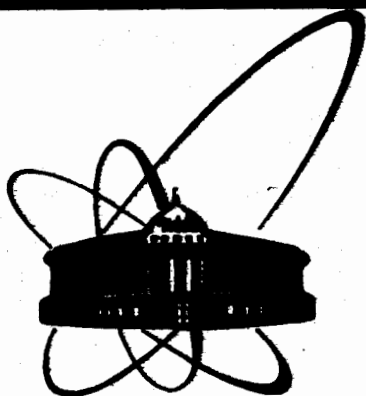


87-460



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P4-87-460

Д.А.Корнеев, Л.П.Черненко

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТРАЖЕНИЯ НЕЙТРОНОВ
ОТ ОДНОМЕРНОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ЯДЕР**

1987

В настоящее время наблюдается повышенный интерес к систематическому изучению магнитных и структурных особенностей поверхностей и тонких пленок с помощью нейтронов. Прогресс в этом направлении связывают с созданием нейтронных спектрометров по методу времени пролета, позволяющим изучать отражательную способность вещества в зависимости от нормальной к поверхности компоненты волнового вектора нейтрона k .

Дискретную среду, состоящую из ядер, принято описывать эффективным потенциалом нейтрон-ядерного взаимодействия ^{/1/}:

$$U = 4\pi \frac{\hbar^2}{2m} \bar{b} \cdot \rho, \quad //$$

где m - масса нейтрона, \bar{b} - среднее по объему значение ядерной длины рассеяния нейтрона, ρ - число ядер в единице объема. Коэффициент отражения нейтронов от поверхности среды $R(k)$ находится из решения одномерной квантово-механической задачи на отражение от барьера высотой U ^{/2/}. Одномерный подход представляет собой эффективное средство описания процесса отражения и имеет большую практическую значимость, несмотря на определенные ограничения класса рассматриваемых задач.

В основу известных нам методов решения задач, моделирующих процесс отражения нейтронов от пленок со сложной структурой ^{/3, 4, 5/}, положена модель с кусочно-непрерывным /ступенчатым/ потенциалом. Это ограничивает возможности метода. Дело в том, что при сложной зависимости b от координаты процедура ее усреднения становится некорректной. В этом случае вопрос об адекватности описания неоднородной ядерной последовательности непрерывным или кусочно-непрерывным потенциалом требует специального рассмотрения.

Более реалистической, на наш взгляд, моделью среды является последовательность бесконечных в двух направлениях ядерных плоскостей с координатами x_n/n - номер плоскости/. При этом взаимодействие нейтрона с каждой плоскостью описывается δ -функцией Дирака, умноженной на величину, равную среднему по n -й плоскости значению ядерной длины рассеяния нейтронов. Такой модели соответствует одномерный сингулярный потенциал вида

$$U(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n=1}^N a_n \cdot \delta(x - x_n). \quad //2/$$

Таким образом, моделирование отражения нейтронов от "реальных" сред сводится к поиску решения квантово-механической задачи об отражении от сингулярного потенциала /2/ с определенным набором a_n и x_n , характеризующим особенности пространственной структуры и состава одномерной среды на атомном уровне.

Легко показать, что уравнение Шредингера с потенциалом /2/ эквивалентно системе N рекуррентных уравнений:

$$\dot{\psi}_{n+1}(x_n) - \dot{\psi}_n(x_n) = a_n \cdot \psi_n(x_n), \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad /3/$$

Условия непрерывности волновой функции нейтрона в точках x_n порождают дополнительно N рекуррентных уравнений:

$$\psi_{n+1}(x_n) - \psi_n(x_n) = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad /4/$$

Волновую функцию нейтрона $\psi_n(x)$ запишем в следующем виде:

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1^+(k)e^{ikx} + A_1^-(k)e^{-ikx}, & (x < x_1); \\ \psi_n(x) = A_n^+(k)e^{ikx} + A_n^-(k)e^{-ikx}, & (x_{n-1} < x < x_n, n = 1, 2, \dots, N); \\ \psi_{N+1}(x) = A_{N+1}^+(k)e^{ikx} + A_{N+1}^-(k)e^{-ikx}, & (x > x_N), \end{cases} /5/$$

