



بررسی اثر نرمی پتانسیل اپتیکی نوترون در مرز سطوح بر روی بازتابندگی نوترونهاي سرد

سید فرهاد مسعودی*، سید سعید سیوف جهرمی

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران- صندوق پستی ۴۴۱۶-۱۵۸۱۷۵

چکیده

در شبیه سازی بازتاب نوترون از لایه های با ضخامت نانومتر، که منجر به یافتن پرفایل بازتابندگی نوترون های سرد می شود، اغلب فرض می شود که پتانسیل اپتیکی نوترون در عبور از لایه ای به لایه دیگر به طور ناپیوسته تغییر کند. در این مقاله به جای در نظر گرفتن چنین تغییرات ناپیوسته ای، پتانسیل پیوسته ای را برای ساختار بین سطوح در نظر گرفته- ایم که با شیب متغیر، پتانسیل لایه ها را در مرز بین سطوح به هم متصل می کند. با استفاده از این پتانسیل خطی، اثرات نرمی پتانسیل بر روی پرفایل بازتابندگی، که در بازتاب سنجی نوترونی مورد بازخوانی قرار می گیرد، بررسی شده است.

کلمات کلیدی: بازتاب سنجی نوترونی، پتانسیل اپتیکی، پتانسیل مرزی نرم

۱. مقدمه

در طی سالهای اخیر، تحقیقات وسیعی بر روی بازتاب سنجی نوترونی و استفاده از آن برای بررسی لایه های با ابعاد نانومتر و بررسی ساختار بین سطوح انجام گرفته است، به قسمی که رشد آن هم از جنبه تجربی و هم شبیه سازی و بررسی مدل‌های مختلف، رشد چشمگیری را نشان می دهد {۱و۲}. یکی از این ابعاد مختلف کاربرد بازتاب سنجی نوترونی، بازخوانی اطلاعات مربوط به لایه های نازک، اعم از نوع و یا ضخامت لایه، با استفاده از پرفایل بازتابندگی نوترونها از نمونه های مجهول است {۳}. در همین زمینه مقالاتی در کنفرانسهای هسته ای اراک و اصفهان ارائه شده است {۴ و ۵}. در این مقالات، در روش بررسی چگونگی بازتاب آینه ای نوترونهاي سرد، پتانسیل برهمکنشی بین نوترون و مواد در بین سطح مشترک دو لایه بطور ناپیوسته و تیز در نظر گرفته شده اند. به عبارتی از نرمی تغییر پتانسیل در عبور نوترون از لایه ای به لایه دیگر صرف نظر شده است. اگرچه این تقریب در اکثر روشهای ارائه شده در مقالات مختلف به کار برده شده است (۳)، با این وجود در اغلب این روشها عدم تیز بودن ساختار بین سطوح به عنوان خطایی در اندازه گیری پارامترها مد نظر قرار گرفته اند (۶). عدم تیز بودن پتانسیل برهمکنشی تغییراتی را در پرفایل بازتابندگی و در نتیجه در بازخوانی اطلاعات نمونه اعمال خواهد کرد. از همین رو در طی ارائه مقالات {۴و۵} همواره بررسی چگونگی اثرات نرم بودن ساختار بین سطوح، بر روی بازتابندگی نوترونها از یک نمونه، مورد نظر شرکت کنندگان در کنفرانس بوده است.

در مقاله ای که در پیش رو داریم، با در نظر گرفتن اینکه پتانسیل برهمکنشی نوترون و مواد در عبور از لایه ای به لایه دیگر بطور پیوسته تغییر می کند، بازتابندگی نوترون از نمونه ای خاص را مورد بررسی قرار داده ایم. نتایج حاصل از در نظر گرفتن این موضوع، میزان اثرات عدم تیز بودن پتانسیل را بر روی شار نوترونهاي بازتابی از نمونه نشان خواهد داد.

