \Delta\chi_{mk}$ [118,130].

Результаты расчета в разных приближениях теории отражения и по точным формулам Паррата приведены на Рис. 2.3.1 для образца Nb(4 нм)/[Dy↑(5 нм)/Lu(3 нм)/Dy↓(5 нм)/Lu(3 нм)]₁₅₀/Y(70 нм)/сапфир, характеризующегося антиферромагнитным межслойным упорядочением. «Магнитные» максимумы полуцелого порядка, отвечающие удвоению магнитного периода, практически не видны на кривых отражения R^+ и R^- , но хорошо проявляются (наиболее ярко для 1/2 и 5/2 максимумов) на графиках асимметрии отражения. Расчет проведен для энергии фотонов $E_{ph}=7790$ эВ ($\lambda=0.159$ нм), которая соответствовала L_3 -краю поглощения диспрозия. Восприимчивости слоев Lu, Nb, Y и сапфира были взяты из таблиц [95,138], а для резонансного магнитного слоя Dy использовались данные из работы [134], измеренный спектр поглощения (XAS) номеровался так, чтобы мнимая часть восприимчивости совпадала с табличными данными [95,138] для диспрозия вне области резонанса («на хвостах» спектра поглощения), а резонансная добавка к табличной реальной части [95,138] восприимчивости вычислялась с помощью преобразования Крамерса-Кронига. Нормировочные коэффициенты для мнимой части восприимчивости использовались и для соответствующей нормировки для приведения к абсолютным значениям и

экспериментального спектра дихроичной добавки к спектру поглощения (XMCD спектра) для вычисления $\text{Im}\Delta\chi_m(E_{ph})$, а $\text{Re}\Delta\chi_m(E_{ph})$ также вычислялась преобразованием Крамерса-Кронига.

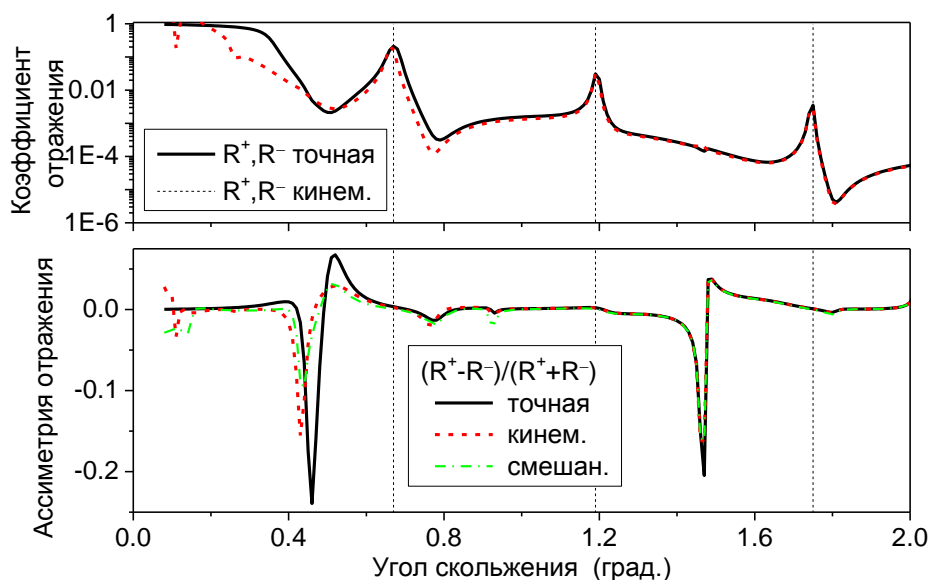


Рис. 2.4.1 Рассчитанные коэффициенты отражения для излучения правой и левой круговой поляризации R^+ и R^- (верхний график), а также асимметрии отражения по знаку круговой поляризации $(R^+ - R^-)/(R^+ + R^-)$ (нижний график) от структуры с антиферромагнитным межслойным упорядочением. Тонкие вертикальные линии отмечают положение брэгговских максимумов разного порядка.

Расчет показал, что для углов, существенно превышающих критический угол полного внешнего отражения ($\theta > \sim 3\theta_c$), кинематическое приближение (П.1.5), как и следовало ожидать, дает приемлемый результат по сравнению с точным расчетом (по формулам Паррата или эквивалентно с помощью 2×2 - матриц распространения) не только для кривых зеркального отражения, но и для очень маленькой величины кривых асимметрии отражения по знаку круговой поляризации. При этом в расчетах по формуле (П.1.5) мы не учитывали магнитные добавки $\pm \Delta\chi_{mk}$ в показателях экспоненты. Из рис. 2.4.1 становится очевидным, что «смешанный» подход, использованный в работе [133], соответствует точному расчету только в той

области, где применимо полное кинематическое приближение. Таким образом, мы показали, что не имеет смысла рассматривать два вклада в отраженную волну в разных приближениях.

Далее мы провели расчеты для многослойной структуры Nb(4 нм)/[Dy(5 нм)/Lu(3 нм)]₆₀₀Y(70 нм)/сапфир с геликоидальным магнитным упорядочением слоев Dy (рис. 2.4.2). В этом случае невозможно выбрать одинаковые для всех слоев собственные поляризации задачи, так что использование матричной теории отражения необходимо. Расчеты по формуле (II.2.12), (II.2.13), (II.3.15), (II.3.17) сравнивались с точным расчетом (II.3.4) и «смешанным» подходом [133]. Результаты представлены на рис. 2.4.3. Как и ожидалось, полное кинематическое приближение (II.2.13) полностью соответствует точному расчету (II.2.4) для углов, превышающих критический угол. (А также подтверждает правильность полученных кинематических формул!). Как и в скалярном случае «смешанный» подход соответствует точному расчету только в той области, где применимо полное кинематическое приближение. Важно отметить, что пренебрежение «магнитными добавками» в показателе преломления (формула (II.2.12)) не всегда оправдана. Кажущиеся небольшими расхождения расчетов асимметрии отражения по формуле (II.2.12) и (II.2.13), на самом деле могут иметь решающее значение для обработки спектров асимметрии отражения. Вставка на Рис. 2.4.3, демонстрирует, что форма спектра асимметрии отражения для брэгговского максимума третьего порядка, когда можно было бы ожидать допустимым использование упрощенной кинематической формулы, действительно существенно различается при расчетах по точной (II.2.12) и приближенной (II.2.13) формулах.

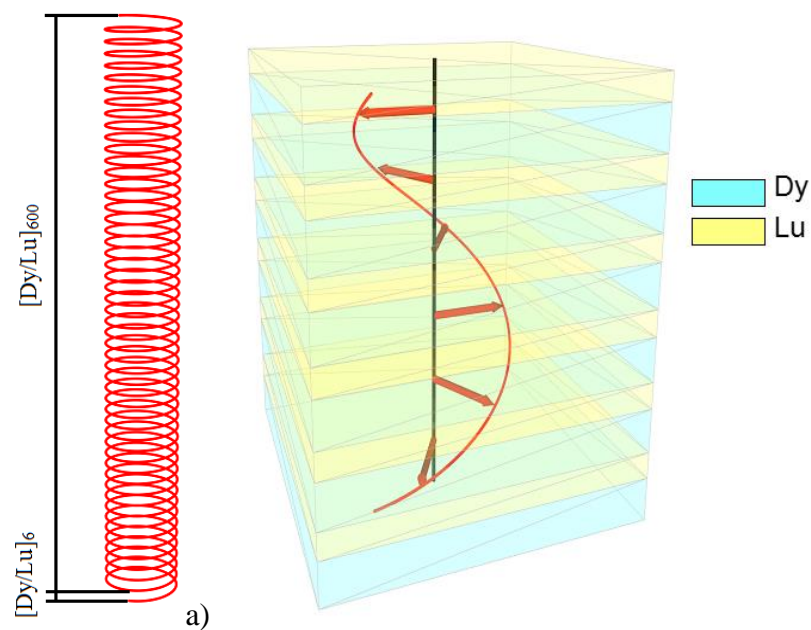


Рис. 2.4.2 Схема магнитного упорядочения: (а) в структуре $[Dy(5 \text{ нм})/Lu(3 \text{ нм})]_{600}$, (b) в одном периоде данной структуры $[Dy(5 \text{ нм})/Lu(3 \text{ нм})]_6$.

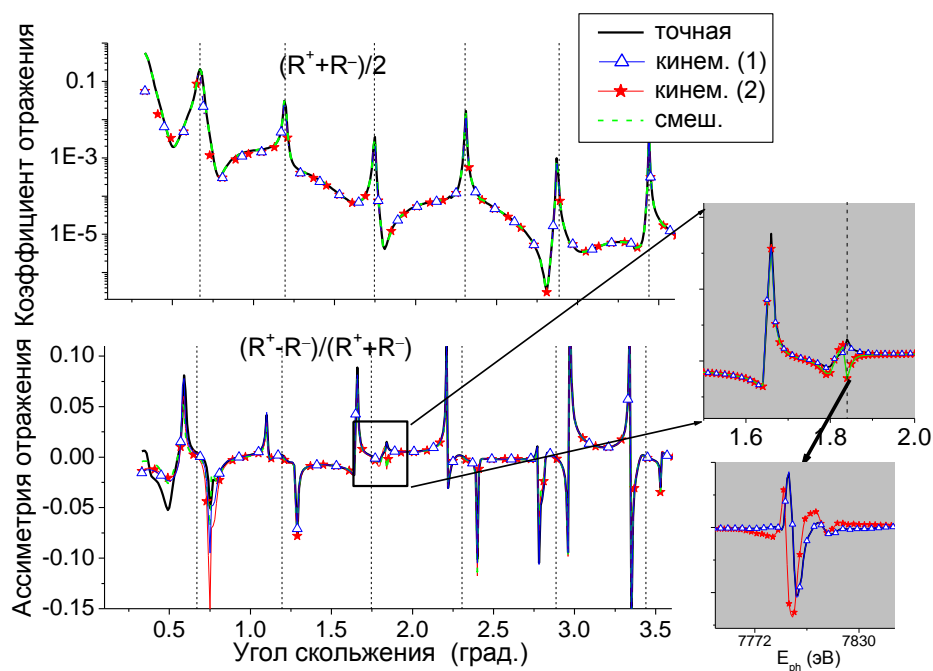


Рис. 2.4.3. Тот же расчет, что и на Рис.2.4.1, но для структуры с геликоидальным межслойным упорядочением, магнитный период в которой составляет 6 структурных периодов. На кривой асимметрии отражения хорошо проявляются «магнитные» сателлиты на расстоянии

$$\pm \Delta\theta \approx \theta_B / 6 = \lambda / 12D \text{ от структурных максимумов.}$$

Таким образом, мы можем констатировать, что кинематическое приближение может существенно ускорить обработку результатов эксперимента (например, для нашей структуры с геликоидальным межслойным упорядочением время расчета кривых отражения и их асимметрии составило по точным формулам 6 мин. 28 сек. 96 мс., а по формулам (П.2.13), (П.3.15), (П.3.17) без потери существенной информации – 30 мс.), однако, в каждом случае необходим контрольный счет по точным формулам.

Основные результаты и выводы Главы II:

Развита матричная кинематическая теория отражения от многослойных магнитоупорядоченных структур, применимая для рентгеновского излучения с энергией фотонов вблизи краев поглощения, когда существенны магнитные добавки к амплитуде рассеяния. Рассмотрено два случая, когда «магнитной добавкой» в показателе экспоненты, отвечающей за преобразование поляризации излучения при распространении в анизотропной среде, можно пренебречь (II.3.12) и когда пренебречь нельзя (II.3.13), и матричные экспоненциалы, описывающие преобразование поляризации, перемножаются последовательно и не допускают перестановки.

Для случая, когда намагниченность многослойной структуры ориентирована в плоскости поверхности, был получен в явном виде тензор поверхностного импеданса (II.3.7), тензор нормальной рефракции (II.3.8) и матричный коэффициент отражения для тангенциальных компонент магнитного поля излучения на границе каждого слоя (II.3.15), а также матрицы перехода (II.3.17) от тангенциальных компонент к стандартным π и σ поляризациям.

Проведены конкретные расчеты для случаев антиферромагнитного и геликоидального межслойного упорядочения. Расчёты показали, что для углов, существенно превышающих критический угол полного внешнего отражения ($\theta > \sim 3\theta_c$), кинематическое приближение, как и следовало ожидать, дает адекватный результат по сравнению с точным расчетом. При этом скорость счёта увеличивается в некоторых случаях на несколько порядков. Показано также, что в отдельных случаях преобразование поляризации при распространении излучения в анизотропных слоях, существенно усложняющее расчеты даже в кинематическом приближении, является важным фактором, который необходимо учитывать при анализе асимметрии спектров отражения в дифракционных максимумах.

Глава III. ПРОБЛЕМЫ ИНТЕРПРЕТАЦИИ СПЕКТРОВ XANES, ИЗМЕРЕННЫХ С ПОМОЩЬЮ ТЕУ ПРИ РАЗНЫХ УГЛАХ СКОЛЬЖЕНИЯ

Для мягкого рентгеновского излучения спектры поглощения XANES (X-ray Absorption Near Edge Spectroscopy) преимущественно измеряются с помощью полного выхода электронов (ПВЭ или Total Electron Yield в англоязычных изданиях). Преимущества ПВЭ метода в том, что он не требует специальной подготовки образца, которую требует метод измерения прямым поглощением. Эффективная длина проникновения при измерениях ПВЭ методом довольно мала (~1 - 5 нм), что обеспечивает чувствительность к поверхностным свойствам образца.

Обычно ПВЭ спектры поглощения имеют форму схожую с формой спектров прямого поглощения. Впервые это было продемонстрировано в [139]. Подобие протяженной тонкой структуры спектров поглощения или EXAFS (Extended X-ray absorption fine structure) измеренной прямым поглощением и выходом электронов исследовано в ряде работ [140-144]. Однако, в экспериментах, где варьировался угол падения рентгеновского излучения, были получены существенные искажения формы ПВЭ спектры поглощения [145-151]. Измерения ПВЭ спектров поглощения при различных углах падения важно для изучения анизотропных свойств поглощающих молекул, для увеличения освещаемой области, а иногда они вызваны условиями эксперимента. Оптимизация измерений протяженной тонкой структуры спектров поглощения за счёт выбора угла падения рентгеновского излучения была проведена в [152].

Известно, что оптические эффекты, такие как отражения от поверхности, в ультрамягких диапазонах энергий становятся значительными при достаточно больших углах скольжения. Влияние рентгеновского отражения на выход фотоэлектронов было обнаружено в ранних работах [79-

80,153], однако лишь угловые зависимости флуоресцентного и электронного выхода были изучены [77,83,154-157]. Сам спектр отражения вблизи края поглощения изучался лишь в нескольких работах [158-171]. Теория спектров ПВЭ, полученных в условиях многократного отражения падающего излучения в многослойных структурах (другими словами влияния рентгеновских стоячих волн), развита в работах [146-147,151,172]. В работе [151] представлен общий теоретический подход для фотоэлектронной и флуоресцентной эмиссии в анизотропной среде.

В данной главе рассмотрено различие в интенсивности ПВЭ спектров вызванных различной природой резонансного и нерезонансного поглощения. Резонансная (белая) линия в спектре поглощения подразумевает резонансный переход электронов с какого-либо внутреннего уровня атомной оболочки на вакантное место вблизи энергетического уровня Ферми и не сопровождается испусканием фотоэлектрона [144]. Заполнение образовавшихся дырок приводит с определённой вероятностью к испусканию Оже-электронов, которые в свою очередь создают вторичные электроны, регистрируемые детектором. При нерезонансном поглощении падающего излучения доминирующую роль играет образование фотоэлектронов, генерируемые всеми типами атомов в образце. Они могут иметь различные энергии и возбуждать различное количество вторичных электронов. Следовательно, эффективность регистрации Оже-электронов, созданных резонансным поглощением, и фотоэлектронов, созданных нерезонансным поглощением, в методе ПВЭ различается. Однако, их относительный вклад в интенсивность ПВЭ спектров поглощения не влияет на форму спектра при нормальном падении излучения, так как нерезонансные фотоэлектроны создают практически постоянный фон в узком энергетическом интервале, в котором измеряется спектр поглощения. Этот фон приобретет энергетическую зависимость и будет искажать форму спектра, если влияние эффектов отражения-преломления (или динамических дифракционных эффектов в монокристаллическом образце [143]) на поле излучения в среде будет

значительным. В этом случае следует учитывать относительный вклад в интенсивность ПВЭ спектров резонансного и нерезонансного поглощения.

В этой главе проведен анализ трансформаций резонансной «белой» линии в ПВЭ спектре поглощения и нерезонансного вклада в зависимости от оптических параметров образца и угла падающего рентгеновского излучения. Наш анализ проведён для экспериментально полученных ПВЭ спектров поглощения вблизи $L_{2,3}$ края фосфора в твёрдом растворе $Ga_xIn_{1-x}P$ при различных углах скольжения. В результате получено объяснение весьма необычной формы этих спектров, вызванной не только оптическими параметрами образца, но и относительным вкладом резонансного и нерезонансного поглощения в их интенсивность.

§ 1 Влияние оптических эффектов на форму спектров TEY XANES

Для вычисления спектров поглощения измеренных методом ПВЭ при скользких углах падения монохроматического падающего рентгеновского излучения θ будет использовать общее выражение:

$$Y(E_{ph}, \theta) = \int_0^{\infty} T(z)A(z, E_{ph}, \theta)dz, \quad (Ш.1.1)$$

где $A(z, E_{ph}, \theta)$ количество электронов, созданных на глубине z после поглощения рентгеновского излучения, $T(z)$ функция выхода, которая носит характер вероятности для регистрации электрона, выходящего с глубины z . Вопрос интерпретации функции $T(z)$, включающий в себя: процессы многократного рассеяния электронов с потерей энергии, рождения вторичных электронов, их углового распределения, влияние ширины окна детектора, учет вероятности перехода электронов через потенциальный барьер на каждой границе раздела двух сред с включением эффектов преломления – был рассмотрен в работах [143-144,173-175]. В ультрамягком рентгеновском излучении энергия фотоэлектронов мала и глубина выхода

равняется нескольким нанометрам [173-175]; информация о поглощении фиксируется практически с самой поверхности. Мы аппроксимируем функцию выхода простой экспоненциальной зависимостью из работы [173]:

$$T_n(z) \sim \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \exp\left(-\frac{z}{\lambda^{el} \cos\psi}\right) \sin\psi d\psi \approx C \exp(-\nu z), \quad (\text{Ш.1.2})$$

где ψ и φ полярный и азимутальный углы выхода электронов, λ^{el} длина свободного пробега электронов, $\nu \approx 5/z$ эффективный коэффициент затухания, который мы будем подгонять при обработке данных. Следует добавить, что коэффициент C так же как и ν может быть разным для электронов, генерируемых при резонансном и нерезонансном поглощении. При конкретных расчетах мы будем включать эту разницу в фактор τ_i (см (7)).

Для определения $A(z, E_{ph}, \theta)$ мы исходим из закона сохранения энергии [176-177]:

$$\text{div}\mathbf{S} + \frac{\partial W}{\partial t} = -Q, \quad (\text{Ш.1.3})$$

где $\mathbf{S} = (c/4\pi) \text{Re}[\mathbf{E}^* \times \mathbf{H}]$ - усреднённый по времени вектор Пойтинга (знак \times обозначает векторное произведение), $\mathbf{W} = (c/8\pi) \text{Re}[\mathbf{E}^* \hat{\epsilon}' \mathbf{E} \times |\mathbf{H}|^2]$ - плотность электромагнитной энергии, и

$$Q = (\mathbf{E}^* \hat{\sigma} \mathbf{E}) \quad (\text{Ш.1.4})$$

потери энергии в единичном объёме за единицу времени (индекс $*$ обозначает комплексное сопряжение). Для разделения поглощения и гиротропных эффектов тензор диэлектрической проницаемости $\hat{\epsilon}$ разделяем на две части,

$$\hat{\epsilon}' = (\hat{\epsilon} + \hat{\epsilon}^H)/2, \quad \hat{\sigma} = (\omega/4\pi i)(\hat{\epsilon} - \hat{\epsilon}^H)/2, \quad (\text{Ш.1.5})$$

где $\hat{\sigma}$ тензор проводимости, который определяет процессы поглощения. Индекс H обозначает эрмитово сопряжённую матрицу. В негиротропной

среде тензор $\hat{\sigma}$ соответствует мнимой части $\hat{\epsilon}$. В гиротропной среде мнимые компоненты тензора $\hat{\epsilon}$ отвечают также и за поляризационные эффекты. Выделение части, отвечающей за поглощение, является в этом случае более сложной задачей, что и осуществляется в (III.1.5).

Для мягкого рентгеновского излучения потери энергии Q в основном определяют фотопоглощение фотонов и, следовательно, количество электронов или флуоресцентных квантов созданных на глубине z в (III.1.1),

$$A \sim \tau(\mathbf{E}^* \hat{\sigma} \mathbf{E}) \sim \tau(\mathbf{E}^* \frac{\hat{\chi} - \hat{\chi}^H}{\lambda} \mathbf{E}), \quad (\text{III.1.6})$$

где $\hat{\chi} = \hat{\epsilon} - 1$ тензор восприимчивости. Если среда содержит разные сорта атомов, мы должны использовать в (III.1.6) сумму по разным атомам, характеризуемым составляющими $\hat{\sigma}_q$ и $\hat{\chi}_q$, которые определяются плотностью ρ_q соответствующего атома.

Вектор \mathbf{E} в (III.1.6) обозначает полное электрическое поле, создаваемое излучением. Если мы используем выражение (III.1.6) не следует рассматривать отдельно волны, распространяющиеся в прямом и обратном направлении, и влияние их интерференции на генерацию фотоэлектронов в каждом слое, как было сделано в работе [145]. Свёртка тензора проводимости $\hat{\sigma}$ с векторами электрического поля \mathbf{E} и \mathbf{E}^* описывает возможную анизотропию процессов поглощения квантов. Существенным является не только абсолютное значение вектора Пойтинга, но также способность атомов реагировать на результирующую поляризацию электрического поля. Аналогичная проблема взаимодействия излучения с анизотропными средами, имеющие различные мультипольные переходы, были проанализированы в [178].

Выражение (III.1.6) является наиболее общим выражением для генерации фотоэлектронов и флуоресцентных квантов, действующее для любых анизотропных и гиротропных сред. Другие подходы, основанные на собственных состояниях электромагнитных волн, включают рассмотрение

взаимодействия атомов с четырьмя собственными волнами и интерференцию их потоков (4+6 членов всего), что делает вычисления очень громоздкими. Добавим, что проблема вычисления собственных волн в анизотропной среде также достаточна сложна (см. [179]).

Если ε является скалярной функцией (или поляризация излучения электрического поля \mathbf{E} является одной из собственных поляризаций) тогда член $\hat{\chi} - \hat{\chi}^H = 2\text{Im}(\chi)$ в (III.1.6) является скаляром и может быть вынесен из процедуры свёртки, тогда мы получим:

$$A(z, E_{ph}, \theta) \sim \tau \{ \text{Im}[\chi(z, E_{ph})] / \lambda \} |E(z, E_{ph}, \theta)|^2 \sim \tau \mu(z, \lambda) |E(z, E_{ph}, \theta)|^2, \quad (\text{III.1.7})$$

где $\mu(z, \lambda)$ коэффициент линейного поглощения. Соотношение (III.2.7) устанавливает, что количество фотоэлектронов или флуоресцентных квантов созданных на глубине z пропорционально квадрату модуля амплитуды полного электрического поля на той же глубине, $|E(z, \lambda, \theta)|^2$ (то есть пропорционален амплитуде стоячей волны) и коэффициенту линейного поглощения.

Разделим поглощение на две составляющие:

$$A(z, E_{ph}, \theta) = \tau_{nres} \frac{\text{Im}(\chi_0(z))}{\lambda} |E(z, E_{ph}, \theta)|^2 + \tau_{res} \frac{\text{Im}(\Delta\chi_{res}(z, E_{ph}))}{\lambda} |E(z, E_{ph}, \theta)|^2. \quad (\text{III.1.8})$$

Первое слагаемое отвечает за общее нерезонансное фотопоглощение, описываемое $\text{Im}\chi_0(z)$. Все типы атомов в образце будут участвовать в этом поглощении. Другой член ($\sim \text{Im}\Delta\chi_{res}(z, E_{ph})$) отвечает за поглощение, ассоциируемое с «белой» линией XANES спектра, измеряемой вблизи выбранного края поглощения исследуемого типа атома. Резонансное поглощение создаёт дырки во внутренней оболочке и не приводит к образованию фотоэлектронов, но заполнение дырок сопровождается выходом Оже-электронов с некоторой вероятностью. Два способа генерации

электронов могут иметь разную эффективность регистрации, поэтому мы ввели в (III.1.8) дополнительные факторы в τ_{res} и τ_{nres} (III.1.8). Позже мы покажем, что эти факторы весьма существенны. Существует много причин, почему эффективность регистрации τ_{res} и τ_{nres} может различаться. Во-первых, количество возбуждаемых электронов для одного поглощённого кванта может различаться. Например, резонансное поглощение может сопровождаться не только испусканием Оже-электронов, но и когерентных и некогерентных флуоресцентных квантов. Во-вторых, фото- и Оже-электроны имеют разную начальную энергию и могут создавать различное количество вторичных электронов; они могут иметь различную глубину выхода; эффективность детектора электронов может зависеть от энергии и т.д. На ограниченном интервале энергий падающий фотонов в пределах измеряемого XANES спектра можно рассматривать τ_{res} и τ_{nres} как постоянные параметры, определяющие количество регистрируемых электронов на один поглощённый фотон.

Для угла θ , много больше критического угла полного внешнего отражения, и для однородного образца ($\chi(z)=\text{const}$) получаем $|E(z, E_{\text{ph}}, \theta)|^2 = |E_0|^2 \exp(-\mu(E_{\text{ph}})z / \sin \theta)$. На малых расстояниях от поверхности ($v \gg \mu(E_{\text{ph}})$) падающая волна не успевает существенно ослабнуть и трансформироваться как функция энергии, так что можно положить $|E(z, E_{\text{ph}}, \theta)|^2 \approx |E_0|^2 \exp(-\mu_0 z / \sin \theta)$, где $\mu_0 = 2\pi \text{Im}(\chi_0) / \lambda$. При этом получим, что нерезонансный член в (III.2.8) не зависит от E_{ph} . Он образует $\sim 1/\lambda$ фон и в большинстве работ не учитывается при интерпретации ПВЭ спектров поглощения. Добавим однако, что если глубина выхода электронов гораздо больше, чем линейный коэффициент поглощения ($v \ll \mu(E_{\text{ph}})$), искажения формы ПВЭ спектров поглощения

могут наблюдаться даже при нормальном падении (как это экспериментально наблюдалось в [150]).

В общем случае, если возникает заметная отраженная волна зависимостью $|E(z, E_{ph}, \theta)|^2$ от E_{ph} пренебрегать нельзя даже вблизи поверхности. Упомянем, что подобные эффекты проявляются и для выхода конверсионных электронов в мёсбауеровской спектроскопии [180-182]. В [151] представлен способ расчёта $|E(z, E_{ph}, \theta)|^2$ для случая анизотропного мультислойного образца. Здесь мы ограничимся простейшим случаем отражения от полубесконечного зеркала. В этом случае имеем

$$|E(z, E_{ph}, \theta)|^2 = |E_0 + E_R(E_{ph}, \theta)|^2 e^{-4\pi \text{Im} \eta(E_{ph}, \theta) z / \lambda}, \quad (\text{III.1.9})$$

где

$$E_R(E_{ph}, \theta) = \frac{\sin \theta - \eta(E_{ph}, \theta)}{\sin \theta + \eta(E_{ph}, \theta)} E_0 \quad (\text{III.1.10})$$

является френелевской амплитудой отражения (для σ -поляризованных волн), а нормальная компонента волнового вектора в среде (в единицах ω/c) $\eta(E_{ph}, \theta)$ определяется соотношением

$$\eta(E_{ph}, \theta) = \sqrt{\sin^2 \theta + \chi(E_{ph})}. \quad (\text{III.1.11})$$

Хорошо известно, что оптические эффекты (отражение-преломление и многократное рассеяние в каждом слое) существенны для углов близких к критическому углу θ_c , определяемому выражением $\sin^2 \theta_c = \text{Re}(\chi(E_{ph}))$.