которая с учетом очевидных равенств

$$A_1^+(k) = 1; \quad A_{N+1}^-(k) = 0, \quad /6/$$

вытекающих из условия нормировки падающей волны на единицу и отсутствия волн, идущих из $+\infty$, содержит $2N$ неизвестных комплексных амплитуд $A_n^+(k)$ и $A_n^-(k)$. Подстановка волновой функции /5/ в систему уравнений /3/, /4/ приводит к системе $2N$ линейных алгебраических уравнений с комплексными коэффициентами относительно $2N$ неизвестных амплитуд $A_n^\pm(k)$, среди которых $A_1^-(k)$ и $A_{N+1}^+(k)$ - суть искомые амплитуды отраженной и прошедшей волн соответственно. Коэффициенты отражения $R(k)$ и прохождения $T(k)$ определяются следующим образом: $R(k) = |A_1^-(k)|^2$, $T(k) = |A_{N+1}^+(k)|^2$. В случае моделирования пленок, нанесенных на подложки, будем считать, что

$$\psi_{N+1}(x) = A_{N+1}^+(k)e^{ik'x}, \quad (x > x_N),$$

где k' - волновой вектор нейтрона в подложке, связанный с потенциалом подложки V соотношением

$$k' = \sqrt{k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V}.$$

Очевидно, что в случае непоглощающих сред, т.е. когда V и все a_n действительны, $R(k)$ и $T(k)$ должны удовлетворять условию $R(k) + T(k) = 1$. Введем последовательную нумерацию амплитуд

$$A_k = \begin{cases} A_n^+, & \text{при } k = 2n - 1 \\ A_n^-, & \text{при } k = 2n, (n = 1, 2, \dots, N+1). \end{cases}$$

Тогда, с учетом /6/, систему алгебраических уравнений относительно A_k можно записать в матричной форме

$$B \cdot \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_{2N+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad /7/$$

где комплексная матрица B строится путем подстановки /5/ в уравнения /3/, /4/. Матрица B имеет ленточную структуру. Таким образом, задача сводится к нахождению обратной матрицы B^{-1} , а решение уравнения /7/ записывается следующим образом:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_{2N+2} \end{pmatrix} = B^{-1} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad /8/$$

Элементы матриц B и B^{-1} зависят от нормальной к поверхности компоненты волнового вектора нейтрона k , а также от координат ядер x_n и их длин рассеяния a_n . Отметим, что для частного случая сингулярного потенциала /однородный и строго периодический/ в работе /8/ получено аналитическое выражение для коэффициента $R(k)$. Существенной чертой предлагаемого метода является свобода в построении типа модельной структуры путем выбора соответствующих массивов x_n и a_n . Это позволяет получать решения для неоднородных и неперiodических структур. Из /8/ строится волновая функция нейтрона в среде, определяются коэффициенты отражения $R(k)$ и прохождения $T(k)$. Использование метода, на наш взгляд, позволит продвинуться в исследовании деталей структуры тонких пленок с помощью нейтронов путем подгон-

ки расчетных и экспериментальных значений $R(k)$ в доступном для измерений интервале значений k .

На основе метода была составлена процедура расчета функции $R(k)$. Возможности ЭВМ типа CDC-6500 позволяют рассчитывать структуры, состоящие из $\sim 2,5 \cdot 10^3$ ядерных плоскостей, что соответствует пленкам толщиной ~ 1 мкм. Время, затрачиваемое на нахождение одного значения R /при $N \sim 2,5 \cdot 10^3$ /, составляет ~ 3 с.

Ниже обсуждаются результаты апробации метода на некоторых простейших типах структур.

1. Упорядоченный двухкомпонентный "сплав" - периодическая последовательность чередующихся плоскостей двух типов со значениями длин рассеяния a_1 и a_2 . Такая структура позволяет проанализировать функцию $R(k)$ при различных значениях средней длины рассеяния сплава \bar{a} :

$$\bar{a} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N a_n = \frac{1}{2} (a_1 + a_2).$$

По аналогии с /1/ такой структуре соответствует потенциальный барьер величины

$$U = 4\pi \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\bar{a}}{a}, \quad /9/$$

где a - межплоскостное расстояние ($1/a$ - число ядерных слоев на единицу длины). Расчеты проведены при $a = 4 \text{ \AA}$, $N = 500$.

