



Рентгеновский магнитный круговой дихроизм

X-ray magnetic circular
dichroism(XMCD)

Студент: Комиссаров А.С.
Группа: ФТ-260015

Круговой дихроизм

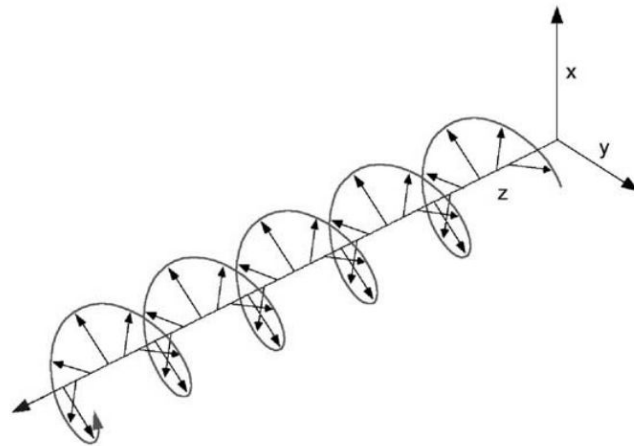
Дихроизм — явление, состоящее в различном поглощении веществом света в зависимости от его поляризации.

Круговой дихроизм - это дихроизм с использованием круговой поляризации света, т. е, дифференциальное LHC и RHC света.

Возможное применение:

- исследования вторичной структуры белков и ДНК
- исследование геометрической и электронной структуры в диапазоне рентгеновского излучения d->d

$$\vec{E}_{\text{rcp}} = E_0\{\sin[\omega t - kz + \phi_0]\mathbf{i} + \cos[\omega t - kz + \phi_0]\mathbf{j}\}$$



LHC HLC

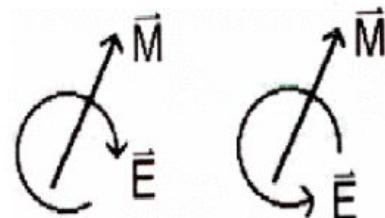
← →

Магнитный дихроизм

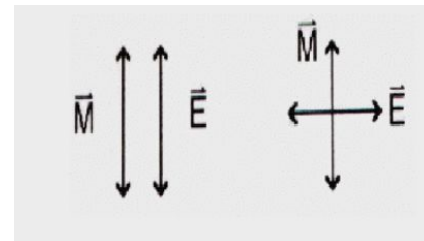
Поляризация зависит от спектра поглощения рентгеновского излучения

e_q : вектор поляризации $q = -1 \Rightarrow$ поляризованного по правому и левому кругу RHC
 $q = 0 \Rightarrow$ линейно
 $q = 1 \Rightarrow$ поляризованного по правому и левому кругу LHC

Рентгеновский **магнитный** круговой дихроизм (XMCD):
разность в поглощении для левого и правого контура
правый круглый поляризованный свет.



Рентгеновский **линейный** дихроизм (XMLD): разность в
поглощении для линейно
поляризованного света \perp и \parallel к оси квантования ($q = \pm 1$ и $q = 0$).



Магнитные эффекты взаимодействия рентгеновского излучения с веществом

Для ф.т.т. рассеяние рентгеновских лучей дает информацию о **плотности заряда**.
Следующие, меньшие по величине, содержат информацию о **магнитном моменте**.

Для рассмотрения: $\hbar \omega / (mc^2) < 1$

$$H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4$$

1. Первые два связаны с кинетической энергией
2. Третье описывает зеемановское взаимодействие спина электрона с магнитным полем волны
3. Четвертое обусловлено спин-орбитальным взаимодействием

$$\begin{aligned}
H' &= \frac{e^2}{2mc^2} \sum_j A^2(\mathbf{r}_j) - \frac{e}{2mc} \sum_j \mathbf{A}(\mathbf{r}_j) \cdot \mathbf{p}_j - \\
&- \frac{e\hbar}{2mc} \sum_j \mathbf{S}_j \cdot [\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)] - \\
&- \frac{e^2\hbar}{2(mc^2)^2} \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \left[\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)}{\partial t} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}_j) \right] = \\
&= H'_1 + H'_2 + H'_3 + H'_4,
\end{aligned}$$

$A(r_j)$ - есть вектор-потенциал поля в точке r_j .

