

**Мессбауэровская спектрометрия в скользящей геометрии – метод исследования ультратонких слоев поверхности. II. Теория мессбауэровских спектров при скользящих углах падения / С.М. Иркаев, М.А. Андреева, В.Г. Семенов. Г.Н. Белозерский, О.В. Гришин // Научное приборостроение — 1992. — Т.2. — N 4: Поверхность и методы ее исследования. — С. 43–61.**

Развита общая теория мессбауэровских спектров зеркально отраженного  $\gamma$ -излучения и вторичного излучения для слоисто неоднородных сред. Математическое моделирование спектров, проведенное на основе этой теории, показало, что форма мессбауэровских спектров зеркального отражения от резонансной пленки значительно отличается от формы спектров для полубесконечного резонансного зеркала. Она сильно зависит от толщины и свойств как пленки, так и нерезонансной подложки. Теория формы мессбауэровских спектров вторичного излучения учитывает влияние различных типов электронов на результирующий спектр. Показано, что обработка мессбауэровских спектров, измеренных в скользящей геометрии, может проводиться только с применением численного моделирования. Библ. 21. Ил. 4.

**С. М. Иркаев**

(Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург)

**М. А. Андреева**

(Московский государственный университет)

**В. Г. Семенов, Г. Н. Белозерский, О. В. Гришин**

(Санкт-Петербургский государственный университет)

## **МЕССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОМЕТРИЯ В СКОЛЬЗЯЩЕЙ ГЕОМЕТРИИ — МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ УЛЬТРАТОНКИХ СЛОЕВ ПОВЕРХНОСТИ**

### **II. Теория мессбауэровских спектров при скользящих углах падения**

*A general theory of grazing incidence Mossbauer Spectroscopy for an inhomogeneous layered medium is presented. The computer simulation based on this theory shows that the shape of resonant spectrum of the reflected wave intensity, in the case of a resonant film, considerably differs from that of semiinfinite resonant mirror. This shape strongly depends on the thickness and the properties of the film and of the nonresonant substrate. The proposed theory of the lineshape of Mossbauer secondary radiation spectra from resonant films takes into account the influence of different types of photo- and conversion electrons on the resulting spectrum. It is shown that the fitting of grazing incidence Mossbauer spectra can be done only by means of numerical simulations.*

### **Введение**

В первой части работы [1] было дано подробное описание мессбауэровского спектрометра, предназначенного для исследования ультратонких слоев поверхности при скользящих углах падения резонансного излучения в условиях полного внешнего отражения. Особенность спектрометра заключается в том, что он позволяет проводить регистрацию спектров одновременно по четырем каналам:  $\gamma$ -излучение, зеркально отраженное ядрами и электронами атомов (спектр ПВО); электроны конверсии и Оже-электроны, переизлученные атомами (спектр МСКЭ); характеристическое рентгеновское излучение и  $\gamma$ -излучение, резонансно рассеянное ядрами.

Настоящий раздел посвящен изложению теории мессбауэровских спектров, регистрируемых в этих условиях. В первых экспериментальных работах, в которых наблюдались спектры ПВО [2] и МСКЭ [3], на качественном уровне продемонстрирована высокая чувствительность метода. Количественный анализ мессбауэровских спектров скользящего падения, который позволил бы извлекать из них информацию о состоянии поверхности, неординарен вследствие необычной формы этих спектров, что обусловлено влиянием различных эффектов.

При скользящих углах падения полное внешнее отражение возникает вследствие когерентного взаимодействия излучения с полубесконечной средой, обладающей идеально гладкой поверхностью, в результате которого су-

щественно изменяется поле излучения вблизи поверхности. Ситуация здесь близка к случаю мессбауэровской дифракции, когда процесс когерентного рассеяния радикально изменяет форму мессбауэровского спектра в дифракционном максимуме. Вследствие зеркального отражения затухание преломленной волны в среде резко возрастает (см. рис. 1 в работе [1]) и волновой вектор преломленной волны  $k_d$  становится неоднородным:  $\text{Re}(k)$  направлена почти вдоль поверхности, в то время как  $\text{Im}(k)$ , как обычно, перпендикулярна поверхности. Таким образом, направление изменения амплитуды и направление изменения фазы преломленной волны не совпадают. Такие волны называют эванесцентными или неоднородными, они имеют необычные свойства [4]. Если отражающая среда слоисто-неоднородна, то преломленная волна также характеризуется неэкспоненциальным осциллирующим затуханием, поскольку в такой среде существуют волны как в прямом, так и в обратном направлениях, отраженные границами раздела неоднородностей. Когерентная суперпозиция падающей и зеркально отраженной волн образует над поверхностью систему стоячих волн [5]. Описание взаимодействия эванесцентных, а тем более стоячих волн с отдельными резонансными ядрами на микроскопическом уровне представляет достаточно сложную и во многом нерешенную проблему.

Ниже рассматривается формирование спектров ПВО и МСКЭ в рамках феноменологического подхода. Наибольшее внимание будет уделено различным искажениям формы линий в этих спектрах, обусловленным влиянием ПВО для слоисто-неоднородной среды.

## 1. Форма мессбауэровских спектров для зеркального отражения

В статьях [2, 6] теоретические спектры ПВО рассчитывались с помощью формул Френеля. Было экспериментально установлено, что характерные особенности спектров достаточно хорошо описываются в этом приближении. Линии в мессбауэровских спектрах ПВО имели асимметричную форму дисперсионного типа, которая значительно искажалась с изменением угла скольжения  $\theta$ . Экспериментальные результаты [2, 6] показали, что мессбауэровскую среду можно описывать с помощью такой макроскопической характеристики, как показатель преломления. Однако формулы Френеля применимы для описания зеркального отражения только в случае полубесконечной однородной среды. Такое приближение не позволяет получать какую-либо количественную информацию об изменениях плотности среды, о ее кристаллической или магнитной структуре вблизи поверхности.

Отражение мессбауэровского излучения от тонкой пленки, помещенной на резонансную подложку, тщательно анализировалось в серии статей [7], посвященных проблеме мессбауэровской фильтрации синхротронного излучения. Для расчета амплитуды отражения от тонкой пленки в этих работах использовались хорошо известные из оптики формулы Эйри [8].

Слоисто-неоднородную среду обычно моделируют многослойной системой, отражение от которой может быть описано двумя различными методами. Один из них часто используется в рентгеновской оптике и обычно называется методом рекуррентных соотношений Паррата [9]. Другой подход базируется на использовании характеристических матриц [8]. Оба эти метода кратко рассмотрены в работе [7].

До сих пор мы не касались анизотропных свойств мессбауэровской среды, которые возникают вследствие сверхтонкого расщепления ядерных резонансных уровней. Вообще говоря, теория отражения от анизотропной среды существенно сложнее, чем в случае изотропной среды. Однако для рентгеновского диапазона волн, когда эффект ПВО имеет место только при скользких углах падения, проблема упрощается. Действительно, коэффициенты отражения  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованного излучения от изотропной среды при таких углах практически совпадают, т. е. анизотропия самого отражения может не учитываться. Поэтому в [2, 6] формулы Френеля использовались для описания отражения двух собственных поляризаций поля излучения от анизотропной среды, причем учитывалось, что показатели преломления для них, как и должно быть в анизотропной среде, различаются. Скалярный вариант общей теории отражения может использоваться и для многослойной среды, но только в том случае, когда собственные поляризации для всех слоев в системе одинаковы (или все слои за исключением одного изотропны, тогда собственные поляризации для системы слоев совпадают с собственными поляризациями этого анизотропного слоя). Именно такой случай рассматривался в [7].

