

P14-2007-147

Л. П. Черненко

О ПРЕДЕЛЬНЫХ ВОЗМОЖНОСТЯХ
МЕТОДА ЗЕРКАЛЬНОГО ОТРАЖЕНИЯ
ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ
В ИЗЛУЧЕНИИ Fe/Cr-НАНОСТРУКТУР

Черненко Л. П.

P14-2007-147

О предельных возможностях метода зеркального отражения поляризованных нейтронов в изучении Fe/Cr-наноструктур

Расчеты коэффициентов зеркального отражения поляризованных нейтронов для Fe/Cr-наноструктур показывают возможности метода нейтронной рефлектометрии в основном канале отражения. Рассмотрено отражение от пленок, проявляющих гигантское магнитное сопротивление. Для данных структур отмечается предельная чувствительность метода зеркального отражения поляризованных нейтронов к типу смешивания нанослоев на интерфейсах.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2007

Chernenko L. P.

P14-2007-147

On the Limit Possibilities of the Polarized Neutron Reflection Method in the Study of Fe/Cr Superlattices

The calculations of polarized neutron reflection coefficients for Fe/Cr superlattices show the neutron reflection method possibilities of the main reflection channel. The reflection of films which have the giant magnetic resistance was considered. The limit sensitivity of the polarized neutron specular reflection method for the nanolayer mixing type of interfaces is observed.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2007

Посвящается памяти Дмитрия Анатольевича Корнеева в знак благодарности за многолетнее сотрудничество с ним

ВВЕДЕНИЕ

Почти одновременно были опубликованы работы двух различных групп исследователей [1] и [2], результаты которых противоречат друг другу. В них изучались наноструктуры Fe/Cr(001), проявляющие гигантское магнитное сопротивление, осциллирующую обменную связь и неколлинеарность магнитных моментов атомов в слоях железа между слоями железа. В настоящее время интерес к наноструктурам широк, и методы их исследования включают в себя поляризационную нейтронную рефлектометрию (ПНР).

Работы [1, 2] противоречат друг другу в величине определенного методом ПНР угла между магнитными моментами Fe-слоев в Fe/Cr(001)-наноструктурах. Различие в углах между Fe-слоями может происходить из-за того, что толщина Cr-слоев в наноструктурах критична к этому углу [3]. Возможно, что теоретические модели, учитывающие влияние обменной связи на неколлинеарность, могут быть более эффективно проверены на Fe/Cr(001)-наноструктурах с тонкими слоями Cr, толщиной около 17 Å и менее.

Естественным образом встает вопрос об экспериментальном изучении методом ПНР более тонких особенностей магнитной структуры Fe/Cr(001)-наноструктур. Такими особенностями могут быть рассматривавшиеся в теоретической работе [3] распределения магнитных моментов в трехслойных структурах Fe/Cr/Fe, в которых оказываются принципиальными не только вариации углов магнитных моментов железа, но и вариации углов магнитных моментов атомов хрома по глубине (антиферромагнитная спираль). Там же (в [3]) рассматривается возможная модуляция величины магнитных моментов железа и хрома с глубиной. Для метода ПНР, на наш взгляд, совсем не очевидно наличие чувствительности к указанным особенностям. Возможным экспериментальным исследованиям магнитной наноструктуры методом ПНР мы предпосылаем численные расчеты. Оценки измеряемых величин такого рода экспериментов дают представление о пределах чувствительности метода к тонким деталям магнитной наноструктуры Fe/Cr(001).

1. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Известны несколько методов расчета коэффициента отражения нейтронов (см., например, [4] и ссылки внутри). Мы применили два метода, отличающиеся формой потенциала в уравнении Шредингера. Нами разработаны алгоритмы и на их основе составлены программы расчета коэффициента отражения нейтронов. Это позволило проверить методы в сравнении и гарантировать отсутствие ошибок при программировании. Для полноты рассмотрения ниже опишем использованные методы.

1.1. Классический метод. Среда разбита на L слоев, в каждом из которых задан потенциал, не зависящий внутри слоя от координаты по глубине слоя. Рассматривается магнитная среда, в которой представлен в общем случае неколлинеарный магнетизм. За последним потенциалом слоя следует потенциал подложки. Все $L + 1$ потенциалов имеют общий вид

$$U_j^\pm = 4\pi(Nb_j \pm \mu_n M_j), \quad (1)$$

где j — порядковый номер слоя от 1 до $L + 1$; Nb_j — плотность нейтрон-ядерной длины рассеяния; μ_n — магнитный момент нейтрона; M_j — компонента магнитного момента слоя, лежащего в плоскости j -го слоя. Волновой вектор нейтрона в среде

$$k_j^\pm = \sqrt{(k^2 - U_j^\pm)}, \quad (2)$$

где k — волновой вектор нейтрона в свободном пространстве. С учетом магнетизма волновая функция нейтрона имеет спинорное представление

$$\Psi_j = \begin{pmatrix} \alpha_j^+ \exp(ik_j^+ x) + \alpha_j^- \exp(-ik_j^+ x) \\ \beta_j^+ \exp(ik_j^- x) + \beta_j^- \exp(-ik_j^- x) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Для $j = 0$ величины относятся к области пространства $x < 0$. Условие непрерывности производной волновой функции и самой волновой функции,

$$\begin{cases} \Theta_{j+1} \Psi_{j+1} |_{x_j} = \Theta_j \Psi_j |_{x_j} \\ \Theta_{j+1} \Psi'_{j+1} |_{x_j} = \Theta_j \Psi'_j |_{x_j}, \end{cases} \quad (4)$$

