

استفاده از بازتاب نوترونهاي سرد براي تعيين جنس و محاسبه ضخامت لايه هاي با مقياس نانو

سيد فرهاد مسعودي^{۱*}، علي پذيرنده^۲، مينا پورمحمدي^۱ و هاجر چنگيزي^۳

^۱ دانشگاه خواجه نصير الدين طوسي، دانشکده علوم، صندوق پستی ۴۴۱۶-۱۵۸۷۵

^۲ دانشگاه تهران، دانشکده فیزیک، صندوق پستی ۱۹۶۷۵-۱۹۳۴

^۳ دانشگاه هرمزگان، گروه فیزیک، صندوق پستس ۳۹۹۵

چکیده

یکی از کاربردهای مهم نوترونهاي سرد، استفاده از آنها در آزمایشات مربوط به اپتیکی نوترونی است. استفاده از بازتاب آئینه ای نوترونهاي سرد از نمونه های چند لایه ای، اطلاعات مهمی درباره نوع لایه و مشخصات آن در اختیارمان قرار می دهد. با این وجود مسئله اصلی برای نیل به این هدف، استفاده از ضریب بازتاب نوترون برای بازخوانی پتانسیل برهمکنشی بین نوترون و لایه ها است که اصطلاحاً مسئله پراکندگی معکوس یا بازتاب سنجی نامیده می شود. در این مقاله با استفاده از کدی که در زبان Matlab برای روش Gelfand-Levitan_Marchenko نوشته شده، اطلاعات مربوط به پتانسیل و ضخامت نمونه های چند لایه ای (با مقیاس نانو) بازخوانی شده است.

کلمات کلیدی: بازتاب سنجی نوترونی، مسئله پراکندگی معکوس، پتانسیل اپتیکی

مقدمه

مسئله پراکندگی معکوس (Inverse Scattering problem) یکی از مهمترین هدفها در مسائل مربوط به پراکندگی امواج و یا ذرات از محیطهای مختلف است [۱ و ۲]. یکی از جالبترین و کاربردی ترین این مسائل، استفاده از بازتاب سنجی نوترونی برای بررسی نمونه های چند لایه ای مغناطیسی و غیر مغناطیسی است [۳ و ۴]. در این روش با استفاده از اطلاعات مربوط به بازتاب نوترونها از هر نمونه ناشناخته بر حسب انرژی نوترونهاي فرودی و حل مسئله معکوس مربوط به معادله شرودینگر، پتانسیل برهمکنشی بین نوترون و لایه های موجود در نمونه بازخوانی می شود. به علت عدم دسترسی مستقیم به اطلاعات مربوط به فاز ضریب بازتاب مختلف، روشهای مختلفی مورد بررسی قرار گرفته اند که در آنها مستقیماً از اندازه ضریب بازتاب استفاده شده است [۵]. با این وجود مشکل اصلی این روشها یکتا نبودن جواب نهایی است. در طی سالهای اخیر روشهای مختلفی مورد بررسی قرار گرفته اند که با استفاده از آنها می توان علاوه بر اندازه ضریب بازتاب مختلط به فاز آن نیز دسترسی پیدا کرد. بدین ترتیب قسمتهای حقیقی و موهومی ضریب بازتاب به صورت تابعی از انرژی نوترونهاي فرودی مشخص خواهند بود. در این مقاله به صورت عملی امکان بازخوانی یکتای پتانسیل مربوط به لایه ها و تعیین ضخامت هر لایه با استفاده از ضریب بازتاب نشان داده شده است.

* masoudi@kntu.ac.ir

حل عددی مسئله پراکندگی معکوس یکبعدی

یکی از مباحث اصلی و مهم در مسئله پراکندگی، حل مسئله پراکندگی معکوس با استفاده از معادله شرودینگر برای یافتن پتانسیل بکار رفته در آن است. یکی از معروفترین کاربردهای این روش، استفاده از آن برای شناخت نوع و ضخامت لایه‌های با ابعاد نانومتر در بازتاب سنجی نوترونی است. این پتانسیل به نوعی توصیف کننده نوع و مشخصات محیطی است که نوترون بواسطه برهمکنش با آن بازتاب می‌یابد [۶]. در اینجا مسئله پراکندگی معکوس یکبعدی را بررسی می‌کنیم. اگر مرز بین محیط برهمکنشی و غیر برهمکنشی را $x=0$ در نظر بگیریم، پتانسیل برهمکنشی را می‌توان در حالت کلی بصورت زیر در نظر گرفت:

$$V(x) = 0 \quad x < 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} V(x) = V_{\infty} \quad (1)$$

