

СТРУКТУРА,  
ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 539.216.2:539.26

АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ МУЛЬТИСЛОЙНЫХ НИЗКОКОНТРАСТНЫХ  
ТОНКИХ ПЛЕНОК Fe/Cr: МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ  
И ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

© 2019 г. Ю. А. Бабанов<sup>a, \*</sup>, В. В. Васин<sup>b</sup>, Д. А. Пономарев<sup>a</sup>, Д. И. Девятериков<sup>a</sup>,  
Л. Н. Ромашев<sup>a</sup>, В. В. Устинов<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН,  
ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

<sup>b</sup>Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН,  
ул. С. Ковалевской, 16, Екатеринбург, 620990 Россия

\*e-mail: devidor@yandex.ru

Поступила в редакцию 24.07.2018 г.

После доработки 19.03.2019 г.

Принята к публикации 20.03.2019 г.

Описан экспериментальный метод изучения локальной атомной структуры с разрешением по глубине низкоконтрастных многослойных тонких пленок. Рассматривается комбинация рентгеновской рефлектометрии и протяженной тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения с угловым разрешением. Для получения структурных характеристик используются следующие способы решения обратных некорректных задач: метод регуляризации Тихонова (для решения линейных интегральных уравнений) и алгоритм Левенберга–Марквардта (для решения нелинейных уравнений). Предлагаемые математические алгоритмы не требуют такой информации об исследуемой системе, как ширина и форма интерфейса, ширина и глубина расположения полос отдельных элементов, атомная структура. Это позволяет получать информацию о локальной атомной структуре отдельных интерфейсных слоев и поверхности. Для оценки возможностей метода нами проведены модельные численные эксперименты для образца со структурой вида Cr/Fe/Cr/Fe/Cr.

**Ключевые слова:** тонкие пленки, рентгеновская рефлектометрия, EXAFS, обратные задачи, разрешение по глубине

**DOI:** 10.1134/S0015323019080035

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Характер поверхности и интерфейса играет ведущую роль в определении свойств многослойных тонких пленок. Для достижения желаемой функциональности важно выяснить атомную структуру интерфейса в многослойных системах. Так как ширина интерфейса изменяется от долей нанометра до десятков нанометров, необходимо использовать экспериментальные методы с разрешением по глубине 1 нм или меньше. В последние годы определенный интерес вызывает возможность создания экспериментального метода, позволяющего изучать локальную атомную структуру с разрешением по глубине. Это глобальная проблема исследований многослойных наногетероструктур, включая сверхрешетки Fe/Cr, в которых наблюдаются гигантский магниторезистивный (GMR) и Кондо эффекты [1].

В литературе есть несколько работ, в названии которых есть фраза “с разрешением по глубине”. В частности, это относится к методу EXAFS с уг-

ловым разрешением [2, 3]. Известно также, что комбинация рентгеновской рефлектометрии и EXAFS особенно полезна для изучения поверхностей и тонких пленок [4–6]. Однако все вышеперечисленные методы не лишены недостатков. В дополнение к неоднозначности получаемых результатов существуют еще более серьезные ограничения. Например, применение методов решения оптимизационных задач в кластерно-слоистых наноструктурах осложняется необходимостью выбора начального приближения. Аналогичные сложности возникают при изучении неупорядоченных систем, таких как аморфные металлические сплавы.

В настоящей работе описывается новый метод исследования локальной атомной структуры с разрешением по глубине. Метод состоит в решении обратных некорректных задач с использованием экспериментальных данных рентгеновской рефлектометрии и спектроскопии EXAFS с угловым разрешением. Предлагаемый метод решения обратных задач не требует информации о ширине

и форме интерфейсов, числе слоев различных элементов и их толщине. Он дает нам достаточную информацию о локальной атомной структуре даже для низкоконтрастных систем Fe/Cr, поверхностей и интерфейсов с перекрывающимися координационными сферами.

Статья структурирована следующим образом. Разд. 2 посвящен описанию схемы метода, заключающейся в решении обратных некорректных задач. Процедура состоит из трех этапов: 1) определение концентрационного профиля  $p_i(z)$  элемента  $i$  с глубиной  $z$  по данным рентгеновской рефлектометрии; 2) определение коэффициента поглощения рентгеновских лучей по выходу флуоресценции  $\mu_i(z, E)$  для элемента  $i$  в зависимости от глубины  $z$  и энергии фотона  $E$  с использованием данных EXAFS спектроскопии с угловым разрешением  $I_i^f(E, \theta)$ ; 3) определение парциальных корреляционных функций  $g_{ij}(z, r)$  в зависимости от глубины  $z$  путем решения интегральных уравнений для функций  $\chi_i(z, k)$ , полученных из  $\mu_i(z, E)$ . В разд. 3 все этапы предлагаемого метода продемонстрированы на модельном примере наноструктурной пленки  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Cr}/\text{Fe}/\text{Cr}/\text{Fe}/\text{Cr}$ .