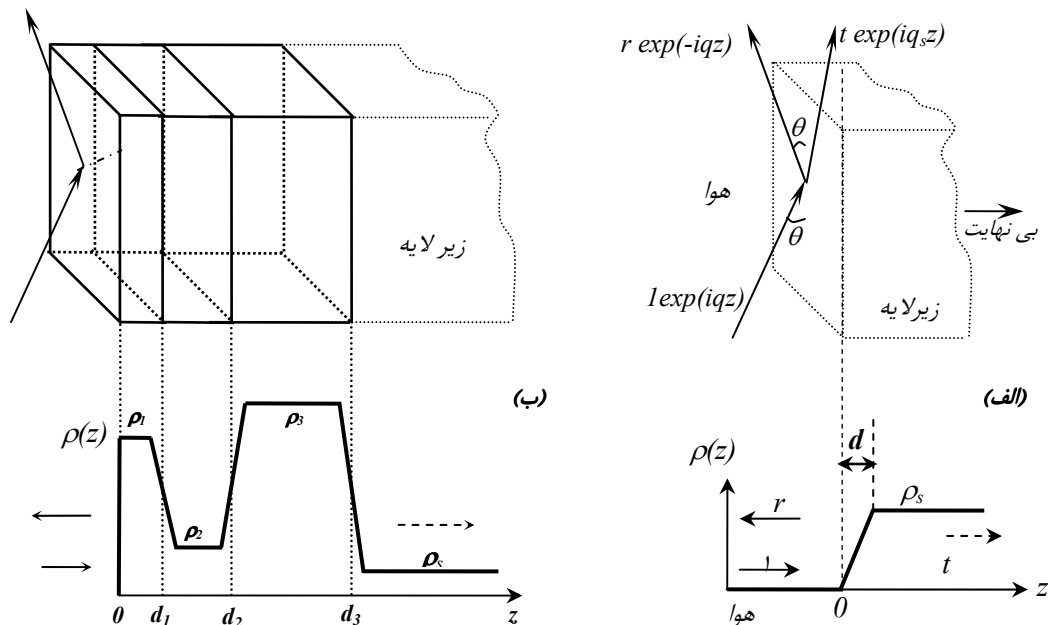


۲. مدل بررسی پتانسیلهای نرم

معادله شرودینگر مربوط به برهمکنش نوترون با مواد مختلف در بازتاب آینه ای نوترونها به صورت یک معادله شرودینگر یکبعدی به صورت زیر است:

$$\left(\partial_z^2 + (k^2 - 4\pi\rho(z))\right)\Psi(k, z) = 0 \quad (1)$$

که در آن ρ چگالی طول پراکندگی (SLD) نوترون، k عدد موج نوترون و z راستای عمود بر سطح بازتابنده (جهت عمقی) است. در اپتیک نوترونی، مرسوم است پتانسیل اپتیکی توصیف کننده برهمکنش نوترون با مواد بر حسب SLD به صورت $v(z) = 2\pi\hbar^2\rho(z)/m$ بیان شود. SLD برای یک ماده خاص، کمیت ثابتی بوده و اطلاعات آن مربوط به هر لایه در مرجع www.neutron.anl.org قابل دسترسی است. برای بدست آوردن پرفایل بازتابندگی از یک نمونه چند لایه ای با تابع چگالی $\rho(z)$ کافی است، معادله شرودینگر برای این سیستم به طور کامل حل شود. در این قسمت دو نمونه به صورت شکل (۱) در نظر گرفته ایم.



شکل ۱: دو نمونه بکار رفته برای بررسی اثرات نرم بودن تغییر پتانسیل در مرز بین لایه ها.

نمونه اول تنها از زیر لایه ای با چگالی طول پراکندگی ρ_s تشکیل شده و نمونه دوم، نمونه چند لایه ای، از ۳ لایه با چگالی طول پراکندگی و ضخامتهای مختلف تشکیل شده است. کل نمونه نیز بر روی زیر لایه ای با چگالی طول پراکندگی ρ_s قرار دارد. برای در نظر گرفتن تغییرات پیوسته پتانسیل در مرز بین مواد مختلف با چگالی فرضی ρ_1 و ρ_2 ، پتانسیل را به صورت خطی در نظر گرفته ایم که از αd_1 قبل از مرز مشترک با مقدار ρ_1 شروع شده و تا αd_2 بعد از مرز مشترک به پتانسیل ρ_2 می رسد. تغییر α در این حالت معادل میزان تیز بودن پتانسیل بین سطوح است. به عنوان مثال با صفر در نظر گرفتن این پارامتر پتانسیل کاملاً تیز مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

(الف) بازتاب از پولک (wafer)



چنانکه در شکل الف دیده می شود، کل ناحیه را می توان به ۳ قسمت لایه فرودی، لایه عبوری و لایه بین سطوح در نظر گرفت. بنابراین پتانسیل برهمکنشی در حالت کلی یا ثابت و یا خطی خواهد بود. حل این معادله در این دو حالت به صورت زیر است. برای پتانسیل ثابت

$$k^2 > 4\pi\rho \rightarrow u(x) = A \sin \sqrt{k^2 - 4\pi\rho}z + B \cos \sqrt{k^2 - 4\pi\rho}z \quad (2)$$

$$k^2 < 4\pi\rho \rightarrow u(x) = A \sinh \sqrt{4\pi\rho - k^2}z + B \cosh \sqrt{4\pi\rho - k^2}z$$