که در آن $V_{\infty} \geq 0$ یک کمیت ثابت است. برای چنین پتانسیلی معادله شرودینگر

$$\Psi'' + (k^2 - V(x))\Psi = 0 \quad -\infty < x < \infty \quad (2)$$

جوابی به صورت زیر خواهد داشت:

$$\begin{aligned} \Psi = \Psi(x, k) &= \exp(ikx) + R(k) \exp(-ikx) \quad x < 0 \\ &= T(k) \exp(i\theta(k)x) \quad x \rightarrow +\infty \end{aligned} \quad (3)$$

که در آن $\theta(k) = \sqrt{k^2 - V_{\infty}}$ عدد موج نوترون در حد $x \rightarrow +\infty$ است. در صورتیکه $k^2 < V_{\infty}$ باشد $\theta(k) = i\sqrt{V_{\infty} - k^2}$ است ($k = (V_{\infty})^{0.5}$ را عدد موج بحرانی نامند).

بدین ترتیب مسئله پراکندگی معکوس یکبعدی یافتن $V(x)$ با استفاده از $R(k)$ خواهد بود. در اینجا هدف خود را بر روی یافتن پتانسیل مربوط به لایه‌هایی می‌کنیم که دارای ضریب جذب کوچکی هستند. برای چنین لایه‌هایی پتانسیل یک کمیت حقیقی بوده و $R(-k) = R^*(k)$ خواهد بود [۷]. پتانسیل موجود در رابطه (۲) را می‌توان با استفاده از ضریب بازتاب مختلط $R(k)$ با استفاده از رابطه انتگرالی Gelfand-Levitan-Marchenko محاسبه کرد [۸]. برای $V_{\infty} \geq 0$ این روش بصورت زیر است. رابطه $g(t)$ را بصورت زیر در نظر می‌گیریم

$$g(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R(k) \exp(-ikt) dk \quad (4)$$

و معادله انتگرالی زیر را برای $K(x, t)$ حل می‌کنیم.

$$K(x, t) + g(x, t) + \int_{-t}^x K(x, t) g(y+t) dy = 0 \quad (x > t) \quad (5)$$

در نهایت تابع پتانسیل از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

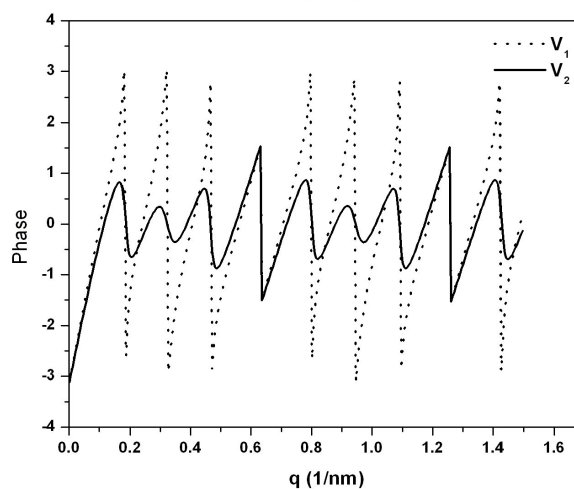
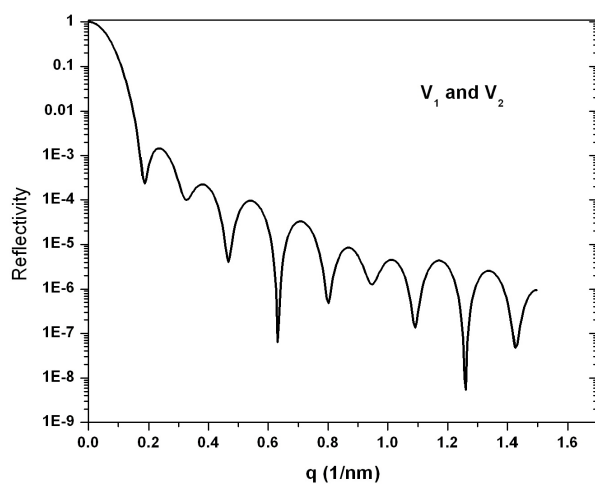
$$V(x) = 2 \frac{d}{dx} K(x, x) \quad (6)$$