## 2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ С РАЗРЕШЕНИЕМ ПО ГЛУБИНЕ В МУЛЬТИСЛОЙНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Разработанный метод обладает двумя важными особенностями:

1. Используются эффективные математические алгоритмы: метод регуляризации Тихонова при решении линейных обратных задач [7] и модифицированный алгоритм Левенберга–Марквардта (Л–М) при решении нелинейных обратных задач [8].

2. Алгоритм разработанного метода состоит из трех этапов. Результаты, полученные на первом этапе, передаются на второй этап в качестве входных данных. Для третьего этапа входными данными являются результаты второго этапа. Эта общая схема не может быть прервана. Например, невозможно опустить второй шаг. Это позволяет считать, что объединение двух экспериментальных методов (рентгеновской рефлектометрии, EXAFS-спектроскопии), совместно с разработанным алгоритмом является новым методом исследования.

**Первый этап.** Определение концентрационного профиля  $p_i(z)$  элемента  $i$  в образце по данным рентгеновской рефлектометрии.

В работе [9] был предложен новый метод определения концентрационного профиля элементов металлических многослойных наногетероструктур для низкоконтрастных систем по данным

рентгеновской рефлектометрии. Ключевой идеей нового подхода является формулировка рефлектометрического интегрального уравнения в терминах концентрационного профиля  $p_i(z)$ , который описывает вероятность обнаружить элемент  $i$  на глубине  $z$  от поверхности образца. Метод прошел экспериментальную проверку [11].

Определим концентрационный профиль  $p_i(z)$  элемента  $i$  для многослойного образца как

$$p_i(z) = n_i(z)/n_{0i}, \quad (2.1)$$

где  $n_i(z)$  определена как атомная плотность элемента  $i$  на некоторой глубине  $z$ ,  $n_{0i}$  — плотность атомов  $i$  чистого слоя этого элемента. Для функции  $p_i(z)$  выполняется соотношение  $0 \leq p_i(z) \leq 1$ .

Интегральное уравнение, полученное в рамках первого Борновского приближения и описывающее чисто зеркальный вклад в рентгеновское рассеяние, связывает коэффициент отражения рентгеновских лучей  $R(s)$  с производной концентрационного профиля  $p_i'(z)$  для многослойного образца [9]. Оно записывается как

$$R(s) = \frac{(4\pi r_e)}{s^2} \sum_{i=1}^n n_{0i} f_i(E) \times \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{dp_i(z)}{dz} \right) \exp(isz) dz, \quad (2.2)$$

где  $s - z$  компонента вектора рассеяния; суммирование ведется по числу элементов в образце  $n$ ;  $r_e$  — классический радиус электрона;  $E$  — энергия фотона, которая является здесь параметром. Рентгеновский форм фактор  $f_i(E)$  является комплексной функцией  $f_i(E) = f_i^0 + f_i'(E) + if_i''(E)$  с атомным форм фактором  $f_i^0$ , дисперсией  $f_i'(E)$  и коррекцией на поглощение  $f_i''(E)$ .

Поскольку на практике происходит измерение интенсивности отраженного излучения, связанного с коэффициентом отражения соотношением  $|R(s)|^2 = I(s)$ , перепишем уравнение (2.2) в виде

$$I(s) = \left| \frac{4\pi r_e}{s^2} \sum_{i=1}^K n_{0i} f_i(s, E) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_i(z)}{dz} \exp(isz) dz \right|^2 = \left| \sum_{i=1}^K \int_{-\infty}^{\infty} K_i(s, E, z) p_i'(z) dz \right|^2. \quad (2.3)$$

Здесь  $K_i(s, E, z)$  — ядро интегрального уравнения (2.3):

$$K_i(s, E, z) = n_{0i}^0 f_i(s, E) \exp(isz) = \text{Re}K + i\text{Im}K. \quad (2.4)$$

При переходе к рассмотрению двухкомпонентного слоистого образца вида  $A_1B_1A_2B_2...B_{n-1}A_n$  примем во внимание наличие особых условий на границах раздела с внешней средой и подложкой, задав четыре функции концентрационного профиля и две точки, разделяющие области определения профилей:

- $p_1 = p_A$  (элемент А);
- $p_2 = p_B$  (элемент В);
- $p_3 = p_{Sub}$  (подложка);
- $p_4 = p_{Ex}$  (вакуум или воздух);
- $L$  – точка внутри слоя  $A_i$ ;
- $D$  – точка внутри слоя  $A_n$ .

