

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ЯДЕРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ «МИФИ»

**Ф.С. Джепаров, Д.В. Львов**

**НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ  
КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД**

*Рекомендовано УМО «Ядерные физика и технологии»  
в качестве учебного пособия  
для студентов высших учебных заведений*

Москва 2012

УДК 539.171.4:538.9 (075)  
ББК 22.386я7  
Д 40

Джепаров Ф.С., Львов Д.В. **Нейтронные исследования конденсированных сред:** Учебное пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2012. – 188 с.

Изложены основы теории рассеяния медленных нейтронов и описаны базовые экспериментальные установки для проведения нейтронных исследований конденсированных сред. Понятия и подходы нерелятивистской теории рассеяния изложены в применении к рассеянию нейтронов: доказана оптическая теорема, получены формула Борна и квазипотенциал Ферми. Рассмотрено брэгговское рассеяние нейтронов на кристаллах, показано существование изотопической и спиновой некогерентности. Большое внимание уделено методу малоуглового рассеяния, который служит для изучения наномасштабной структуры вещества и активно развивается в настоящее время. Рассмотрены основные нейтронооптические явления, а также основанные на них нейтроноды и поляризаторы нейтронов. Описаны основные методы монохроматизации и детектирования нейтронов. Приведены схемы основных нейтронографических и нейтронных спектроскопических, малоугловых и интерферометрических установок.

Предназначено для студентов, специализирующихся в области физики конденсированных сред и нейтронной физики.

Подготовлено в рамках Программы создания и развития НИЯУ МИФИ.

Рецензенты: д-р физ.-мат. наук Ю.Г. Абов, д-р физ.-мат. наук С.В. Степанов

ISBN 978-5-7262-1760-4

© Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 2012

## Введение

Данное пособие имеет целью подготовку студентов к самостоятельной научной работе и, в первую очередь, к чтению современной литературы по нейтронно-физическим исследованиям конденсированных сред. Оно в значительной степени опирается, в первую очередь, на замечательную монографию [1], которая со временем практически не потеряла своей актуальности, а также на работы [2–6] и, в меньшей степени, на работы [7–11].

Нейтроны классифицируют в зависимости от их энергии как показано в табл. В1.

Таблица В1

Классификация нейтронов в зависимости от их энергии

| Нейтроны       | Энергия $E$ , эВ             | Скорость $v$ , см/с | Ср. длина волны $\lambda$ , см | Ср. температура $T_{\text{ср}}$ , К |
|----------------|------------------------------|---------------------|--------------------------------|-------------------------------------|
| Быстрые        | $> 10^5$                     | $> 1,4 \times 10^9$ | $< 10^{-12}$                   | $10^9$                              |
| Промежуточные  | $10^4 - 10^5$                | $1,4 \times 10^3$   | $3 \times 10^{-11}$            | $10^8$                              |
| Резонансные    | $0,5 - 10^4$                 | $1,4 \times 10^7$   | $3 \times 10^{-10}$            | $10^6$                              |
| Тепловые       | $5 \times 10^{-3} - 0,5$     | $2 \times 10^5$     | $2 \times 10^{-8}$             | $10^3$                              |
| Холодные       | $10^{-7} - 5 \times 10^{-3}$ | $4,4 \times 10^4$   | $9 \times 10^{-8}$             | 1                                   |
| Ультрахолодные | $< 10^{-7}$                  | $< 4,4 \times 10^2$ | $9 \times 10^{-6}$             | $10^{-3}$                           |

В исследованиях конденсированных сред используют тепловые и холодные нейтроны, часто их называют медленными нейтронами. Приведённые значения граничных энергий конечно в достаточной степени условны.

В основе применения медленных нейтронов, т. е. нейтронов с энергией, не превышающей долей электронвольта, в физике конденсированных сред лежит совпадение следующих фактов.

Нейтроны не имеют заряда и обладают малым по атомным масштабам сечением поглощения в веществе. Поэтому они практически беспрепятственно проникают в плотные тела.

Длина волны нейтрона соизмерима с межатомными расстояниями, что дает возможность изучать структуру вещества. Упругое рассеяние нейтронов на упорядоченных структурах приводит к хо-

рошо наблюдаемым и чрезвычайно информативным когерентным эффектом.

Энергия медленных нейтронов соответствует энергии химической связи и теплового движения атомов в кристаллах и жидкостях. Таким образом, энергия нейтронов недостаточно велика для разрушения вещества при упругом столкновении с его атомами, но она вполне достаточна для изучения спектров возбуждений на основе измерения неупругого рассеяния нейтронов.

Сечение магнитного рассеяния нейтронов на атомных электронах соизмеримо с сечением ядерного рассеяния, что позволяет эффективно исследовать магнитные структуры.

Сечение рассеяния нейтронов на атоме существенно зависит от зарядового и массового чисел, но, в отличие от сечения рассеяния рентгеновских лучей, имеет один порядок величины для всех атомов. Это оставляет нейтроны вне конкуренции в исследовании легких элементов.

При захвате нейтронов в образцах образуются новые радиоактивные ядра, изучение излучения которых дает важную дополнительную информацию о веществе и процессах в нем. На этой основе осуществляются исследования методами бета-ЯМР спектроскопии и резонансной гамма-спектроскопии.

Нейтроны сверхнизких энергий, называемые ультрахолодными, чувствительны к свойствам поверхностного слоя вещества толщиной порядка  $100 \text{ \AA}$ . На этой основе в наши дни создается новый метод исследования статических и динамических свойств поверхностей.

Ярко выраженные волновые свойства медленных нейтронов обуславливают целый ряд явлений, имеющих типичный оптический характер, а именно: преломление нейтронных волн на границе двух сред, полное внутреннее отражение, дифракцию, рассеяние на малые углы. Эти явления служат хорошей иллюстрацией волновых свойств нейтрона как микрочастицы.

Нейтронные исследования конденсированных сред были начаты в 50-х годах прошлого века и с тех пор неуклонно расширяются. В настоящее время рассеяние медленных нейтронов представляет собой один из основных методов экспериментального изучения физики конденсированного состояния.

Можно указать несколько основных направлений применения рассеяния медленных нейтронов в исследованиях конденсированных сред. Во-первых, медленные нейтроны успешно применяются для анализа атомной структуры вещества в тех случаях, когда использование рентгеновских лучей или электронов представляется неудобным или просто невозможно. В качестве примера можно отметить нейтронографию водородсодержащих соединений и сплавов из элементов с близкими атомными номерами.

Во-вторых, медленные нейтроны широко применяются для изучения атомных движений в кристаллах и жидкостях. Так, например, анализ данных по рассеянию медленных нейтронов позволяет восстановить спектр колебательных частот кристаллической решетки, а также определить кривые дисперсии фононов. В жидкостях, где атомная динамика особенно сложна, рассеяние медленных нейтронов позволяет уже теперь сделать ряд ценных заключений относительно характера движения атомов (или молекул), например, о степени квазикристалличности этого движения, об особенностях механизма диффузии.

В-третьих, медленные нейтроны являются уникальным инструментом изучения физики магнитных материалов. Так, нейтронные исследования позволили: а) установить факт существования и характер упорядоченной антипараллельной магнитной структуры в антиферромагнетиках; б) определять ориентацию магнитных моментов атомов магнетиков по отношению к кристаллографическим плоскостям и осям; в) изучать магнитную динамику кристаллов (рассеяние нейтронов на спиновых волнах и критическое магнитное рассеяние).

Существенно также то, что медленные нейтроны можно применять для производства в веществе радиоактивных ядер-зондов, излучение которых несет информацию о локальных полях на этих ядрах, и, тем самым, о структуре конденсированных сред и движениях в них. На этом, в частности, основана бета-ЯМР спектроскопия.

Медленные нейтроны достаточно широко используются также и в ядерно-физических исследованиях. Рассеяние медленных нейтронов применяется для измерения амплитуд ядерного рассеяния на различных изотопах. С помощью медленных нейтронов исследовался ряд важных ядерно-физических проблем, таких как спино-

вая зависимость ядерных сил, нейтрон-протонное взаимодействие, специфическое нейтрон-электронное притяжение.

Отметим, что изучение особенностей рассеяния медленных нейтронов в веществе существенно для понимания процесса замедления нейтронов в области низких энергий, когда необходимо принимать во внимание двусторонний обмен энергией между нейтронами и атомами замедлителя. Процесс установления равновесия нейтронов с замедлителем называют термализацией нейтронов. Понимание деталей этого процесса важно для расчета атомных реакторов на тепловых нейтронах.

### **Основные процессы взаимодействия медленных нейтронов с веществом**

Взаимодействие нейтронного излучения с веществом имеет двоякую природу. Во-первых, имеет место *ядерное взаимодействие* нейтронов с ядрами атомов вещества. Во-вторых, несмотря на отсутствие у нейтрона электрического заряда, имеет место *электромагнитное взаимодействие*. Оно обусловлено наличием у нейтрона магнитного дипольного момента.

Можно указать несколько процессов электромагнитного взаимодействия нейтронов с веществом:

а) взаимодействие магнитного момента нейтрона с магнитным моментом электронной оболочки атома (ниже это взаимодействие будем называть просто *магнитным взаимодействием*);

б) взаимодействие магнитного момента нейтрона с магнитным моментом атомного ядра;

в) взаимодействие магнитного момента нейтрона с электрическим полем ядра — так называемое *взаимодействие Швингера* (в системе координат движущегося нейтрона на него действует неоднородное магнитное поле  $(\mathbf{E} \times \mathbf{v})/c$ , где  $\mathbf{E}$  — электрическое поле ядра, а  $\mathbf{v}$  — скорость нейтрона).

Основным процессом взаимодействия является ядерное взаимодействие. В области энергий медленных нейтронов становится существенным также взаимодействие магнитных моментов нейтрона и электронной оболочки (*магнитное взаимодействие*). Остальные процессы взаимодействия играют заметную роль только в

некоторых специальных случаях (в специально поставленных опытах).

Во взаимодействиях нейтронов с ядрами принято выделять два предельных случая: когда процесс проходит либо через образование промежуточного возбужденного ядра с последующим его распадом по одному из возможных каналов; либо без образования промежуточного ядра, когда нейтрон рассеивается непосредственно силовым полем ядра (случай потенциального рассеяния). Каналами распада промежуточного ядра могут быть упругое и неупругое рассеяние нейтронов, испускание  $\gamma$ -квантов (процесс радиационного захвата нейтрона ядром), испускание заряженных частиц (реакции  $(n, p)$  и  $(n, \alpha)$ ), деление ядра. В области энергий медленных нейтронов неупругое рассеяние отсутствует, захват нейтрона с последующим делением ядра наблюдается только для нескольких тяжелых изотопов ( $U^{233}$ ,  $U^{235}$ ,  $Pu^{239}$ ,  $Am^{241}$ ,  $Am^{242}$ ), а реакции с испусканием заряженных частиц идут лишь на нескольких легких изотопах (реакции:  $He^3(n, p)T^3$ ,  $Li^6(n, \alpha)T^3$ ,  $B^{10}(n, \alpha)Li^7$ ). Поэтому в случае медленных нейтронов можно, как правило, ограничиться рассмотрением только двух каналов распада промежуточного ядра: радиационным захватом и резонансным упругим рассеянием.

При изучении конденсированных сред основным является процесс потенциального упругого рассеяния, идущего без образования промежуточного ядра. Заметим, что термин *упругое рассеяние* понимается здесь в том смысле, в каком он употребляется в задаче двух тел: при столкновении нейтрона с ядром их суммарная кинетическая энергия не изменяется. При этом энергия нейтрона в лабораторной системе координат изменяется.

# Глава 1. Теория рассеяния нейтронов на ядрах

## ***§1. Фазовая теория рассеяния и ее применение к рассеянию нейтронов на ядрах***

### **Амплитуда и сечение рассеяния**

Рассмотрим рассеяние медленного нейтрона на атомном ядре, считая последнее закрепленным в начале координат. Координату нейтрона обозначим через  $\mathbf{r}$ . Сначала будем пренебрегать наличием спинов. Тогда волновая функция нейтрона будет функцией  $\mathbf{r}$  и времени  $t$ :  $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ , где  $\psi$  – комплексное число. Распространение нейтронов описывается временным уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(\mathbf{r})\psi, \quad (1.1)$$

где  $m$  – масса нейтрона,  $U(\mathbf{r})$  – потенциальная энергия взаимодействия нейтрона с веществом. Получим выражение для плотности потока частиц. Запишем комплексно-сопряженное уравнение к уравнению Шредингера (1.1)

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + U(r)\psi^*. \quad (1.2)$$

Умножим уравнение (1.1) на  $\psi^*$ , уравнение (1.2) на  $\psi$ , и вычтем из первого второе

$$i\hbar \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*).$$

Преобразовав данное выражение, получаем

$$i\hbar \frac{\partial (\psi^* \psi)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{div}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*).$$



Так как плотность вероятности нахождения частицы в точке с координатой  $\mathbf{r}$  равна  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ , находим

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{2im} \operatorname{div}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = 0.$$

Таким образом,  $\rho$  (называемое обычно просто плотностью частиц) удовлетворяет уравнению непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0,$$

где вектор плотности потока частиц

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \operatorname{grad} \psi^* - \psi^* \operatorname{grad} \psi). \quad (1.3)$$

Важнейшей величиной при описании процесса упругого рассеяния частиц является сечение рассеяния. Дифференциальное сечение рассеяния называется отношение числа частиц, рассеянных в угол  $d\Omega$ , к плотности потока падающих частиц

$$d\sigma = \frac{j_{\text{scat}} dS}{j_{\text{in}}} = \frac{j_{\text{scat}} r^2 d\Omega}{j_{\text{in}}}. \quad (1.4)$$

Интегральное или полное сечение рассеяния получается интегрированием (1.4) по всем телесным углам

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (1.5)$$

Оно представляет собой отношение полной вероятности рассеяния частицы в единицу времени к плотности потока падающей волны.

Пусть вдоль оси  $OZ$  на мишень падает поток частиц. Свободная частица, движущаяся в положительном направлении оси  $OZ$ , описывается плоской волной  $\psi = \psi_0 = e^{ikz}$  с импульсом  $k$  и энергией  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Решение нестационарного уравнения Шредингера (1.1) с таким начальным условием имеет вид

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) \psi_0. \quad (1.6)$$

Длинновременная асимптотика делокализованного решения с начальным условием  $e^{ikz}$  будет иметь энергию  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ , определяемую поведением решения в основной части нормировочного объема, поэтому при больших  $t$  оно имеет вид

$\psi(t) = \exp(-iEt/\hbar)\psi(E)$ , а функцию  $\psi(E)$  можно вычислить по известной формуле Абеля как

$$\psi(E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{-\varepsilon t/\hbar} \exp(iEt/\hbar) \psi(t) = \frac{i\varepsilon}{E - H + i\varepsilon} \psi_0. \quad (1.7)$$

Для любых двух операторов  $A$  и  $B$  достаточно общего вида справедливо тождество

$$(A + B)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}B(A + B)^{-1}.$$

Поэтому, учитывая, что  $H = H_0 + U$ , где  $H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$  – гамильтониан свободной частицы, получаем:

$$\frac{1}{E - H + i\varepsilon} = \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} U \frac{1}{E - H + i\varepsilon}. \quad (1.8)$$

Очевидно, что  $i\varepsilon(E - H_0 + i\varepsilon)^{-1} \psi_0 = \psi_0$ , поэтому (1.7) с учетом (1.8) можно записать как

$$\psi(E) = \psi_0 + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} U \psi(E). \quad (1.9)$$

Это уравнение является основным в теории рассеяния. Оно известно, как уравнение Липпмана-Швингера, и однозначно определяет правила работы с сингулярностями резольвент  $(H - E)^{-1}$  и  $(H_0 - E)^{-1}$ .

Нетрудно видеть, что  $\psi(E)$  удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера  $(H - E)\psi(E) = 0$ .

Компоненты решения (1.6), соответствующие другим значениям энергии  $E_1 \neq E$  можно найти аналогично, вычисляя предел

$$\psi(E_1) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{\hbar} \int_0^{\infty} dt e^{-\varepsilon t/\hbar} \exp(iE_1 t/\hbar) \psi(t) = \frac{i\varepsilon}{E_1 - H + i\varepsilon} \psi_0. \quad (1.10)$$

Теперь  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (i\varepsilon / (E_1 - H_0 + i\varepsilon)) \psi_0 = 0$ . Поэтому уравнение Липпмана – Швингера для  $\psi(E_1)$  является однородным:

$$\psi(E_1) = \frac{1}{E_1 - H_0 + i\varepsilon} U \psi(E_1). \quad (1.9a)$$

К правилу работы с полюсами резольвент можно прийти и на основе решения уравнения Шредингера методом Лапласа. Действительно, введем функцию

$$\chi(\lambda) = \int_0^{\infty} dt \exp(-\lambda t) \psi(t),$$

представляющую собой преобразование Лапласа по времени от функции  $\psi(t)$ . Умножая обе части уравнения (1.1) на  $\exp(-\lambda t)$  и интегрируя по  $dt$ , получаем:

$$i\hbar(\lambda\chi(\lambda) - \psi_0) = H\chi(\lambda),$$

т.е. при преобразовании Лапласа дифференциальное уравнение переходит в алгебраическое. Решая его, находим

$$\chi(\lambda) = \frac{i\hbar}{i\hbar\lambda - H} \psi_0.$$

Как известно, волновая функция  $\psi(t)$  выражается через лаплас-образ  $\chi(\lambda)$  преобразованием Меллина:

$$\psi(t \geq 0) = \int_{\varepsilon - i\infty}^{\varepsilon + i\infty} \frac{d\lambda}{2\pi i} e^{\lambda t} \chi(\lambda),$$

причем в силу эрмитовости  $H$  можно положить  $\varepsilon \rightarrow +0$ .

Делая замену переменной интегрирования  $\lambda = (-iE + \varepsilon) / \hbar$ , на-  
ходим:

$$\psi(t \geq 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi\hbar} e^{-iEt/\hbar} \chi\left(\frac{-iE + \varepsilon}{\hbar}\right).$$

Здесь  $\chi\left(\frac{-iE + \varepsilon}{\hbar}\right) = \frac{i\hbar}{E - H + i\varepsilon} \psi_0$ . Правила обхода полюсов в

этом выражении те же, что и в формулах (1.7) – (1.10) и определяются только требованием эрмитовости гамильтониана и тем, что мы решаем эволюционную задачу с начальным условием.

В параграфе 2 будет показано, что

$$\langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} | \mathbf{r}' \rangle = -\frac{m}{2\pi} \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

поэтому в координатном представлении уравнение (1.9) имеет вид

$$\psi(E, \mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi} \int d^3r' \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(E, \mathbf{r}'). \quad (1.11)$$

Следовательно, при больших  $\mathbf{r}$ , где  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r + o(r)$ , решение уравнения (1.11) имеет вид

$$\psi = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1.12)$$

Здесь  $\theta$  - угол рассеяния, т. е. угол между направлением импульса падающих частиц и радиусом-вектором точки  $\mathbf{r}$ , в которой производится измерение потока частиц, рассеянных в результате взаимодействия с мишенью. Физический смысл этой формулы состоит в том, что на достаточно большом расстоянии от мишени, вне зоны взаимодействия, поток нерассеянных частиц, описываемых плоской волной  $\psi = e^{ikz}$ , будет складываться с потоком рассеянных частиц, описываемых расходящейся сферической волной  $\psi_s = \exp(ikr)/r$ . Выражение (1.12) является определением амплитуды рассеяния  $f(\theta)$ .

Плотность потока падающей волны согласно (1.3)

$$j_{in} = \frac{i\hbar}{2m} \left( e^{ikz} \frac{d}{dz} e^{-ikz} - e^{-ikz} \frac{d}{dz} e^{ikz} \right) = \frac{\hbar k}{m} = v, \quad (1.13)$$

а, подставляя в (1.7)  $\psi = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$ , находим радиальный поток  $j$  рассеянной сферической волны

$$j_{scat} = \frac{i\hbar}{2m} |f(\theta)|^2 \left( \frac{e^{ikr}}{r} \frac{d}{dr} \frac{e^{-ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{d}{dr} \frac{e^{ikr}}{r} \right) = v \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}. \quad (1.14)$$

В итоге из (1.4), (1.13) и (1.14) находим связь между амплитудой рассеяния и дифференциальным сечением рассеяния

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (1.15)$$

### Фазовая теория рассеяния

Силы взаимодействия между медленным нейтроном и ядром можно считать статическими и центральными. Это означает, что потенциал взаимодействия  $U$  зависит только от расстояния  $r$  между нейтроном и ядром и от взаимной ориентации спинов нейтрона и ядра

$$U(\mathbf{r}) = U(r).$$

Стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U(\mathbf{r})\psi = E\psi,$$

в этом случае удобно рассматривать в сферических координатах  $r, \theta, \varphi$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\psi) - \frac{\hat{L}^2}{r^2}\psi\right) + U(r)\psi = E\psi, \quad (1.16)$$

где  $\hat{L}^2$  – оператор квадрата углового момента. Решение данного уравнения имеет вид

$$\psi = \sum_{l,m} A_{lm} R_l(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (1.16a)$$

где  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  – сферические функции, являющиеся собственными функциями оператора квадрата углового момента:

$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ,  $l$  – значение углового момента и  $m$  – его проекция на ось  $z$ . Учитывая данное соотношение при подстановке (1.16) в (1.15), получаем уравнение на радиальную часть волновой функции:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rR_l) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l = 0. \quad (1.17)$$

После замены

$$R_l(r) = \frac{\chi_l(r)}{r} \quad (1.18)$$

оно совпадает с уравнением Шредингера для одномерного движения

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - U) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l = 0, \quad (1.19)$$

(где, однако, координата удовлетворяет условию  $r \geq 0$ ) в поле с потенциальной энергией

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2},$$

т.е. к потенциальной энергии добавляется так называемая центробежная энергия. В задаче рассеяния имеется выделенное направле-

ние – направление потока падающих частиц (ось  $z$ ). Очевидно, что решение уравнения Шредингера должно быть аксиально-симметричным относительно оси  $z$ . Всякое такое решение может быть представлено в виде суперпозиции волновых функций непрерывного спектра, отвечающих движению в данном поле частиц с заданной энергией  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  и орбитальными моментами с различными величинами  $l$  и равными нулю  $m$  (эти функции не зависят от азимутального угла  $\varphi$  вокруг оси  $z$ , т.е. аксиально-симметричны). Шаровые функции при  $m = 0$  с точностью до коэффициента равны полиномам Лежандра  $P_l(\cos \theta)$

$$Y_{l0} = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta).$$

Таким образом, искомая функция имеет форму

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l R_{kl}(r) Y_{l0} = \sum_{l=0}^{\infty} B_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta), \quad (1.20)$$

где  $B_l$  – постоянные. На больших расстояниях от рассеивателя можно пренебречь в уравнении Шредингера как потенциальной, так и центробежной энергией. Тогда (1.17) переходит в приближенное уравнение

$$\frac{1}{r} \frac{d^2(rR_{kl})}{dr^2} + k^2 R_{kl} = 0. \quad (1.21)$$

Общее решение этого уравнения

$$R_{kl} = \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) = \frac{(-i)^l e^{i(kr+\delta_l)} - i^l e^{-i(kr+\delta_l)}}{ir}, \quad (1.22)$$

где  $\delta_l$  – фазовый сдвиг, член  $-l\pi/2$  в аргументе синуса прибавлен для того, чтобы в отсутствие поля было  $\delta_l = 0$ . Волновая функция (1.22) имеет нормировку

$$\int_0^{\infty} r^2 R_{k'l} R_{kl} dr = \delta\left(\frac{k-k'}{2\pi}\right). \quad (1.23)$$

Фазы  $\delta_l$  являются функциями как от  $l$ , так и от  $k$ , и при малых значениях волнового вектора

$$\delta_l \sim k^{2l+1}. \quad (1.24)$$

Подставляя (1.22) в (1.20) получаем выражение для волновой функции вдали от рассеивателя

$$\psi = \frac{1}{ir} \sum_{l=0}^{\infty} B_l (-i)^l P_l(\cos \theta) \left[ e^{i(kr+\delta_l)} - (-1)^l e^{-i(kr+\delta_l)} \right].$$

Воспользуемся известной формулой разложения плоской волны по сферическим волнам

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \left( \frac{r}{k} \right)^l \left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\sin kr}{kr}. \quad (1.25)$$

На больших расстояниях она принимает асимптотическую форму

$$e^{ikz} \approx \frac{1}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left[ e^{ikr} + (-1)^{l+1} e^{-ikr} \right]. \quad (1.25a)$$

Согласно (1.12) разность  $\psi - e^{ikz}$  должна быть расходящейся сферической волной, т.е. все члены с  $e^{-ikr}$  должны исчезнуть. Для этого должно быть

$$B_l = \frac{1}{2k} (2l+1) i^l e^{i\delta_l}.$$

Для коэффициента же при  $e^{ikr} / r$  в этой разности, т.е. для амплитуды рассеяния, находим

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta). \quad (1.26)$$

Эта формула решает задачу о выражении амплитуды рассеяния через фазы  $\delta_l$ .