مسئله فاز

چنانکه در رابطه (4) دیده می‌شود در تعیین تابع پتانسیل از ضریب بازتاب مختلط R استفاده شده است. علت اصلی این مسئله یکتا نبودن جواب نهایی برای حالتی است که در تعیین پتانسیل از اندازه ضریب بازتاب استفاده شود. شکل (1) اندازه و فاز ضریب بازتاب نوتونهای سرد را از دو پتانسیل زیر نشان داده است.

$$V_1(x) = \begin{cases} 40 & 0 < x < 5nm \\ 60 & 5nm < x < 20nm \\ 0 & \text{others} \end{cases}, \quad V_2(x) = \begin{cases} 60 & 0 < x < 5nm \\ 40 & 5nm < x < 20nm \\ 0 & \text{others} \end{cases} \quad (V)$$

پتانسیلهای فوق در واحد 10^{-4} nm^{-2} بیان شده اند.



شکل ۱: اندازه و فاز ضریب بازتاب برای دو پتانسیل رابطه (V).

چنانکه دیده می‌شود، اندازه این کمیت در هر دو حالت یکی بوده در حالیکه فاز ضریب بازتاب متفاوت است. بدین ترتیب تعیین $V(x)$ با استفاده از اندازه ضریب بازتاب به جواب یکتایی منتهی نخواهد شد در حالیکه با استفاده از فاز می‌توان جواب یکتایی برای پتانسیل بدست آورد. با وجود این آنچه که از طریق آزمایش در اختیار ما قرار می‌گیرد، تنها اندازه ضریب بازتاب است. مسئله محاسبه فاز ضریب بازتاب را، "مسئله فاز" می‌نامند. در اینجا تنها به ارائه منابعی برای حل این مسئله بسنده می‌کنیم [۹-۱۱]. آنچه در اینجا حائز اهمیت است امکان دسترسی به ضریب بازتاب مختلط است که در منابع فوق به آن اشاره شده است.

بازتاب آینه‌ای نوترونی‌های سرد از لایه‌های با ضخامت نانو و بازخوانی پتانسیل

در بازتاب سنجی نوترونی مرسوم است به جای استفاده از انرژی نوترونی‌های فرودی از عدد موج نوترون فرودی استفاده شود. در مسئله بازتاب نوترونها از یک محیط، برای بازتابندگی محسوس تنها زوایای بسیار کوچک و به عبارتی بازتاب آینه‌ای و همچنین استفاده از نوترونی‌های سرد باید مد نظر قرار گیرد. در عدم حضور پراکندگی غیر آینه‌ای، معادله شرودینگر مربوط به برهمکنش این نوترونی‌های سرد با محیط، به یک معادله شرودینگر یکبعدی بصورت زیر تقلیل می‌یابد:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(q, x) + (q^2 - V(x)) \Psi(q, x) = 0 \quad (8)$$

