

P4-2002-181

**Д. А. Корнеев**, В. К. Игнатович, С. П. Ярадайкин,  
В. И. Боднарчук

**ОТРАЖЕНИЕ НЕЙТРОНОВ ОТ ПОТЕНЦИАЛОВ  
С РАЗМЫТЫМИ ГРАНИЦАМИ**

Направлено в журнал «Поверхность»

# 1 Введение

Данная работа посвящена изучению зеркального отражения нейтронов от сред с потенциалом взаимодействия  $U(x)$ , зависящим от расстояния  $x$  от поверхности в глубину среды. Подобного рода задачи встречаются при исследовании тонких пленок (кинетика роста, процессы диффузии, окисления), проникновения магнитного поля внутрь сверхпроводника, поверхностного магнетизма и т.д. Ступенчатый потенциал с размытым краем адекватно моделирует среду с шероховатой поверхностью в широкой области значений параметров, характеризующих поверхность [1].

При экспериментальном исследовании обычно измеряется коэффициент отражения  $|R(k)|^2$  в зависимости от величины  $k$  — перпендикулярной к поверхности компоненты волнового вектора падающих на образец нейтронов. Экспериментально измеренная функция  $|R(k)|^2$  является основным источником информации о форме потенциала  $U(x)$ . Разрешение современных нейтронных рефлектометров позволяет, используя функцию  $|R(k)|^2$ , решить мезоструктурную задачу (восстановление функции  $U(x)$ ) на интервале значений  $x$  вплоть до нескольких тысяч Å с разрешением порядка десятка Å.

Для сопоставления теории с экспериментом и подгонки параметров мезоструктуры необходимо уметь вычислять амплитуды отражения  $R(k)$  при заданной форме потенциала  $U(x)$ . Теоретический расчет сводится к решению одномерного уравнения Шредингера (УШ) с заданным потенциалом. При произвольном потенциале  $U(x)$  получить решение в аналитическом виде не удастся. Приходится использовать либо рекуррентные численные методы [2], либо приближенные [3-6].

Численный рекуррентный метод основан на разбиении потенциала на большое количество узких ступенек. Он не ограничивает область значений параметров подгоняемого потенциала, но делает подгонку к экспериментальным данным довольно громоздкой и длительной процедурой.

Приближенные методы имеют ограниченную точность и область применения. Например, для полубесконечной среды с гауссовским распределением градиента  $dU/dx$  потенциала с дисперсией  $\sigma^2$  первое борновское приближение приводит к формуле [3]

$$R(k) = R_0(k)e^{-2k^2\sigma^2} \quad (1)$$

( $R_0(k)$  – амплитуда отражения от потенциальной ступеньки), которая справедлива только при  $k^2 \gg 2mU(x)/\hbar^2$ , где  $|R_0(k)| \ll 1$  и одновременно  $k\sigma \ll 1$ .

Первое борновское приближение в методе искаженных плоских волн для шероховатостей с гауссовским распределением высот и экспоненциальной корреляционной функцией приводит к амплитуде зеркального отражения [7]

$$R(k) = R_0(k)e^{-2kk'\sigma^2}, \quad (2)$$

где  $k'$  – нормальная компонента внутри среды в области максимума потенциала. Однако это выражение также справедливо только при  $k\sigma \ll 1$ .

При исследовании тонких пленок часто приходится иметь дело с неодинаковым размытием двух границ раздела. В этом случае для описания отражения от пленки используется формула [6]

$$R(k) = \frac{r_1 + r_2 e^{2ik'd}}{1 + r_1 r_2 e^{2ik'd}}, \quad (3)$$

где  $d$  – толщина пленки,  $k'$  – нормальная компонента волнового вектора внутри нее, а  $r_i = r_{0i} e^{-2k'k_i\sigma_i^2}$ . Причем  $r_{0i}$  – амплитуды отражения от идеальных ступенчатых границ (левой и правой для  $i=1, 2$  соответственно),  $\sigma_i$  – параметры размытия (высота шероховатостей) этих границ и  $k_i$  – нормальная компонента волновых векторов слева и справа от изучаемой пленки. Однако выражение (3) может считаться справедливым при тех же условиях, что и (2), а именно когда  $k'k_i\sigma^2 \ll 1$ .

В данной работе продемонстрирован быстрый точный аналитический метод расчета амплитуды отражения  $R(k)$  для несимметричного потенциального барьера с размытыми границами, справедливый во всей области значений волновых векторов нейтронов и параметров потенциала. С помощью этого метода проведена обработка экспериментальной кривой отражения от тонкой медной пленки на стеклянной подложке. Проведено сравнение эффективности численного рекуррентного и аналитического методов при подгонке экспериментальных данных. Эффективность в данном случае определялась как относительная затрата времени при одной и той же точности расчета.

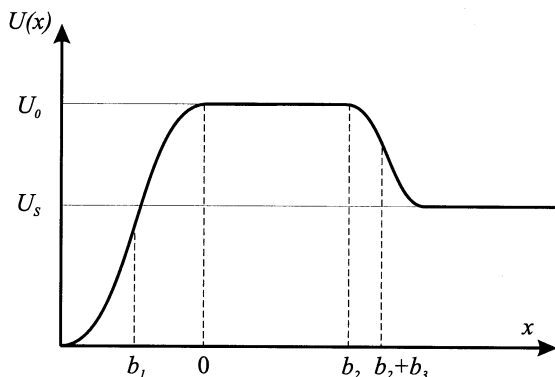


Рис. 1. Потенциальный барьер пленки на подложке с двумя размытыми границами. Потенциал состоит из трех кусочно-непрерывных частей. Размытия описываются выражениями (4), которые сшиваются по непрерывности с прямоугольным барьером в точках 0 и  $b_2$

### 1.1 Идея метода

Идея метода состоит в том [8, 9], что между отдельными частями потенциала, для которых известно аналитическое решение задачи на отражение и прохождение, вводится бесконечно узкая щель с нулевым потенциалом. Амплитуды отражения и пропускания каждой части вычисляются независимо, а затем с помощью методов [10] (они будут продемонстрированы) находятся амплитуды отражения и пропускания для всего составного потенциала.

Одним из потенциалов, на основе которого можно построить модель тонкой пленки на подложке и для которого известно аналитическое решение, является потенциал вида (см. рис. 1)

$$U(x) = \frac{U_0}{1 + e^{-x/h}}, \quad (4)$$

представляющий собой потенциальную ступеньку с размытым краем, степень размытия которого  $h$  связана с общепринятым параметром размытия  $\sigma$  соотношением  $\sigma = \pi h / \sqrt{3}$ .