Для них выполняются условия:

$$\begin{cases} p_A + p_B = 1, & \text{если } z p_A, p_B \in [L, D] \\ p_A + p_{Sub} = 1, & \text{если } p_A \in [D, +\infty] \\ p_A + p_{Ex} = 1, & \text{если } p_A \in [-\infty, L]. \end{cases} \quad (2.5)$$

В таком случае уравнение (2.3) принимает вид

$$I(s) = \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Re} \tilde{K}(s, E, z) p'_A dz \right]^2 + \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \text{Im} \tilde{K}(s, E, z) p'_A dz \right]^2. \quad (2.6)$$

Уравнение (2.3) является нелинейным уравнением Фредгольма первого рода относительно неизвестной функции  $p_A(z)$ . Итерационный модифицированный метод Левенберга–Марквардта был использован для решения этого уравнения [8]. В операторной форме уравнение (2.4) можно записать в виде

$$I^R = A(p). \quad (2.7)$$

Следуя работе [12], вычислительная формула алгоритма Левенберга–Марквардта записывается как

$$p^{j+1} = P_Q \left[ p^j - \left( A'(p^j)^T A'(p^j) + \alpha_j I \right)^{-1} \times \right. \\ \left. \times A'(p^j)^T \left( A(p^j) - I^R \right) \right], \quad (2.8)$$

где  $P_Q$  – метрическая проекция на множество  $Q = \{z : 0 \leq p(z) \leq 1\}$ ,  $A'$  – матрица Якоби,  $I$  – единичная матрица,  $\alpha_j$  – параметр регуляризации, который может быть изменен в процессе итераций,  $j$  – число итераций.

**Второй этап.** Определение коэффициента поглощения рентгеновских лучей  $\mu_i(E, z)$  с разрешением по глубине по данным EXAFS-спектроскопии с угловым разрешением.

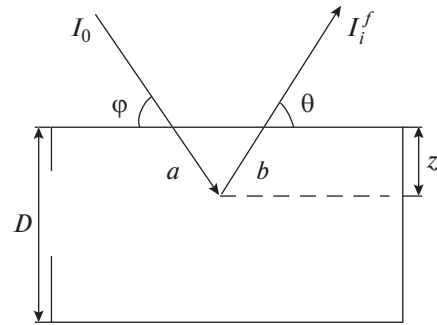


Рис. 1. Геометрия EXAFS-эксперимента.

Второй этап разработанного метода – самый важный, так как именно на этом этапе происходит переход от угловой зависимости EXAFS-спектроскопии к разрешению по глубине и устанавливается математическая связь между двумя независимыми экспериментами – рентгеновской рефлектометрией и EXAFS-спектроскопией с угловым разрешением.

Рассмотрим образец толщиной  $D$ , облучаемый рентгеновскими фотонами с энергией  $E$  под углом  $\phi$  (рис. 1). Экспериментальный спектр снимается по точкам в энергетической шкале  $E$  при фиксированном угле выхода флуоресценции  $\theta$ . Происходит накопление спектра во всем энергетическом интервале существования осцилляций. Затем накопление спектра происходит вновь при других значениях угла выхода флуоресценции  $\theta$ , где  $l$  – индекс текущего угла выхода флуоресценции. Известно, что средняя глубина поглощения изменяется с энергией  $E$  падающего фотона, что изменяет вероятность повторного поглощения фотона флуоресценции образцом. Это самопоглощение приводит к уменьшению измеренных осцилляций EXAFS. В работе [13] приведена улучшенная формула коррекции самопоглощения для данных EXAFS, которая работает при любой толщине образца. Интенсивность флуоресценции из многослойного образца  $I_i^f(E, \theta_l)$  для спектра элемента  $i$  была получена в работе [14]. Интегральное уравнение в этом случае имеет вид

$$I_i(E, \theta_l) = \int_0^D \frac{I_0 \epsilon_a n_{0i} p_i(z)}{\sin \phi} \times \exp \left[ - \left( \frac{\mu_i(E)}{\sin \phi} + \frac{\mu_i(E_f)}{\sin \theta_l} \right) z \right] \mu_i(E, z) dz. \quad (2.9)$$

Где  $\mu_i(E, z)$  – коэффициент поглощения излучения с энергией  $E$  элемента  $i$  на глубине  $z$ ,  $\mu_i(E_f)$  – коэффициент поглощения флуоресцентного излучения с энергией  $E_f$  элемента  $i$ ,  $\epsilon_a$  – выход флуоресценции в единицу телесного угла.