В случае рассеяния тепловых нейтронов на ядрах данная формула существенно упрощается. Из формул (1.24) и (1.26) видно, что если длина волны падающих частиц много больше размеров области взаимодействия, то с подавляющей вероятностью рассеиваются только частицы с моментом импульса, равным нулю. Поясним это утверждение, основываясь на квазиклассическом приближении. Момент импульса частицы равен произведению ее импульса  $p$  на прицельное расстояние  $\rho$ :

$$M = p\rho.$$

С другой стороны, момент  $M$  квантуется, и его возможные значения:

$$M_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Следовательно, и прицельные расстояния должны в некотором смысле квантоваться, т.е. каждому значению  $l$  соответствует прицельное расстояние

$$\rho_l = \frac{M_l}{p} = \frac{\hbar\sqrt{l(l+1)}}{p} = \frac{\lambda\sqrt{l(l+1)}}{2\pi}.$$

Для частиц с  $l=0$  (соответствующая компонента волновой функции называется  $s$ -волной) эффективное прицельное расстояние  $\rho=0$ . Для частиц с  $l=1$  ( $p$ -волна) и больше прицельное расстояние  $\rho_l \geq \lambda/\pi\sqrt{2}$ . Поэтому, если  $\lambda \gg r_0$ , то все частицы с  $l > 0$  не попадают в область взаимодействия и не рассеиваются.

Таким образом, из (1.26) для медленных нейтронов получаем:

$$f = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \sin \delta_0,$$

т.е. амплитуда рассеяния не зависит от угла рассеяния – рассеяние изотропно. Следовательно, полное сечение рассеяния равно произведению дифференциального сечения на полный телесный угол

$$\sigma_{sc} = 4\pi |f|^2 = 4\pi \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} \quad (1.27)$$

Так как согласно (1.24)  $\delta_0(k) \sim k$ , то для медленных нейтронов должен существовать конечный предел:

$$\lim_{k \rightarrow 0} f(k) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0(k)}{k} = -a. \quad (1.28)$$

Постоянная  $a$ , определяемая этим соотношением, имеет размерность длины и называется длиной рассеяния.

Чтобы пояснить смысл длины рассеяния, рассмотрим следующий пример. Возьмем простейшую модель ядра – глубокая потенциальная яма с постоянной энергией  $-V$  и размером  $r_0$ , т.е.  $U = -V$  при  $r \leq r_0$  и  $U = 0$  при  $r > r_0$ .

Запишем уравнение (1.19) для рассеяния тепловых нейтронов, т.е. положим  $l=0$

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right) \chi = 0, \quad (1.29)$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U).$$



Чтобы получить решение уравнения (1.29) при всех  $r \geq 0$ , надо решить его в областях больше и меньше  $r_0$  и затем «сшить» решения на границе.

1. Рассмотрим область  $r \leq r_0$ . Здесь  $E - U = E + V \approx V$ , так как потенциальная энергия ядерного взаимодействия  $V \sim 50$  МэВ, а кинетическая энергия тепловых нейтронов  $E \leq 0,1$  эВ. Уравнение (1.29) хорошо известно (например, из теории гармонических колебаний) и его общее решение имеет вид

$$\chi(r) = A \sin Kr + B \cos Kr, \quad K = \sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}}.$$

Однако в области  $r \leq r_0$  надо оставить только первое слагаемое

$$\chi(r) = A \sin Kr.$$

Часто это обосновывают тем, что волновая функция  $\psi$  должна быть конечна в нуле, а для этого должно быть  $\chi(0) = 0$ . Однако это требование не является обязательным, а второе слагаемое надо отбросить, поскольку соответствующая решению  $\chi(r) = B \cos Kr$  уравнения (1.29) радиальная часть волновой функции  $R(r) = \frac{B \cos Kr}{r}$  не удовлетворяет уравнению (1.17). Действительно, в следующем параграфе будет показано, что  $(\nabla^2 + K^2) \frac{\cos Kr}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$ , а не нулю, как требуется в уравнении (1.29).

2. В области  $r > r_0$  данная сингулярность отсутствует и  $\frac{\cos kr}{r}$  удовлетворяет уравнению (1.17). Соответственно общее решение (1.29) имеет вид

$$\chi(r) = B \sin(kr + \delta_0), \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \ll K.$$

Так как  $U$  конечна, то волновая функция и ее производная должны быть непрерывны во всем пространстве. Запишем эти условия в точке  $r = r_0$ :

$$\begin{cases} A \sin Kr_0 = B \sin(kr_0 + \delta_0), \\ AK \cos Kr_0 = Bk \cos(kr_0 + \delta_0). \end{cases}$$

Разделив первое уравнение системы на второе, имеем:

$$\frac{\chi(r_0)}{\chi'(r_0)} = \frac{1}{K} \operatorname{tg}(Kr_0) = \frac{1}{k} \operatorname{tg}(kr_0 + \delta_0) \approx r_0 - a. \quad (1.30)$$

Проведем к графику  $\chi(r)$  касательную в точке  $r_0$  как показано на рис. 1.1. Пусть она пересекает ось ОХ в точке с координатой  $a$  под углом  $\alpha$ . Тогда

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{\chi(r_0)}{r_0 - a} = \chi'(r_0). \quad (1.31)$$

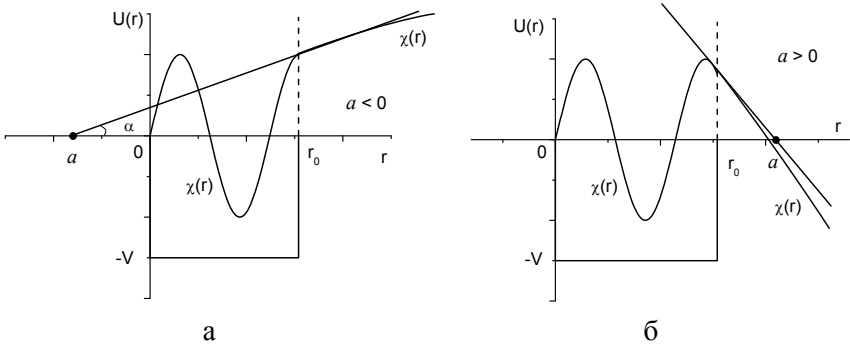


Рис. 1.1. Потенциал и волновая функция при рассеянии нейтрона на ядре для случаев отрицательной (а) и положительной (б) длин рассеяния.

Из соотношений (1.30) и (1.31) получаем:

$$r_0 - a = \frac{\chi(r_0)}{\chi'(r_0)} = \frac{1}{k} \operatorname{tg}(kr_0 + \delta_0). \quad (1.32)$$

Так как длина волны нейтрона много больше размера ядра, то  $kr_0 \ll 1$ . Из рис. 1.1 видно, что  $|a| \sim r_0$ , значит значение тангенса много меньше 1. Следовательно, так как фазу  $\delta_0$  можно выбрать в пределах  $0 < \delta_0 < \pi/2$ , то значение аргумента тангенса также много меньше 1 и его можно разложить в ряд. Ограничиваясь первым членом разложения, получаем:

$$r_0 - a = \frac{kr_0 + \delta_0}{k},$$

$$a = -\frac{\delta_0}{k}. \quad (1.33)$$

Сравнивая полученное выражение с (1.28) видим, что величина  $a$  является длиной рассеяния нейтрона.

Таким образом, мы получаем наглядный смысл длины рассеяния – длина отрезка, отсекаемого на оси абсцисс касательной, проведенной к волновой функции на границе ядра.

Исходя из графика видно, что если предположить, что угол наклона касательной является случайной величиной, то вероятность пересечения касательной оси абсцисс в области отрицательных значений меньше, чем в области положительных. Более точно можно оценить знак длины рассеяния исходя из следующей оценки. Из выражений (1.30) и (1.32) имеем:

$$a = r_0 \left( 1 - \frac{1}{Kr_0} \operatorname{tg}(Kr_0) \right). \quad (1.34)$$

Следовательно, для того, чтобы длина рассеяния была отрицательной, необходимо выполнение соотношения

$$\operatorname{tg}(Kr_0) > Kr_0. \quad (1.35)$$

В учебниках по ядерной физике для оценки радиуса ядра используют эмпирическую формулу  $r_0 \approx \alpha A^{1/3}$  Фм, где  $A$  – его массовое число, константа  $\alpha$  по данным различных пособий находится в пределах  $\alpha = 1,3 - 1,4$ , а длина измерена в стандартных для ядерной физики единицах – Ферми, причем  $1 \text{ Фм} = 10^{-13}$  см. При типичных значениях внутриядерного потенциала  $V \approx 40 - 50$  МэВ получается, что  $Kr_0 \approx (1,8 - 2,2) \cdot A^{1/3}$ . В результате почти для всех ядер периодической системы величина  $Kr_0$  пробегает значения от 2,9 до 14. Так как  $(Kr_0)_{\min} > \pi/2$ , неравенство (1.35) выполняется только в том случае, если  $Kr_0$  близко к нечетному кратному  $\pi/2$ :

$$Kr_0 = (2n + 1) \frac{\pi}{2} - \varphi, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

где  $\varphi$  – малая положительная величина. Положив

$$\operatorname{tg} Kr_0 = \operatorname{ctg} \varphi \approx \frac{1}{\varphi},$$

находим, что неравенство (1.35) выполняется, если  $\varphi$  лежит в интервале

$$0 < \varphi < \frac{1}{Kr_0}. \quad (1.36)$$

Область возможных значений  $Kr_0$  в несколько раз больше периода тангенсоиды  $\pi$ , поэтому вероятность того, что наудачу выбранное ядро будет иметь отрицательную длину рассеяния, можно оценить, если разделить среднюю величину интервала (1.36) на  $\pi$ :

$$w \approx \frac{1}{\langle Kr_0 \rangle \pi}.$$

Беря среднее значение атомного веса  $\langle A \rangle \approx 100$ , получаем  $\langle Kr_0 \rangle \approx 10$  и вероятность отрицательного значения длины рассеяния  $w \approx 3\%$ . Таким образом, для большинства ядер длина рассеяния должна быть положительна. Данный вывод полностью подтверждается экспериментом: ядер с положительной длиной рассеяния существенно больше, чем с отрицательной, причем по порядку величины модуль длины рассеяния равен размеру ядра.

Длины рассеяния некоторых элементов приведены в табл. 1.1.

Таблица 1.1

Длины рассеяния нейтронов в ферми

| <b>H</b> | <b>D</b> | <b>C</b> | <b>N</b> | <b>O</b> | <b>P</b> | <b>S</b> |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| -3.7406  | 6.671    | 6.6460   | 9.36     | 5.803    | 5.13     | 2.847    |

Приведенные в таблице длины рассеяния  $a$  отвечают случаю, когда атомы находятся в веществе и рассеяние нейтронов происходит без отдачи. При рассеянии нейтрона на свободном ядре длина

рассеяния будет равна  $a_f = \frac{A}{A+1} a$ . Для измерения сечения рассеяния принято использовать барн: 1 барн =  $10^{-24}$  см<sup>2</sup>.

### Оптическая теорема

Амплитуда рассеяния  $f = f' + i f''$  имеет мнимую часть  $f''$ . Величина мнимой части  $f$  следует из оптической теоремы, которая связывает ее с полным сечением рассеяния. Оптическая теорема выражает просто сохранение потока: полный поток падающих частиц (в нашем случае нейтронов), входящих в сферу радиуса  $r$ , равен сумме полных потоков выходящих и поглощенных частиц. Докажем оптическую теорему для рассеяния медленных нейтронов на ядрах, при этом  $l = 0$ . Часть падающей плоской волны  $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ , соответствующая  $s$ -нейтронам, равна:

$$\frac{1}{4\pi} \int \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\Omega = \frac{1}{2} \int_0^\pi \exp(ikr \cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{\exp(ikr) - \exp(-ikr)}{2ikr}.$$

Таким образом, учитывая только нейтроны с нулевым угловым моментом, для волновой функции имеем

$$\psi_s = \frac{i}{2k} \frac{e^{-ikr}}{r} + \left(f - \frac{i}{2k}\right) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (1.37)$$

Здесь первое слагаемое отвечает сходящейся, а второе – расходящейся волне. Согласно (1.12) плотность потока нейтронов, выходящих из рассеивающего центра (расположенного в начале координат) равна  $j_{out} = v |f - i/(2k)|^2 / r^2$ , а плотность входящего потока  $j_{in} = v |i/(2k)|^2 / r^2$ . Рассмотрим сферу с радиусом  $r$  и с центром в начале координат. Число нейтронов  $N_a$ , поглощенных ядром в единицу времени, равно разности числа нейтронов вошедших и вышедших из сферы:

$$N_a = j_{in} S - j_{out} S = 4\pi r^2 (j_{in} - j_{out}). \quad (1.38)$$

По аналогии с сечением рассеяния введем сечение поглощения  $\sigma_a$  как количество нейтронов, поглощенных в единицу времени, деленное на плотность падающего потока. Так как согласно (1.11) плотность падающего потока равна скорости нейтрона  $v$ , то

$$\sigma_a = N_a / v.$$

Подставляя в (1.38) выражения для плотностей входящего и выходящего потоков, находим:

$$\sigma_a = 4\pi(|i/(2k)|^2 - |f - i/(2k)|^2) = -4\pi|f|^2 + \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f. \quad (1.39)$$

Учитывая выражение (1.27) для полного сечения рассеяния, получаем оптическую теорему для рассеяния нейтронов на ядрах

$$\operatorname{Im} f = \frac{k}{4\pi} (\sigma_a + \sigma_{sc}) = \frac{k}{4\pi} \sigma_t, \quad (1.40)$$

где  $\sigma_t$  – полное сечение взаимодействия нейтрона с ядром. В более общем случае амплитуда рассеяния зависит от угла рассеяния  $f = f(\theta)$ , и оптическая теорема принимает вид

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_t. \quad (1.41)$$

Из оптической теоремы следует, что в отсутствие захвата нейтронов мнимая часть амплитуды рассеяния очень мала:

$$\left| \frac{f''}{f'} \right| = \left| \frac{k\sigma_t}{4\pi f'} \right| \approx |kf'| = 2\pi \frac{|f'|}{\lambda} \approx 2\pi \frac{|f|}{\lambda}. \quad (1.42)$$

Типичные значения  $f \approx 10^{-12}$  см,  $\lambda \approx 10^{-8}$  см; следовательно,  $|f''/f| \leq 10^{-3}$ , и  $f$  можно считать вещественным. Даже для ядра с очень большим сечением поглощения, такого, как  ${}^6\text{Li}$ , для которого сечение поглощения тепловых нейтронов с энергией  $E = 0,025$  эВ (и, соответственно, с длиной волны  $\lambda \approx 1,7 \cdot 10^{-8}$  см) равно  $\sigma_a = 940$  барн и  $f = -1,8 \cdot 10^{-13}$  см, имеем:

$$\left| \frac{f''}{f} \right| = \frac{\sigma_a}{2\lambda f} = \frac{940 \cdot 10^{-24}}{2 \cdot 1,7 \cdot 10^{-8} \cdot 1,8 \cdot 10^{-13}} = 0,15, \quad (1.43)$$

и пренебрежение в амплитуде рассеяния мнимой частью приводит к изменению сечения рассеяния всего лишь на 2%. Полное сечение в этой области  $\sigma_t \gg \sigma_{sc}$  и зависит от скорости нейтрона как  $\sigma_t \propto 1/v$ .

## §2. Борновское приближение. Квазипотенциал Ферми

Как мы видели, задача рассеяния сводится к уравнению Липпмана – Швингера (1.9), которое можно записать в форме

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \int d^3r' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'), \quad (2.1)$$

где введена функция Грина (пропагатор)

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{r} \left| \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} \right| \mathbf{r}' \right\rangle. \quad (2.2)$$

Нетрудно проверить, что функция Грина удовлетворяет уравнению

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.3)$$

Удостоверимся, что функция  $\psi(\mathbf{r})$  из (2.1) является решением стационарного уравнения Шредингера. Действительно,

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2)\psi &= (\nabla^2 + k^2)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \int d^3r' [(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = \\ &= \int d^3r' \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

Таким образом, решение уравнения Липпмана – Швингера является частным решением Шредингера, соответствующим задаче рассеяния. В частности, уравнение (2.1) имеет вид: падающая плоская волна + рассеянная волна. Следовательно, из него непосредственно возникает связь между амплитудой рассеяния и потенциалом взаимодействия.

Решим уравнение (2.3) и найдем функцию Грина. Из (2.3) формально получаем

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{\nabla^2 + k^2} \delta(\mathbf{r}).$$

Используя интегральное представление для  $\delta(\mathbf{r})$ , имеем:

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{\nabla^2 + k^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{k^2 - q^2}. \quad (2.4)$$

Для вычисления интеграла перейдем к сферическим координатам ( $d^3q = q^2 dq d\Omega$ ). Возьмем интеграл по направлению вектора  $\mathbf{q}$ :

$$\int d\Omega e^{iqr} = \frac{2\pi}{iqr} (e^{iqr} - e^{-iqr}). \quad (2.5)$$

Подставляя данное выражение в (2.4), получаем

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2 ir} \int_0^\infty \frac{q dq}{k^2 - q^2} (e^{iqr} - e^{-iqr}). \quad (2.6)$$

Это выражение имеет сингулярность в знаменателе и требует доопределения, которое уже содержалось в формуле (2.2):  $k^2$  следует понимать как  $k^2 \rightarrow k^2 + i\varepsilon$ ,  $\varepsilon \rightarrow +0$ . Второе слагаемое в (2.6) можно преобразовать, используя равенство

$$-\int_0^\infty \frac{q dq}{k^2 - q^2} e^{-iqr} = \int_{-\infty}^0 \frac{q dq}{k^2 - q^2} e^{iqr}.$$

Теперь во втором слагаемом подынтегральное выражение такое же, как в первом. Объединяя первое и второе слагаемые, имеем

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^2 ir} \int_{-\infty}^\infty \frac{q dq}{k^2 - q^2 + i\varepsilon} e^{iqr}. \quad (2.7)$$

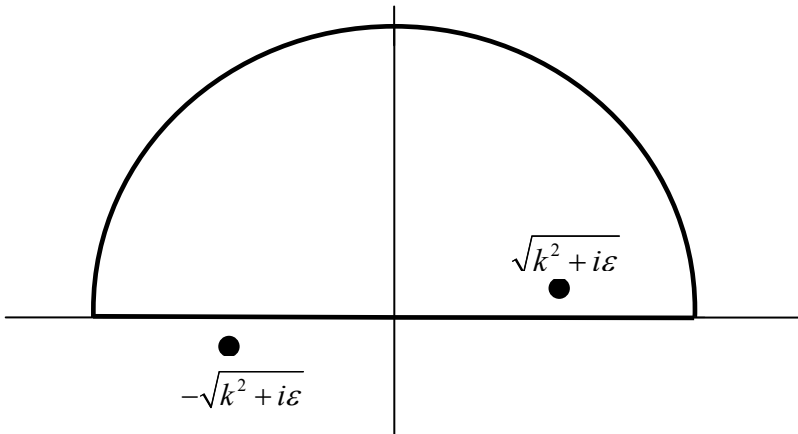


Рис. 2.1. Контур интегрирования и полюса (к вычислению интеграла (2.7)).

Данный интеграл может быть вычислен с помощью теоремы о вычетах.

Так как  $r > 0$ , то подынтегральное выражение экспоненциально мало в верхней полуплоскости  $q$ . Поэтому можно замкнуть контур



интегрирования в верхнюю полуплоскость, как показано на рис. 2.1. Согласно теореме о вычетах интеграл (2.7) равен сумме вычетов внутри замкнутого контура, умноженной на  $2\pi i$ . В данном случае есть один полюс в точке  $\sqrt{k^2 + i\varepsilon}$ . В итоге в пределе  $\varepsilon \rightarrow 0$  получаем:

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Окончательно получаем решение уравнения (2.3):

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.8)$$

Этот пропагатор соответствует расходящейся рассеянной сферической волне. Заметим, что если к энергии взять отрицательную мнимую добавку, т.е.  $k^2 \rightarrow k^2 - i\varepsilon$ , то получим пропагатор сходящейся сферической волны  $e^{-ikr}/r$ . К такому выбору мнимой добавки мы бы пришли, если бы строили решение  $\psi(t) = \exp(-\frac{i}{\hbar}Ht)\psi_0$  для больших отрицательных  $t$ .

Вернемся к анализу уравнения (2.1). При детектировании рассеянных нейтронов результат определяется значением функции  $\psi(\mathbf{r})$  на макроскопических расстояниях, много больших размера образца, т.е.  $r \gg r'$ . Возьмем приближенное значение пропагатора (2.8) с учетом данного условия, а именно: в знаменателе просто положим  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r$ , а в числителе учтем первый порядок разложения по малому параметру  $r'/r$ :

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2} \approx \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}'} = r\sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r^2}} \approx r - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r}.$$

Подставляя приближенное значение пропагатора в (2.2), получаем:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikr} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{ikr - ik\mathbf{r}'\mathbf{r}/r}}{r} U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}'). \quad (2.9)$$

Таким образом, волновая функция представляет собой сумму падающей плоской волны и рассеянной сферической

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikr} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (2.10)$$

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'), \quad (2.11)$$

где  $\mathbf{k}' = k(\mathbf{r}/r)$  – волновой вектор волны, рассеянной в направлении  $\mathbf{r}$ ,  $\theta$  – угол между  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ , т.е. угол рассеяния.

Мы перешли от уравнения Шредингера к соотношениям (2.10), (2.11) с использованием только условия  $r \gg r'$ . Однако если рассеивающий потенциал  $U(\mathbf{r})$  мал, то из (2.11) сразу получаем выражение для амплитуды рассеяния. В самом деле, если  $U(\mathbf{r})$  мал, то рассеянная волна много меньше падающей. Соответственно, в (2.11) можно положить  $\psi(\mathbf{r}') \approx e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'}$ . При этом мы считаем, что рассеивается на ядрах только падающая плоская волна, и пренебрегаем тем, что рассеянная волна (нейтрон) может рассеяться вторично. В итоге получаем выражение для амплитуды рассеяния в борновском приближении:

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

где мы ввели вектор рассеяния  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  с абсолютной величиной

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2}.$$

Видно, что в борновском приближении формула для амплитуды рассеяния довольно проста: амплитуда пропорциональна фурье-образу потенциала рассеяния.

Оценим условия применимости борновского приближения [9, §126]. При его выводе мы фактически решаем уравнение (2.9) итерациями – берем первое приближение для волновой функции в виде плоской волны (первое слагаемое), подставляем в интеграл во втором слагаемом и находим поправку. Соответственно, в правой части (2.1) второе слагаемое (поправка) должно быть много меньше первого. Оценивая интеграл в (2.1) получаем, что борновское приближение применимо при выполнении условий:

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{md^2}, \quad \text{если } kd \leq 1, \quad (2.13a)$$

$$|U| \ll \frac{\hbar v}{d} = \frac{\hbar^2}{md^2} kd, \quad \text{если } kd \gg 1. \quad (2.13b)$$

где  $d$  – радиус действия поля  $U(\mathbf{r})$ , а  $U$  – порядок его величины в основной области его существования,  $v$  – скорость нейтрона.

Выражение  $\hbar^2 / md^2$  имеет простой физический смысл – это кинетическая энергия, которой обладала бы частица, заключенная в объеме с линейными размерами  $d$ , поскольку, согласно соотношению неопределенностей ее импульс был бы  $\sim \hbar / d$ . Из условий (2.13) видно, что если борновское приближение применимо при малых скоростях нейтронов, то оно верно и при больших скоростях. Часто борновское приближение применяют для анализа рассеяния на неоднородностях структуры вещества, имеющих надатомные размеры ( $> 1$  нм). В этом случае  $kd \gg 1$  и надо пользоваться критерием (2.136).