## 2 Постановка задачи

Рассмотрим потенциал, изображенный на рис. 1, который описывает пленку с отталкивающим потенциалом  $U_0$ , напыленную на подложку с потенциалом  $U_s$ , с размытием внешней и промежуточной границ раздела шириной  $h_1$  и  $h_3$  соответственно. Полный потенциал пленки с размытиями описывается сшивкой трех потенциалов: двух потенциалов вида (4) и прямоугольного потенциала шириной  $b_2$  и высотой  $U_0$ :

$$U(x) = \theta(x < 0)U_0 \frac{1 + e^{b_1/h_1}}{1 + e^{-[x-b_1]/h_1}} + \theta(0 < x < b_2)U_0 + \theta(x > b) \left( U_s + [U_0 - U_s] \frac{1 + e^{-b_3/h_3}}{1 + e^{[x-b_2-b_3]/h_3}} \right) \quad (5)$$

и содержит 7 параметров:  $U_{0,s}$ ,  $h_{1,3}$  и  $b_{1,2,3}$ , где  $U_0$ ,  $U_s$  — высоты потенциальных барьеров пленки и подложки соответственно,  $h_{1,3}$  — параметры размытия левого и правого краев пленки,  $b_2$  — ширина средней части потенциала, а  $b_{1,3}$  — параметры, характеризующие плавность перехода размытого края в среднее плато. Чем больше абсолютное значение этих двух последних параметров, тем меньше скачки первых производных потенциала в точках  $x = 0$  и  $x = b_2$ . Величина  $b_1$  — отрицательна, а  $b_3$  — положительна. Точки  $b_{1,3}$  соответствуют серединам потенциала (4). Для удобства в потенциал введена  $\theta$ -функция, которая равна единице при выполнении неравенства, указанного в аргументе, и нулю в противоположном случае.

Наша задача состоит в том, чтобы найти амплитуду  $R$  отражения от потенциала (5) слева. Для этого нужно найти решение уравнения Шредингера в трех областях и сшить их в точках  $x = 0$  и  $x = b_2$ . При этом волновая функция в асимптотической области  $x \rightarrow -\infty$  должна содержать падающую и отраженную плоские волны, а в области  $x \rightarrow +\infty$  волновая функция должна содержать единственную прошедшую плоскую волну.

Для потенциала (4) решения уравнения Шредингера известны в аналитическом виде [11], поэтому после сшивки мы получаем аналитическое решение на всей оси  $x$ . Мы упростим процедуру, разбив потенциал бесконечно узкими щелями на три части, как показано на рис. 2.

Такое разбиение позволяет найти амплитуды отражения  $r_j$  и пропускания  $t_j$  независимо для каждой части, после чего амплитуда

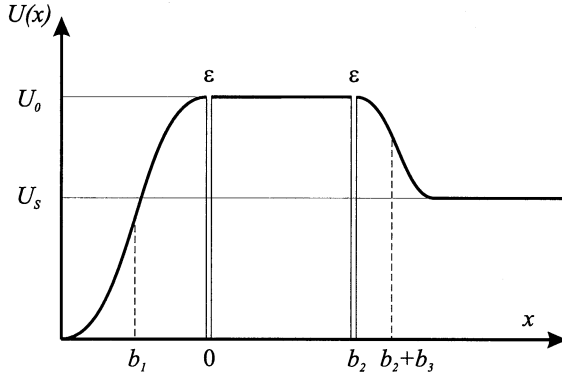


Рис. 2. Потенциал, изображенный на рис. 1, делится двумя бесконечно узкими щелями (шириной  $\epsilon$ ) на три части

отражения от всего потенциала  $R_{123}$  находится чисто алгебраически через амплитуды отдельных частей. Соответствующее выражение было получено в [12]:

$$\vec{R}_{123} = \vec{r}_1 + \overleftarrow{t}_1 \frac{\vec{R}_{23}}{1 - \overleftarrow{r}_1 \vec{R}_{23}} \vec{t}_1, \quad \vec{R}_{23} = r_2 + t_2^2 \frac{\vec{r}_3}{1 - r_2 \vec{r}_3}, \quad (6)$$

где  $\vec{r}_j$ ,  $\overleftarrow{r}_j$  — амплитуды отражения, а  $\vec{t}_j = \overleftarrow{t}_j$  — амплитуды пропускания  $i$ -го барьера слева и справа соответственно, а амплитуды для среднего барьера симметричны и равны

$$r_2 = \rho \frac{1 - e^{2iqd}}{1 - \rho^2 e^{2iqd}}, \quad t_2 = \frac{e^{iqd}(1 - \rho^2)}{1 - \rho^2 e^{2iqd}}, \quad \rho = \frac{k - q}{k + q}, \quad (7)$$

где  $q = \sqrt{k^2 - 2mU_0/\hbar^2}$ ,  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ , а  $E$  — энергия падающего нейтрона.

### 3 Определение парциальных амплитуд левого барьера

Найдем амплитуды отражения и пропускания для первой части потенциала, которая представляет собой кусок потенциала Экарта (4), показанный на рис. 3. Справа от точки  $x = 0$  волновая функция имеет

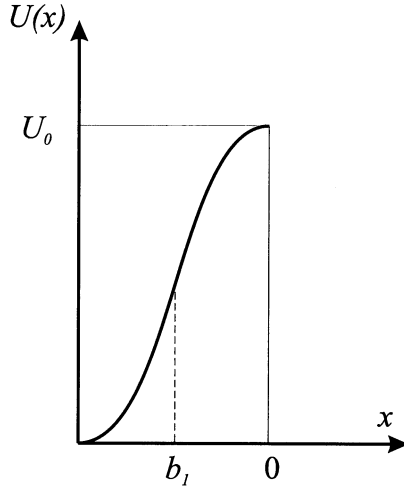


Рис. 3. Левая часть потенциала, изображенного на рис. 2

вид

$$\psi = \theta(x > 0) \begin{cases} \vec{t}_1 e^{ikx}, & \text{если ищутся } \vec{t}_1, \vec{r}_1, \\ e^{-ikx} + \overleftarrow{r}_1 e^{ikx}, & \text{если ищутся } \overleftarrow{r}_1, \overleftarrow{t}_1, \end{cases} \quad (8)$$

слева же волновая функция должна быть вида

$$\psi = \theta(x < 0) \begin{cases} \psi_+(k, x) + \vec{r}_1 \psi_-(k, x), & \text{если ищутся } \vec{r}_1, \vec{t}_1, \\ \overleftarrow{t}_1 \psi_-(k, x), & \text{если ищутся } \overleftarrow{t}_1, \overleftarrow{r}_1, \end{cases} \quad (9)$$

где функции  $\psi_{\pm}(k, x)$  имеют при  $x \rightarrow -\infty$  асимптотики  $e^{\pm ikx}$ . Чтобы определить амплитуды  $r$  и  $t$ , нужно сшить функции (8) и (9) в точке  $x = 0$ . Условия непрерывности функции и производной дают соотношения

$$\psi_+(k, 0) + \vec{r}_1 \psi_-(k, 0) = \vec{t}_1, \quad \psi'_+(k, 0) + \vec{r}_1 \psi'_-(k, 0) = ik \vec{t}_1, \quad (10)$$

$$\overleftarrow{t}_1 \psi_-(k, 0) = 1 + \overleftarrow{r}_1, \quad \overleftarrow{t}_1 \psi'_-(k, 0) = -ik(1 - \overleftarrow{r}_1), \quad (11)$$

где штрих означает дифференцирование по  $x$  в точке  $x = 0$ .

Решения этих уравнений имеют соответственно вид

$$\vec{r}_1 = -\frac{ik\psi_+(k, 0) - \psi'_+(k, 0)}{ik\psi_-(k, 0) - \psi'_-(k, 0)}, \quad (12)$$

$$\vec{t}_1 = \frac{\psi_+(k, 0)\psi'_-(k, 0) - \psi_-(k, 0)\psi'_+(k, 0)}{\psi'_-(k, 0) - ik\psi_-(k, 0)} \equiv \frac{2ik}{ik\psi_-(k, 0) - \psi'_-(k, 0)}, \quad (13)$$

$$\overleftarrow{t}_1 = \frac{ik\psi_-(k, 0) + \psi'_-(k, 0)}{ik\psi_-(k, 0) - \psi'_-(k, 0)}, \quad \overleftarrow{t}_1 = \frac{2ik}{ik\psi_-(k, 0) - \psi'_-(k, 0)}, \quad (14)$$

где в равенстве (13) использовано значение вронскиана  $-2ik$  функций  $\psi_{\pm}(k, x)$ , которое следует из их асимптотического поведения.