و برای پتانسیل خطی با شرایط بیان شده، معادله شرودینگر و حل آن به صورت زیر خواهد بود:

$$\left(\partial_z^2 + \gamma - \beta x\right)\Psi(k, z) = 0 \Rightarrow \Psi(k, z) = C \text{Ai}\left(\frac{\beta z - \gamma}{\beta^{2/3}}\right) + D \text{Bi}\left(\frac{\beta z - \gamma}{\beta^{2/3}}\right) \quad (3)$$

که در آن $\beta = 4\pi \frac{\rho_2 - \rho_1}{d_1 + d_2}$ ، $\gamma = k^2 4\pi\rho_1$ و Ai و Bi توابع آیری هستند.

بنابر این شکل تابع موج در ۳ ناحیه نمونه (الف) به صورت زیر خواهند شد:

$$u_1 = e^{ikz} + re^{-ikz}, \quad u_2 = C \text{Ai}(\beta_2^{1/3}z) + D \text{Bi}(\beta_2^{1/3}z), \quad u_3 = te^{iqz} \quad (4)$$

که در آن $\beta_2 = 4\pi\rho_s/d$ و $q = \sqrt{k^2 - 4\pi\rho_s}$ است. در این حالت چون هر دو لایه فرودی و عبوری دارای ابعاد نامتناهی فیزیکی هستند، در پارامتر β_2 کمیت d را باید با توجه به معیار تیز بودن تغییر پتانسیل انتخاب کنیم. چهار ضریب C ، D ، t ، r با استفاده از پیوستگی تابع موج و مشتق آن در دو مرز $x=0$ و x بدست خواهند آمد. با حل این چهار معادله ضریب بازتاب r به صورت زیر بدست خواهد آمد:

$$r = \frac{h\alpha_{12} + \alpha_{21} + i(\alpha_{22} - h\alpha_{11})}{h\alpha_{12} - \alpha_{21} + i(\alpha_{22} + h\alpha_{11})} \quad (5)$$

که در آن

$$\alpha_{11} = \text{Ai}(\beta_2^{1/3}d)\text{Bi}'(0) - \text{Bi}(\beta_2^{1/3}d)\text{Ai}'(0), \quad \alpha_{12} = \beta_2^{-1/3}(\text{Bi}(\beta_2^{1/3}d)\text{Ai}(0) - \text{Ai}(\beta_2^{1/3}d)\text{Bi}(0)) \quad (6-a)$$

$$\alpha_{21} = \beta_2^{1/3}(\text{Bi}'(0)\text{Ai}'(\beta_2^{1/3}d) - \text{Ai}'(0)\text{Bi}'(\beta_2^{1/3}d)), \quad (6-b)$$

$$\alpha_{22} = \text{Ai}(0)\text{Bi}'(\beta_2^{1/3}d) - \text{Bi}(0)\text{Ai}'(\beta_2^{1/3}d), \quad h = \sqrt{1 - \frac{4\pi\rho_s}{k^2}}$$

(ب) بازتاب از نمونه های چند لایه ای

برای حل معادله شرودینگر از نمونه (ب) در شکل (۱)، باید تابع موج در ۹ لایه مشخص شده در شکل (۱-ب) محاسبه شود. شکل کلی این توابع به صورت زیر است:

$$u_1 = e^{ik_1z} + re^{-ik_1z}, \quad u_9 = te^{iqz}$$

$$u_i = A_i e^{ik_iz} + B_i e^{-ik_iz} \quad i = 3, 5, 7 \quad (7)$$

$$u_i = C_i \text{Ai}\left(\frac{\beta_i(z - \eta_i) - \gamma_i}{\beta_i^{2/3}}\right) + D_i \text{Bi}\left(\frac{\beta_i(z - \eta_i) - \gamma_i}{\beta_i^{2/3}}\right) \quad i = 2, 4, 6, 8$$

$$k_i = \sqrt{k^2 - 4\pi\rho_i}, \quad \eta_2 = 0, \eta_4 = (1 - \alpha)d_1, \eta_6 = d_1 + (1 - \alpha)d_2, \eta_8 = d_1 + d_2 + (1 - \alpha)d_3$$