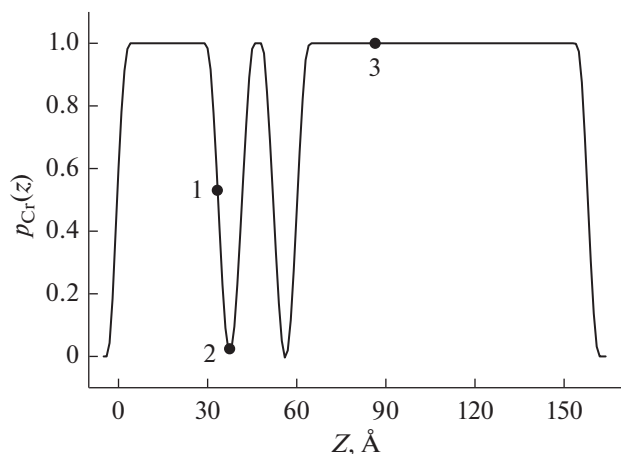


Рис. 2. Концентрационный профиль хрома (решение).

**Третий этап.** Определение парциальных парных корреляционных функций  $g_{ij}(z, r)$  в зависимости от глубины.

Информация о локальном атомном строении исследуемого образца в виде парциальных парных корреляционных функций (пПКФ)  $g_{ij}(r, z)$  из коэффициента поглощения  $\mu_i(E, z)$  находится за три основных шага:

1) Выделение нормированной осциллирующей части коэффициента поглощения в виде

$$\chi_i(E, z) = \frac{\mu_i(E, z) - \mu_{i0}(E)}{\mu_{i0}(E)}, \quad (2.10)$$

где  $\mu_{i0}(E)$  – коэффициент поглощения уединенного атома.

2) Перевод нормированной осциллирующей части коэффициента поглощения из пространства энергий  $E$  в пространство волновых векторов фотоэлектрона  $k$ .

Для этого применяется закон дисперсии, описываемый выражением:

$$E(k) = c + bk + ak^2, \quad (2.11)$$

где  $a = \hbar^2/2m_e \sim 2.81$  эВ  $\text{\AA}$ ,  $b$  – коэффициент подгонки, который имеет малую величину ( $\sim 0.1-1$ ),  $c$  – начальная энергия фотоэлектрона, его значение должно быть близко или совпадать с энергией  $K$ -края элемента, выбранного центральным. Тогда  $\chi(k, z)$  согласно [15] запишется в виде:

$$k\chi_i(z, k) = 4\pi\rho_0 \sum_{j=1}^n c_j \int_0^\infty f_j(k, r) \times \exp\left(-\frac{2r}{\lambda_i(k)}\right) \sin(2kr + \psi_{ij}(k, r)) g_{ij}(z, r) dr. \quad (2.12)$$

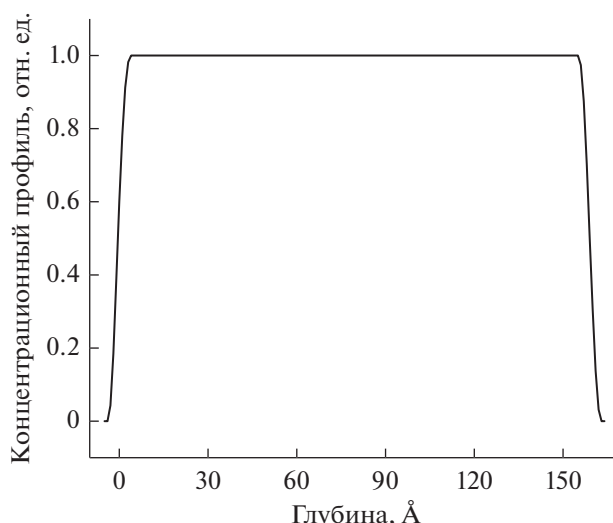


Рис. 3. Концентрационный профиль хрома (начальное приближение).

Для перехода к следующему шагу необходимо выбрать интересующие точки  $z_i$  на оси глубин и работать с каждой точкой отдельно.