Сравнение (13) с (14) демонстрирует известное соотношение  $\overleftarrow{t}_1 = \vec{t}_1$ , которое справедливо для любых потенциальных барьеров, имеющих одинаковые потенциальные уровни с правой и левой стороны. Поэтому в дальнейшем пропускание потенциала, изображенного на рис. 3, мы будем обозначать просто  $t_1$ .

### 3.1 Решение уравнения Шредингера с потенциалом, изображенным на рис. 3

Чтобы найти значения функций  $\psi_{\pm}(k, x)$  и их производных в точке  $x = 0$  при заданном асимптотическом поведении, нужно решить уравнение Шредингера [11]

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + k^2 - \frac{u_0[1 + e^{b_1/h_1}]}{1 + e^{-(x-b_1)/h_1}} \right) \psi(k, x) = 0, \quad (15)$$

где  $u_0 = 2mU_0/\hbar^2$ . Замена переменных  $z = (x - b_1)/h_1$  приводит уравнение (15) к виду

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + k_1^2 - \frac{u_1}{1 + e^{-z}} \right) \psi(k_1, z) = 0, \quad (16)$$

где  $k_1 = kh_1$ ,  $u_1 = h_1^2 u_0 [1 + e^{b_1/h_1}]$ . Дальнейшая замена переменных

$$y = -e^{-z}, \quad \psi(z) = y^{-\mu} w(\mu, y) \quad (17)$$

преобразует (16) в уравнение для  $w$

$$y^2(1-y)w'' + (1-2\mu)y(1-y)w' + [(\mu^2 + k_1^2)(1-y) - u_1]w(\mu, y) = 0. \quad (18)$$

Полагая  $\mu = is$ , где  $s = \pm q_1$ ,  $q_1 = \sqrt{k_1^2 - u_1}$ , получаем

$$y(1-y)w'' + [1 - 2is - (1 - 2is)y]w' + (s^2 - k_1^2)w(s, y) = 0. \quad (19)$$



Решениями этого уравнения являются гипергеометрические функции. Если сравнить уравнение (19) с уравнением для гипергеометрической функции  $F(\alpha, \beta, \gamma, y)$

$$y(1-y)F'' + [\gamma - (1 + \alpha + \beta)y]F' - \alpha\beta F = 0,$$

то легко получим соответствие  $\alpha = i(k_1 - s)$ ,  $\beta = -i(k_1 + s)$ ,  $\gamma = 1 - 2is$  и два решения для разных знаков  $s = \pm q_1$ :

$$w_1(q_1, y) = F_+(y) = F(-i[q_1 - k_1], -i[q_1 + k_1], 1 - 2iq_1, y), \quad (20)$$

$$w_2(q_1, y) = w_1(-q_1, y) = F_-(y) = F(i[q_1 + k_1], i[q_1 - k_1], 1 + 2iq_1, y), \quad (21)$$

которые стремятся к единице при  $y \rightarrow 0$ , или  $z \rightarrow \infty$ .

Гипергеометрическая функция симметрична относительно перестановки параметров  $\alpha$  и  $\beta$ , поэтому

$$F_{\pm}(y) = F(\mp i[q_1 - k_1], \mp i[q_1 + k_1], 1 \mp 2iq_1, y) \quad (22)$$

и функции  $F_{\pm}$  от знака  $k_1$  не зависят. При замене же  $q_1 \rightarrow -q_1$  они переходят друг в друга. При  $k_1^2 > u_1$ , когда  $q_1$  действительно, замена  $q \rightarrow -q$  эквивалентна комплексному сопряжению, т.е.  $F_-(y) = F_+^*(y)$ . При мнимых же  $q_1$  функции  $w_{1,2}(q_1, y)$  и  $F_{\pm}(y)$  — вещественны.

Обеим этим функциям, согласно (17), соответствуют линейно независимые решения уравнения (16), равные

$$\psi^+(k_1, z) = e^{iq_1 z} F_+(y), \quad \psi^-(k_1, z) = e^{-iq_1 z} F_-(y), \quad (23)$$

относительно которых справедливо все то, что было сказано относительно функций  $w_{1,2}(q_1, y)$ , т.е. они не зависят от знака  $k_1$  и при замене  $q_1 \rightarrow -q_1$  переходят друг в друга. Таким образом, при действительных  $q_1$  они комплексно сопряжены относительно друг друга.

Поскольку  $F \rightarrow 1$  при  $z \rightarrow +\infty$ , т.е. при  $y \rightarrow 0$ , то волновые функции  $\psi^{\pm}$  при  $z \rightarrow +\infty$  имеют асимптотики  $\psi^{\pm}(k_1, z) = e^{\pm iq_1 z}$ . При  $z \rightarrow -\infty$  волновые функции  $\psi^{\pm}(k_1, z)$  имеют асимптотики [11]

$$\psi^{\pm}(k_1, z) = C(k_1, \pm q_1) e^{ik_1 z} + C(-k_1, \pm q_1) e^{-ik_1 z}, \quad (24)$$

которые при подстановке  $z = x/h_1 + z_1$ , где  $z_1 = -b_1/h_1 = |b_1|/h_1$ , представляются в виде

$$\psi^{\pm}(k_1, z) = C(k_1, \pm q_1) e^{ik_1 z_1} e^{ikx} + C(-k_1, \pm q_1) e^{-ik_1 z_1} e^{-ikx}. \quad (25)$$

Здесь

$$C(k, q) = \frac{\Gamma(-2ik)\Gamma(1-2iq)}{\Gamma[-i(k+q)]\Gamma[1-i(k+q)]}, \quad (26)$$

$\Gamma(x)$  — функция Эйлера и  $k_1 = kh_1$ . При вещественных  $q$  имеем  $C(-k, -q) = C^*(k, q)$ , а при мнимых  $q$  имеем соотношение  $C(-k, q) = C^*(k, q)$ .

Из функции  $\psi^\pm(k_1, z)$  можно построить волновые функции  $\psi_\pm(k, x)$ , которые при  $x \rightarrow -\infty$  имеют асимптотики  $e^{\pm ikx}$ . Для этого представим (23) с учетом (25) в виде

$$\psi^\pm(k_1, z) = C(k_1, \pm q_1) e^{ik_1 z_1} \psi_+(k, x) + C(-k_1, \pm q_1) e^{-ik_1 z_1} \psi_-(k, x) \quad (27)$$

и разрешим относительно  $\psi_\pm(k, x)$ . В результате получим

$$\psi_\pm(k, x) = \pm e^{\mp ik_1 z_1} \frac{C(\mp k_1, -q_1) \psi^+(k_1, z) - C(\mp k_1, q_1) \psi^-(k_1, z)}{C(k_1, q_1) C(-k_1, -q_1) - C(k_1, -q_1) C(-k_1, q_1)}. \quad (28)$$

Функции  $\psi_\pm(k, x)$  не зависят от знака  $q_1$ , т.к. при замене  $q_1 \rightarrow -q_1$  они переходят сами в себя. При замене же  $k_1 \rightarrow -k_1$  и при комплексном сопряжении они переходят друг в друга как при действительных, так и при мнимых  $q_1$ .