Для случая полубесконечной среды, принимая во внимания упрощения для функции выхода (III.1.2), мы может численно проинтегрировать (III.1.1) и получить следующее выражение:

$$Y(E_{ph}, \theta) \sim (\tau_{nres} \text{Im}(\chi_0) + \tau_{res} \text{Im}(\Delta\chi_{res}(E_{ph}))) \frac{|E_0 + E_R(E_{ph}, \theta)|^2}{4\pi \text{Im} \eta(E_{ph}, \theta) + v\lambda}. \quad (\text{III.1.12})$$

Отметим, что если ν будет очень большим (то есть глубина выхода электронов много меньше глубины проникновения падающего излучения и будут регистрироваться электроны, образовавшиеся только вблизи поверхности), зависимостью знаменателя от энергии фотонов можно будет пренебречь. В этом случае энергетическая зависимость первого нерезонансного члена в (III.1.12) соответствует энергетической зависимости стоячей волны на поверхности. Вклад второго члена в (III.1.12)) будет зависеть и от интенсивности стоячей волны на поверхности, и от резонансной зависимости поглощения ($\text{Im}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}))$). Суммарная энергетическая зависимость ПВЭ будет зависеть от относительного вклада этих двух разных энергетических зависимостей.

С целью выявить наиболее существенные черты влияния оптических эффектов на спектры поглощения мы провели моделирование. Мы использовали простейшее выражение для $\chi(E_{\text{ph}})$, описывая резонансную составляющую в виде зависимости Брейта-Вигнера $\frac{-1}{x+i}$, что соответствует лоренцевской форме линии для резонансного поглощения, то есть представили $\chi(E_{\text{ph}})$ в виде следующих двух членов:

$$\chi(E_{\text{ph}}) = \chi_0 - \frac{\Delta\chi}{x+i} = \left(\text{Re}\chi_0 - \frac{x\Delta\chi}{x^2+1} \right) + i \left(\text{Im}\chi_0 + \frac{\Delta\chi}{x^2+1} \right), \quad (\text{III.1.13})$$

где x является отклонением от энергии резонанса E_{ph}^{R} в единицах полуширины $\Gamma/2$ резонансной линии поглощения: $x = 2(E_{\text{ph}} - E_{\text{ph}}^{\text{R}})/\Gamma$. Для $E_{\text{ph}}^{\text{R}} = 130.9685$ эВ (L_3 край поглощения фосфора) мы использовали следующие параметры, $\Gamma/2 = 2.0$, $\text{Re}\chi_0 = -0.017$, $\text{Im}\chi_0 = 0.023$, $\Delta\chi = 0.046$, которые по порядку величины соответствуют восприимчивости $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ для этой энергий фотонов.

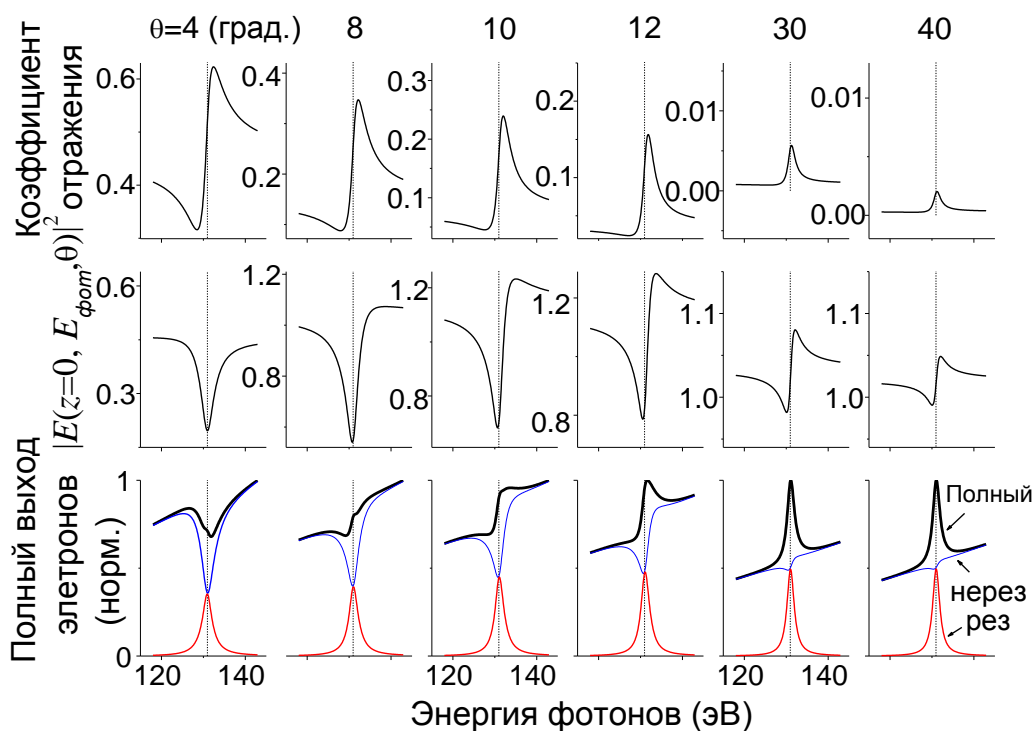


Рис. 3.1.1. Энергетические зависимости отражения (верхние спектры), поля на поверхности образца $|E(z=0, E_{\text{ph}}, \theta)|^2$ (спектры посередине) и формы TEU NEXAFS (нормированные) для $\tau_{\text{res}} / \tau_{\text{pres}} = 0.5$ и разных скользящих углов θ (нижние спектры). Тонкие линии в нижних спектрах соответствуют резонансному (красный) и нерезонансному вкладу (голубой). Энергия точного резонанса E_{ph}^{R} обозначена пунктирной линией.

Результаты представлены на рис. 3.1.1, 3.1.2. Мы видим, что при относительно больших углах мы имеем практически лоренцевскую форму ПВЭ сигнала, но когда скользящий угол уменьшается, этот спектр приобретает дисперсионную форму и затем окончательно переворачивается: появляется провал вместо лоренцевского пика. Отметим, что практически для всех изучаемых углов положение пика (или провала) не соответствует точной энергии резонанса E_{ph}^{R} . Следующей важной особенностью является то, что асимметрия ПВЭ спектров поглощения практически для всех углов объясняется асимметрией нерезонансного фона. Отметим, что аналогичное

асимметричное искажение формы спектров, обусловленное фоновым сигналом от фотоэлектронов, наблюдалось в мессбауэровской спектроскопии конверсионных электронов в условиях зеркального отражения [183-186].
 187? Сравнение рис. 3.1.1 и рис. 3.1.2 показывает, как оптические характеристики среды, такие как $\text{Re}\chi_0$, влияют на форму ПВЭ спектров поглощения. Усиление преломления (то есть увеличение абсолютной величины $\text{Re}\chi_0$) приводит к трансформациям ПВЭ спектров поглощения при бóльших скользких углах. И именно при достаточно больших значениях $|\text{Re}\chi_0|$ мы может вновь получить форму пика при маленьких углах ($< 4^\circ$). Это может быть объяснено уменьшением амплитуды поля на поверхности (за счет противофазного сложения амплитуд падающее и отраженной волн при углах скольжения существенно меньших критического угла) так что резонансный фактор может снова превалировать над спектральным изменением амплитуды поля.

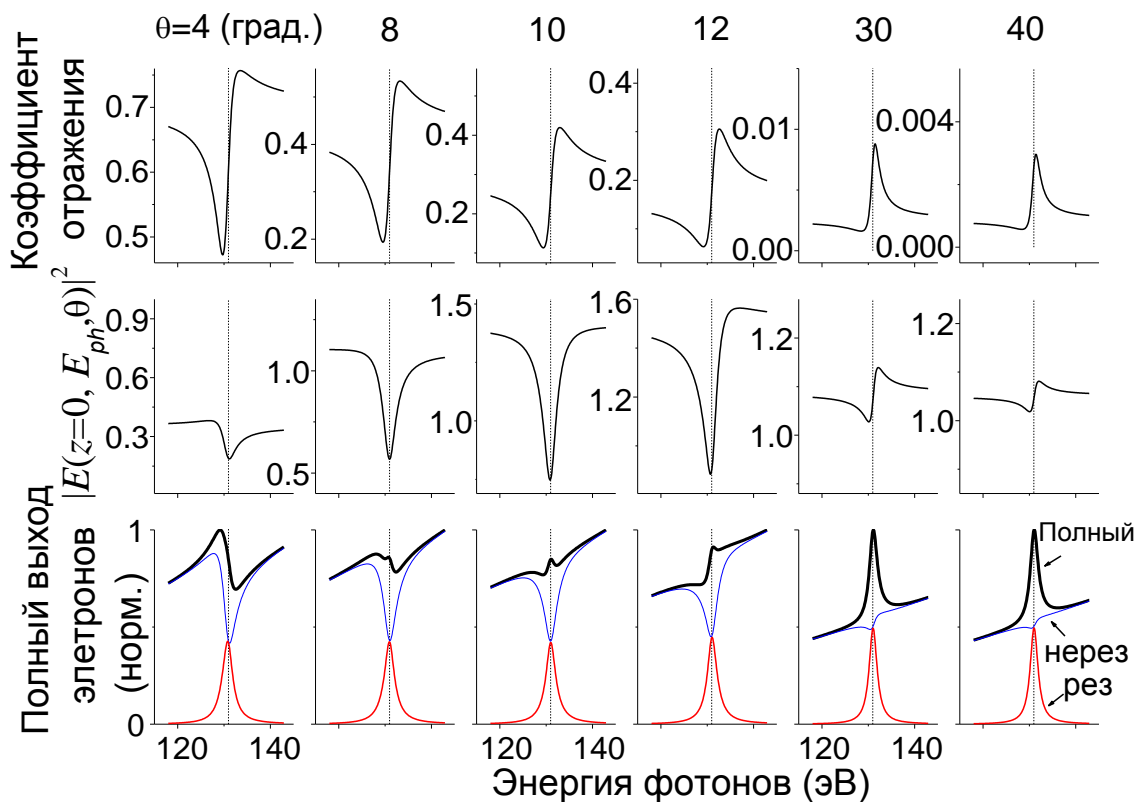


Рис. 3.1.2. Тоже что и на рис. 3.1.1 но для $\text{Re}\chi_0 = -0.04$.

Более подробный анализ трансформации формы спектров представлен на Рис. 3.1.3 – 3.1.5. На рис. 3.1.3 показано, что изменение формы линии с уменьшением угла скольжения от максимума к минимуму и опять к максимуму происходят только в случае преобладания нерезонансного вклада.

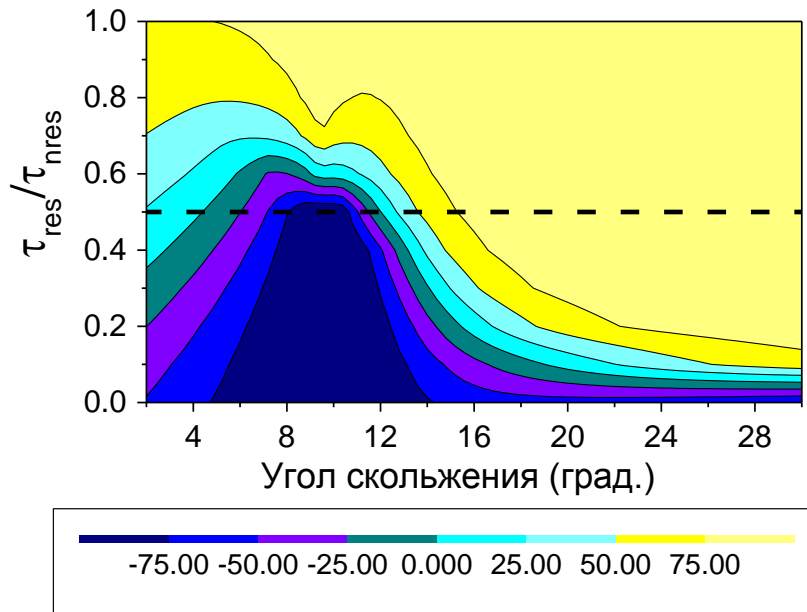


Рис. 3.1.3. Вариации формы спектра (параметр A) при $\text{Re } \chi_0 = -0.037$ как функция θ и τ_{res}/τ_{nres} . Более тёмные области (красные в pdf версии) соответствуют пику в резонансе, а более светлые (синие в pdf версии) провалу. Области, представляющие дисперсионную форму линии, имеют зелено-желтый цвет.

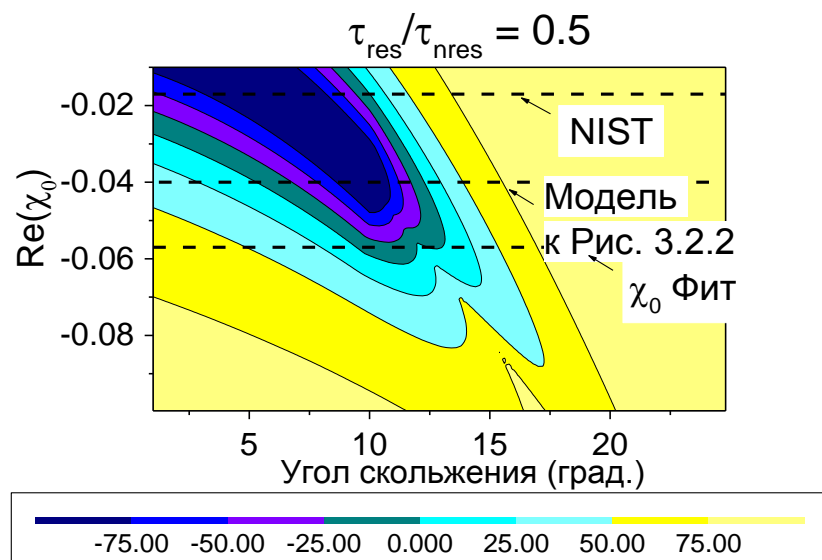


Рис. 3.1.4. Вариации формы спектра, характеризуемой параметром A (см. далее текст), как функция θ и $\text{Re } \chi_0$. Цвета соответствуют тем же характеристикам формы линии, что и на рис. 3.2.3. Величина χ_0 для нашей структуры $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$, определенная по таблицам NIST [179], используемая при моделировании (Рис. 3.2.1- 3.2.2) и полученная при подгонке экспериментальных спектров, отмечена соответствующими горизонтальными пунктирными линиями.

Рис. 3.1.4 показывает влияние отношения нерезонансных и резонансных вкладов на форму спектра при $\theta=4^\circ$. Только при $\tau_{\text{res}}/\tau_{\text{nres}} < 0.5$ резонансная линия проявляется опять как пик при малых скользящих углах.

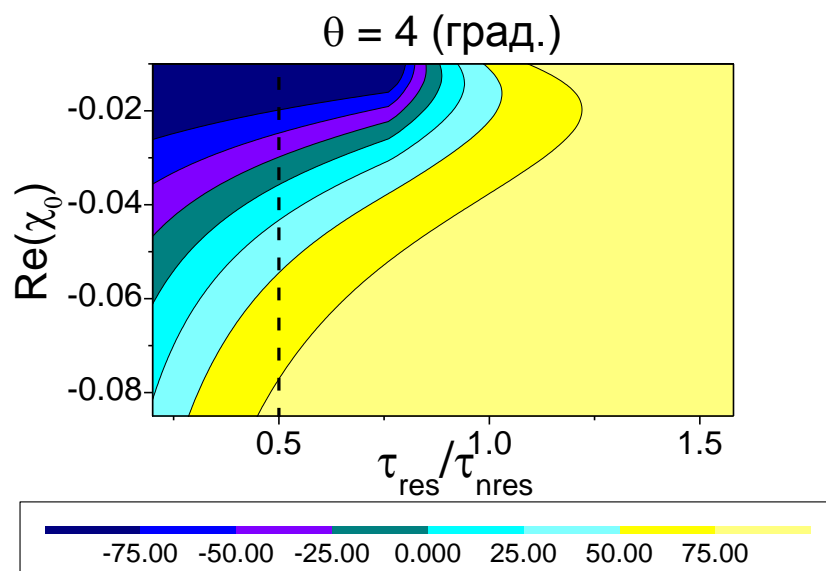


Рис. 3.1.5. Вариации формы спектра (параметр А) при угле падения рентгеновского излучения $\theta = 4^\circ$ как функция от τ_{res} / τ_{nres} и $Re \chi_0$. Цвета соответствуют тем же характеристикам формы линии, что и на рис. 3.1.3.

Анализ бы проведён следующим образом. Для каждого рассчитанного спектра ПВЭ мы ввели количественную характеристику формы линии: вычли прямую линию фона между $Y(E_{ph} = 122 \text{ эВ})$ и $Y(E_{ph} = 138 \text{ эВ})$, как это иллюстрируется рис. 3.1.6, затем нашли максимум Y_M и минимум Y_N результирующей функции и использовали для характеристики формы линии следующую функцию А:

$$A = \frac{Y_M - Y_N}{Y_M + Y_N} * 100\%, \quad (\text{III.1.14})$$

которая варьируется между +100% (форма пика) и -100% (форма провала), $A=0$ соответствует дисперсионной форме ПВЭ спектра поглощения.

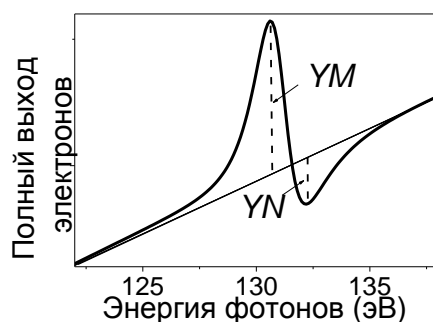


Рис. 3.1.6. Иллюстрация определения параметра A (III.1.14), характеризующего форму линии.

Таким образом, мы выявили, что наиболее интересные трансформации формы ПВЭ спектров поглощения (которые мы наблюдали в эксперименте) мы можем получить, когда спектры измеряются в области полного внешнего отражения $\theta < |\chi_0|$, то есть когда угол скольжения достаточно мал или $|\chi_0|$ достаточно велик, и когда нерезонансный вклад существенно больше, чем резонансный $\tau_{\text{nrres}} > \tau_{\text{res}}$. Последнее обстоятельство, очевидно, проявляется, когда исследуемый образец содержит кроме резонансных атомов много других, то есть для многокомпонентных соединений (как это имеет место в нашем случае).

§ 2 Интерпретация спектра TEY XANES для плёнки GaInP.

Нам были предоставлены (для интерпретации необычной формы этих спектров) ПВЭ спектры поглощения (Рис. 3.2.1), измеренные при разных углах падения рентгеновского излучения методом компенсационного тока для образца $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{GaAs}(100)$ вблизи $L_{2,3}$ края поглощения фосфора. Эпитаксиальная $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ плёнка \sim толщиной 1 микрон была получена методом осаждения металлоорганических соединений из газообразной фазы (MOCVD) в физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе (Санкт-Петербург, Россия). Измерения проводились сотрудниками Воронежского гос. Университета (Домашевская Э.П., Терехов В.А., Середин П.В.,

Кашкаров В.М.) на канале Mark V в центре синхротронных исследований в университете Висконсин-Мэдисон (the Synchrotron Radiation Center in University of Wisconsin-Madison Stoughton, USA). Структура исследуемого образца была подробно изучена в статье [188].

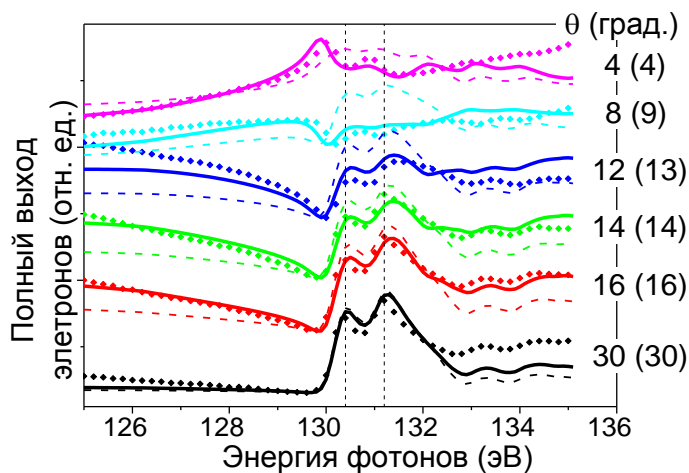


Рис. 3.2.1. ПВЭ спектры поглощения, измеренные при разных углах скольжения падающего рентгеновского излучения методом компенсационного тока для образца $Ga_{0.5}In_{0.5}P/GaAs(100)$ вблизи $L_{2,3}$ края поглощения фосфора (символы), и результаты подгонки их формы (сплошные линии). Спектры смещены по вертикали. Для каждого спектра приведено экспериментальное значение соответствующего скользящего угла (эти значения не очень точны) и угла, полученного при подгонке кривых (в скобках). Результирующее соотношение резонансного и нерезонансного вкладов оказалось равным $\tau_{res} / \tau_{nres} = 0.5$. Тонкие пунктирные линии представляют теоретические спектры для соотношения $\tau_{res} / \tau_{nres} = 1.0$ с теми же оптическими параметрами, что и для толстых сплошных линий. Полученные при подгонке кривых оптические параметры изображены на рис. 3.2.2.

Экспериментальные спектры демонстрируют очень нетривиальные трансформации формы при малых скользящих углах падающего рентгеновского излучения. Каждая резонансная линия (резонансные энергии соответствующих компонент отмечены вертикальными пунктирными

линиями) имеет ассиметричные искажения при скользящих углах меньших чем $\sim 15^\circ$, они проявляются как ассиметричные провалы при углах $\sim 8^\circ$ и снова в виде пиков при углах $\sim 4^\circ$.

Теоретические ПВЭ спектры вычислялись для модели однородного полубесконечного зеркала по формулам (III.1.1, III.1.2, III.1.12), учитывая относительно большую (~ 1000 нм) толщину плёнки $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$.

Начальные (для последующего моделирования) значения $\text{Re}\chi_0$ и $\text{Im}\chi_0$ для нашего образца (которые затем уточнялись в процессе подгонки) были получены следующим образом. Для восприимчивости χ_0 использовалась общая формула:

$$\chi = \frac{4\pi}{k^2} \sum \rho_i f_i = \frac{\lambda^2}{\pi} \sum \rho_i f_i. \quad (\text{III.2.1})$$

Принимая во внимание то, что твёрдый раствор $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ имеет структуру типа сфалерита: 4 атома фосфора, 2 атома Ga и 2 атома In в кубической элементарной ячейке с параметром решётки $a=5.6596 \text{ \AA}$ [188], мы получили значения объёмной плотности для Ga, In и P: $\rho_{\text{Ga}} = \rho_{\text{In}} = 0.0110325 (\text{\AA}^{-3})$ и $\rho_{\text{P}} = 0.0220649 (\text{\AA}^{-3})$. Амплитуды атомного рассеяния $f = r_0^*(f_1 + if_2)$ ($r_0 = 2.81794 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}$ классический радиус электрона) для Ga, In и P были взяты из таблиц NIST - National Institute of Standards and Technology [189]. Полученные по формуле (III.3.1) $\text{Re}\chi_0(E_{\text{ph}})$ и $\text{Im}\chi_0(E_{\text{ph}})$ приведены на рис 3.2.2 пунктирными зелеными линиями. Для проверки полученных зависимостей мы сравнили их с кривыми восприимчивости для GaP, имеющимися в таблицах Henke [95] (тонкие голубые линии). Экспериментальные ПВЭ спектры поглощения, измеренные при нормальном падении в области $L_{2,3}$ краев поглощения фосфора, были нормированы вне области резонанса (на «хвостах») на полученную по таблицам NIST зависимость $\text{Im}\chi_0(E_{\text{ph}})$ – точечная кривая на рис. 3.2.2. Разность этих двух кривых определяет, $\text{Im}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}))$. Для получения $\text{Re}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}))$ мы

использовали Крамерс-Кронинг преобразования $\text{Im}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}))$, и результат добавляли к «табличной зависимости» $\text{Re}\chi_0(E_{\text{ph}})$ для получения общей зависимости $\text{Re}\chi(E_{\text{ph}})$ (чёрная пунктирная линия).

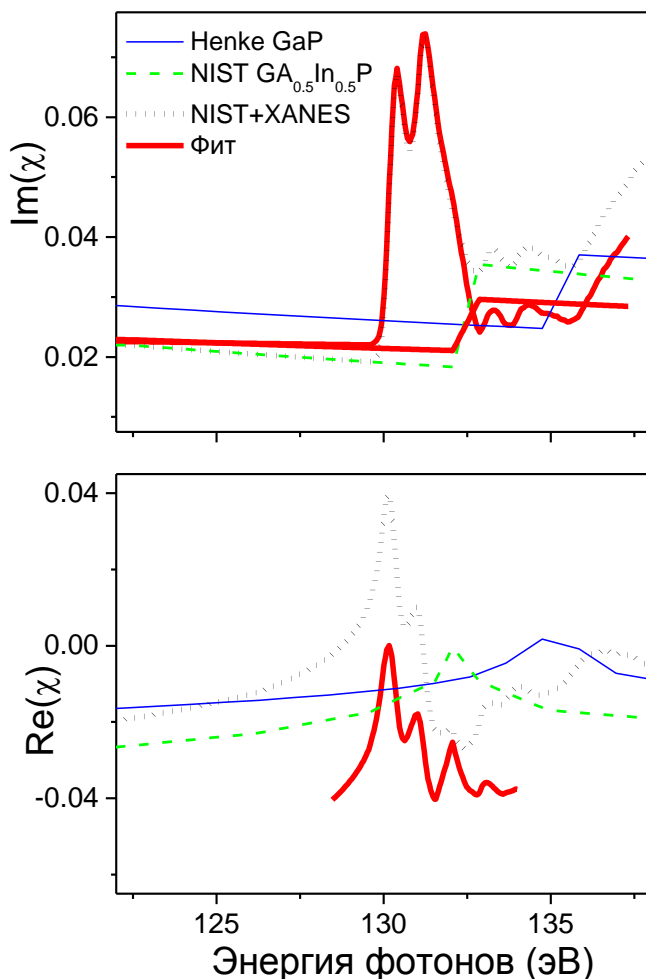


Рис. 3.2.2. Реальные и мнимые части GaP и Ga_{0.5}In_{0.5}P восприимчивостей взятые из разных источников [95,189] (см. пояснения в тексте) и полученные при подгонке экспериментальных данных (толстые красные линии).

Хорошо известно, что при малых энергиях рентгеновского излучения (<1 кэВ) табличные данные для $\text{Re}\chi_0$ и $\text{Im}\chi_0$ имеют большую погрешность. В процессе подгонки экспериментальных спектров, поскольку форма ПВЭ спектров поглощения в области полного внешнего отражения существенно

зависит от абсолютных значений восприимчивости исследуемой пленки, мы вводили сдвиг и растяжение (сжатие) для $\text{Re}\chi_0$ и $\text{Im}\chi_0$, а также $\text{Re}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}))$ и $\text{Im}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}))$:

$$\begin{aligned} \chi(E_{\text{ph}}) = & (A_1 \times (\text{Re}(\chi_0) - \text{Re}(\chi_0(E_{\text{ph}}^{\text{min}}))) + A_2 \times \text{Re}(\chi_0(E_{\text{ph}}^{\text{min}}))) \\ & + i(B_1 \times (\text{Im}(\chi_0) - \text{Im}(\chi_0(E_{\text{ph}}^{\text{min}}))) + B_2 \times \text{Im}(\chi_0(E_{\text{ph}}^{\text{min}}))) \\ & + (C_1 \times (\text{Re}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}})) - \text{Re}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}^{\text{min}}))) + C_2 \times \text{Re}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}^{\text{min}}))) \\ & + i(D_1 \times (\text{Im}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}})) - \text{Im}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}^{\text{min}}))) + D_2 \times \text{Im}(\Delta\chi_{\text{res}}(E_{\text{ph}}^{\text{min}}))), \end{aligned} \quad (\text{III.2.2})$$

где $E_{\text{ph}}^{\text{min}}$ минимальная энергия фотонов на нашем графике. С целью получить значения восприимчивости, позволившие воспроизвести экспериментальную форму спектров при всех углах скольжения, при которых производились измерения ПВЭ для нашей плёнки, мы варьировали эти параметры A_i , B_i , C_i , D_i , $i=1,2$, а также соотношение резонансного и нерезонансного вклада в форму ПВЭ спектра поглощения $\tau_{\text{res}}/\tau_{\text{nres}}$ и эффективный коэффициент затухания для выходящих из образца электронов ν , определяющий глубину тестирования пленки данным методом (всего 10 параметров). Учитывая большое число параметров, влияющих на форму спектров и достаточно громоздкий формализм вычисления ПВЭ спектров, мы для фитирования адаптировали известный алгоритм АМОЕВА (см. ПРИЛОЖЕНИЕ), который показал существенно лучшую сходимость, по сравнению с методами последовательного спуска по каждому параметру или методу «сеточной» минимизации. Весь пакет программ, применимый для вычисления ПВЭ или флуоресцентных спектров поглощения в условиях зеркального отражения для случая любых мультислойных образцов, помещен в свободный доступ на сайте кафедры физики твердого тела физического факультета МГУ [190].