3) Решение обратной задачи EXAFS-спектроскопии и получение парциальных парных корреляционных функций методом регуляризации Тихонова.

### 3. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

**3.1. Первый этап.** Для численного моделирования использована пятислойная система  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Cr}(100 \text{ \AA}) [\text{Fe}(8 \text{ \AA})/\text{Cr}(10.5 \text{ \AA})]_2/\text{Cr}(20 \text{ \AA})$ . Для этой структуры был задан концентрационный профиль  $p_{\text{Cr}}(z)$ , который использовали для имитации интенсивности отражения  $I^R$  согласно уравнению (2.6). Затем, решая обратную задачу для уравнения (2.6), мы нашли профиль  $\tilde{p}_{\text{Cr}}(z)$ . Сравнение полученного результата с истинным решением  $p_{\text{Cr}}(z)$  приводится на рис. 2. Точками обозначены значения глубины  $Z$ , на которых будут получены парные корреляционные функции  $g_{ij}(z, r)$  в ходе следующего этапа апробации метода. Для оценки качества полученного решения рассчитывали норму невязки  $RN$  между моделью и полученными данными. В ходе решения “самоогласованной” задачи в качестве начального приближения для алгоритма Левенберга–Маркварта использовали концентрационный профиль, представленный на рис. 3. Этот концентрационный профиль соответствует однослойной пленке Cr, толщина которой равна толщине модельной кривой. На рис. 4 видно, что рассчитан-

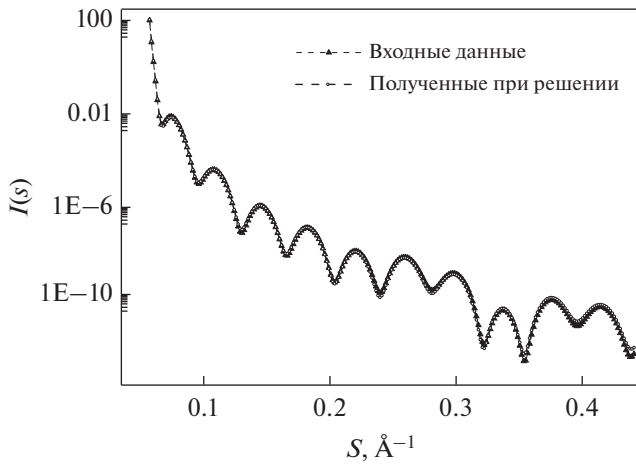


Рис. 4. Сравнение расчетных интенсивностей отражения для истинного и приближенного решения.

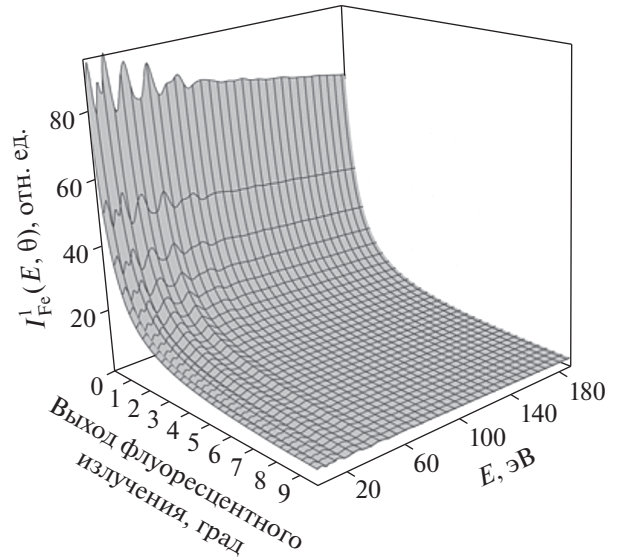


Рис. 6. Расчетный  $I(E, \theta)$  на  $K$ -краю поглощения Fe.

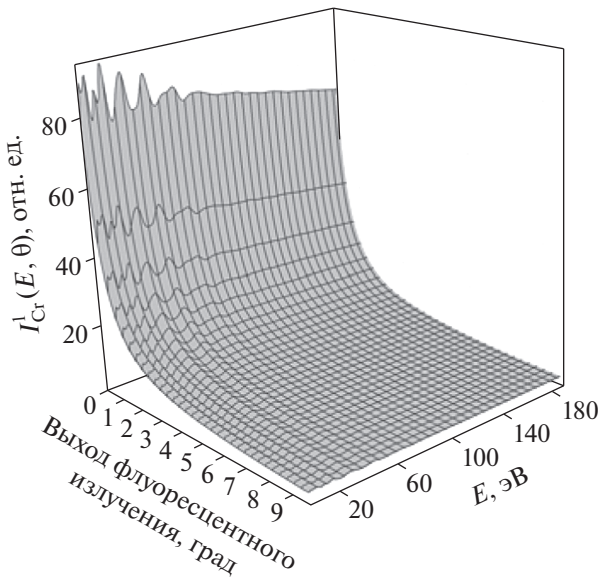


Рис. 5. Расчетный  $I(E, \theta)$  на  $K$ -краю поглощения Cr.

