

УДК 539.26:535.312:548.73

**ТЕОРИЯ ОТРАЖЕНИЯ ОТ МЁССБАУЭРОВСКОГО ЗЕРКАЛА.  
УЧЕТ ПОСЛОЙНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ СВЕРХТОНКИХ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ**

М. А. Андреева, К. Росете (Мексика)

(кафедра физики твердого тела)

**Введение.** Первые эксперименты по мёссбауэровскому полному отражению интерпретировались на основе формул Френеля, в которые вводились показатели преломления для собственных поляризаций излучения в анизотропной (при наличии сверхтонких взаимодействий (СТВ)) резонансной среде [1]. Справедливость такого подхода для скользких углов падения в первом приближении доказана в работе [2]. Однако в обеих работах [1, 2] среда рассматривалась как однородно анизотропная. В то же время из экспериментальных спектров, полученных в работе [1], следовало, что метод весьма чувствителен к наличию любых изменений химического и магнитного состояния среды вблизи поверхности. Отметим, что именно эти изменения и представляют наибольший интерес с точки зрения физики поверхности. При наличии изменений параметров СТВ вблизи поверхности среду уже нельзя рассматривать как однородно анизотропную. Для исследования профиля их изменений аналогично тому, как это делается в рентгеновской (изотропной) оптике [3, 4], необходимо развить теорию мёссбауэровского полного отражения от слоисто-анизотропной среды.

**§ 1. Уравнения поля в слоистой среде.** В плоскостой среде, свойства которой меняются только вдоль нормали к поверхности (ось  $z$ ), уравнения Максвелла можно свести к системе линейных дифференциальных уравнений для тангенциальных компонент электрического и магнитного полей излучения:

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t \\ [\mathbf{qE}] \end{pmatrix} = ikM(z) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t \\ [\mathbf{qE}] \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{q}$  — единичный вектор нормали к поверхности (ось  $z$ ),  $\mathbf{H}_t = I\mathbf{H}$ ,  $I = -\mathbf{q} \times^2 = 1 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}$  — проективный оператор,  $\mathbf{q} \times$  — тензор, дуальный вектору  $\mathbf{q}$ . Явный вид матрицы распространения  $M$  приведен, например, в книге [5], а в ковариантном представлении — в работе [6]. В мёссбауэровской оптике задачу можно решать приближенно, так как восприимчивость среды мала:  $|\hat{\chi}| = |\hat{\epsilon} - 1| \sim 10^{-5}$  и эффект полного отражения наблюдается только при скользких углах падения. Нам удалось привести матрицу  $M$  к такому виду  $M_{\text{мёссб}}$  (в первом приближении с точностью до  $\sqrt{|\hat{\chi}|^*}$ ):

\* Получение первого приближения является нетривиальным, так как тангенциальные компоненты поля излучения, поляризованного в плоскости падения, при скользких углах падения малы ( $\sim \sin \theta$ ), но участвуют в процессе отражения равноправно с  $\sigma$ -поляризованными векторами поля. Можно показать, что при этом  $\mathbf{q} \times$  при умножении на тензор  $\hat{\chi}$  слева можно заменить диадой  $\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$ , а справа — диадой —  $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ .

$$M = \begin{pmatrix} \frac{q \times \hat{\epsilon} q \cdot a}{\hat{q} \hat{\epsilon} q} & \frac{b \cdot \hat{q} \hat{\mu} /}{\hat{q} \hat{\mu} q} & \frac{I \hat{\epsilon} /}{\hat{q} \hat{\epsilon} q} & \frac{b \cdot b}{\hat{q} \hat{\mu} q} \\ \frac{a \cdot a}{\hat{q} \hat{\epsilon} q} & \frac{q \times \hat{\mu} q \times}{\hat{q} \hat{\mu} q} & \frac{a \cdot q \hat{\epsilon} q \times}{\hat{q} \hat{\epsilon} q} & \frac{I \hat{\mu} q \cdot b}{\hat{q} \hat{\mu} q} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow M_{\text{Мёссб}} = \begin{pmatrix} \hat{a} \hat{\chi} q b \cdot a & I - b \cdot b (1 - \hat{a} \hat{\chi} a) \\ I - a \cdot a (1 - q \hat{\chi} q) & q \hat{\chi} a a \cdot b \end{pmatrix}, \quad (2)$$