Полученные $\text{Re}\chi(E_{\text{ph}})$ и $\text{Im}\chi(E_{\text{ph}})$ показаны на рис. 3.2.2 жирной красной линией. Мы получили значение параметра $\tau_{\text{res}}/\tau_{\text{nres}} = 0.5$. Это означает, что нерезонансный фон даёт бóльший вклад в форму ПВЭ спектра поглощения. Проведенные нами модельные расчеты, подтверждают, что

наблюдаемые трансформации формы спектров с углом скольжения невозможно получить при меньшем вкладе в ПВЭ нерезонансного фона. Полученный результат вполне объясняется относительно большим количеством нерезонансных атомов в твёрдом растворе $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$. Мы получили $\nu=0.1 \text{ \AA}^{-1}$, что примерно соответствует данным из работы [173] для электронов с энергией $\sim 95 - 114 \text{ эВ}$ в кремнии. Таким образом, полученная глубина тестирования $\sim 3\text{-}5 \text{ нм}$ сопоставима с глубиной проникновения падающего излучения при углах скольжения в области полного отражения, что объясняет то, что на самом деле при подгонке величина ν не сильно влияет на результаты в нашем случае.

Основные результаты и выводы Главы III:

В главе III было продемонстрировано, как оптические эффекты искажают форму ПВЭ спектров поглощения, измеренных при разных скользящих углах падающего излучения.

Показано, что сигнал от нерезонансного фона играет важную роль в искажении ПВЭ спектра поглощения при малых углах скольжения падающего излучения.

Дана интерпретация необычной формы ПВЭ спектров поглощения, измеренных от плёнки $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{GaAs}(100)$ вблизи $L_{2,3}$ края поглощения фосфора при разных скользящих углах падающего излучения. При интерпретации было уточнено абсолютное значение оптических констант, а также определено соотношение нерезонансного и резонансного вклада измеряемый сигнал ПВЭ.

Сделано заключение, что поскольку форма ПВЭ спектров поглощения, измеренных при разных углах скольжения, существенно зависит от оптических характеристик среды, эта форма в принципе может быть использована для определения абсолютных значений этих характеристик.

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

Для мягкого рентгеновского излучения преломление и поглощение, включая магнитные поправки, могут быть экспериментально определены из сдвига брэгговских максимумов на кривых отражения от периодических мультислоев (см. обзорную главу I). Для жёсткого рентгеновского излучения брэгговские максимумы возникают при дифракции на кристаллах, но влияние преломления на их сдвиг слишком мало, чтобы его можно было использовать для определения дисперсионных поправок к показателю преломления (то есть δ и β в показателе преломления $n = 1 + \delta + i\beta$) или, 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 (см., например, [110,118]), в том числе и для определения магнитных добавок к показателю преломления [118]. 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 от кристаллической структуры (и, соответственно, возможность определения дисперсионных поправок) возрастает в резко асимметричной схеме дифракции при

скользящих углах падения, что позволит использовать этот более простой метод по сравнению с рефлектометрией для определения магнитооптических констант. Такую возможность мы анализируем в данной главе, используя как стартовый момент обнаружение неожиданных эффектов в экспериментальных данных по рефлектометрии.

§ 1. Интерпретация аномальных всплесков интенсивности на кривых выхода флуоресцентного излучения от плёнки YFe₂

В недавно проведенном эксперименте на ESRF [118] 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 измерялись рефлектометрические кривые (зависимость отражения от угла скольжения) для набора энергий вблизи $L_{2,3}$ краев поглощения Y. Аппаратура была настроена так, что одновременно с зеркально отраженным сигналом регистрировалось и флуоресцентное излучение от этого образца в функции угла скольжения (Рис. 4.1.1).

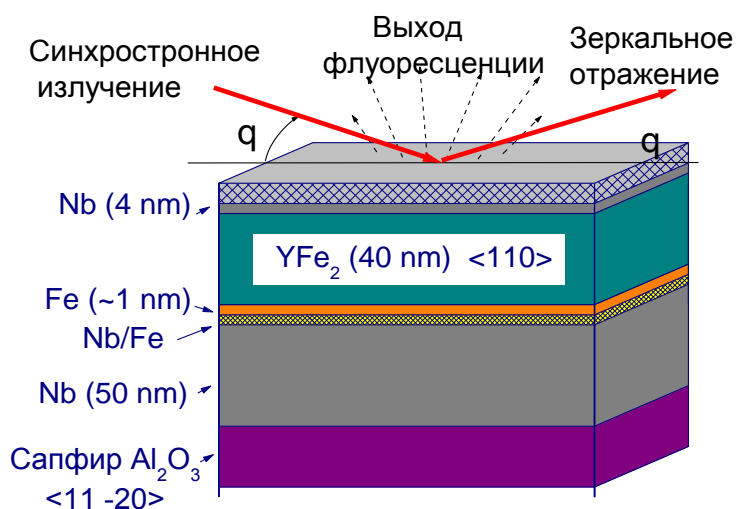


Рис. 4.1.1. Схема эксперимента.

Флуоресцентный детектор располагался над поверхностью образца. Эти данные не входили в основную задачу: определения 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 от всех атомов в исследуемом образце: $L_{\alpha 1,2}$ 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 $K_{\alpha 1}$ 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 YFe_2 и подложки Al_2O_3 за исключением одной маленькой детали.

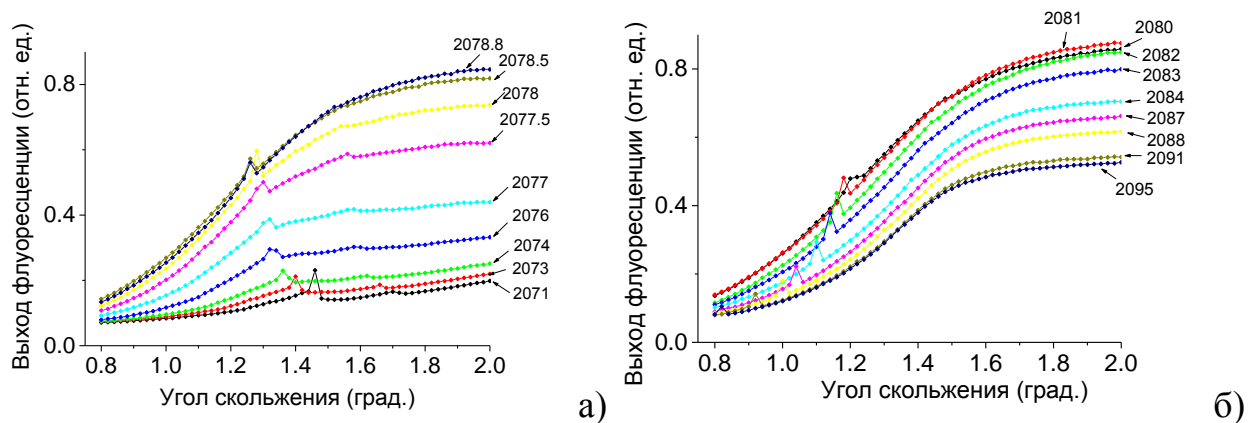


Рис. 4.1.2 (а,б). Экспериментальные зависимости выхода флуоресцентного излучения от образца $Nb(4 \text{ нм})/YFe_2(40 \text{ нм } \langle 110 \rangle)/Fe(1.5 \text{ нм})/Nb(50 \text{ нм})/сапфир$ в функции угла скольжения падающего излучения θ , измеренные для набора энергий фотонов вблизи L_3 края поглощения Y.

На всех флуоресцентных кривых (Рис. 4.1.2а-б) имеется пичок в области малых углов скольжения, который можно было бы и проигнорировать (как дефект измерительной аппаратуры), но его положение изменяется с энергией падающих фотонов вполне систематически и даже как-то (хотя и слабо) согласуется с резонансной зависимостью восприимчивости в исследуемой области (Рис. 4.1.3). Передо мной была поставлена задача объяснить появление таких аномалий на угловых зависимостях выхода флуоресцентного излучения.

Попытки описать такую зависимость изменением критического угла полного внешнего отражения от какой-либо границы раздела, вблизи которого всегда возникает всплеск вторичного излучения, или формированием волноводного режима в пленке YFe_2 , обеспечивающего локальные (по углу и по пространству) усиления возбуждающего поля в образце, как это иллюстрируется Рисунком 4.1.4, рассчитанном для волноводной структуры многослойной пленки [A4], не были успешными. Параметры структуры были выбраны идеальными для формирования волноводных мод (увеличена оптическая плотность Nb, то есть $Re \chi_{Nb}$, и уменьшено поглощение в слое YFe_2). Отметим, что пучности поля и соответствующие пики на кривых выхода флуоресценции возникают для углов, существенно больших критического угла полного отражения (что не соответствует нашим результатам), а идеальные параметры волноводной структуры не соответствовали полученным оптическим характеристикам образца [118].

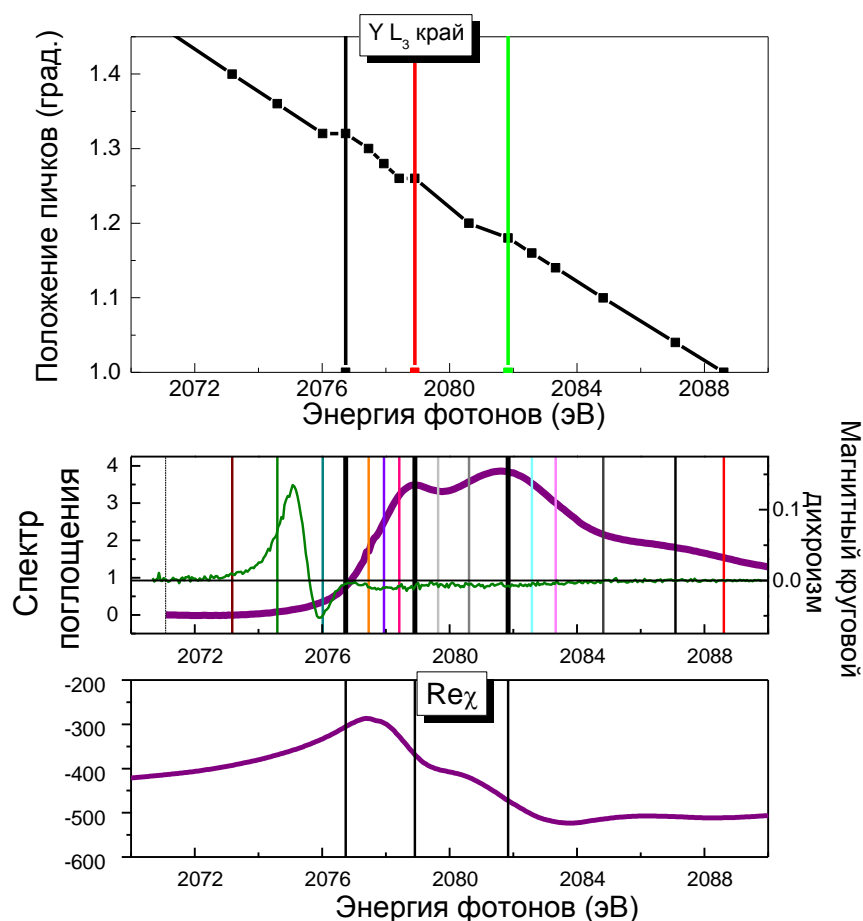


Рис. 4.1.3. Изменения угла скольжения θ_m , при котором наблюдался пикок на кривых флуоресцентного выхода, в функции энергии падающих фотонов (верхний график, вертикальные линии обозначают некоторые резонансные особенности), экспериментальные зависимости поглощения и кругового дихроизма (XAS и XMCD) для нашего образца (средний график, тонкие вертикальные линии обозначают энергии падающих фотонов, для которых измерялись рефлектометрические и одновременно флуоресцентные кривые), зависимость реальной части восприимчивости, полученная при подгонке рефлектометрических кривых в работе [118] (нижний график).

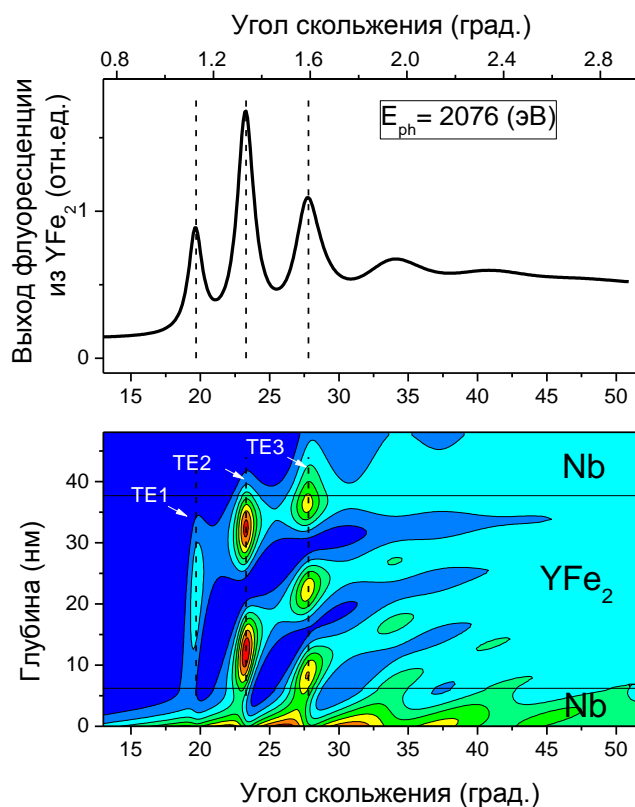


Рис. 4.1.4. Пики на кривой выхода флуоресценции из волноводной структуры Nb/YFe₂/Nb (верхний график, расчет). На нижней карте представлено двумерное распределение квадрата модуля амплитуды поля рентгеновской стоячей волны в этой модельной структуре. Наибольшая интенсивность поля соответствует наиболее темным (красным в цветном варианте) областям.

Наиболее существенно, что смещение пиков с изменением энергии фотонов получалось совершенно с другим наклоном, чем в эксперименте. Близкая к линейной зависимость положения пиков от энергии падающих фотонов, интерпретируемая в простейшем приближении $2d \sin \theta = n\lambda$, дали для дифракционной толщины $d \approx 0.4$ нм. Это обстоятельство привело к мысли, что кроме флуоресцентного излучения в детектор случайно попал сигнал дифракции на кристалле YFe₂. Используя пакет PowderCell [192], нашли, что для наших очень больших длин волн ($\lambda = 0.591 - 0.598$ нм) существует единственное дифракционное отражение (111) от структуры C15 (YFe₂) с

параметром решетки $d=0.4255$ нм (рис 4.1.5).

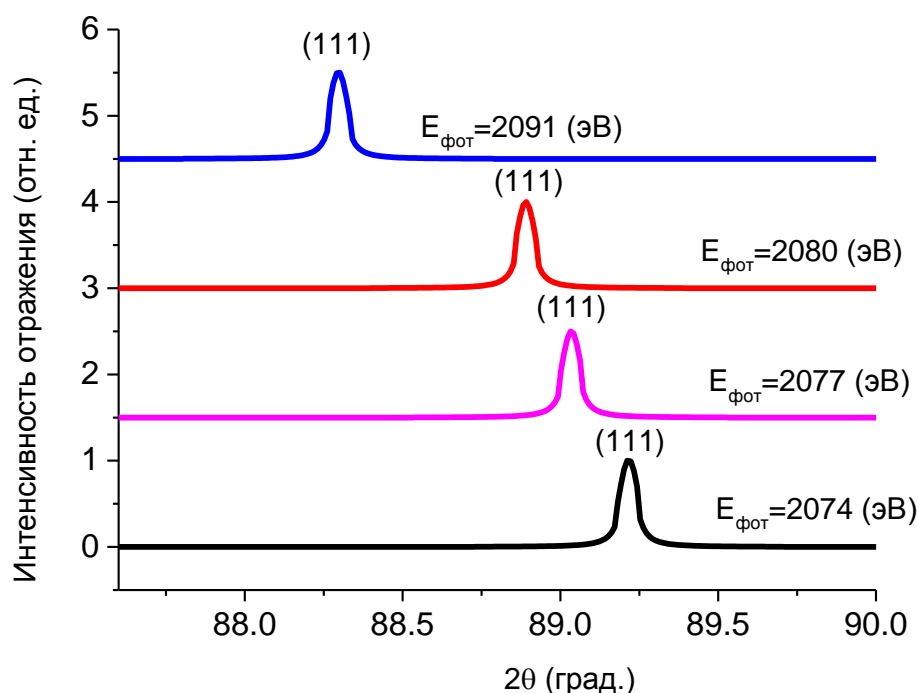


Рис 4.1.5. Моделированные кривые брэгговского отражения от монокристаллического $YFe_2(C15)$ для разных энергий фотонов.

Обнаруженный эффект простимулировал рассмотрение влияния преломления на положение дифракционного пика в условиях резко асимметричной дифракции в скользящей геометрии.

§ 2. Теория резко асимметричной дифракции. Кинематическое приближение

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

$$2d \sin(\theta + \psi) = n\lambda, \quad (IV.2.1)$$

где θ — угол скольжения для падающего излучения, ψ — угол между поверхностью кристалла и атомно-кристаллическими плоскостями

(Рис. 4.2.1), d – межплоскостное расстояние, n – порядок отражения. При скользких углах падения $\sin(\theta + \psi) \approx (\theta \cos \psi + \sin \psi)$, что дает линейную зависимость положения угла Брэгга от длины волны (или обратно пропорциональную от энергии фотона E_{ph}).

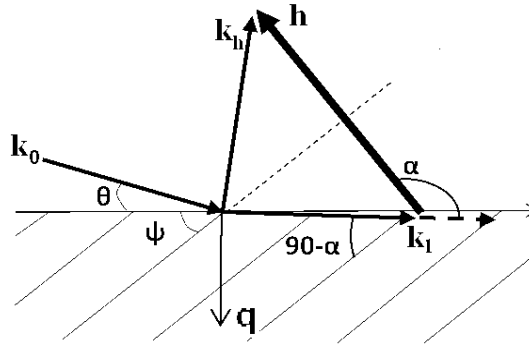


Рис. 4.2.1. Рассматриваемая геометрия резко-асимметричной дифракции.

В случае кинематической дифракции с учетом преломления волновой вектор в среде равен $\mathbf{k}_1 = \frac{2\pi}{\lambda} \{0, \cos \theta, \sin \theta'\}$, $|\mathbf{k}_1| = \frac{2\pi}{\lambda} (1 + \chi/2)$, где

$$\sin \theta' = \eta = \sqrt{\sin^2 \theta + \chi}, \quad (\text{IV.2.2})$$

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

$$\chi = 2\delta + 2i\beta = \frac{\lambda^2}{\pi} \rho f \quad (\text{IV.2.3})$$

χ - восприимчивость среды, ρ - объемная плотность атомов, f - атомный фактор рассеяния на нулевой угол, δ и β - показатели преломления. В (IV.2.3) представлена известная связь между восприимчивостью, показателем преломления и атомным фактором рассеяния для рентгеновского излучения.

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

$$\exp(-2i \operatorname{Re} k_{1h} d) = \exp(2\pi i), \quad (\text{IV.2.4})$$

где k_{1h} - проекция (комплексного) волнового вектора преломленной волны

на нормаль к отражающим плоскостям (то есть на направление вектора обратной решетки $\mathbf{h} = \frac{2\pi}{d}\{0, -\sin\psi, -\cos\psi\}$). Косинус угла между \mathbf{h} и \mathbf{k}_1 (или минус синус угла преломленной волны с отражающей кристаллической плоскостью) равен

$$\frac{(\mathbf{k}_1, \mathbf{h})}{|\mathbf{k}_1||\mathbf{h}|} = \cos\alpha = \frac{-\cos\theta\sin\psi - \operatorname{Re}(\sin\theta')\cos\psi}{1 + \chi/2}. \quad (\text{IV.2.5})$$

Таким образом

$$-\operatorname{Re} k_{1h} = \frac{2\pi}{\lambda}(\cos\theta\sin\psi + \operatorname{Re}(\sin\theta')\cos\psi), \quad (\text{IV.2.6})$$

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

$$\sin\psi\cos\theta_m + \cos\psi\operatorname{Re}\sqrt{\sin^2\theta_m + \chi(E_{ph})} = \frac{\lambda}{2d}. \quad (\text{IV.2.7})$$

Это уравнение для определения угла скольжения $\theta_m(E_{ph})$, при котором возникает брэгговское отражение, мы решаем точно методом Ньютона. Отметим, что в работах [98,110-114] квадратный корень в (IV.2.7) вычислялся приближенно (что справедливо только вдали от критического угла, но это не работает в нашем случае), поэтому считалось, что в кинематическом приближении мнимая часть $\chi(E_{ph})$ не влияет на положение брэгговского максимума. Точное решение (IV.2.7) 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 волн, рассеянных кристаллическими плоскостями [193]). В нашем случае мы представляем ее в виде:

$$I \sim \left| t \frac{1}{1 - e^{-2ik_1 h d}} \right|^2, \quad (\text{IV.2.8})$$

где t – амплитуда преломленной волны, которая для случая границы между внешней средой и полубесконечным кристаллом определяется формулой

$$\text{Френеля } t = \frac{2 \sin \theta}{\sin \theta + \eta}.$$

§ 3. Динамическая теория резко асимметричной дифракции в общем некомпланарном случае.

Динамическая теория резко асимметричной дифракции рассматривалась ранее в основном для решения задач управления пучками рентгеновского излучения, и были получены приближенные выражения для ширины, сдвига и расходимости дифрагированного пучка [194-196]. Эффект усиления влияния преломления на эти параметры был продемонстрирован и даже использовался для разделения близких дифракционных максимумов от пленки и подложки [197]. Для нашей задачи мы будем численно решать динамические уравнения точно и находить положение брэгговского пика $\Theta_m(E_{ph})$ как экстремум модуля в квадрате амплитуды дифрагированной волны.

В динамической теории используя малость восприимчивости среды χ , можно записать материальные уравнения среды в виде:

$$\mathbf{E} = \hat{\varepsilon}^{-1} \mathbf{E} \cong (1 - \hat{\chi}) \mathbf{D}. \quad (\text{IV.3.1})$$

С учетом пространственной периодичности кристалла диэлектрическую восприимчивость $\chi(\mathbf{r})$ представляют рядом Фурье

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_h \chi_h e^{-i \frac{\omega}{c} \boldsymbol{\tau} \mathbf{r}}, \quad (\text{IV.3.2})$$

(Здесь и далее мы будем использовать вектора обратной решетки $\boldsymbol{\tau}$ и

волновые вектора \mathbf{k}_i в единицах $2\pi/\lambda = \omega/c$, то есть $\boldsymbol{\tau} = \frac{\lambda}{2\pi} \mathbf{h}$, $\mathbf{k}_i = \frac{\lambda}{2\pi} \mathbf{k}_i$, $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$). Тогда, разлагая волны в среде по плоским волнам $\sim \exp(i \frac{\omega}{c} \mathbf{k}_i \mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}_1 \exp(i \frac{\omega}{c} \mathbf{k}_1 \mathbf{r}) + \mathbf{E}_2 \exp(i \frac{\omega}{c} \mathbf{k}_2 \mathbf{r}) + \dots \\ \mathbf{D}(\mathbf{r}) &= \mathbf{D}_1 \exp(i \frac{\omega}{c} \mathbf{k}_1 \mathbf{r}) + \mathbf{D}_2 \exp(i \frac{\omega}{c} \mathbf{k}_2 \mathbf{r}) + \dots \end{aligned} \quad (\text{IV.3.3})$$

из (IV.3.1) в двухволновом случае получаем, сгруппировав члены с одинаковой фазовой зависимостью:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1 &= \mathbf{D}_1 - \hat{\chi}_{11} \mathbf{D}_1 - \hat{\chi}_{12} \mathbf{D}_2 \\ \mathbf{E}_2 &= \mathbf{D}_2 - \hat{\chi}_{22} \mathbf{D}_2 - \hat{\chi}_{21} \mathbf{D}_1. \end{aligned} \quad (\text{IV.3.4})$$

Уравнения Максвелла для плоских волн $\sim \exp(i \frac{\omega}{c} \mathbf{k}_i \mathbf{r} - i\omega t)$ имеют вид:

$$\mathbf{D}_i = -[\mathbf{k}_i \mathbf{H}_i] = -\mathbf{k}_i^{\times} \mathbf{H}_i, \quad \mathbf{H}_i = [\mathbf{k}_i \mathbf{E}_i] = \mathbf{k}_i^{\times} \mathbf{E}_i, \quad (\text{IV.3.5})$$

где \mathbf{k}_i^{\times} – тензор, дуальный вектору \mathbf{k}_i . Систему динамических уравнений в общем некомпланарном или анизотропном случае лучше выписать для векторов поля \mathbf{H}_i , которые поперечны волновым векторам в каждой плоской волне, согласно (IV.3.5). Из (IV.3.4), (IV.3.5) получаем

$$\begin{cases} \mathbf{H}_1 = -[\mathbf{k}_1 [\mathbf{k}_1 \mathbf{H}_1]] + [\mathbf{k}_1 \hat{\chi}_{11} [\mathbf{k}_1 \mathbf{H}_1]] + [\mathbf{k}_1 \hat{\chi}_{12} [\mathbf{k}_2 \mathbf{H}_2]], \\ \mathbf{H}_2 = -[\mathbf{k}_2 [\mathbf{k}_2 \mathbf{H}_2]] + [\mathbf{k}_2 \hat{\chi}_{22} [\mathbf{k}_2 \mathbf{H}_2]] + [\mathbf{k}_2 \hat{\chi}_{21} [\mathbf{k}_1 \mathbf{H}_1]]. \end{cases} \quad (\text{IV.3.6})$$

Учитывая соотношение $\mathbf{k}_i^{\times 2} = \mathbf{k}_i \circ \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_i^2$ (символ \circ соответствует внешнему произведению двух векторов - диаде) и поперечность \mathbf{H}_i , для изотропной среды, когда элементы χ_{ij} являются скалярами, получаем

$$\begin{cases} (\mathbf{1} - \mathbf{k}_1^2 + \chi_0 \mathbf{k}_1^2) \mathbf{H}_1 \cong (\mathbf{1} - \mathbf{k}_1^2 + \chi_0) \mathbf{H}_1 = \chi_h \mathbf{k}_1^{\times} \mathbf{k}_2^{\times} \mathbf{H}_2, \\ (\mathbf{1} - \mathbf{k}_2^2 + \chi_0 \mathbf{k}_2^2) \mathbf{H}_2 \cong (\mathbf{1} - \mathbf{k}_2^2 + \chi_0) \mathbf{H}_2 = \chi_h \mathbf{k}_2^{\times} \mathbf{k}_1^{\times} \mathbf{H}_1; \end{cases} \quad (\text{IV.3.7})$$

здесь мы учли, что с учетом малости преломления можно полагать $\mathbf{k}_1^2 \cong 1$, $\mathbf{k}_2^2 \cong 1$. Из (IV.3.7):

$$\mathbf{H}_2 = \chi_{\bar{h}} \frac{\mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_1^{\times}}{\mathbf{1} - \mathbf{\kappa}_2^2 + \chi_0} \mathbf{H}_1. \quad (\text{IV.3.8})$$

Подставляя (IV.3.8) в первое уравнение из системы (IV.3.7), получаем волновое уравнение:

$$\left\{ (\mathbf{1} - \mathbf{\kappa}_1^2 + \chi_0) - \frac{\chi_h \chi_{\bar{h}}}{(\mathbf{1} - \mathbf{\kappa}_2^2 + \chi_0)} \mathbf{\kappa}_1^{\times} \mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_1^{\times} \right\} \mathbf{H}_1 = 0. \quad (\text{IV.3.9})$$

Из характеристического уравнения:

$$\det \left\{ (\mathbf{1} - \mathbf{\kappa}_1^2 + \chi_0)(\mathbf{1} - \mathbf{\kappa}_2^2 + \chi_0) - \chi_h \chi_{\bar{h}} \mathbf{\kappa}_1^{\times} \mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_1^{\times} \right\} = 0. \quad (\text{IV.3.10})$$

мы можем определить собственные значения волновых векторов.

Для нахождения детерминанта в (IV.4.10) воспользуемся тензорным соотношением из [177]:

$$\det(\lambda - \alpha) = \lambda^3 - \lambda^2 \alpha_t + \lambda \bar{\alpha}_t - \det(\alpha). \quad (\text{IV.3.11})$$

В нашем случае $\lambda = \frac{(\xi^2 + 2\xi \sin \theta - \chi_0)(2\xi \sin \theta_h + \zeta - \chi_0)}{\chi_h \chi_{\bar{h}}}$, $\alpha = \mathbf{\kappa}_0^{\times} \mathbf{\kappa}_h^{\times} \mathbf{\kappa}_h^{\times} \mathbf{\kappa}_0^{\times}$.