Во многих случаях рассеяния происходит на сферически-симметричном потенциале, когда  $U(\mathbf{r}) = U(r)$ . При этом в (2.12) можно провести интегрирование по направлению вектора  $\mathbf{r}$ . Для амплитуды рассеяния, зависящей в данном случае только от модуля вектора рассеяния, получаем:

$$f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) \frac{\sin qr}{q} r dr. \quad (2.14)$$

Рассмотрим рассеяние в борновском приближении в предельных случаях малых ( $kd \ll 1$ ) и больших ( $kd \gg 1$ ) скоростей.

При малых скоростях можно в интеграле (2.12) положить  $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \approx 1$ , так что амплитуда рассеяния

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r U(\mathbf{r}),$$

а если  $U = U(r)$ , то

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) r^2 dr.$$

Рассеяние оказывается здесь изотропным по направлениям и не зависящим от скорости, что находится в согласии с результатами § 1.

В обратном предельном случае больших скоростей рассеяние резко анизотропно и направлено вперед, в узком конусе с углом раствора  $\Delta\theta \sim 1/kd$ . Таким образом, рассеяние в этом случае является малоугловым; оно будет подробно рассмотрено в § 7.

Наконец, возведя в квадрат модуль амплитуды рассеяния, получим следующую формулу для сечения рассеяния в элемент телесного угла  $d\Omega$  :

$$d\sigma = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left| \int U(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^3r \right|^2 d\Omega. \quad (2.15)$$

Борновское приближение часто используется при описании рассеяния нейтронов в конденсированных средах. Например, при маломугловом рассеянии нейтронов на неоднородностях структуры вещества условия применимости этого приближения обычно выполнены. Однако при рассеянии медленных нейтронов на ядрах, как было показано в предыдущем параграфе, замена  $\psi(\mathbf{r})$  на  $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$  недопустима. Ядерное взаимодействие  $U(\mathbf{r})$  является сильным и значительно искажает волновую функцию в пределах своего радиуса действия. С другой стороны, вычислить  $U(\mathbf{r})$  почти для всех ядер не удастся, и найти амплитуду ядерного рассеяния из первых принципов не представляется возможным. Но если использовать амплитуду ядерного рассеяния  $f = -a$  как уже известную величину, то в дальнейшем можно ввести фиктивный потенциал (псевдопотенциал Ферми). Обычно его записывают в виде

$$U_F(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a \delta(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

Потенциал  $U_F$  не является истинным взаимодействием между ядром и нейтроном. Полагая, однако, что он является таким взаимодействием, а также принимая, что это взаимодействие слабое, получаем в борновском приближении (2.12)

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U_F(\mathbf{r}) = -a \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r}) = -a, \quad (2.17)$$

что совпадает с определением длины рассеяния. Другими словами, неверный потенциал  $U_F$  после подстановки в выражение для неверного (борновского) приближения дает правильный результат [2]. Это делает потенциал Ферми (2.16) очень удобным при описании реального рассеяния тепловых нейтронов ядрами, закрепленными и движущимися в конденсированных средах с тепловыми скоростями.

В действительности более правильная формула для псевдопотенциала имеет вид

$$U_F(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a\delta_\varepsilon(\mathbf{r}) \quad , \quad (2.18)$$

где  $\delta_\varepsilon(\mathbf{r})$  – «размазанная» дельта-функция, которую можно выбрать, например, в форме  $\delta_\varepsilon(\mathbf{r}) = (2\pi\varepsilon^2)^{-3/2} \exp(-r^2 / (2\varepsilon^2))$ .

Эта формула применима, если  $ka \ll k\varepsilon \ll 1$ . Первое из этих неравенств непосредственно следует из (2.13а), а второе необходимо для того, чтобы можно было пренебречь рассеянием с ненулевым орбитальным моментом, и, соответственно, амплитуда  $f$  не зависела от угла  $\theta$ .

### **§3. Эйкональное приближение. Нейтроннооптический потенциал**

Эйкональное приближение (или приближение высоких энергий) применяется для вычисления амплитуды рассеяния столь быстрых частиц, что

$$|U| \ll E \sim \frac{\hbar^2}{md^2} (kd)^2, \quad (kd \gg 1),$$

но, в то же время, ещё

$$|U| \geq \frac{\hbar^2}{md^2} kd = \frac{\hbar v}{d} \sim \frac{E}{kd}.$$

Здесь  $d$  – радиус действия поля  $U(\mathbf{r})$ ,  $v$  – скорость нейтрона. В таком случае мы имеем дело с рассеянием быстрых частиц, к которому, однако, неприменимо борновское приближение. Для вычисления амплитуды рассеяния в приближении эйконала надо использовать более общую, чем (2.12) формулу [9, §131]:

$$f = \frac{k}{2\pi i} \int [S(\mathbf{g}) - 1] e^{-i\mathbf{q}\mathbf{g}} d^2g, \quad (3.1)$$

$$S(\mathbf{g}) = \exp[2i\delta(\mathbf{g})], \quad \delta(\mathbf{g}) = -\frac{1}{2\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{g}, z) dz,$$

( $\mathbf{g}$  – радиус-вектор в плоскости  $xy$ ). Функция  $\delta(\mathbf{g})$  представляет собой сдвиг фазы волновой функции вдоль прямолинейной траектории. Если энергия налетающих нейтронов настолько велика, что  $\delta \sim \frac{|U|d}{\hbar v} \ll 1$ , то, разложив  $S - 1 \approx 2i\delta$ , получим:

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U e^{-i\mathbf{q}\mathbf{g}} d^2 g dz.$$

Так как при рассеянии быстрых частиц вектор рассеяния ортогонален волновому вектору падающей волны (подробно данный вопрос будет рассмотрен в § 7), то данное выражение совпадает с формулой (2.12) для вычисления амплитуды рассеяния в борновском приближении.

### **Эйкональное приближение для рассеяния нейтронов в твердых телах**

При использовании эйконального приближения в задачах многократного рассеяния встает проблема выбора потенциала рассеяния. Псевдопотенциал Ферми, применимый в борновском приближении, не может быть использован, как это показано ниже. Рассмотрим для определенности рассеяние нейтронов на порошке. Соответственно, объектом, на котором надо рассмотреть рассеяние нейтронов, является одна гранула порошка размером от 10 нм до 10 мкм. Получим выражение для потенциала гранулы в случае, когда ядра расположены неупорядоченно.

Если рассеивающий центр находится в точке  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ , а не в начале координат, асимптотическое выражение для функции  $\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_\perp, r_3)$ , а именно  $\exp(ikr_3) + (f/r)\exp(ikr)$ , вследствие изменения начала отсчета принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp[ik(r_3 - x_3)] + f \frac{\exp[ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}|]}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|}. \quad (3.2)$$

Мы можем использовать вместо этого выражения волновую функцию

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3) + f \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \exp(ikx_3), \quad (3.3)$$

которая отличается от (3.2) только фазовым множителем. Существенно, что при s-рассеянии это соотношение справедливо всюду вне области взаимодействия. В (3.3) видно, что расходящаяся волна пропорциональна значению амплитуды падающей (иницирующей) волны  $\varphi(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3)$  в точке расположения рассеивателя. При рассеянии на системе, состоящей из  $N > 1$  неподвижных центров, инициирующая волна не совпадает с падающей и должна быть определена независимо. С учетом сферической симметрии рассеянной волны в (3.3) очевидно, что инициирующая волна на центре, расположенном в точке  $\mathbf{r}$ , удовлетворяет уравнению

$$\varphi(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3) + f \sum_{\mathbf{x} \neq \mathbf{r}} \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \varphi(\mathbf{x}). \quad (3.4)$$

Уравнение (3.4) просто выражает тот факт, что, в силу принципа суперпозиции, инициирующая волна на любом центре складывается из падающей волны и волн, пришедших от других центров. Соответственно, волновая функция представляется соотношением

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3) + f \sum_{\mathbf{x}} \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \varphi(\mathbf{x}), \quad (3.5)$$

где  $\mathbf{r}$  – любая точка вне центров рассеяния. Уравнения (3.4) и (3.5) называются системой уравнений многократного рассеяния. Существенно, что  $\psi(\mathbf{r})$  в (3.5) выражается только через амплитуду рассеяния и не зависит от деталей потенциала. Если бы мы попытались применить псевдопотенциал (2.18) и стандартную теорию эйконала (3.1), то получили бы ответ, существенно зависящий от  $\varepsilon$ , который, теперь, опираясь на решение (3.5), мы должны признать неверным.

Для получения решения уравнений (3.4) заметим, что, так как длина волны тепловых нейтронов порядка межатомного расстояния  $\lambda \sim r_0$ , то показатель экспоненты в (3.5) меняется на величину  $\gtrsim 1$  при переходе от одного члена суммы к другому. Следовательно

но, соседние слагаемые в суммах (3.4) и (3.5) существенно отличаются и суммы не могут быть заменены интегралами.

При рассеянии на объектах, протяженность которых существенно превосходит длину волны нейтронов, полезно ввести вместо быстро осциллирующей  $\varphi(\mathbf{r})$  более медленную функцию  $\chi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) \exp(-ikr_3)$ , которая удовлетворяет системе уравнений

$$\chi(\mathbf{r}) = 1 + f \sum_{\mathbf{x} \neq \mathbf{r}} \frac{\exp\left(ik\left[|\mathbf{r} - \mathbf{x}| - (r_3 - x_3)\right]\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \chi(\mathbf{x}). \quad (3.6)$$

Ясно, что в силу малости отношения  $f/r_0$  и в силу медленного спада ядра уравнения (3.6), в сумму в (3.6) дает вклад много слагаемых. Показатель экспоненты равен нулю, если ортогональная к начальному импульсу компонента  $(\mathbf{r} - \mathbf{x})_{\perp}$  равна нулю, а  $r_3 - x_3 > 0$ . Соответственно слагаемые с  $\mathbf{x}$  из окрестности этого отрезка дают основной вклад в сумму. Так как в этой окрестности  $(\mathbf{r} - \mathbf{x})_{\perp}$  мало, а  $r_3 - x_3$  пробегает значения от нуля до толщины гранулы, то для большинства слагаемых отношение  $|(\mathbf{r} - \mathbf{x})_{\perp}|/(r_3 - x_3)$  мало. Следовательно, для показателя экспоненты в (3.6) имеем:

$$ik \left[ \sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{x})_{\perp}^2 + (r_3 - x_3)^2} - (r_3 - x_3) \right] \approx ik \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{x})_{\perp}^2}{r_3 - x_3}.$$

Таким образом, для главных членов суммы (3.6) соседние слагаемые отличаются мало вследствие наличия в показателе экспоненты малого параметра  $|(\mathbf{r} - \mathbf{x})_{\perp}|/(r_3 - x_3)$ , и для них при  $\lambda \gtrsim r_0$  можно заменить сумму на интеграл:

$$\chi(\mathbf{r}) = 1 + f \int_V \frac{d^3x}{\Omega} \frac{\exp\left(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}| - ik(r_3 - x_3)\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \chi(\mathbf{x}). \quad (3.7)$$

Здесь  $\Omega$  – объем, приходящийся на один рассеиватель,  $V$  – объем гранулы. Теперь иницирующая волна определена для всех  $\mathbf{r}$ . Уравнение (3.7) можно представить в форме

$$\chi(\mathbf{r}) = 1 - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x \frac{\exp\left(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}| - ik(r_3 - x_3)\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} U_a(\mathbf{x}) \chi(\mathbf{x}), \quad (3.8)$$



где введен эффективный нейтронооптический потенциал

$$U_a(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2 f}{m\Omega} \mathcal{G}(\mathbf{r} \in V). \quad (3.9)$$

Эффективный потенциал  $U_a(\mathbf{r})$  получается усреднением квази-потенциала Ферми  $U_F(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi\hbar^2 f}{m} \sum_{\mathbf{x}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})$  по объему. Здесь, как и ранее, предполагается, что  $\mathbf{x}$  пробегает по положениям рассеивателей. Потенциал  $U_a(\mathbf{r})$  много меньше, чем кинетическая энергия нейтронов  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ , поэтому для нахождения амплитуды рассеяния можно применить результаты (3.1) метода эйконала, переведя его предварительно в уравнение Шредингера с потенциалом (3.9).

Их можно получить и непосредственно из анализа интеграла в уравнении (3.8). Вычисляем интеграл по  $\mathbf{x}_\perp$  в главном порядке по большому  $k$ . При этом существенны малые  $(\mathbf{r} - \mathbf{x})_\perp$ , т.е. в подинтегральном выражении в (3.7) можно заменить  $\mathbf{x}_\perp$  на  $\mathbf{r}_\perp$  в аргументе медленно меняющейся функции  $\chi$ .

$$\chi(\mathbf{r}) = 1 + f \int_V \frac{d^3 x \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}| - ik(r_3 - x_3))}{\Omega |\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \chi(\mathbf{r}_\perp, x_3). \quad (3.10)$$

Интеграл по поперечным координатам можно вычислить переходом в импульсное представление, используя (2.4) и (2.8), получаем:

$$\begin{aligned} & \int d^2 x_\perp \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}|) / |\mathbf{r} - \mathbf{x}| = \\ & = -\int d^2 x_\perp \frac{1}{2\pi^2} \int d^3 q \frac{e^{iq(\mathbf{r} - \mathbf{x})}}{k^2 - q^2} = \frac{2\pi i}{k} \exp(ik|r_3 - x_3|). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Здесь предполагено, что поперечные размеры гранулы достаточно велики, чтобы интеграл по  $\mathbf{x}_\perp$  можно было брать в бесконечных пределах. Подставляя (3.11) в (3.10) и учитывая сделанное при замене суммы на интеграл требование  $r_3 - x_3 > 0$ , мы приходим к уравнению

$$\chi(\mathbf{r}) = 1 + \frac{2\pi i f}{\Omega k} \int_{-\infty}^{r_3} dx_3 \chi(\mathbf{r}_\perp, x_3) \mathcal{G}((\mathbf{r}_\perp, x_3) \in V). \quad (3.12)$$

Дифференцируя по  $r_3$ , получаем, что внутри гранулы  $\chi(\mathbf{r})$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial r_3} \chi(\mathbf{r}) = \frac{2\pi i f}{\Omega k} \mathcal{G}(\mathbf{r} \in V) \chi(\mathbf{r}) = -\frac{i}{\hbar v} U_a(\mathbf{r}) \chi(\mathbf{r}), \quad (3.13)$$

с условием, что если  $z(\mathbf{r}_\perp)$  – начальная точка пересечения невозмущенной прямолинейной траектории нейтрона с гранулой, то в ней  $\chi(\mathbf{r}_\perp, z(\mathbf{r}_\perp)) = 1$ . Уравнение (3.13) представляет собой стандартное уравнение эйконала для среднего потенциала  $U_a(\mathbf{r})$ . Его решение

$$\chi(\mathbf{r}) = \exp\left(\frac{2\pi i f}{\Omega k} (r_3 - z(\mathbf{r}_\perp))\right) = \exp\left(-i \int_{-\infty}^{r_3} \frac{dz}{\hbar v} U_a(\mathbf{r})\right). \quad (3.14)$$

Выражение для волновой функции (3.5) можно записать в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3) \left( 1 + f \sum_{\mathbf{x}} \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}| - ik(r_3 - x_3))}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \chi(\mathbf{x}) \right), \quad (3.15)$$

и, с той же точностью, что и при выводе уравнения (3.7), фигурирующая здесь сумма может быть заменена интегралом:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \exp(ikr_3) \left( 1 + \frac{f}{\Omega} \int_V d^3x \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}| - ik(r_3 - x_3))}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \chi(\mathbf{x}) \right) = \\ &= \exp(ikr_3) \left( 1 - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}| - ik(r_3 - x_3))}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} U_a(\mathbf{x}) \chi(\mathbf{x}) \right). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Найдем вид волновой функции вдали от рассеивающего образца, т.е. при  $r \gg x$ . Аналогично переходу от (2.8) к (2.9) получаем

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(ikr)}{r} \int d^3x e^{-ik'x} U_a(\mathbf{x}) e^{ikx_3} \chi(\mathbf{x}). \quad (3.17)$$

Видно, что волновая функция представляет собой сумму плоской и сферической волн. Для амплитуды рассеяния имеем

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} U_a(\mathbf{x}) \chi(\mathbf{x}), \quad (3.18)$$

где  $\mathbf{q}$  – вектор рассеяния. Перепишывая (3.13) в виде

$$U_a(\mathbf{x}) \chi(\mathbf{x}) = i\hbar v \frac{\partial \chi}{\partial x_3} \quad (3.19)$$

и учитывая, что при рассеянии быстрых частиц вектор рассеяния ортогонален волновому вектору падающей волны, получаем

$$f = \frac{k}{2\pi i} \int d^3 x e^{-iqg} \frac{\partial \chi}{\partial x_3} = \frac{k}{2\pi i} \int d^2 g e^{-iqg} \left( \exp \left[ -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\hbar v} U_a(\mathbf{r}) \right] - 1 \right), \quad (3.20)$$

что совпадает с выражением (3.1). Полученные формулы справедливы и для малоуглового рассеяния на кристаллических зернах. Спецификой рассеяния на кристаллах, как будет показано в §5, является возникновение брэгговских пиков. Так как гранулы ориентированы хаотически, то вклад брэгговского рассеяния сводится к возрастанию фона и уменьшению интенсивности прямо прошедшего пучка. Соответственно, вклад брэгговского рассеяния в малоугловое рассеяние пренебрежимо мал.

Таким образом, вычисление волновой функции для задачи рассеяния нейтронов на системе неподвижных центров может быть проведено в приближении эйконала, но примененном не к истинному ядерному потенциалу и не к квазипотенциалу Ферми, а к среднему потенциалу (3.9). Так как размер области, где средний потенциал отличен от нуля (в рассмотренном частном случае это размер гранулы порошка) много больше длины волны нейтрона, то рассеяние будет малоугловым. Такое рассеяние будет подробно рассмотрено в § 7.

## § 4. Псевдомагнитное взаимодействие нейтронов с ядрами\*

До сих пор, рассматривая рассеяние нейтрона, мы не учитывали наличие у него спина. Это имело то основание, что если спин ядра равен нулю, то спиновое состояние нейтрона не влияет на взаимодействие. Если же ядро имеет некоторый спин  $I$ , то сильное взаимодействие нейтрона с ядром зависит от взаимной ориентации их спинов. Так как спин нейтрона  $S = 1/2$ , то модуль полного момента  $\mathbf{j} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$  может принимать два значения:  $j = I + 1/2$  (спины параллельны) и  $j = I - 1/2$  (спины антипараллельны). Параллельному и антипараллельному направлению спинов отвечают две амплитуды рассеяния:  $a_+$  и  $a_-$ . Соответственно, длина (и амплитуда) рассеяния в данном случае является оператором, действующим на спиновую часть волновой функции

$$a = b_0 + b(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}). \quad (4.1)$$

В частности, формула (3.3) теперь переходит в

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3)\chi_{in} - (b_0 + b(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}))\chi_{in} \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{x}|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{x}|} \exp(ikx_3),$$

где  $\chi_{in}$  – спиновая часть волновой функции начального состояния.

Оператор  $a = a(\mathbf{S}, \mathbf{I})$  линеен по операторам проекций спина  $S_\alpha$ , что является следствием равенства  $S = 1/2$ . В остальном же формула (4.1) следует из инвариантности амплитуды  $s$ -рассеяния к вращениям.

Первое слагаемое в (4.1) не содержит спиновых операторов, называется когерентной частью амплитуды рассеяния, и определяет амплитуду волны, когерентно рассеянной ядром. Действительно, эта часть рассеянной волны имеет ту же спиновую функцию, что и падающая волна, поэтому рассеянная и падающая волна когерентно складываются. Второй член содержит скалярное произведение операторов спина нейтрона и ядра:  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}$ . Под действием этих операторов спиновая часть волновой функции меняется, следовательно, вторая часть рассеянной волны имеет, вообще говоря, другую

---

\* Материал данного параграфа основан на монографиях [1] и [6].

спиновую зависимость. Естественно, что компоненты конечного состояния, ортогональные по спиновым переменным к начальному состоянию, не интерферируют с ним.

Найдем связь между амплитудами  $a_+$ ,  $a_-$  и коэффициентами  $b_0$ ,  $b$ . Возводя соотношение  $\mathbf{j} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$  в квадрат, находим

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{I} = \frac{1}{2}(\mathbf{j}^2 - \mathbf{I}^2 - \mathbf{S}^2) = \frac{1}{2}\left(j(j+1) - I(I+1) - \frac{3}{4}\right).$$

При параллельном направлении спинов

$$(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I})_+ = \frac{1}{2}\left((I + \frac{1}{2})(I + \frac{3}{2}) - I(I+1) - \frac{3}{4}\right) = \frac{I}{2}.$$

Подставляя данный результат в (4.1), получаем

$$a_+ = b_0 + b \frac{I}{2}. \quad (4.2)$$

При антипараллельном направлении спинов

$$(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I})_- = \frac{1}{2}\left((I - \frac{1}{2})(I + \frac{1}{2}) - I(I+1) - \frac{3}{4}\right) = -\frac{I+1}{2}.$$

$$a_- = b_0 - b \frac{I+1}{2}. \quad (4.3)$$

Обратив данные формулы, получим

$$b_0 = \frac{I+1}{2I+1}a_+ + \frac{I}{2I+1}a_-, \quad (4.4)$$

$$b = \frac{2(a_+ - a_-)}{2I+1}. \quad (4.5)$$

Наличие двух различных амплитуд рассеяния приводит к появлению некогерентного рассеяния. При этом когерентное рассеяние определяется средней длиной рассеяния, а некогерентное – дисперсией длины рассеяния. Отметим, что «наивное» предположение, что средняя длина рассеяния равна  $(a_+ + a_-)/2$ , оказывается неверным. Действительно, вероятности того, что у двух частиц спины будут параллельны и антипараллельны, неодинаковы. Если спины ядра и нейтрона параллельны, то полный момент  $j_+ = I + 1/2$ . Ему отвечает  $N_+ = 2j_+ + 1 = 2I + 2$  волновых функций. Соответственно антипараллельному направлению спинов отвечает  $N_- = 2j_- + 1 = 2I$

состояний. Общее число состояний нейтрона и ядра равно  $N_t = (2S + 1)(2I + 1) = 2(2I + 1)$ .

Средняя амплитуда, определяющая когерентное рассеяние неполяризованных нейтронов, равна:

$$\langle a \rangle = a_{coh} = \frac{N_+}{N_t} a_+ + \frac{N_-}{N_t} a_- = b_0. \quad (4.6)$$

Полное сечение рассеяния нейтрона на ядре согласно (1.27) равно произведению квадрата модуля длины рассеяния на полный телесный угол

$$\sigma_s = 4\pi \langle |b_0 + b(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I})|^2 \rangle, \quad (4.7)$$

где теперь, однако, надо провести усреднение  $\langle \dots \rangle$  по спиновым операторам. Проведем усреднение, считая, что пучок нейтронов не поляризован. Так как операторы  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{I}$  коммутируют, квадрат суммы содержит три члена: сумму квадратов и удвоенное произведение. Квадрат первого члена определяет сечение когерентного рассеяния

$$\sigma_s^{coh} = 4\pi b_0^2. \quad (4.8)$$

Удвоенное произведение после усреднения обращается в нуль благодаря неполяризованности пучка нейтронов (так как  $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$ ).