В общем случае оси сверхтонких полей могут изменять свое направление от слоя к слою, и общих собственных поляризаций для всей системы анизотропных слоев может не быть. Тогда следует принимать во внимание не только многократные отражения, но также смешивание собственных поляризаций на каждой границе. В этом случае необходимо применять общую теорию распространения излучения в слоисто-анизотропной среде [10, 11], вводя в теорию специфические для мессбауэровского случая упрощения [12], обусловленные малым отличием показателя преломления среды от единицы.

*Анизотропная многослойная среда.* Будем исходить из предположения, что свойства среды изменяются только с глубиной  $z$ , так что тензор обобщенной восприимчивости мессбауэровской среды  $\chi$  [13] представляет собой одномерную функцию:  $\hat{\chi} = \hat{\chi}(z)$ .

Как принято в оптике слоисто-анизотропных сред, будем описывать изменение поля излучения с глубиной при помощи дифференциальной матрицы распространения  $\hat{M}$  [10, 11]:

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(z) \\ [\mathbf{q} \mathbf{E}(z)] \end{pmatrix} = i \mathfrak{K} \hat{M}(z) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(z) \\ [\mathbf{q} \mathbf{E}(z)] \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{H}_t$  и  $[\mathbf{q} \mathbf{E}]$  — тангенциальные компоненты магнитного и электрического полей излучения ( $\mathbf{H}_t = -[\mathbf{q} [\mathbf{q} \mathbf{H}]] = -(\mathbf{q}^\times)^2 \mathbf{H}$ ),  $\mathbf{q}$  — единичный вектор нормали к поверхности, крест ( $\times$ ) здесь и далее означает образование тензора, дуального вектору (т.е., например,  $\mathbf{q}^\times \mathbf{a} = [\mathbf{q} \mathbf{a}]$ ),  $\mathfrak{K} = 2\pi/\lambda$  — волновое число в вакууме.

Если принять во внимание, что  $|\chi| \sim 10^{-6}$  и  $\theta \sim |\chi|^{1/2} \sim 10^{-3}$ , то общее выражение для  $\hat{M}$  упрощается [11]:

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} (\mathbf{a} \chi \mathbf{q}) \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} & (\hat{I} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} (1 - (\mathbf{a} \chi \mathbf{a}))) \\ \hat{I} - \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} (1 - (\mathbf{q} \chi \mathbf{q})) & (\mathbf{q} \chi \mathbf{a}) \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Точка между векторами в (2) означает их внешнее произведение (бивектор или диаду),  $\mathbf{b}$  — тангенциальная компонента волнового вектора падающей волны в единицах  $\omega/c$  (и всех волн в слоистой среде; эта компонента, как

известно, не меняется при отражении и преломлении,  $|b| = \cos \theta$ , где  $\theta$  — угол скольжения,  $\mathbf{a} = [\mathbf{b} \mathbf{q}]$ ,  $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}|$ . Так как величина восприимчивости  $|\chi|$  очень мала, то в свертках векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$  с  $\hat{\chi}$  в (2) можно положить  $|\mathbf{a}| = |\mathbf{b}| \sim 1$ . Планарный тензор  $I$  — это проективный оператор на плоскость поверхности:  $\hat{I} = 1 - \mathbf{q} \cdot \mathbf{q} = -(\hat{\mathbf{q}}^\perp)^2$ .

Выбирая единичные базисные векторы в плоскости поверхности таким образом, что  $\mathbf{e}_x \parallel \mathbf{a}$  и  $\mathbf{e}_y \parallel \mathbf{b}$ , можно представить матрицу  $\hat{M}$  (2) в виде

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ (\mathbf{a} \chi \mathbf{q}) & 0 & 0 & \theta^2 + (\mathbf{a} \chi \mathbf{a}) \\ \theta^2 + (\mathbf{q} \chi \mathbf{q}) & 0 & 0 & (\mathbf{q} \chi \mathbf{a}) \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где  $\sin \theta = \theta$  вследствие малости угла скольжения  $\theta$ .

В выражении (1) для описания изменения поля излучения с глубиной в анизотропной среде используется четыре скалярные переменные, так как в каждом анизотропном слое существует четыре собственных волны (по два различных состояния поляризации для волн в прямом и обратном направлениях). Волновые векторы этих четырех собственных волн могут быть легко найдены при решении дисперсионного уравнения для матрицы  $\hat{M}_n$  в каждом слое  $n$ , в котором можно положить  $\chi(z) = \text{const} = \chi_n$

$$\det\{\hat{M}_n - \eta_n\} = 0. \quad (4)$$

Величины  $\eta_n^{(i)}$  ( $i = 1, \dots, 4$ ), определяемые из (4), — это нормальные компоненты волновых векторов собственных волн, т. е. волновые векторы в  $n$ -ом слое (в единицах  $\omega/c$ ) представляются в виде  $\mathbf{k}_n^{(i)} = \mathbf{b} + \eta_n^{(i)} \mathbf{q}$ . Используя явный вид дифференциальной матрицы распространения  $\hat{M}$  (3), несложно получить

$$\eta_n^{(i)} = \pm (\theta^2 + \chi_{\perp}^{(j)}), \quad j = 1, 2, \quad i = 1, \dots, 4, \quad (5)$$

где  $\chi_{\perp}^{(j)}$  — собственные компоненты поперечного тензора восприимчивости в  $n$ -м слое; индекс  $n$  здесь и далее для краткости опущен. Этот тензор пропорционален амплитуде когерентного рассеяния вперед  $f(\mathbf{k} \Rightarrow \mathbf{k}_0)$  ( $\mathbf{k}_0$  — волновой вектор падающей волны:  $\mathbf{k}_0 = \mathbf{b} + \sin \theta \mathbf{q}$ ). Поскольку угол  $\theta$  очень мал, то в рассматриваемом случае можно положить  $f(\mathbf{k}_0 \Rightarrow \mathbf{k}_0) = f(\mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{b})$ , поэтому

$$\begin{aligned} \chi_{\perp}^{(j)} &= \frac{4\pi}{\kappa^2} f(\mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{b}) = \\ &= \frac{\mathbf{a} \hat{\chi} \mathbf{a} + \mathbf{q} \hat{\chi} \mathbf{q}}{2} = \left( \left( \frac{\mathbf{a} \hat{\chi} \mathbf{a} + \mathbf{q} \hat{\chi} \mathbf{q}}{2} \right)^2 + \mathbf{a} \hat{\chi} \mathbf{q} \mathbf{q} \hat{\chi} \mathbf{a} - \mathbf{a} \hat{\chi} \mathbf{a} \mathbf{q} \hat{\chi} \mathbf{q} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (6)$$

Выражение (6) обобщает на случай скользящего падения матричный показатель преломления мессбауэровской среды, введенный в мессбауэровскую оптику Блюмом и Кистнером [14]. Легко найти соответствие этого выражения с теми формулами, которые использовались в [2,6].

Интегрирование матричного уравнения (1) дает характеристическую матрицу  $L$  слоисто-анизотропной среды. Характеристическая матрица однородного анизотропного слоя толщиной  $d$ , в котором  $\chi_n(z) = \text{const}$ , имеет вид матричного экспоненциала  $\hat{L}_n = \exp \{i \kappa d_n \hat{M}_n\}$ .

Если использовать приближенные выражения (2) (или (3)), для дифференциальной матрицы распространения  $\hat{M}$ , собственные значения которой легко находятся ((5), (6)), то аналитическое выражение для  $4 \times 4$ - матричного экспоненциала  $\exp \{i \kappa d \hat{M}\}$  может быть получено в явном виде [12]. Мы не будем приводить его здесь, поскольку оно довольно громоздко. Для численных вычислений имеет смысл использовать процедуру

$$\exp \{i \kappa d \hat{M}\} = \left( \hat{E} + \frac{(i \kappa d \hat{M})}{2^k} \right)^{2^k}, \quad k \Rightarrow \infty,$$

где  $\hat{E}$  — единичная  $4 \times 4$ - матрица. Для мессбауэровского случая, когда  $|\chi| \sim 10^{-6}$ , и для толщин пленок  $d \sim 1 \div 100 \text{ nm}$  результат сходится уже при  $k \sim 5 \div 10$ .