Знаменатель выражения (28) пропорционален вронскиану

$$W = \psi^{+'}(k_1, z) \psi^-(k_1, z) - \psi^{-'}(k_1, z) \psi^+(k_1, z)$$

функций  $\psi^\pm(k_1, z)$ , где  $\psi^{\pm'}$  обозначает дифференцирование по  $z$ . При  $z \rightarrow \pm\infty$  вронскиан равен соответственно

$$W = \begin{cases} 2iq_1, & z \rightarrow +\infty, \\ 2ik_1 [C(k_1, q_1) C(-k_1, -q_1) - C(k_1, -q_1) C(-k_1, q_1)], & z \rightarrow -\infty, \end{cases}$$

откуда следует

$$[C(k_1, q_1) C(-k_1, -q_1) - C(k_1, -q_1) C(-k_1, q_1)] = \frac{W}{2ik_1} = \frac{q_1}{k_1} \quad (29)$$

и

$$\psi_\pm(k, x) = \pm e^{\mp ik_1 z_1} \frac{k_1}{q_1} [C(\mp k_1, -q_1) \psi^+(k_1, z) - C(\mp k_1, q_1) \psi^-(k_1, z)]. \quad (30)$$

### 3.2 Расчет $\vec{r}'_1$ и $\vec{t}'_1$

Для вычисления производных воспользуемся выражением (30). В результате получаем

$$\left. \frac{d\psi_{\pm}(k, x)}{dx} \right|_{x=0} = \pm e^{\mp ik_1 z_1} \frac{k_1}{h_1 q_1} [C(\mp k_1, -q_1) \psi_z^{+'}(k_1, z_1) - C(\mp k_1, q_1) \psi_z^{-'}(k_1, z_1)], \quad (31)$$

где  $\psi_z^{\pm'}$  — производная по  $z$  в точке  $z_1$ . Эта производная, согласно (23), равна

$$\psi_z^{\pm'}(k_1, z_1) = e^{\pm iq_1 z_1} [\pm iq_1 F_{\pm}(y_1) - y_1 F'_{\pm}(y_1)], \quad (32)$$

где  $F'(y_1)$  — производная гипергеометрической функции по  $y$  в точке  $y = y_1 = -e^{-z_1}$ . Производная от  $F$  вычисляется в соответствии с правилом

$$F'(\alpha, \beta, \gamma, y) = \frac{\alpha\beta}{\gamma} F(1 + \alpha, 1 + \beta, 1 + \gamma, y).$$

Соответственно,

$$F'_{\pm}(y) = \frac{u_1}{1 \mp 2iq_1} F(1 \mp i[q_1 - k_1], 1 \mp i[q_1 + k_1], 2 \mp 2iq_1, y).$$

Подставив (32) в (31) и учитывая (30), а также соотношение  $k = k_1/h_1$ , получим выражение для  $ik\psi_{\pm}(k, 0) - \psi'_{\pm}(k, 0)$ :

$$\begin{aligned} ik\psi_{\pm}(k, 0) - \psi'_{\pm}(k, 0) = & \pm e^{\mp ik_1 z_1} \frac{k_1}{h_1 q_1} \{C(\mp k_1, -q_1) [ik_1 \psi^+(k_1, z_1) - \psi'^+(k_1, z_1)] - \\ & C(\mp k_1, q_1) [ik_1 \psi^-(k_1, z_1) - \psi'^-(k_1, z_1)]\} = \\ & \mp e^{\mp ik_1 z_1} \frac{k_1}{h_1 q_1} \{C(\mp k_1, -q_1) e^{iq_1 z_1} [i(q_1 - k_1) F_+(y_1) - y_1 F'_+(y_1)] + \\ & C(\mp k_1, q_1) e^{-iq_1 z_1} [i(k_1 + q_1) F_-(y_1) + y_1 F'_-(y_1)]\}. \end{aligned} \quad (33)$$

Подставив (33) в (12) и (13), получим

$$\vec{r}'_1(k) = e^{-2ik_1 z_1} \frac{N_{11}(k_1, q_1)}{D_1(k_1, q_1)}, \quad (34)$$

$$\vec{t}'_1(k) = e^{-i[k_1 - q_1]z_1} \frac{2q_1}{D_1(k_1, q_1)}, \quad (35)$$

где

$$N_{l1}(k_1, q_1) = C(-k_1, q_1)[(k_1 + q_1)F_- - iy_1 F'_-] - e^{2iq_1 z_1} C(-k_1, -q_1)[(k_1 - q_1)F_+ - iy_1 F'_+], \quad (36)$$

$$D_1(k_1, q_1) = C(k_1, q_1)[(k_1 + q_1)F_- - iy_1 F'_-] - e^{2iq_1 z_1} C(k_1, -q_1)[(k_1 - q_1)F_+ - iy_1 F'_+]. \quad (37)$$

Выражение (34) можно также представить в виде

$$\vec{r}_1 = e^{-2ik_1 z_1} \frac{\vec{R}_\infty(k_1, q_1)[1 - A(k_1, q_1)e^{2iq_1 z_1}]}{1 - \vec{R}_\infty(k_1, q_1)\vec{R}_\infty(-k_1, -q_1)A(k_1, q_1)e^{2iq_1 z_1}}, \quad (38)$$

где введены обозначения

$$\vec{R}_\infty(k_1, q_1) = \frac{C(-k_1, q_1)}{C(k_1, q_1)}, \quad (39)$$

$$A(k_1, q_1) = \frac{C(-k_1, -q_1)}{C(-k_1, q_1)} \cdot \frac{(k_1 - q_1)F_+ - iy_1 F'_+}{(k_1 + q_1)F_- - iy_1 F'_-}. \quad (40)$$

При  $h_1 \ll b_1$  имеем  $z_1 \gg 1$  и  $y_1 \ll 1$ . При этом мы можем принять  $y_1 = 0$  и  $F_\pm \approx 1$ . В результате выражение (40) приводится к виду

$$A(k_1, q_1) = \frac{C(-k_1, -q_1)}{C(-k_1, q_1)} \frac{k_1 - q_1}{k_1 + q_1}. \quad (41)$$

При невысоких энергиях  $k^2 \approx 1$  и малых шероховатостях  $h_1 \approx 0$  имеем  $k_1 \ll 1$ ,  $q_1 \ll 1$  и можем воспользоваться асимптотическим представлением гамма-функции [13], справедливым при всех  $z \ll 1$ :

$$\Gamma(1 - iz) = \frac{1}{1 - iz} e^{-iz[1-\gamma] - [\zeta(2)-1]z^2/2},$$

где  $\gamma$  — постоянная Эйлера,  $\zeta(\mu)$  —  $\zeta$ -функция Римана, причем  $\zeta(2) \equiv \zeta = \pi^2/6$ . Соответственно, функции  $C(\pm k, \pm q)$  аппроксимируются выражениями

$$C(k, q) = \frac{k+q}{2k} e^{-\zeta(2)(k-q)^2} = C(-k, -q),$$

$$C(-k, q) = \frac{k-q}{2k} e^{-\zeta(2)(k+q)^2} = C(k, -q).$$

В результате мы можем получить следующие приближенные выражения для (39) и (41):

$$\vec{R}_\infty(k_1, q_1) = \frac{C(-k_1, q_1)}{C(k_1, q_1)} = \frac{k_1 - q_1}{k_1 + q_1} e^{-4k_1 q_1 \zeta}, \quad (42)$$

$$A(k_1, q_1) = \frac{C(-k_1, -q_1)}{C(-k_1, q_1)} \cdot \frac{(k_1 - q_1)F_+ - iy_1 F'_+}{(k_1 + q_1)F_- - iy_1 F'_-} = e^{4k_1 q_1 \zeta}. \quad (43)$$