который позволяет получить решение задачи для любых случаев СТВ и любых мультиполюстей мёссбауэровских переходов. В (2)  $\hat{\epsilon}$  и  $\hat{\mu}$  — диэлектрическая и магнитная проницаемости среды,  $\mathbf{b}$  — тангенциальная компонента волнового вектора падающей волны (в единицах  $\omega/c$ ),  $\mathbf{a} = [\mathbf{b}\mathbf{q}]$ ,  $|\mathbf{b}| = |\mathbf{a}| = \sqrt{1 - \sin^2 \theta}$ ,  $\theta$  — угол скольжения (в свертках с  $\hat{\chi}$  мы можем считать  $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| \approx 1$ ). Отметим, что  $\hat{\chi}$  в  $M_{\text{Мёссб}}$  включают уже токи как электрического, так и магнитного типов. При наличии пространственной дисперсии  $\hat{\chi} \rightarrow \hat{\chi}^{(b \rightarrow b)}$ .

В оптике для  $\hat{\epsilon}$  и  $\hat{\mu}$  произвольного вида решение задачи осложняется необходимостью находить корни дисперсионного уравнения 4-й степени (уравнения на собственные значения матрицы  $M$ ). После проведенного нами упрощения матрицы распространения это уравнение становится биквадратным для произвольного вида тензора ядерной восприимчивости  $\hat{\chi}$ :

$$\eta^4 - \eta^2 (2(1 - b^2) + \hat{a} \hat{\chi} a + q \hat{\chi} q) + (1 - b^2 + \hat{a} \hat{\chi} a)(1 - b^2 + q \hat{\chi} q) - \hat{a} \hat{\chi} q q \hat{\chi} a = 0. \quad (3)$$

Корни (3) совпадают со значениями нормальных компонент волновых векторов в среде для скользящих углов падения, использованными в [1]:

$$\eta_j = \pm \sqrt{\sin^2 \theta + \frac{4\pi}{k^2} N f_i(0)}, \quad i=1, 2, \quad j=1, 2, 3, 4, \quad (4)$$

где  $N$  — плотность рассеивающих центров, а  $f_i(0)$  — собственные значения амплитуды рассеяния вперед ( $\mathbf{b} \rightarrow \mathbf{b}$ ):

$$\frac{4\pi}{k^2} N f_i(0) = \frac{\hat{a} \hat{\chi} a + q \hat{\chi} q}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\hat{a} \hat{\chi} a + q \hat{\chi} q}{2}\right)^2 + \hat{a} \hat{\chi} q q \hat{\chi} a - \hat{a} \hat{\chi} a q \hat{\chi} q},$$

что подтверждает справедливость выбранного приближения.

**§ 2. Решение уравнения (1) в однородном слое.** Среду с непрерывно изменяющимися анизотропными параметрами мы всегда можем в некотором приближении разбить на отдельные слои, в каждом из которых  $\hat{\chi}$  постоянна. Для каждого такого слоя решение (1) представляет собой матричный экспоненциал  $e^{ikM_n d_n}$ , где  $d_n$  — толщина  $n$ -го слоя. Так как собственные значения  $M_{\text{Мёссб}}$  в нашем случае известны (4), несложно привести  $M$  к диагональному виду, или, еще проще, воспользоваться для вычисления  $e^{ikM d}$  формулой Сильвестра для матричных функций [7]. В нашем случае оказывается возможным получить аналитический вид  $e^{ikM d}$ , воспользовавшись разложением экспоненты в