Так как $\det(\mathbf{\kappa}_1^{\times} \mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_1^{\times}) = 0$ запишем выражение (IV.3.11) в виде:

$$\lambda(\lambda^2 - \lambda \alpha_t + \bar{\alpha}_t) = 0, \quad (\text{IV.3.12})$$

где, α_t - след матрицы α , $\bar{\alpha}$ - тензор взаимный к тензору α . Случай $\lambda = 0$ нас не интересует (распространение без взаимодействия). Преобразуем матрицу α :

$$\begin{aligned} \alpha &= \mathbf{\kappa}_1^{\times} \mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_2^{\times} \mathbf{\kappa}_1^{\times} = \\ &= (\mathbf{\kappa}_2 \circ \mathbf{\kappa}_1 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2))(\mathbf{\kappa}_1 \circ \mathbf{\kappa}_2 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)) = \\ &= \mathbf{\kappa}_2 \circ \mathbf{\kappa}_2 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)(\mathbf{\kappa}_2 \circ \mathbf{\kappa}_1 + \mathbf{\kappa}_1 \circ \mathbf{\kappa}_2) + (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 = \\ &= (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 + (\mathbf{\kappa}_2 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_1) \circ \mathbf{\kappa}_2. \end{aligned} \quad (\text{IV.3.13})$$

Воспользовавшись соотношениями из [177] $(\mathbf{a} \circ \mathbf{b})_t = \mathbf{a} \mathbf{b} = \mathbf{b} \mathbf{a}$,

$(\mathbf{A} \mathbf{a} + \mathbf{B} \mathbf{b})_t = \mathbf{A} \mathbf{a}_t + \mathbf{B} \mathbf{b}_t$, $a_t = 3a$, найдём след матрицы α :

$$\begin{aligned} \alpha_t &= (\mathbf{\kappa}_2 \circ \mathbf{\kappa}_2)_t - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)(\mathbf{\kappa}_2 \circ \mathbf{\kappa}_1)_t - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)(\mathbf{\kappa}_1 \circ \mathbf{\kappa}_2)_t + (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2_t = \\ &= \mathbf{\kappa}_2^2 + (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 \cong 1 + (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.3.14})$$

Поскольку тензор α в характеристическом уравнении присутствует в произведении с очень маленьким скалярным множителем $\chi_h \chi_{\bar{h}}$, в этом тензоре мы можем с учетом малости преломления полагать $\kappa_1^2 \cong 1$, $\kappa_2^2 \cong 1$. Взаимные тензоры обладают следующими свойствами [177] $\overline{\mathbf{a}^\times} = \mathbf{a} \circ \mathbf{a}$, $\overline{\mathbf{a}\mathbf{b}} = \overline{\mathbf{b}\mathbf{a}}$, $\overline{\mathbf{a}^\times} = \mathbf{a} \circ \mathbf{a}$, таким образом:

$$\begin{aligned} \overline{\alpha}_t &= \overline{(\kappa_1^\times \kappa_2^\times \kappa_2^\times \kappa_1^\times)_t} = \overline{((\kappa_2^\times \kappa_1^\times) (\kappa_1^\times \kappa_2^\times))_t} = \overline{(\kappa_1^\times \kappa_2^\times \kappa_2^\times \kappa_1^\times)_t} = \\ &= ((\kappa_1 \circ \kappa_1)(\kappa_2 \circ \kappa_2)(\kappa_2 \circ \kappa_2)(\kappa_1 \circ \kappa_1))_t = \\ &= \kappa_2^2 (\kappa_1 \kappa_2)^2 \kappa_1^2 \cong (\kappa_1 \kappa_2)^2 \end{aligned} \quad (\text{IV.3.15})$$

Учитывая преобразования (IV.3.14,15), запишем выражение (IV.3.12) как:

$$(\lambda^2 - \lambda(1 + (\kappa_1 \kappa_2)^2) + (\kappa_1 \kappa_2)^2) = (\lambda - 1)(\lambda - (\kappa_1 \kappa_2)^2) = 0. \quad (\text{IV.3.16})$$

В результате характеристическое уравнение разбивается на два

$$(\mathbf{1} - \kappa_1^2 + \chi_0)(\mathbf{1} - \kappa_2^2 + \chi_0) - \chi_h \chi_{\bar{h}} = 0, \quad (\text{IV.3.17})$$

$$(\mathbf{1} - \kappa_1^2 + \chi_0)(\mathbf{1} - \kappa_2^2 + \chi_0) - \chi_h \chi_{\bar{h}} (\kappa_1 \kappa_2)^2 = 0, \quad (\text{IV.3.18})$$

каждое из которых в общем случае является уравнением 4 степени относительно поправки на преломление $\xi = \eta - \sin \theta$, определяемой как

обычно вдоль нормали к поверхности \mathbf{q} , для волнового вектора κ_1 , так как

$$\kappa_1^2 = (\kappa_0 + \xi \mathbf{q})^2 = 1 + 2\xi \sin \theta + \xi^2, \quad (\text{IV.3.19})$$

$$\begin{aligned} \kappa_2^2 &= (\kappa_1 + \boldsymbol{\tau})^2 = \\ &= (\kappa_0 + \xi \mathbf{q})^2 + 2\boldsymbol{\tau}(\kappa_0 + \xi \mathbf{q}) + \boldsymbol{\tau}^2 = 1 + 2\xi \sin \theta_h + \xi^2 + \delta. \end{aligned} \quad (\text{IV.3.20})$$

где $\sin \theta_h = (\sin \theta + \boldsymbol{\tau} \mathbf{q})$ - угол выхода дифрагированной волны, $\delta = \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{\tau} + 2\kappa_0)$

- отклонение от точного угла Брэгга. Если в (IV.3.20) пренебречь ξ^2 (поскольку $\sin \theta_h$ достаточно велик) можно с достаточной точностью ограничиться решением уравнения (IV.4.2) третьей степени по ξ , но это не слишком упрощает компьютерное решение задачи.

Анализ корней уравнений (IV.3.17,18), показывает, что в случае отражения от полубесконечного кристалла для преломленных волн мы можем оставить только по одному решению для каждого уравнения. Для нахождения собственных векторов поля излучения \mathbf{H}_1^i , отвечающих каждому из двух уравнений (IV.3.17) и (IV.3.18) используем соотношение

$$\mathbf{H}_1^i \parallel \overline{(\lambda - \alpha)} \mathbf{d}, \quad (\text{IV.3.21})$$

где \mathbf{d} произвольный вектор. Соотношение (IV.4.21) непосредственно следует из свойств взаимных тензоров

$$\overline{\alpha\alpha} = \overline{\alpha\alpha} = |\alpha|. \quad (\text{IV.3.22})$$

С учетом $\det(\alpha) = 0$ алгоритм (IV.3.21) автоматически приводит к выполнению условия (IV.3.9), то есть дает правильные выражения для собственных векторов \mathbf{H}_1^i . Учитывая соотношения (IV.3.13,14), преобразуем взаимный тензор $\overline{(\lambda - \alpha)}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \overline{(\lambda - \alpha)} &= \lambda^2 - \lambda(\alpha_t - \alpha) + \overline{\alpha} = \\ &= \lambda^2 - \lambda\{(1 - (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)^2) - \mathbf{k}_1^\times \mathbf{k}_2^\times \mathbf{k}_2^\times \mathbf{k}_1^\times\} + (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)^2 \mathbf{k}_1 \circ \mathbf{k}_1 = \\ &= \lambda^2 - \lambda\{(1 - (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)^2) - \mathbf{k}_2 \circ \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_2 \circ \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_2 \circ \mathbf{k}_2 - \\ &\quad - (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_2 \circ \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_1 \circ \mathbf{k}_2) - (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)^2\} + (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)^2 \mathbf{k}_1 \circ \mathbf{k}_1. \end{aligned} \quad (\text{IV.3.23})$$

Согласно преобразованиям (IV.3.16) имеем два характеристических уравнения. В случае, когда $\lambda=1$, принимая во внимание преобразование (IV.3.23), запишем (IV.3.21) следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_1^\sigma \parallel \overline{(\lambda - \alpha)} \mathbf{d} &= \\ &= (\mathbf{k}_2 \circ \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_2 \circ \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_1 \circ \mathbf{k}_2 + (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)^2 \mathbf{k}_1 \circ \mathbf{k}_1) \mathbf{d} = \\ &= (\mathbf{k}_1 \mathbf{d})((-\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_2 + (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)^2 \mathbf{k}_1) + (\mathbf{k}_2 \mathbf{d})(\mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_1) = \\ &= (\mathbf{k}_1 \mathbf{d})(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)((\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - (\mathbf{k}_2 \mathbf{d})((\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) = \\ &= ((\mathbf{k}_1 \mathbf{d})(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2) - (\mathbf{k}_2 \mathbf{d}))((\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2), \end{aligned} \quad (\text{IV.3.24})$$

где $((\mathbf{k}_1 \mathbf{d})(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2) - (\mathbf{k}_2 \mathbf{d}))$ скалярный множитель. В нашем случае $\mathbf{k}_1^2 \cong 1$, таким образом $(\mathbf{k}_1 (\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2) - \mathbf{k}_2) \approx [\mathbf{k}_1 [\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2]]$, откуда следует, что

собственный вектор \mathbf{H}_1^σ , удовлетворяющий дисперсионному уравнению (IV.4.17), лежит в плоскости дифракционного отражения:

$$\mathbf{H}_1^\sigma \parallel [\mathbf{\kappa}_1^\sigma [\mathbf{\kappa}_1^\sigma \mathbf{\kappa}_2^\sigma]]. \quad (\text{IV.3.25})$$

Для векторов \mathbf{E}_1 имеем выражение, следующее из (IV.3.4, IV.3.5, IV.3.8):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1 &= (1 - \hat{\chi}_0) \mathbf{D}_1 - \hat{\chi}_h \mathbf{D}_2 = -(1 - \chi_0) [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{H}_1] + \chi_h [\mathbf{\kappa}_2 \mathbf{H}_2] = \\ &= -((1 - \chi_0) - \chi_h \chi_h \frac{\mathbf{\kappa}_2^\times \mathbf{\kappa}_2^\times}{\mathbf{1} - \mathbf{\kappa}_2^{(i)2} + \chi_0}) \mathbf{\kappa}_1^\times \mathbf{H}_1 \end{aligned} \quad (\text{IV.3.26})$$

Если выполняется (IV.3.17) и учитывая (IV.3.25), для \mathbf{E}_1^σ получаем:

$$\mathbf{E}_1^\sigma \parallel -((1 - \chi_0) - (\mathbf{1} - \mathbf{\kappa}_1^{\sigma 2} + \chi_0) \mathbf{\kappa}_2^{\sigma \times} \mathbf{\kappa}_2^{\sigma \times}) \mathbf{\kappa}_1^{\sigma \times} [\mathbf{\kappa}_1^\sigma [\mathbf{\kappa}_1^\sigma \mathbf{\kappa}_2^\sigma]]. \quad (\text{IV.3.27})$$

Так как

$$\begin{aligned} [\mathbf{\kappa}_1 [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2]] &\cong (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_1 - \mathbf{\kappa}_2 \\ \mathbf{\kappa}_1^\times [\mathbf{\kappa}_1 [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2]] &= \mathbf{\kappa}_1^\times ((\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_1 - \mathbf{\kappa}_2) = -[\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2] \\ -[\mathbf{\kappa}_2 [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2]] &\cong -\mathbf{\kappa}_1 + (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_2 \\ -\mathbf{\kappa}_2^\times [\mathbf{\kappa}_2 [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2]] &= -\mathbf{\kappa}_2^\times (-\mathbf{\kappa}_1 + (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_2) = [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2] \end{aligned} \quad (\text{IV.3.28})$$

получаем

$$\mathbf{E}_1^\sigma \parallel ((1 - \chi_0) + (\mathbf{1} - \mathbf{\kappa}_1^{\sigma 2} + \chi_0)) [\mathbf{\kappa}_1^\sigma \mathbf{\kappa}_2^\sigma] = (2 - \mathbf{\kappa}_1^{\sigma 2}) [\mathbf{\kappa}_1^\sigma \mathbf{\kappa}_2^\sigma] \cong [\mathbf{\kappa}_1^\sigma \mathbf{\kappa}_2^\sigma], \quad (\text{IV.3.29})$$

то есть векторы \mathbf{E}_1^σ перпендикулярны плоскости рассеяния - это σ -поляризация излучения.

В случае, когда $\lambda = (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2$ (см. (IV.3.18)):

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_1^\pi \parallel (\overline{\lambda - \alpha}) \mathbf{d} &= (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{d}) (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 (\mathbf{\kappa}_1 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_2) + \\ &+ (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 (\mathbf{\kappa}_2 \mathbf{d}) (\mathbf{\kappa}_2 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_1) - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 (1 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2) \mathbf{d} = \\ &= (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 \{ (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{d}) (\mathbf{\kappa}_1 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_2) + \\ &+ (\mathbf{\kappa}_2 \mathbf{d}) (\mathbf{\kappa}_2 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2) \mathbf{\kappa}_1) - (1 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2) \mathbf{d} \} = \\ &= (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 \{ (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{d}) [\mathbf{\kappa}_2 [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2]] - (\mathbf{\kappa}_2 \mathbf{d}) [\mathbf{\kappa}_1 [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2]] - (1 - (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2) \mathbf{d} \} = \\ &= (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2)^2 \{ (\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{d}) \mathbf{\kappa}_2^\times - (\mathbf{\kappa}_2 \mathbf{d}) \mathbf{\kappa}_1^\times + \mathbf{d} \circ [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2] \} [\mathbf{\kappa}_1 \mathbf{\kappa}_2], \end{aligned} \quad (\text{IV.3.30})$$

здесь мы пользовались следующими соотношениями:

$[\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2][\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2] = \mathbf{k}_1^2 \mathbf{k}_2^2 - (\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2)^2 \cong 1 - (\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2)^2$. Так как $\mathbf{d} \circ [\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2] = \mathbf{d} \circ \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2^\times$ преобразуем выражение в фигурных скобках из (IV.4.30) следующим образом:

$$\begin{aligned} & (\mathbf{k}_1 \mathbf{d}) \mathbf{k}_2^\times - (\mathbf{k}_2 \mathbf{d}) \mathbf{k}_1^\times - \mathbf{d} \circ [\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2] = (\mathbf{k}_1 \mathbf{d}) \mathbf{k}_2^\times - (\mathbf{k}_2 \mathbf{d}) \mathbf{k}_1^\times - \mathbf{d} \circ \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2^\times = \\ & = ((\mathbf{k}_1 \mathbf{d}) - \mathbf{d} \circ \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2^\times - (\mathbf{k}_2 \mathbf{d}) \mathbf{k}_1^\times = -\mathbf{k}_1^\times \mathbf{d}^\times \mathbf{k}_2^\times - \mathbf{k}_1^\times (\mathbf{k}_2 \mathbf{d}) = -\mathbf{k}_1^\times (\mathbf{k}_2 \circ \mathbf{d}) = \quad (\text{IV.3.31}) \\ & = -[\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2] \circ \mathbf{d}. \end{aligned}$$

Окончательно, запишем выражение (IV.3.30):

$$\mathbf{H}_1^\pi \parallel -(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2)^2 (\mathbf{d} [\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2]) [\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2], \quad (\text{IV.3.32})$$

где $((\mathbf{k}_1 \mathbf{d})(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) - (\mathbf{k}_2 \mathbf{d}))$ скалярный множитель. Таким образом, собственный вектор \mathbf{H}_1^π , удовлетворяющий дисперсионному уравнению (IV.3.18), перпендикулярен плоскости рассеяния:

$$\mathbf{H}_1^\pi \parallel [\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]. \quad (\text{IV.3.33})$$

Из (IV.3.26), учитывая (IV.3.18), для \mathbf{E}_1^π получаем:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1^\pi \parallel & -((1 - \chi_0) - \frac{\mathbf{1} - \mathbf{k}_1^{\pi 2} + \chi_0}{(\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi)^2} \mathbf{k}_2^{\pi \times} \mathbf{k}_2^{\pi \times}) \mathbf{k}_1^{\pi \times} [\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi] = \quad (\text{IV.3.34}) \\ & = -(1 - \chi_0) [\mathbf{k}_1^\pi [\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]] + \beta [\mathbf{k}_2^\pi [\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]] \end{aligned}$$

$(\beta = \frac{\mathbf{1} - \mathbf{k}_1^{\pi 2} + \chi_0}{(\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi)})$, так как

$$\begin{aligned} & [\mathbf{k}_1 [\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2]] \cong (\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 \\ & \mathbf{k}_2^\times [\mathbf{k}_1 [\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2]] = \mathbf{k}_2^\times ((\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) = -(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) [\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2], \quad (\text{IV.3.35}) \\ & -(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2^\times [\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2] \cong (\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) (\mathbf{k}_2 (\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2) - \mathbf{k}_1) \end{aligned}$$

то есть вектор \mathbf{E}_1^π лежит в плоскости рассеяния (π поляризация излучения).

Граничная задача для нахождения амплитуд отраженных и дифрагированных волн в общем случае, с учетом того, что дифрагированные

§ 4. Динамическая теория резко асимметричной дифракции в компланарном случае.

В случае компланарной геометрии плоскости зеркального и дифракционного отражения совпадают, все волновые векторы и вектор обратной решетки лежат в этой плоскости, их векторное произведение (для разноименных) дает вектор перпендикулярный плоскости рассеяния, а тройное векторное произведение возвращает этот вектор в плоскость рассеяния. Таким образом, для σ -поляризации падающей волны все векторы поля \mathbf{E} (IV.3.36) перпендикулярны плоскости рассеяния (IV.3.29) и уже являются тангенциальными (направлены по оси x), а соответствующие им векторы поля \mathbf{H} (см. (IV.3.25)) лежат в плоскости рассеяния и для решения граничной задачи их надо спроектировать на ось y . Вводя единичные векторы \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y и учитывая, что и в вакууме $\mathbf{H}_i = [\mathbf{k}_i \mathbf{E}_i]$ перепишем два первых уравнения системы (IV.3.36) в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\mathbf{e}_y[\mathbf{k}_0 \mathbf{E}_0]) + (\mathbf{e}_y[\mathbf{k}_R \mathbf{E}_R]) = C^\sigma (\mathbf{e}_y[\mathbf{k}_1^\sigma [\mathbf{k}_1^\sigma \mathbf{k}_2^\sigma]]) + C^\pi (\mathbf{e}_y[\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]), \\ (\mathbf{e}_x \mathbf{E}_0) + (\mathbf{e}_x \mathbf{E}_R) = C^\sigma (\mathbf{e}_x [\mathbf{k}_1^\sigma \mathbf{k}_2^\sigma]) + \\ \quad \vdots \quad + C^\pi (\mathbf{e}_x (-(1 + \chi_0) [\mathbf{k}_1^\pi [\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]] + \beta [\mathbf{k}_2^\pi [\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]])). \end{array} \right. \quad (\text{IV.4.1})$$

Введем обозначения $(\mathbf{e}_x \mathbf{E}_0) = E_{0x}$, $(\mathbf{e}_x \mathbf{E}_R) = E_{0R}$, $E_{1x} = C^\sigma (\mathbf{e}_x [\mathbf{k}_1^\sigma \mathbf{k}_2^\sigma])$ и, учитывая, что

$$(\mathbf{e}_y[\mathbf{k}_0 \mathbf{E}_0]) = ([\mathbf{e}_y \mathbf{k}_0], \mathbf{E}_0) = \sin \theta (\mathbf{e}_x \mathbf{E}_0) = \sin \theta E_{0x},$$

$$(\mathbf{e}_y[\mathbf{k}_R \mathbf{E}_R]) = -\sin \theta E_{0R},$$

$$(\mathbf{e}_y[\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]) = 0, (\mathbf{e}_x [\mathbf{k}_1^\pi [\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]]) = 0, (\mathbf{e}_x [\mathbf{k}_2^\pi [\mathbf{k}_1^\pi \mathbf{k}_2^\pi]]) = 0, \quad (\text{IV.4.2})$$

а

$$\begin{aligned} C^\sigma (\mathbf{e}_y[\mathbf{k}_1^\sigma [\mathbf{k}_1^\sigma \mathbf{k}_2^\sigma]]) &= C^\sigma ([\mathbf{e}_y \mathbf{k}_1^\sigma], [\mathbf{k}_1^\sigma \mathbf{k}_2^\sigma]) = \\ &= C^\sigma (\sin \theta + \xi^\sigma) (\mathbf{e}_x [\mathbf{k}_1^\sigma \mathbf{k}_2^\sigma]) = C^\sigma (\sin \theta + \xi^\sigma) E_{1x} \end{aligned} \quad (\text{IV.4.3})$$

граничную задачу для σ -поляризации в компланарной геометрии получаем для преломленной и отраженной волн (учитывая, что для дифракционного

отражения в рассматриваемой резко асимметричной схеме только один корень дисперсионного уравнения (IV.3.17) имеет смысл) в привычном (для френелевского отражения) виде:

$$\begin{cases} E_{0x} + E_{Rx} = E_{1x}^\sigma, \\ \sin \theta (E_{0x} - E_{Rx}) = (\sin \theta + \xi^\sigma) E_{1x}^\sigma. \end{cases} \quad (\text{IV.4.4})$$

Амплитуда дифрагированной волны E_2 в кристалле связаны с амплитудой проходящей волны E_1 соотношением, следующим из скалярных динамических уравнений для σ - поляризации E-поля

$$\begin{cases} (1 + \chi_0)E_1 + \chi_h E_2 = \hat{\mathbf{k}}_1^2 E_1, \\ (1 + \chi_0)E_2 + \chi_{\bar{h}} E_1 = \hat{\mathbf{k}}_2^2 E_2; \end{cases} \quad (\text{IV.4.5})$$

то есть

$$E_2^\sigma = -\frac{1 - \mathbf{k}_1^{\sigma 2} + \chi_0}{\chi_h} E_1^\sigma = -\frac{\chi_{\bar{h}}}{1 - \mathbf{k}_2^{\sigma 2} + \chi_0} E_1^\sigma, \quad (\text{IV.4.6})$$

Для дифрагированной волны E_2 преломление не существенно, поскольку волновой вектор дифрагированной волны образует достаточно большой угол с поверхностью, так что можно положить $E_D = E_2^\sigma$ на поверхности. С учетом (IV.4.6) это полностью решает задачу вычисления амплитуды дифрагированной волны как функцию угла скольжения падающего излучения θ и нахождения ее экстремума.

§ 5. Моделирование спектральной зависимости положения максимума дифракционного отражения в условия резко асимметричной дифракции

Численное моделирование мы провели для плёнки YFe_2 вблизи L_3 края поглощения Y ($E_{\text{ph}}=2071 - 2095$ эВ, $\lambda=0.5986 - 0.5918$ нм). Для отражения от кристаллических плоскостей (111) с межплоскостным расстоянием $d=0.4255$ нм для рассматриваемого интервала длин волн идеальный угол

Брэгга составляет $44.71^\circ - 44.06^\circ$. Для того, чтобы дифракция возникла при скользящем угле падения, мы выбрали угол $\psi=43.9^\circ$. Спектральные зависимости реальной и мнимой части восприимчивости $\chi_0(E_{ph})$ мы взяли из работы [118].

Фурье компоненты $\chi_{h,\bar{h}}(E_{ph})$ вычислялись для структуры C15 ($Fd\bar{3}mO_h^7$) с использованием [198]. Это кубическая структура с параметром ячейки 0.737 нм. Объем элементарной ячейки $\Omega = 0.4003 \text{ нм}^3$. Элементарная ячейка включает 8 атомов иттрия в положении 8a и 16 атомов железа в положении 16d рис 4.5.1.

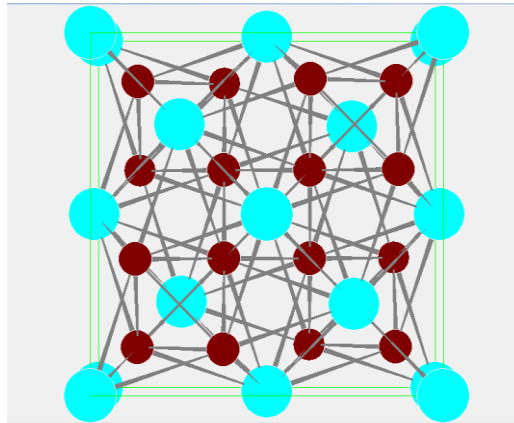


Рис 4.5.1. Изображение элементарной ячейки исследуемой структуры YFe_2 (C15) полученное с помощью [192]. Атомы Y изображены светло-голубым цветом (большие кружки), атомы Fe коричневым (маленькие кружки).

Учитывая, что объемная плотность атомов $\rho^A = n^A / \Omega$ где n^A - количество атомов сорта A в элементарной ячейке вычисление $\chi_h, \chi_{\bar{h}}$ проведём по формуле:

$$\chi_h = -\frac{\lambda^2}{\pi} r_0 \left(\frac{f^Y(\theta, E_{ph})}{\Omega} \sum_{j=1}^8 e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} + \frac{f^{Fe}(\theta, E_{ph})}{\Omega} \sum_{j=1}^{16} e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} \right) \quad (IV.5.1)$$

Структурный фактор для атомов иттрия получаем из выражения

$$\sum_{j=1}^8 e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} ;$$

Координаты атома в кристаллической решётке x, y, z	$e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$
0 0 0	1
0 0.5 0.5	1
0.5 0.5 0	1
0.5 0 0.5	1
0.75 0.25 0.75	-i*1
0.25 0.25 0.25	-i*1
0.25 0.75 0.75	-i*1
0.75 0.75 0.25	-i*1
	$\Sigma = 4 - i*4$

Структурный фактор для атомов железа $\sum_{j=1}^{16} e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$:

Координаты атома в кристаллической решётке x, y, z	$e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}$
0.625 0.625 0.625	$\sqrt{2}/2 - i* \sqrt{2}/2$
0.375 0.875 0.125	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$
0.875 0.125 0.375	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$
0.125 0.375 0.875	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$
0.875 0.375 0.125	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$
0.375 0.125 0.875	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$
0.125 0.875 0.375	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$
0.625 0.125 0.125	$\sqrt{2}/2 - i* \sqrt{2}/2$
0.375 0.375 0.625	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$
0.875 0.625 0.875	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$
0.875 0.875 0.625	$-\sqrt{2}/2 + i* \sqrt{2}/2$

0.375 0.625 0.375	$-\sqrt{2}/2 + i^* \sqrt{2}/2$
0.125 0.625 0.125	$\sqrt{2}/2 - i^* \sqrt{2}/2$
0.625 0.375 0.375	$-\sqrt{2}/2 + i^* \sqrt{2}/2$
0.625 0.875 0.875	$-\sqrt{2}/2 + i^* \sqrt{2}/2$
0.125 0.125 0.625	$\sqrt{2}/2 - i^* \sqrt{2}/2$
	$\Sigma = -5.65685 + i^* 5.65685$

Вблизи края поглощения атомарный фактор рассеяния:

$$f = f_0 + f' - if'', \quad (\text{IV.5.2})$$

где f' и f'' - поправки на аномальную дисперсию. Атомный фактор рассеяния f_0 определяется в единицах амплитуды рассеяния одним электроном. Если бы электроны атома были сосредоточены в одной точке, то f_0 было бы равно атомному номеру атома Z . Однако размеры атома соизмеримы с длиной волны рентгеновских лучей, поэтому между волнами, рассеянными отдельными электронами, возникает разность фаз. Эта разность фаз равна нулю лишь при $2\theta=0$. Поэтому значение f_0 уменьшается с ростом угла θ , а при $\theta \rightarrow 0$ стремится к Z [193]. Подробнее этот вопрос разобран в статье [199]. Согласно [200] структурный фактор атома определяется формулой

$$f_0 = \int p(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) d^3r, \quad (\text{IV.5.3})$$

где $\mathbf{q}=2\kappa\sin(\theta)$,

$$p(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^Z p_j(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^Z \psi_j^*(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}) \quad (\text{IV.5.4})$$

суммарная электронная плотность, $\psi_j(\mathbf{r})$ - волновая функция j -го электрона. В работе [201] были рассчитаны значения f_0 с использованием волновых функций, полученных методом Хатри-Фока. Приведём рассчитанную в этой статье зависимость $f_0(\theta)$ для атомов Y и Fe при энергии рассеиваемого излучения $E_{\text{ph}}=2082.58$ эВ (длина волны $\lambda=0.5953$ нм) - Рис.4.3.2.

В расчетах брэгговского отражения (111) в резко асимметричной геометрии по динамической теории мы будем использовать коэффициент уменьшения энергетических зависимостей амплитуд рассеяния (приведенных на рис. 4.5.2 из работы [194]) для рассеяния на угол 2θ соответственно этому графику. Атомарный фактор рассеяния на нулевой угол для иттрия и железа мы брали из работы [118]. Для вклада в восприимчивость от атомов иттрия получаем уменьшающий коэффициент 0.884, и для вклада от атомов железа - 0.886. Для нашей задачи, хотя вблизи краев поглощения этот подход является достаточно грубым приближением, такая оценка Фурье компонент восприимчивости $\chi_h, \chi_{\bar{h}}$ достаточна. Более корректно использовать расчеты атомных факторов рассеяния вблизи краев поглощения из первых принципов, например, по программе FDMNES.