Квадрат второго члена содержит оператор

$$(\mathbf{SI})^2 = (S_x I_x + S_y I_y + S_z I_z)^2. \quad (4.9)$$

Раскрывая скобки, находим, что смешанные члены после усреднения снова обращаются в нуль, ибо содержат произведения типа  $S_x S_y$ . Квадраты же, учитывая коммутативность операторов  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{I}$  и независимость спинов нейтрона и ядра (усреднение происходит по спиновым волновым функциям до рассеяния), можно преобразовать следующим образом

$$\langle (S_x I_x)^2 \rangle = \langle S_x^2 \rangle \langle I_x^2 \rangle.$$

Вследствие эквивалентности всех направлений для неполяризованных нейтронов

$$\langle S_x^2 \rangle = \langle S_y^2 \rangle = \langle S_z^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle S^2 \rangle = \frac{1}{4}. \quad (4.10)$$

Поэтому

$$\langle (\mathbf{SI})^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle (I_x^2 + I_y^2 + I_z^2) \rangle = \frac{1}{4} I(I+1).$$

Подставляя это в (4.7), находим сечение некогерентного рассеяния

$$\sigma_s^{inc} = 4\pi b^2 \frac{I(I+1)}{4} = 4\pi (a_+ - a_-)^2 \frac{I(I+1)}{(2I+1)^2}. \quad (4.11)$$

Полное сечение рассеяния есть

$$\begin{aligned} \sigma_s &= \sigma_s^{coh} + \sigma_s^{inc} = 4\pi b_0^2 + \pi I(I+1)b^2 = \\ &= 4\pi \left[ \frac{I+1}{2I+1} a_+^2 + \frac{I}{2I+1} a_-^2 \right]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Последнее выражение можно переписать в виде

$$\sigma_s = p_+ 4\pi a_+^2 + p_- 4\pi a_-^2,$$

где вероятности параллельной и антипараллельной ориентации неполяризованного нейтрона относительно спина ядра

$$p_+ = \frac{I+1}{2I+1}, \quad p_- = \frac{I}{2I+1}.$$

Введем по аналогии с длиной когерентного рассеяния длину некогерентного рассеяния  $a^{inc} > 0$ , определенную так, что

$$\sigma_s^{inc} = 4\pi (a^{inc})^2.$$

Тогда

$$a^{coh} = p_+ a_+ + p_- a_-, \quad a^{inc} = |a_+ - a_-| \sqrt{p_+ p_-}.$$

В более удобной форме записи

$$a^{coh} = \langle a \rangle, \quad \langle a^{inc} \rangle^2 = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2. \quad (4.13)$$

Полученные результаты верны для пучка неполяризованных нейтронов независимо от того, поляризованы ядра или нет. Если ядра неполяризованы, то можно повторить все выкладки, поменяв при усреднении роль операторов  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{I}$ , и получится тот же результат независимо от спинового состояния нейтронов. Но если поляризованы и нейтроны, и ядра, соотношение между когерентным и некогерентным рассеянием меняется. Если, например, ядра и нейтроны полностью поляризованы в одном направлении, то все рассеяние когерентно и характеризуется длиной рассеяния  $a_+$ .

Рассмотрим простой пример, иллюстрирующий различие между когерентным и некогерентным рассеянием. Пусть нейтронная волна падает на два одинаковых ядра с независимыми спинами и разделенных расстоянием  $r$  таким, что  $kb_0 \ll kr \ll 1$ . Первое неравенство позволяет пренебречь перерассеянием волны между ядрами, а второе гарантирует, что разность фаз рассеянных на ядрах волн мала. Тогда амплитуда рассеянной волны будет суммой амплитуд волн, рассеянных ядрами, т.е. суммой двух выражений (4.1)

$$2b_0 + b\mathbf{S}(\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2).$$

После возведения в квадрат и усреднения первое слагаемое даст  $4\sigma^{coh}$ , а второе –  $2\sigma^{inc}$ , так как в квадрате суммы  $(\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2)^2$  удвоенное произведение при усреднении по спинам ядер обращается в нуль. Таким образом, при когерентном рассеянии складываются амплитуды, а при некогерентном – интенсивности (сечения).

Рассмотрим теперь рассеяние поляризованных нейтронов и определим вероятность того, что в процессе рассеяния спин нейтрона сменит свое направление. Обозначим через  $\chi_+$  и  $\chi_-$  собственные функции оператора  $S_z$ :

$$S_z\chi_+(S) = \frac{1}{2}\chi_+(S), \quad S_z\chi_-(S) = -\frac{1}{2}\chi_-(S).$$

Два других оператора проекции спина действуют, как известно, на функцию  $\chi_+$  следующим образом:

$$S_x\chi_+(S) = \frac{1}{2}\chi_-(S),$$

$$S_y\chi_+(S) = \frac{i}{2}\chi_-(S).$$

Пусть нейтроны поляризованы по оси  $z$ . Тогда спиновая часть волновой функции  $\varphi(S, I)$  падающей волны будет иметь вид

$$\varphi_{in}(S, I) = \chi_+(S)\lambda(I). \quad (4.14)$$

Действуя оператором амплитуды (4.1) на спиновую функцию (4.14) и собирая множители при  $\chi_+$  и  $\chi_-$ , получаем амплитуду рассеянной волны

$$\varphi_{out} = \left\{ \left[ b_0 + \frac{b}{2}I_z \right] \chi_+(S) + \frac{b}{2}(I_x + iI_y)\chi_-(S) \right\} \lambda(I). \quad (4.15)$$



Отсюда получаем сечение рассеяния без изменения проекции спина

$$\sigma'_s = 4\pi \left\langle \left[ b_0 + \frac{b}{2} I_z \right]^2 \right\rangle = 4\pi \left\langle b_0^2 + b_0 b I_z + \frac{b^4}{4} I_z^2 \right\rangle \quad (4.16)$$

и с изменением проекции спина

$$\begin{aligned} \sigma''_s &= 4\pi \left\langle \left( \frac{b}{2} \right)^2 (I_x + iI_y)^+ (I_x + iI_y) \right\rangle = \\ &= 4\pi b^2 \langle I(I+1) - I_z^2 - I_z \rangle, \end{aligned} \quad (4.17)$$

где скобки  $\langle \dots \rangle$  обозначают квантовомеханическое усреднение по спиновой функции ядра, а также, если нужно, и статистическое усреднение по возможным спиновым функциям ядра. При выводе (4.17) мы воспользовались коммутационным соотношением для  $I_x$ ,  $I_y$  ( $[I_x, I_y] = iI_z$ ) и тем обстоятельством, что

$$I_x^2 + I_y^2 + I_z^2 = I(I+1).$$

Результат усреднения в формулах (4.16) и (4.17) существенно зависит от спинового состояния ядер. Например, если ядра полностью поляризованы в том же направлении, что и нейтроны, то

$$\langle I_z \rangle = I, \quad \langle I_z^2 \rangle = I^2$$

и, как видно из (4.17), сечение рассеяния с переворотом спина обращается в нуль. Причина этого заключается в законе сохранения проекции полного момента на ось  $z$ . До рассеяния она была равна

$I + \frac{1}{2}$ , следовательно, такой же она должна остаться и после рас-

сеяния, а это возможно только в том случае, если оба спина направлены по оси  $z$ . Если ядро находится в чистом состоянии  $|m\rangle$ ,

где  $I_z |m\rangle = m |m\rangle$ , то, как нетрудно убедиться, максимального

значения  $\sigma''_s$  достигает при  $m = -\frac{1}{2}$  для полуцелого  $I$  и при  $m = 0$

или  $m = -1$  для целого  $I$ . Для полностью неполяризованных ядер

$$\langle I_z \rangle = 0, \quad \langle I_z^2 \rangle = \frac{1}{3} I(I+1).$$

Тогда из (4.16) и (4.17) с учетом выражений для когерентного и некогерентного сечений (4.8), (4.11) находим

$$\sigma'_s = \sigma_s^{coh} + \frac{1}{3} \sigma_s^{inc}, \quad (4.18)$$

$$\sigma''_s = \frac{2}{3} \sigma_s^{inc}. \quad (4.19)$$

Таким образом, сечение рассеяния без переворота спина складывается из когерентного сечения (что совершенно естественно) и одной трети некогерентного сечения. Существование некогерентного рассеяния без переворота спина на первый взгляд может показаться странным, ибо если не меняется проекция спина нейтрона, то не меняется и проекция спина ядра. Следовательно, невозможно определить, на каком именно ядре рассеялся нейтрон, и рассеяние, казалось бы, должно быть когерентным. Здесь дело в том, что амплитуда волны, описывающей некогерентное рассеяние без переворота спина, а именно

$$\frac{b}{2} I_z \lambda(I) \chi_+(S)$$

зависит от спинового состояния ядра  $\lambda(I)$ . Следовательно, хотя рассеянная волна будет содержать ту же спиновую зависимость  $\varphi_m(S, I)$ , что и падающая волна, однако амплитуда рассеянной волны будет зависеть от спинового состояния ядра, и при рассеянии на ядрах, спины которых направлены случайно, амплитуда будет также случайно меняться от ядра к ядру, а это значит, что рассеяние некогерентно.

## §5. Дифракция нейтронов. Изотопическая и спиновая некогерентность

От рассмотрения рассеяния нейтронов на одном ядре перейдем к однократному рассеянию на образце с реалистическими размерами, много большими длины волны нейтрона. Пусть имеется группа ядер, находящихся в точках с координатами  $\mathbf{r}_i$ . Из соотношения (3.3) следует, что волновая функция нейтрона в этом случае имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \sum_i a_i \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_i) \frac{\exp[ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}, \quad (5.1)$$

где  $a_i$  – длина рассеяния  $i$ -го ядра. Координаты  $\mathbf{r}_i$  лежат внутри образца, размер которого всегда много меньше расстояния до детектора. Расположим начало координат в геометрическом центре образца. Наблюдаемые величины зависят от волновой функции  $\psi(\mathbf{r})$  на месте детектора, поэтому в (5.1)  $r \gg r_i$ . При этом

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| \approx r - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}_i}{r}. \quad (5.2)$$

Пусть  $\mathbf{k}' = k(\mathbf{r}/r)$ . С учетом этого (5.1) принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \frac{\exp(ikr)}{r} \sum_i a_i \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i), \quad (5.3)$$

где  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  – изменение волнового вектора нейтрона при рассеянии. Коэффициент при сферической волне равен амплитуде рассеяния. Значит, для длины рассеяния на образце имеем

$$A = \sum_i a_i \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i). \quad (5.4)$$

Между рассеянием единичным ядром и ядерным рассеянием на образце существует большое различие: если первое изотропно, то второе, очевидно, не изотропно. Заметим, что из данного результата следует, что взаимодействие нейтрона с ансамблем ядер характеризуется псевдопотенциалом Ферми

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_i a_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (5.5)$$

Действительно, подставляя эту энергию в формулу Борна (2.12), получаем для длины рассеяния выражение (5.4). Дифференциальное сечение рассеяния, следующее из (5.4), имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A|^2 = \sum_{i,j} a_i a_j^* \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \quad (5.6)$$

Предположим сначала для простоты, что мишень состоит из ядер одного сорта, спин которых равен нулю. Тогда все коэффициенты  $a_i$  имеют одну и ту же величину  $a$ , а выражение (5.6) можно переписать в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |a|^2 \sum_{i,j} \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \quad (5.7)$$

Предположим далее, что мишень представляет собою кристалл с одним атомом в элементарной ячейке и линейными размерами много большими, чем  $q^{-1}$ . Тогда двойная сумма в (5.7) сводится к  $N \sum_i \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i)$ , где  $N$  – число рассеивающих ядер, а сумма берется по всем ячейкам. Хорошо известно, что при  $N \rightarrow \infty$  эта сумма обращается в нуль, если вектор  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  не является вектором обратной решетки  $\mathbf{s}$ . Можно показать [6], что

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = N |a|^2 \sum_i \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i) = \frac{N |a|^2}{v_0} (2\pi)^3 \sum_{\mathbf{s}} \delta(\mathbf{s} - \mathbf{q}), \quad (5.8)$$

где  $v_0$  — объем элементарной ячейки. Мы видим, что рассеяние сильно анизотропно и имеет место лишь для определенных ориентаций волновых векторов падающих и рассеянных нейтронов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  – оно реализуется при таких  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ , что  $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{s}$ . Различные пики рассеяния в направлении  $\mathbf{k}'$ , возникающие при соответствующей ориентации вектора  $\mathbf{k}$  по отношению к кристаллу, называют брэгговскими пиками. Другого рассеяния, помимо брэгговского, не существует. Можно сказать, что рассеяние полностью когерентно. Условия  $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{s}$ ,  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$  требуют, чтобы векторы  $\mathbf{k}$

и  $\mathbf{k}'$  составляли с плоскостью решетки, перпендикулярной вектору  $\mathbf{s}$ , один и тот же угол  $\theta$  и выполнялось равенство  $|\mathbf{s}| = 2k \sin \theta$  или  $|\mathbf{s}| = (4\pi \sin \theta) / \lambda$ . Отсюда следует, что, если  $\lambda > 4\pi / s_0$ , где  $s_0$  — наименьший вектор обратной решетки, брэгговское рассеяние не имеет места. Длина волны  $\lambda = 4\pi / s_0$  называется длиной волны обреза.

По определению вектора обратной решетки  $\mathbf{sr} = 2\pi n$ , где  $n$  — целое число. Соответственно, вся кристаллическая решетка разбивается на систему параллельных плоскостей, ортогональных вектору  $\mathbf{s}$ . Расстояние  $d$  между соседними плоскостями равно  $d = 2\pi / s_0$ . Наличие  $\delta$ -функций в (5.8) приводит к условию  $\mathbf{s} = \mathbf{q}$ , из которого, выбирая векторы обратной решетки в виде  $s = 2\pi n / d$ , получаем, что  $2k \sin \theta = 2\pi n / d$ . Выражая волновой вектор через длину волны, получаем известное условие Брэгга

$$2d \sin \theta = n\lambda. \quad (5.9)$$

Выражение (5.8), соответствующее бесконечно узким и бесконечно высоким брэгговским пикам, является следствием использованного борновского приближения (это так называемая кинематическая теория дифракции). При этом не учитывается трансформация иницирующей волны при прохождении через вещество, что верно лишь для очень малых кристаллов. Дифракция нейтронов на не малых кристаллах описывается динамической теорией дифракции (см., например, [32]), проводящей к ненулевой ширине брэгговского пика.

На опыте отраженные лучи получают двумя способами, различающимися ориентацией кристаллических плоскостей в кристалле и установкой кристалла по отношению к первичному пучку. В первом способе кристаллические плоскости ориентированы параллельно поверхности кристалла и отраженные нейтроны выходят со стороны падающего пучка, как показано на рис. 5.1а. Этот способ установки кристалла называют геометрией Брэгга (на отражение). В другом способе, называемом геометрией Лауэ (на прохождение), кристаллические плоскости ориентированы ортогонально поверхности (рис. 5.1б). При этом отраженные нейтроны делятся на два пучка и выходят из кристалла со стороны, противоположной падающему пучку.

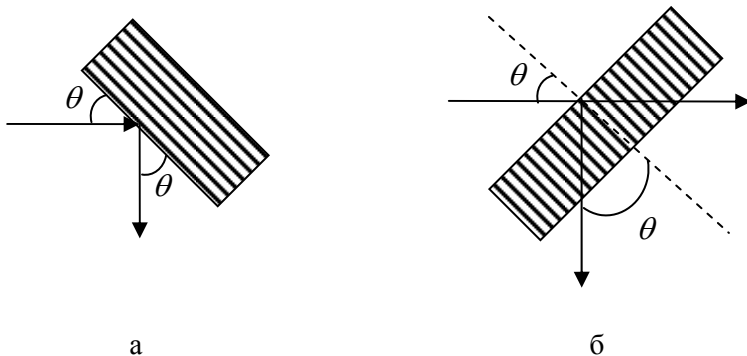


Рис. 5.1. Дифракция нейтронов по Брэггу (а) и по Лауэ (б).

Ограничение, заключающееся в том, что элементарная ячейка содержит один атом, может быть снято. Предположим, что элементарная ячейка содержит  $M$  атомов, занимающих внутри ячейки положения  $\mathbf{d}_1, \dots, \mathbf{d}_\alpha, \dots, \mathbf{d}_M$ , ядра которых имеют длины рассеяния  $a_1, \dots, a_\alpha, \dots, a_M$ . Предположим также, что каждый сорт атомов представлен только одним изотопом. Легко показать, что выражение (5.8) остается справедливым, если длину рассеяния  $a$  заменить длиной рассеяния элементарной ячейки:

$$a \rightarrow F(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha=1}^M a_\alpha \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{d}_\alpha). \quad (5.10)$$

### Изотопическая некогерентность

Рассмотрим теперь ситуацию, когда кристалл, в котором на элементарную ячейку приходится один атом, содержит несколько изотопов, распределенных хаотически. Пусть  $a_1, a_2, \dots, a_\nu$  — их различные длины рассеяния, а  $C_1, C_2, \dots, C_\nu$  — относительные концентрации изотопов, так что  $\sum C_\nu = 1$ . (Следует заметить, что в уравнении (5.6)  $a_i$  — длина рассеяния ядром, находящимся в узле  $i$ , в то время как  $a_\nu$  — длина рассеяния ядром изотопа  $\nu$ .) В хорошем приближении изотопы распределены хаотически, поэтому корре-

ляции между относительными положениями  $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  и произведениями длин рассеяния  $a_i^* a_j$  не существует. Ядерная мишень, содержащая большое число ядер, может рассматриваться как статистический ансамбль, поэтому мы можем усреднить правую часть (5.6), а именно  $a_i a_j^* \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]$ , по случайным положениям изотопов

$$\langle a_i a_j^* \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \rangle = \langle a_i a_j^* \rangle \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)].$$

Разделяя члены с  $i = j$  и  $i \neq j$ , уравнение (5.6) можно привести к виду

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_i \langle |a_i|^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle a_i a_j^* \rangle \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \quad (5.11)$$

Такое разделение связано с тем, что усреднение произведения длин рассеяния и квадрата длины рассеяния приводят к разным результатам, а именно

$$\langle a_i a_j^* \rangle_{i \neq j} = \sum_{\nu, \nu'} C_\nu C_{\nu'} a_\nu a_{\nu'}^* = \langle |a\rangle|^2, \quad \langle |a_i|^2 \rangle = \sum_\nu C_\nu |a_\nu|^2 = \langle |a|^2 \rangle.$$

К правой части уравнения (5.11) можно прибавить и одновременно вычесть выражение  $N \langle |a\rangle|^2$ . Тогда

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= N \left\{ \langle |a|^2 \rangle - \langle |a\rangle|^2 \right\} + \langle |a\rangle|^2 \sum_{i,j} \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] = \\ &= N \left\{ \langle |a|^2 \rangle - \langle |a\rangle|^2 \right\} + N \langle |a\rangle|^2 \sum_i \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Второй член в (5.12) согласно формуле (5.8) приводит к брэгговскому рассеянию с когерентной амплитудой  $\langle a \rangle = \sum_\nu C_\nu a_\nu$ . Но теперь имеется и изотропное рассеяние, называемое некогерентным, с сечением рассеяния

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неког}} = N \left\{ \langle |a|^2 \rangle - \langle |a\rangle|^2 \right\} = N \left\{ \sum_\nu C_\nu |a_\nu|^2 - \left| \sum_\nu C_\nu a_\nu \right|^2 \right\}.$$

Обобщение на решетку, содержащую более чем один атом в элементарной ячейке, производится непосредственно в длине рассеяния, определяемой выражением (5.10), длина  $a_\alpha$  для каждого атомного узла  $\mathbf{d}_\alpha$  в элементарной ячейке заменяется средней длиной по различным изотопам  $\langle a_\alpha \rangle$ . Обобщение на решетку, содержащую более чем один атом в элементарной ячейке, производится аналогично (5.10) заменой  $\langle a \rangle \rightarrow \langle F(\mathbf{q}) \rangle = \sum_{\alpha=1}^M \langle a_\alpha \rangle \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{d}_\alpha)$ ,  $\langle a^2 \rangle \rightarrow \langle F^2(\mathbf{q}) \rangle$ .

### Спиновая некогерентность

Рассмотрим теперь брэгговскую дифракцию с учетом спинов нейтрона и ядер. В этом случае длина рассеяния зависит от взаимной ориентации спинов и определяется выражением (4.1). В выражение для дифференциального сечения рассеяния входит

$$a_i^+ a_i = [b_0 + b(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i)]^2 = b_0^2 + 2bb_0(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i) + b^2(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i)^2. \quad (5.13)$$

Последнее слагаемое в (5.13) можно преобразовать, используя стандартные коммутационные соотношения для компонент спина

$$(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i)^2 = \frac{1}{4}(\mathbf{I}_i \cdot \mathbf{I}_i) + \frac{i}{2}\mathbf{S} \cdot [\mathbf{I}_i \times \mathbf{I}_i] = \frac{I(I+1)}{4} - \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i)}{2}.$$

Отсюда следует

$$a_i^+ a_i = b_0^2 + 2bb_0(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i) + b^2 \left\{ \frac{I(I+1)}{4} - \frac{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i)}{2} \right\}. \quad (5.14a)$$

Аналогично для двух ядер, расположенных в узлах  $i$  и  $j$ , имеем

$$\begin{aligned} a_i a_j^+ &= [b_0 + b(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i)][b_0 + b(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_j)] = \\ &= b_0^2 + bb_0 \{(\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i) + (\mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_j)\} + b^2 \left\{ \frac{(\mathbf{I}_i \cdot \mathbf{I}_j)}{4} + \frac{i}{2}\mathbf{S} \cdot [\mathbf{I}_i \times \mathbf{I}_j] \right\}. \end{aligned} \quad (5.14b)$$

Выражения (5.14) существенно облегчают вычисления средних значений, входящих в выражение для дифференциального сечения рассеяния:



$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_i \langle a_i^+ a_i \rangle + \sum_{i \neq j} \langle a_i a_j^+ \rangle \exp[-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \quad (5.15)$$

Здесь  $\langle \dots \rangle$  обозначает усреднение по спинам нейтрона и ядер. Мы будем полагать, что корреляция между относительными ориентациями двух ядерных спинов  $\mathbf{I}_i$  и  $\mathbf{I}_j$ , с одной стороны, и их относительными положениями — с другой, отсутствует. Данное предположение нарушается, например, в исключительных случаях, когда исследуются ядерные магнетики, но оно правильно для абсолютного большинства веществ. Теперь выражение (5.15) можно записать в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_i \langle a_i^+ a_i \rangle + \sum_{i \neq j} \langle a_i a_j^+ \rangle \exp[-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \quad (5.16)$$

При отсутствии рассеяния, связанного с наличием спина, эта формула переходит в (5.11).

Пусть мишень и пучок нейтронов характеризуются поляризациями  $P$  и  $p$  соответственно. То есть  $\langle \mathbf{I}_i \rangle = P \mathbf{n}_I$ ,  $\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{1}{2} p \mathbf{n}_s$ , где  $\mathbf{n}_I$  и  $\mathbf{n}_s$  — единичные векторы. Рассмотрим случай, когда  $\mathbf{n}_I = \mathbf{n}_s$ .

Тогда при  $i \neq j$

$$\langle \mathbf{I}_i \cdot \mathbf{I}_j \rangle = \langle \mathbf{I}_i \rangle \cdot \langle \mathbf{I}_j \rangle = P^2 I^2, \quad \langle [\mathbf{I}_i \times \mathbf{I}_j] \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{I}_i \rangle = pPI/2,$$

и, используя (5.14), получаем:

$$\langle a_i^+ a_i \rangle = b_0^2 + bb_0 IpP + \frac{b^2}{4} \{I(I+1) - pPI\}, \quad (5.17)$$

$$\langle a_i a_j^+ \rangle_{i \neq j} = b_0^2 + bb_0 IpP + \frac{b^2 I^2 P^2}{4}. \quad (5.18)$$

Аналогично (5.12), подставляя (5.17), (5.18) в (5.16), получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = N \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неког}} + N \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{ког}} \sum_i \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i), \quad (5.19)$$

где

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неког}} = \frac{b^2}{4} [I(I+1) - pPI - P^2 I^2], \quad (5.20)$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{ког}} = b_0^2 + bb_0IpP + \frac{b^2I^2P^2}{4}.$$

Мы видим, что  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{неког}}$  обращается в нуль при  $pP = 1$ , но не при  $pP = -1$ . На первый взгляд это может показаться странным, так как в этом случае длины рассеяния нейтрона для всех ядер одинаковы (и равны  $a_-$ ). Однако дело в том, что при  $pP = -1$  спин падающего нейтрона при рассеянии на отдельном ядре может сменить направление на противоположное (например, с  $1/2$  на  $-1/2$ ). Одновременно проекция спина ядра также изменится на 1. Данное рассеяние будет некогерентным, так как конечное состояние мишени становится ортогональным ее начальному состоянию.