Так как тангенциальные компоненты электрического и магнитного поля излучения непрерывны на границах раздела, то для многослойной пленки характеристические матрицы отдельных слоев перемножаются ( $d_n$  — толщины отдельных слоев,  $n = 1, \dots, m$ ;  $d_1 + \dots + d_m = d$ , где  $d$  — полная толщина пленки)

$$\hat{L} = \exp \{i \kappa d_m \hat{M}_m\} \exp \{i \kappa d_{m-1} \hat{M}_{m-1}\} \dots \exp \{i \kappa d_1 \hat{M}_1\}. \quad (7)$$

Именно это обстоятельство определяет эффективность матричного метода. Плавный профиль изменения параметров с глубиной в расчетах обычно можно аппроксимировать ступенчатым, что дает возможность рассчитывать характеристическую матрицу по формуле (7). Характеристическая матрица  $\hat{L}$  связывает тангенциальные амплитуды поля на верхней ( $z = 0$ ) и нижней ( $z = d$ ) поверхностях пленки

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(d) \\ [\mathbf{q} \mathbf{E}(d)] \end{pmatrix} = \hat{L}(d) \begin{pmatrix} \mathbf{H}_t(0) \\ [\mathbf{q} \mathbf{E}(0)] \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Заметим, что поле над поверхностью пленки представлено когерентной суперпозицией падающей и зеркально отраженной волн:  $\mathbf{H}_t(0) = \mathbf{H}_{0t} + \mathbf{H}_{rt}$ .

Для решения граничной задачи, представленной системой четырех линейных уравнений (8), и определения амплитуд поля зеркально отраженной  $\mathbf{H}_r$  и преломленной  $\mathbf{H}_d$  волн следует принять во внимание, что тангенциальные компоненты поля  $\mathbf{H}_t$  и  $[\mathbf{q} \mathbf{E}]$  связаны друг с другом в каждой волне вполне определенным образом с помощью так называемого тензора поверхностного импеданса  $\hat{\gamma}_{0,r,d}$  [11]

$$[\mathbf{q} \mathbf{E}(0)] = [\mathbf{q} \mathbf{E}_0] + [\mathbf{q} \mathbf{E}_r] = \hat{\gamma}_0 \mathbf{H}_{0t} + \hat{\gamma}_r \mathbf{H}_{rt}, \quad (9)$$

$$[\mathbf{q} \mathbf{E}(d)] = \hat{\gamma}_d \mathbf{H}_{dt}(d). \quad (10)$$

С использованием этих связей в системе (8) остается только четыре неизвестных:  $\mathbf{H}_r$  и  $\mathbf{H}_{dt}$  (по две компоненты для каждого тангенциального вектора).

Наиболее простой явный вид тензоры  $\hat{\gamma}_{0,r,d}$  имеют в случае изотропной среды [11]. При скользящих углах тензор  $\hat{\gamma}$  можно представить следующим образом:

$$\hat{\gamma} = \pm \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{b} + \eta^2 \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}{\eta}, \quad \eta = (\theta^2 + \chi)^{1/2}. \quad (11)$$

Знаки  $\pm$  относятся к волнам в прямом и обратном направлениях.

Ясно, что во внешней среде  $\chi = 0$ , так что для падающей и зеркально отраженной волн матрица поверхностного импеданса  $\hat{\gamma}_{0,r}$  имеет вид (распишем ее в тех же ортах, что и матрицу распространения (3))

$$\hat{\gamma}_{0,r} = \pm \begin{pmatrix} \theta & 0 \\ 0 & 1/\theta \end{pmatrix}.$$

Если подложка также изотропна, то тензор  $\hat{\gamma}_d$  определяется выражением (11). Если же подложка анизотропна, связь тангенциальных амплитуд поля (10) имеет более сложный вид.

Для мессбауэровского случая в первом приближении можно получить [12]

$$\hat{\gamma}_d = \frac{1}{G} \left\{ \eta^{(1)} \eta^{(2)} (\eta^{(1)} + \eta^{(2)}) \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} + q \hat{\chi} \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} - \mathbf{a} \hat{\chi} q \cdot \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} + (\eta^{(1)} + \eta^{(2)}) \mathbf{b} \cdot \mathbf{b} \right\},$$

где  $\eta^{(1,2)}$  — нормальные компоненты волновых векторов (в единицах  $\omega/c$ ) собственных волн в прямом направлении, определенные общим выражением (5), в котором  $\hat{\chi}$  — восприимчивость подложки и  $G = \theta^2 + \mathbf{a} \hat{\chi} \mathbf{a} + \eta^{(1)} \eta^{(2)}$ .

Решение системы линейных уравнений (8) с учетом связей (9), (10) относительно составляющих векторов  $\mathbf{H}_r$  и  $\mathbf{H}_{dt}$  не представляет труда. Если тангенциальный вектор  $\mathbf{H}_r$  известен, то полный вектор  $\mathbf{H}_r$  можно найти с помощью так называемого тензора восстановления  $\hat{w}_r$  [11]:  $\mathbf{H}_r = \hat{w}_r \mathbf{H}_{r,t}$ . Во внешней среде, где  $\hat{\chi} = 0$ , тензор легко определяется следующим образом:

$$\hat{w}_r = \hat{I} + \frac{q \cdot \mathbf{b}}{\theta}.$$

До сих пор мы рассматривали наиболее общий случай ПВО от мессбауэровского зеркала, когда предполагается возможным любое изменение параметров сверхтонких взаимодействий вблизи поверхности, включая изменение ориентации осей сверхтонкого поля. Конкретные расчеты [12] показали, что мессбауэровские спектры ПВО чрезвычайно чувствительны к наличию вблизи поверхности ультратонкого слоя, характеризуемого параметрами сверхтонких взаимодействий, отличными от объемных.

Теперь перейдем к анализу более простой модели, в которой учитывается только изменение величины или типа сверхтонких взаимодействий в приповерхностном слое, но не учитывается возможный поворот направления сверхтонкого поля.

*Скалярный случай.* Общий формализм может быть существенно упрощен, если собственные поляризации излучения одни и те же для всей многослойной системы. Тогда для учета анизотропии достаточно принять во внимание различие восприимчивостей слоев для каждой собственной поляризации. Следует

отметить, что этот формализм описывает и случай изотропных слоев, когда взаимодействие излучения любой поляризации с системой одинаково.

В скалярном случае дифференциальная матрица распространения  $\hat{M}$  становится  $2 \times 2$ -матрицей и описывает изменение с глубиной амплитуды поля (скалярной величины, так как ее поляризация известна и не изменяется) и ее  $z$ -производной

$$\frac{d}{dz} \begin{pmatrix} E(z) \\ E'(z) \end{pmatrix} = i\kappa \hat{M}(z) \begin{pmatrix} E(z) \\ E'(z) \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Необходимость использования двух переменных для описания распространения излучения в среде при скользящих углах падения следует из того обстоятельства, что в слоистой среде существуют волны, распространяющиеся в прямом и обратном направлениях. Из (3) легко найти

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \theta^2 + \chi & 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

В однородном слое аналитическое решение матричного дифференциального уравнения имеет достаточно простой вид

$$e^{i\kappa \hat{M} d} = \begin{pmatrix} \cos Q & \frac{i}{\eta} \sin Q \\ i\eta \sin Q & \cos Q \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где  $Q = \kappa d \eta$ ,  $\eta^2 = \theta^2 + \chi$ .

Характеристическая матрица  $\hat{L}$  всей системы изотропных слоев определяется общей формулой (7), в которой теперь можно использовать аналитические выражения для матричных экспоненциалов (14).