Подстановка в (39), (41) и далее в (38) и (35) приводит последние выражения к виду

$$\vec{r}_1 = e^{-2ik|b_1|} \rho \frac{e^{-4k_1 q_1 \zeta} - e^{2iq|b_1|}}{1 - \rho^2 e^{-4k_1 q_1 \zeta} e^{2iq|b_1|}}, \quad (44)$$

$$\vec{t}_1(k) = e^{-ik|b_1|} \frac{e^{iq|b_1|}(1 - \rho^2)e^{\zeta(k_1 - q_1)^2}}{1 - \rho^2 e^{-4k_1 q_1 \zeta} e^{2iq|b_1|}}, \quad (45)$$

что согласуется с (3), если учесть, что в левом потенциале размыта только левая граница.

При  $h_1 = 0$  получаем

$$\vec{r}(k) = e^{-2ik|b|} \rho \frac{1 - e^{2iq|b|}}{1 - \rho^2 e^{2iq|b|}}, \quad \vec{t}_1(k) = e^{-ik|b|} \frac{e^{iq|b|}(1 - \rho^2)}{1 - \rho^2 e^{2iq|b|}}, \quad (46)$$

где  $\rho$  указано в (7) и для простоты мы всюду опустили индекс 1 у параметра  $b$ . Полученное выражение, как и следовало ожидать, соответствует отражению от прямоугольного барьера шириной  $b$ , сдвинутого влево на величину  $|b|$ .

Представляет интерес также случай таких энергий, при которых неравенства  $k_i, q_i \ll 1$  не выполняются, а выполняются противоположные неравенства, но все же  $k - q \ll 1$ . Тогда решение можно считать квазиклассическим и отражение от размытой границы убывает пропорционально  $e^{-2\pi q_1}$ :

$$\vec{r}_1 \approx -e^{-2i(k-q)|b_1|} \rho = e^{-2i(k-q)|b_1|} \frac{q - k}{q + k}, \quad (47)$$

т.е. целиком определяется скачком потенциала при  $x = 0$ .

### 3.3 Расчет $\overleftarrow{r}_1$

Для амплитуды отражения (14), учитывая соотношения (28), сразу получаем

$$\overleftarrow{r}_1(k) = N_{r1}(k_1, q_1)/D_1(k_1, q_1), \quad (48)$$

где

$$N_{r1}(k_1, q_1) = C(k_1, q_1)[(k_1 - q_1)F_- + iy_1 F'_-] - e^{2iq_1 z_1} C(k_1, -q_1)[(k_1 + q_1)F_+ + iy_1 F'_+], \quad (49)$$

а  $D_1(k_1, q_1)$  указано в (37). Сравнивая с (34), видим, что  $\overleftarrow{r}_1 = e^{2i\phi} \overrightarrow{r}_1$  с вещественным  $\phi$ , где

$$e^{2i\phi} = e^{2ik_1 z_1} N_{r1}(k_1, q_1) / N_{l1}(k_1, q_1). \quad (50)$$

При малых  $h_1$ , таких, что  $h_1 \ll |b_1|$  и  $h_1 \ll 1$ , амплитуда (48) аппроксимируется выражением

$$\overleftarrow{r}_1(k) = \rho \frac{1 - e^{-4k_1 q_1 \zeta} e^{2iq|b_1|}}{1 - \rho^2 e^{-4k_1 q_1 \zeta} e^{2iq|b_1|}}, \quad (51)$$

которое при  $h_1 = 0$  переходит в такое же, как и  $\overrightarrow{r}(k)$  в (46), но без множителя  $e^{-2ik|b_1|}$ .

При  $k_i, q_i \gg 1$ , но  $k_i - q_i \ll 1$  получаем

$$\overleftarrow{r}_1(k) \approx \rho = \frac{k - q}{k + q}, \quad (52)$$

т.е. отражение только от скачка.

### 3.4 Амплитуды отражения и пропускания правого барьера

Рассмотрим теперь правый барьер, который представляет собой третий потенциал на рис. 2. Для удобства выделим его отдельно и, зеркально отразив от точки  $x = b_2$ , приведем к виду, изображенному на рис. 4. Нам нужна только амплитуда отражения от преобразованного потенциала справа, поэтому мы должны воспользоваться волновой функцией, которая аналогично (8) справа от точки  $x = 0$  имеет вид

$$e^{-ikx} + \overleftarrow{t}_3 e^{ikx}, \quad (53)$$

а слева представляется в виде

$$\overleftarrow{t}_3 \psi_-(k_s, x), \quad (54)$$

причем функция  $\psi_-(k_s, x)$  имеет при  $x \rightarrow -\infty$  асимптотику  $e^{-ik_s x}$ , где  $k_s = \sqrt{k^2 - 2mU_s/\hbar^2}$  — значение энергии нейтрона внутри подложки.

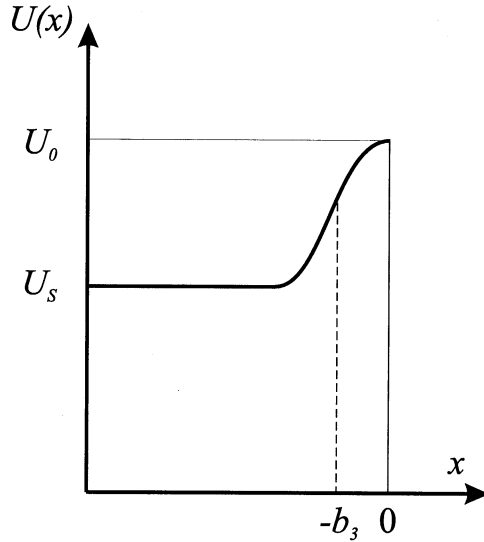


Рис. 4. Правая часть потенциала, изображенного на рис. 2, приведенная к виду, аналогичному потенциалу, показанному на рис. 3

Чтобы определить амплитуды  $r$  и  $t$ , нужношить функции (53) и (54) в точке  $x = 0$ . Условия непрерывности функции и производной дают соотношения

$$\overleftarrow{t}_3 \psi_-(k_s, 0) = 1 + \overleftarrow{r}_3, \quad \overleftarrow{t}_3 \psi'_-(k_s, 0) = -ik(1 - \overleftarrow{r}_3), \quad (55)$$

где штрих означает дифференцирование по  $x$  в точке  $x = 0$ .