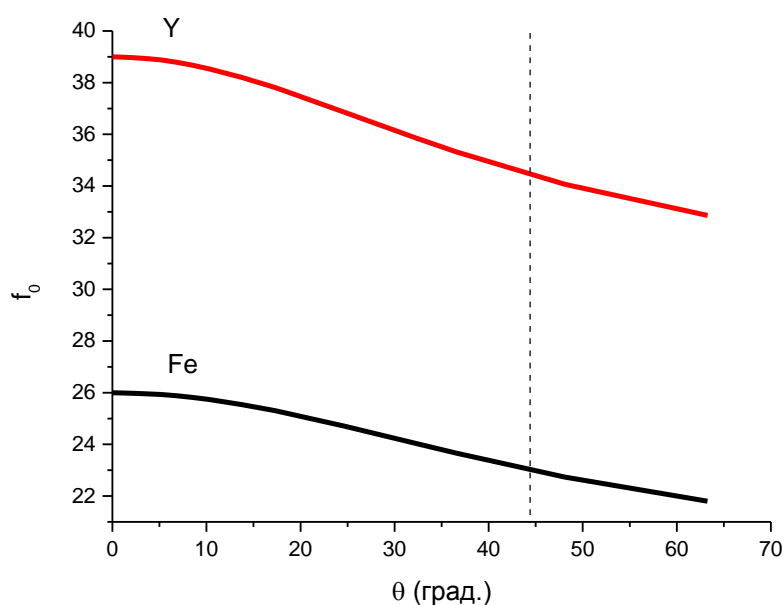


Рис.4.5.2 Зависимость $f_0(\theta)$ для атомов Y и Fe для излучения с длиной волны $\lambda = 0.595$ нм. Данные из работы [194]. Для отражения (111) угол Брэгга отмечен пунктиром.

Уравнение (IV.3.17) решалось с помощью программного пакета Wolfram Mathematica, который дал аналитическое решение уравнения 4-ой

степени (слишком громоздкое, чтобы его здесь привести), и далее численный результат по вводимым параметрам. Результат для энергии $E_{ph}=2082$ эВ приведен на Рис. 4.5.2.

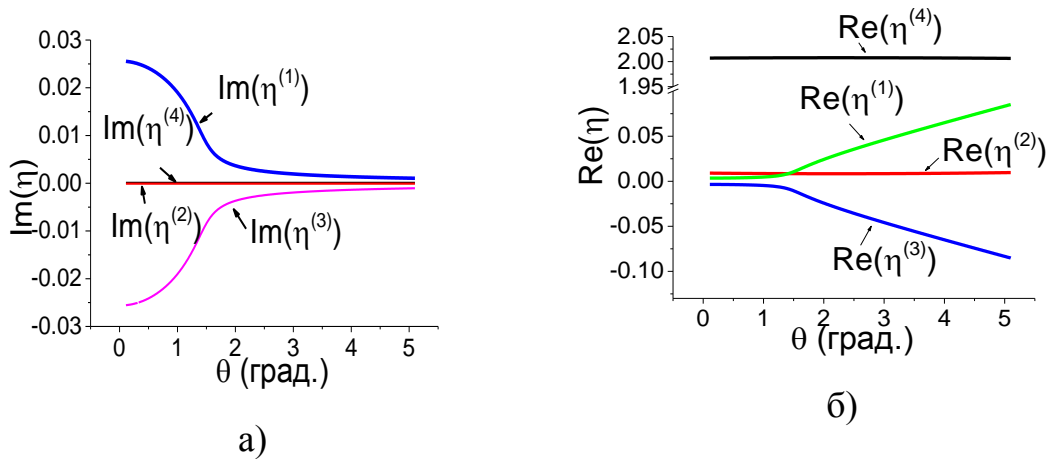


Рис. 4.5.2. Корни уравнения (IV.4.17) для энергии фотонов $E_{ph}=2082$ эВ.

Наглядно показано, что только один корень $\hat{\mathbf{k}}_1^{(1)}$ в нашей геометрии имеет смысл. Волновой вектор $\hat{\mathbf{k}}_1^{(2)}$ имеет небольшую отрицательную мнимую часть при положительной реальной части нормальной составляющей и не имеет физического смысла; для $\hat{\mathbf{k}}_1^{(3)}$ волна направлена из среды, эта волна возбуждается в пленке при наличии нижней границы, $\hat{\mathbf{k}}_1^{(4)}$ имеет слишком большую реальную часть, соответствующая дифрагированная волна согласно (IV.4.5) пренебрежимо мала. Отметим, что $\eta^{(1)}$ 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 (IV.2.8) и по динамической теории - (Рис. 4.5.3). Расчеты по нашим формулам сравнивались с расчетами

по теории, изложенной в [194], результаты совпали.

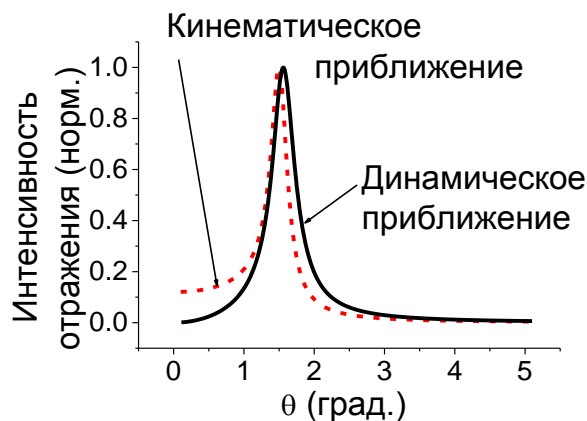


Рис. 4.5.3. Кривые дифракционного отражения (111) (в функции угла скольжения θ) от кристалла YFe_2 для $E_{ph} = 2082$ eV, рассчитанные по формуле (IV.3.8) и по динамической теории (IV.3.17)-(IV.4.5) в условиях резко асимметричной дифракции для $\psi = 43.9^\circ$.

Видно, что форма дифракционного максимума в кинематическом и динамическом приближении несколько различается, но положение брэгговского максимума θ_m в обоих приближениях почти совпадает. В нашей задаче интересно именно положение брэгговского максимума θ_m в функции энергии фотонов E_{ph} , представленное на Рис. 4.5.4-4.5.5.

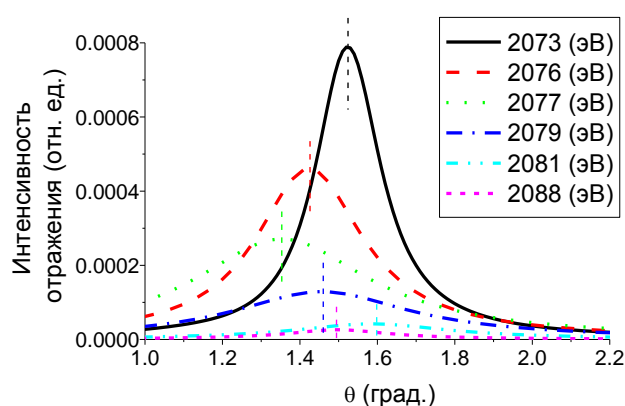


Рис. 4.5.4. Кривые дифракционного отражения от кристалла YFe_2 для нескольких энергий фотонов вблизи L_3 края поглощения Y . Расчет по динамической теории. Вертикальные черточки отмечают положение максимума, которое представлено на Рис. 4.5.4 в функции энергии фотонов.

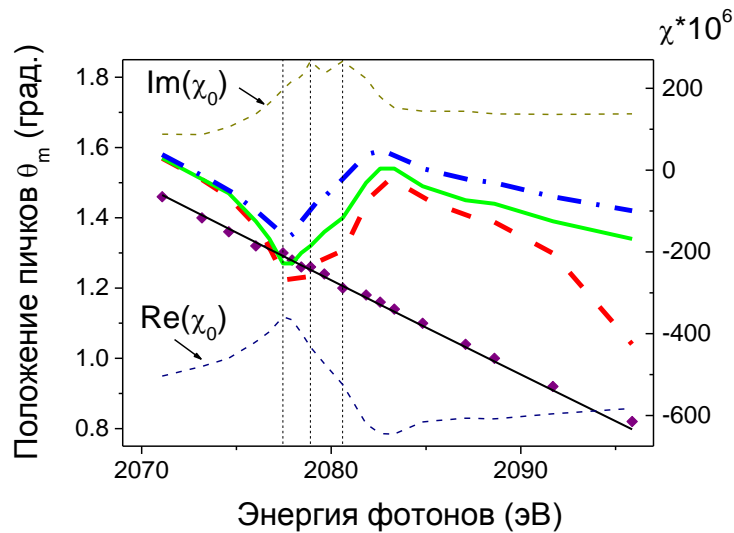


Рис. 4.5.4. Расчет изменения угла скольжения θ_m , при котором должен наблюдаться максимум брэгговского пика от идеального кристалла YFe_2 , в функции энергии фотонов вблизи L_3 края поглощения Y : по обычному закону Вульфа-Брэгга (IV.2.1) (тонкая черная линия), по обобщенной формуле (IV.2.5) (пунктирная красная линия), с использованием функции Лауэ (IV.2.8) (зеленая жирная линия) и по динамической теории (штрих-пунктирная синяя линия). Точками представлены экспериментальные значения положения пиков для образца $Nb(4 \text{ нм})/YFe_2(40 \text{ нм } \langle 110 \rangle)/Fe(1.5 \text{ нм})/Nb(50 \text{ нм})/сапфир$. Для сравнения на этом же рисунке приведены зависимости $Re(\chi_0)$, $Im(\chi_0)$ (правая шкала).

Расчетные зависимости угла скольжения θ_m , при котором должен наблюдаться максимум брэгговского пика от идеального кристалла YFe_2 , в разных приближениях теории дифракции, хотя и не совпадают, но все демонстрируют яркую зависимость от преломления. Интервал отклонения θ_m от линейной зависимости в области резонанса ~ 0.5 град., что является вполне измеряемой величиной. Характер изменения $\theta_m(E_{ph})$ хорошо коррелирует с поведением $Re\chi(E_{ph})$. Теоретические расчеты демонстрируют, что подобная зависимость реально может быть использована для восстановления оптических констант.

Обнаруженные в эксперименте слабые по сравнению с теорией проявления эффекта преломления на поведение $\theta_m(E_{ph})$ объясняется тем, что эксперимент не предполагал исследование дифракционных эффектов от имеющегося образца. Наблюдаемая слабая зависимость положения пиков от резонансного преломления была случайным артефактом. Образец (см. Рис. 4.1.1) не был монокристаллическим вблизи поверхности. Пленка YFe_2 была закрыта слоем Nb, и при скользящих углах сигнал мог быть получен только из интерфейса Nb/ YFe_2 . Верхний слой Nb 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 иметь угол с поверхностью $\sim 35.3^\circ$, но в этом случае при скользящих углах мы бы не имели брэгговского отражения для межплоскостного расстояния $d=0.4255$ нм. Так что случайно зафиксированные брэгговские отражения могут быть объяснены как искажения 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.

Наибольший интерес в современных синхротронных исследованиях представляют магнитные эффекты в рассеянии, наблюдаемые вблизи краев поглощения. С учетом магнитного рассеяния рентгеновского излучения восприимчивости 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 скользящем падении и ориентации намагниченности в плоскости

рассеяния (L-МОКЕ геометрия), для волн круговой поляризации оказывается возможным использовать «скалярную» теорию отражения [130]. При этом в расчетах следует использовать восприимчивость с «магнитными добавками» $\chi \pm \Delta\chi_{\text{magn}}$, где знаки \pm соответствуют правой и левой круговой поляризации падающего излучения.

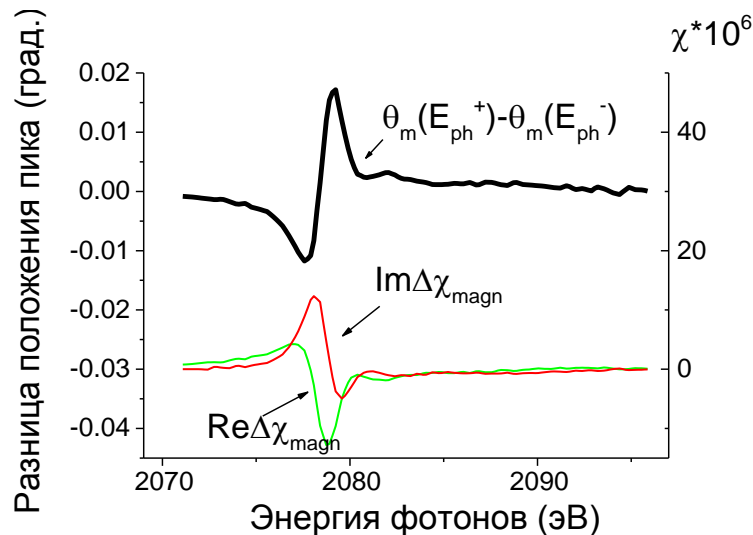


Рис. 4.5.6. Разница положения брэгговского пика для правой и левой круговой поляризации падающего излучения, рассчитанная для монокристалла YFe_2 вблизи L_3 края поглощения Y . Для сравнения на этом же графике приведены спектральные зависимости $\Delta\chi_{\text{magn}}(E_{\text{ph}})$ из работы [118] (правая шкала).

Влияние «магнитного» преломления на положение дифракционных максимумов рассчитано для значений $\Delta\chi_{\text{magn}}(E_{\text{ph}})$ из работы [118]. Полученная зависимость разницы в положении брэгговского пика для двух круговых поляризаций $[\theta_m(E_{\text{ph}}^+) - \theta_m(E_{\text{ph}}^-)]$ воспроизводит в общих чертах (обращенную) форму реальной части $\Delta\chi_{\text{magn}}(E_{\text{ph}})$ (Рис. 4.5.6). Результат, представленный на Рис. 4.5.6, демонстрирует, что зависимость $[\theta_m(E_{\text{ph}}^+) - \theta_m(E_{\text{ph}}^-)]$ вполне наблюдаема даже для таких небольших значений наведенных магнитных моментов, как это имеет место на атомах Y в структуре YFe_2 .

Основные результаты Главы IV:

Дано объяснение аномальных всплесков интенсивности на экспериментальных кривых выхода флуоресцентного излучения от образца Nb(4 нм)/YFe₂(40 нм <110>)/Fe(1.5 нм)/Nb(50 нм)/сапфир, измеренных для набора энергий вблизи L₃ края поглощения Y. Наблюдаемые пики оказались дифракционными максимумами отражения падающего излучения с длиной волны $\lambda=0.591 - 0.598$ нм от кристаллической структуры YFe₂.

Рассмотрено влияние эффектов преломления на положение дифракционного максимума в резко-асимметричной схеме дифракции в рамках кинематической теории.

Развита ковариантная динамическая теория резко асимметричной в общем случае некомпланарной дифракции для идеального полубесконечного кристалла.

Проведен расчет влияния эффектов преломления на положение дифракционного максимума отражения от идеального кристалла YFe₂ в рамках динамической теории дифракции для компланарной резко-асимметричной схемы.

Проведенные расчеты по кинематической и динамической теории продемонстрировали, что эффект преломления на положение дифракционного максимума в условиях резко асимметричной дифракции весьма значителен для идеальной структуры и может использоваться для измерения оптических характеристик для жесткого рентгеновского излучения.

Расчет положения дифракционного пика для правой и левой круговой поляризации с учетом магнитной добавки к восприимчивости вблизи краев поглощения показал, что и магнитные добавки к рентгеновской восприимчивости могут быть определены в условиях резко асимметричной дифракции.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Получены общие формулы, описывающие отражение от системы анизотропных слоев, в кинематическом приближении, применено вдали от критического угла полного отражения. Показано, что использование введенного матричного показателя преломления (или тензора нормальной рефракции), описывающего изменение поляризации излучения для проходящей и отраженной волн, в ряде случаев необходимо для правильного расчета спектров асимметрии отражения по знаку круговой поляризации. Проведено сравнение скорости вычисления спектров и угловых зависимостей коэффициента отражения по точной теории и в кинематическом приближении и показано, что в последнем случае она увеличивается на порядок.
2. Проведены конкретные расчеты угловых зависимостей и спектров асимметрии отражения по знаку круговой поляризации вблизи L_3 края поглощения диспрозия от многослойной структуры, характеризующейся спиральным упорядочением магнитных слоев и продемонстрировано, что «магнитные добавки» в матричном показателе преломления могут быть существенны даже для относительно больших углов скольжения.
3. Дано объяснение искажений формы спектров поглощения вблизи краев поглощения, измеренных по полному выходу электронов при разных скользящих углах падающего излучения: показано, что в основе наблюдаемых эффектов лежит резонансная модуляция возбуждающего поля излучения (стоячие рентгеновские волны) в слоистой среде, а также возникновение резонансной зависимости для процессов нерезонансного поглощения вследствие такой модуляции. Продемонстрировано, что сигнал от нерезонансного фона играет доминирующую роль в экспериментально наблюдаемых искажениях

ПВЭ спектров поглощения от образца GaInP при малых углах скольжения падающего излучения.

4. Развита теория резко асимметричной дифракции в кинематическом и динамическом приближениях в общем некомпланарном случае. Проведен расчет положения дифракционного пика (111) при отражении от кристалла YFe₂ при скользящих углах падения. Показано, что резко асимметричная дифракция может быть хорошим методом для определения магнитооптических констант вблизи краев поглощения в жестком диапазоне длин волн рентгеновского излучения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Пакет программ AM_FLU

Пакет программ помещен в открытый доступ на сайте КФТТ,
а также в облачном хранилище Dropbox [A14]

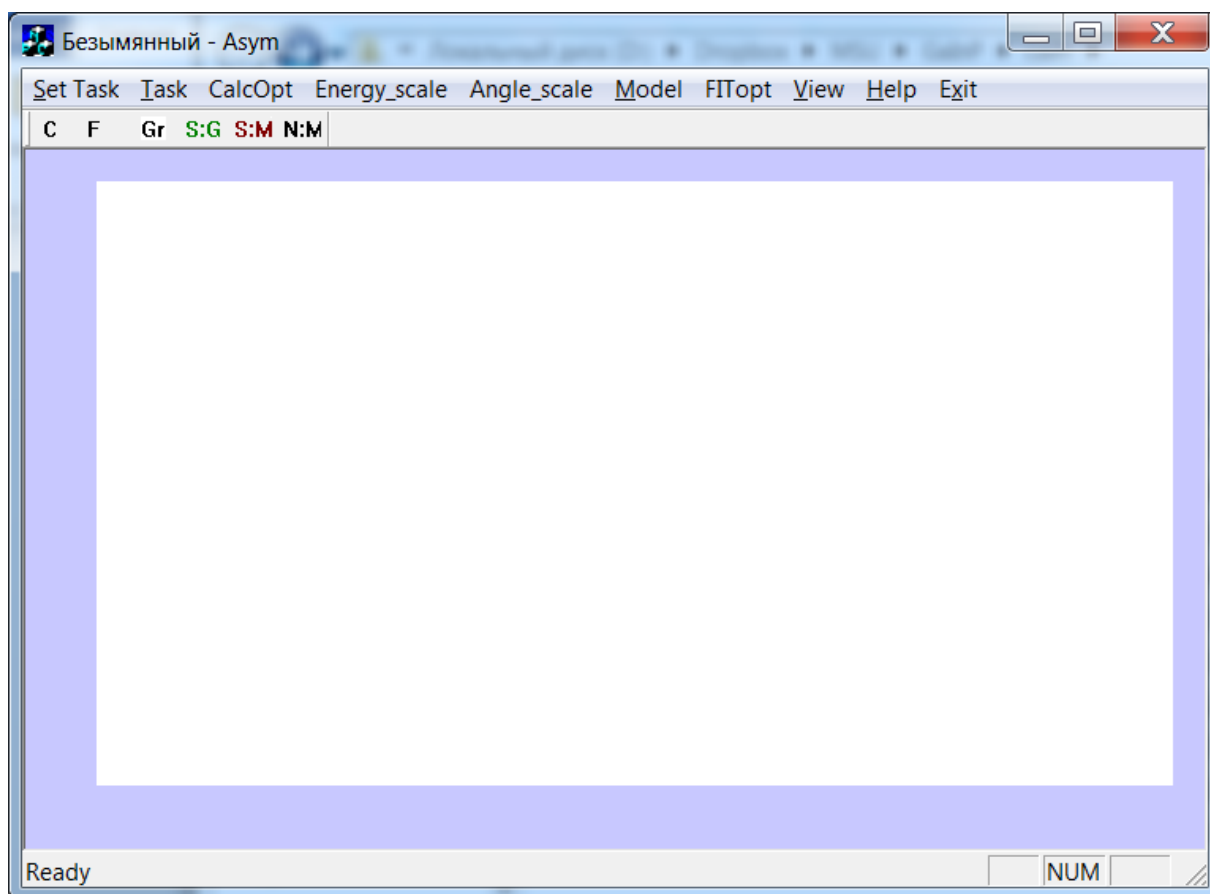
§ 1. Общее описание.

Пакет программ AM_FLU предназначен для обработки экспериментальных данных, получаемых в условиях отражения от многослойных структур по полному выходу электронов. Он включает два исполняемых файла, запускающих графический интерфейс «ASYM.exe» и вычислительную программу «am_flu.exe», а также набор текстовых файлов, задающих режим работы пакета программ AM_FLU и описывающих параметры структуры (для примера «model.inf»), характеристики структуры (в директории DAT для примера приложены табличные энергетические зависимости восприимчивости GaInP «GAINP.dat» и резонансной добавки вблизи $L_{2,3}$ краев поглощения «RES.dat»), параметры задачи (для примера «START_A.inp»), параметры расчетов (для примера «OptFluspc.inp»), параметры графики (для примера «AXIS_E.inp, AXIS_A.inp»), файл экспериментальных зависимостей ПВЭ (для примера «Em794c.DAT» представляет шесть энергетических зависимостей ПВЭ вблизи $L_{2,3}$ краев поглощения для различных углов скольжения), параметров фитирования «FIT.inp». Опционально пакет AM_FLU может содержать файл со значениями скользящего угла (для примера «Energy.inp») и файл со значениями энергии фотонов (для примера «Angle.inp»)

§ 2. Меню графического интерфейса «ASYM».

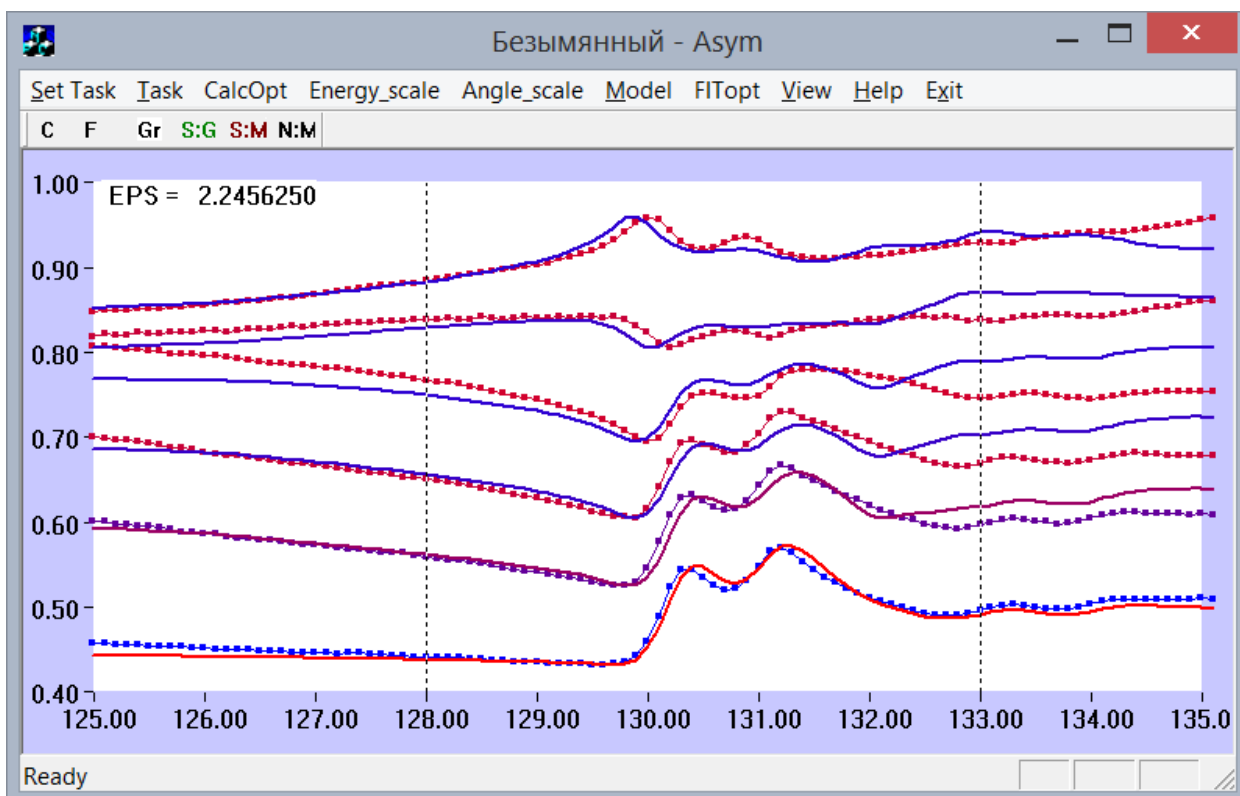
Запуск задачи осуществляется файлом «ASYM.exe». Интерфейс «ASYM» реализован для компилятора языка C++. Он представляет собой

графический интерфейс, в котором можно откорректировать все файлы, используемые в этой задаче, а также сравнить полученные теоретические и используемые экспериментальные спектры или угловые зависимости в графическом виде. Для начала работы необходимо отредактировать файл параметров задачи «START_A.inp», нажав кнопку «Set Task» (содержание см. далее).



В дальнейшем доступ к файлу параметров задачи будет осуществляться кнопкой «Task» в верхней панели. После закрытия файла «START_A.inp» автоматически открывается файл параметров осей «AXIS_E.inp» или «AXIS_A.inp» в зависимости от инструкции, указанных в файле «START_A.inp». Файл параметров осей можно будет в дальнейшем запустить, щёлкнув правой кнопкой мыши на пустом месте интерфейса. После закрытия файла параметров осей в графическом окне появляются экспериментальные зависимости, которые предполагается обработать, если

сравнение с экспериментом выбрано в файле «START_A.inp» и соответствующий файл с данными имеется в рабочей директории. Указанные в «START_A.inp» файлы можно будет отредактировать: кнопка «CalcOpt» открывает файл параметров счёта, кнопка «Energy_scale» открывает файл со значениями энергии фотонов, кнопка «Angle_scale» - файл со значениями скользящего угла, кнопка «Model» - файл параметров модели, кнопку «FITopt» - файл параметров фитирования.

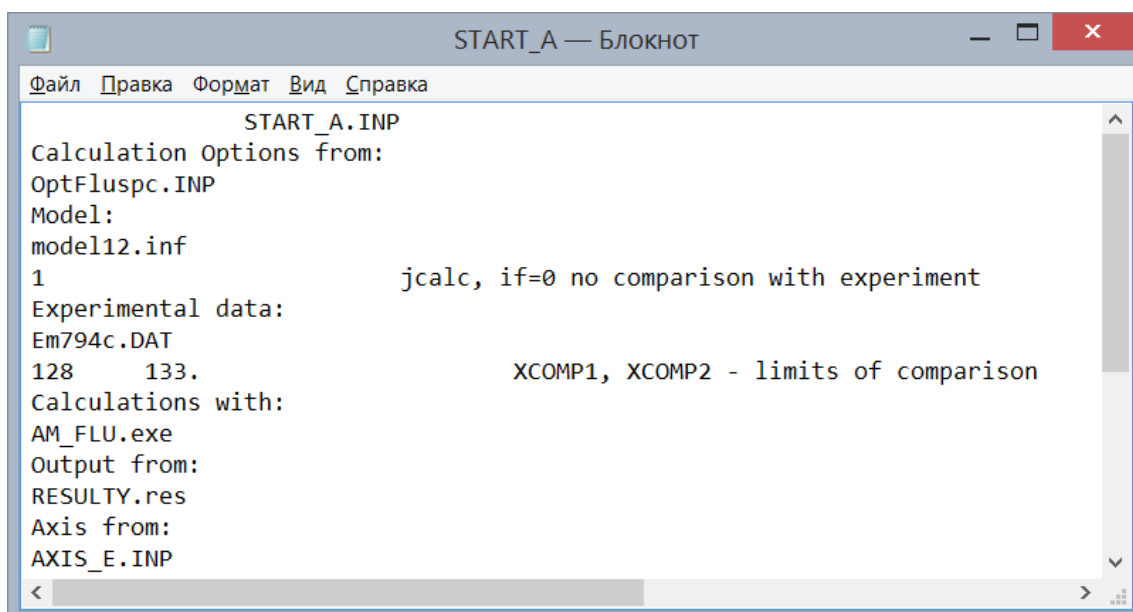


Для расчёта теоретических спектров ПВЭ необходимо нажать кнопку «С» на второй сверху панели. Эта кнопка запускает исполняемый файл «am_flu.exe» (или другой исполняемый файл, если он будет указан в «START_A.INP» и если он имеется в рабочей директории). Эта программа вычисляет по заданным параметрам спектры ПВЭ или угловые зависимости ПВЭ от любой многослойной структуры. Расчеты выполняются согласно теории, описанной в Главе III по формулам (III.2.1, III.2.12). Результаты теоретических вычислений будут отображены в окне сплошными линиями,

экспериментальные данные сплошными линиями с точками. Программа автоматически накладывает вычисленные теоретические кривые на соответствующие им экспериментальные с соответствующими нормировками по выбранному критерию сравнения. Вертикальными пунктирными линиями будет обозначен интервал, в котором программа сравнивает экспериментальные и теоретические данные. Программа «am_flu.exe» также проводит сравнение по указанному критерию (см. далее) вычисленных зависимостей с экспериментальными данными (различные критерии сравнения описаны далее), значение параметра сравнения «EPS» появляется на экране.