Можно заметить также, что в противоположность изотопному некогерентному рассеянию, для которого, согласно (5.12),  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{ког}}$  и  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{неког}}$  определяются величинами  $|\langle a \rangle|^2$  и  $\langle |a|^2 \rangle - |\langle a \rangle|^2$ , в данном случае

$$|\langle a \rangle|^2 = \left[ b_0 + \frac{bpPI}{2} \right]^2 = b_0^2 + bb_0IpP + \frac{b^2p^2P^2I^2}{4}, \quad (5.21a)$$

$$\langle |a|^2 \rangle - |\langle a \rangle|^2 = \frac{b^2}{4} [I(I+1) - pPI - p^2P^2I^2]. \quad (5.21b)$$

Нетрудно видеть, что оба выражения (5.21) отличаются от соответствующих выражений (5.20) и совпадают с ними только для  $|p| = 0$  или 1. Причина этих различий заключается в том, что величина  $\langle a_i a_j^+ \rangle_{i \neq j}$ , определяемая выражением (5.18), при усреднении не распадается на произведение средних, так как усреднение ведется не только по спинам ядер, но и по спину нейтрона. Соответственно она отличается от величины  $|\langle a \rangle|^2$ , которая дается выражением (5.21a).

Для решетки, имеющей более одного атома в элементарной ячейке, сечение когерентного рассеяния получается следующим

образом (мы принимаем, что для каждого атома имеется только один изотоп).

Определяем для элементарной ячейки величины

$$B_0 = \sum_{\alpha=1}^M b_{\alpha}^0 \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{d}_{\alpha}), \quad B = \sum_{\alpha=1}^M P_{\alpha} I_{\alpha} b_{\alpha} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{d}_{\alpha}),$$

где  $b_{\alpha}^0 + b_{\alpha}(\mathbf{S}\mathbf{I}_{\alpha})$  — амплитуда рассеяния атомного ядра, находящегося в узле  $\mathbf{d}_{\alpha}$  элементарной ячейки, имеющего спин  $\mathbf{I}_{\alpha}$  и поляризацию  $P_{\alpha}$ . Тогда когерентная часть сечения рассеяния дается выражением

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{кор}} = B_0^+ B_0 + \frac{1}{4} B^+ B + p \operatorname{Re}(B_0 B^+). \quad (5.22)$$

## § 6. Преломление нейтронов на границе раздела сред

При распространении волн в упруго и когерентно рассеивающей среде происходит интерференция сферических волн, рассеянных на отдельных атомах, с распространяющейся плоской волной, в результате чего волновой вектор плоской волны меняется по величине. Если в пустоте он был равен  $k$ , то в среде он становится равным  $k'$ . Отношение

$$n = \frac{k'}{k} \quad (6.1)$$

называется коэффициентом преломления. При прохождении через границу вещества из-за симметрии сила, действующая на нейтрон, ортогональна поверхности.

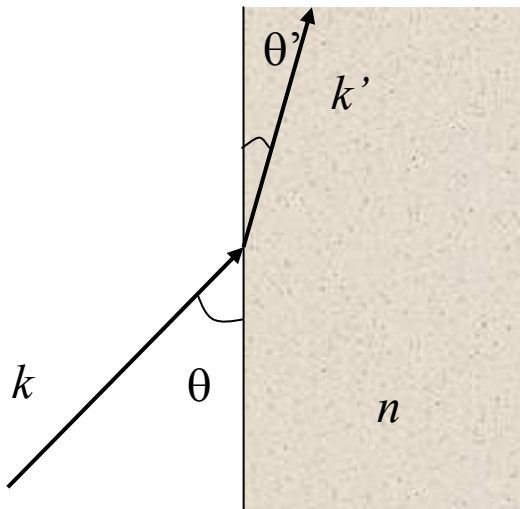


Рис. 6.1.  
Преломление нейтронов на границе раздела сред

Следовательно, компонента импульса нейтрона, параллельная поверхности, не изменяется:

$$k \cos \theta = k' \cos \theta',$$

где  $\theta$ ,  $\theta'$  — углы скольжения падающей и преломленной нейтронных волн. В итоге изменение волнового вектора приводит к преломлению волн на границе среды с вакуумом по закону Снеллиуса

$$\frac{\cos \theta}{\cos \theta'} = \frac{k'}{k} = n. \quad (6.2)$$

Вычислим коэффициент преломления нейтронов. Пусть среда состоит из различных атомов. Длину когерентного рассеяния на атоме типа  $\nu$  обозначим через  $a_\nu$ , число атомов типа  $\nu$  в единице объема — через  $\rho_\nu$ . Пусть нейтроны падают в направлении оси  $z$  и среда занимает область пространства  $z > 0$ . Выберем некую точку наблюдения  $z$  и допустим сначала, что рассеивает только плоский слой среды с координатной  $z'$  и весьма малой толщиной  $\Delta z'$  (рис. 6.2).

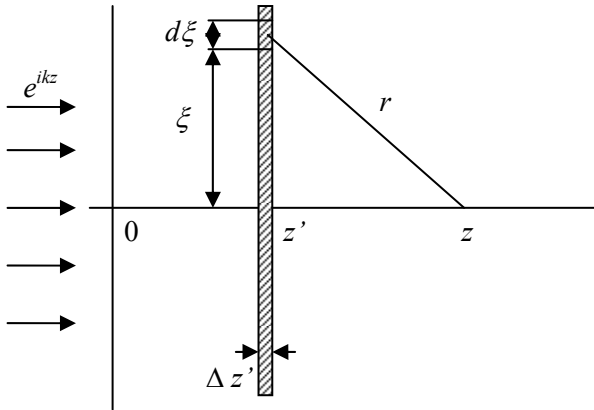


Рис. 6.2.  
Прохождение  
нейтронов через  
вещество

Амплитуда волны в точке  $z$  есть сумма амплитуд нерассеянной и рассеянных волн:

$$\psi(z, z') = e^{ikz} - \int_0^{\infty} \sum \rho_\nu 2\pi\xi d\xi \Delta z' a_\nu e^{ikz'} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (6.3)$$

$$r = \sqrt{(z - z')^2 + \xi^2}.$$

Здесь  $2\pi\xi d\xi \Delta z'$  – объем кольца с радиусом  $\xi$ , точки которого находятся от точки  $z$  на расстоянии  $r$ . Соответственно  $\rho_\nu 2\pi\xi d\xi \Delta z'$  – число ядер типа  $\nu$ , а  $a_\nu e^{ikz'} \frac{e^{ikr}}{r}$ , согласно (4.3), сферическая волна, рассеянная на одном ядре. Вынося из-под знака интеграла не зависящие от  $\xi$  множители и переходя к интегрированию по  $dr$  с помощью соотношения  $\xi d\xi = r dr$ , получаем:

$$\psi(z, z') = e^{ikz} - 2\pi(\sum \rho_\nu a_\nu) \Delta z' \int_{|z-z'|}^{\infty} e^{ikr} dr. \quad (6.4)$$

Для вычисления интеграла по  $dr$  необходимо провести его регуляризацию

$$\int_z^{\infty} e^{ikr} dr = \lim_{p^2 \rightarrow 0} \int_z^{\infty} e^{ikr - p^2 r} dr = \lim_{p^2 \rightarrow 0} \frac{1}{-ik + p^2} e^{(ik - p^2)z} = \frac{i}{k} e^{ikz}.$$

Подставляя полученное значение в (6.4), находим

$$\psi(z, z') = e^{ikz} - \frac{2\pi i}{k} \left( \sum \rho_\nu a_\nu \right) e^{ikz'} e^{ik|z-z'|} \Delta z'. \quad (6.5)$$

При  $z' > z$  член, возникший вследствие рассеяния, пропорционален  $e^{-ikz}$ , т. е. описывает волну, отраженную от слоя  $z'$ . Нам же интересен случай  $z' < z$ , когда рассеянная волна распространяется в том же направлении, что и нерассеянная. Опуская знак модуля в этом случае, получаем:

$$\psi(z, z') = e^{ikz} \left( 1 - \frac{2\pi i}{k} \left( \sum \rho_\nu a_\nu \right) \Delta z' \right). \quad (6.6)$$

Таким образом, благодаря рассеянию нейтронов слоем толщиной  $\Delta z'$  с координатой  $z'$ , амплитуда волны в точке  $z$  умножается на постоянный множитель, не зависящий ни от  $z'$ , ни от  $z$ , который приводит к некоторому сдвигу фазы волны. Если мы теперь будем последовательно вводить слои толщиной  $\Delta z'$ , начиная с  $z' = 0$  и кончая  $z' = z$  (всего  $N = z / \Delta z'$  слоев), то в результате умножения каждый раз на этот множитель нейтронная волна в сплошной среде примет вид

$$\psi(z) = e^{ikz} \left( 1 - \frac{2\pi i}{k} \left( \sum \rho_\nu a_\nu \right) \frac{z}{N} \right)^N. \quad (6.7)$$

Переходя к пределу бесконечно тонких слоев  $\Delta z' \rightarrow 0$  ( $N \rightarrow \infty$ ) и учитывая, что  $\lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{1}{n} \right)^n = e$ , получаем:

$$\psi(z) = e^{ikz} \exp \left( - \frac{2\pi i}{k} \left( \sum \rho_\nu a_\nu \right) z \right) = e^{ik'z}, \quad (6.8)$$

$$k' = k - \frac{2\pi}{k} \left( \sum \rho_\nu a_\nu \right). \quad (6.9)$$

Таким образом, волновая функция приобретает обычное выражение для плоской волны  $e^{ik'z}$ , но с измененным волновым вектором  $k'$ . Подставляя (6.9) в (6.1) находим коэффициент преломления

$$n = 1 - \frac{2\pi}{k^2} \left( \sum \rho_\nu a_\nu \right) = 1 - \frac{\lambda^2}{2\pi} \left( \sum \rho_\nu a_\nu \right). \quad (6.10)$$

При выводе данной формулы мы пренебрегли отражением нейтронов от тонких слоев и рассматривали только прохождение. Однако волна, отразившаяся от одного тонкого слоя, может вторично отразиться от другого слоя и попасть в точку  $z$ . Формула (6.10) получена без учета перерасеяния нейтронов тонкими слоями, что верно, только если рассеяние слабое, т. е. коэффициент преломления близок к единице. Для тепловых нейтронов это условие выполняется с большой точностью, например, для нейтронов с длиной волны  $\lambda = 4 \text{ \AA}$  коэффициент преломления отличается от единицы на величину порядка  $10^{-5}$ .

Коэффициент преломления не зависит от того, является ли среда кристаллической или однородно аморфной, ибо, как видно из формулы (6.6), сдвиг фазы волны, вызываемый рассеивающим слоем, не зависит от координаты слоя  $z'$ . Эта нечувствительность к структуре вещества объясняется тем, что при рассеянии вперед множитель  $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$ , который определяет зависимость фазы рассеянной волны от координаты  $\mathbf{r}$  рассеивающего центра, всегда равен единице ( $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ). Коэффициент преломления зависит только от средней амплитуды когерентного рассеяния единицей объема  $\sum \rho_v a_v$ .

Мы показали, что для анализа преломления нейтронов, как и для световой волны, можно ввести усредненную характеристику среды – показатель преломления. Следовательно, можно в данном случае рассматривать среду как непрерывную и характеризующуюся средним потенциалом взаимодействия  $U = U_0$ . Энергия в нейтрона в вакууме

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

равна энергии нейтрона в веществе

$$E = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + U_0$$

по закону сохранения энергии. Отсюда получаем:

$$k'^2 = k^2 - \frac{2mU_0}{\hbar^2}. \quad (6.11)$$

Деля (6.11) на  $k^2$  находим показатель преломления

$$n^2 = 1 - \frac{2mU_0}{\hbar^2 k^2}. \quad (6.12)$$

Теперь найдем  $U_0$  – средний потенциал взаимодействия нейтрона с веществом. Используя (5.5), получаем:

$$\begin{aligned} U_0 &= \frac{1}{V} \int_V U(\mathbf{r}) d^3r = \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{V} \int_V \sum_j a_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) d^3r = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{V} \sum_j a_j, \end{aligned} \quad (6.13)$$

где индекс  $j$  отвечает суммированию по всем ядрам внутри объема  $V$ . Переходя к суммированию по отдельным сортам ядер, имеем

$$U_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_\nu a_\nu \frac{N_\nu}{V} = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_\nu a_\nu \rho_\nu, \quad (6.14)$$

где  $N_\nu$  – число ядер типа  $\nu$  в объеме  $V$ .

Подставляя данное выражение в (6.12), получаем:

$$n^2 = 1 - \frac{4\pi}{k^2} \sum \rho_\nu a_\nu. \quad (6.15)$$

Учитывая, что коэффициент преломления близок к единице, находим

$$n = \sqrt{1 - \frac{4\pi}{k^2} \sum \rho_\nu a_\nu} \approx 1 - \frac{2\pi}{k^2} \sum \rho_\nu a_\nu, \quad (6.16)$$

что совпадает с (6.10). Для тепловых нейтронов формулы (6.10) и (6.15) эквивалентны, но для более медленных нейтронов коэффициент преломления существенно отличается от единицы, и необходимо пользоваться более точной формулой (6.15).

Выше мы предполагали, что средний потенциал не зависит от  $z$ . Однако это требование не является существенным. Если средний потенциал сам зависит от координат, то набег фазы  $k'z$  в (6.8) следует заменить на интеграл от  $k'(z)$  по  $dz$ .

Для подавляющего большинства веществ  $a > 0$ , поэтому  $n < 1$ , т. е. среда является оптически менее плотной, чем вакуум. При переходе волны в оптически менее плотную среду может иметь место



явление полного внутреннего отражения: если угол скольжения  $\theta$  меньше, чем некий критический угол  $\theta_c$ , то нейтроны не могут преодолеть границы сред и полностью от нее отражаются. Критический угол  $\theta_c$  определяется из условия

$$\cos \theta_c = n. \quad (6.17)$$

Так как  $\theta_c \ll 1$ , можно разложить  $\cos \theta_c$ , в результате чего получаем

$$\theta_c = \sqrt{2(1-n)} = \lambda \sqrt{\frac{1}{\pi} \sum \rho_v a_v}. \quad (6.18)$$

Критический угол  $\theta_c$  для бериллия при длине волны, равной 2 Å, составляет 12 угловых секунд.

### **§7. Малоугловое рассеяние нейтронов на неоднородностях вещества**

В § 1 было показано, что рассеяние тепловых нейтронов на ядрах изотропно, так как длина волны нейтрона много больше размера ядра. В обратном предельном случае больших размеров рассеивателя (или больших скоростей нейтрона) рассеяние резко анизотропно и направлено вперед. Данная ситуация носит название *малоугловое рассеяние* и реализуется, если  $\lambda/d \ll 1$ , где  $\lambda$  – длина волны,  $d$  – характерный размер рассеивателя. Для тепловых нейтронов малоугловое рассеяние обычно происходит на неоднородностях вещества, так как есть отличие средних потенциалов взаимодействия нейтронов с веществом внутри неоднородности и вне ее. Данный вопрос был подробно рассмотрен в §3, где было показано, что в качестве потенциала рассеяния неоднородности надо брать среднее значение от псевдопотенциала Ферми.

Большинство рассеянных нейтронов находятся в узком конусе с углом раствора  $\Delta\theta \sim 1/kd$ . Действительно, вспоминая формулу Борна для амплитуды рассеяния

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}), \quad (7.1)$$

видим, что вне этого конуса  $q \approx k\theta \gg 1/d$ , множитель  $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$  есть быстро осциллирующая функция и интеграл от его произведения на медленно меняющуюся функцию  $U(\mathbf{r})$  близок к нулю.

Рассмотрим простейший пример: рассеяние на шаре радиуса  $d$ , т. е.  $U(\mathbf{r}) = U_0$  при  $r < d$  и  $U(\mathbf{r}) = 0$  при  $r \geq d$ . Вычисляя амплитуду согласно (7.1) и возводя ее модуль к квадрат, находим дифференциальное сечение рассеяния:

$$\sigma(\mathbf{q}) = |f(\mathbf{q})|^2 = 4d^2 \left( \frac{mU_0d^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{(\sin qd - qd \cos qd)^2}{(qd)^6}. \quad (7.2)$$

Полуширина данной функции равна  $q_{1/2} \approx 1,81/d$ . Таким образом, как показано на рис. 7.1, ширина линии сечения рассеяния обратна размеру рассеивателя.

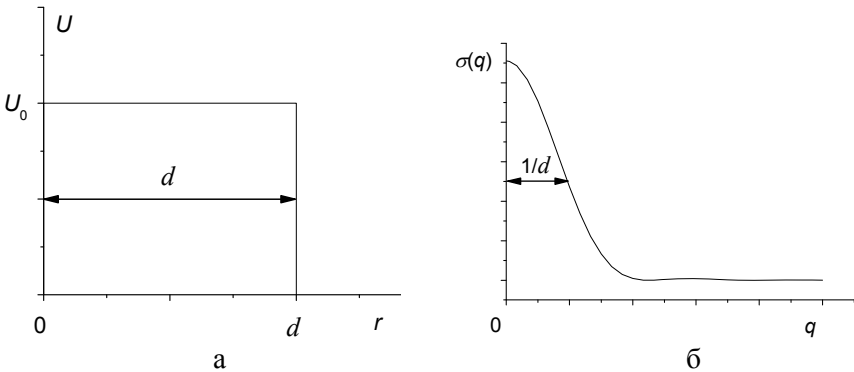


Рис. 7.1. Потенциал (а) и сечение рассеяния (б) на шаре радиуса  $d$

При малых углах рассеяния в выражении  $q = 2k \sin \theta / 2$  можно ограничиться первым членом разложения синуса в ряд, что дает  $q = k\theta$ . Соответственно, из условия  $q \sim 1/d$  получаем  $\theta \sim 1/kd \ll 1$  если  $\lambda \ll d$ .

Покажем, что при малоугловом рассеянии вектор рассеяния  $\mathbf{q}$  ортогонален волновому вектору  $\mathbf{k}$ .

На рис. 7.2 видно, что для компонент вектора рассеяния, параллельной и перпендикулярной падающей волне, имеем

$$q_{\perp} = k \sin \theta \approx k\theta, \\ q_{\parallel} = k(1 - \cos \theta) \approx k\theta^2 / 2.$$

Таким образом, в первом порядке по  $\theta$  имеем  $q_{\parallel} = 0$ , т.е.  $\mathbf{q} \perp \mathbf{k}$ . Говорят, что малоугловое рассеяние происходит в плоскости, ортогональной  $\mathbf{k}$ .

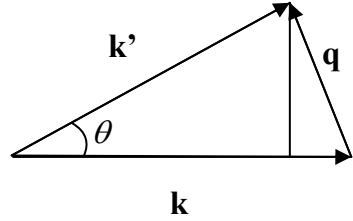


Рис. 7.2. Связь вектора и угла рассеяния

### Малоугловое рассеяние на ансамбле рассеивателей

Рассмотрим теперь малоугловое рассеяние не на одном, а на ансамбле рассеивателей, что соответствует рассеянию нейтронов на реальных образцах. Представим образец в виде совокупности  $N$  рассеивателей и запишем его потенциал:  $U(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N U_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ , где  $U_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$  – потенциал  $i$ -го рассеивателя с центром в точке  $\mathbf{r}_i$ . Запишем амплитуду рассеяния в борновском приближении:

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \sum_{i=1}^N U_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \\ = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \int d^3r U_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)} = \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} f_i(\mathbf{q}), \quad (7.3)$$

где  $f_i(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r U_i(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}$  – амплитуды рассеяния (форм-факторы) отдельных рассеивателей. Тогда, возводя (7.3) по модулю в квадрат, имеем для интенсивности рассеяния ансамблем:

$$I(\mathbf{q}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N f_i(\mathbf{q}) f_j^*(\mathbf{q}) \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)]. \quad (7.4)$$

В эксперименте наблюдается интенсивность рассеяния, усредненная по большому числу неоднородностей в образце. Группируя члены с  $i = j$  и усредняя по ансамблю, получаем

$$\langle I(\mathbf{q}) \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N |f_i(\mathbf{q})|^2 \right\rangle + \left\langle \sum_{i \neq j} f_i(\mathbf{q}) f_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{ij}) \right\rangle,$$

где  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ . Рассмотрим случай, когда неоднородности не очень сильно отличаются по размерам, а их форма близка к сферической. Тогда можно считать, что флуктуации формы и размера рассеивателей слабо влияют на их расположение в пространстве. Имеем

$$\langle I(\mathbf{q}) \rangle = N \left\langle |f(\mathbf{q})|^2 \right\rangle + \left\langle |f(\mathbf{q})|^2 \right\rangle \left\langle \sum_{i \neq j} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{ij}) \right\rangle. \quad (7.5)$$

Здесь во втором слагаемом мы разделили усреднение по параметрам одной неоднородности и по положениям неоднородностей. Будем предполагать, что изучаемая система изотропна, т.е. характер расположения частиц в ней не зависит от направления. Тогда для расчета среднего значения двойной суммы в (7.5) введем функцию плотности вероятности  $p_{ij}$ , которая дает вероятность найти частицу в объеме  $dv_i$ , положение которого дается вектором  $\mathbf{r}_i$ , и одновременно другую частицу в объеме  $dv_j$ , соответствующем вектору  $\mathbf{r}_j$ . Учитывая еще, что усреднение функции  $\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})$  по всем ориентациям дает

$$\langle \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \exp(-iqr \cos\theta) = \frac{\sin qr}{qr},$$

где  $\varphi, \theta$  – направление  $\mathbf{r}$  в сферических координатах ( $\theta$  – угол между  $\mathbf{q}$  и  $\mathbf{r}$ ), мы получаем:

$$\left\langle \sum_{i \neq j} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_{ij}) \right\rangle = \iint_{V_0} \frac{\sin qr_{ij}}{qr_{ij}} p_{ij} dv_i dv_j,$$

где  $V_0$  – облученный объем образца. Из соображений нормировки удобнее пользоваться функцией  $P(r_{ij}) = p_{ij} v_1^2$ , где  $v_1 = V_0 / N$  – объем, приходящийся на одну частицу. Действительно, отсутствие дальнего порядка делает расположение неоднородностей практически независимым на расстояниях  $r$  таких, что  $v_1^{1/3} \ll r \ll V_0^{1/3}$ . Следовательно, вероятность найти частицу в объеме  $dv_i$  и одновре-

менно другую частицу в объеме  $dv_j$  равна произведению вероятностей нахождения частиц в данных объемах. Так как вероятность найти неоднородность в объеме  $dv$  равна  $dv/v_1$ , то  $p_{ij} \rightarrow \frac{1}{v_1^2}$  при  $r_{ij} \rightarrow \infty$ . Соответственно  $P(r) \rightarrow 1$  при  $r \rightarrow \infty$ . Сделав еще замену  $P(r) = 1 - [1 - P(r)]$ , мы можем записать:

$$\begin{aligned} \langle I(\mathbf{q}) \rangle = N \left\langle |f(\mathbf{q})|^2 \right\rangle + \left| \langle f(\mathbf{q}) \rangle \right|^2 \iint_{V_0} \frac{\sin qr_{ij}}{qr_{ij}} \frac{dv_i}{v_1} \frac{dv_j}{v_1} - \\ - \left| \langle f(\mathbf{q}) \rangle \right|^2 \iint_{V_0} [1 - P(r_{ij})] \frac{\sin qr_{ij}}{qr_{ij}} \frac{dv_i}{v_1} \frac{dv_j}{v_1}. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Рассмотрим внимательнее (7.6). Нетрудно заметить, что первый интеграл в правой части соответствует рассеянию «частицей» с объемом  $V_0$  и постоянной плотностью. Вклад от такого члена будет нулевым уже для векторов рассеяния  $q \geq 2\pi/D_0$ , где  $D_0 \sim V_0^{1/3}$ . В реальных экспериментах этот вклад не наблюдаем.