где x_j — координата границы между j и $j + 1$ слоями, а оператор поворота спина

$$\Theta_j = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta_j}{2}\right) - i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin\left(\frac{\theta_j}{2}\right), \quad (5)$$

определяет поворот спинора на угол θ_j , дает рекуррентные соотношения для определения неизвестных амплитуд α_j^\pm и β_j^\pm . При этом используются дополнительные условия

$$\begin{cases} \alpha_{L+1}^- = 0, \\ \beta_{L+1}^- = 0, \end{cases} \quad (6)$$

означающие отсутствие волны, идущей из $-\infty$, и

$$\begin{cases} \alpha_0^+ = 1, \\ \beta_0^+ = 0; \end{cases} \begin{cases} \alpha_0^+ = 0, \\ \beta_0^+ = 1 \end{cases} \quad (7)$$

— два чистых состояния падающей спинорной волны, которые позволяют найти матрицу амплитуд отражения $\begin{pmatrix} r^{++} & r^{+-} \\ r^{-+} & r^{--} \end{pmatrix}$, используя амплитуды α_0^- и β_0^- для двух чистых состояний падающей спинорной волны. Угол θ_j задает ось квантования в каждом слое j , совпадающую с направлением момента M_j слоя. Нами использованы: а) процедура поворота каждого j -спинора на угол θ_j , т. е. переход в лабораторную систему, и б) условия непрерывности производной и волновой функции, записанные в лабораторной системе (см. (4)). Данный алгоритм, на наш взгляд, полностью эквивалентен всем известным алгоритмам за исключением алгоритма, учитывающего локальность взаимодействия нейтрона и ядер, рассматриваемого ниже.

1.2. Метод « δ -функции». Среда разбита на L плоскостей, в которых локализованы ядра вещества. Расстояния между плоскостями — порядка межплоскостных расстояний в идеальном кристалле. Атомные магнитные моменты также локализованы в плоскостях. Подложка имеет потенциал, определяемый, как и в методе, изложенном выше. В этом заключается некоторая непоследовательность данного метода, что мы обсудим позднее. Таким образом, определенная среда из L плоскостей характеризуется квазипотенциалом, аналогом квазипотенциала Ферми, имеющим вид

$$U_j = \Theta_j^{-1} \begin{pmatrix} b_j^+ & 0 \\ 0 & b_j^- \end{pmatrix} \Theta_j \delta(x - x_j) = B_j \delta(x - x_j), \quad (8)$$

где x_j — координаты δ -плоскостей, а b_j^\pm — одномерные аналоги плотности амплитуд нейтрон-ядерного рассеяния, определяемые как $b^\pm = 4\pi(b^n \pm b^m)/s_0$, где b^n — нейтрон-ядерная длина рассеяния, b^m — нейтрон-магнитная длина рассеяния, усредненные по плоскости s_0 , составляющей условную среду. Оператор поворота Θ_j приведен выше (см. формулу (5)).

Так же как и выше (в классическом методе), можно получить рекуррентные соотношения, соответствующие условиям непрерывности волновой функции и ее производной

$$\begin{cases} \Psi_{j+1}|_{x_j} = \Psi_j|_{x_j} \\ \Psi_{j+1}^{\odot}|_{x_j} = \Psi_j^{\odot}|_{x_j} - B_j \Psi_j|_{x_j} \end{cases} \quad (9)$$

Спинорная волновая функция существенно меняется по сравнению с (3) и имеет более простой вид:

$$\Psi_j = \begin{pmatrix} \alpha_j^+ \\ \beta_j^+ \end{pmatrix} \exp(ikx) + \begin{pmatrix} \alpha_j^- \\ \beta_j^- \end{pmatrix} \exp(-ikx). \quad (10)$$

Начальные условия задаются уравнениями

$$\begin{cases} \alpha_0^+ = 1, \\ \beta_0^+ = 0 \end{cases} \text{ и } \begin{cases} \alpha_0^+ = 0, \\ \beta_0^+ = 1, \end{cases} \quad (11)$$

имеющими аналогичный (7) смысл и дополняются условием отсутствия волны, идущей из $-\infty$:

$$\begin{cases} \alpha_{L+1}^- = 0, \\ \beta_{L+1}^- = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Матрицу отражения находим, решая рекуррентные уравнения (9) для чистых состояний.

Подложка учитывается тем, что рекуррентное соотношение для $j = L + 1$ записывается в таком же виде, как и в предыдущем методе.