S_j - спин j-го электрона с импульсом p_j .

Общие формулы для магнитного рентгеновского рассеяния

Эксперимент по рентгеновскому рассеянию связан с двухфотонным процессом, в котором имеется падающий фотон с **энергией, волновым вектором и поляризацией**.

В ходе эксперимента фотон аннигилирует вылетает новый фотон.

$\hbar \omega_j$ - энергия. k_f - волновой вектор. ϵ_f - поляризация.

Из гамильтониана первое и четвертое слагаемые дают вклад в **первом порядке** теории возмущений. Второе и третье во второй порядок теории возмущений.

Введем начальное и конечное состояние системы:

$|i\rangle = |0_e; k_j; \epsilon_i\rangle$ - основное состояние.

и энергиями:

$|f\rangle = |f_e; k_j; \epsilon_i\rangle$ - возбужденное состояние.

$$\epsilon_i = E_0 + E_i, \epsilon_f = E_f + E_f.$$

Золотое правило Ферми:

$$\sigma \sim \sum_{i,f} \left| \langle f; k_f | \hat{V}_{\text{int}} | i; k_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar c(k_i - k_f)) \rho$$

$$\hat{V}_{\text{int}} = -e \left(\vec{\varepsilon} \sum_{a=1}^Z \vec{r}_a e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_a} \right)$$

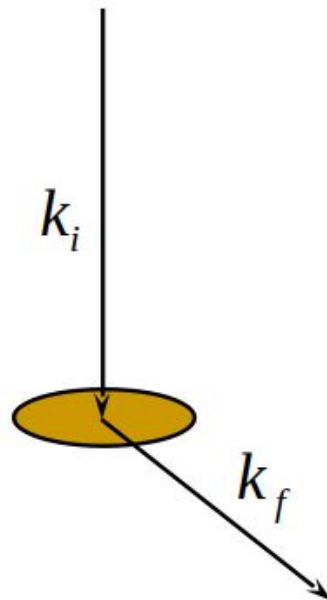
Одноэлектронное приближение

$$\sum_{a=1}^Z \vec{r}_a e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_a} \rightarrow \vec{r} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}}$$

Дипольное приближение

$$e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \approx 1 + \dots$$

$$\lambda \gg a_0$$



$$|i\rangle \rightarrow |f\rangle$$

При данных условиях можно определить вероятность рассеяния:

$$\omega_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | H'_1 + H'_4 | i \rangle + \sum_n \frac{\langle f | H'_2 + H'_3 | n \rangle \langle n | H'_2 + H'_3 | i \rangle}{\epsilon_i - \epsilon_n} \right|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_f) . \quad (3)$$

Дважды дифференциальное сечение рассеяния связано с измеряемыми величинами:

$$\frac{d^2 \sigma}{dE_f d\Omega_f} = r_0^2 \frac{\omega_f}{\omega_i} \sum_{f_e} |M_{if}|^2 \delta(E_{0e} - E_{f_e} + \hbar\omega_i - \hbar\omega_f) , \quad (4)$$

где $r_0 = \frac{e^2}{mc^2} = 2.82 * 10^{-13} cm$, есть классический радиус электрона

Случай Магнитного резонансного упругого рассеяния

В этом случае $E_i - E_n + \hbar\omega_i \rightarrow 0$

Энергия гамма-кванта близка к энергии промежуточного состояния с дыркой на внутренней атомной оболочке и электроном выше уровня Ферми.

Данное приближение разумно для **4f-электронов редко-земельных металлов** и менее для 3d-металлов.