При рассмотрении второго интеграла учтем, что объем области, где  $1 - P(r)$  отлична от нуля, много меньше  $V_0$ . Поэтому можно записать

$$\int_{V_0} \frac{dv_j}{v_1} \int_{V_0} [1 - P(r_{ij})] \frac{\sin qr_{ij}}{qr_{ij}} \frac{dv_i}{v_1} \approx N \int_0^\infty [1 - P(r)] \frac{\sin qr}{qr} \frac{4\pi r^2}{v_1} dr$$

(первый интеграл равен  $V_0/v_1$ , а во втором мы перешли к сферическим координатам). Таким образом, для всех  $q \geq 2\pi/D_0$  имеем:

$$\langle I(\mathbf{q}) \rangle = N \left\{ \left\langle |f(\mathbf{q})|^2 \right\rangle - \frac{\left| \langle f(\mathbf{q}) \rangle \right|^2}{v_1} \int_0^\infty [1 - P(r)] \frac{\sin qr}{qr} 4\pi r^2 dr \right\}. \quad (7.7)$$

Если неоднородности сферически-симметричны и имеют одинаковый размер, то  $\left\langle |f(\mathbf{q})|^2 \right\rangle = \left| \langle f(\mathbf{q}) \rangle \right|^2 = F^2(q)$ , и мы можем записать:

$$\langle I(q) \rangle = NF^2(q) \left\{ 1 - \frac{1}{v_1} \int_0^\infty [1 - P(r)] \frac{\sin qr}{qr} 4\pi r^2 dr \right\}, \quad (7.8)$$

где  $F^2(q)$  – формфактор рассеивателя. В этом выражении первое слагаемое описывает некогерентное рассеяние, а второе – когерентное рассеяние нейтронов с учетом их интерференции. Данное выражение имеет важное значение, так как выражает регистрируемую интенсивность рассеяния через амплитуды рассеяния частиц (неоднородностей) и статистическую функцию их размещения.

### Множественное малоугловое рассеяние. Теория Мольер

Одной из характеристик движения нейтрона в среде является величина, называемая *длиной свободного пробега нейтрона*  $l_c$ . Это среднее расстояние, которое нейтрон проходит в материале без рассеяния, или, другими словами, на этой длине нейтрон рассеивается в среднем один раз. Найдем связь длины рассеяния с параметрами образца. Пусть образец имеет вид, как показано на рис.7.3а, т.е. это толстый (толщины  $L$ ) образец со случайным расположением в нем неоднородностей. Нейтрон, влетая в вещество, взаимодействует с неоднородностями, размеры которых существенно превышают характерные размеры нейтрона. Поскольку нам важны сами факты рассеяния, представим себе картину движения нейтрона в среде иначе (см. рис.7.3б).

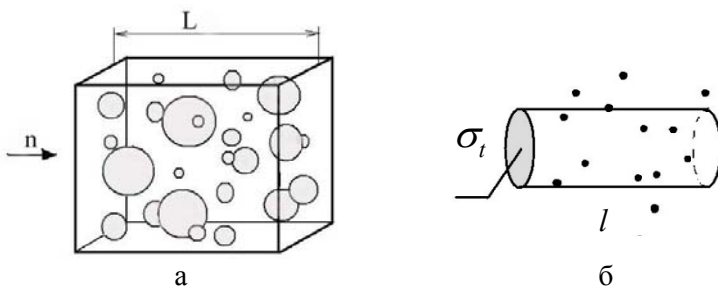


Рис. 7.3. К выводу формулы для длины рассеяния

Пусть теперь нейтрон имеет средний размер неоднородностей, а сами рассеивающие центры будут иметь точечные размеры. Очевидно, что вероятность рассеяния от этого не изменится. Теперь нейтрон, двигаясь в среде, замечает некоторый объем, и число актов рассеяния равно числу точек (рассеивателей) в этом объеме.

Таким образом, для одного нейтрона получаем цилиндр взаимодействия с некоторой длиной  $l$  и площадью основания, равной полному сечению рассеяния  $\sigma_t$ .

Пусть  $N$  – количество рассеивателей, которые попали в этот цилиндр. Тогда

$$N = l\sigma_t c, \quad (7.9)$$

где  $c$  – концентрация неоднородностей. Полагая в формуле (7.9)  $N = 1$  (одно рассеяние) получаем, что

$$1 = l_c \sigma_t c \Rightarrow l_c = \frac{1}{\sigma_t c}. \quad (7.10)$$

Если толщина образца  $L \ll l_c$ , то рассеяние является однократным. При этом можно пренебречь тем, что нейтрон, рассеянный на одной неоднородности, может еще раз рассеяться на другой неоднородности. В обратном случае  $L \geq l_c$  рассеяние называется многократным. Для описания такого рассеяния обычно используется теория Мольера, предполагающая, что неоднородности в образце расположены абсолютно случайно, и, следовательно, рассеянные волны от различных неоднородностей складываются некогерентно.

Вместо вектора рассеяния  $\mathbf{q}$  удобно рассматривать безразмерный вектор  $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{q} / k$ . Так как модуль этого вектора равен углу рассеяния  $|\boldsymbol{\theta}| = \theta$ , мы будем также называть его углом рассеяния.

Рассмотрим сначала однократное рассеяние. Вероятность однократного рассеяния нейтрона на угол  $\boldsymbol{\theta}$  равна:

$$p_1(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\sigma(\boldsymbol{\theta})}{\sigma_t},$$

где  $\sigma(\boldsymbol{\theta})$  – дифференциальное сечение рассеяния нейтрона на угол  $\boldsymbol{\theta}$ . Вероятность получить полный угол рассеяния  $\boldsymbol{\theta}$  при взаимодействии с двумя рассеивающими центрами имеет вид:

$$p_2(\boldsymbol{\theta}) = \int p_1(\boldsymbol{\tau}) p_1(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\tau}) d\boldsymbol{\tau}. \quad (7.11)$$

Действительно, если нейтрон первый раз рассеялся на угол  $\boldsymbol{\tau}$ , то во второй раз ему необходимо рассеяться на угол  $\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\tau}$ , чтобы суммарный угол рассеяния был равен  $\boldsymbol{\theta}$ . Считая данные события независимыми, перемножаем их вероятности. Так как угол  $\boldsymbol{\tau}$  мо-

жет быть любым, то в (7.11) интегрируем по  $d\tau$ . Поскольку подинтегральное выражение отлично от нуля только при малых  $\tau$ , то пределы интегрирования можно взять бесконечными. Аналогично получаем вероятность  $n$ -кратного рассеяния на угол  $\theta$ :

$$p_n(\theta) = \int p_1(\theta_1) \dots p_1(\theta_{n-1}) p_1(\theta - \theta_1 - \dots - \theta_{n-1}) d\theta_1 \dots d\theta_{n-1}. \quad (7.12)$$

Пусть  $p_i(\mathbf{g})$  – фурье-образ  $p_i(\theta)$ :

$$p_i(\mathbf{g}) = \int d^2\theta e^{i\mathbf{g}\theta} p_i(\theta).$$

Переход в фурье-пространство значительно упрощает задачу, поскольку свертка функций в выражении (7.12) превращается в их произведение:

$$p_2(\mathbf{g}) = p_1^2(\mathbf{g}), \dots, p_n(\mathbf{g}) = p_1^n(\mathbf{g}). \quad (7.13)$$

В образце нейтрон может рассеяться произвольное количество раз. Интенсивность рассеяния на угол  $\theta$  на образце толщиной  $L$  будет выражаться суммой по всем кратностям рассеяния  $n$

$$I(\theta, L) = \sum_{n=0}^{\infty} P(n) p_n(\theta), \quad (7.14)$$

где  $P(n)$  – вероятность того, что нейтрон рассеется  $n$  раз. Здесь значению  $n=0$  отвечают нейтроны, прошедшие образец, не испытав рассеяния. Очевидны следующие соотношения:  $p_0(\theta) = \delta(\theta)$ ,  $p_0(\mathbf{g}) = 1$ . Фурье-представление интенсивности рассеяния

$$I(\mathbf{g}, L) = \sum_{n=0}^{\infty} P(n) p_1^n(\mathbf{g}). \quad (7.15)$$

Найдем вероятности  $P(n)$ . Для этого разобьём образец на  $N \gg 1$  слоев (рис. 7.4)

толщиной  $\Delta L = \frac{L}{N}$ . Вероятность рассеяться

в одном тонком слое равна

$$q = \frac{\Delta L}{l_c} = \frac{L}{N l_c}. \quad (7.16)$$

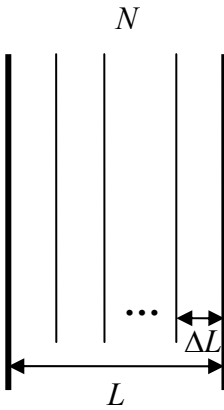


Рис. 7.4. Разбиение образца на слои



Вероятность, что нейтрон в  $N$  слоях рассеется  $n$  раз, определяется биномиальным распределением

$$P(n, N) = C_N^n q^n (1-q)^{N-n}.$$

Для получения окончательного выражения надо устремить число слоев к бесконечности. Так как при  $N \rightarrow \infty$  произведение  $qN = \lambda = L/l_c$  остается постоянным, то биномиальное распределение переходит в распределение Пуассона

$$P(n) = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda} = \frac{(L/l_c)^n}{n!} e^{-L/l_c}. \quad (7.17)$$

Подставляя (7.17) в (7.15), получаем:

$$I(\mathbf{g}, L) = \sum_{n=0}^{\infty} p_1^n(\mathbf{g}) \frac{(L/l_c)^n}{n!} e^{-L/l_c} = \exp(p_1(\mathbf{g})L/l_c) e^{-L/l_c}.$$

Учитывая, что  $p_1(\mathbf{g}) = \frac{\sigma(\mathbf{g})}{\sigma_t}$ , находим фурье-образ интенсивности рассеяния

$$I(\mathbf{g}, L) = \exp\left(-\frac{L}{l_c} \left(1 - \frac{\sigma(\mathbf{g})}{\sigma_t}\right)\right). \quad (7.18)$$

Совершая обратное преобразование Фурье, получаем:

$$I(\boldsymbol{\theta}, L) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int e^{-i\mathbf{g}\boldsymbol{\theta}} \exp\left(-\frac{L}{l_c} \left(1 - \frac{\sigma(\mathbf{g})}{\sigma_t}\right)\right) d^2 g. \quad (7.19)$$

Эта формула называется формулой Мольер, она широко используется при изучении материалов методом многократного малоуглового рассеяния нейтронов. На первый взгляд кажется, что интеграл в (7.19) расходится на бесконечности. Действительно, при больших  $g$  фурье-образ сечения  $\sigma(\mathbf{g}) \rightarrow 0$  (как интеграл от быстроосциллирующей функции) и

$$\exp\left(-\frac{L}{l_c} \left(1 - \frac{\sigma(\mathbf{g})}{\sigma_t}\right)\right) \rightarrow \exp\left(-\frac{L}{l_c}\right).$$

Однако интеграл в (7.19) можно разбить на два согласно тождеству

$$\exp\left(-\frac{L}{l_c} \left(1 - \frac{\sigma(\mathbf{g})}{\sigma_t}\right)\right) = \exp\left(-\frac{L}{l_c}\right) + \left[ \exp\left(-\frac{L}{l_c} \left(1 - \frac{\sigma(\mathbf{g})}{\sigma_t}\right)\right) - \exp\left(-\frac{L}{l_c}\right) \right].$$

В результате получаем:

$$\begin{aligned}
 I(\boldsymbol{\theta}, L) = & \exp\left(-\frac{L}{l_c}\right) \delta(\boldsymbol{\theta}) + \\
 & + \frac{1}{(2\pi)^2} \int e^{-i\mathbf{g}\boldsymbol{\theta}} \left[ \exp\left(-\frac{L}{l_c} \left(1 - \frac{\sigma(\mathbf{g})}{\sigma_t}\right)\right) - \exp\left(-\frac{L}{l_c}\right) \right] d^2\mathbf{g}.
 \end{aligned}
 \tag{7.20}$$

Здесь первое слагаемое отвечает интенсивности нейтронов, прошедших через образец без рассеяния, а второе отвечает интенсивности рассеянных нейтронов.

## Глава 2. Основные узлы нейтронных установок

### **§8. Источники нейтронов**

#### **1. Первый источник нейтронов. Изотопные источники нейтронов<sup>\*</sup>**

В конце двадцатых годов XX века проводились исследования взаимодействия  $\alpha$ - и  $\gamma$ -излучений с ядрами различных элементов. В. Боте и Г. Беккер в 1930 г. обратили внимание на способность некоторых легких ядер под действием  $\alpha$ -частиц испускать какое-то излучение, напоминающее по своему аномально малому поглощению в различных веществах  $\gamma$ -кванты больших энергий. Наиболее эффективным источником данного излучения был бериллий, поэтому и само излучение стали в то время называть «бериллиевым».

Гипотеза о том, что бериллиевое излучение представляет собой фотоны большой энергии, просуществовала недолго. Она оказалась неспособной объяснить результаты многих экспериментов. В начале 1932 г. Дж. Чедвик выдвигает смелое предположение о том, что наблюдаемое излучение является потоком новых, еще неизвестных частиц.

Опишем кратко схему опыта, позволившего Дж. Чедвику прийти к такому важному заключению. Полоний (источник  $\alpha$ -частиц), нанесенный тонким слоем на металлическую подложку, располагался вблизи бериллиевой пластинки для того, чтобы возможно большее число  $\alpha$ -частиц попадало на бериллий. Эта часть установки, по существу, служит источником бериллиевого излучения. Другая часть установки состоит из мишени, помещенной в ионизационную камеру, которая регистрирует результат воздействия излу-

---

<sup>\*</sup> Материал пунктов 1 и 2 данного параграфа основан на информации с сайта [www.physics.ru](http://www.physics.ru).

чаемого излучения на ядра мишени. В зависимости от состава мишени в камере регистрировались соответствующие ядра отдачи — протоны (при парафиновой мишени), ядра азота, лития и т. п. Энергия этих ядер отдачи определялась по ионизации, создаваемой ими в камере.

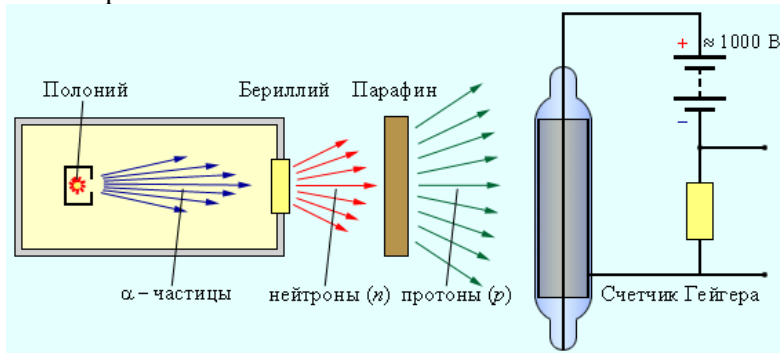


Рис. 8.1. Схема опыта по обнаружению нейтрона

Несколько раньше И. Кюри и Ф. Жолио обнаружили, что бериллиевое излучение способно выбивать протоны из парафина. Предположив появление протонов отдачи в результате столкновения  $\gamma$ -квантов с ядрами водорода, они вычислили требуемую для этого процесса энергию фотона. Она оказалась близкой к 50 МэВ. Эта величина никак не согласовывалась с энергетическим балансом реакции захвата  $\alpha$ -частицы ядром бериллия и последующим испусканием  $\gamma$ -кванта. Что касается числа зарегистрированных протонов отдачи, то оно в тысячи раз превышало ожидаемое на основании известной вероятности взаимодействия  $\gamma$ -квантов с веществом.

Когда Дж. Чедвик подсчитал энергию предполагаемых  $\gamma$ -квантов по эффекту от ядра отдачи азота, то она получилась близкой к 70 МэВ. Налицо явное противоречие: одним и тем же  $\gamma$ -квантам приписывается разная энергия в зависимости от того, регистрируются ли они по протонам отдачи или по ядрам отдачи азота.

Каковы же должны быть свойства частицы, чтобы устранялось данное противоречие?

Для этого, как показали расчеты, следует предположить, что при облучении  $\alpha$ -частицами ядер бериллия возникает частица, лишенная электрического заряда и обладающая массой, близкой к массе протона. Так, в 1932 г. были открыты нейтроны — частицы с зарядом, равным нулю, и с массой, близкой к массе протона. Очевидно, установку, при помощи которой было окончательно доказано существование нейтронов, в известной степени можно считать первым изотопным нейтронным источником.

В настоящее время изотопные источники применяют довольно редко. Нейтроны в них получают либо в результате спонтанного деления ( $^{252}\text{Cf}$ ), либо в результате ядерных реакций ( $\alpha, n$ ) на легких ядрах, например  $^9\text{Be}(\alpha, n)^{12}\text{C}$ . В качестве источников альфа-частиц используются альфа-активные изотопы  $^{210}\text{Po}$ ,  $^{226}\text{Ra}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$ . Интенсивность потока нейтронов от изотопных источников ограничена активностью препарата и обычно заметно меньше  $10^8$  нейтронов в секунду. Кроме того, такие изотопные источники имеют сплошной спектр нейтронов ( $\sim 0.1 - 12$  МэВ) и высокий фон гамма-излучения. Изотопные источники монохроматических нейтронов небольших энергий можно создать, используя реакцию ( $\gamma, n$ ). Для этого используется, например, реакция  $d(\gamma, n)p$  (энергия реакции  $Q = -2.23$  МэВ) с монохроматическим источником гамма-квантов на основе  $^{208}\text{Tl}$  ( $E_\gamma = 2.62$  МэВ), энергия нейтронов — 200 кэВ.

## 2. Реактор как источник нейтронов

На рис. 8.2 приведен график зависимости удельной энергии связи атомных ядер от массового числа  $A$ . Как видно из графика, удельная энергия связи нуклонов у разных ядер неодинакова. Для легких ядер удельная энергия связи сначала возрастает до максимальной величины 8,7 МэВ/нуклон у элементов с массовым числом  $A = 50 - 60$ , а потом сравнительно медленно уменьшается у тяжелых элементов. Например, у урана  $^{238}_{92}\text{U}$  она составляет 7,6 МэВ/нуклон. Уменьшение удельной энергии связи при переходе к тяжелым элементам объясняется увеличением энергии кулоновского отталкивания протонов.

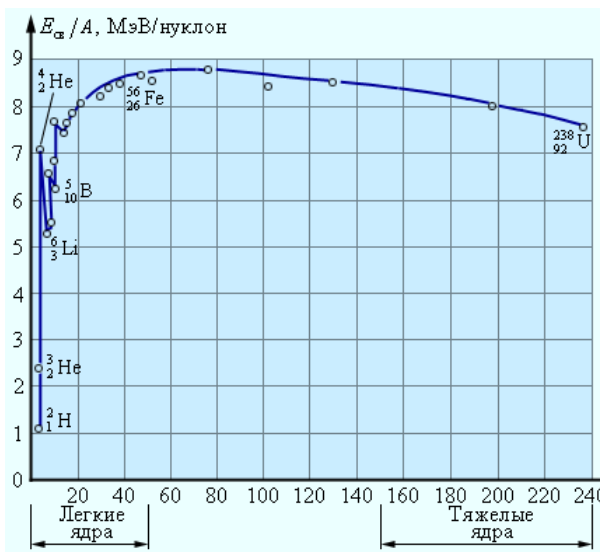


Рис. 8.2. Удельная энергия связи ядер

В случае стабильных легких ядер, где роль кулоновского взаимодействия невелика, числа протонов и нейтронов  $Z$  и  $N$  оказываются одинаковыми ( ${}^4_2\text{He}$ ,  ${}^6_3\text{Li}$ ,  ${}^{10}_5\text{B}$ ). Под действием ядерных сил как бы образуются протон-нейтронные пары. Но у тяжелых ядер из-за возрастания энергии кулоновского отталкивания протонов для обеспечения устойчивости число нейтронов должно превышать число протонов. На рис. 8.3 приведена диаграмма, показывающая числа протонов и нейтронов в стабильных ядрах.

Из рис. 8.2 видно, что наиболее устойчивыми с энергетической точки зрения являются ядра элементов средней части таблицы Менделеева. Это означает, что существуют две возможности получения положительного энергетического выхода при ядерных превращениях: 1) деление тяжелых ядер на более легкие; 2) слияние легких ядер в более тяжелые. В настоящее время оба процесса осуществлены практически: реакции деления и термоядерного синтеза.

В 1939 году немецкими учеными О. Ганом и Ф. Штрассманом было открыто деление ядер урана. Продолжая исследования, нача-

тые Ферми, они установили, что при бомбардировке урана нейтронами возникают элементы средней части периодической системы.

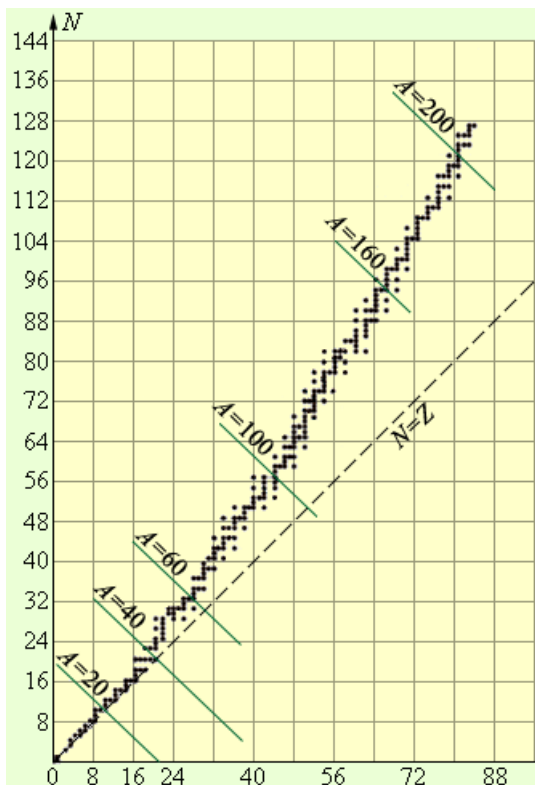
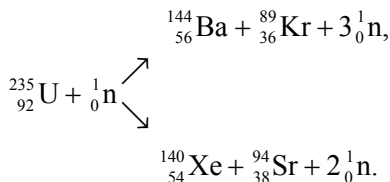


Рис. 8.3. Числа протонов и нейтронов в стабильных ядрах

Уран встречается в природе в виде двух изотопов:  $^{238}_{92}\text{U}$  (99,3 %) и  $^{235}_{92}\text{U}$  (0,7 %). При бомбардировке нейтронами ядра обоих изотопов могут расщепляться на два осколка. При этом реакция деления  $^{235}_{92}\text{U}$  наиболее интенсивно идет на медленных (тепловых) нейтронах, в то время как ядра  $^{238}_{92}\text{U}$  вступают в реакцию деления только с быстрыми нейтронами с энергией порядка 1 МэВ.

Основной для работы ядерных реакторов является реакция деления ядра  $^{235}_{92}\text{U}$ . В настоящее время известны около 100 различных

изотопов с массовыми числами примерно от 90 до 145, возникающих при делении этого ядра. Две типичные реакции деления этого ядра имеют вид:



Важно, что в результате деления ядра, инициированного нейтроном, возникают новые нейтроны, способные вызвать реакции деления других ядер.

Выполним некоторые оценки. Пусть, например, ядро урана  ${}^{238}_{92}\text{U}$  делится на два одинаковых ядра с массовыми числами 119. У этих ядер, как видно из рис. 8.2, удельная энергия связи порядка 8,5 МэВ/нуклон. Удельная энергия связи ядра урана 7,6 МэВ/нуклон. Следовательно, при делении ядра урана выделяется энергия, равная 0,9 МэВ/нуклон или более 200 МэВ на один атом урана.

Продукты деления ядра урана нестабильны, так как в них содержится значительное избыточное число нейтронов. Действительно, отношение  $N/Z$  для наиболее тяжелых ядер порядка 1,6 (см. рис. 8.3), для ядер с массовыми числами от 90 до 145 это отношение порядка 1,3 – 1,4. Поэтому ядра-осколки испытывают серию последовательных  $\beta^-$ -распадов, пока не образуется стабильное ядро.

При делении ядра урана-235, которое вызвано захватом нейтрона, освобождается два или три нейтрона. При благоприятных условиях эти нейтроны могут попасть в другие ядра урана и вызвать их деление. На этом этапе появятся уже от четырех до девяти нейтронов, способных вызвать новые распады ядер урана и т. д. Такой лавинообразный процесс называется *цепной реакцией*. Для осуществления управляемой цепной реакции необходимо, чтобы так называемый *коэффициент размножения нейтронов* был равен единице. Другими словами, в каждом последующем поколении нейтронов должно быть столько же, сколько в предыдущем. Коэффициент размножения определяется не только числом нейтронов, об-



разующихся в каждом элементарном акте, но и условиями, в которых протекает реакция – часть нейтронов может поглощаться другими ядрами или выходить из зоны реакции.