Амплитуда  $E_r^*$  зеркально отраженной волны над поверхностью многослойной среды определяется при решении граничной задачи, аналогичной (8), в которой можно использовать связи  $E'_0 = \theta E_0$ ,  $E'_r = -\theta E_0$ ,  $E_d(d) = \eta_d E_0$ . Это решение можно выписать в явном виде

$$E_r = \frac{\theta(l_{12}\eta_d + l_{11}) - (l_{22}\eta_d + l_{21})}{\theta(l_{12}\eta_d + l_{11}) + (l_{22}\eta_d + l_{21})} E_0. \quad (15)$$

Здесь  $E_0$  — амплитуда падающей волны,  $\eta_d$  — нормальная компонента волнового вектора преломленной в подложку волны (в единицах  $\omega/c$ )

$$\eta_d = \theta_d = (\theta^2 + \chi_d)^{1/2}, \quad (16)$$

где  $\chi_d$  — восприимчивость подложки,  $\theta_d$  — угол скольжения для преломленной в подложку волны,  $l_{ij}$  ( $i, j = 1, 2$ ) элементы характеристической матрицы  $\hat{L}$ .

В случае полубесконечной изотропной однородной среды из (15) легко получить формулу Френеля, если положить  $l_{11} = l_{22} = 1$  и  $l_{12} = l_{21} = 0$

\* В выражении для  $E_r$  в [14] переставлены индексы у элементов  $l_{ij}$  матрицы  $\hat{L}$ .



$$E_r = \frac{\eta_0 - \eta_d}{\eta_0 + \eta_d}, \quad (17)$$

где  $\eta_0 = \sin \theta - \theta$ ,  $\eta_d = \theta_d$ . Именно эта формула использовалась в первых работах при расчетах мессбауэровских спектров ПВО [2, 6].

Особенности вычисления квадратного корня в (16) при условии  $\theta^2 \sim \chi_d$  не позволяют разделить вклады от двух видов рассеяния в зеркально отраженной волне, обусловленных электронной  $\chi_e$  и ядерной  $\chi_{\text{я}}$  составляющими восприимчивости (17). Данное обстоятельство было убедительно проиллюстрировано в работе [3] с помощью графического изображения равных значений амплитуды отражения на плоскости комплексного аргумента  $\text{Re}(\chi)/\theta^2$  и  $\text{Im}(\chi)/\theta^2$ ; необычная форма линий в мессбауэровских спектрах ПВО интерпретировалась как проявление интерференции ядерно-резонансного и релеевского рассеяний. Различные формы линий (пики, провалы или дисперсионного вида линии) непосредственно следуют из (17). В случае мультиплетного спектра ситуация усложняется интерференцией линий между собой, в результате которой, например, существенно изменяется первоначальное соотношение интенсивностей отдельных линий. Этот эффект также отмечен авторами статьи [2] при расчете дублетного спектра ПВО. Аналогичное изменение соотношений интенсивностей линий возникает, как будет видно при дальнейшем рассмотрении, и в спектрах выхода вторичного излучения.

Если подставить в выражение (15) элементы матрицы (14), то можно получить формулу Эйри, описывающую отражение излучения от пленки

$$E_r = \frac{R_{01} + R_{12} e^{2i\kappa\eta d}}{1 + R_{01} R_{12} e^{2i\kappa\eta d}} E_0, \quad (18)$$

где  $R_{01}$  и  $R_{12}$  — френелевские амплитуды отражения для границы внешняя среда — пленка и пленка — подложка, соответственно,  $\eta$  — нормальная компонента волнового вектора в пленке:  $\eta = (\theta^2 + \chi)^{1/2}$ ,  $\chi$  — восприимчивость пленки.

Это выражение тщательно анализировалось в [7] для выявления условий минимизации отражения, обусловленного электронным рассеянием. Такая задача возникла при решении проблемы создания мессбауэровского фильтра синхротронного излучения с помощью ультратонких покрытий резонансного зеркала.

Следует отметить, что форма линии мессбауэровского спектра ПВО от тонкой резонансной пленки существенно отличается от спектра для полубесконечного резонансного зеркала, исследованного в [2]. В случае пленки форма линии сильно зависит от ее толщины и свойств нерезонансной подложки (величины ее электронной плотности). На рис. 1 приведены модельные спектры отражения  $I_r(x) = |E_r(x)/E_0|^2$  ( $x = 2(E_\gamma - E_R)/\Gamma$ ) от пленки, характеризующейся одиночной резонансной линией, для различных подложек: с большей (кривая 2 —  $\chi_{\text{аб}} = (-31,0 + 1,0i) \cdot 10^{-6}$ ) и меньшей (кривая 3 —  $\chi_{\text{аб}} = (-4,4 + 0,1i) \cdot 10^{-6}$ ), чем в пленке, электронной плотностью. Толщина резонансной пленки 5 нм,

\* Мы не делаем в расчетах для рис. 1 и далее для рис. 2 и 4 свертку энергетического спектра отраженной интенсивности (или выхода вторичного излучения) с энергетическим распределением источника  $W(E)$ . Эта операция несущественна для рассматриваемых эффектов вследствие большой ширины линий в спектрах при скользких углах падения.

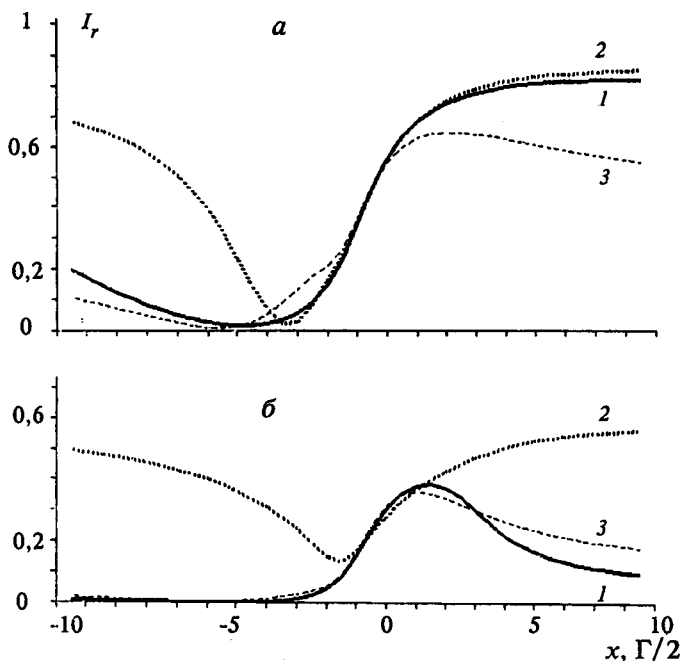


Рис. 1. Резонансный спектр зеркально отраженной волны при углах скольжения  $\theta = 3$  мрад (а) и  $\theta = 5$  мрад (б) для случаев полубесконечного однородного резонансного зеркала (1), резонансной пленки на подложке из золота (2) и резонансной пленке на подложке из стекла (3).

ее электронная и ядерная восприимчивости выбраны такими же, как при расчете рис.1 в работе [1].

Как видно из рисунка, для одного и того же угла скольжения в спектре зеркально отраженной волны может наблюдаться пик (кривая 1), провал (кривая 2) или дисперсионного типа линия (кривая 3) в зависимости от вида подложки. С увеличением толщины пленки влияние подложки уменьшается.

Зависимость формы спектра ПВО от свойств нижележащих слоев является достаточно непривычным в мессбауэровской спектроскопии явлением, но оно реально имеет место и его следует учитывать при интерпретации мессбауэровских спектров ПВО, а также, как будет показано ниже, мессбауэровских спектров выхода вторичных излучений при скользящих углах падения.

Общее выражение (15) позволяет проводить модельные расчеты мессбауэровских спектров ПВО для случая многослойных пленок, учитывающие произвольный профиль изменения параметров сверхтонких взаимодействий (но не ориентации полей) вблизи поверхности.