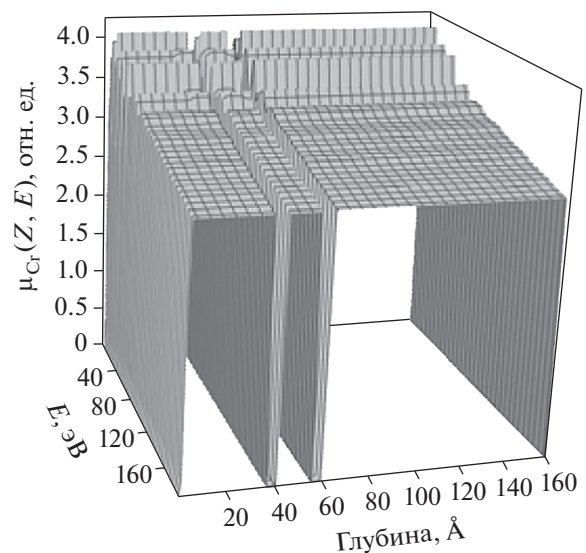


Рис. 7.  $\mu_i(E, z)$  на  $K$ -краю поглощения Cr.

ные интенсивности хорошо совпадают друг с другом.  $RN$ -фактор для этих кривых составляет 0.2%.

**3.2. Второй этап.** На рис. 5, 6 показаны рассчитанные интенсивности флуоресцентного излучения для  $K$ -краев поглощения Cr и Fe. Результаты решения обратной задачи (2.12) – функции  $\mu_i(E, z)$  представлены на рис. 7, 8.

Поведение интенсивности флуоресцентного излучения  $I(E, \theta_i)$  кардинально отличается от поведения коэффициента поглощения, так как связь между ней и концентрационным профилем образца является интегральной. В отличие от ко-

эффициента поглощения образца, по внешнему виду интенсивности флуоресцентного излучения невозможно сказать о примерной структуре исследуемого образца. Также можно заметить, что вдоль оси углов  $\theta$  интенсивность плавно спадает и не имеет каких-либо особенностей (рис. 5, 6).

**3.3. Третий этап.** В начале третьего этапа происходит переход от коэффициента поглощения образца  $\mu_i(E, z)$  к нормированной осциллирующей

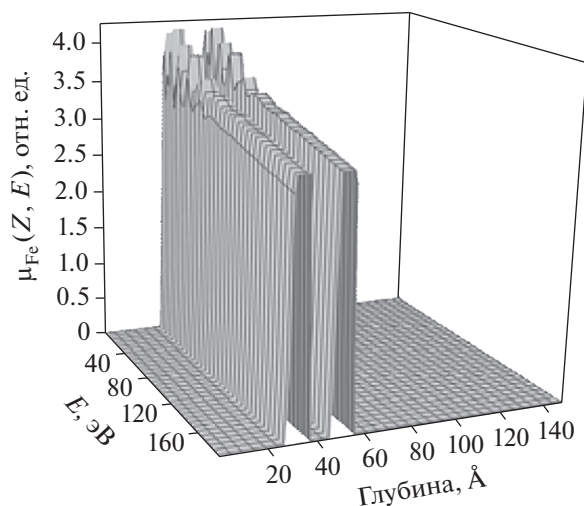


Рис. 8.  $\mu_i(E, z)$  на  $K$ -краю поглощения Fe.