Формальные соотношения связывают матрицу отражения с амплитудами спинов падающей и отраженной волн следующим образом:

$$\begin{pmatrix} r^{++} & r^{+-} \\ r^{-+} & r^{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0^+ \\ \beta_0^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_0^- \\ \beta_0^- \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Данное определение позволяет путем несложных преобразований, используя дважды начальные условия, найти амплитуды отражения r^{++} , r^{+-} , r^{-+} и r^{--} , а затем и коэффициенты отражения $R^{++} = |r^{++}|^2$, $R^{--} = |r^{--}|^2$, $R^{+-} = |r^{+-}|^2$ и $R^{-+} = |r^{-+}|^2$.

2. ХАРАКТЕРИСТИКА ПОДХОДОВ

Приведенные выше алгоритмы расчета коэффициентов отражения поляризованных нейтронов имеют под собой различные основания в представлении об изучаемом методом ПНР объекте. В алгоритме, опирающемся на классический метод, существенно представление о нейтронно-оптическом потенциале как об усредненной характеристике области, включающей в себя совокупность атомов, которая не имеет в структурном отношении принципиального значения. Классическое представление о нейтронно-оптическом потенциале было нами противопоставлено другому представлению, учитывавшему локальность взаимодействия нейтрона и ядер среды. В отношении большинства задач, решавшихся методом нейтронной рефлектометрии, по определению глубинного профиля состава и его магнитных свойств в пленках локальность взаимодействия, по-видимому, не принципиальна. Однако, когда речь идет о предельных возможностях современной нейтронной рефлектометрии, мы не в праве пренебрегать обсуждаемым различием методов.

В работах [5] впервые разработан подход к задаче зеркального отражения нейтронов как процессу динамической дифракции на последовательности

атомных δ -плоскостей. Было получено, что в области малых переданных импульсов, $Q \ll \frac{2\pi}{d}$, где d — шаг между δ -плоскостями, расчеты совпадают с результатами соответствующих расчетов с помощью оптического непрерывного потенциала для тех случаев, когда различие методов не принципиально. Таким образом, было показано, что дифракция на нулевом узле одномерной обратной решетки является областью соответствующей классической нейтронной оптики. Область значений переданного импульса $Q \geq \frac{2\pi}{d}$ соответствует дифракции на одномерной решетке. Разработанный подход мы называем дифракционной оптикой. Множество рассмотренных примеров, приведенных в работе [5] для иллюстрации его возможностей, носят, в основном, эвристический характер. До 1989 г. изучение неколлинеарного магнетизма пленок методом рассеяния поляризованных нейтронов носило эпизодический характер, о чем свидетельствует состояние исследований поверхности, интерфейсов и магнетизма тонких пленок, отраженное в исчерпывающем обзоре того времени [6]. К настоящему времени, когда изучение неколлинеарного магнетизма пленок методом ПНР распространяется значительно, заслуживает внимания анализ обсуждаемого принципиального различия расчета коэффициентов отражения поляризованных нейтронов.

В качестве примера мы приведем расчеты коэффициента отражения нейтронов с переворотом спина для антиферромагнитной спирали пленки хрома. Значительная интенсивность отражения нейтронов в оптической области векторов рассеяния нейтронов, обнаруженная нами, свидетельствует, по крайней мере, о том, что рабочее представление о нулевом магнитном нейтронно-оптическом потенциале антиферромагнетика не точно. Такое представление, следующее из классического определения нейтронно-оптического потенциала, довлеет над исследователями в оценках перспектив. Этот тезис можно проверить на примере обзора [7], где приводятся расчеты для неколлинеарной антиферромагнитной спирали прослоек хрома в наноструктуре Fe/Cr(001) только для векторов рассеяния в области дифракции.

Таким образом, наша характеристика подходов ставит на повестку дня вопрос об адекватности расчета коэффициентов отражения нейтронов современным представлениям о неколлинеарном магнетизме пленок и задачам в их изучении.

3. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Рассмотрим результаты расчета коэффициентов отражения нейтронов на Fe/Cr(001)-наноструктурах, используя, в частности, и структуры, приведенные в теоретической работе [3].

Наноструктура $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Cr}(15 \text{ \AA})/[\text{Fe}(15 \text{ \AA}, 90^\circ), \text{Cr}(15 \text{ \AA}), \text{Fe}(15 \text{ \AA}, 0^\circ), \text{Cr}(15 \text{ \AA})]_{10}, \text{Cr}(15 \text{ \AA})$ представляет собой структуру, которая может проявлять гигантское магнитное сопротивление. В параметрах слоев железа ука-

заны углы ориентации магнитных моментов атомов, которые соответствуют случаю неколлинеарной структуры, обнаруженному в работе [1]. Толщины элементарных слоев, однако, малы настолько, что обменное взаимодействие может в данном случае проявлять характер, противоречащий модели взаимодействия, с которой в работе [1] получено удовлетворительное согласие. Зонные расчеты [3] показали, что упомянутая модель взаимодействия не работает при малых толщинах элементарных слоев.