Вычисление амплитуды зеркально отраженной волны является начальным этапом при рассмотрении выхода вторичного излучения в случае скользящих углов падения, поскольку этот процесс непосредственно зависит от суммарного поля излучения на поверхности.

## 2. Форма мессбауэровских спектров вторичного излучения

*Анизотропный случай.* Вероятность образования вторичных частиц  $P_{\text{nucl}}^{\text{sec}}$  (конверсионные или Оже-электроны, рентгеновское характеристическое излучение) пропорциональна сечению ядерного резонансного поглощения  $\hat{\sigma}_{\text{res}}(E_\gamma)$ , амплитуде поля излучения в месте расположения ядра  $E(z, E_\gamma)$  и вероятности образования частицы вида  $s$  на одно возбужденное ядро  $w_{\text{nucl}}^{\text{sec}}$ .

В [15] показано, что наиболее общее выражение для  $P_{\text{nucl}}^{\text{sec}}$  в случае анизотропной резонансной среды имеет вид

$$P_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(z, E_\gamma) = w_{\text{nucl}}^{\text{sec}} / 2 E^*(z, E_\gamma) \hat{\sigma}_{\text{res}}(E_\gamma) E(z, E_\gamma). \quad (19)$$

где  $E^*$  — амплитуда сопряженной волны.

Если мы пронормируем (18) и соответственно  $\hat{\sigma}_{\text{res}}$  на единичный объем, то для  $\hat{\sigma}_{\text{res}}$  в анизотропной (и, в ряде случаев, гиротропной) мессбауэровской среде получим выражение

$$\hat{\sigma}_{\text{res}} = \frac{\omega}{4 \pi i} \frac{\hat{\chi}_{\text{res}} - \hat{\chi}_{\text{res}}^+}{2}, \quad (20)$$

где  $\hat{\chi}_{\text{res}}$  — резонансная часть тензора восприимчивости, знак + означает эрмитовое сопряжение. Таким способом разделяются эффекты поглощения и гиротропии, которые оба описываются мнимой частью обобщенного тензора восприимчивости  $\hat{\chi}$ . Свертка тензора  $\hat{\sigma}$  с векторами поля  $E^*$  и  $E$  в (19) выделяет ту поляризацию поля излучения, которая может быть поглощена анизотропным ядром.

Мессбауэровский спектр, регистрируемый по выходу вторичного излучения, вычисляется как свертка энергетического спектра мессбауэровского источника  $W(E_\gamma)$  с резонансным спектром выхода вторичного излучения из образца, который, как известно, определяется выражением

$$I_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(E_\gamma) = \int_0^d P_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(z, E_\gamma) T(z) dz, \quad (21)$$

где  $T(z)$  — функция выхода, описывающая вероятность того, что вторичная частица, образованная на глубине  $z$ , достигнет детектора. При рассмотрении выхода конверсионных электронов в расчетах использовалась функция выхода  $T(z)$ , приведенная в работе [16].

Наиболее существенное отличие теории мессбауэровских спектров вторичного излучения при скользящих углах падения в условиях ПВО по сравнению с обычной геометрией состоит в аномальном поведении поля преломленных волн  $E(z, E_\gamma)$  в многослойной пленке. Это объясняется следующими причинами. Во-первых, амплитуда поля излучения на входной поверхности не равна амплитуде поля падающей волны вследствие наличия зеркально отраженной волны. Во-вторых, затухание преломленной волны в среде является аномальным, так как оно связано не только с поглощением, но и с формированием зеркально отраженной волны. Глубина проникнове-

ния излучения при этом становится меньше или сопоставимой с глубиной выхода вторичного излучения, что соответствует увеличению светосилы метода. Существенно, что в такой ситуации изменение амплитуды поля и, что более важно для мессбауэровского случая, изменение с глубиной энергетического состава проходящего излучения следует строго учитывать, так как оно значительно влияет на результирующий мессбауэровский спектр выхода вторичного излучения. В-третьих, в слоисто-неоднородной среде в условиях ПВО существуют волны как в прямом, так и в обратном направлениях, отраженные нижележащими границами раздела; их когерентная суперпозиция образует систему стоячих волн в среде. В теории для учета этого обстоятельства оказывается необходимым вводить для описания изменения амплитуды поля с глубиной уже не одну переменную, а несколько (две в скалярном случае и четыре в анизотропном).

Итак, корректное вычисление амплитуды поля  $E(z, E_\gamma)$  на глубине  $z$  в слоистой анизотропной резонансной среде может быть проведено с помощью характеристических матриц, описывающих преобразование тангенциальных компонент амплитуд электрического и магнитного полей излучения

$$\begin{pmatrix} H_t(z) \\ [q E(z)] \end{pmatrix} = \exp \{ i \kappa \xi M_n \} \dots \exp \{ i \kappa d_1 M_1 \} \begin{pmatrix} \hat{y}_0 H_{0t} + H_{r,t} \\ \hat{y}_0 H_{0t} + \hat{y}_r H_{r,t} \end{pmatrix}, \quad (22)$$

где  $z = d_1 + d_2 + \dots + d_{n-1} + \xi$ ,  $\xi$  отсчитывается от границы  $n$ -го слоя.

Если задача на отражение от многослойной среды уже решена и амплитуда зеркально отраженной волны известна, то согласно (22) тангенциальные амплитуды поля вычисляются последовательно шаг за шагом, начиная с поверхности образца (в наших расчетах этот шаг составлял 0,1 нм). После нахождения  $H_t(z)$  и  $[q E(z)]$  полный вектор электрического поля  $E(z)$  можно определить с помощью соотношения, при написании которого мы использовали обычные для мессбауэровской оптики упрощения

$$E(z) \sim q \cdot a H_t(z) + a \cdot b [q E(z)]. \quad (23)$$

Формулы (20) — (23) дают наиболее общее решение проблемы формирования мессбауэровского спектра вторичных излучений в слоисто-анизотропной мессбауэровской среде. Этот формализм учитывает многократные отражения в каждом слое, а также преобразование и смешивание поляризационных состояний излучения в процессе его распространения через систему анизотропных слоев.

*Скалярный случай.* В скалярном случае, когда имеется одна собственная поляризация для всей системы анизотропных слоев, общее выражение для функции  $P_{\text{nucl}}^{\text{sec}}$  (19) можно упростить следующим образом:

$$P_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(z, E_\gamma) = \frac{\omega}{8\pi} w_{\text{nucl}}^{\text{sec}} |E(z, E_\gamma)|^2 \text{Im}(\chi_{\text{res}}(E_\gamma)). \quad (24)$$

В этом случае для описания преобразования поля излучения с глубиной необходимы только две переменные, например, амплитуда поля  $E(z)$  и ее  $z$ -производная  $E'(z)$  (см. (12)). Соответственно, дифференциальная матрица распространения становится  $2 \times 2$ -матрицей (13). В результате алгоритм сту-

пенчатого определения амплитуды поля на глубине  $z$  (22) также упрощается и тогда нет необходимости восстанавливать полный вектор поля (первый элемент столбца как раз и есть амплитуда поля).

Для описания вторичных процессов существует также другой подход, в котором вероятность образования вторичных частиц  $P_{\text{nucl}}^{\text{sec}}$  связывается с потерями энергии излучения в каждом дифференциальном слое

$$P_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(z, E_\gamma) \sim \frac{dI(z, E_\gamma)}{dz}.$$

Такой подход использовался, например, в [17, 18]\*, а для описания вторичных процессов в условиях дифракции — в [19].