При нажатии кнопки «F» эта же программа проводит варьирование параметров структуры, указанных в файле «FIT.inp», для выбора наилучшего значения выбранного параметра сравнения, используя алгоритм нелинейного симплексного спуска «АМОЕВА». Перед началом фитирования автоматически открывается файл параметров фитирования «FIT.inp» из рабочей директории. кнопку «S:G». Кнопка «S:M» позволяет сохранить в памяти последнюю модель.

§ 3. Файл режима работы пакета программ «START_A.INP»



```
START_A.INP
Calculation Options from:
OptFluspc.INP
Model:
model12.inf
1                               jcalc, if=0 no comparison with experiment
Experimental data:
Em794c.DAT
128   133.                       XCOMP1, XCOMP2 - limits of comparison
Calculations with:
AM_FLU.exe
Output from:
RESULTY.res
Axis from:
AXIS_E.INP
```

Строка	Значение параметра	Описание параметра
1	START_A.INP	Текстовый комментарий.
2	Calculation Options from:	Название файла, задающего параметры вычисления ПВЭ.
3	Model:	Текстовый комментарий.
4	1	jcalc - указатель сравнения с экспериментальными данными. Если jcalc=1 программа будет сравнивать вычисленные спектры и угловые зависимости с экспериментальными данными, jcalc=0 программа не будет сравнивать вычисления с экспериментальными данными.
5	Experimental data:	Текстовый комментарий.
6	Em794c.DAT	Имя файла, содержащего экспериментальные зависимости.
7	128. 133.	XCOMP1, XCOMP2 - интервал, в котором проводится сравнение теории и эксперимента.
8	Calculations with:	Текстовый комментарий.
9	AM_FLU.exe	Имя основного исполняемого файла.
10	Output from:	Текстовый комментарий.
11	RESULTY.res	Имя файла, в который будут записаны результирующие теоретические зависимости.
12	Axis from:	Текстовый комментарий.
13	AXIS_E.INP	Имя файла, описывающего параметры графики основного окна.

§ 4. Файл, описывающий модель структуры (на примере «Model.inf»).

```

MODEL.INF
6 - NNN - number of sublayers (including substrate)
5 6 N1N,N2N - limits of repeated layers (from - to; including all)
9 NRN - number of repetitions
2 KKK - number of using data files
DAT\GAINP.DAT
DAT\RES.DAT
2
Mixture of data files in each layer
1 2.4507 3.1263 0.5000 1.0688 1.000 0.8000 1.8141 0.9543 0.8599 0.5000
2 2.4507 3.1263 0.5000 1.0688 1.000 0.8000 1.8141 0.9543 0.8599 0.5000
3 2.4507 3.1263 0.5000 1.0688 1.000 0.8000 1.8141 0.9543 0.8599 0.5000
4 2.4507 3.1263 0.5000 1.0688 1.000 0.8000 1.8141 0.9543 0.8599 0.5000
5 2.4507 3.1263 0.5000 1.0688 1.000 0.8000 1.8141 0.9543 0.8599 0.5000
6 2.4507 3.1263 0.5000 1.0688 1.000 0.8000 1.8141 0.9543 0.8599 0.5000
N DA WIDTH PAR Kind Nstep Flu Fmu
1 100.000 40.00 20.00 5 0 1.00 9833680.99
2 100.000 40.00 20.00 5 0 1.00 9833680.99
3 100.000 40.00 20.00 5 0 1.00 9833680.99
4 100.000 40.00 20.00 5 0 1.00 9833680.99
5 100.000 40.00 20.00 5 0 1.00 9833680.99
6 100.000 40.00 20.00 5 0 1.00 9833680.99
1.00 DZ thickness of the differential layer

```


	Значение параметра	Описание параметра
1	MODEL.INF	Пустая строка
2	1	NNN количество слоёв в структуре, включая подложку
3	5 6	N1N,N2N – начальный и конечный номер слоев периодической части структуры
4	1	NRN - число повторений периодической части.
5	2	ККК - количество файлов функции восприимчивости, используемых программой.
6	DAT\GAINP. DATDAT\RE S.DAT ...	Путь к файлам функции восприимчивости.
7	2	Kflu - Number of data file for fluorescence
8	Mixture of data files in each layer	Текстовый комментарий.
9... 9+NNN	1.0000 2.4507 3.1263 0.5000 1.0688 1.0000 0.8000 1.8141 0.9543 0.8599 0.5000	Значения параметров для каждого слоя MXR; MXBR; MXI; MXBI; TAY; i=1,NNN Описание дано ниже.
10+NN N	N DA WIDTH PAR Kind Nstep Flu FMu	Текстовый комментарий.
11+NN N... 11+2*N NN	1 10000.000 40.00 20.00 5 0 1.00 9833680.99	Значения параметров для каждого слоя N DA WIDTH PAR Kind Nstep Flu FMu Описание дано ниже.
12+2*N NN	1.00	DZ - толщина слоя в Å для дифференциального вычисления образования вторичных частиц

Значения параметров для каждого слоя.

N – номер слоя (максимальное число слоёв, с которыми работает программа равно 30 без учёта повторений),

DA - толщина (в ангстремах, для подложки не обязательно указывать точное значение),

Flu - относительный выход вторичного излучения из слоя и линейный,

Fmu - коэффициент поглощения,

KIND – вид функции профиля интерфейса верхней поверхности слоя,

WIDTH – ширина интерфейса,

NSTEP - количества ступенек в каждом интерфейсе.

Для описания шероховатостей используется профиль интерфейсов. Профили интерфейсов описываются одной из следующих функций с помощью параметра **KIND** значения которого обозначают: 1 – линейное распределение, 2 – функцию арктангенса, 3 – половина профиля Гаусса, 4 – функция Гаусса, 5 – функция ошибок. Форма этих функций приведена на рис. П.1-рис. П.2. Для проведения расчетов плавные изменения функций плотности и фотопоглощения (т.е. реальной и мнимой части восприимчивости) в области интерфейсов аппроксимируются ступенчатыми функциями. Интерфейсы задаются такими параметрами, как ширина интерфейса **WIDTH**, количества ступенек **NSTEP** в каждом интерфейсе.

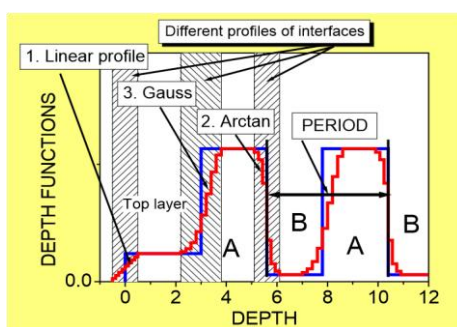


Рис. П.1. Виды функций для описания профилей интерфейсов: 1 – линейное распределение, 2 – функцию арктангенса, 3 – функция Гаусса.

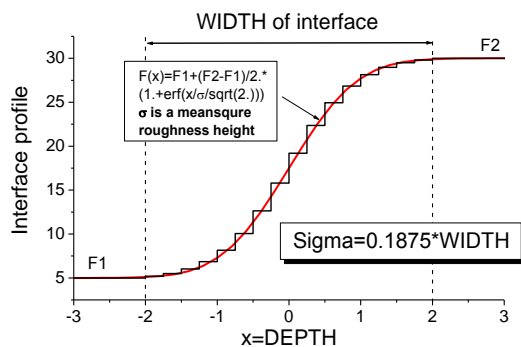


Рис. П.2. Профиль интерфейса, заданный с помощью функции ошибок.

Файлы функции восприимчивости должны содержать зависимость $\chi(E_{ph})$ для определённого элемента в структуре и имеют следующую структуру:

<Энергия фотонов eV> <реальная часть восприимчивости $\chi \cdot 10^6$ > <мнимая часть восприимчивости $\chi \cdot 10^6$ >.

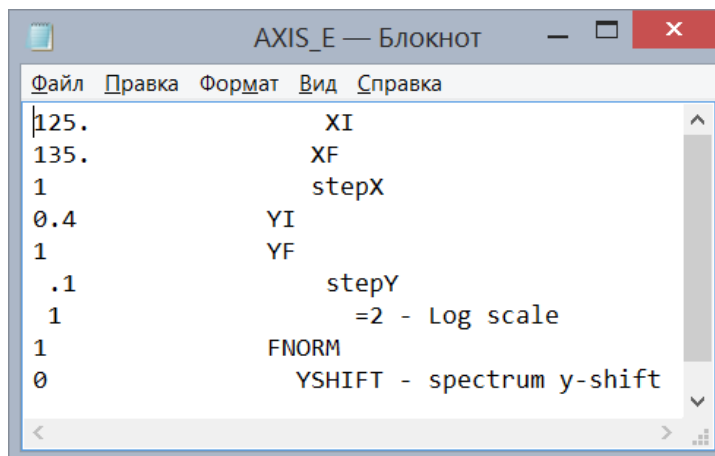
Восприимчивость в каждом слое вычисляется суммированием значений восприимчивости из каждого файла функции восприимчивости, указанными в строке б, с определёнными весами, которые задаются с помощью параметров **MXR_j**, **MXBR_j**, **MXI_j**, **MXBI_j**:

$$\chi_k = \sum_{j=1}^{KKK} (MXR_j * (Re \chi_{kj} - Re \chi_{1j}) + MXBR_j * Re \chi_{1j} + i(MXI_j * (Im Re \chi_{kj} - Im Re \chi_{1j}) + MXBI_j * Im Re \chi_{1j})) \quad (1П)$$

где χ_{1j} - первое значение восприимчивости в соответствующем файле функции восприимчивости.

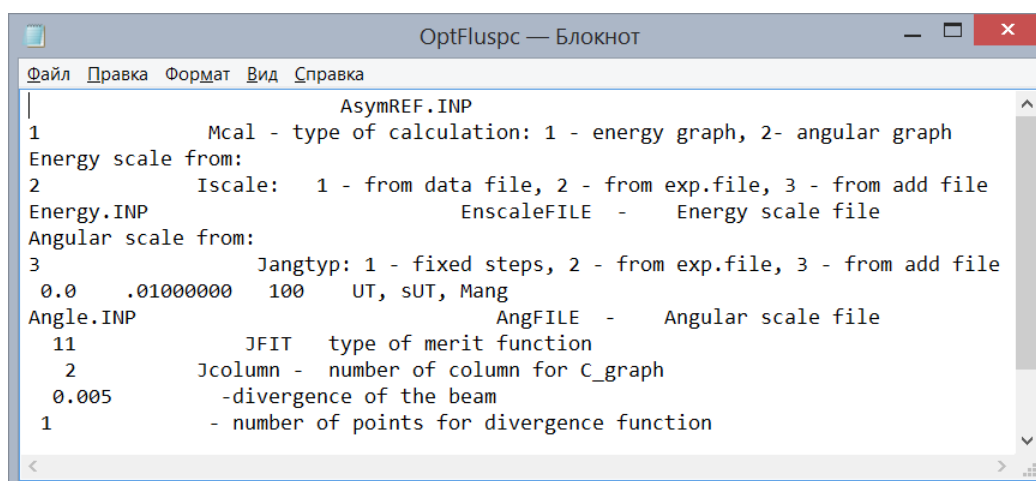
ТАУ_j – параметр, который позволяет разделить поглощение рентгеновского излучения на два члена. Один из них отвечает за нерезонансное фотопоглощение описываемого $Im \chi_0(z)$, другой пропорциональный ($\sim Im \Delta \chi_{res}(z, E_{ph})$) отвечает за резонансное поглощение ассоциируемое с «белой» линией в спектре поглощения измеренном вблизи выбранного края поглощения исследуемого атома. Для описания слоя с резонансным поглощением необходимо создать минимум 2 файла функции восприимчивости: для резонансной χ_{res} и нерезонансной χ_0 восприимчивости.

§ 5. Файл параметров осей координат



	Значение параметра	Описание параметра
1	125.	XI - нулевая отметка на оси абсцисс
2	135.	XF - конечная отметка на оси абсцисс.
3	1	stepX - цена деления на оси абсцисс.
4	0.4	YI - нулевая отметка на оси ординат.
5	1	YF - конечная отметка на оси ординат.
6	1	stepY - цена деления на оси ординат.
7	1	указатель шкалы, 1 – десятичная шкала, 2 – логарифмическая шкала
8	1	FNORM – нормировочная величина для всех отображаемых кривых.
9	0	YSHIFT – сдвиг экспериментальных кривых по оси ординат.

§ 6. Параметры вычисления.



	Значение параметра	Описание параметра
1	AsymREF.INP	Текстовый комментарий.co
2	1	Mcal – указатель типа счёта, Mcal=0 программа работает с энергетической зависимостью ПВЭ, Mcal=1 программа работает с угловой зависимостью.
3	Energy scale from:	Текстовый комментарий.
4	2	Iscale – указатель способа загрузки значений энергии фотонов для расчёта ПВЭ, Iscale=1 программа загрузит значения из файла функции восприимчивости, Iscale=2 программа загрузит значения из файла экспериментальных данных, Iscale=3 программа загрузит значения из дополнительного файла.
5	Energy.INP	Имя дополнительного файла со значениями энергии фотонов.
6	Angular scale from:	Текстовый комментарий.
7	3	Jangtyp - указатель способа загрузки значений угла скольжения падающего излучения для расчёта ПВЭ, Jangtyp=1 программа загрузит значения с помощью параметров UT sUT Mang из строчки 9, Jangtyp=2 программа загрузит значения из файла экспериментальных данных, Jangtyp=3 программа загрузит значения из дополнительного файла.
8	Angle.INP	Имя дополнительного файла со значениями скользящего угла.
9	30.0 .01 100	UT - начальная точка, sUT - шаг по углу, Mang - количество угловых точек
10	Angle.INP	Имя дополнительного файла со значениями скользящего угла.
11	11	JFIT – тип функции сравнения.
12	2	Jcolumn
13	0.005	DIV Расходимость пучка.
14	1	NDIV Число точек для функции расходимости пучка. Подробнее значения параметров в строке 11-14 описано в § 7.

Файлы со значениями энергии фотонов и скользящего угла падающего излучения имеет смысл использовать, если счет требуется провести для выделенных значений, не задаваемых линейной функцией. Они имеют следующую структуру:

<Число значений L>

Значение 1

2

...

L.

Значения энергии фотонов следуют указывать в эВ, угла скольжения в градусах.

ЖFIT – параметр, который позволяет выбирать тип функции критерия сравнения (описанных ниже). Программа может фитировать до 10 спектров одновременно.

§ 7. Файл экспериментальных зависимостей ПВЭ

Файл экспериментальных зависимостей ПВЭ имеет следующую структуру:

102	6						
124.999	0.45581	0.60011	0.69884	0.8065	0.81643	0.84585	
125.09992	0.45556	0.59919	0.69808	0.80533	0.81978	0.84731	
125.19998	0.45504	0.59664	0.6963	0.80352	0.81884	0.84777	
125.29918	0.4545	0.59559	0.69458	0.80227	0.81784	0.84826	
125.40047	0.45408	0.59411	0.69307	0.80221	0.82161	0.8492	
125.49992	0.45313	0.59336	0.6909	0.80054	0.82104	0.85013	
125.60145	0.45225	0.59167	0.68944	0.79939	0.82034	0.85075	
125.69818	0.45181	0.59002	0.68689	0.7975	0.82211	0.85187	
125.80095	0.45166	0.58727	0.68558	0.79692	0.82267	0.85265	
125.89989	0.45151	0.58644	0.68461	0.79631	0.82215	0.85369	
125.99993	0.44996	0.58582	0.68154	0.79469	0.82343	0.85437	
126.09911	0.44896	0.58509	0.67973	0.79389	0.82389	0.85554	
126.2004	0.44909	0.58212	0.67768	0.79276	0.82286	0.85665	
126.30081	0.44865	0.58008	0.67617	0.79114	0.82462	0.85746	
126.40035	0.44846	0.57866	0.67556	0.7897	0.82611	0.8585	
126.501	0.44735	0.57725	0.67327	0.78741	0.82554	0.85975	
126.59878	0.44751	0.5767	0.67123	0.78623	0.82576	0.8608	
126.69868	0.44659	0.57491	0.66922	0.78604	0.8275	0.86243	
...							
...							

	Значение параметра	Описание параметра
1	102 6	Количество экспериментальных точек и количество экспериментальных зависимостей в файле соответственно
2	124.999 0.45581 0.60011 0.69884 0.8065 0.81643 0.84585	Первая экспериментальная точка: для энергетических зависимостей указывается значение энергии фотонов падающего излучения в электронвольтах (для угловых зависимостей указывается значение скользящего угла падающего излучения), затем интенсивность в относительных единицах ПВЭ для экспериментальной зависимости 1, для экспериментальной зависимости 2 ...
3	125.09992 0.45556 0.59919 0.69808 0.80533 0.81978 0.84731	То же самое, что и в предыдущей строке для второй экспериментальной точки.
4

§ 8. Фитирование параметров

Для фитирования параметров программа «am_flu.exe» использует алгоритм АМОЕВА, который в свою очередь реализует метод нелинейного симплексного спуска и позволяет находить корни функции от многих независимых переменных. Этот метод позволяет находить корни быстрее, чем метод сетки для функций с пятью и большим количеством независимых переменных. В нашей программе алгоритм АМОЕДА реализован для компилятора языка Fortran90 следующим образом:

Subroutine AMOEBA

```
NP=ITFIN
NDIM=ITFIN
MP=ITFIN+1
FTOL=.001
MPTS=NDIM+1
ITER=0
1      ILO=1
IF(Yfmin(1).GT.Yfmin(2))THEN
  IHI=1
  INHI=2
ELSE
  IHI=2
  INHI=1
ENDIF
DO 11 I=1,MPTS
  IF(Yfmin(I).LT.Yfmin(ILO)) ILO=I
  IF(Yfmin(I).GT.Yfmin(IHI))THEN
    INHI=IHI
    IHI=I
  ELSE IF(Yfmin(I).GT.Yfmin(INHI))THEN
    IF(I.NE.IHI) INHI=I
  ENDIF
11     CONTINUE
RTOL=2.*DABS(Yfmin(IHI)-Yfmin(ILO))
WRITE(4,*) 'RTOL, FTOL=',RTOL,FTOL
IF(RTOL.LT.FTOL) GO TO 122
IF(ITER.EQ.ITMAX) WRITE(4,*) 'Amoeba exceeding maximum iterations.'
IF(ITER.EQ.ITMAX) GO TO 122
ITER=ITER+1
DO 12 J=1,NDIM
  PBAR(J)=0.
12     CONTINUE
DO 14 I=1,MPTS
  IF(I.NE.IHI)THEN
    DO 13 J=1,NDIM
      PBAR(J)=PBAR(J)+P(I,J)
13     CONTINUE
  ENDIF
14     CONTINUE
DO 15 J=1,NDIM
  PBAR(J)=PBAR(J)/NDIM
  PR(J)=(1.+ALPHA)*PBAR(J)-ALPHA*P(IHI,J)
  YVV(IK1(J),IK2(J))=PR(J)  !!!!! Варьируемые параметры
  IF(YVV(IK1(J),IK2(J)).LT.Alim1(J)) YVV(IK1(J),IK2(J))=Alim1(J)
  IF(YVV(IK1(J),IK2(J)).GT.Alim2(J)) YVV(IK1(J),IK2(J))=Alim2(J)
  PR(J)=YVV(IK1(J),IK2(J))
15     CONTINUE
CALL MAIN_FLU1(Mcal,NNN,N1N,N2N,NRN,KKK,JscE,Mang,
  *      YVV,AA,AAI,UTT,UTTD,DZ,Fmin,RATIOY,Y1,EPOV)
YPR=Fmin
IF(YPR.LE.Yfmin(ILO))THEN
  DO 16 J=1,NDIM
    PRR(J)=GAMMA*PR(J)+(1.-GAMMA)*PBAR(J)
```



```

YVV(IK1(J),IK2(J))=PRR(J)
IF(YVV(IK1(J),IK2(J)).LT.Alim1(J))
*   YVV(IK1(J),IK2(J))=Alim1(J)
IF(YVV(IK1(J),IK2(J)).GT.Alim2(J))
*   YVV(IK1(J),IK2(J))=Alim2(J)
PRR(J)=YVV(IK1(J),IK2(J))
16   CONTINUE
CALL MAIN_FLU1(Mcal,NNN,N1N,N2N,NRN,KKK,JscE,Mang,
*   YVV,AA,AAI,UTT,UTTD,DZ,Fmin,RATIOY,Y1,EPOV)
YPRR=Fmin
IF(YPRR.LT.Yfmin(ILO))THEN
  DO 17 J=1,NDIM
    P(IHI,J)=PRR(J)
17   CONTINUE
    Yfmin(IHI)=YPRR
  ELSE
    DO 18 J=1,NDIM
      P(IHI,J)=PR(J)
18   CONTINUE
      Yfmin(IHI)=YPR
    ENDIF
  ELSE IF(YPR.GE.Yfmin(INHI))THEN
    IF(YPR.LT.Yfmin(IHI))THEN
      DO 19 J=1,NDIM
        P(IHI,J)=PR(J)
19   CONTINUE
        Yfmin(IHI)=YPR
      ENDIF
      DO 21 J=1,NDIM
        PRR(J)=BETA*P(IHI,J)+(1.-BETA)*PBAR(J)
        YVV(IK1(J),IK2(J))=PRR(J)
        IF(YVV(IK1(J),IK2(J)).LT.Alim1(J))
*         YVV(IK1(J),IK2(J))=Alim1(J)
        IF(YVV(IK1(J),IK2(J)).GT.Alim2(J))
*         YVV(IK1(J),IK2(J))=Alim2(J)
        PRR(J)=YVV(IK1(J),IK2(J))
21   CONTINUE
      CALL MAIN_FLU1(Mcal,NNN,N1N,N2N,NRN,KKK,JscE,Mang,YVV,
*         AA,AAI,UTT,UTTD,DZ,Fmin,RATIOY,Y1,EPOV)
      YPRR=Fmin
      IF(YPRR.LT.Yfmin(IHI))THEN
        DO 22 J=1,NDIM
          P(IHI,J)=PRR(J)
22   CONTINUE
          Yfmin(IHI)=YPRR
        ELSE
          DO 24 I=1,MPTS
            IF(I.NE.ILO)THEN
              DO 23 J=1,NDIM
                PR(J)=0.5*(P(I,J)+P(ILO,J))
                YVV(IK1(J),IK2(J))=PR(J)
                IF(YVV(IK1(J),IK2(J)).LT.Alim1(J))
*                 YVV(IK1(J),IK2(J))=Alim1(J)
                IF(YVV(IK1(J),IK2(J)).GT.Alim2(J))
*                 YVV(IK1(J),IK2(J))=Alim2(J)
                PR(J)=YVV(IK1(J),IK2(J))

```

```

        P(I,J)=YVV(IK1(J),IK2(J))
23      CONTINUE
        CALL MAIN_FLU1(Mcal,NNN,N1N,N2N,NRN,KKK,JscE,Mang,
*        YVV,AA,AAI,UTT,UTTD,DZ,Fmin,RATIOY,Y1,EPOV)
        Yfmin(I)=Fmin
        ENDIF
24      CONTINUE
        ENDIF
        ELSE
        DO 25 J=1,NDIM
        P(IHI,J)=PR(J)
25      CONTINUE
        Yfmin(IHI)=YPR
        ENDIF
        GO TO 1

RETURN
END

```

§ 9. Файл параметров фитирования «FIT.inp»

Файл содержит число строк, соответствующих числу варьируемых параметров (максимальное число равно 20). Список варьируемых параметров должен заканчиваться строчкой, в которой в графе номера слоя указан «0».

Каждая строка содержит:

<Номер слоя> <номер фиттируемого параметра> <шаг начального варьирования> Ist <минимально допустимое значение> <максимально допустимое значение> IK3 IK4 Amul

В программе каждый варьируемый параметр имеет свой номер: DA -1, WIDTH - 2, PAR - 3, Flu - 4, Fmu - 5, MXR_n - 1+5n, MXBR_n - 2+5n, MXI_n - 3+5n, MXBI_n - 4+5n, TAY - 5+5n, где n номер соответствующему этому параметру файла данных функции восприимчивости в том порядке, в котором он был указан в файле параметров модели.

Например, строка в файле «FIT.inp»

```
1 2 10 1 0 100 0 2 1.
```

обозначает, что варьироваться будет толщина интерфейса в первом слое с начальным шагом 10 А, и этот параметр ограничен значениями в пределах от 0 до 100 А. Программа может варьировать функцию восприимчивости по

формуле (1П) следующими способами: с помощью параметров $MXBR_n$ и $MXBI_n$ сжимать/расширять реальную и мнимую часть соответственно; с помощью параметров MXR_n и MXI_n сдвигать реальную и мнимую часть функции восприимчивости соответственно.

§ 10. Критерии сравнения

В случае, когда выбран режим сравнения рассчитанных кривых с экспериментальными данными, необходимо указать критерий сравнения, который будет использоваться. В программе можно выбрать разные критерии сравнения для угловых зависимостей вторичного излучения и коэффициента отражения (что часто оправдано, т.к. кривая зеркального отражения может изменяться на несколько порядков в узком угловом интервале, в то время как выход вторичного излучения в этом же интервале изменяется незначительно).

Первый (соответствует цифре «0») опирается на критерий хи-квадрат для определения величины среднеквадратичного отклонения рассчитанных теоретически зависимостей от экспериментальных данных. Чтобы увеличить вклад «хвостов» на кривых зеркального отражения, где амплитуда отражения может падать более чем на три порядка, можно использовать модифицированный критерий среднеквадратичного отклонения «хи-квадрат с весом» (цифры «1» или «2» в поле соответствуют «весу», т.е. показателю степени n):

$$EPS = \sqrt{\frac{\sum_i \frac{(y_i - t_i)^2}{y_i^n}}{\sum_i \frac{1}{y_i^n}}} \quad (2)$$

Где $n=1,2,3,\dots$, y_i – нормированные экспериментальные значения в i -й точке по шкале абсцисс, t_i – соответствующие нормированные значения функции в тех же точках, N – число точек, для которых производится сравнение.

В статье [202] предлагается использовать другой критерий для работы с аналогичными зависимостями. В соответствии с этой работой можно ввести следующие критерии сравнения:

$$EPS = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\sum \frac{(y_i - t_i)^2}{(y_i + t_i)^2}} + \sqrt{\frac{\sum (y_i - t_i)^2}{\sum y_i^2}}, \quad (3)$$

$$EPS = \sqrt{\frac{\sum (y_i - t_i)^2}{\sum y_i^2}}, \quad (4)$$

$$EPS = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\sum \frac{(y_i - t_i)^2}{(y_i + t_i)^2}}. \quad (5)$$

Критерий (5) в основном учитывает влияние на «хвостах» кривой, (4) – наилучшим образом подгоняет те точки на кривой, в которых значение функции максимально. Наиболее удовлетворительное совпадение теоретической кривой с экспериментом для рефлектометрических кривых получается, если использовать критерий (3), для выбора которого необходимо указать «11» в поле выбора критерия сравнения в диалоговом окне «FLstart». В формулах (2)-(5) y_i соответствует экспериментальному значению функции в i -й точке, t_i - теоретическому, N – общее число точек, для которых производится сравнение.