Отвлекаясь пока от проблем магнетизма, рассмотрим чисто методический вопрос адекватности принятых нами методов решения задачи об отражении поляризованных нейтронов. Мы рассчитали коэффициенты отражения нейтронов R^{++} , R^{--} (рис. 1, *a*) и R^{+-} (рис. 1, *б*) двумя методами, приняв для второго из них, так как это существенно, параметр шага между атомными эпитаксиальными слоями равным 2,5 Å. Данный шаг между слоями достаточно реалистичен и приводит к кратному числу монотонных слоев, равному шести.

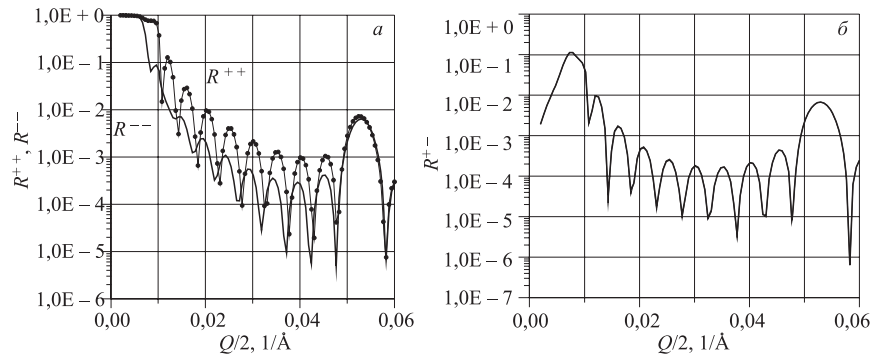


Рис. 1. Коэффициенты отражения нейтронов: *a*) без переворота спина нейтрона R^{++} и R^{--} (R^{++} изображен линией с точками, Q — вектор рассеяния нейтронов), *б*) с переворотом спина R^{+-} , рассчитанные по двум вариантам программ, составленных на основе изложенных методов для наноструктуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Cr}(15 \text{ \AA})/[\text{Fe}(15 \text{ \AA}, 90^\circ), \text{Cr}(15 \text{ \AA}), \text{Fe}(15 \text{ \AA}, 0^\circ), \text{Cr}(15 \text{ \AA})]_{10}, \text{Cr}(15 \text{ \AA})$

Ниже мы вернемся к обсуждению вопросов магнетизма, когда потребуется охарактеризовать предельные возможности поляризационной нейтронной рефлектометрии. А пока важно отметить, что на данном этапе сравнения двух методов расчета не обнаружено различия в расчетах коэффициентов отражения для приведенной выше структуры. Для коэффициентов отражения без переворота спина нейтрона R^{++} и R^{--} (рис. 1, *a*) и с переворотом спина R^{+-} (рис. 1, *б*) различие расчетов двумя методами пренебрежимо настолько, что приводит к почти полному наложению рассчитанных кривых, визуально не различимому на рисунках.

Важно отметить, что на данном этапе магнитные моменты атомов Cr нулевые и, по всей видимости, так же принято и в работах [1, 2], в кото-

рых обсуждается применение нейтронного рассеяния для определения угла неколлинеарного магнетизма в Fe/Cr(001)-наноструктурах. Это естественное предположение не противоречит наивному представлению о нулевом магнитном оптическом потенциале антиферромагнетика. Однако далее мы подробнее проверим этот тезис, так как известна важная роль антиферромагнитной прослойки Cr в обменном взаимодействии, влияющем на формирование неколлинеарной структуры [3].

Интересно рассмотреть случай трехслойной структуры. Во-первых, в ней меньшее количество вещества по сравнению с наноструктурой и, следовательно, имеется трудность в применении обычной дифракции нейтронов, связанная с набором достаточной статистики в брэгговских рефлексах. Во-вторых, для трехслойной структуры минимизируется число параметров, требуемых для определения при обработке экспериментальных данных. Мы не берем все идеализированные варианты, которые фигурируют в теории для зонных расчетов [3]. Проанализируем структуру $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Fe}(15 \text{ \AA})/\text{Cr}(15 \text{ \AA})/\text{Fe}(15 \text{ \AA})$, в которой имеется подложка монокристалла сапфира, и включим в рассмотрение антиферромагнитную связь атомов Cr.

Может ли в области нейтронной оптики изучаться неколлинеарный антиферромагнетизм? Утвердительный ответ на этот вопрос может давать надежду и на успехи в поставленной задаче о трехслойной структуре.

В противоречие с наивным представлением о нулевом магнитном потенциале антиферромагнетика имеется возможность, найденная нами на примере $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Cr}(001)$, изучения неколлинеарной структуры путем измерения коэффициента отражения поляризованных нейтронов с переворотом спина нейтрона. На рис. 2 для эпитаксиальной пленки хрома толщиной 250 \AA , в которой осуществляется антиферромагнитная спираль, приведены коэффициенты отражения с переворотом спина нейтрона.