Цепная реакция в уране с повышенным содержанием урана-235 может развиваться только тогда, когда масса урана превосходит критическую массу. В небольших кусках урана большинство нейтронов, не попав ни в одно ядро, вылетает наружу. Для чистого урана-235 критическая масса составляет около 50 кг. Критическую массу урана можно во много раз уменьшить, если использовать так называемые *замедлители* нейтронов. Их действие основано на том, что вероятность захвата нейтрона обратно пропорциональна его скорости, т.е. замедление нейтрона способствует развитию цепной реакции. Применение замедлителей нейтронов и специальной оболочки из бериллия, которая отражает нейтроны, позволяет снизить критическую массу до 250 г.

Устройство, в котором поддерживается управляемая реакция деления ядер, называется ядерным реактором. Схема ядерного реактора на медленных нейтронах приведена на рис. 8.4.

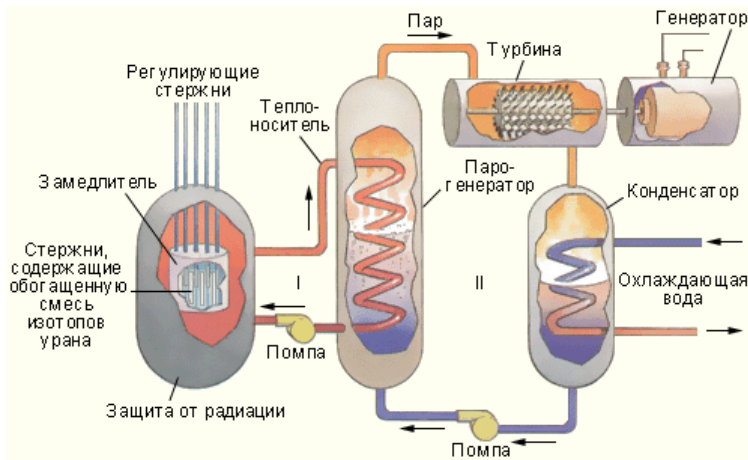


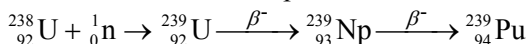
Рис. 8.4. Схема устройства ядерного реактора

Ядерная реакция протекает в активной зоне реактора, которая состоит из тепловыделяющих элементов (ТВЭЛов), содержащих обогащенную смесь изотопов урана с повышенным содержанием урана-235, и заполнена замедлителем. В активную зону вводятся регу-

лирующие стержни, содержащие кадмий или бор, которые интенсивно поглощают нейтроны. Введение стержней в активную зону позволяет управлять скоростью цепной реакции.

Активная зона (АЗ) охлаждается с помощью прокачиваемого теплоносителя, в качестве которого может применяться вода или металл с низкой температурой плавления (например, натрий, имеющий температуру плавления 98 °С). В парогенераторе теплоноситель передает тепловую энергию воде, превращая ее в пар высокого давления. В энергетических реакторах пар направляется в турбину, соединенную с электрогенератором. Из турбины пар поступает в конденсатор. Во избежание утечки радиации контуры теплоносителя I и парогенератора II работают по замкнутым циклам.

Наряду с описанным выше ядерным реактором, работающим на медленных нейтронах, большой практический интерес представляют реакторы, работающие без замедлителя на быстрых нейтронах. В таких реакторах ядерным горючим является обогащенная смесь, содержащая не менее 15 % изотопа  $^{235}_{92}\text{U}$ . Преимущество реакторов на быстрых нейтронах состоит в том, что при их работе ядра урана-238, поглощая нейтроны, посредством двух последовательных  $\beta^-$ -распадов превращаются в ядра плутония, которые затем можно использовать в качестве ядерного топлива:



Коэффициент воспроизводства таких реакторов достигает 1,5, т. е. на 1 кг урана-235 получается до 1,5 кг плутония. В обычных реакторах также образуется плутоний, но в гораздо меньших количествах.

Первый ядерный реактор был построен в 1942 году в США под руководством Э. Ферми. В нашей стране первый реактор был построен в 1946 году под руководством И. В. Курчатова.

### **Реакторы водно-водяного типа (бассейновые)**

К ним относятся широко распространенные реакторы типов ВВР и ИРТ. Для примера более подробно рассмотрим реактор ИРТ-2000. Он предназначен для широкого класса исследовательских работ в области молекулярной физики, радиационной физики

твёрдого тела, радиационной химии и биологии, ядерной физики, для производства радионуклидов. Реакторы этого типа являются гетерогенными (горючее конструктивно отделено от других элементов активной зоны), работающими на тепловых нейтронах. Типичная АЗ реактора имеет форму параллелепипеда, состоящего из 48 ячеек размером 69×69 мм, расположенных в шесть рядов с шагом между рядами 71,5 мм. АЗ погружена в бак с бидистиллированной водой. Все детали корпуса реактора и каналы выполнены из алюминия и его сплавов. В отражателе по периферии АЗ и в центре АЗ расположены вертикальные каналы для экспериментальных работ диаметром от 52 до 180 мм. К поверхности активной зоны радиально подходят горизонтальные каналы. Спектры нейтронов в экспериментальных каналах отличаются от спектра деления урана.

### **Уран-графитовые тяжеловодные реакторы**

Примером таких реакторов явились реакторы ТВР и ИСПРА-1. В таких реакторах спектры нейтронов обогащены нейтронами малой энергии. Первый исследовательский реактор на природном уране с тяжеловодным замедлителем и теплоносителем, мощностью 300 кВт, введен в действие в апреле 1949 г. под руководством А.И. Алиханова в Теплотехнической лаборатории АН СССР (с 1958 года – Институт теоретической и экспериментальной физики).

### **Реактор на быстрых нейтронах типа БР**

Реакторы на быстрых нейтронах типа БР разрабатывались как экспериментальные установки. В реакторе БР-5 в качестве топлива применялся монокарбид урана, а теплоносителя – натрий. Отражатель нейтронов выполнен из тонкого слоя природного урана и более толстого слоя никеля. Работа этого реактора дала уникальный опыт по технологии радиоактивного натрия, физике реактора, стойкости конструкционных и топливных материалов, использованный при создании экспериментального реактора БОР–60 и энергетических реакторов БН–350 и БН–600.

Некоторые исследовательские ядерные реакторы с непрерывным потоком нейтронов приведены в табл. 8.1 [4].

Таблица 8.1

## Исследовательские ядерные реакторы

| Реактор                          | Мощность,<br>МВт | Поток<br>$\times 10^{14}$ ,<br>нейтр. $\text{см}^{-2}\text{с}^{-1}$ |
|----------------------------------|------------------|---|
| ПИК, Гатчина, Россия<br>(проект) | 100              | 45  |
| HFIR, Ок-Ридж, США               | 100              | 30  |
| HFR-ILL, Гренобль, Фран-<br>ция  | 58               | 15  |
| HFBR, Брукхейвен, США            | 60               | 9   |
| FRM-2, Мюнхен, ФРГ               | 20               | 8   |
| NRU, Чок-Ривер, Канада           | 125              | 3   |
| ORPHEE, Сакле, Франция           | 14               | 2.5   |
| JRR-3M, Ибараки, Япония          | 20               | 2   |
| Dhruva, Бомбей, Индия            | 100              | 2   |
| ИР-8, Москва, Россия             | 8                | 1   |
| BER-II, Берлин, ФРГ              | 10               | 1   |

**Импульсные реакторы** можно подразделить на три типа: **самогасящиеся импульсные реакторы, периодические импульсные реакторы и бустеры.**

**В самогасящихся импульсных реакторах** цепная реакция деления гасится за счет отрицательной обратной связи различных процессов, связанных с выделяющимся теплом, с коэффициентом размножения нейтронов. Одним из первых импульсных реакторов был однократный реактор на быстрых нейтронах "Леда Годива", созданный в 1951 в Лос-Аламосской лаборатории в США. Длительность нейтронных импульсов в таких реакторах от нескольких десятков микросекунд до нескольких секунд. Частота повторения импульсов невелика (один импульс в час, а то и 2-3 раза в сутки) и

определяется временем, необходимым для охлаждения реактора. В импульсе до  $\sim 10^{18}$  нейтронов (ЯГУАР в ВНИИТФ, Снежинск).

**В бустере** мишень-конвертер из тяжелого металла помещена в подкритическую сборку. Импульс мощности инициируется импульсом нейтронов от внешнего источника. В качестве внешних источников используются сильноточные ускорители электронов (30-200 МэВ). Электроны из ускорителя рождают в мишени тормозные гамма-кванты, которые, в свою очередь, вызывают фотоядерные реакции ( $\gamma$ , xn). Фотоядерные нейтроны инициируют цепную реакцию в сборке, что приводит к увеличению потока нейтронов в 10 – 30 раз. После выключения внешнего источника размножение нейтронов прекращается. В бустере ИРЕН (**И**сточник **Р**езонансных **Н**ейтронов) (ОИЯИ) линейный электронный ускоритель ЛУЭ-200 имеет длительность импульсов 250 нс, значение тока электронов в импульсе  $\sim 1.5$  А, частоту следования импульсов 150 Гц, энергию электронов  $\sim 200$  МэВ. Мишень-конвертер – W. Конвертер окружает оболочка из  $^{239}\text{Pu}$  в состоянии глубокой подкритичности. Длительность нейтронного импульса 400 нс, интегральный выход нейтронов  $\sim 9 \cdot 10^{14}$  н/с.

**В периодических импульсных реакторах** нейтронные импульсы инициируются и гасятся за счет периодического движения части активной зоны или части отражателя. Первый в мире импульсный периодический реактор ИБР (импульсный быстрый реактор) вступил в строй в 1960 г. Его создание связано с именем первого директора ОИЯИ АН СССР Д.И. Блохинцева. Изменение коэффициента размножения нейтронов ИБР производилось перемещением подвижных частей активной зоны — двух вкладышей из  $^{235}\text{U}$ , закрепленных на двух вращающихся дисках. Главный вкладыш запрессован в стальной диск, вращающийся со скоростью 6000 об/мин, вспомогательный вкладыш — в малый диск, вращающийся у периферии активной зоны с иной частотой, кратной частоте вращения первого диска. Импульс нейтронов появляется в тот момент, когда оба вкладыша совмещаются с неподвижной активной зоной. Длительность импульса 40 мкс, частота следования устанавливалась в диапазоне от 5 до 83 с<sup>-1</sup>. Средняя мощность 1 кВт. Плотность потока нейтронов с поверхности АЗ достигала  $10^{13}$  см<sup>-2</sup>с<sup>-1</sup>. Заметим, что на стационарных реакторах такая же плотность потока достигается при мощности реактора  $> 1$  МВт.

В 1967 г. было принято решение о сооружении еще одного импульсного периодического реактора ИБР-2 с рекордной импульсной плотностью потока  $10^{16} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ . Он принят в эксплуатацию в 1984 г. Высокая плотность потока может быть достигнута на реакторе мощностью несколько мегаватт. Авторам проекта надо было решить чрезвычайно сложную проблему теплосъема, особенно с подвижных элементов. В ИБР-2 модуляция коэффициента размножения нейтронов осуществляется перемещением основного и дополнительного отражателей нейтронов около активной зоны. Теплосъем осуществляется потоком гелия. Схема АЗ приведена на рис. 8.5.

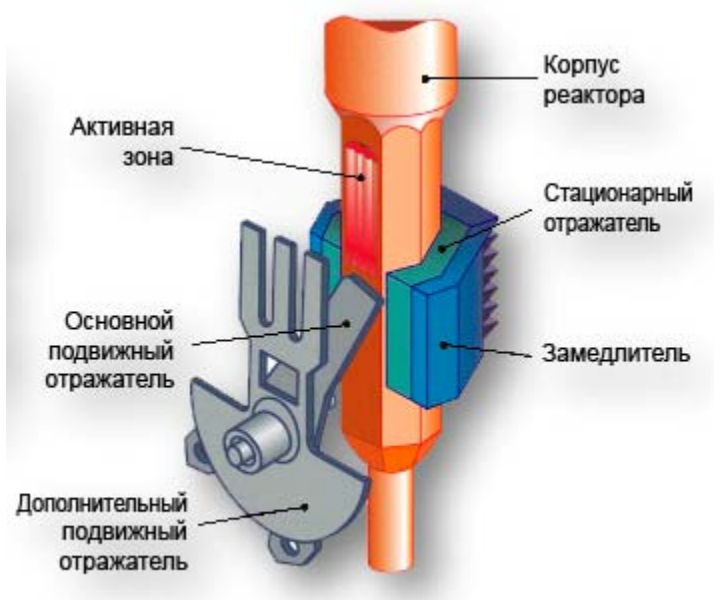


Рис. 8.5. Конструкция активной зоны реактора ИБР-2

Лопать основного отражателя вращается со скоростью 1500 об/мин вблизи поверхности АЗ, лопать дополнительного – со скоростью 300 об/мин. Импульс нейтронного излучения возникает при одновременном прохождении лопастей около зоны. Материалом зоны служит оксид плутония, охлаждение осуществляется током

жидкого натрия. Активная зона окружена замедлителями нейтронов, формирующими спектры соответственно желанию экспериментаторов. Через 14 каналов в защите пучки нейтронов по вакуумным нейтроноводам транспортируются к экспериментальным установкам. Средняя мощность реактора 2 МВт, мощность в импульсе 1500 МВт, длительность импульса 300 мкс, частота следования  $5 \text{ с}^{-1}$ . Плотность потока нейтронов в импульсе на поверхности замедлителя достигает значения  $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ .

В 2006 г. был полностью выработан установленный проектом ресурс реактора ИБР-2. В связи с этим осуществлена модернизация ИБР-2, нацеленная на замену основного реакторного оборудования, повышение надежности и улучшение основных параметров установки. После завершения модернизации ИБР-2 создан новый модернизированный реактор ИБР-2М, он был запущен в 2011 году, а с 2012 года начал регулярную работу. Новый реактор ИБР-2М имеет в 1.5 раза больший поток тепловых нейтронов, более долговечный (в 2.5 раза) ресурс подвижного отражателя, втулочные ТВЭЛы с увеличенной глубиной допустимого выгорания, усовершенствованную систему аварийной защиты и новый современный комплекс замедлителей (теплых и криогенных). Комплекс замедлителей на модернизированном реакторе ИБР-2М позволит повысить эффективность использования нейтронов в экспериментах на выведенных пучках до 20 - 30 раз. Средняя плотность потока холодных нейтронов на поверхности каждого из криогенных замедлителей комплекса реактора ИБР-2М будет не менее  $9 \cdot 10^{11} \text{ н/см}^2/\text{с}$ .

### 3. Нейтронные генераторы\*

В нейтронных генераторах обычно используются реакции  $d + t \rightarrow n + {}^4\text{He}$  и  $d + d \rightarrow n + {}^3\text{He}$ , максимумы сечения которых находятся при небольших энергиях (рис. 8.6 и 8.7).

---

\* Материал этого и следующего пунктов заимствован из пособия [4].

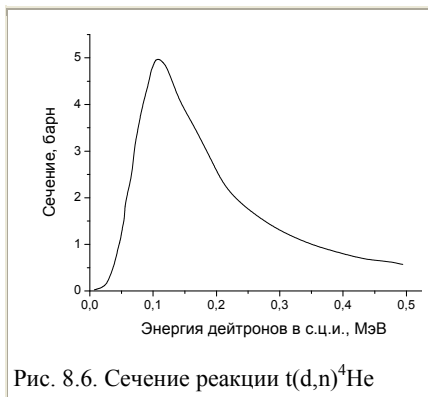


Рис. 8.6. Сечение реакции  $t(d,n)^4\text{He}$

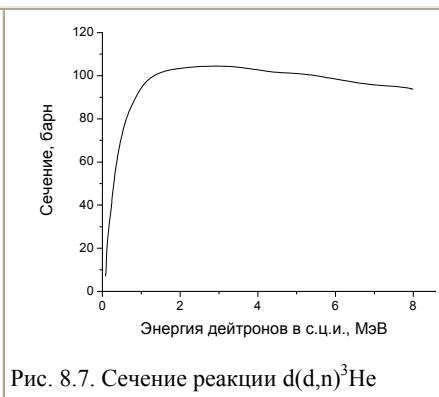


Рис. 8.7. Сечение реакции  $d(d,n)^3\text{He}$

Таблица 8.2

Основные параметры реакций, используемых в нейтронных генераторах

| Реакция             | Энергия реакции Q, МэВ | Энергия нейтронов, МэВ | Максимальное сечение $\sigma_{\max}$ , барн | Энергия d в с.ц.и при $\sigma_{\max}$ , МэВ |
|---------------------|------------------------|------------------------|---|---|
| $d(d,n)^3\text{He}$ | 3.3                    | ~ 2.5                  | ~ 0.1                                       | ~ 1.0                                       |
| $t(d,n)^4\text{He}$ | 17.6                   | ~ 14.2                 | 5.0   | 0.13  |

Это позволяет использовать небольшие ускорители, например, каскадные генераторы. Энергия ускоренных частиц в таких нейтронных генераторах обычно 100 – 300 кэВ. Как правило, ускоряются дейтроны. Так как энергия этих реакций заметно больше энергии ускоряемых частиц, нейтроны вылетают из мишени почти с одинаковыми энергиями. При энергии дейтронов 200 кэВ энергия нейтронов, получаемых в реакции  $t(d,n)^4\text{He}$ , во всем диапазоне углов варьируется от 15.1 до 13.2 МэВ. Нейтронный генератор может быть точечным моноэнергетическим источником нейтронов. Нейтроны из реакции d-t вылетают из мишени практически изотропно. Угловое распределение нейтронов из реакции d-d имеет небольшой максимум в направлении дейтронного пучка. При небольших энергиях дейтронов альфа-частицы из реакции  $t(d,n)^4\text{He}$  вылетают из мишени-конвертера под углами, близкими к  $180^\circ$  относительно направления вылета нейтронов. Если регистрировать альфа частицы, то соответствующие им нейтроны оказываются как



бы "меченными". Энергии и направления вылета нейтронов однозначно связаны с энергиями и углами вылета альфа-частиц. Таким образом можно осуществить "электронную" коллимацию нейтронного пучка. Момент вылета нейтрона из мишени также фиксируется с помощью детектирования сопутствующих альфа-частиц, что может быть использовано во времяпролетной методике. Ускорители, используемые в таких нейтронных генераторах, обычно непрерывного действия. Чтобы получить импульсный пучок используют импульсные ионные источники или устройства отклонения и группировки. На рис. 8.8 показана упрощенная схема нейтронного генератора.

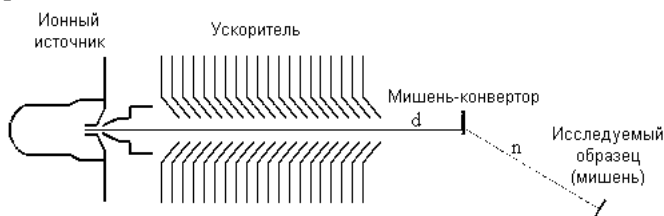


Рис. 8.8. Схема нейтронного генератора

Мишени-конвертеры нейтронных генераторов, позволяющих получить высокоинтенсивные потоки нейтронов, обычно твердотельные, и представляют собой тонкие слои (до нескольких десятков мкм) титана, скандия или цинка, нанесенные на медную подложку. Эти металлы способны образовывать так называемые металлические гидриды. Так гидриды титана или скандия способны удерживать до двух атомов изотопов водорода на один атом металла. Это свойство металлических гидридов позволяет использовать их в качестве аккумуляторов изотопов водорода и в частности изготавливать из них мишени-конвертеры. Энергия, теряемая пучком заряженных частиц в мишени, может достигать больших величин (до десятков кВт на квадратный сантиметр). Это требует эффективного охлаждения. Обычно используется водяное охлаждение. Кроме того, мишень часто представляет собой быстро вращающийся диск. Таким образом увеличивается эффективная площадь, на которую попадает пучок.

На нейтронных генераторах, использующих реакцию  $t(d,n)^4\text{He}$  удается получить потоки нейтронов до  $\sim 10^{14}$  нейтронов/с на телесный угол  $4\pi$ . У "стандартных" нейтронных генераторов они заметно меньше ( $\sim 10^{10}$  нейтронов/с).

#### 4. Генерация нейтронов на ускорителях

##### *Фотоядерные реакции*

Нейтроны получаются в результате фотонейтронных реакций от тормозного излучения электронов, падающих на мишень из тяжелых ядер. При энергии электронов 100 МэВ на 20 электронов образуется 1 нейтрон. На рис. 8.9 показаны зависимости выхода нейтронов на единицу мощности ускорителя от энергии нейтронов. При энергии электронов  $>100$  МэВ выход нейтронов практически перестает увеличиваться с ростом энергии.

Примером нейтронного источника такого типа может служить нейтронный источник на линейном ускорителе электронов ORELA (Oak Ridge Electron Linear Accelerator). Максимальная энергия электронов у ORELA 180 МэВ, длительность импульсов –  $4\div 30$  нс, частота –  $12\div 1000$  Гц. В качестве мишени-конвертера в основном используется Ta. В каждом нейтронном сгустке содержится  $10^{11}$  нейтронов в широком энергетическом диапазоне от  $10^{-3}$  до  $10^8$  эВ. Интенсивность нейтронов разных энергий составляет  $4\cdot 10^{13}$  МэВ $^{-1}$ с $^{-1}$  при энергии нейтронов 1 МэВ и  $4\cdot 10^{10}$  МэВ $^{-1}$ с $^{-1}$  при 14 МэВ. Для получения нейтронов тепловых энергий используется водяной модератор.

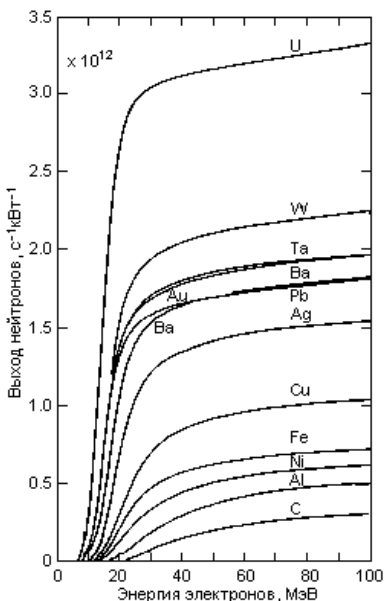


Рис. 8.9. Выход нейтронов в фотоядерных реакциях

Выход нейтронов из фотоядерных реакций мал. Для повышения выхода нейтронов используется размножающая мишень из делящегося материала (бустер).

### ***Реакция скалывания***

Когда высокоэнергетичный протон попадает в ядро, он последовательно взаимодействует с его нуклонами, передавая им часть своей энергии. Получившие энергию нуклоны, в свою очередь, взаимодействуют с другими нуклонами. В результате такого внутриядерного каскада, энергия налетевшего протона перераспределяется по все большему количеству нуклонов ядра и через некоторое время образуется составное ядро.

Часть нуклонов в процессе развития внутриядерного каскада вылетает из ядра. Такой процесс называется скалыванием или выбиванием (spallation, knock out). Кроме нуклонов из ядра могут вылетать кластеры (альфа-частицы, дейтроны, ...). Вылетают также  $\pi$ -мезоны, если энергия выше порога их образования. В случае использования толстой мишени формируется также внешний каскад, когда высокоэнергетические частицы из реакции скалывания в свою очередь попадают в ядра мишени.

Для толстых мишеней и энергий налетающих протонов от  $\approx 0.3$  ГэВ до  $\sim 1$  ГэВ выход нейтронов на толстых мишенях подчиняется простой эмпирической закономерности

$$Y(E, A) = 0,1(E - 0,120)(A + 20) \text{ для неделящихся мишеней,}$$

$$Y(E, A) = 50(E - 0,120) \text{ для } {}^{238}\text{U},$$

где энергия протонов  $E$  в ГэВ,  $A$  – массовое число. Рассчитанные по данным формулам интенсивности выходов нейтронов для мишеней из U и Hg представлены на рис. 8.10. При более высоких энергиях линейная зависимость выхода от энергии нарушается. Это

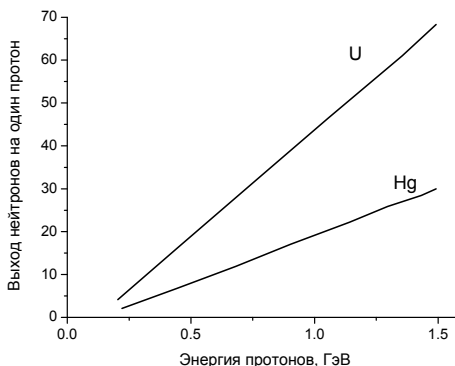


Рис.8.10. Выход нейтронов на толстых мишенях

связано с возрастающим сечением образования  $\pi^0$ -мезонов, которые из-за малого времени жизни практически не участвуют во внутриядерном каскаде.