Покажем, что в сложных случаях многослойных и особенно анизотропных сред подобный подход неудобен. Интенсивность излучения в этих случаях включает много составляющих: интенсивности собственных волн (по четыре волны в каждом анизотропном слое), интенсивности интерференционных потоков  $I_{\text{int}}$ . Даже в простейшем случае одной изотропной пленки интенсивность поля излучения в ней включает три составляющие

$$I = I_+ + I_- + I_{\text{int}} \sim \\ \sim \text{Re } \eta |E_+|^2 - \text{Re } \eta |E_-|^2 + \text{Im } \eta ((E_+ E_-^*) - (E_-^* E_+)),$$

где  $E_\pm$  — амплитуды волн в прямом и обратном направлениях,  $I_\pm$  — их интенсивности,  $\eta$  — нормальная компонента волнового вектора в пленке.

На рис. 2 приведен резонансный спектр выхода конверсионных электронов  $I_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(x)$  из пленки и вклады в него прямой и обратной волн и интерференционного потока. Толщина пленки 5 нм, угол скольжения 5 мрад. Восприимчивость пленки определена из (1. 4) и (1. 5) [1]. Части *a* и *б* рис. 2 различаются выбором подложки: на рис. 2, *a* подложка имеет меньшую, чем в пленке, электронную плотность (стекло), а на рис. 2, *б* — большую (золото). Из рисунка видно, что вкладом интерференционного потока в суммарный выход вторичного излучения  $I_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(x)$  пренебрегать нельзя, поскольку он оказывает заметное влияние на форму линии.

Разделение выхода вторичного излучения  $I_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(x)$  на различные составляющие, неизбежно возникающее при энергетическом подходе, не только существенно усложняет рассмотрение, но и является достаточно искусственной процедурой, поскольку при этом возникает нефизичная ситуация, когда вклад интерференционного потока в выход вторичного излучения является отрицательным. Поэтому в дальнейшем мы будем работать с общим выражением (19) (в скалярном случае (23)), которое связывает вероятность образования вторичных частиц непосредственно с амплитудой поля излучения в месте расположения ядра. При этом все сложности расчета выхода вторичного излучения при скользящих падениях переносятся на поведение поля излучения в среде. Например, в случае пленки мы получаем немонотонное осциллирующее затухание поля с глубиной — структура типа стоячих волн (рис. 3). Все расчетные параметры для рис. 3 те же, что и для рис. 2, *б*; сдвиг энергии падающего

\*Случай изотропной резонансной пленки рассматривался в рамках энергетического подхода в [18], однако в этой работе ошибочно опущен вклад интерференционного потока в выход вторичного излучения.

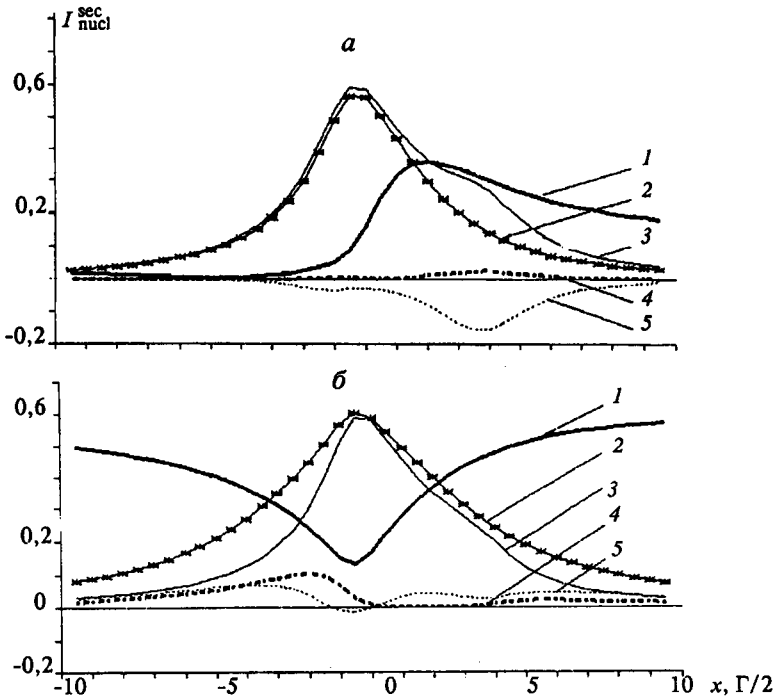


Рис. 2. Резонансные спектры для двух различных подложек при угле скольжения  $\theta = 5$  мрад.

*a* — стекло, *б* — золото; 1 — спектр зеркально отраженной волны, 2 — суммарный выход конверсионных электронов из пленки, 3 — вклад прямой волны, 4 — вклад обратной волны, 5 — вклад интерференционного потока.

излучения относительно точного резонанса в пленке выбран  $x = -4$  (в единицах полуширины линии). Для такого значения  $x$  действительная часть суммарной восприимчивости пленки ( $\chi = \chi_{el} + \chi_{nucl}$ ) близка к нулю, поэтому структура стоячих волн в пленке проявляется особенно отчетливо, как и в случае лэнгмюровских пленок [5]. Очевидно, что столь значительные вариации амплитуды поля в пленке должны существенным образом сказаться на выходе вторичного излучения.

Интерференция прямой и обратной волн приводит к тому,

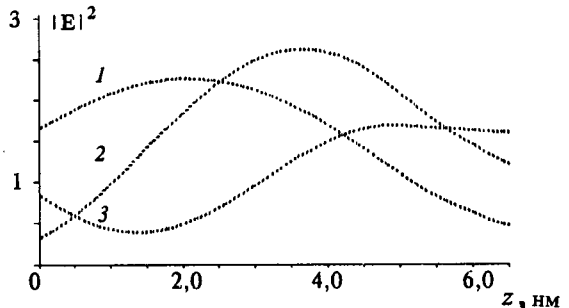


Рис. 3. Изменения квадрата модуля амплитуды поля в резонансной пленке при различных углах скольжения в зависимости от глубины.  $\theta$ : 1—4 мрад, 2—5 мрад, 3—6 мрад.

что в отдельных случаях амплитуда поля на некоторой глубине становится существенно больше амплитуды поля на поверхности и соответственно выход вторичного излучения из этого дифференциального слоя значительно увеличивается. Положение пучностей стоячей волны в пленке зависит от угла скольжения, поэтому относительные вклады вторичных излучений с различных глубин в результирующий спектр также изменяются.

На рис. 2 изображена также рассчитанная по формуле Эйри (18) резонансная кривая зеркально отраженной волны  $I_r(x)$  для сравнения ее формы с формой кривой выхода вторичного излучения  $I_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(x)$ . При этом видно, что, в отличие от кривой  $I_r(x)$ , имеющей достаточно необычную в общем случае дисперсионного вида форму, кривая  $I_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(x)$  всегда имеет пик вблизи резонанса  $E_R$ , что делает качественную интерпретацию мессбауэровских спектров конверсионных электронов при скользящих углах падения более простой по сравнению с интерпретацией спектров ПВО. Такая форма линии для выхода вторичного излучения объясняется тем, что  $I_{\text{nucl}}^{\text{sec}}$  пропорциональна резонансному сечению поглощения  $\text{Im}(\chi_{\text{res}})$  (см. (19), (24)).

В то же время форма линии  $I_{\text{nucl}}^{\text{sec}}(x)$  существенно искажена по сравнению с привычной лоренцевской: она имеет значительное асимметричное уширение (до 5—10 естественных ширин). Такое уширение объясняется тем, что хотя глубина проникновения излучение при скользящих углах падения существенно меньше, путь, проходимый им в тонком поверхностном слое, из которого вторичное излучение достигает детектора, значительно возрастает при скользящих углах распространения. Здесь возникает аналогия с толстым поглотителем, для которого линия поглощения уширяется вплоть до ее самоинверсии. Асимметрия линии обусловлена различием степени преломления волны при энергиях падающего излучения, больших и меньших энергии точного резонанса.