ряд и найдя для  $M_{\text{Мессе}}$  вида (2) алгоритм возведения  $M$  в степень:

$$e^{ikMd} = \begin{pmatrix} \psi_{11} & ikd\rho_{21} & ikd\rho_{22} & \psi_{12} \\ i(\alpha\varphi_{11} + \beta\varphi_{21}) & \vartheta_{11} & \vartheta_{12} & i(\alpha\varphi_{12} + \beta\varphi_{22}) \\ i(\gamma\varphi_{11} + \delta\varphi_{21}) & \vartheta_{21} & \vartheta_{22} & i(\gamma\varphi_{12} + \delta\varphi_{22}) \\ \psi_{21} & ikd\rho_{11} & ikd\rho_{12} & \psi_{22} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Скаляры  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  и  $2 \times 2$ -матрицы  $\psi, \rho, \varphi, \vartheta$  в (5) определены следующими соотношениями:

$$\vartheta = \cos\sqrt{V}, \quad \psi = \cos\sqrt{W}, \quad \rho = V^{-1/2} \sin\sqrt{V}, \quad \varphi = W^{-1/2} \sin\sqrt{W};$$

$$V \equiv kd \begin{pmatrix} \beta\alpha \\ \delta\gamma \end{pmatrix} = (kd)^2 \begin{pmatrix} 1 - b^2 + a\hat{\chi}a & a\hat{\chi}q \\ q\hat{\chi}a & 1 - b^2 + q\hat{\chi}q \end{pmatrix},$$

$$W \equiv kd \begin{pmatrix} \gamma\delta \\ \alpha\beta \end{pmatrix} = (kd)^2 \begin{pmatrix} 1 - b^2 + q\hat{\chi}q & q\hat{\chi}a \\ a\hat{\chi}q & 1 - b^2 + a\hat{\chi}a \end{pmatrix}.$$

Вычисление косинусов, синусов и других функций  $2 \times 2$ -матриц  $V$  и  $W$  можно провести на основе их разложения по спиновым матрицам Паули [8] или с помощью проективных операторов [9].

**§ 3. Решение граничной задачи.** Интегральная матрица распространения для всей системы анизотропных слоев  $L(d)$  получается непосредственным перемножением матричных экспоненциалов отдельных слоев, так как тангенциальные компоненты поля непрерывны на границе. Представим поле на поверхности в виде суммы падающей и отраженной волн и введем связь между тангенциальными компонентами  $\mathbf{H}_i$  и  $[\mathbf{qE}]$  для каждой из волн: падающей, отраженной и прошедшей (индексы соответственно 0,  $r$  и  $d$ ):  $[\mathbf{qE}^{0,r,d}] = \gamma^{0,r,d} \mathbf{H}_i^{0,r,d}$ , где тензоры  $\gamma^{0,r,d}$  называются тензорами поверхностного импеданса [9]. (В вакууме они легко находятся.) Тогда система уравнений для нахождения  $\mathbf{H}_i^r$  и  $\mathbf{H}_i^d$  принимает вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_i^d \\ \gamma^d \mathbf{H}_i^d \end{pmatrix} = L(d) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_i^0 + \mathbf{H}_i^r \\ \gamma^0 \mathbf{H}_i^0 - \gamma^0 \mathbf{H}_i^r \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Тензор отражения тангенциальных компонент поля  $r(\mathbf{H}_i^r = r\mathbf{H}_i^0)$  можно найти из (6) операторным путем:

$$r = \left[ (-\gamma^d, I) L(d) \begin{pmatrix} I \\ \gamma^r \end{pmatrix} \right]^{-1} \left[ (\gamma^d, -I) L(d) \begin{pmatrix} I \\ \gamma^0 \end{pmatrix} \right].$$

Переход к тензору отражения  $\hat{R}$  для полных векторов поля в вакууме осуществляется достаточно просто [6, 9].

**§ 4. Отражения от однородно анизотропной среды.** Проверим правильность развиваемого подхода сравнением с результатами работы [1], в которой рассмотрен простейший случай: отражения от однородно анизотропной среды. Для одной границы раздела тензор  $r$  может быть вычислен по формуле [9]

$$r = (\gamma^d - \gamma^r)^{-1} (\gamma^0 - \gamma^d),$$

в которой  $\gamma^d$  представляет собой импеданс анизотропной среды. Воспользовавшись алгоритмом вычисления импеданса, основанным на известных собственных значениях  $M$  и изложенным в [9], получим общее