Кривые последовательно представляют полный поворот спирали от 0° до 180° . Дальнейшее увеличение угла до 360° приводит к повторению картины в обратной последовательности, и этим исчерпывается полный период, так что дальнейшее увеличение угла не дает новых решений. Таким образом, картина отражения определяется ориентацией первого и последнего спинов спирали, как это качественно было отмечено нами без привязки к реальной антиферромагнитной спирали в работе 1989 г. [5], когда изучение неколлинеарного магнетизма пленок еще не начиналось.

Чтобы дать представление о чувствительности коэффициента отражения с переворотом спина к разнице углов между первым и последним атомными магнитными моментами антиферромагнитной спирали хрома, на рис. 3 приведен расчет для поворота на 90 и 85° . Вывод: различие в повороте на 5° вполне измеримо.

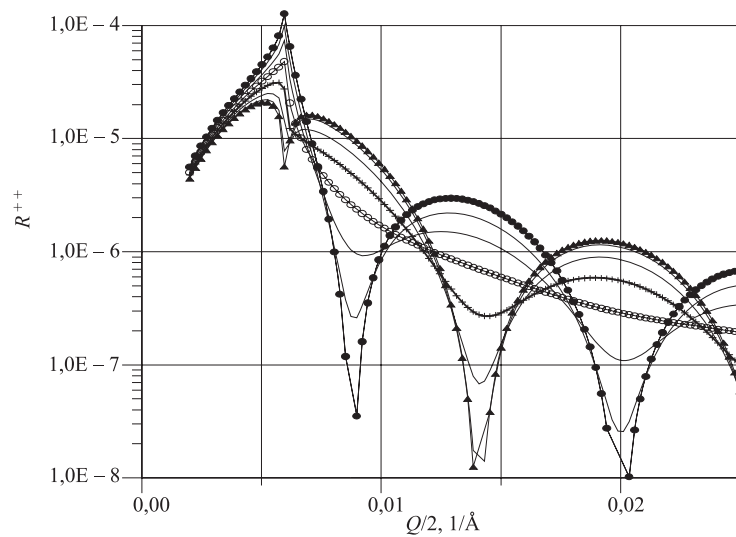


Рис. 2. Коэффициенты отражения нейтронов с переворотом спина для антиферромагнитной спирали в пленке хрома на сапфировой подложке и толщиной 100 монотонных слоев с шагом $2,5 \text{ \AA}$. В серии кривых угол между первым и последним магнитным моментом хрома пробегает последовательно от 0 до 180° для серии кривых (см. текст)

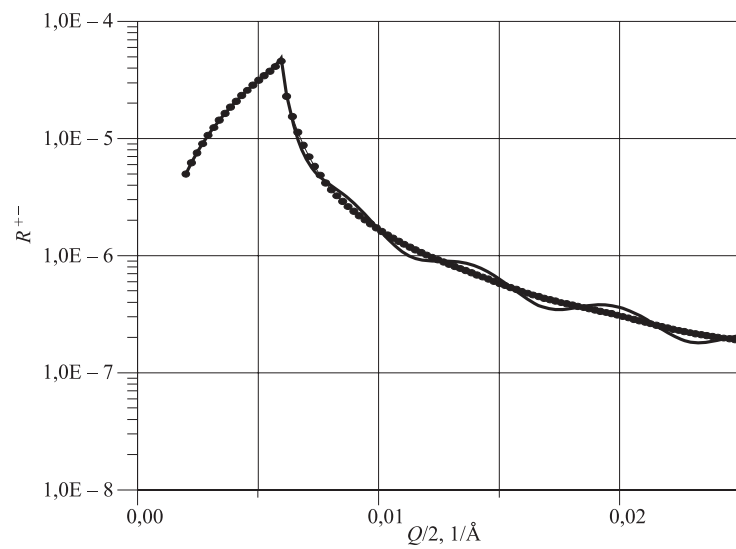


Рис. 3. Коэффициенты R^{+-} отражения нейтронов с переворотом спина для угла поворота антиферромагнитной спирали на 85 и 90° (кривая с символами) для пленки хрома толщиной 500 \AA

Как вариант, расчеты первым методом для антиферромагнитной спирали могут быть тоже выполнены, если формально пленку разбить на элементарные слои, в каждом из которых магнитный момент хрома определяет магнитный потенциал по рецепту, принятому для ферромагнетика.

В трехслойной структуре Fe/Cr/Fe антиферромагнетизм хрома может не чувствоваться из-за более сильных эффектов на ферромагнитном железе.

Возьмем для расчета структуру $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Fe}(15 \text{ \AA}), \text{Cr}(15 \text{ \AA}), \text{Fe}(15 \text{ \AA})$ с шагом между атомными плоскостями $2,5 \text{ \AA}$ для второго метода расчета и шириной слоев $2,5 \text{ \AA}$ для первого метода. При этом будем приближаться к неколлинеарной структуре, подобной рассмотренной в [3]. Пусть в начале магнитные моменты внутри слоя железа коллинеарные в каждом из слоев, а во внутреннем слое железа моменты повернуты на 90° относительно внешнего слоя. Сравним случаи: когда моменты хрома нулевые и когда образуют антиферромагнитную спираль с элементарным угловым шагом 15° и согласованно подворачиваются к 90° , углу магнитных моментов слоя железа. На рис. 4 приведены коэффициенты отражения без переворота спина нейтрона, а на рис. 5 — с переворотом. Линии без символов соответствуют расчету, когда моменты хрома не нулевые, что отвечает более реалистической картине.