шей части  $\chi_i(k, z)$ . Для получения пПКФ необходимо решить обратную задачу для уравнения (2.12). Так как мы исследуем двухкомпонентную систему Fe/Cr, то мы будем искать две пПКФ с центральным атомом Cr:  $g_{CrCr}(z, r) = g_{11}(z, r)$ ,  $g_{CrFe}(z, r) = g_{12}(z, r)$  и две с центральным атомом Fe:  $g_{FeCr}(z, r) = g_{21}(z, r)$ ,  $g_{FeFe}(z, r) = g_{22}(z, r)$ . Впервые задача определения нескольких пПКФ для твердых растворов была решена в работе [16]. Интегральное уравнение (2.12) для  $K$ -краев поглощения Fe и Cr можно переписать следующим образом:

$$k\chi_{Cr}(z, k) = 4\pi\rho_0 \left\{ \begin{aligned} & \int_0^\infty g_{11}(z, r) f_1(k, r) \exp\left(-\frac{2r}{\lambda_1(k)}\right) \times \\ & \times \sin(2kr + \psi_{11}(k, r)) dr + \\ & + \int_0^\infty g_{12}(z, r) f_2(k, r) \exp\left(-\frac{2r}{\lambda_1(k)}\right) \times \\ & \times \sin(2kr + \psi_{12}(k, r)) dr \end{aligned} \right\}; \quad (3.1)$$

$$k\chi_{Fe}(z, k) = 4\pi\rho_0 \left\{ \begin{aligned} & \int_0^\infty g_{21}(z, r) f_1(k, r) \exp\left(-\frac{2r}{\lambda_2(k)}\right) \times \\ & \times \sin(2kr + \psi_{21}(k, r)) dr + \\ & + \int_0^\infty g_{22}(z, r) f_2(k, r) \exp\left(-\frac{2r}{\lambda_2(k)}\right) \times \\ & \times \sin(2kr + \psi_{22}(k, r)) dr \end{aligned} \right\}. \quad (3.2)$$

Индексы в уравнениях означают тип атома: 1 – Cr, 2 – Fe. Решение обратной задачи для интегральных уравнений Фредгольма первого рода необходимо начинать с выбора интересующих точек на оси глубин, чтобы получить  $z = \text{const}$ . Шаг сетки по глубине в методе принимается равным  $2 \text{ \AA}$ , что обуславливается толщиной одного атомного монослоя. При шаге  $2 \text{ \AA}$  среднее время решения обратной задачи для одной глубины составляет 5 мин. Точки по оси глубины, выбранные для проверки, отмечены на концентрационном профиле, показанном на рис. 2, цифрами 1, 2 и 3. Для проверки

Таблица 1. Результаты обработки данных численного эксперимента и модельные данные для первой координационной сферы структуры  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Cr}(100 \text{ \AA})/[\text{Fe}(8 \text{ \AA})/\text{Cr}(10.5 \text{ \AA})]_2/\text{Cr}(20 \text{ \AA})$  на краю поглощения Cr

Точка	Данные	Fe–Cr		Fe–Fe	
		$r_1, \text{ \AA}$	$n_1$	$r_1, \text{ \AA}$	$n_1$
Точка 1	Модель	2.50	4.0	2.50	4.0
	Решение	2.49	3.7	2.49	3.5
Точка 2	Модель	2.50	2.0	2.50	6.0
	Решение	2.50	2.2	2.50	6.1
Точка 3	Модель	–	–	–	–
	Решение	–	–	–	–

**Таблица 2.** Результаты обработки данных численного эксперимента и модельные данные для первой координационной сферы структуры  $Al_2O_3/Cr(100 \text{ \AA})/[Fe(8 \text{ \AA})/Cr(10.5 \text{ \AA})]_2/Cr(20 \text{ \AA})$  на краю поглощения Fe

Точка	Данные	Cr–Cr		Cr–Fe	
		$r_1, \text{ \AA}$	$n_1$	$r_1, \text{ \AA}$	$n_1$
Точка 1	Модель	2.52	4.0	2.50	4.0
	Решение	2.51	3.6	2.50	3.5
Точка 2	Модель	2.52	6.0	2.50	2.0
	Решение	2.51	5.8	2.49	2.6
Точка 3	Модель	2.52	8.0	–	–
	Решение	2.51	7.1	–	–

наиболее интересны: 1 – точка на интерфейсе, между слоями Fe и Cr, 2 – точка в центре слоя Fe, 3 – точка в слое с чистого Cr. Найденные в ходе решения уравнения (2.9) парные корреляционные функции  $g_{FeFe}$ ,  $g_{FeCr}$ ,  $g_{CrCr}$  позволяют определить средние расстояния  $r_1$  между соседствующими атомами соответствующего сорта и оценить координационные числа  $n_1$ , показывающие среднее число атомов в первой координационной сфере рассеивающего центра. Полученные результаты сведены в табл. 1 и 2.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подход, представленный в этой статье, полностью описывает рассеяние и поглощение рентгеновских лучей. Установлена математическая взаимосвязь между этими явлениями. Использован универсальный математический язык канонических функций распределения для описания атомной структуры как в случае рентгеновской рефлектометрии и EXAFS-спектроскопии [10] этот подход широко применяется при изучении как упорядоченных, так и неупорядоченных систем (аморфных систем, жидкостей, расплавов и твердых растворов).