Влияние нижележащих слоев на выход вторичного излучения из данного слоя иллюстрируется отличием формы линий на рис. 2, а и б, рассчитанных для одной и той же резонансной пленке на разных подложках. Это отличие объясняется существованием энергетической зависимости зеркального отражения на границе пленка—подложка, что сильно изменяет структуру поля в пленке. В многослойной среде изменение резонансного спектра поля излучения вследствие процессов отражения и преломления на каждой границе может привести к искажению энергетической зависимости выхода вторичного излучения из данного слоя до неузнаваемой формы [20].

Таким образом, для спектров выхода вторичного излучения из многослойной системы при скользящих углах падения нарушается принцип аддитивности парциальных спектров от отдельных слоев: добавление к системе еще одного резонансного слоя не только приведет к появлению новой составляющей в спектре, но и изменит вклад в суммарный спектр от всех остальных слоев. Это обстоятельство было проиллюстрировано в работе [20] конкретным расчетом.

**Выход фотоэлектронов.** Обычно считается, что фон в мессбауэровских спектрах конверсионных электронов влияет только на величину резонансного эффекта и не изменяет форму спектров. Основной вклад в фон обусловлен выходом нерезонансных фотоэлектронов. В случае обогащенных образцов этот вклад достаточно мал, так как сечение резонансного поглощения  $\gamma$ -квантов ядром на два порядка больше сечения поглощения этих квантов атомами. Фотоэлектронный выход становится больше для небогатенных образцов, для тонких резонансных пленок на нерезонансных сильнопоглощающих подлож-

ках, а также в тех случаях, когда резонансный спектр мессбауэровской среды значительно уширен и расщеплен на большое число подспектров, так что "спектральная плотность резонансного взаимодействия" мала.

Вероятность образования фотоэлектронов описывается формулой, похожей на (24), в которой, однако, следует заменить сечение ядерного резонансного поглощения ( $\sim \text{Im}(\chi_{\text{res}})$ ) на сечение фотоэлектронного поглощения ( $\sim \text{Im}(\chi_{\text{el}})$ )

$$P_{\text{el}}^s(z, E_\gamma) = \frac{\omega}{8\pi} w_{\text{el}}^s |E(z, E_\gamma)|^2 \text{Im}(\chi_{\text{el}}). \quad (25)$$

Величина  $w_{\text{el}}^s$  в (25) соответствует числу вторичных частиц вида  $s$ , образующихся на один поглощенный атомом квант. Эта величина отличается от  $w_{\text{пос}}^{\text{сес}}$ , поскольку  $w_{\text{пос}}^{\text{сес}}$  включает вероятность конверсии возбужденного состояния ядра, сопровождающейся вылетом электронов с внутренних оболочек атома. Кроме того, конверсионные электроны могут быть образованы только резонансными ядрами, в то время как фотоэлектроны с различной вероятностью атомами любых элементов. Строго говоря, последнее обстоятельство следует учитывать суммированием в (25) по различным группам атомов с соответствующей величиной  $w_{\text{el}}^s$ . Эта процедура требует разделения  $\chi_{\text{el}}$  на отдельные составляющие, связанные с различными группами атомов. Таким образом, вычисление  $P_{\text{el}}^s$  достаточно сложно и включает много неопределенностей, особенно для многокомпонентных систем. Относительный вклад фото- и конверсионных электронов в измеряемый выход вторичных электронов трудно рассчитать точно.

Добавим, что конверсионные электроны могут быть образованы только резонансным излучением, в то время как фотоэлектроны — любым излучением рентгеновского диапазона, например, излучением, испущенным с отдачей, высокоэнергетическим излучением источника, космическим излучением и т.д. Однако все виды нерезонансного излучения не испытывают взаимодействия с резонансной подсистемой среды и такая постоянная составляющая спектра здесь не рассматривается.

Безусловно, величина  $\chi_{\text{el}}$  не зависит от смещения энергии падающего излучения в пределах мессбауэровского спектра. Поэтому в обычной геометрии выход фотоэлектронов не искажает форму мессбауэровского спектра конверсионных электронов. При скользких углах падения оказывается необходимым учитывать, что величина  $|E|^2$  в (25) существенно зависит от величины падающего излучения  $E_\gamma$  уже начиная от поверхности, где имеет место суперпозиция падающей и зависящей от энергии отраженной волн. Кроме того, энергетическая зависимость  $|E|^2$  меняется с глубиной  $z$  (см. рис. 3). В результате выход фотоэлектронов  $P_{\text{el}}^s$  приобретает резонансную зависимость [21]. Заметим, что хотя  $\chi_{\text{el}}$  всегда скалярная величина, но в анизотропной слоистой среде для описания преобразования поля излучения  $E$  с глубиной следует использовать общий закон изменения тангенциальных составляющих амплитуд поля (22).

Для того, чтобы получить суммарный выход фотоэлектронов из образца, величину  $P_{\text{el}}^s$  (25) следует проинтегрировать с учетом функции выхода  $T(z)$  по всей глубине образца