Как видно из рис.1, расчеты $R(k)$ по модели сингулярного потенциала и по формуле /7/ для потенциального барьера /9/ совпадают с высокой точностью. В зависимости R от k имеются все характерные черты, свойственные отражению от потенциального барьера:

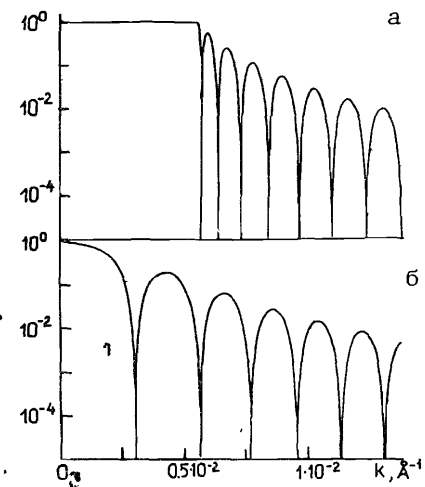


Рис.1. Значения коэффициента отражения, рассчитанные для:

а/ потенциального барьера $U = V_0$ и б/ потенциальной ямы $U = -V_0$, совпавшие с расчетами по модели сингулярного потенциала с $\bar{a} = a_0 > 0$ и $\bar{a} = -a_0$ соответственно / $a_0 = 9,58 \cdot 10^{-8} \text{ \AA}^{-1}$, $V_0 = 0,625 \cdot 10^{-7} \text{ эВ}$./

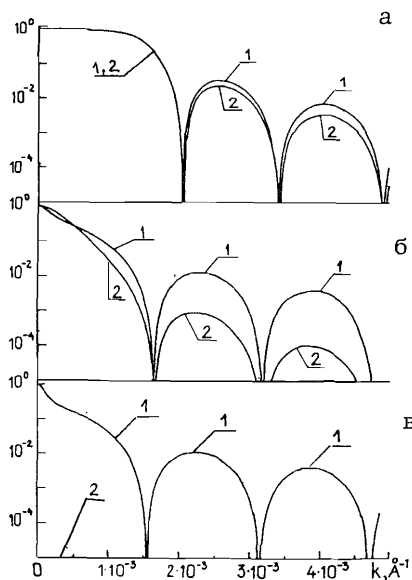


Рис.2. Значения коэффициента отражения, рассчитанные для "сплава" с помощью сингулярного /кривые 1/ и соответствующего ему /см. ф-лу /9// непрерывного потенциалов /кривые 2/: а/ $\bar{a} = 5,748 \cdot 10^{-7} \text{ \AA}^{-1}$; $U = 3,73 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}$, б/ $\bar{a} = 9,58 \cdot 10^{-8} \text{ \AA}^{-1}$; $U = 6,25 \cdot 10^{-10} \text{ эВ}$; в/ $\bar{a} = 0$, $U = 0$.

существование граничного значения волнового вектора k_f ($k_f = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U}$), ниже которого наступа-

ет полное отражение нейтронов в случае $\bar{a} > 0$ /рис.1а/, отсутствие k_f при $\bar{a} < 0$ /рис.1б/, осцилляции, соответствующие интерфе-

ренции волн, отраженных от границ барьера. Совпадение моделей в этом случае справедливо для любых, не равных нулю a_1 и a_2 , когда \bar{a}/a соответствует значениям $U > 10^{-8} \text{ эВ}$. Для смеси с $a_1 > 0$ и $a_2 < 0$ ($|a_1| \approx |a_2|$), т.е. при $\bar{a} \approx 0$ /скомпенсированный сплав/, проявляются существенные различия в результатах расчетов по модели сингулярного и непрерывного потенциалов. Эти различия наступают в области $U < 10^{-8} \text{ эВ}$. На рис.2 показаны значения $R(k)$ в области малых k ($0 < k < 5 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$), рассчитанные для сингулярного /кривые 1/ и соответствующего ему непрерывного потенциала /кривые 2/ для трех значений \bar{a} . Видно, что с уменьшением \bar{a} различия в расчетах возрастают. Основная разница в зависимости $R(k)$ от \bar{a} состоит в том, что в потенциальной модели $R(k) \rightarrow 0$ при $\bar{a} \rightarrow 0$, в то время как для сингулярного потенциала этого не наблюдается, т.е. $R(k) \neq 0$ при $\bar{a} = 0$ /см.рис.2в/. Из этого следует, что, по крайней мере в одномерном случае, модель непрерывного потенциала в области $\bar{a} \approx 0$ неадекватно описывает дискретную среду, состоящую из ядер разного типа с отличными от нуля длинами рассеяния.