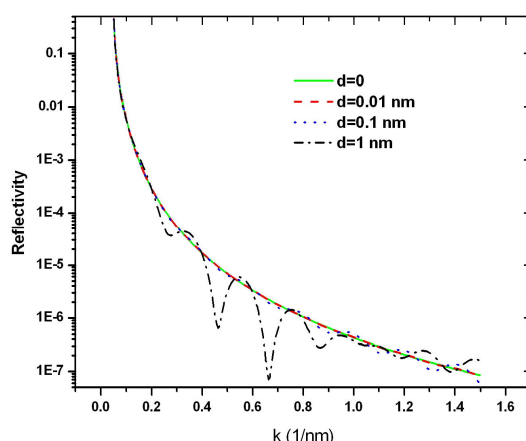


در هر یک از این معادلات اگر انرژی نوترون فرودی از پتانسیل کمتر باشد، باید به جای توابع تناوبی از توابع نمایی استفاده نمائیم. ۱۶ ضریب مجهول در روابط فوق باید از ۱۶ معادله ناشی از پیوستگی تابع موج و مشتق آن در مرز مرزهای موجود در نمونه بین نواحی مختلف، حل شود تا پارامتر Γ بدست آید. اندازه پارامتر Γ منجر به یافتن بازتابندگی نوترون از این لایه ها خواهد شد. بواسطه آنکه حل این ۱۶ معادله برای یافتن Γ بسیار پیچیده خواهد شد، و برای حالت الف نیز این پیچیدگی را در رابطه نهایی مشاهده می کنیم، در قسمت بعد اثرات تغییر شیب پتانسیل نرم بین سطوح را برای مثال خاصی از نظر عددی بررسی می کنیم.

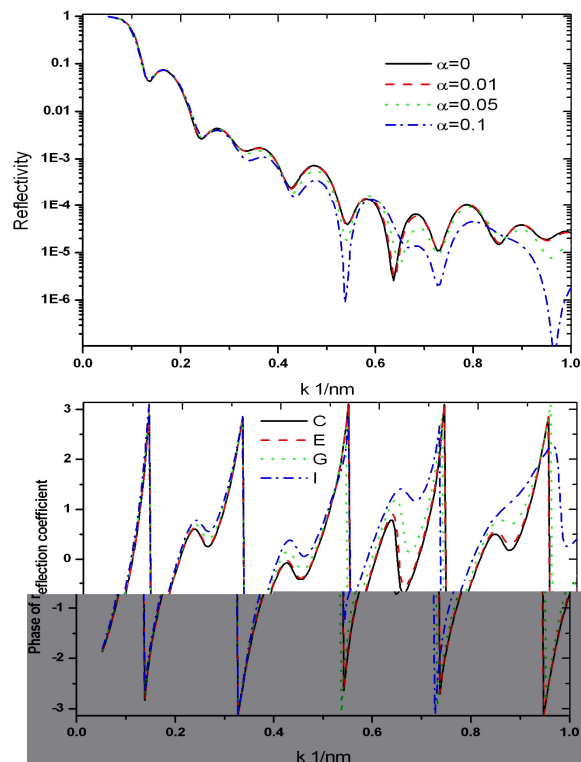
۳. بررسی عددی روابط

برای بررسی نوع تغییرات بازتابندگی نوترون از یک زیر لایه (نمونه الف) در اینجا، سیلیکون را به عنوان یک زیر لایه در نظر گرفته ایم. چگالی طول پراکندگی سیلیکون برابر $2.08 \times 10^{-4} \text{ nm}^{-2}$ است. شکل (۲) نوع تغییرات بازتابندگی را بر حسب عدد موج نوترون برای شیبهای مختلف پتانسیل خطی در شکل (۱-الف) نشان می دهد. چنانکه دیده می شود، برای عدد موجهای بسیار کم، حتی در حد $d=1 \text{ nm}$ نیز، تغییری در بازتابندگی ایجاد نخواهد شد. با افزایش عدد موج اثرات شیب نرم بین سطوح بیشتر دیده می شود. برای ضخامت ۱ نانومتر برای ناحیه با پتانسیل خطی اثرات یک لایه با ابعاد نانومتر (که نوسان بازتابندگی است) به وضوح دیده می شود. قابل ذکر است که این حالت فقط جهت مقایسه رسم شده و در عمل ناحیه بین سطوح از مرتبه آنگستروم است. برای بررسی دقیق تر اثرات نرمی پتانسیل، نتایج بازتابندگی را برای نمونه شکل (۱-ب) به صورت عددی محاسبه می کنیم. برای این نمونه عددی، سه لایه را به ترتیب Cu ، Co و Ni در نظر گرفته ایم که بر روی زیر لایه Si قرار دارند. چگالی طول پراکندگی لایه ها در واحد $(10^{-4} \text{ nm}^{-2})$ و ضخامت آنها به ترتیب برابرند با:

$$\rho_1 = \rho_{\text{Cu}} = 6.52, \rho_2 = \rho_{\text{Co}} = 2.23, \rho_3 = \rho_{\text{Ni}} = 9.4, d_1 = 10 \text{ nm}, d_2 = 5 \text{ nm}, d_3 = 15 \text{ nm}$$



شکل ۲: بازتابندگی نوترونهای سرد از پولکی به جنس سیلیکون برای پارامترهای d مختلف با استفاده از رابطه ۵.