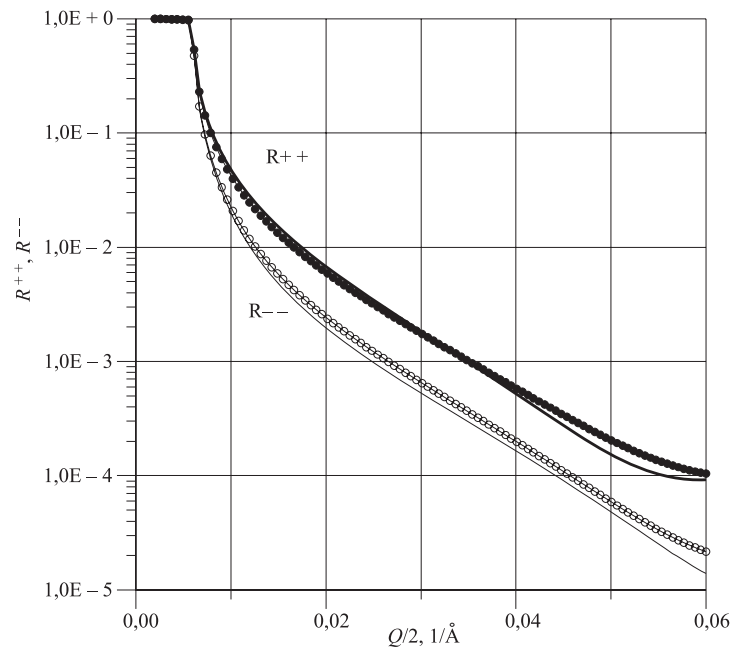


Рис. 4. Коэффициенты отражения нейтронов без переворота спина R^{++} и R^{--} для структуры $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Fe}(15 \text{ \AA}), \text{Cr}(15 \text{ \AA}), \text{Fe}(15 \text{ \AA})$ с учетом моментов хрома (линии без символов) и без их учета (линии с символами). Магнитные моменты железа внутри слоев коллинеарные, а между слоями железа — 90°

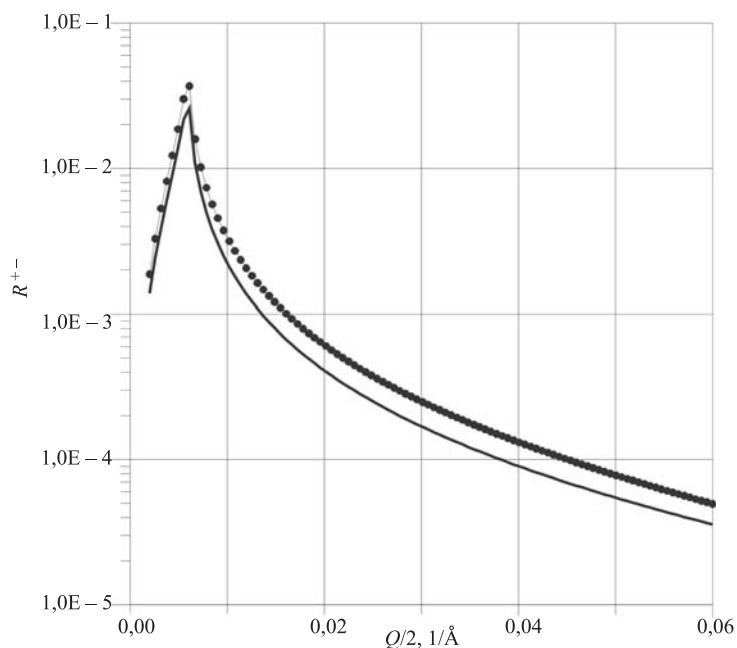


Рис. 5. Коэффициенты R^{+-} отражения нейтронов с переворотом спина для той же структуры, что и на рис. 4 (обозначения те же)

Различие в величине коэффициентов отражения нейтронов с переворотом спина для обоих случаев вполне измеримо и свидетельствует о том, что необходимо вводить в модельный расчет моменты атомов антиферромагнитной прослойки.

Можно принять во внимание, что интерфейс между слоями может быть представлен перемешиванием атомов железа и хрома или подавлением магнитного момента железа и усилением магнитного момента хрома. Тогда для рассматриваемой трехслойной структуры можно рассчитать коэффициенты отражения и сравнить эти два случая, которые важны для зонных расчетов [3]. На рис. 5 приведены коэффициенты отражения нейтронов с переворотом спина, свидетельствующие о чувствительности процесса переворота спина нейтрона к ситуации, когда две рассматриваемые причины модификации интерфейса имеют место в сравнении с интерфейсом без модификации. Однако между собой обе они не различимы. Причем в расчетах принято смешивание в двух слоях интерфейса атомов железа и хрома в пропорции 1:1, т. е. достаточно большое, а также подавление магнитных моментов железа и усиление магнитных моментов хрома до выравнивания соответствующего магнитного потенциала соседних слоев интерфейса.