Решения этих уравнений имеют вид

$$\overleftarrow{r}_3 = \frac{ik\psi_-(k_s, 0) + \psi'_-(k_s, 0)}{ik\psi_-(k_s, 0) - \psi'_-(k_s, 0)}, \quad \overleftarrow{t}_1 = \frac{2ik}{ik\psi_-(k_s, 0) - \psi'_-(k_s, 0)}. \quad (56)$$

Чтобы найти значения функции  $\psi_-(k_s, x)$  и ее производной в точке  $x = 0$  при заданном асимптотическом поведении, нужно решить уравнение Шредингера [11], которое при замене переменной  $z = (x + b_3)/h_3$  приводится к виду

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + k_4^2 - \frac{u_3}{1 + e^{-z}} \right) \psi(k_4, z) = 0, \quad (57)$$

где  $k_4 = h_3 k_s$ ,  $u_s = 2mU_s/\hbar^2$ ,  $k_s^2 = k^2 - u_s$  и  $u_3 = (u_0 - u_s)h_3^2[1 + e^{-b_3/h_3}]$ .

Искомая волновая функция слева от точки  $x = 0$  в потенциале рис. 4 равна

$$\psi_-(k_s, x) = -e^{ik_4 z_3} \frac{k_4}{q_3} [C(k_4, -q_3)\psi^+(k_4, z) - C(k_4, q_3)\psi^-(k_4, z)]. \quad (58)$$

Используя соотношения (31), получаем

$$\begin{aligned} ik\psi_-(k_s, 0) \pm \psi'_-(k_s, 0) = & \\ & -e^{ik_4 z_3} \frac{k_4}{h_3 q_3} \{C(k_4, -q_3)[ik_3\psi^+(k_4, z_3) \pm \psi'^+(k_4, z_3)] - \\ & C(k_4, q_3)[ik_3\psi^-(k_4, z_3) \pm \psi'^-(k_4, z_3)]\} = \\ & -e^{ik_4 z_3} \frac{k_4}{h_3 q_3} \{C(k_4, -q_3)e^{iq_3 z_3}[i(k_3 \pm q_3)\tilde{F}_+(y_3) \mp y_3\tilde{F}'_+(y_3)] - \\ & C(k_4, q_3)e^{-iq_3 z_3}[i(k_3 \mp q_3)\tilde{F}_-(y_3) \mp y_3\tilde{F}'_-(y_3)]\}. \end{aligned} \quad (59)$$

Подставив (59) в (56), получим  $\overleftarrow{r}_3(k) = N_{r3}(k_4, q_3)/D_3(k_4, q_3)$ , где соответственно

$$\begin{aligned} N_{r3}(k_4, q_3) = C(k_4, q_3)[(k_3 - q_3)\tilde{F}_- + iy_3\tilde{F}'_-] - \\ e^{2iq_3 z_3} C(k_4, -q_3)[(k_3 + q_3)\tilde{F}_+ + iy_3\tilde{F}'_+], \end{aligned} \quad (60)$$

$$\begin{aligned} D_3(k_4, q_3) = C(k_4, q_3)[(k_3 + q_3)\tilde{F}_- - iy_3\tilde{F}'_-] \\ - e^{2iq_3 z_3} C(k_4, -q_3)[(k_3 - q_3)\tilde{F}_+ - iy_3\tilde{F}'_+], \end{aligned} \quad (61)$$

при этом  $k_3 = kh_3$ ,  $q_3 = \sqrt{k_4^2 - u_3}$ ,  $z_3 = b_3/h_3$ ,  $y_3 = -e^{-z_3}$  и

$$\tilde{F}_\pm = F_\pm(\mp i[q_3 - k_4], \mp i[q_3 + k_4], 1 \mp 2iq_3, y_3), \quad (62)$$

$$\tilde{F}'_\pm = \frac{u_3}{1 \mp 2iq_3} F_\pm(1 \mp i[q_3 - k_4], 1 \mp i[q_3 + k_4], 2 \mp 2iq_3, y_3). \quad (63)$$

При  $y_3 \approx 0$  и  $k_i, q_i \ll 1$  получаем асимптотическое выражение

$$\overleftarrow{r}_3(k) = \frac{\rho - e^{-4k_s q \sigma_3^2} e^{2iq|b_3|} \rho_s}{1 - \rho \rho_s e^{-4k_s q \sigma_3^2} e^{2iq|b_3|}}, \quad \sigma_3 = h_3 \frac{\pi}{\sqrt{3}}, \quad \rho_s = \frac{k_s - q}{k_s + q}, \quad (64)$$

что согласуется с (3) с учетом того, что в этом случае имеется только одна размытая граница у подложки.



### 3.5 Сводка формул для расчета отражения от потенциала, показанного на рис. 1

Окончательные формулы имеют следующий вид:  $R = |\vec{R}_{123}|^2$ ,

$$\vec{R}_{123} = \frac{\vec{r}_1 + (t_1^2 - \overleftarrow{r}_1 \overleftarrow{r}_1) \vec{R}_{23}}{1 - \overleftarrow{r}_1 \vec{R}_{23}} t_1, \quad \vec{R}_{23} = \frac{r_2 + (t_2^2 - r_2^2) \vec{r}_3}{1 - r_2 \vec{r}_3}, \quad (65)$$

$$r_2 = \rho \frac{1 - e^{2iqb_2}}{1 - \rho^2 e^{2iqb_2}}, \quad t_2 = \frac{e^{iqb_2}(1 - \rho^2)}{1 - \rho^2 e^{2iqb_2}}, \quad (66)$$

$$q = \sqrt{k^2 - u_0}, \quad u_0 = 2mU_0/\hbar^2, \quad k^2 = 2mE/\hbar^2, \quad (67)$$

$$\vec{r}_1(k) = e^{-2ik_1 z_1} \frac{N_{l1}(k_1, q_1)}{D_1(k_1, q_1)}, \quad \overleftarrow{r}_1(k) = \frac{N_{r1}(k_1, q_1)}{D_1(k_1, q_1)}, \quad (68)$$

$$t_1(k) = e^{-i[k_1 - q_1]z_1} \frac{2q_1}{D_1(k_1, q_1)}, \quad \vec{r}_3(k) = \frac{N_{r3}(k_4, q_3)}{D_3(k_4, q_3)}, \quad (69)$$

$$N_{l1}(k_1, q_1) = C(-k_1, q_1)[(k_1 + q_1)F_- - iy_1 F'_-] - e^{2iq_1 z_1} C(-k_1, -q_1)[(k_1 - q_1)F_+ - iy_1 F'_+], \quad (70)$$

$$N_{r1}(k_1, q_1) = C(k_1, q_1)[(k_1 - q_1)F_- + iy_1 F'_-] - e^{2iq_1 z_1} C(k_1, -q_1)[(k_1 + q_1)F_+ + iy_1 F'_+], \quad (71)$$

$$D_1(k_1, q_1) = C(k_1, q_1)[(k_1 + q_1)F_- - iy_1 F'_-] - e^{2iq_1 z_1} C(k_1, -q_1)[(k_1 - q_1)F_+ - iy_1 F'_+], \quad (72)$$

$$C(k, q) = \frac{\Gamma(-2ik)\Gamma(1-2iq)}{\Gamma[-i(k+q)]\Gamma[1-i(k+q)]} = \frac{k+q}{2k} \frac{\Gamma(1-2ik)\Gamma(1-2iq)}{\Gamma^2[1-i(k+q)]}, \quad (73)$$

$$F_{\pm} = F(\mp i[q_1 - k_1], \mp i[q_1 + k_1], 1 \mp 2iq_1, y_1), \quad (74)$$

$$F'_{\pm} = \frac{u_1}{1 \mp 2iq_1} F(1 \mp i[q_1 - k_1], 1 \mp i[q_1 - k_1], 2 \mp 2iq_1, y_1), \quad (75)$$