شکل ۳: بازتابندگی و فاز ضریب بازتاب از نمونه شکل (۱-ب) برای شیبهای مختلف پتانسیلهای خطی در مرز بین سطوح از آنجا که در بررسی و آنالیز بازتاب سنجی نوترونی برای نیل به نوع لایه، هم از اطلاعات دامنه و هم فاز Γ استفاده می شود، در شکل (۳) اثرات تغییر پارامتر α را بر روی ضریب بازتاب مختلط Γ بررسی کرده ایم. چنانکه این شکل نشان می دهد، برای $\alpha=0.01$ از اثرات نرمی پتانسیل، حتی برای عدد موج های در حد 1 nm^{-1} ، می توان صرفنظر کرد. این ضریب معادل پهنای ۱ آنگسترومی ناحیه پتانسیل نرم بین سطوح برای لایه های با ضخامت ۱۰ نانومتر است. با این حال با افزایش این پهنای تا مرز یک نانومتر، اطلاعات ضریب بازتاب مختلط مخصوصا با افزایش عدد موج نوترون بطور کامل تغییر خواهد کرد.

۴. بحث و نتیجه گیری

اثرات تیز نبودن پتانسیل در مرز بین دو لایه مورد بررسی قرار گرفت. برای نیل به این هدف، پتانسیل بین دو لایه با چگالی طول پراکندگی های مختلف بطور خطی در نظر گرفته شد. شیب این پتانسیل خطی را با اعمال یک پارامتر متغیر، در حالت های مختلف تغییر داده و با حل معادله شرودینگر برای دو لایه مختلف، نتایج عددی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که برای ضخامتهای در حد آنگستروم ناحیه بین سطوح، می توان از اثرات تیز نبودن پتانسیل برای لایه های در حد نانومتر صرفنظر کرد. با افزایش شیب پتانسیل خطی، و یا به عبارتی با افزایش ضخامت ناحیه بین سطوح، اثرات نرمی پتانسیل بیشتر دیده شده و برای عدد موج های در حد 1 nm^{-1} تغییرات پرفایل بازتابندگی کاملا محسوس خواهد بود. بررسی اثرات این تغییرات برای ضخامتهای معقول آنگستروم در بازتاب سنجی نوترونی برای بررسی پایداری روشهای مختلف در این حیطه، ضروری خواهد بود.



مراجع

- 1- C.F. Majkrzak, N.F. Berk, and U.A. Perez-Salas, "Phase sensitive neutron reflectometry" *Langmuir*, **19**, 7796-7810, 2003.
- 2- Xiao-Lin Zhou, Sow-Hsin Chem, "Theoretical foundation of X-ray and neutron reflectometry", *Phys. Rep.* **257**, 223-348, 1995.
- 3- Masoudi, S.F.¹; Vaezzadeh, M.; Golafrouz, M.; Jafari, G.R." Retrieval of the complex reflection coefficient from nano scale thin films by using polarized neutrons and magnetic substrates, *Applied Physics A*, **86**(1), pp. 95-100, 2007.
- ۴- سید فرهاد مسعودی، علی پذیرنده، "تعیین قطبش نوترونهای بازتابی از لایه‌های مغناطیسی با استفاده از بازتاب سنجی"، دهمین گردهمایی فیزیکدانان و متخصصان هسته‌ای کشور، اسفند ماه ۱۳۸۲، دانشگاه اراک.
- ۵- سید فرهاد مسعودی، علی پذیرنده، مینا پورمحمدی، "تعیین نوع و ضخامت لایه‌های در حد نانومتر با استفاده از بازتاب سنجی نوترونی"، کنفرانس هسته‌ای ایران، اصفهان، اسفند ۱۳۸۵.
- 6- J. Kasper, H. Leeb, and R. Lipperheide, "Phase Determination in Spin-Polarized Neutron Specular Reflection" *Phys. Rev. Lett.* **80** 2614.1988.