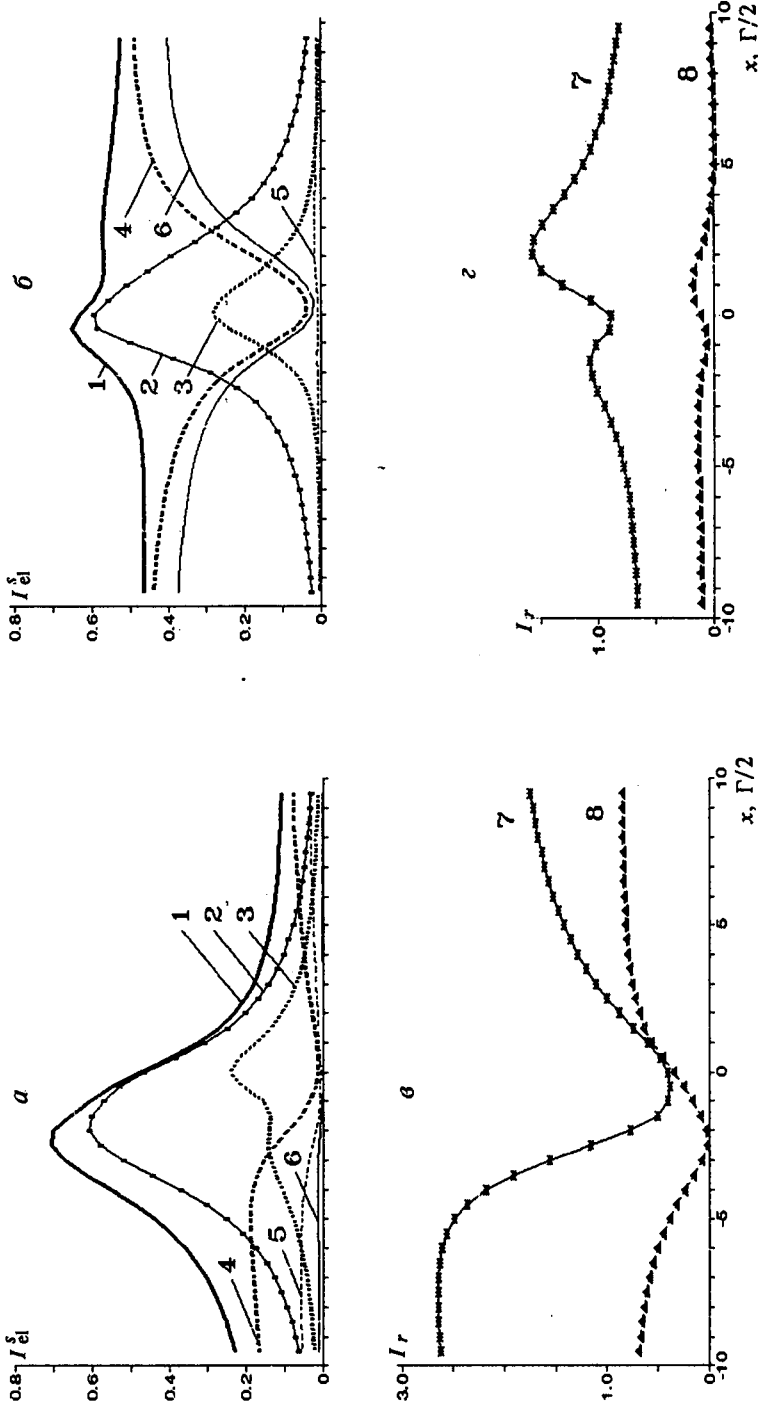


Рис. 4. Расчетные спектры для резонансной пленки при углах скольжения  $\theta = 3$  мрад ( $a, б$ ) и  $\theta = 6$  мрад ( $б, з$ ).  
 $I$  — суммарный выход вторичных электронов из пленки, 2 — выход конверсионных электронов из пленки, 3 — выход конверсионных электронов из поверхностного слоя ( $d = 1$  нм), 4 — выход фотоэлектронов из пленки, 5 — выход фотоэлектронов из поверхностного слоя ( $d = 1$  нм), 6 — выход фотоэлектронов из подложки, 7 — квадрат модуля амплитуды поля на поверхности, 8 — интенсивность зеркально отраженной волны.

$$I_{el}^s(E\gamma) = \int_0^D P_{el}^s(z, E\gamma) T(z) dz. \quad (26)$$

Полная глубина  $D$ , по которой проводится интегрирование в (26), не совпадает с толщиной резонансного слоя  $d$ , которая ограничивает интеграл в (21), поскольку фотоэлектроны могут образовываться и в нерезонансной подложке. Величина  $D$  в зависимости от угла скольжения излучения может задаваться либо глубиной проникновения излучения в среду  $d$ , либо глубиной выхода вторичного излучения  $d_{esc}$  (для углов, больших критического угла ПВО, когда  $d_{esc} < d$ ). Кроме того, следует учитывать, что функция выхода фотоэлектронов  $T(z)$  в (26) отличается от функции выхода конверсионных электронов в (21), поскольку нерезонансные атомы образуют фотоэлектроны других энергетических групп, а в подложке длина свободного пробега электронов отлична от пробега в резонансной среде.

Два предельных случая:  $d < d_{esc}$  и  $d > d_{esc}$  — характеризуются качественно различной формой спектра  $I_{el}(E\gamma)$ . При  $d < d_{esc}$  форма спектра  $I_{el}(E\gamma)$  напоминает перевернутую кривую зеркального отражения (все то излучение, что не отразилось, переходит в регистрируемое вторичное излучение). При  $d > d_{esc}$  часть поглощенного глубокими слоями излучения не дает вклада в регистрируемый спектр выхода вторичного излучения, поэтому резонансная кривая выхода фотоэлектронов близка по форме к энергетической зависимости квадрата амплитуды поля на поверхности  $|E(z=0, E\gamma)|^2$ . Этими причинами объясняется изменение асимметрии "хвостов" спектра выхода вторичных электронов, которая наблюдалась экспериментально в работе [21].

Изменение резонансной зависимости выхода фотоэлектронов с изменением угла скольжения можно проиллюстрировать простыми расчетами, результаты которых представлены на рис. 4. На этом же рисунке для сравнения приведены энергетические зависимости зеркально отраженной волны, квадрата модуля амплитуды поля на поверхности  $|E(z=0, x)|^2$ , а также различные составляющие выхода фотоэлектронов: с поверхностного слоя и из подложки. Расчетные параметры соответствуют рис. 2, б. Функция выхода взята из [16]. Как видно из рис. 4, эти расчеты также подтверждают изменение знака асимметрии "хвостов" резонансного спектра выхода вторичных электронов.

В заключение отметим, что результирующая форма спектра выхода вторичных электронов при скользких углах падения (особенно величина асимметрии "хвостов") зависит от относительных величин выхода фото- и конверсионных электронов и может использоваться для выделения выхода фотоэлектронов из общего фона.

## ВЫВОДЫ

Развитая в этом разделе общая теория формы мессбауэровских спектров ПВО и вторичных излучений при скользящих углах падения излучения представляет собой основу нового метода исследования поверхности: мессбауэровской спектроскопии скользящего падения.

Показано, что хорошо известные методы обработки мессбауэровских спектров, основанные на предположении лоренцевской формы линий и их аддитивных вкладах в результирующий спектр, неприменимы в скользящей геометрии эксперимента. Это обусловлено возникновением в такой геометрии большого числа различных интерференционных эффектов, которые приводят к необычной форме линий в спектрах и нетривиальным особенностям формирования целого спектра из отдельных составляющих.

Мы проиллюстрировали наиболее существенные моменты, приводящие к искажению формы линий в спектрах, на простейших примерах при рассмотрении резонансной пленки на различных подложках для отдельной нерасщепленной резонансной линии. Учитывая сложность формирования спектров скользящего падения, можно заключить, что обработку экспериментальных спектров, полученных в скользящей геометрии, можно проводить только с помощью численного интегрирования.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Иркаев С. М., Андреева М. А., Семенов В. Г. и др. // Научное приборостроение. — 1992. — Т. 2, N 2. — С. 70—84.
2. Bernstein S., Campbell E. // Phys. Rev. — 1963. — V. 132. — P. 1625.
3. Frost J. C., Cowie B. C., Chapman S. N., Marshall J. F. // Appl. Phys. Lett. — 1985. — V. 47, N 6. — P. 581.
4. Andreeva M. A., Kuzmin R. N. // Phys. Stat. Sol. — 1981. — V. 103. — P. 193.
5. Bedzyk M. // Nucl. Instr. and Meth. — 1988. — V. 266. — P. 679.
6. Wagner F. E. // Zeitsch. fur Phys. — 1968. — V. 210. — P. 361.
7. Hannon J. P., Trammel G. T., Mueller M. e. a. // Phys. Rev. Lett. — 1979. — V. 43. — P. 636; Phys. Rev. — 1985. — V. 32. — P. 5068, 5081, 6363, 6374.
8. Борн М., Вольф Е. Принципы оптики. М., 1973. 614 с.
9. Parratt L. G. // Phys. Rev. — 1954. — V. 95. — P. 359.
10. Аззам Р., Башара Н. Эллипсометрия и поляризованный свет. — М., 1981. 583 с.
11. Бордзов Г. Н., Барковский Л. М., Лаврукович В. И. // ЖПС. — 1976. — Т. 25. — С. 526.
12. Андреева М. А., Росете С. // Поверхность. — 1986. — Т. 9. — С. 145.
13. Андреева М. А., Кузьмин Р. Н. Мессбауэровская  $\gamma$ -оптика. — М., 1982. 227 с.
14. Blum M., Kistner O. C. // Phys. Rev. — 1968. — V. 171. — P. 417.
15. Андреева М. А. // ЖТФ. — 1987. — Т. 57. — С. 2009.
16. Liljequist D., Ekdahl T., Baverstam U. // Nucl. Instrum. and Meth. — 1978. — V. 155. — P. 529.
17. Андреева М. А., Борисова С. Ф., Кузьмин Р. Н. // ЖТФ. — 1983. — Т. 53. — С. 1395; Оптика и спектроскопия. — 1984. — Т. 56. — С. 546.

18. *Andreeva M. A., Kuzmin R. N.* // Phys. Stat. Sol. — 1984. — V. 125. — P. 461.
19. *Александров П. А., Афанасьев А. М.* // ФТТ. — 1980. — Т. 22. — С. 2797.
20. *Andreeva M. A., Belozerskii G. N., Irkaev S. M. e. a.* // Phys. Stat. Sol. — 1991. — V. 127. — P. 455.
21. *Андреева М. А., Белозерский Г. Н., Гришин О. В. и др.* // Письма в ЖЭТФ.— 1992. — Т. 55. — С. 62.

Рукопись поступила 1.07.92