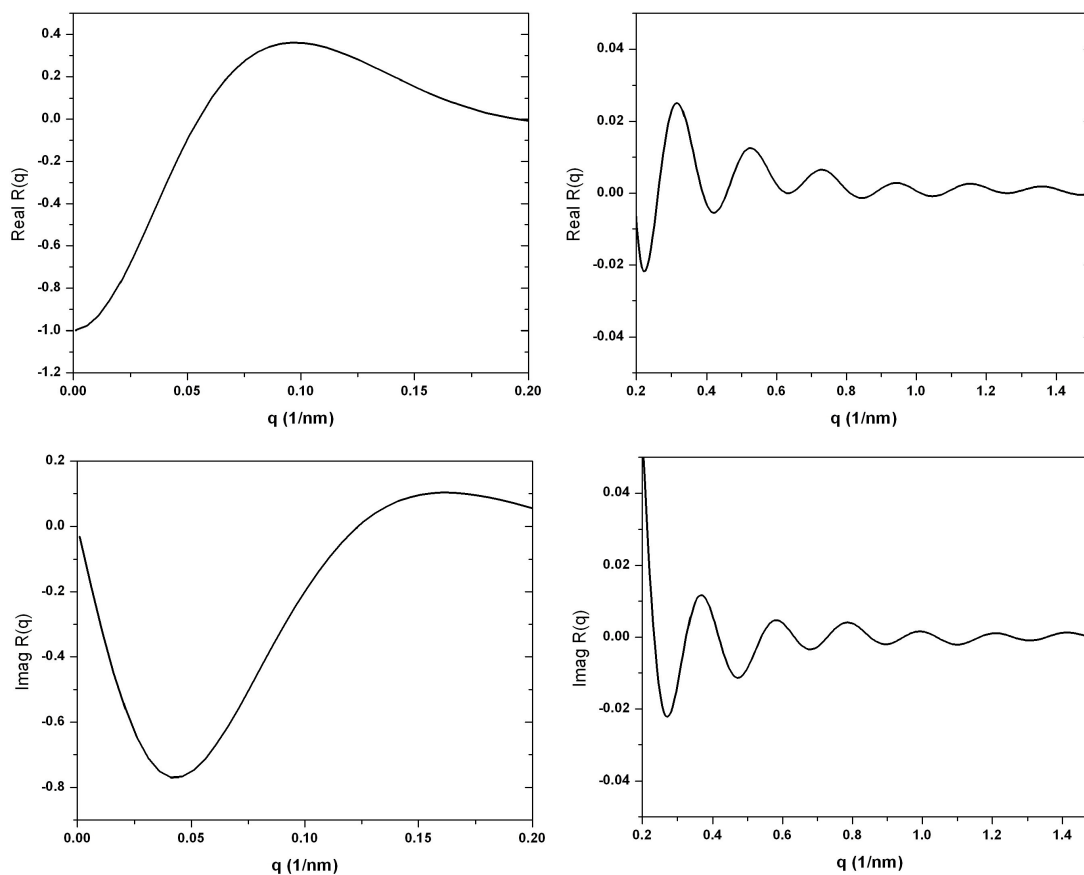
که در آن x راستای عمود بر صفحه بازتابنده (راستای عمق) بوده و q مولفه بردار موج در این راستا است. شکل (۲) ضریب بازتاب مختلط مربوط به حل معادله فوق را برای پتانسیل زیر بدون اثرات زیر لایه نشان می‌دهد:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 4 & 0 < x < 5nm \\ 6 & 5nm < x < 15nm \\ 2.2 & x > 15nm \end{cases} \quad (9)$$

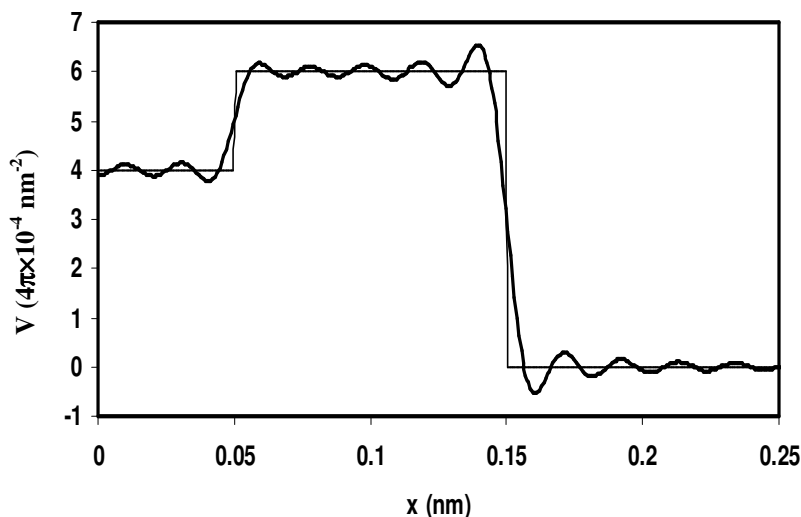
پتانسیلهای فوق در واحد $4\pi \times 10^{-4} \text{ nm}^{-2}$ بیان شده اند. پتانسیل $V_{\infty} = 2.2 \times (4\pi \times 10^{-4} \text{ nm}^{-2})$ مربوط به Si است که در اغلب آزمایشهای مربوط به بازتاب سنجی نوترونی از آن به عنوان زیر لایه استفاده می‌شود. اطلاعات مربوط به عدد موجهای کوچکتر از عدد موج بحرانی را با استفاده از روشی که در مرجع [۱۲] ارائه شده می‌توان بازخوانی کرد.