2. Многослойная структура - чередующаяся последовательность слоев /толщиной, как правило, $\sim 100 \text{ \AA}$ / двух различных веществ. Используется обычно в качестве монохроматоров нейтронов. Рассчитывалась в модели кусочно-непрерывного потенциала в работах /3,4,5/. На рис.3 показаны результаты расчета $R(k)$ для многослойной структуры GeMn, в которой чередуются равнотолщинные /90 \text{ \AA}/ слои Ge и Mn. В нашем случае расчет проводился при меж-

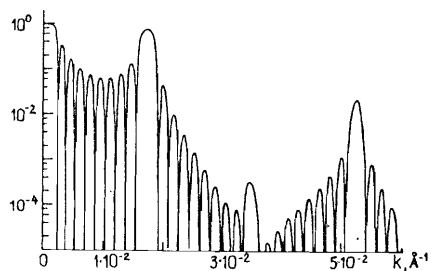
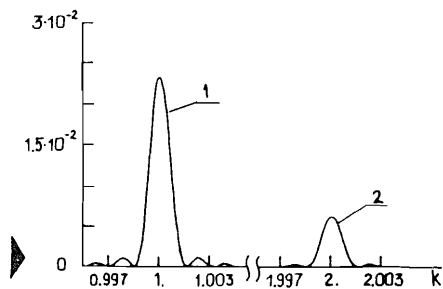


Рис.3. Рассчитанные значения коэффициента отражения от многослойной структуры GeMn без взаимной диффузии, совпавшие с результатами расчета по модели многоступенчатого потенциала, приведенными в /5/. Параметры структуры: $a = 5 \text{ \AA}$, $\alpha_{\text{Ge}} = 0,185 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$, $\alpha_{\text{Mn}} = -0,145 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$, $N = 360$, число сверхслоев = 20.

Рис.4. Рассчитанные значения коэффициента отражения в области дифракционных пиков первого /кривая 1/ и второго /кривая 2/ порядков отражения от структуры с $\alpha = 0,382 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$, $a = 4 \text{ \AA}$, $N = 500$. По шкале абсцисс отложены значения k в единицах π/a .



ядерном расстоянии 5 \AA при числе ядерных слоев в сверхслое 18. Значения α_{Ge} , α_{Mn} , число сверхслоев соответствовали параметрам, приведенным в работе /5/. Из сравнения наших результатов с расчетами /5/ следует, что модель с кусочно-непрерывным потенциалом для многослойной пленки адекватна модели сингулярного потенциала, не учитывающего взаимной диффузии сверхслоев /в смысле поведения R в области $k < 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$ /.

Коротко опишем результаты расчетов в дифракционной области. На рис.4 приведены значения $R(k)$ при больших k , а именно в области значений векторов обратной решетки. Рассчитывалась периодическая структура с $\alpha = 0,382 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$, $a = 4 \text{ \AA}$, $N = 500$, что соответствует пленке

Рис.5. Значения коэффициентов отражения в области дифракционного пика, рассчитанные для структуры с $\alpha = 1,916 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$, $a = 8 \text{ \AA}$, $N = 500$. По шкале абсцисс отложены значения k в единицах π/a .

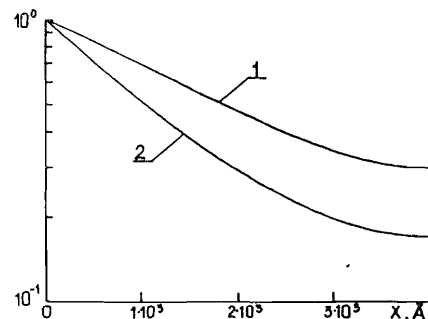
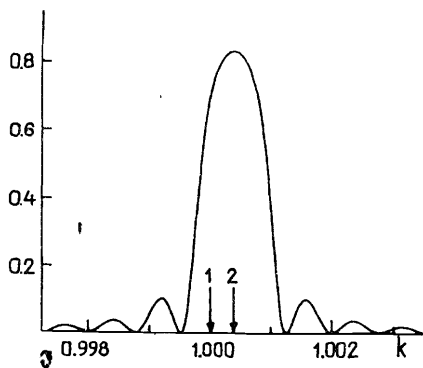


Рис.6. Зависимость потока нейтронов от координаты внутри среды для структуры с параметрами, перечисленными в подписи к рис.5. Кривые 1 и 2 соответствуют значениям k , помеченным стрелками на рис.5.