Итогом компьютерного моделирования и апробации метода с помощью решения самосогласованной задачи для системы  $Al_2O_3/Cr(100 \text{ \AA})/[Fe(8 \text{ \AA})/Cr(10.5 \text{ \AA})]_2/Cr(20 \text{ \AA})$  стало успешное восстановление информации о локальном атомном строении в интересующих точках по глубине в виде пПКФ для  $K$ -краев поглощения Cr и Fe.

Исследование проведено в рамках государственного задания Минобрнауки РФ (“Спин” № АААА-А18-118020290104-2).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ustinov V.V., Romashev L.N., Milayev M.A., Korolev A.V., Krinitsina T.P., Burkhanov A.M.* Kondo-like effect in the resistivity of superparamagnetic cluster-layered Fe/Cr nanostructures. // *J. Magn. Magn. Mater.* 2006. V. 300. P. 148.
2. *Amemiya K.* Sub-nm resolution depth profiling of the chemical state and magnetic structure of thin films by a depth-resolved X-ray absorption spectroscopy technique // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2012. V. 14. P. 10477.
3. *Kayser Y., Sá J., Szlachetko J.* Depth-Resolved X-ray Absorption Spectroscopy by Means of Grazing Emission X-ray Fluorescence // *Anal. Chem.* 2015. V. 87(21). P. 10815.
4. *Heald S.M., Barrera E.V., Chen H.* Structure of Surfaces and Interfaces as studied using Synchrotron Radiation Faraday // *Discuss. Chem. Soc.* 1990. V. 89. P. 21.
5. *Borthen P., Strehlow H.-H.* X-ray-reflectivity fine structure and EXAFS // *Phys. Rev. B.* 1995. V. 52. P. 3017–3019.
6. *Souza-Neto N.M., Ramos A.Y., Tolentino H.C.N., Martins A., Santos A.D.* Depth-dependent local structures in thin films unraveled by grazing-incidence X-ray absorption spectroscopy // *J. Appl. Cryst.* 2009. V. 42. P. 1158–1164.
7. *Vasin V.V., Ageev A.L.* Ill-Posed Problems with a priori Information. VSP, Utrecht. 1995. P. 255.
8. *Vasin V.V.* Irregular Nonlinear Operator Equations: Tikhonov’s Regularization and Iterative Approximation // *J. Inv. Ill-Posed Probl.* 2013. V. 21. P. 109.
9. *Babanov Y., Salamatov Y., Ustinov V.* A new interpretation of X-ray reflectivity in real space for low contrast

- multilayer systems I. Mathematical algorithm and numerical simulations // *Superlattices Microstruct.* 2014. V. 74. P. 100.
10. *Займан Дж.* Модели беспорядка. Пер. с англ. М.: Мир, 1982. 592 с.
  11. *Babanov Yu.A., Salamatov Yu.A., Ustinov V.V., Mukhamedzhanov E.Kh.* Diagnostics of the atomic structure of multilayer metallic nanoheterostructures from reflectometry data: A new approach to low-contrast systems // *Phys. Solid State.* 2014. V. 56. P. 1904–1915.
  12. *Babanov Y., Salamatov Y., Vasin V., Ustinov V.* The phase problem for X-ray specular reflectivity from thin films: A new approach // *Superlattices Microstruct.* 2015. V. 82. P. 612–622.
  13. *Booth C.H., Bridges F.* Improved self-absorption correction for fluorescence measurements of extended X-ray absorption fine-structure // *Physica Scripta.* 2005. V. T115. P. 202–204.
  14. *Babanov Yu.A., Salamatov Yu.A., Mukhamedzhanov E.Kh.* Variable angle XAFS study of multilayer nanostructure: Determination of selective concentration profile and depth-dependent partial atomic distributions // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2009. V. 190. P. 012030.
  15. *Babanov Yu.A., Vasin V.V., Ageev A.L., Ershov N.V.* Regular Method in X-Ray Scattering Analysis of Amorphous and Liquid Metals // *Phys. Status Sol. B.* 1981. V. 105. P. 747.
  16. *Babanov Yu.A., Ponomarev D.A., Ustinov V.V., Baranov A.N., Zubavichus Ya.V.* Local atomic structure of solid solutions with overlapping shells by EXAFS: The regularization method // *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 2016. V. 211. P. 1–12.