با استفاده از نتایج شکل (۲) و روش ارائه شده در معادلات (۴) تا (۶)، پتانسیل مربوط به رابطه (۸) را بازخوانی می‌کنیم. شکل (۳) نتایج بازخوانی را برای مثال فوق نشان می‌دهد. بازخوانی با استفاده از داده‌های مربوط به ضریب بازتاب بین $0 \leq q \leq 1.5 \text{ nm}^{-1}$ و برای فواصل 0.01 nm^{-1} انجام شده است. چنانکه دیده می‌شود به وضوح می‌توان به پتانسیل مربوط به لایه‌ها و ضخامت آنها (۵ و ۱۰ نانومتر) پی برد. بازخوانی‌های مختلف نشان

می‌دهد که هرچه بازه‌های مربوط به داده‌های $R(q)$ کوچکتر باشد، آنچه در نتیجه بدست می‌آید، نوسانات کوچکتری حول جواب اصلی داشته و نتیجه دقیقتر خواهد بود. نتیجه خروجی شکل (۳) با استفاده از کدی بدست آمده که در زبان برنامه‌نویسی Matlab تنها با دریافت قسمت حقیقی و موهومی $R(q)$ به عنوان ورودی، معادله انتگرالی رابطه (۵) را حل کرده و خروجی $V(x)$ را محاسبه می‌کند.



شکل ۲: قسمت‌های حقیقی و موهومی ضریب شکست برای پتانسیل رابطه (۹).



شکل ۳: پتانسیل بازخوانی شده با استفاده از داده های شکل (۲) و حل معادله انتگرالی رابطه (۵).

نتیجه

در این مقاله امکان بازخوانی یکتای پتانسیل موجود در رابطه شرودینگر با استفاده از قسمتهای حقیقی و موهومی ضریب بازتاب تابع موج نشان داده شد. در این روش با حل معادله انتگرالی Gelfand-Levitan-Marchenko بر حسب ضریب بازتاب به عنوان تابعی از انرژی (یا عدد موج) نوترونهای فرودی، پتانسیل برهمکنشی بین نوترونهای سرد و نمونه های چند لایه ای قابل بازخوانی است. این پتانسیل که آن را پتانسیل اپتیکی می نامند اطلاعاتی مهمی، از جمله نوع لایه ها و ضخامت آنها را در اختیارمان قرار می دهد.

مراجع

- [1] G. Ross, M.A. Fiddy, and M. Nieto-Vesperinas, Inverse Scattering Problems in Optics, edited by H.P. Baltes (Springer, Berlin, 1980).
- [2] Direct Method of Solving Crystal Structures, edited by H. Schenk (Plenum Press, 1991).
- [3] J. Penfold, Physica B **173**, 139 (1991).
- [4] G.P. Felcher, Proc. SPIE 983, 2 (1988).
- [5] G. Felcher and T.P. Russel, Physica B **173**, 1 (1991).
- [6] V. F. Sears, "Neutron Optics", Oxford, 1989.
- [7] V.F. Sears, (1978), Can. J. Phys. **56**, 1261.
- [8] P.E. Sacks, Wave Motion **18**, 21 (1993).
- [9] S.F. Masoudi, A. Pazirandeh, J. Phys.: Condens. Matter **17** (2005) 475.
- [10] S.F. Masoudi, A. Pazirandeh, Physica B, **362** (2005) 153-157.
- [11] J. Kasper, H. Leeb, and R. Lipperheide, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 2614.
- [12] S.F. Masoudi, M. Vaezzadeh, M. Golafrouz, Gh.R. Jafari, Applied Phys. A, In press (online version is available).