толщиной $2 \cdot 10^3 \text{ \AA}$. Кривые 1 и 2 на рис.4 соответствуют дифракционным пикам 1 и 2 порядков отражения в области k , равных π/a и $2\pi/a$. Форма дифракционного пика для структуры с $a = 8 \text{ \AA}$, $\alpha = 1,916 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$ и $N = 500$ показана на рис.5 Для этой структуры была также рассчитана зависимость потока падающих нейтронов от координаты внутри среды. Результаты расчета потока для двух значений k показаны на рис.6. Заметим, что результаты, полученные в области $k = \frac{\pi}{a} \cdot n / n = 1, 2, \dots$, являются примером точного решения двухволновой динамической задачи брэгговской дифракции для простейших, т.е. строго периодических, структур. В заключение еще раз отметим, что рассмотренные здесь модели структур, с точки зрения возможностей метода, являются тривиальными.

Авторы благодарят А.М.Балагурова за полезные советы и интерес к работе и С.Ю.Шмакова за консультации при составлении процедуры решения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шапиро Ф.Л. Препринт ОИЯИ РЗ-7135, Дубна, 1973.
2. Шифф Л. Квантовая механика. М.: ИЛ, 1959.
3. Гукасов А.Г., Рубан В.А., Бедризова М.Н. - Письма в ЖТФ, 1977, т.3, с.130.
4. Антонов А.В. и др. - Письма в ЖЭТФ, 1974, т.20, с.632.
5. Дзюблик А.Я., Рудько В.Н. - УФЖ, 1985, т.30, с.173.
6. Игнатович В.К. - УФН, 1986, т.150, с.145.
7. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.+Л.: ИТТЛ, 1949, с.383.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 июня 1987 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р.55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р.00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р.50 к.
D2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р.30 к.
D1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р.50 к.
D10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программирования и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983.	3 р.50 к.
D17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р.75 к.
D11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.00 к.
D13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна, 1985.	4 р.80 к.
D4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1985.	3 р.75 к.
D3,4,17-86-747	Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р.50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984. /2 тома/	13 р.50 к.
D1,2-86-668	Труды VIII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1986. /2 тома/	7 р.35 к.
D9-87-105	Труды X Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1986. /2 тома/	13 р.45 к.
D7-87-68	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Дубна, 1986	7 р.10 к.
D2-87-123	Труды Совещания "Ренормгруппа-86". Дубна, 1986	4 р.45 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79. Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.

Корнеев Д.А., Черненко Л.П.
Моделирование отражения нейтронов от одномерной последовательности ядер

P4-87-460

Описывается метод расчета коэффициента отражения нейтронов низких энергий от границы модельной среды, представляющей собой дискретную последовательность ядерных плоскостей. Процедура расчета, построенная на основе метода, проверена на простейших моделях структур и позволяет рассчитывать спектральную зависимость коэффициента отражения нейтронов от пленок толщиной $\leq 1 \mu\text{м}$. Метод можно применять для исследований неоднородных по составу тонких пленок путем сравнения экспериментальных и расчетных значений коэффициента отражения в широком интервале волновых векторов нейтронов, как в области зеркального отражения нейтронов, так и в области дифракции.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Korneev D.A., Chernenko L.P.
Modelling the Reflection of Neutrons from a One-Dimensional Row of Nuclei

P4-87-460

The method is described for calculating the coefficient of reflection of low-energy neutrons from the boundary of a model medium that is a discrete sequence of nuclear planes. The calculation procedure constructed on the basis of the method has been verified for simplest models of structures, and it allows one to compute a spectral dependence of the neutron-reflection factor from films of thickness $\leq 1 \mu$. The method can be applied to study thin films inhomogeneous in composition by comparing the experimental and calculated values of the reflection factor in a wide interval of neutron wavevectors in the region of both specular reflection and diffraction.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987