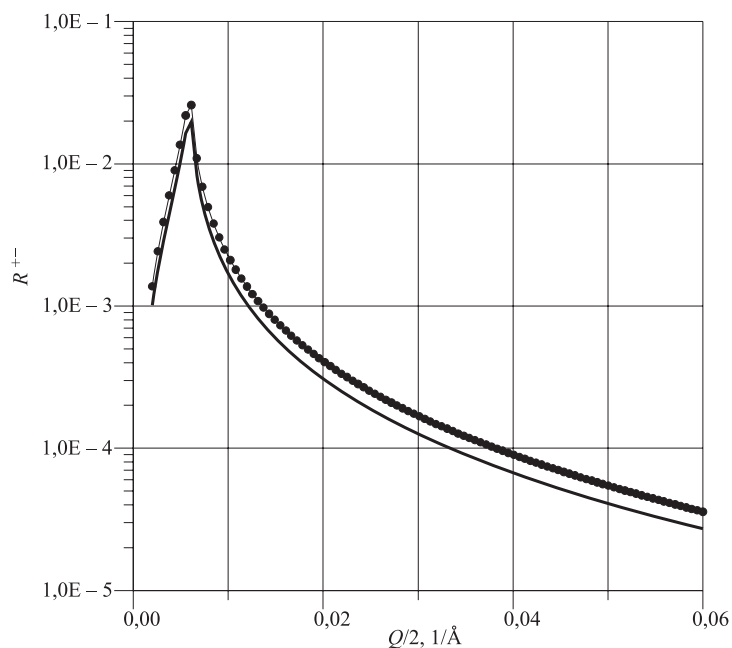


Рис. 6. Коэффициенты R^{+-} отражения нейтронов с переворотом спина для трехслойной структуры. Интерфейс идеальный (кривая с символами) и модифицирован перемешиванием железа и хрома в соседних плоскостях в пропорции 1:1 или подавлением магнитных моментов железа и усилением магнитных моментов хрома, как если бы в той же пропорции магнитные моменты в соседних плоскостях смешать (кривая без символов). Последние две гипотезы неразличимы в рассчитанных коэффициентах отражения

Таким образом, последний рассмотренный расчет свидетельствует о весьма нетривиальной ситуации. Возможны исследования, когда может быть изучена адекватность зонных расчетов и феноменологических моделей, объясняющих поведение объекта со сложной структурой. Обнаружено, что причина отклонения от идеальности интерфейса неразличима в отношении двух рассматривавшихся гипотез: взаимной диффузии или обменного взаимодействия с подавлением и усилением соответствующих магнитных моментов.

Другой аспект поведения магнитной системы трехслойной структуры связан с жесткостью связей моментов. До сих пор мы брали моменты железа внутри слоя коллинеарные. Если ослабить связь моментов железа и позволить им поворачиваться по глубине слоя так, чтобы уменьшить приращение угла поворота в антиферромагнитной прослойке хрома и сохранить суммарный угол поворота 90° , то отражение с переворотом спина чувствует поворот моментов железа в элементарном шаге на 3° . Это показано на рис. 7.

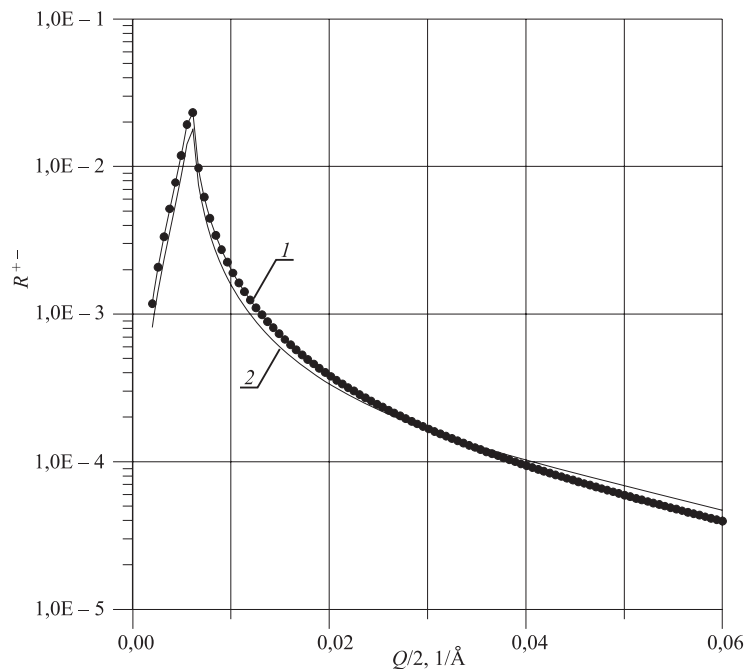


Рис. 7. Коэффициенты R^{+-} отражения нейтронов с переворотом спина. Для случаев: 1 — магнитные моменты железа в каждом слое строго коллинеарные; 2 — магнитные моменты железа поворачиваются от плоскости к плоскости на угол 3° . Причем антиферромагнитная спираль в слое хрома компенсирует остаток поворота с меньшим углом, чем для случая 1, так, чтобы последний магнитный момент трехслойной структуры составлял угол 90° по отношению к первому магнитному моменту трехслойной структуры