$$N_{r3}(k_4, q_3) = C(k_4, q_3)[(k_3 - q_3)\tilde{F}'_- + iy_3 \tilde{F}'_-] - e^{2iq_3 z_3} C(k_4, -q_3)[(k_3 + q_3)\tilde{F}'_+ + iy_3 \tilde{F}'_+], \quad (76)$$

$$D_3(k_4, q_3) = C(k_4, q_3)[(k_3 + q_3)\tilde{F}'_- - iy_3 \tilde{F}'_-] - e^{2iq_3 z_3} C(k_4, -q_3)[(k_3 - q_3)\tilde{F}'_+ - iy_3 \tilde{F}'_+], \quad (77)$$

$$\tilde{F}_{\pm} = F(\mp i[q_3 - k_4], \mp i[q_3 + k_4], 1 \mp 2iq_3, y_3), \quad (78)$$

$$\tilde{F}'_{\pm} = \frac{u_3}{1 \mp 2iq_3} F_{\pm}(1 \mp i[q_3 - k_4], 1 \mp i[q_3 + k_4], 2 \mp 2iq_3, y_3), \quad (79)$$

$$z_{1,3} = \frac{|b_{1,3}|}{h_{1,3}}, y_{1,3} = -e^{-z_{1,3}}, \quad (80)$$

$$k_{1,3} = kh_{1,3}, k_4 = k_s h_3, k_s = \sqrt{k^2 - u_s}, u_s = 2mU_s/\hbar^2, \quad (81)$$

$$q_1 = \sqrt{k_1^2 - u_1}, q_3 = \sqrt{k_4^2 - u_3}, \quad (82)$$

$$u_1 = u_0 h_1^2 (1 - y_1), \quad u_3 = (u_0 - u_s) h_3^2 (1 - y_3). \quad (83)$$

#### 4 Описание эксперимента и сравнение результатов обработки экспериментальной кривой $R(k)$ в различных моделях

Анализ разработанного подхода и сравнение его с численным рекуррентным методом расчета [2, 14] производились на основе экспериментально измеренной кривой отражения нейтронов  $|R(k)|^2$  от медной пленки толщиной 1800 Å, напыленной на стеклянную подложку (образец любезно предоставлен группой А.Щебетова, ПИЯФ). Измерения выполнялись на времяпролетном рефлектометре «Рефлекс», расположенном на 9-м канале импульсного реактора ИБР-2, ОИЯИ (г. Дубна). Для определения параметров пленки экспериментально полученная кривая отражения фитировалась к теоретической с помощью метода наименьших квадратов. При расчете теоретической кривой численным рекуррентным методом находились 5 параметров: плотности длин рассеяния подложки и пленки, среднеквадратичные шероховатости подложки и пленки и толщина пленки, а при расчете разработанным здесь аналитическим методом находились еще два параметра  $b_1$  и  $b_3$ , определяющие плавность сшивания потенциала пленки с шероховатостями на границах раздела.

Экспериментальная кривая отражения  $|R(k)|^2$  и результаты ее подгонки обоими методами показаны на рис. 5. Результаты подгонки оказываются настолько близкими друг другу, что расчетные кривые на рис. 5 визуально неразличимы. Параметры структуры (табл. 1), определенные обоими методами, также практически совпадают. Существенное различие состоит лишь во времени вычислений.

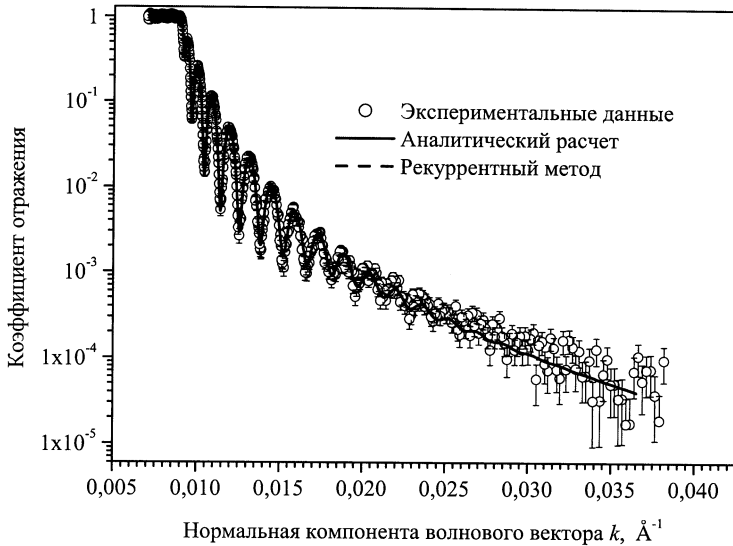


Рис. 5. Экспериментальная рефлектограмма и ее подгонка с помощью аналитического и численного рекуррентного методов. Параметры подгонки указаны в таблице 1. Результаты подгонки на глаз неразличимы

Время, требуемое для расчета аналитическим методом, несмотря на подгонку большего числа параметров, оказывается в 7 раз меньше времени, затрачиваемого для расчета по рекуррентной формуле. Это представляется существенным преимуществом аналитического метода.

**Таблица 1**

	Аналитический метод	Рекуррентный метод
$\sigma_1$	$68,84 \pm 0,22 \text{ \AA}$	$68,72 \pm 0,22 \text{ \AA}$
$\sigma_3$	$10,82 \pm 0,27 \text{ \AA}$	$10,26 \pm 0,26 \text{ \AA}$
$Nb_1$	$6,43 \cdot 10^{-6} \pm 7,06 \cdot 10^{-10} \text{ \AA}^{-2}$	$6,43 \cdot 10^{-6} \pm 7,06 \cdot 10^{-10} \text{ \AA}^{-2}$
$Nb_s$	$3,02 \cdot 10^{-6} \pm 9,34 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}^{-2}$	$3,03 \cdot 10^{-6} \pm 9,31 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}^{-2}$
$b_1$	$-396,28 \pm 0,32 \text{ \AA}$	$1799,55 \pm 0,32 \text{ \AA}$
$b_2$	$1000,01 \pm 0,32 \text{ \AA}$	
$b_3$	$404,00 \pm 0,10 \text{ \AA}$	
$\chi^2$	1,241	1,243

## 5 Примеры расчета коэффициента отражения точным аналитическим методом и приближенным методом с помощью фактора Дебая–Уоллера

При обработке экспериментов по рефлектометрии пленки на подложке, а также мультислойных систем неоднородность нейтронно-оптического потенциала на границах раздела сред (вакуум–пленка, пленка–пленка, пленка–подложка) учитывают с помощью умножения коэффициента отражения, рассчитанного для системы с идеальными границами, на фактор Дебая–Уоллера (ДУ) [6]. Например, коэффициент отражения от пленки ширины  $d$  с потенциалом  $U_0$  на подложке с потенциалом  $U_s$  при размытиях  $\sigma_{1,3}$  на двух границах раздела представляется в виде [15]

$$R = \left| \frac{r_{01} + r_{1s} e^{2ik'd}}{1 + r_{01} r_{1s} e^{2ik'd}} \right|^2, \quad (84)$$

где

$$r_{01} = W_{01} \frac{k - k'}{k + k'}, \quad r_{1s} = W_{1s} \frac{k' - k_s}{k' + k_s}, \quad (85)$$

$$k' = \sqrt{k^2 - 2mU_0/\hbar^2}, \quad k_s = \sqrt{k^2 - 2mU_s/\hbar^2}, \quad (86)$$

а

$$W_{ij} = e^{-0.5k_i k_j \sigma_i^2} \quad (87)$$

— фактор ДУ, в котором  $k_i$  — нормальная компонента волнового вектора внутри среды с потенциалом  $U_i$ . Приближенный подход справедлив, когда шероховатости малы, и не справедлив, когда шероховатости порядка или больше приведенной критической длины волны  $\lambda_c/2\pi$  пленки или подложки.