выражение для импеданса мёссбауэровской среды. В базисе  $e_x \| a$ ,  $e_y \| b$  получим

$$\gamma_{\text{Мёссб}} = \frac{1}{1 - b^2 + \widehat{a\chi a} + \eta_1 \eta_2} \begin{pmatrix} \eta_1 \eta_2 (\eta_1 + \eta_2) & q\widehat{\chi a} \\ -a\widehat{\chi q} & (\eta_1 + \eta_2) \end{pmatrix},$$

где  $\eta_1$  и  $\eta_2$  соответствуют двум собственным волнам в прямом (для преломленной волны) направлении. В частном случае для отдельной компоненты мёссбауэровского спектра, когда  $\widehat{\chi} = \alpha c \cdot c^*$  ( $c$  — вектор тока сверхтонкого перехода) [10], получаем ( $\eta_0 = \eta_1 = \sqrt{1 - b^2}$ )

$$r = \frac{\eta_0 - \eta_2}{\eta_0 + \eta_2} \frac{1}{\eta_0 (1 - (bc)(bc^*))} ((qc) a - \eta_0 (ac) b) \cdot ((ac^*) b + \eta_0 (qc^*) a),$$

откуда следует, что коэффициент отражения для волны с поляризацией  $H^0 \| [bc]$  равен  $|R|^2 = \left| \frac{\eta_0 - \eta_2}{\eta_0 + \eta_2} \right|^2$  и равен нулю для волны с поляризацией  $H^0 \| [b[bc^*]]$ , которая не взаимодействует со средой, если  $\widehat{\chi} = \alpha c \cdot c^*$ , что полностью соответствует [1]. Таким образом, проведенный расчет еще раз подтверждает справедливость выбранного приближения для  $M_{\text{Мёссб}}$ .

§ 5. Рекуррентные соотношения для тензоров отражения в многослойной среде. Нахождение тензора импеданса для мёссбауэровской среды позволяет решать задачу об отражении от слоистой мёссбауэровской среды с помощью рекуррентных соотношений. Запишем граничные условия непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей излучения для границы раздела между  $n-1$ -м и  $n$ -м слоями в виде

$$H_{t,n-1}^0 + H_{t,n-1}^r = e^{-ikN_n^0 d_n} H_{t,n}^0 + e^{-ikN_n^r d_n} H_{t,n}^r, \quad (7)$$

$$\gamma_{n-1}^0 H_{t,n-1}^0 + \gamma_{n-1}^r H_{t,n-1}^r = \gamma_n^0 e^{-ikN_n^0 d_n} H_{t,n}^0 + \gamma_n^r e^{-ikN_n^r d_n} H_{t,n}^r,$$

где  $H_{t,n}^{0,r}$  и  $H_{t,n-1}^{0,r}$  заданы на нижней границе каждого слоя; их значения на верхней границе можно найти с помощью тензоров нормальной рефракции  $N_{n(n-1)}^{0,r}$ , определяющих изменение  $H_{t,n(n-1)}^{0,r}$  в слое:

$$\frac{d}{dz} H_{t,n}^{0,r} = ikN_n^{0,r} H_{t,n}^{0,r}.$$

В нашем случае, используя общие соотношения из [9], получаем

$$N_{\text{Мёссб}}^{0,r} = \frac{1}{1 - b^2 + \widehat{a\chi a} + \eta_1 \eta_2} \begin{pmatrix} \pm \eta_1 \eta_2 (\eta_1 + \eta_2) & q\widehat{\chi a} \\ \eta_1 \eta_2 a\widehat{\chi q} & \pm (1 - b^2 + \widehat{a\chi a}) (\eta_1 + \eta_2) \end{pmatrix} \quad (8)$$

(верхний знак для волны в прямом направлении, нижний — для отраженной волны). Тензор нормальной рефракции (8) является обобщением на случай скользящего падения матричного показателя преломления, используемого в мёссбауэровской оптике для описания изменений поляризации излучения при распространении в толстом анизотропном поглотителе [10]. Отметим, что собственными значениями  $N_{\text{Мёссб}}$  являются  $\eta_{1,2}$ .