Особенности:

- имеется зависимость от номера оболочки
- получено до дипольного приближения и возбуждения с r-уровня зависят от заполнения и от магнитных свойств d-состояний

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} = r_0^2 \left| \sum_{\mathbf{R}} \exp(i\mathbf{QR}) \left[\frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \boldsymbol{\varepsilon}) (F_{1,1} + F_{1,-1}) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{i}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}^* \times \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \mathbf{z}_R (F_{1,1} + F_{1,-1}) + \right. \right. \\ \left. \left. + (\boldsymbol{\varepsilon}^* \cdot \mathbf{z}_R) (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{z}_R) \left(F_{1,0} - \frac{F_{1,1}}{2} - \frac{F_{1,-1}}{2} \right) \right] \right|^2. \end{aligned}$$

File: data/raw_mat0.txt

	0.01 mJ/cm^2 photon energy	0.01 mJ/cm^2 plus	0.01 mJ/cm^2 minus
1	745.811740455425	0.313397381054667	0.31494285105798
2	745.911123241307	0.314352476979835	0.31290328349791
3	746.010445386144	0.314014873035597	0.314815866779791
4	746.109828172026	0.313209076742581	0.313562297048004
5	746.209150326797	0.314598383997914	0.314209902081484
6	746.308472481568	0.31325492665762	0.314479016782672
7	746.407855267451	0.315520198006999	0.313172960899881
8	746.507177412287	0.313882805222803	0.314974513846907
9	746.60656019817	0.314176721304299	0.313615900926419
10	746.705882352941	0.314739079206419	0.314177279435906
11	746.805204507712	0.31387872608499	0.315217057598528
12	746.904587293595	0.314790877486557	0.313310968320455
13	747.003909438431	0.313230093453378	0.31479798305036
14	747.103292224314	0.314951903711965	0.313828808261301
15	747.202614379085	0.314898647264745	0.314028666156922
16	747.301936533856	0.313461486563712	0.315061048190714
17	747.401319319738	0.315347485117903	0.312505107785861
18	747.500641464575	0.313673022503265	0.31581450729481
19	747.600024250457	0.314164492917022	0.313708300508025
20	747.699346405229	0.314915167190079	0.314091612521241
21	747.79866856	0.314026010889477	0.31439143900698
22	747.898051345882	0.315079545934949	0.313786993546352
23	747.997373490719	0.313220912000981	0.315330893697933
24	748.096756276601	0.314396135569826	0.314117869670731
25	748.196078431372	0.314894504049682	0.314489193340949
26	748.295400586144	0.313877924129464	0.314876387560819
27	748.394783372026	0.315866944821812	0.314067957678122
28	748.494105516863	0.313462749026999	0.314793604908521
29			

Обработка поглощения рентгеновского излучения

X-ray absorption spectroscopy(XAS)

Рентгеновское поглощение

$$I = I_0 \exp(-\mu_x d) = I_0 \exp(-\rho_a \sigma^{abs} d)$$

μ_x - коэффициент линейного поглощения [m^{-1}]

σ^{abs} - поглощение на секцию [m^2 /атом]

ρ - плотность [атом/ m^3]

Для обработки необходимо:

- Получить на спектре энергий значения коэффициентов рентгеновского поглощения(I).
- Рассчитать разность значений, поляризованный по правому и левому кругу.
- Найти зависимость и построить спектр.

Используемые материалы

- С. Г. Овчинников, “Использование синхротронного излучения для исследования магнитных материалов”, УФН
- РЕНТГЕНОВСКИЙ КРУГОВОЙ МАГНИТНЫЙ ДИХРОИЗМ ПРИ СИЛЬНЫХ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЯХ© 2017 г. Т. В. Кузнецова 1, 2, *, В. И. Гребенников 1, 2
- *Ferromagnetic and antiferromagnetic domain configurations in thin films and multilayers towards a patterned exchange bias system* Author(s): Czekaj, Slawomir Marcin Publication Date: 2007
- *Theory of magnetic circular dichroism of nonresonant x-ray Raman scattering* Manabu Takahashi



Github: https://github.com/disDeal/xmcd_rs



Nannou: <https://github.com/nannou-org/nannou>

Спасибо за внимание!