Тем не менее, выбор критерия зависит от вида анализируемой кривой. Окончательный выбор критерия осуществляется путем сравнения результатов наложения теоретической кривой на экспериментальные данные с использованием разных критериев сравнения

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

- [1]. Солдатов А.В. От спектроскопии EXAFS к спектроскопии XANES: новые возможности исследования материи./ А.В. Солдатов// Сорсовский образовательный журнал – 1988. - Т.12 –С.101-104.
- [2]. de Groot F.M.F. XANES spectra of transition metal compounds. de Groot F.M.F.// Journal of Physics: Conference Series - 2009. - V.190. - P.012004.
- [3]. Vinogradov A.S. X-ray absorption evidence for the back-donation in iron cyanide complexes./ A.S. Vinogradov, A.B. Preobrajenski, S.A. Krasnikov, T. Chasse, R. Szargan, A. Knop-Gericke, R. Schlogl, P. Bressler // Surface Review and Letters - 2002. - V.9. - P.359.
- [4]. Kossel W. Zum Bau der Röntgenspektren./ W. Kossel // Z. Phys - 1920. - V.1. - P.119-134.
- [5]. Kroning R. De L. Zur Theorie der Feinstruktur in den Röntgenabsorptionspektren./ R. De L. Kroning // Z. Phys - 1931. - V.70. - P.317-323.
- [6]. Brion C.E. Absolute oscillator strengths for photoabsorption and photoionization processes by fast electron impact./ C.E. Brion // Comments Atomic and Molecular Physics. - 1985. - V.16. - P.249.
- [7]. Hitchcock A.P. Bibliography of atomic and molecular inner-shell excitation studies./ A.P. Hitchcock // J. Electron Spectrosc. - 1982. - V.25. - P.245-275.
- [8]. Wight G.R K-shell energy loss spectra of 2.5 keV electrons in N₂ and CO./ G.R. Wight, C.E. Brion, M.J. van der Wiel // J. Electron Spectrosc - 1973. - V.1. - P.457-469.
- [9]. Dehmer J.L. Shape Resonances in K-Shell Photoionization of Diatomic Molecules./ J.L. Dehmer, D. Dill // Phys. Rev. Lett. - 1975. - V.35. - P.213.
- [10]. Dehmer J.L. Photophysics and Photochemistry in the Vacuum Ultra-violet./ J.L. Dehmer, D. Dill, A.C. Parr - Dordrecht:Reidel 1985.

- [11].Koningsberger D.C. Chapters X-ray Absorption: Principles, Applications, Techniques of EXAFS, SEXAFS and XANES./ D.C. Koningsberger, R. Prins, A. Bianconi, P.J. Durham - New York:John Wiley & Sons 1988. - P.53.
- [12]. Koningsberger D.C. Chapters X-ray Absorption: Principles, Applications, Techniques of EXAFS, SEXAFS and XANES./ D.C. Koningsberger, R. Prins, A. Bianconi, P.J. Durham - New York:John Wiley & Sons 1988. - P.573.
- [13].Stohr J. Orientation of Chemisorbed Molecules from Surface-Absorption Fine-Structure Measurements: CO and NO on Ni(100)./ J. Stohr, K. Babershke, R. Jaeger, T. Treichler // Phys. Rev. Lett. - 1981. - V.47. - P.381.
- [14].Jaeger R. Photon-Stimulated Desorption due to Multielectron Excitations in Chemisorbed Molecules: CO on Ni(100) / R. Jaeger, J. Stohr, R. Treichler, K. Babarshke // Phys. Rev. Lett. - 1981. – V.47. - P.1300.
- [15].Stohr J. EXAFS and surface-EXAFS studies in the soft x-ray region using electron yield spectroscopy./ J. Stohr // J. Vac. Sci. Technol - 1979. - V.16. - P.37.
- [16].Stohr J. Absorption measurements above the K edges of the low-Z atoms, C, N, O, and F, are discussed, which utilize 250–1000-eV synchrotron radiation./ J. Stohr, R. Jaeger, J. Feldhaus, S. Brennan, G. Norman, G. Apai // Appl. Opt. - 1980. - V.19. - P.3911.
- [17].Citrin P.H. Extended X-Ray-Absorption Fine Structure of Surface Atoms on Single-Crystal Substrates: Iodine Adsorbed on Ag(111)./ P.H. Citrin, P. Eisenberger, R.C. Hewitt // Phys. Rev. Lett. - 1978. - V.41. - P.309.
- [18].Stohr J. Surface extended x-ray absorption fine structure in the soft-x-ray region: Study of an oxidized Al surface./ J. Stohr, D. Denley, P. Perfetti // Phys. Rev. B. - 1978. - V.18. - P.4132.
- [19].Citrin P.H. Sexafs studies of iodine adsorbed on single crystal substrates./ P.H. Citrin, P. Eisenberger, R.C. Hewitt // Surf. Sci. - 1979. - V.89. - P.28.

- [20].Stohr J. Extended-x-ray-absorption-fine-structure studies of low-Z atoms in solids and on surfaces: Studies of Si₃N₄, SiO₂, and oxygen on Si(111)./ J. Stohr, L. Johansson, I. Lindau, P. Pianetta // Phys. Rev. B. - 1979. - V.20. - P.664.
- [21].Stohr J. Absorption-edge resonances, core-hole screening, and orientation of chemisorbed molecules: CO, NO, and N₂ on Ni(100)./ J. Stohr, R. Jaeger // Phys. Rev. B - 1982. - V.26. - P.4111.
- [22].Davenport J.W. Ultraviolet Photoionization Cross Sections for N₂ and CO./ J.W. Davenport // Phys. Rev. Lett. - 1976. - V.36. - P.945.
- [23].Wallace S. Detector integrated angular distribution: Chemisorption-site geometry, axial-recoil photofragmentation, and molecular-beam orientation./ S. Wallace, D. Dill // Phys. Rev. B - 1978. - V.17. -P.1692.
- [24].Stohr J. Bonding and Bond Lengths of Chemisorbed Molecules from Near-Edge X-Ray-Absorption Fine-Structure Studies./ J. Stohr, J.L. Gland, W. Eberhardt, D. Outka, R.J. Madix, F. Sette, R.J. Koestner, U. Dobler // Phys. Rev. Lett. - 1983. - V.51. - P.2414.
- [25].Johnson A.L. Orientation of complex molecules chemisorbed on metal surfaces: near-edge x-ray absorption./ A.L. Johnson, E.L. Muetterties // J. Am. Chem. Soc. - 1983. - V.105. - P.7183.
- [26].Stohr J. Surface Extended X-Ray-Absorption Fine Structure of Low-Z Adsorbates Studied with Fluorescence Detection./ J. Stohr, E.B. Kollin, D.A. Fischer, J.B. Hastings, F. Zaera, F. Sette // Phys. Rev. Lett. - 1985. - V.55. - P.1468.
- [27].Fischer D.A. X-ray fluorescence proportional counter for SEXAFS studies of low-Z adsorbates./ D.A. Fischer, J.B. Hasting, F. Zaera, J. Stohr, F. Sette // Nucl. Instrum. Methods A - 1986. - V.246. - P.561-564.
- [28].Fischer D.A. Carbon K-edge structure of chemisorbed molecules by means of fluorescence detection./ D.A. Fischer, U. Dobler, D. Arvanitis, L. Wenzel, K. Baberschke, J. Stohr // Surf. Sci. - 1986. - V.177. - P.114-120.

- [29]. Arvanitis D. A new technique for submonolayer NEXAFS: fluorescence yield at the carbon K edge./ D. Arvanitis, U. Dobler, L. Wenzel, K. Baberschke, J. Stohr // *J. de Phys Colloques* - 1986. - V.47(8). - P.173.
- [30]. Zaera F. Fluorescence yield near-edge x-ray absorption spectroscopy under atmospheric conditions: CO and H₂ coadsorption on Ni(100) at pressures between 10⁻⁹ and 0.1 Torr./ F. Zaera, D.A. Fischer, S. Shen, J.L. Glad // *Surf. Sci.* - 1988. - V.194. - P.205-216.
- [31]. Wilke M. Oxidation state and coordination of Fe in minerals: An Fe K-XANES spectroscopic study./ M. Wilke, F. Farges, P.-E. Petit, Jr. G.E. Brown, F. Martin // *American Mineralogist* - 2001. - V.86. - P.714-730.
- [32]. Ressler T. Quantitative Speciation of Mn-Bearing Particulates Emitted from Autos Burning (Methylcyclopentadienyl) manganese Tricarbonyl-Added Gasolines Using XANES Spectroscopy./ T. Ressler, J. Wong, J. Roos, I.L. Smith // *Environ. Sci. Technol.* - 2000. - V.34. - P.950-958.
- [33]. Matan S.K. PdO_x/Pd at Work in a Model Three-Way Catalyst for Methane Abatement Monitored by Operando XANES./ S.K. Matan, G.L. Chiarello, Y. Lu, A. Weidenkaff, D. Ferri // *Top Catal.* - 2013. - V.56. - P.239-242.
- [34]. De Groot F.M.F. X-ray absorption of transition metal oxides: An overview of the theoretical approaches./ F.M.F. De Groot // *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* - 1993. - V.62. - P.111-130.
- [35]. Mattheiss L.F. Relativistic tight-binding calculation of core-valence transitions in Pt and Au./ L.F. Mattheiss, R.E. Dietz // *Phys. Rev. B* - 1980. - V.22. - P.1663.
- [36]. Rehr J.J. High-order multiple-scattering calculations of x-ray-absorption fine structure./ J.J. Rehr, S.I. Zabinsky, R.C. Albers // *Phys. Rev. Lett.* - 1992. - V.69. - P.3397.
- [37]. Tyson T.A. General multiple-scattering scheme for the computation and interpretation of x-ray-absorption fine structure in atomic clusters with applications to SF₆, GeCl₄, and Br₂ molecules./ T.A. Tyson, K.O. Hodgson, C.R. Natoli, M. Benfatto // *Phys. Rev. B* - 1992. - V.46. - P.5997.

- [38].Ellis D.E. Discrete variational method for the energy-band problem with general crystal potentials./ D.E. Ellis, G.S. Painter // Phys. Rev. B - 1970. - V.2. - P.2887.
- [39].Huhne T. Full-potential spin-polarized relativistic Korringa-Kohn-Rostoker method implemented and applied to bcc Fe, fcc Co, and fcc Ni./ T. Huhne, T.C. Zecha, H. Ebert, P.H. Dederichs, R. Zeller // Phys. Rev. B - 1998 . - V.58, - P.10236.
- [40].Blaha P. Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems./ P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S. Trickey // Comput. Phys. Commun. - 1990. - V.59. - P.399-415.
- [41].Kimball G.E. The Numerical Solution of Schrödinger's Equation./ G.E. Kimball, G.H. Shortley // Phys. Rev. - 1934. - V.45. - P.815.
- [42].Thijssen J.M. Embedding muffin-tins into a finite-difference grid./ J.M. Thijssen, J.E. Inglesfield // Europhys. Lett. - 1994. - V.27. - P.65.
- [43].Joly Y. X-ray absorption near-edge structure calculations beyond the muffin-tin approximation./ Y. Joly // Physical Review B - 2001. - V.63. - P.125120.
- [44].<http://neel.cnrs.fr/spip.php?article3137&lang=fr>
- [45].Joly J. Self-consistency, spin-orbit and other advances in the FDMNES code to simulate XANES and RXD experiments./ J. Joly, O. Bunau, J.E. Lorenzo, R.M. Galera, S. Grenier, B. Thompson // Journal of Physics: Conference Series - 2009. - V.190. - P.012007.
- [46].Klein O. Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac./ O. Klein, Y. Nishina // Z. Phys. - 1929. - V. 52. - P.853 – 868.
- [47].Platzman P.M. Magnetic Scattering of X Rays from Electrons in Molecules and Solids./ P.M. Platzman, N. Tzoar // Phys. Rev. B. - 1970. - V.2. - P.3556 – 3559.
- [48].de Bergevin F. Observation of magnetic superlattice peaks by X-ray diffraction on an antiferromagnetic NiO crystal./ F. de Bergevin, M. Brunel // Phys. Lett. A. - 1972. - V. 39. - P.141 – 142.

- [49]. Blume M. Magnetic scattering of x rays./ M. Blume // J. App. Phys. - 1985. - V.57. - P.3615.
- [50]. Namikava K. X-Ray Resonance Magnetic Scattering./ K. Namikava, M. Ando, T. Nakajima, H. Kawata // Phys. Soc. Jpn. - 1985. - V. 54. - P.4099.
- [51]. Hannon J.P. X-Ray Resonance Exchange Scattering./ J.P. Hannon, G.T. Trammell, M. Blume, D. Gibbs // Phys. Rev. Lett. - 1988. - V.61. - P.1245.
- [52]. Thole B.T. X-Ray Circular Dichroism as a Probe of Orbital Magnetization./ B.T. Thole, P. Carra, F. Sette, G. van der Laan // Phys. Rev. Lett. – 1992. – V.68. – P.1941.
- [53]. Carra P. X-Ray Circular Dichroism and Local Magnetic Fields./ P. Carra, B.T. Thole, M. Altarelli, X. Wang // Phys. Rev. Lett. – 1993. – V.70. – P.694.
- [54]. Schütz G. Absorption of circularly polarized x rays in iron./ G. Schütz, W. Wagner, W. Wilhelm, P. Kienle, R. Zeller, R. Frahm, G. Materlik // Phys. Rev. Lett. - 1987. - V.58, P.737.
- [55]. Tonnerre. J.-M. Лекции на IVth International School on Magnetism and Synchrotron Radiation./ J.-M. Tonnerre. - Mittelwahr. 2004.
- [56]. Holm A.P. XMCD Characterization of the Ferromagnetic State of $\text{Yb}_{14}\text{MnSb}_{11}$./ A.P. Holm, S.M. Kauzlarich, S.A. Morton, G.D. Waddill, W.E. Pickett, J.G. Tobin // J. Am. Chem. Soc. - 2002. - V.124. - P.9894-9898.
- [57]. Ohldag H. Correlation between Exchange Bias and Pinned Interfacial Spins./ H. Ohldag, A. Scholl, F. Nolting, E. Arenholz, S. Maat, A. T. Young, M. Carey, J. Stohr // Lawrence Berkeley National Laboratory – 2003 <https://escholarship.org/uc/item/7c0940j1>.
- [58]. Kronast F. Element-Specific Magnetic Hysteresis of Individual 18 nm Fe Nanocubes./ F. Kronast, N. Friedenberger, K. Ollefs, S. Gliga, L. Tati-Bismaths, R. Thies, A. Ney, R. Weber, Ch. Hassel, F.M. Romer, A.V. Trunova, Ch. Wirtz, R. Hertel, H.A. Durr and M. Farle // Nanoletters – 2011. – V.11. – P.1710-1715.

- [59].Compton A.H. The total reflexion of X-rays./ A.H. Compton // Philosophical Magazine Series 6. – 1923. - V.45. – P.1121-1131.
- [60].Kiessig H. Untersuchungen zur Totalreflexion von Röntgenstrahlen./ H. Kiessig // Annalen der Physik. - 1931. - V.402 - P.715–768.
- [61].Parratt L.G. Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays / L.G. Parratt // Phys. Rev. - 1954. - V.95. - P.359
- [62].de Boer D.K.G. Influence of the roughness profile on the specular reflectivity of x rays and neutrons / D.K.G. de Boer // Phys. Rev. B – 1994. - V.49. – P.5817
- [63].Liu Y. Interfacial Bonding and Structure of Bi₂Te₃ Topological Insulator Films on Si(111) Determined by Surface X-Ray Scattering./ Y. Liu, H.-H. Wang, G. Gian, Z. Zhang, S.S. Lee, P.A. Fenter, J.Z. Tischler, H. Hong, T.-C. Chiang // Physical Review Letters - 2013. - V.110. - P.226103.
- [64].Kao C.–C. Dichroic interference effects in circularly polarized soft-x-ray resonant magnetic scattering./ C.–C. Kao, C.T. Chen, E.D. Johnson, J.B. Hastings, H.J. Lin, G.H. Ho, G. Meigs, J.–M. Brot, S.L. Hulbert, Y.U. Idzerda, C. Vettier // Phys. Rev. B. - 1994. - V.50. - P.9599 – 9602.
- [65].Se`ve L. Profile of the induced 5d magnetic moments in Ce/Fe and La/Fe multilayers probed by x-ray magnetic-resonant scattering./ L. Se`ve, N. Jaouen, J.M. Tonnerre, D. Raoux, F. Bartolomé, M. Arend, W. Felsch, A. Rogalev, J. Goulon, C. Gautier, J.F. Berar // Phys. Rev. B. - 1999. - V.60. - P.9662.
- [66].Jaouen N. Oscillatory behavior of 5d magnetic moments in Fe/W multilayers./ N. Jaouen, G. van der Laan, T.K. Johal, F. Wilhelm, A. Rogalev, S. Mylonas, L. Ortega // Physical Review B. - 2004. - V.70. - P.094417.
- [67].Hosoito N. Magnetic Field Dependence of Au Spin Polarization Induced in the Epitaxial Fe/Au(001) Multilayer with Antiferromagnetic Interlayer Coupling by Resonant X-ray Magnetic Scattering/ N. Hosoito, T. Ohkochi, K. Kodama, R. Yamagishi // Journal of the Physical Society of Japan. - 2009. - V.78. - P.094716.

- [68]. Andreeva M. Au induced magnetization profile in [Co/Au]₁₀ multilayer studied by x-ray resonant magnetic reflectometry/ M. Andreeva, A. Rogalev, A. Smekhova, F. Wilhelm // Fourth Seeheim Conference on Magnetism (SCM - 2010). (Frankfurt, Germany, March 28th - April 1st, 2010). P-07. - P.168.
- [69]. Tonnerre J.M. Depth Magnetization Profile of a Perpendicular Exchange Coupled System by Soft-X-Ray Resonant Magnetic Reflectivity./ J.M. Tonnerre, M. De Santis, S. Grenier, H.C.N. Toletino, V. Langlais, E. Bontempi, Garcia-M. Fernandez, U. Staub // Physical Review Letters - 2008. - V.100. - P.157202.
- [70]. Freeland W. Charge transport and magnetization profile at the interface between the correlated metal CaRuO₃ and the antiferromagnetic insulator CaMnO₃./ W. Freeland, J. Chakhalian, A.V. Boris, J.-M. Tonnerre, J.J. Kavich, P. Yordanov, S. Grenier, P. Zshack, E. Kapapetrova, P. Popovich, H.N. Lee, B. Keimer // Physical Review B - 2010. - V.81. - P.094414.
- [71]. Roy S. Evidence of modified ferromagnetism at a buried Permalloy/CoO interface at room temperature./ S. Roy, C. Sanchez-Hanke, S. Park, M. R. Fitzsimmons, Y. J. Tang, J. I. Hong, David J. Smith, B. J. Taylor, X. Liu, M. B. Maple, A. E. Berkowitz, C.-C. Kao, and S. K. Sinha // Phys. Rev. B - 2007. - V.75. - P.014442.
- [72]. Doi S. Magnetization profile of Ir in a MnIr/CoFe exchange bias system evaluated by hard x-ray resonant magnetic reflectivity./ S. Doi, K. Nomura, N. Awaji, N. Hosoi, R. Yamagishi, M. Suzuki // J. Appl. Phys. - 2009 - V.106. - P.123919.
- [73]. Bruck S. Uncompensated Moments in the MnPd/Fe Exchange Bias System / S. Bruck, G. Schultz, E. Goering, X. Ji, K. Krishnan // Phys. Rev. Lett. - 2008. - V.101. - P.126402.
- [74]. Mannhart J. Oxide Interfaces—An Opportunity for Electronics./ J. Mannhart, D.G. Schlom // Science - 2010. - V.327 - P.1607–1611.

- [75]. Ковальчук М.В. Рентгеновские стоячие волны — новый метод исследования структуры кристаллов./ М.В. Ковальчук, В.Г. Кон // Усп. физ. наук. - 1986. - Т.149. - С.69.
- [76]. Бушуев В.А. Вторичные процессы в рентгеновской оптике./ В.А. Бушуев, Р.Н. Кузьмин - М.:Изд-во Моск.ун-та, 1990. - С.112.
- [77]. Bedzyk M. New trends in X-ray standing waves./ M. Bedzyk // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. - 1988. - V.266. - P.679.
- [78]. Bedzyk M.J. X-ray standing waves at a reflecting mirror surface./ M.J. Bedzyk, G.M. Bommarito, J.S. Schildkraut // Physical Review Letters. – 1989. - V.62. - P.1376.
- [79]. Henke B.L. Ultrasoft-X-Ray Reflection, Refraction, and Production of Photoelectrons (100-1000-eV Region)/ B.L. Henke B.L. // Physical Review A. - 1972. - V.6. - P.94.
- [80].Соломин И.К./ И.К. Соломин, М.В. Круглов // Физика твердого тела. - 1984. - Т.26. - С.519.
- [81].Чумаков А.И. Mössbauer spectroscopy of conversion electrons: determining the range of depths that can be analyzed by nondestructive depth profiling./ А.И. Чумаков, Г.В. Смирнов// ЖЭТФ. - 1985. - V.89. - P.1810.
- [82].Roddatis V.V. The microstructural and optical properties of Ge/Si heterostructures grown by low-temperature molecular beam epitaxy / V.V. Roddatis, S.N. Yakunin, A.L. Vasiliev, M.V. Kovalchuk, A.Yu. Seregin, T.M. Burbaev, M.N. Gordeev // Journal of Materials Research – 2013. – V.28. – P.1432.
- [83].Bera S. Probing Atomic Migration in Nanostructured Multilayers: Application of X-Ray Standing Wave Fields./ S. Bera, K. Bhattacharjee, G. Kuri, B.N. Dev // Physical Review Letters - 2007. - V.98. - P.196103

- [84].Gupta A. Interface structure in magnetic multilayers using x-ray standing waves./ A. Gupta, D. Kumar, C. Meneghini // Physical Review B. - 2007. - V.75. - P.064424.
- [85].Salditt T. X-ray waveguides and thin macromolecular films./ T. Salditt, F. Pfeiffer, H. Perzl, A. Vix, U. Mennicke, A. Jarre, A. Mazuelas, T.H. Metzger // Physica B - 2003. - V.336. - P.181-192.
- [86]. <http://ftp.esrf.eu/pub/scisoft/xop2.1/Windows/Extensions>
- [87]. Бушуев В.А. Влияние толщин переходных слоёв на эффективность возбуждения тонкоплёночного рентгеновского волновода./ В.А. Бушуев, О.Д. Рощупкина // Известия РАН. Серия Физика. - 2007. - Т.71(1). - С.64-68.
- [88]. Бушуев В.А. Тонкоплёночный рентгеновский волновод на основе многослойной структуры с нанорезонатором./ В.А. Бушуев, О.Д. Рощупкина // Известия РАН. Серия Физика. - 2008. - Т.72(2). - С.209-213.
- [89].Dmitrienko V.E. Resonant X-ray Diffraction by Crystals: New Method of Studying Structure and Properties of Materials./ V.E. Dmitrienko, E.N. Ovchinnikova // Кристаллография - 2003. - Т.48(S1). - С.59.
- [90].Jaouen N. Chemical and magnetization profile study of Ce in [CeLaCe/Fe] and [LaCeLa/Fe] multilayers by resonant X-ray reflectivity./ N. Jaouen, J.M. Tonnerre, Bontempi, D. Raoux, L. Sève, F. Bartolomé, A. Rogalev, M. Müenzenberg, W. Felsch, H.A. Dürr, E. Dudzik, H. Maruyama // Physica B. - 2000. - V.283. - P.175-179.
- [91].Bergmann A. X-ray resonant magnetic scattering study of [Co₂MnGe/Au]_n and [Co₂MnGe/V]_n multilayers./ A. Bergmann, J. Grabis, A. Nefedov, K. Westerholt, H. Zabel // Journal of Physics D: Applied Physics - 2006. - V.39. - P.842.
- [92].Brück S. Uncompensated Moments in the MnPd/Fe Exchange Bias System./ S. Brück, G. Schütz, E. Goering, X. Ji, K.M. Krishnan // Phys. Rev. Lett. - 2008. - V.101. - P.126402.

- [93].Hosoito N. Magnetic Field Dependence of Au Spin Polarization Induced in the Epitaxial Fe/Au(001) Multilayer with Antiferromagnetic Interlayer Coupling by Resonant X-ray Magnetic Scattering./ N. Hosoito, T. Ohkochi, K. Kodama, R. Yamagishi // Journal of the Physical Society of Japan - 2009. - V.78. - P.094716.
- [94].Kravtsov E., Haskel D., Te Velthuis S. G. E, Jiang J.S., Kirby B.J. Complementary polarized neutron and resonant x-ray magnetic reflectometry measurements in Fe/Gd heterostructures: Case of inhomogeneous intralayer magnetic structure // Phys. Rev. B 2009. V.79. P.134438.
- [95]. http://henke.lbl.gov/optical_constants/getdb2.html
- [96].Andreeva M.A. Interference phenomena of synchrotron radiation in TEY spectra for silicon-on-insulator structure./ M.A. Andreeva, E.P. Domashevskaya, E.E. Odintsova, V.A. Terekhov, S.Yu. Turishchev // Journal of Synchrotron Radiation - 2012. - V.19. - P.609.
- [97].Fontaine A. Determination of anomalous scattering factors in GaAs using x-ray refraction through a prism./ A. Fontaine, W.K. Warburton, K.F. Ludwig // Phys. Rev. B. - 1985. - V.31. - P.3599.
- [98].Kortright J.B. Soft-x-ray Faraday rotation at Fe $L_{2,3}$ edges ./ J.B. Kortright, M. Rice, R. Carr // Phys. Rev. B - 1995. - V.51. - P.10240.
- [99].Warburton W.K. Absorption effects in the determination of anomalous scattering factors using x-ray refraction through a prism./ W.K. Warburton, K.F. Ludwig // Phys. Rev. B. - 1986. - V.33. - P.8424.
- [100]. Fukamachi T. Measurements of X-Ray Anomalous Scattering Factors near the Cu K Absorption Edge by the Use of Synchrotron Radiation./ T. Fukamachi, S. Hosoya, S. Kawamura, S. Hunter, Y. Nakano // Jpn. J. Appl. Phys. - 1978. - V.17(S2). - P.326-328.

- [101]. Kawamura T. Application of the Dispersion Relation to Determine the Anomalous Scattering Factors./ T. Kawamura, T. Fukamachi // Jpn. J. Appl. Phys. - 1978. - V.17(S2). - P.224-226.
- [102]. Hoyt J.J. Determination of the anomalous scattering factors for Cu, Ni and Ti using the dispersion relation./ J.J. Hoyt, D. De Fontaine, W.K. Warburton // J. Appl. Cryst. - 1984. - V.17. - P.344-351.
- [103]. Bonse U. Tailless x-ray single-crystal reflection curves obtained by multiple reflection./ U. Bonse, M. Hart // Appl. Phys. Lett. - 1965. - V.7. - P.238.
- [104]. Hart M. Review Lecture: Ten Years of X-Ray Interferometry./ M. Hart // Proc. R. Soc. A London - 1975. - 346. - P.1
- [105]. Begum R. Direct measurements of the complex X-ray atomic scattering factors for elements by X-ray interferometry at the Daresbury Synchrotron Radiation Source./ R. Begum, M. Hart, K.R. Lea, D.P. Siddons // Acta. Cryst - 1986. - A.42. - P.456.
- [106]. Stanglmeier F. Determination of the dispersive correction $f'(E)$ to the atomic form factor from X-ray reflection./ F. Stanglmeier, B. Lengeler, W. Weber, H. Gobel, M. Schuster // Acta Cryst. - 1992. - A48. - P.626.
- [107]. Materlik G. Resonant Anomalous X-ray Scattering: Theory and Applications./ G. Materlik, C.J. Sparks, K. Fischer, B. Lengeler - Amsterdam:North Holland, - 1994. - P.35.
- [108]. Soufli R. Reflectance measurements on clean surfaces for the determination of optical constants of silicon in the extreme ultraviolet–soft-x-ray region./ R. Soufli, E.M. Gullikson // APPLIED OPTICS. – 1997, V.36. – P.5499
- [109]. Prins J.A. Über die Dispersion und Absorption von Röntgenstrahlen./ J.A. Prins // Z. Physik - 1928. - V.47. - P.479-498.
- [110]. Lengeler B. X-Ray Absorption and Reflection in Materials Science./ B. Lengeler // Materials Science Forum - 1991. - V.79-82. - P.974.
- [111]. Sacchi M. Optical Constants of Ferromagnetic Iron via 2p Resonant Magnetic Scattering./ M. Sacchi, C. Hague, L. Pasquali, A. Mirone, J.