Вводя обозначения  $H_{t,n}^r = r_{n,n+1} H_{t,n}^0$ , из (7) получаем

$$r_{n-1,n} = (\gamma_n^{(вх)} - \gamma_{n-1}^r)^{-1} (\gamma_{n-1}^0 - \gamma_n^{(вх)}), \quad (9)$$

где  $\gamma^{(вх)}$  — «входной» импеданс системы нижележащих слоев [11]:

$$\gamma_n^{(вх)} = (\gamma_n^0 e^{-ikN_n^0 d_n} + \gamma_n^r e^{-ikN_n^r d_n} r_{n,n+1}) (e^{-ikN_n^0 d_n} + e^{-ikN_n^r d_n} r_{n,n+1})^{-1}. \quad (10)$$

Соотношения (9), (10) являются обобщением рекуррентных соотношений Паррата [3], используемых в рентгеновской рефлектометрии для исследования изменений приповерхностной плотности, на случай изменений анизотропных параметров среды вблизи поверхности. Решают задачу, полагая для самого нижнего слоя  $r_{N,N+1} = 0$  и  $\gamma_N^{(вх)} = \gamma_N^0$ .

§ 6. Конкретные расчеты. Оба развитых алгоритма расчетов: матричный и импедансный — проверялись для расчетов простейших моделей; результаты при этом получали взаимную проверку.

Для выявления влияния анизотропии среды на форму кривых отражения сначала был рассмотрен идеальный случай: непоглощающая среда,  $\hat{\chi} = \alpha c \cdot c^*$ , причем предполагалось, что изменение вблизи поверхности претерпевает только направление  $c = \hat{n}_{\Delta m} (\hat{n}_{\pm 1,0}$  — сферические орты системы осей, связанной с направлением магнитного сверхтонкого поля  $H_{ств}$ ,  $\Delta m$  — изменение магнитного квантового числа при переходе [10]). Если среда однородно анизотропна ( $c$  не изменяется), то коэффициент отражения неполяризованного излучения  $|R|^2 = 0,5$  при  $\theta < \theta_c = \sqrt{\alpha(1 - (bc)(bc^*))}$  (пунктирные кривые 1, 2 на рис. 1), так как только одна собственная поляризация взаимодействует со средой.

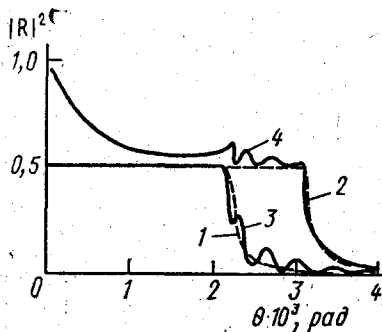


Рис. 1. Зависимости коэффициента зеркального отражения  $|R|^2$  от угла скольжения  $\theta$  для однородно анизотропных непоглощающих сред:  $H_{ств} \parallel q$  (1) и  $H_{ств} \parallel b$  (2); в случае анизотропной пленки толщиной  $\sim 700 \text{ \AA}$ ,  $H_{ств} \parallel q$ , без подложки (3) и на анизотропной подложке, в которой  $H_{ств} \parallel b$  (4). При расчетах предполагалось  $\Delta m = +1$ ,  $\alpha = -0,00001$

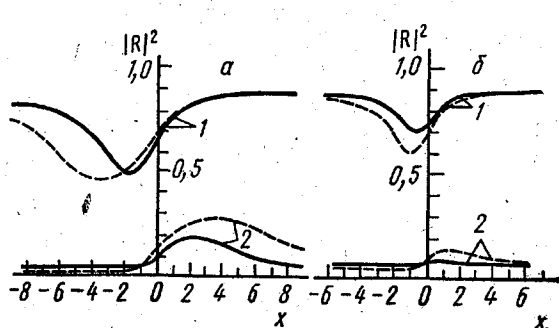


Рис. 2. Формы резонансных кривых зеркального отражения отдельной компоненты спектра ( $\chi_{\text{ял}} = -[a/(x+i)] \hat{n}_{+1} \cdot \hat{n}_{-1}$ ,  $x$  — отклонение от резонанса в единицах полуширины линии  $\Gamma/2$ ,  $a = 0,000048$  (а);  $0,000012$  (б);  $\chi_{\text{эл}} = -0,000013 + +0,0000013i$ ) для двух углов скольжения:  $\theta = 2$  (1) и  $4,5$  мрад (2). Сплошные кривые соответствуют отражению от анизотропной пленки ( $100 \text{ \AA}$ ,  $H_{ств} \parallel q$ ) на анизотропной подложке ( $H_{ств} \parallel b$ ), пунктирные — отражению от однородно анизотропной среды ( $H_{ств} \parallel b$ ).