На рис. 6 представлена зависимость коэффициентов отражения от  $k$  при заданных значениях  $Nb_0 = 6,577 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$ ,  $Nb_s = 2,073 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$ ,  $b_1 = -300 \text{ \AA}$ ,  $b_2 = 1000 \text{ \AA}$ ,  $b_3 = 300 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_1 = 50 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_3 = 20 \text{ \AA}$ . Сплошная кривая отвечает коэффициенту отражения, полученному с помощью формул (84)–(86) и факторов ДУ (87), при этом толщина пленки считалась равной  $d = -b_1 + b_2 + b_3$ , а кривая из кружков — точному аналитическому расчету. Видно, что две кривые сильно различаются.

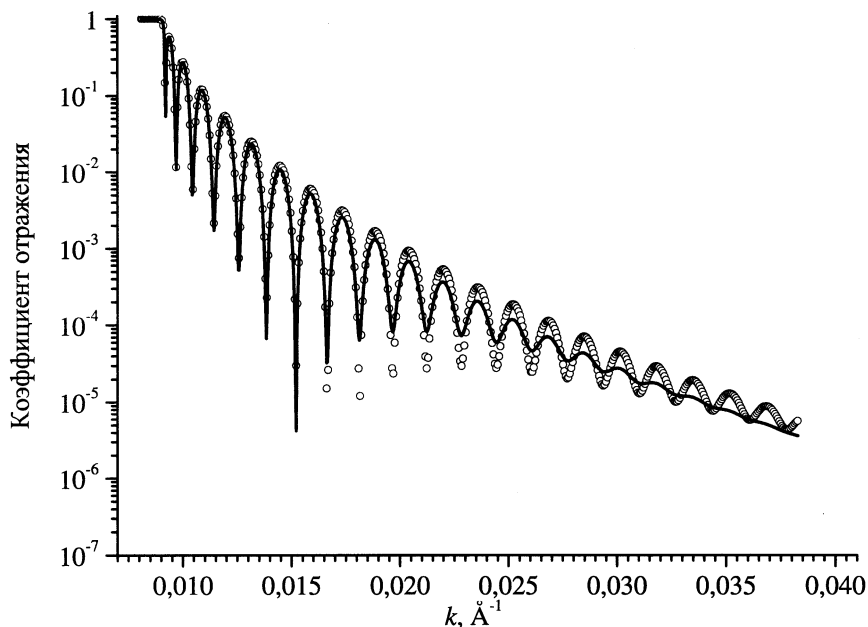


Рис. 6. Пример расчета коэффициента отражения от сглаженного потенциального барьера аналитическим методом (толстая линия), демонстрирующий невозможность подгонки с помощью умножения коэффициента отражения от барьера с идеальными границами на фактор ДУ. Параметры расчетных кривых указаны в тексте

## 6 Заключение

Создана и апробирована на конкретных моделях программа расчета коэффициента отражения от несимметричного барьера, построенного на основе формул для гиперболического тангенса и моделирующего нейтронно-оптический потенциал тонкой пленки на подложке с размытыми границами. Показано, что описание размытия с помощью фактора ДУ, как это делается для шероховатых поверхностей, приводит к неправильному поведению амплитуды отражения.

Предложенный метод достаточно эффективен. При заданной относительной точности расчета скорость расчета коэффициента отражения с использованием аналитического решения в  $\approx 7$  раз выше скорости счета по аналогичной программе рекуррентного типа.

Работа выполнена при поддержке Министерства промышленности, науки и технологий Российской Федерации (госконтракт №40.012.1.1148).

## Литература

- [1] Л.А.Смирнов, Т.Д. Сотникова, Б.С.Анюхин и Б.З.Тайбин, Оптика и спектроскопия, том 46, вып. 3, стр. 593 (1979).
- [2] L.G. Parratt, Phys. Rev. 95, 359 (1954).
- [3] P.S.Pershan and J.Als-Nielsen, Phys. Rev. Lett. 52, 759 (1984).
- [4] L.Névoit and P.Croce, Rev. Phys. Appl. 15, 761 (1980).
- [5] R.A.Cowley and T.W.Ryan, J. Phys. D 20 (1987) 61.
- [6] J.Penfold, J. de Phys. 50 (1989) C7-99.
- [7] S.K.Sinha, E.B.Sirota, S.Garoff and H.B.Stanley, Phys. Rev. B 38, 2297 (1988).
- [8] V.K. Ignatovich. An algebraic approach to the propagation of waves and particles in layered media. Physica B, vol. 175 (1991) 33-38.
- [9] V.K.Ignatovich. Physics of Ultracold Neutrons (UCN). Oxford Clarendon Press, 1990.
- [10] В.К.Игнатович. Новый метод решения уравнения Шредингера. ТМФ 88, № 3, с. 477, 1991. (Sov. Phys. Theor. Math. Phys. 88(3), 1010–1012, 1991.)
- [11] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Москва, Наука, 1989, стр.106.
- [12] В.К. Игнатович. Этюд о периодическом потенциале. УФН 150 (1), 146-158, 1986. (Sov. Phys. Usp. 29(9), 880–887, 1986.)
- [13] Справочник по специальным функциям. Под редакцией М. Абрамовица и И. Стиган, Москва, Наука, 1979.
- [14] X.-L.Zhou, S.-H.Chen, Physics Reports, 257 (1995) p.223.
- [15] O.S.Heavens. Optical properties of thin films. Oxford, Butterworths, 1970.

**Корнеев Д. А.** и др.

P4-2002-181

Отражение нейтронов от потенциалов с размытыми границами

Получено аналитическое выражение для кривой отражения нейтронов от потенциалов с размытыми границами, когда потенциалы описываются кусочно-непрерывными функциями вида  $u(x) = a/[1 + \exp(-bx)]$ . Подгонка полученного выражения к экспоненциальным данным позволяет извлечь параметры потенциалов в 7 раз быстрее, чем с помощью численных рекуррентных процедур.

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

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2002

Перевод авторов

**Korneev D. A.** et al.

P4-2002-181

Neutron Reflection from Potentials with Smooth Boundaries

An analytical expression for reflection of neutrons from potentials with smooth boundaries, when potentials are described by piecewise continuous functions of the type  $u(x) = a/[1 + \exp(-bx)]$ , is obtained. The fitting of this expression to experimental data to find parameters of the potential is demonstrated to be 7 times faster than with the common numerical recurrent method.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2002

**Редактор *А. Н. Шабашова***  
**Макет *Н. А. Киселевой***

**Подписано в печать 28.10.2002.**

**Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.**  
**Усл. печ. л. 1,37. Уч.-изд. л. 1,44. Тираж 360 экз. Заказ № 53591.**

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

**E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)**  
**[www1.jinr.ru](http://www1.jinr.ru)**