- Mariot, P. Isberg, E. Gullikson, J. Underwood // *Phys. Rev. Lett.* - 1998. - V.81. - P.1521.
- [112]. Sacchi M. Resonant magnetic scattering of polarized soft x rays: Specular reflectivity and Bragg diffraction from multilayers./ M. Sacchi, C. Hague, E. Gullikson, J. Underwood // *Phys. Rev. B* - 1998. - V.57. - P.108.
- [113]. Sacchi M. Resonant magnetic scattering of polarized soft x-rays./ M. Sacchi // *Rassegna Scientifica* - 1999. - V.4. - P.3.
- [114]. Андреева М.А. Анализ спектров резонансного магнитного рассеяния рентгеновских лучей от магнитных многослойных структур./ М.А. Андреева, А.Г. Смехова // *Поверхность. Рентг., синхр. и нейтр. исследования* - 2006. - Т.2. - С.83.
- [115]. Sacchi M. Optical Constants of Ferromagnetic Iron via 2p Resonant Magnetic Scattering./ M. Sacchi, C.F. Hague, L. Pasquali, A. Mirone, J.-M. Mariot, P. Isberg, E.M. Gullikson, J.H. Underwood // *Phys. Rev. Lett.* - 1998. - V.81(7). - P.1521-1524.
- [116]. Rosenbluth A.E. Bragg condition in absorbing x-ray multilayers./ A.E. Rosenbluth, P. Lee // *Appl. Phys. Lett.* - 1982. - V.40. - P.466.
- [117]. Chen H.-Y. Single-mode dynamic X-ray diffraction for Si and Si-nanowires on Si./ H.-Y. Chen, P.-T. Chu, S.-L. Chang // *J. Appl. Cryst.* – 2014. – V.47. – 285-290.
- [118]. Смехова А.Г. Определение магнитного вклада в восприимчивость YFe_2 -слоя методом рентгеновской резонансной магнитной рефлектометрии./ А.Г. Смехова, М.А. Андреева, Е.Е. Одинцова, К. Дуфур, К. Думеснил, Ф. Вилхелм, А. Рогалев // *Кристаллография*. - 2010. - V.55(5). - P.906.
- [119]. Jaouen N. Ce 5d magnetic profile in Fe/Ce multilayers for the α and γ -like Ce phases by x-ray resonant magnetic scattering N. Jaouen, J.M. Tonnerre, D. Raoux, E. Bontempi, and L. Ortega // *PHYSICAL REVIEW B*. – 2002. – V.66. – 134420.

- [120]. Berreman D.W. Optics in Stratified and Anisotropic Media: 4×4-Matrix Formulation./ D.W. Berreman // J. Opt. Soc. Amer. - 1972. - V.62(4). - P.502-510
- [121]. Аззам Р. Эллипсометрия и поляризованный свет./ Р. Аззам, Н. Башара - Москва:Мир, 1981 – 392 С.
- [122]. Борзов Г.Н. Тензорный импеданс и преобразование световых пучков системами анизотропных слоев. II. Косое падение./ Г.Н. Борзов, Л.М. Барковский, В.И. Лаврукович // Журнал Прикладной Спектроскопии - 1976. - Т.25(3) - С.526.
- [123]. Федоров Ф.И. Оптика анизотропных сред./ Ф.И. Федоров - Минск:АН БССР, 1958.
- [124]. Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах./ Ф.И. Федоров - Москва: «Наука», 1965.
- [125]. Andreeva M.A. Theoretical analysis of the spectra of X-ray resonant magnetic reflectivity./ M.A. Andreeva, A.G. Smekhova // Applied Surface Science. - 2006. - V.252, - P.5619.
- [126]. Andreeva M.A. Depth selective investigations of magnetic multilayers by X-ray resonant magnetic reflectivity./ M.A. Andreeva, A.G. Smekhova, B. Lindgren, M. Björck, G. Andersson // J. Magn. Magn. Mater. - 2006. - V.300 (1). - P.e371-e374.
- [127]. Stepanov S.A. X-ray resonant reflection from magnetic multilayers: Recursion matrix algorithm./ S.A. Stepanov, S.A. Sinha // Phys. Rev. B. - 2000. - V.61. - P.15302.
- [128]. Андреева М.А. Рентгеновская магнитооптика на синхротронном излучении./ М.А. Андреева, А.Г. Смехова // Изв. РАН, сер. Физическая. - 2008. - Т.72. №5. - С.693.
- [129]. Ishimatsu N. Magnetic structure of Fe/Gd multilayers determined by resonant x-ray magnetic scattering./ N. Ishimatsu, H. Hashizume, S. Hamada, N. Hosoito, C.S. Nelson, C.T. Venkataraman, G. Srajer, J.C. Lang // Phys. Rev. B. - 1999. - V.60. - P.9596.

- [130]. Одинцова Е.Е. Анализ применимости приближенных методов в теории рентгеновского отражения от магнитных мультислоев./ Е.Е. Одинцова, М.А. Андреева // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2010. - №11. - С.46.
- [131]. Татарский Д.А. Интерференционное усиление магнитооптического эффекта Керра в многослойных структурах в рентгеновском диапазоне длин волн./ Д.А. Татарский, А.А. Фраерман // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2012. - Т.7. - С.10-14.
- [132]. Плешанов Н.К. О зеркальном и диффузном рассеянии нейтронов: операторный подход. Гатчина: ПИЯФ. - 1996. - 48 с.
- [133]. Ott H. Magnetic depth profiles from resonant soft x-ray scattering: Application to Dy thin films./ H. Ott, C. Schubertaler-Langeheine, E. Schierle, G. Kaindl, E. Weschke // Appl. Phys. Lett. - 2006. - V.88. - P.212507.
- [134]. Hamley I.W. Analysis of neutron and X-ray reflectivity data. I. Theory./ I.W. Hamley, J.S. Pedersen // J. Appl. Cryst. - 1994. - V.27, - P.29.
- [135]. Andreeva M.A. Nuclear resonant spectroscopy at Bragg reflections from periodic multilayers: Basic effects and applications./ M.A. Andreeva, B. Lindgren // Phys. Rev. B. - 2005. - V.72. - P.125422.
- [136]. Барковский Л.М. Волновые операторы в оптике. Препринт № 304./ Л.М. Барковский, Г.Н. Борздов, Ф.И. Федоров - Минск: Институт физики АН Белорусской ССР. 1983. - С.45.
- [137]. Смехова А.Г. // «Развитие метода резонансного рентгеновского отражения вблизи $L_{2,3}$ краев поглощения для исследования магнитных мультислоев.», канд. дисс., физфак МГУ, 2006.
- [138]. Henke B.L. X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at $E=50-30,000$ eV, $Z=1-92$./ B.L. Henke, E.M. Gullikson,

- J.C. Davis // Atomic Data and Nuclear Data Tables. - 1993. - V.54. No.2. - P.181.
- [139]. Gudat W. Close Similarity between Photoelectric Yield and Photoabsorption Spectra in the Soft-X-Ray Range./ W. Gudat, C. Kunz // Phys. Rev. Lett. - 1972. - V.29. - P.169-172.
- [140]. [Stöhr J.](#) Surface crystallography by means of electron and ion yield SEXAFS./ [J. Stöhr](#), R. Jaeger, R. Brennan // Surface Science - 1982. - V.117. - P.503-534.
- [141]. [Stöhr J.](#) Auger and photoelectron contributions to the electron-yield surface extended x-ray-absorption fine-structure signal./ [J. Stöhr](#), C. Noguera, T. Kendelewicz // Phys. Rev. B. - 1984. - V.30. - P.5571-5579.
- [142]. Guo T. Extended x-ray-absorption fine structure: Direct comparison of absorption and electron yield./ T. Guo, M.L. den Boer // Phys. Rev. B. - 1985. - V.31. - P.6233-6237.
- [143]. Erbil A. Total-electron-yield current measurements for near-surface extended x-ray-absorption fine structure./ A. Erbil, G.S. Cargill III, R. Frahm, R.F. Boehme // Phys. Rev. B. - 1988. - V.37. - P.2450-2465.
- [144]. [Stöhr J.](#) NEXAFS Spectroscopy, Springer Series in Surface Sciences./ [J. Stöhr](#) - Berlin:Springer, 1992. - V.25.
- [145]. Ejima T. Si–K absorption spectra of Si/CaF₂ and Si/LiF multilayers./ T. Ejima, K. Ouchi, M. Watanabe // J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena. - 1999. - V.101-103 - P.833-838.
- [146]. Ejima T. Formulae of Total Electron Yield for Multilayers: Extension of Pepper's Method./ T. Ejima // Jpn. J. Appl. Phys. - 2003. - V.42. - P.6459-6466.
- [147]. Watanabe M. Studies of multilayer structure in depth direction by soft X-ray spectroscopy./ M. Watanabe, T. Ejima, N. Miyafa, T. Imazono, M. Yanagihara // Nuclear Science and Techniques - 2006. - V.17. – P.257-267.

- [148]. Terekhov V.A. XANES, USXES and XPS investigations of electron energy and atomic structure peculiarities of the silicon suboxide thin film surface layers containing Si nanocrystals./ V.A. Terekhov, S.Yu. Turishchev, K.N. Pankov, I.E. Zanin., E.P. Domashevskaya, D.I. Tetelbaum, A.N. Mikhailov, A.I. Belov, D.E. Nikolichev, S.Yu. Zubkov // Surface and Interface Analysis. - 2010. - V.42. - P.891-896.
- [149]. Domashevskaya E.P. Synchrotron Radiation Interference in Front of the Silicon Absorption Edge for Silicon-on-Insulator Structures./ E.P. Domashevskaya, V.A. Terekhov, S.Yu. Turishchev // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - 2011. - V.5. - P.141-149.
- [150]. Terekhov V.A. Synchrotron Investigations of Electronic and Atomic-Structure Peculiarities for Silicon-Oxide Films' Surface Layers Containing Silicon Nanocrystals./ V.A. Terekhov, S.Yu. Turishchev, K.N. Pankov, I.E. Zanin, E.P. Domashevskaya, D.I. Tetelbaum, A.N. Mikhailov, A.I. Belov, D.E. Nikolichev // J. Surf. Invest. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - 2011. - V.5. - P.958-967.
- [151]. Andreeva M.A. Interference phenomena of synchrotron radiation in TEY spectra for silicon-on-insulator structure./ M.A. Andreeva, E.P. Domashevskaya, E.E. Odintsova, V.A. Terekhov, S.Yu. Turishchev // Journal of Synchrotron Radiation - 2012. - V.19. - P.609-618. (DOI:10.1107/S0909049512022844).
- [152]. Martens G. EXAFS in photoelectron yield spectra and optimisation of the photon glancing angle./ G. Martens, P. Rabe, N. Schwentner, A. Werner // J. Phys. C: Solid State Phys. - 1978. - V.11. - P.3125-3133.
- [153]. Румш М.А. / М.А. Румш, М.А. Лукирский, В.Н. Шмелёв // Изв. Акад. Наук СССР, Сер. Физ. - 1961. - Т.25. - С.1060-1065.
- [154]. de Boer D.K.G. Glancing-incidence x-ray fluorescence of layered materials./ D.K.G. de Boer // Phys. Rev. B. - 1991. - V.44. - P.498-511.
- [155]. Dev B.N. Resonance enhancement of x rays in layered materials: Application to surface enrichment in polymer blends./ B.N. Dev, A.K. Das,

- S. Dev, D.W. Schubert, M. Stamm, G. Materlik // *Phys. Rev. B.* - 2000. - V.61. - P.8462-8468.
- [156]. Novikova N.N. Investigation of molecular mechanisms of action of chelating drugs on protein-lipid model membranes by X-ray fluorescence./ N.N. Novikova, S.I. Zheludeva, M.V. Kovalchuk, N.D. Stepina, A.I. Erko, E.A. Yur'eva // *Crystallography Reports.* - 2009. - V.54. - P.1208-1213.
- [157]. Andreeva M.A. Localization of an ultrathin buried Fe layer in a multilayer structure Nb/Fe/[Mo/Si]₄₀/SiO₂ by means of X-ray standing waves./ M.A. Andreeva, A.D. Gribova, E.E. Odintsova, M.M. Borisov, M.V. Kovalchuk, E.Kh. Mukhamedzhanov // *Moscow University Physics Bulletin.* - 2009. - V.64(4). - P.437-441.
- [158]. Barchewitz R. The extended X-ray absorption fine structure in the reflectivity at the K edge of Cu./ R. Barchewitz, M. Cremonese-Visicato, G. Onori // *J. Phys. C.: Solid State Phys.* - 1981. - V.14. - P.1523-1524.
- [159]. Martens G. EXAFS studies on superficial regions by means of total reflection./ G. Martens, P. Rabe // *Phys. Stat. Sol. (a)* - 1980. - V.58. - P.415-424.
- [160]. Martens G. The extended X-ray absorption fine structure in the reflectivity at the K edge of Cu./ G. Martens, P. Rabe // *J. Phys. C: Solid State Phys.* - 1981. - V.14. - P.1523-1524.
- [161]. Bremer J. X-ray reflectivity of cobalt and titanium in the vicinity of the L_{2,3} absorption edges./ J. Bremer, K. Kaihola, R. Keski-Kuha // *J. Phys. C: Solid State Phys.* - 1980. - V.13. - P.2225-2230.
- [162]. Kaihola L. Anomalous scattering of X-rays by total reflection in the L-edge regions of iron and copper./ L. Kaihola, J. Bremer // *J. Phys. C: Solid State Phys.* - 1981. - V.14. - P.L43-L47.
- [163]. Jones R.G. Sampling depths in total yield and reflectivity SEXAFS studies in the soft X-ray region./ R.G. Jones, D.P. Woodruff // *Surface Science* - 1982 - V.114. - P.38-46.

- [164]. André J.M. X-ray anomalous scattering and specular reflection in MV photoabsorption regions./ J.M. André, R. Barchewitz, A. Maquet, R. Marmoret // *Phys. Rev. B*. - 1984. - V.29. - P.6576-6585.
- [165]. Лиаховская И.И. Ультрамягкие рентгеновские спектры отражения окисленных редкоземельных металлов./ И.И. Лиаховская, А.С. Шулаков., Л.Е. Лобанова, Т.М. Зимкина // *Физика Твёрдого Тела*. - 1988. - Т.30. - С.221-226.
- [166]. van Brug H. Si L-edge structures in the soft x-ray reflectivity of laser-annealed Si surfaces (with Ni overlayers)/ H. van Brug, H. van Dorssen, M.J. van der Wiel // *Surface Science*. - 1989. - V.210. - P.69-84.
- [167]. Waki I. The silicon L-edge photoabsorption spectrum of silicon carbide./ I. Waki, Y. Hirai // *J. Phys.: Condens. Matter* - 1989. - V.1. - P.6755-6762.
- [168]. Filatova E. Total reflection and surface scattering of soft X-rays on the Si-SiO₂ system and hexagonal BN crystal./ E. Filatova, A. Stepanov, C. Blessing, J. Friedrich, R. Barchewitz, J.-M. Andre, F.Le. Guern, S. Bac, P. Troussel // *J. Phys.: Condens. Matter*. - 1995. - V.7. - P.2731-2744.
- [169]. Ponomarev Y.V. ReflEXAFS spectroscopy of thin Fe/Sc multilayers./ Y.V. Ponomarev, A.B. Palkin, A.B. Savel'ev, N.N. Salashenko // *Journal of x-ray science and technology* - 1995. - V.5. - P.379-388.
- [170]. Filatova E. Optical constants of amorphous SiO₂ for photons in the range of 60-3000 eV./ E. Filatova, V. Lukyanov, R. Barchewitz, J.-M. André, M. Idir, Ph. Stemmler // *Journal of Physics: Condensed Matter*. - 1999. - V.11. - P.3355-3370.
- [171]. Filatova E.O. X-ray reflection spectroscopy of the HfO₂/SiO₂/Si system in the region of the O-K absorption edge./ E.O. Filatova, P. Jonnard, J.-M. André // *Thin Solid Films*. - 2006. - V.500. - P.219-223.
- [172]. Pepper S.V. Optical Analysis of Photoemission./ S.V. Pepper // *J. Opt. Soc. Am.* - 1970. - V.60. - P.805-812.
- [173]. Kasrai M. Sampling depth of total electron and fluorescence measurements in Si L- and K-edge absorption spectroscopy./ M. Kasrai, W.N. Lennard,

- R.W. Brunner, G.M. Bancroft, J.A. Bardwell, K.H. Tan // *Appl. Surf. Sci.* - 1996. - V.99. - P.303-312.
- [174]. Bakaleinikov L.A. Analytical and numerical approaches to calculating the escape function for the emission of medium-energy electrons from uniform specimens./ L.A. Bakaleinikov, E.Yu. Flegontova, K.Yu. Pogrebitskii, H.-J. Lee, Y.-K. Cho, H.-M. Park, Y.-W. Song // *Technical Physics.* - 2001. - V.46. - P.796-805.
- [175]. Cazaux J. Influence of electron refraction effects at surfaces and interfaces in quantitative surface analysis with XPS and AES./ J. Cazaux // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena.* - 2013. - V.187. - P.23– 31.
- [176]. Борн М., Основы оптики./ М. Борн, Э. Вольф - М.: Наука. 1970. - С.855.
- [177]. Фёдоров Ф.И. Теория Геротропии./ Ф.И. Фёдоров - Минск: Наука и Техника, 1976.
- [178]. Vartanyants I.A. Contributions of multipole terms to the photoelectric yield in X-ray standing-wave measurements./ I.A. Vartanyants, J. Zegenhagen // *Il Nuovo Cimento.* - 1997. - D.19, - P.617–624.
- [179]. Odintsova E.E. Analysis of Applicability of Approximate Methods in the Theory of X-Ray Reflection from Magnetic Multilayers./ E.E. Odintsova, M.A. Andreeva // *J. Surf. Invest.* - 2010. - V.4. - P.913-922.
- [180]. Andreeva M.A. Effect of background asymmetry in conversion-electron Mossbauer spectroscopy with total external reflection./ M.A. Andreeva, G.N. Belozerskii, O.V. Grishin, S.M. Irkaev, V.I. Nikolaev, V.G. Semenov // *JETP Lett.* - 1992. - V.55(1). - P.63-66.
- [181]. Andreeva M.A. Grazing-incidence Mössbauer spectroscopy determination of photo- and conversion-electron yield functions./ M.A. Andreeva, S.M. Irkaev, V.G. Semenov // *JETP.* - 1994. - V.78. - P.956-965.
- [182]. Andreeva M.A. Secondary radiation emission at Mössbauer total external reflection./ M.A. Andreeva, S.M. Irkaev, V.G. Semenov // *Hyperfine Interactions.* - 1996. - V.97/98. - P.605-623.

- [183]. Andreeva M.A., Belozerskii G.N., Irkaev S.M., Semenov V.G., Sokolov A.Yu., Shumilova N.V. Investigation of thin oxide ^{57}Fe films by Mössbauer total external reflection// Phys. Stat. Sol. 1991 V.127(2) P.455-464.
- [184]. Андреева М.А. Эффект асимметрии фона в мессбауэровской спектроскопии конверсионных электронов при полном внешнем отражении. / М.А. Андреева, Г.Н. Белозерский, О.В. Гришин, С.М. Иркаев, В.И. Николаев, В.Г. Семенов // Письма в ЖЭТФ – 1992. – Т.55(1), - С.62-65.
- [185]. Андреева М.А. Определение функций выхода конверсионных и фотоэлектронов методом скользящей мессбауэровской спектроскопии. / М.А. Андреева, С.М. Иркаев, В.Г. Семенов // ЖЭТФ - 1994 - Т.105(6). – С.1767-1784.
- [186]. Andreeva M.A. Mossbauer reflectometry of ultrathin multilayer $\text{Zr}(10\text{нм})/[^{57}\text{Fe}(1.6\text{нм})/\text{Cr}(1.7\text{нм})]_{26}/\text{Cr}(50\text{нм})$ film using synchrotron radiation. / M.A. Andreeva, S.M. Irkaev, V.G.Semenov, K.A.Prokhorov, N.N.Salashchenko, A.I.Chumakov, R.Ruffer // Journal of Alloys and Compounds - 1999 – V.286. - P.322-332.
- [187]. Chumakov A.I. Determination of the yield function for different energy loss of electrons by means of total reflection of 14.4 keV X-ray from Fe-mirror./ A.I. Chumakov, G.V. Smirnov // JETP. – 1985. - V.89. – P.1810.
- [188]. Seredin P.V. Phase formation under the effect of spinodal decomposition in epitaxial alloys of $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{GaAs}(100)$ heterostructures./ P.V. Seredin, E.P. Domashevskaya, Val.E. Rudneva, V.E. Rudneva, N.N. Gordienko, A.V. Glotov, I.N. Arsenyev, D.A. Vinokurov, A.L. Stankevich, I.S. Tarasov // [Semiconductors](#). - 2009. - V.43(9). - P.1221-1225.
- [189]. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/html/form.html>
- [190]. <https://www.dropbox.com/sh/23g0zl0kf94cpyf/AAAMZo62e1Y07oahqVp11rVwa?dl=0>
- [191]. Kasrai M. Sampling depth of total electron and fluorescence measurements in Si L- and K-edge absorption spectroscopy M. Kasrai, W.N. Lennard,

- R.W. Brunner, G.M. Bancroft, J.A. Bardwell, K.H. Tan. // Applied Surface Science - 1996. - V.99. - P.303-312.
- [192]. <http://powdercell-for-windows.software.informer.com/2.4/>
- [193]. Иверонова В.И. Теория рассеяния рентгеновских лучей./ В.И. Иверонова, Г.П. Ревкевич - М:Моск.Ун-та, 1972. - С.49.
- [194]. Kishino S. Theoretical Considerations on Bragg-case Diffraction of X-rays at a Small Glancing Angle./ S. Kishino, K. Kohra // Jap. J. App. Phys. - 1971. - V.10, - P.551.
- [195]. Rustichelli F. On the deviation from the Bragg law and the widths of diffraction patterns in perfect crystals./ F. Rustichelli // Phil. Mag. - 1975. - V.31. - P.1.
- [196]. Brümmer O. Study of extremely asymmetric X-ray diffraction in the Bragg case of grazing incidence./ O. Brümmer, H.R. Höcher, J. Nieberr // Phys. Stat. Sol. - 1976. - V.37. - P.529.
- [197]. Pietsch U. Lattice-parameter-difference measurement of heteroepitaxial structures by means of extremely asymmetrical Bragg diffraction./ U. Pietsch, W. Borchard // J. Appl. Cryst. - 1987. - V.20, - P.8.
- [198]. Int. Tables for X-ray Crystallography - 1969. - V.1. - P.340.
- [199]. Hubbell J.H. Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections./ J.H. Hubbell, Wm.J. Veigele, L.A. Briggs, R.T. Brown, D.T. Cromer, R.J. Howerton // J. Phys. Chem. Ref. Data - 1975. - V.4(3). - P.471-538.
- [200]. Brown W.D. // Wash. Report - 1966. - P.269
- [201]. Cromer D.T. X-ray scattering factors computed from numerical Hartree–Fock wave functions./ D.T. Cromer // Acta Crystallogr. A. - 1968. - V.24(2), - P.321-324.
- [202]. Segmuller A., Int.conf. “Modulated structures”, New-York,1979. - P.78-80

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА

Статьи

- [A1]. Andreeva M.A. Kinematic limit in the theory of x-ray magnetic reflectivity./ M.A. Andreeva, **Yu.L. Repchenko** // Crystallography Reports. - 2013. - V.58. - No.7, - P.1037-1042.
- [A2]. Andreeva M.A. The problem of XANES spectrum interpretation measured by TEY technique at different photon glancing angles./ M.A. Andreeva, **Yu.L. Repchenko**, E.P. Domashevskaya, V.A. Terekhov, P.V. Seredin, V.M. Kashkarov // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. - 2013. – V.191. – P.35-40. DOI 10.1016/j.elspec.2013.09.004.
- [A3]. Андреева М. А. Резко асимметричная дифракция как метод определения магнитооптических констант для рентгеновского излучения вблизи краев поглощения./ М.А. Андреева, Ю.Л. Репченко, А.Г. Смехова, К. Думенил, Ф. Вилхелм, А. Рогалев // ЖЭТФ - 2015. - Т.147(6) - С.1128.

Тезисы докладов и сообщений, опубликованных в материалах конференций

- [A4]. **Репченко Ю.Л.** Определение рентгеновской восприимчивости резонансного слоя YFe_2 по выходу флуоресцентного излучения в условиях волноводного возбуждения./ **Ю.Л. Репченко** // Материалы Международного молодёжного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2012», секция «Физика», подсекция «Физика твёрдого тела» (Москва, 2012). - С.40.
- [A5]. **Repchenko Y.L.** Kinematic approach in the theory of X-ray resonant magnetic reflectivity./ **Y.L Repchenko.**, M.A. Andreeva // Book of abstracts 11th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging and Youth International School-Conference «Modern Methods of Diffraction Data Analysis and Topical Problems of X-ray Optics» (St. Petersburg, 2012). - P.238.

- [A6]. Андреева М.А. Кинематический предел в теории рентгеновской магнитной рефлектометрии./ М.А. Андреева, **Ю.Л. Репченко** // Доклады конференции «Рентгеновская оптика – 2012» (Черноголовка, 2012). - С.7-9.
- [A7]. **Репченко Ю.Л.** Исследования $L_{2,3}$ спектров поглощения Р в плёнках GaInP в скользящей геометрии./ **Ю.Л. Репченко**, М.А. Андреева, Э.П. Домашевская, В.А. Терехов, П.В. Середин, В.М. Кашкаров // Доклады конференции «Рентгеновская оптика – 2012» (Черноголовка, 2012). - С.102-104.
- [A8]. Андреева М.А. Теория рентгеновской магнитной рефлектометрии: сравнение динамики и кинематики./ М.А. Андреева, **Ю.Л. Репченко** // Современные методы анализа дифракционных данных и актуальные проблемы рентгеновской оптики: сборник материалов и программа Шестого международного научного семинара и Четвёртого международного молодёжной научной школы-семинара (Великий Новгород, 2013). - С.26-28.
- [A9]. **Репченко Ю.Л.** Искажения спектров XANES при скользящих углах падающего рентгеновского излучения./ **Ю.Л. Репченко**, М.А. Андреева, Э.П. Домашевская, В.А. Терехов, П.В. Середин, В.М. Кашкаров // Международная балтийская школа по физике твёрдого тела. Тезисы докладов (Калининград, 2013). - С.31-32.
- [A10]. Andreeva M.A. The problem of XANES spectrum interpretation measured by TEY technique at different photon glancing angles./ M.A. Andreeva, **Yu.L. Repchenko**, E.P. Domashevaskaya, V.A. Terekhov, P.V. Seredin, V.M. Kashkarov // Fifth joint BER II and BESSY II users meeting (Berlin, 2013) P.64.
- [A11]. **Репченко Ю.Л.** Резко асимметричная дифракция как метод определения компонент тензора восприимчивости вблизи краев поглощения./ **Ю.Л. Репченко**, М.А. Андреева // Доклады конференции «Рентгеновская оптика – 2014» (Черноголовка, 2014).

- [A12]. Andreeva M.A. Analysis of different approximations in the XRMR theory./
M.A. Andreeva, **Y.L. Repchenko** // Book of abstracts 12th Biennial
Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (Villard-de-
Lans, 2014). - P.67.
- [A13]. **Repchenko Y.L.** Extremely asymmetric diffraction as a tool for the optical
constant determinations / **Y.L. Repchenko**, M.A. Andreeva, A. Rogalev, A.
Smekhova // Book of abstracts 12th Biennial Conference on High
Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (Villard-de-Lans, 2014). - P.68.
- [A14]. http://kftt.phys.msu.ru/programs/ASYM_XANES.zip;
<https://www.dropbox.com/sh/23g0zl0kf94cpyf/AAAMZo62e1Y07oahqVpl1rVwa?dl=0>

Выражаю огромную благодарность моим научным руководителям профессору Воронежского государственного университета Домашевской Эвелине Павловне за общее руководство и организацию научной деятельности и в.н.с., д.ф.-м.н. Московского Государственного Университета имени М.В. Ломоносова Андреевой Марине Алексеевне за постановку задачи, постоянное внимание, помощь в работе и плодотворное обсуждение результатов; а также сотружникам Воронежского Государственного Университета профессору Терехову Владимиру Андреевичу, доценту Середину Павлу Владимировичу и проф. Кашкарову Владимиру Михайловичу за предоставленные экспериментальные данные; сотрудникам кафедры физики твердого тела профессорам Бушуеву Владимиру Алексеевичу, Овчинниковой Елене Николаевне и доценту, д.ф.-м.н. Орешко Алексею Павловичу за плодотворное обсуждение результатов на теоретическом семинаре; кафедре физики твердого тела и наноструктур Воронежского Государственного Университета за возможность получить достойное образование, и кафедре физики твердого тела физического факультета Московского Государственного Университета за возможность продолжить обучение и проводить научные исследования совместно с в.н.с., д.ф.-м.н. Андреевой М.А.