Отражение от тонкой анизотропной пленки (в вакууме) так же, как и в изотропном случае, приводит к возникновению осцилляций интенсивности «на хвостах» кривой отражения (кривая 3). При наличии анизотропной подложки, если характер анизотропии пленки и подложки различен, происходит существенная трансформация кривой отражения: осцилляции возникают «на ступеньке» в интервале углов от  $\theta_{\text{пленки}}$  до  $\theta_{\text{подложки}}$  и очень слабо выражены «на хвосте» кривой отражения. При этом  $|R|^2$  становится больше 0,5 и  $|R|^2 \rightarrow 1$  при  $\theta \rightarrow 0$

(кривая 4). Осцилляции связаны с интерференцией волн различной (но в рассматриваемом случае неортогональной) поляризации, отраженных от пленки и подложки (при  $\theta \rightarrow 0$  их взаимодействие ослабевает; пленка и подложка начинают отражать все более независимо). Поляризационные эффекты при многолучевой интерференции в пленке и вызывают необходимость перехода от скалярного рассмотрения к матричному.

В реальном случае при рассмотрении отражения резонансного излучения от среды, содержащей мёссбауэровские ядра, необходимо учесть, что  $\hat{\chi} = \hat{\chi}_{эл} + \hat{\chi}_{яд}$ ,  $\hat{\chi}_{эл}$  представляет взаимодействие (скалярное) с электронами, а  $\hat{\chi}_{яд}$  — с ядрами; ядерное взаимодействие является резонансным, оно связано с сильным поглощением. Электронный вклад в поглощение безусловно сглаживают осцилляции кривых отражения для пленки. Однако, в отличие от случая полного отражения рентгеновского излучения в нашем случае возникает дополнительная возможность исследовать мёссбауэровский спектр полного отражения, который обладает большей чувствительностью к любым изменениям параметров среды, чем кривые отражения. На рис. 2 показано, что наличие поверхностного слоя с направлением намагниченности, отличным от объемного, приводит к изменению ширины и возникновению сдвига резонансной кривой в условиях полного отражения. Чувствительность резонансных кривых к поверхностным аномалиям намагниченности тем больше, чем больше  $|\hat{\chi}_{яд}|$  по сравнению с  $\hat{\chi}_{эл}$  (см. рис. 2, а, б).

Хотя рассмотренная модель является упрощенной (в реальных случаях необходимо будет учитывать изменение сверхтонкого поля вблизи поверхности не только по направлению, но и по величине), проведенные расчеты подтверждают уникальные возможности метода мёссбауэровского полного отражения в исследованиях параметров СТВ вблизи поверхности.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Bernstein S., Cambbell E. C. Phys. Rev., 1963, 132, p. 1625. [2] Андреева М. А., Борисова С. Ф., Кузьмин Р. Н. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1979, 20, № 5, с. 39. [3] Parratt L. G. Phys. Rev., 1954, 95, p. 359. [4] Андреева М. А., Борисова С. Ф., Степанов С. А. Поверхность, 1985, № 4, с. 5. [5] Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. М.: Мир, 1981. [6] Борздов Г. Н., Барковский Л. М., Лаврукович В. И. Журн. прикл. спектр., 1976, 25, с. 526. [7] Анго А. Математика для электро- и радиоинженеров. М.: Наука, 1965. [8] Андреева М. А., Кузьмин Р. Н., Росетте К. Деп. ВИНТИ № 2542—84 от 23.04.84. [9] Барковский Л. М., Борздов Г. Н., Федоров Ф. И. Препринт № 304 Ин-та физики АН БССР. Минск, 1983. [10] Андреева М. А., Кузьмин Р. Н. Мёссбауэровская оптика. М.: Изд-во МГУ, 1982. [11] Барковский Л. М. Кристаллография, 1978, 23, с. 1145.

Поступила в редакцию  
04.04.85