Таким образом, трехслойная структура может исследоваться методом ПНР. В наших расчетах интервал волнового вектора рассеяния нейтронов выбирался так, чтобы представить диапазон существенных значений коэффициентов отражения, что дает представление об оптимальных условиях измерения. Последнее обстоятельство существенно для планирования нейтронного эксперимента.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Использование двух методов расчета позволило сравнить их и показать их эквивалентность для изучения Fe/Cr(001)-наноструктур.

Расчеты показывают, что простейшие фрагменты наноструктур могут быть изучены методом ПНР. При этом может быть достигнута наибольшая

определенность в извлекаемых параметрах изучаемой структуры. Такими параметрами являются углы неколлинеарной магнитной структуры не только между магнитными моментами, возникающими между ферромагнитными слоями, но и элементарные углы между моментами в последовательных слоях. Имеется возможность сравнить жесткость неколлинеарной структуры ферромагнитных слоев и антиферромагнитной прослойки.

Интересен случай пленки хрома, неколлинеарная структура в которой может появляться из-за влияния напряжений, возникающих как при выращивании (эпитаксии), так и при температурных измерениях за счет различия в коэффициентах теплового расширения (сокращения).

Интересная информация о состоянии интерфейса может быть получена при сравнении “идеальных” структур и модифицированных воздействием, приводящим к смешиванию атомов в соседних слоях интерфейса.

Остается неразличимой ситуация, когда интерфейс модифицируется или перемешиванием атомов соседних плоскостей, или подавлением (усилением) магнитных моментов в соседних слоях интерфейса. Для идентификации соответствующих причин модификации ПНР имеет ограничения по чувствительности при экспериментах на трехслойной структуре.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предсказания феноменологических моделей магнетизма в Fe/Cr(001)-системе, по-видимому, эффективно проверяются на простейших структурах, допускающих изучение системы методами зонных расчетов. Возникает интересная ситуация, показанная в наших расчетах, когда эти же простейшие структуры позволяют изучать их методом ПНР. При этом может быть получена нетривиальная информация о более тонких состояниях системы, что приводит к изучению более тонких свойств Fe/Cr(001)-наноструктур, определяющих явления гигантского магнитного сопротивления и роль обменного взаимодействия, отвечающего за формирование неколлинеарного магнетизма системы.

Благодарности. Автор признателен Анатолию Балагурову за поддержку работы и Виктору Боднарчуку за сделанные замечания. Приятно также поблагодарить Евгения Кравцова (ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург) за предшествовавшие нашим расчетам беседы о явлениях в Fe/Cr-наноструктурах и о современном состоянии исследований в этой области.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Adenwalla S. et al.* Polarized-Neutron-Reflectivity Confirmation of 90° Magnetic Structure in Fe/Cr(001) Superlattices // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 53. P. 2474–2480.

2. *Schreyer A. et al.* Noncollinear and Collinear Magnetic Structures in Exchange Coupled Fe/Cr(001) Superlattices // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. P. 16066–16085.
3. *Freyss M. et al.* Noncollinear Order Contribution to the Exchange Coupling in Fe/Cr(001) Superlattices // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. P. 12677–12680.
4. *Pleshanov N. K.* On Specular and Diffuse Neutron Scattering: Operator Approach. Preprint PNPI SS-38-1996 2130, 1996; *Pleshanov N. K., Pusenikov V. M.* Application of Generalized Matrix Method to Neutrons in Magnetically Non-Collinear Stratified Media // *Z. Phys. B.* 1996. V. 100. P. 507–511; *Pleshanov N. K.* Spin Particles at Stratified Media: Operator Approach // *Z. Phys. B.* 1996. V. 100. P. 423–427.
5. *Корнеев Д. А., Черненко Л. П.* Нейтронная дифракционная оптика ограниченных сред со сложной магнитной структурой. Препринт ОИЯИ Р4-89-709. Дубна, 1989. *Korneev D. A., Chernenko L. P.* Neutron Diffraction Optics of Films with Noncollinear Magnetic Depth Structures. // *Neutron Optical Devices and Applications*, Charles F. Majkrzak, James L. Wood, Editors, Proc. SPIE 1738, 1992. P. 468–476.
6. *Falicov L. M. et al.* Surface, Interface, and Thin-Film Magnetism // *J. Mater. Res.* 1990. V. 5, No. 6. P. 1299–1340.
7. *Majkrzak C. F.* Neutron Scattering Studies of Magnetic Thin Films and Multilayers // *Physica B.* 1996. V. 221. P. 342–356.

Получено 4 октября 2007 г.

Корректор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 27.12.2007.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,06. Уч.-изд. л. 1,26. Тираж 280 экз. Заказ № 56011.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/