Действующие и проектируемые источники нейтронов, основанные на использовании реакции скалывания, перечислены в табл. 8.3.

Проект SNS (Spallation Neutron Source) реализуется в Ок Ридже (США). В нем участвуют 6 национальных лабораторий США (Argonne, Brookhaven, Jefferson, Lawrence Berkeley, Los Alamos, Oak Ridge). В линейном ускорителе отрицательные ионы H<sup>-</sup> ускоряются до энергии 1 ГэВ. Затем ионы проходят через обдирочную мишень, лишаясь электронов и превращаясь в протоны. Далее протоны поступают в накопительное кольцо, в котором в течение 1060 оборотных циклов происходит их накопление. После этого они выводятся из накопительного кольца. Сформированные таким образом сгустки протонов с частотой 60 Гц и длительностью 0,7 мкс падают на мишень-конвертер, в которой в результате реакции скалывания образуются нейтроны. В импульсе содержится  $1,5 \times 10^{14}$  нейтронов. В качестве мишени используется ртуть. Ртуть была выбрана из следующих соображений. Как у элемента с большой атомной массой, у ядер ртути на 80 протонов в среднем приходится 120 нейтронов; ртуть – жидкость и не испытывает радиационных повреждений как твердое тело; она лучше может рассеивать быстро выделяющееся тепло и выдерживать ударные нагрузки, возникающие от коротких высокоэнергетичных протонных импульсов. Для получения тепловых и холодных нейтронов используются водные замедлители и замедлители с жидким водородом.

В установке n-TOF (CERN) используется протонный синхротрон (20 ГэВ). Длительность протонного сгустка ~6 нс, в каждом сгустке  $7 \times 10^{12}$  протонов. Реакция скалывания происходит на свинцовой мишени толщиной 40 см, охлаждаемой водой. Вода служит также замедлителем. В результате образуются нейтроны в широком энергетическом диапазоне, от 1 эВ до 250 МэВ. Каждый протонный сгусток преобразуется в нейтронный импульс со среднеквадратичным значением длительности ~7 нс и содержащим  $2 \times 10^{15}$  нейтронов. Нейтроны поступают в нейтронпровод, который расположен под углом  $10^\circ$  по отношению к направлению протонного пучка. В нейтронпроводе имеются коллиматоры и магнит, который про-

изводит очистку нейтронного пучка от остаточных заряженных частиц.

Таблица 8.3

Нейтронные источники, основанные на реакции скалывания

| Установка                        | Энергия протонов, МэВ | Ток, мкА | Частота, Гц | Мишень                 | Замедлитель                        | Статус             |
|----------------------------------|-----------------------|----------|-------------|------------------------|------------------------------------|--------------------|
| IPNS, Argonne, США               | 450                   | 15       | 30          | Уран                   | Жидкий метан, твердый метан        | Работает с 1981 г. |
| ISIS, Rutherford, Великобритания | 800                   | 200      | 50          | Тантал, Вольфрам, Уран | Жидкий метан, жидкий водород, вода | Работает с 1985 г. |
| KENS, KEK, Япония                | 500                   | 7        | 20          | Вольфрам, Уран         | Твердый метан, вода                | Работает с 1980 г. |
| MLNSC, LANL, США                 | 800                   | 100      | 20          | Вольфрам               | Жидкий водород, вода               | Работает с 1986 г. |
| n-TOF, CERN-PS                   | 20000                 | 1        | 50          | Свинец                 |                                    | Работает с 2001 г. |
| SNS, ORNL                        | 1000                  | 1400     | 60          | Ртуть                  | Жидкий водород, вода               | Работает с 2006 г. |
| JYF, JAERI Япония                | 3000                  | 333      | 25          | Ртуть                  |                                    |                    |
| ESS                              | 1330                  | 4000     | 50          | Ртуть                  |                                    |                    |
| CSNS, Китай                      | 1600                  | 62       | 25          | Вольфрам               |                                    |                    |

## 5. Спектр нейтронов

В реакторах нейтроны рождаются в результате деления ядер го- рючего. Энергетический спектр нейтронов деления практически одинаков для всех изотопов и почти не зависит от энергии падаю- щих нейтронов. Он простирается от 0 до примерно 10 МэВ и при- ближенно описывается формулой (спектр Уатта)

$$f(E') = \text{sh}(\sqrt{2E'}) \exp(-E'), \quad (8.1)$$

где  $E'$  – энергия нейтронов (в МэВ). Средняя энергия вылетающих нейтронов – 2 МэВ. Угловое распределение практически изотропно.

В ускорителях нейтроны рождаются в результате реакций, иду- щих в мишени, облучаемой потоком ускоренных заряженных час- тич. Во всех случаях рождаются нейтроны высоких энергий поряд- ка нескольких МэВ, поэтому для получения медленных нейтронов необходимо использовать замедлители.

Замедление нейтронов происходит вследствие неупругих столк- новений с тяжелыми ядрами и упругих столкновений с легкими ядрами. Первый процесс эффективен для быстрых нейтронов, вто- рой — для нейтронов промежуточных и низких энергий. Теряя энергию в столкновениях с ядрами замедлителя, нейтроны посте- пенно приближаются к состоянию теплового равновесия с замед- лителем (*термализуются*). Однако на практике тепловое равнове- сие никогда не достигается из-за эффектов захвата нейтронов яд- рами и утечки из пределов замедляющей системы. Эти эффекты приводят к тому, что нейтроны за время своего существования в замедляющей системе не успевают испытать числа столкновений, достаточного для установления теплового равновесия. Поэтому устанавливающийся в конечном итоге энергетический спектр ней- тронов в замедлителе оказывается несколько жестче, нежели рав- новесный максвелловский спектр. Последний имеет вид:

$$\frac{d\Phi}{dE} = \text{const} \cdot E \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad (8.2)$$

где  $\Phi$  — поток нейтронов,  $T$  — температура замедлителя. Если поглощение в замедлителе невелико, то установившийся спектр нейтронов оказывается близким к максвелловскому и приближенно описывается выражением (8.2), в которое, однако, вводится другая

температура ( $T_n$ ), называемая в литературе нейтронной температурой. Эффект некоторого ужесточения нейтронного спектра отражается в том, что  $T_n > T$ .

На рис. 8.11 приводится спектр нейтронов, выходящих из отверстия в защите реактора; там же для сопоставления приводится равновесный максвелловский спектр, вычисленный для температуры замедлителя. Рисунок иллюстрирует два основных эффекта: а) некоторое ужесточение нейтронного спектра; б) искажение максвелловского характера спектра в области высоких энергий, где спектр изменяется с энергией по закону  $1/E$ .

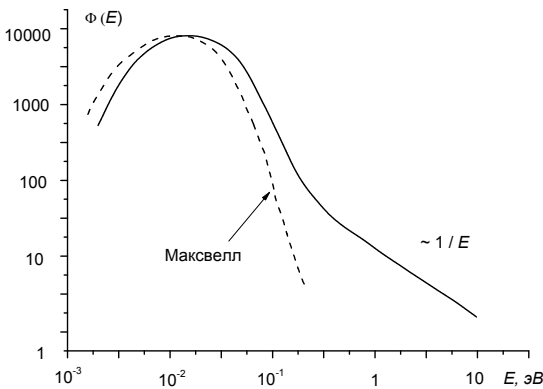


Рис. 8.11. Энергетический спектр нейтронов, выходящих из замедлителя реактора [1]

Чем ближе установившийся в замедлителе нейтронный спектр к равновесному максвелловскому распределению, тем, очевидно, выше качество данного замедлителя. Качество конкретного замедлителя определяется, во-первых, вероятностью нейтронам избежать поглощения и, во-вторых, эффективной величиной энергии, теряемой нейтроном в каждом столкновении. При упругом столкновении мерой указанной потери энергий служит величина  $\xi$ , называемая *логарифмическим декрементом энергии*

$$\xi = \overline{\ln(E_1 / E_2)}, \quad (8.3)$$

где  $E_1$  и  $E_2$  — энергии нейтрона до и после соударения соответственно. Он выражается через атомный вес  $A$  ядра замедлителя следующим образом:

$$\xi = 1 + \frac{(A-1)^2}{4A} \ln \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2 \cong \frac{2}{A+2/3}. \quad (8.3a)$$

Из (8.3a) видно, что более эффективны замедлители, содержащие *легкие* ядра, т. е. прежде всего водородсодержащие замедлители. К сожалению, у протонов большое сечение поглощения нейтронов, поэтому часто используют иные замедлители — более тяжелые, но зато с меньшим сечением поглощения нейтронов.

Количественной характеристикой замедляющих свойств материала служит *коэффициент замедления*, который определяется отношением

$$\frac{\xi \Sigma_s}{\Sigma_a(E)},$$

где  $\Sigma_s$  и  $\Sigma_a$  — макросечения (обратные длины свободного пробега) рассеяния и поглощения нейтронов соответственно. В табл. 8.4 приводятся для четырех замедлителей значения *замедляющей способности* ( $\xi \Sigma_s$ ) и коэффициента замедления. Числа приводятся для тепловых нейтронов. Из таблицы видно, что коэффициент замедления обычной воды оказывается, вследствие большого поглощения нейтронов, ниже, чем у остальных приведенных здесь замедлителей. Выше всего замедляющие качества у тяжелой воды.

В обычных реакторах на тепловых нейтронах формируется квазимаксвелловский нейтронный спектр с  $T_n \approx 400$  К, что приблизительно на  $100^\circ$  превышает температуру замедлителя.

Большие возможности для формирования спектров нейтронов и варьирования соотношений между быстрыми, тепловыми нейтронами и фотонами предоставляют радиальные горизонтальные каналы. Это достигается применением тех или иных фильтров, устанавливаемых глубоко в канале.

Таблица 8.4

Характеристики основных замедлителей нейтронов

| Замедлитель  | $\xi \Sigma_s$ ,<br>см <sup>-1</sup> | $\frac{\xi \Sigma_s}{\Sigma_a(E)}$ | Замедлитель | $\xi \Sigma_s$ ,<br>см <sup>-1</sup> | $\frac{\xi \Sigma_s}{\Sigma_a(E)}$ |
|--------------|--------------------------------------|------------------------------------|-------------|--------------------------------------|------------------------------------|
| Обычная вода | 1,53                                 | 72                                 | Бериллий    | 0,176                                | 159                                |
| Тяжелая вода | 0,370                                | 12000                              | Графит      | 0,064                                | 170                                |



## §9. Нейтронные монохроматоры\*

Проведение различных исследований требует обычно использования *моноэнергетических* нейтронных пучков (т. е. пучков нейтронов, энергии которых лежат в достаточно узком интервале около заданного значения). Методы монохроматизации основываются как на *корпускулярных*, так и на *волновых* свойствах нейтрона.

### Методы монохроматизации, использующие корпускулярные свойства нейтрона

Используя корпускулярные свойства нейтрона, можно применять различные механические устройства, разделяющие нейтроны по разнице в скоростях (точнее, по разнице времен, требуемых нейтронам для пролета некоторого заданного расстояния). Эти устройства называют *механическими селекторами* скоростей нейтронов.

Простейший механический селектор скоростей состоит из одного прерывателя, предназначенного для преобразования непрерывного нейтронного пучка из реактора в последовательность отдельных импульсов.

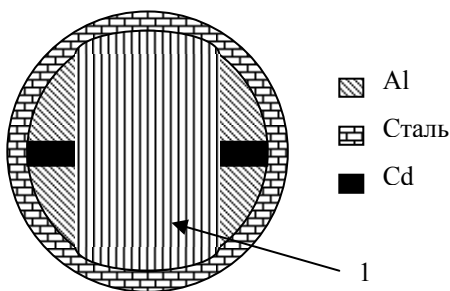


Рис. 9.1. Механический прерыватель.  
1 — многослойный пакет из кадмиевых и алюминиевых фольг

На рис. 9.1 представлен первый прерыватель для медленных нейтронов, предложенный Ферми. Он представляет собой вращающийся с большой скоростью (порядка 10000 об/мин) цилиндр, ось которого перпендикулярна к направлению пучка. Цилиндр набран из расположенных вдоль оси и чередующихся тонких слоев алюминия и кадмия. Алюминий хо-

\* Материал данного параграфа непосредственно основан на монографии [1].

рошо пропускает медленные нейтроны, а кадмий, напротив, почти полностью их задерживает. Поэтому нейтроны проходят сквозь цилиндр лишь при расположении слоев параллельно направлению пучка. Таким образом, вращение цилиндра попеременно то закрывает, то открывает путь для медленных нейтронов, вследствие чего непрерывный поток разбивается на отдельные импульсы. Чем выше скорость вращения ротора, тем, очевидно, более узок выходящий из ротора импульс.

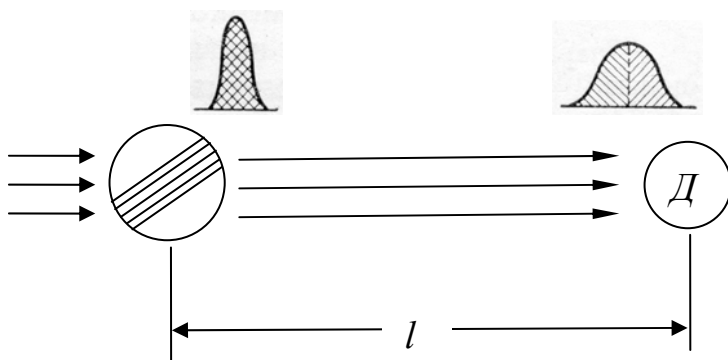


Рис. 9.2. Схема прерывателя в сочетании с техникой времени пролета; нейтронный импульс в начале и в конце пролетного расстояния  $l$ .  $D$  — детектор; левая штриховка — нейтроны с энергией ниже некоторого значения  $E_1$ ; правая штриховка — нейтроны с энергией выше  $E_1$ .

Нейтронные импульсы, выходящие из прерывателя, анализируются по времени, затрачиваемому нейтронами на пролет некоторого заданного расстояния (*техника времени пролета*). Для анализа используются соответствующие электронные устройства. Если в самом начале пролетного расстояния в нейтронном импульсе были «перемешаны» нейтроны самых различных энергий, то к концу пролета происходит естественная «пересортировка»: более медленные нейтроны отстают от более быстрых, импульс во времени растягивается (рис. 9.2). Если включать детектор нейтронов в определенные моменты времени (строго согласованные с моментом посылки импульса), то можно регистрировать нейтроны лишь из

определенного участка растянувшегося импульса, т. е. в определенном интервале скоростей (энергий).

Разрешение рассматриваемого монохроматора (представляющего собой прерыватель в сочетании с техникой времени пролета) определяется длительностью нейтронного импульса и длительностью промежутка времени, на которое включается детектор (т. е. шириной временного канала анализатора). Энергия нейтрона  $E$  связана со временем  $t$  пролета расстояния  $l$  соотношением

$$E = \frac{m/2}{(t/l)^2}$$

или (9.1)

$$E(\text{эВ}) = \frac{5150}{(t/l)^2}.$$

В последнем соотношении и далее в формуле (9.2) время выражено в секундах, а расстояние в метрах. Отсюда находим разрешение по энергии и неопределенность в энергии

$$\frac{\Delta E}{E} = -\frac{2\Delta t}{t},$$

$$\Delta E = -0,028E^{3/2} \frac{\Delta t}{l}, \quad (9.2)$$

где неопределенность во времени  $\Delta t$  обусловлена длительностью исходного импульса и шириной канала анализатора. Из (9.2) видно, что разрешение по энергии пропорционально  $\sqrt{E}$ , что определяет верхний энергетический предел области применимости данной установки. Заметим, что увеличение пролетного расстояния с целью улучшения разрешения установки ограничено соображениями сохранения интенсивности.

На практике применяется также механический селектор из одного ротора, который не только прерывает, но и одновременно грубо монохроматизирует пучок. Это достигается тем, что ротор имеет щели *искривленной формы* (рис. 9.3). При заданной форме щели и скорости вращения ротор пропускает нейтроны лишь в определенном энергетическом интервале.

В настоящее время широко применяются *многороторные системы*, состоящие из двух, трех и четырех последовательно расположенных и взаимно синхронизированных вращающихся роторов. Для понимания принципа действия многороторных установок достаточно рассмотреть *двухроторную установку*.

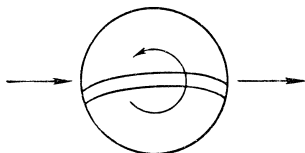


Рис. 9.3. Ротор с параболической щелью

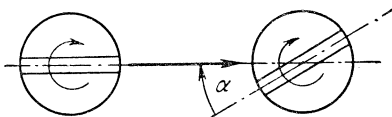


Рис. 9.4. Схема двухроторного механического селектора с прямыми щелями

Двухроторный механический селектор представлен на рис. 9.4. Здесь первый на пути пучка ротор служит *прерывателем* нейтронного пучка, а второй ротор *отбирает* из поступающих в него нейтронных импульсов нейтроны определенной энергии (точнее, в определенном энергетическом интервале), значение которой задается длиной пролетного расстояния между роторами, скоростью вращения роторов и синхронизацией. Щели роторов должны быть повернуты друг относительно друга на угол  $\alpha = \omega l / v$ , где  $\omega$  — угловая скорость вращения роторов,  $l$  — пролетное расстояние между ними,  $v$  — скорость регистрируемых нейтронов.

Многороторные системы обладают рядом преимуществ: наряду с большой светосилой они характеризуются тем, что позволяют выделять достаточно узкую монохроматическую линию нейтронов, допускают изменение энергии нейтронов в широком диапазоне (вплоть до очень низких энергий), позволяют сильно снизить фон быстрых нейтронов в падающем пучке,

Если источник нейтронов является *импульсным* (ускоритель или импульсный реактор), то необходимость в роторе, играющем роль прерывателя пучка, очевидно, отпадает. В этом случае вращение остающегося ротора (или роторов) синхронизируют непосредственно с импульсами источника.

## Методы монохроматизации, использующие волновые свойства нейтрона

К установкам, в которых для монохроматизации медленных нейтронов используются волновые свойства последних, относятся *монокристаллические монохроматоры* и *кристаллические фильтры*. Их применение основано на нейтронно-оптическом явлении дифракции.

Рассмотрим сначала монокристаллические монохроматоры. Для фиксированной ориентации данного монокристалла в падающем нейтронном пучке и при заданном угле рассеяния нейтронов  $\theta$  будут, как известно, отражаться лишь те нейтроны, длина волны которых удовлетворяет условию Брэгга — Вульфа

$$2d \sin \frac{\theta}{2} = n\lambda = \frac{nh}{\sqrt{2mE}}, \quad (9.3)$$

где  $m$  и  $E$  — соответственно масса и энергия нейтронов (это выражение совпадает с (5.9), если учесть, что угол скольжения равен половине угла рассеяния  $\theta$ ). Как видно из брэгговского условия, в данном направлении отражаются нейтроны нескольких энергий

$$E_n = n^2 h^2 \left[ 8md^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right]^{-1}, \quad \text{где } n = 1, 2, \dots \quad (9.4)$$

т. е. имеют место *отражения различных порядков*.

На практике используют только отражение первого порядка, а от остальных порядков пытаются избавиться. Отражения более высоких порядков оказываются слабее отражения первого порядка, что имеет две причины. Первая причина связана с тем, что интенсивность отражения уменьшается с энергией нейтронов по закону  $1/E$ , а поскольку  $E_n \sim n^2$  (в более высоких порядках отражения представлены более быстрые нейтроны), то, следовательно, интенсивность  $n$ -го отражения должна быть в  $n^2$  раз меньше интенсивности отражения первого порядка. Вторая причина состоит в том, что если в основном отражении участвуют нейтроны с энергией вблизи максимума спектра падающих на монокристалл тепловых нейтронов, то нейтроны с энергией, отвечающей более высоким порядкам отражения, будут попадать в район спада максвелловского распределения, что также должно обуславливать уменьшение относительной интенсивности отражений высших порядков.

Следует иметь в виду, что применение монокристаллического монохроматора с целью выделения линии очень медленных нейтронов наталкивается на затруднения двоякого рода. Во-первых, принципиально невозможно выделять нейтроны с длиной волны, превышающей удвоенное максимальное межплоскостное расстояние в решетке, так как такие нейтроны просто не испытывают брэгговского отражения. Во-вторых, при выделении очень медленных нейтронов будут существенным образом мешать отражения высших порядков, поскольку в этом случае нейтроны высших отражений будут попадать в более интенсивную часть максвелловского распределения, что в некоторой степени скомпенсирует влияние зависимости  $1/E$ . В связи с этим возникает проблема исключения отражений высших порядков при работе с монокристаллами в области достаточно низких энергий нейтронов. Эта проблема разрешается либо посредством применения монокристаллов, симметрия которых такова, что они не дают отражений второго порядка (например, магнетит и германий), либо посредством использования в сочетании с монокристаллом механических прерывателей или фильтров.

Исходя из условия Брэгга, можно найти разрешение монокристаллического монохроматора:

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{2\Delta\lambda}{\lambda}, \quad (9.5)$$

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta\theta}{2} \cdot \operatorname{ctg} \frac{\theta}{2}.$$

Из (9.5) видно, что неопределенность в энергии отраженных моноэнергетических нейтронов пропорциональна неопределенности в угле рассеяния и *возрастает с уменьшением угла*. Это обстоятельство накладывает ограничения на применение монокристаллов как монохроматоров со стороны высоких энергий. Так, например, для того чтобы выделить нейтроны с энергией 10 эВ при отражении от плоскости (200) монокристалла NaCl, надо обеспечить угол рассеяния  $\theta = 1^\circ 50'$ , а для выделения нейтронов с энергией 100 эВ требуется угол  $\theta = 36'$ . В то же время неопределенность в угле  $\Delta\theta$ , обусловленная разбросом нейтронов пучка по углам и дефектами кристаллического образца, оказывается порядка  $20'$ .

Рассмотренные ограничения снизу и сверху определяют тот интервал энергий, в пределах которого может использоваться монокристаллический монокроматор. Этот интервал простирается приблизительно от 0,01 эВ до 10 эВ.

Первый нейтронный кристаллический монокроматор был построен и применен в 1947 г. Цинном, использовавшим монокристалл кальцита. Позднее наиболее употребительными стали монокристаллы свинца, бериллия, цинка, кремния, германия и др. При работе на больших длинах волн нейтронов целесообразнее применять кристаллы с большими межплоскостными расстояниями (например, германий), в случае же более коротких длин волн — кристаллы с меньшими межплоскостными расстояниями (например, бериллий).

В некоторых случаях применяют монокристаллы с *изогнутыми поверхностями*, что позволяет заметно улучшить фокусировку отраженного пучка. При этом возможны два способа изгибания кристалла: по Кошуа и по Джоану. Эти способы демонстрируются на рис. 9.5, где пунктиром изображены отражающие плоскости.

Применяются также установки с *вращающимся монокристаллом*. Они сочетают в себе свойства монокристаллического монокроматора и механического прерывателя и дают моноэнергетические импульсы нейтронов. Отметим, что установки, использующие монокристаллы для монохроматизации нейтронов, обладают высоким разрешением (порядка 1%) по сравнению с многими другими установками. Недостаток их заключается в малой светосиле, что не позволяет применять их для ряда исследований на реакторах средней мощности.

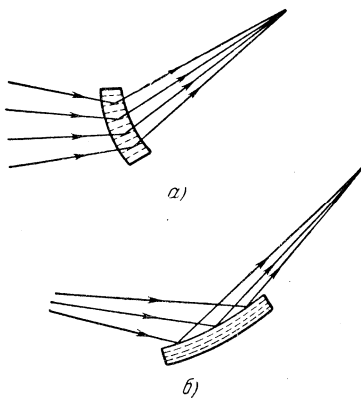


Рис. 9.5. Ход лучей при отражении от монокристаллов, изогнутых по Кошуа (а) и по Джоану (б)

Далее, рассмотрим *кристаллические фильтры*. Применение фильтров также основывается на нейтронно-оптическом явлении

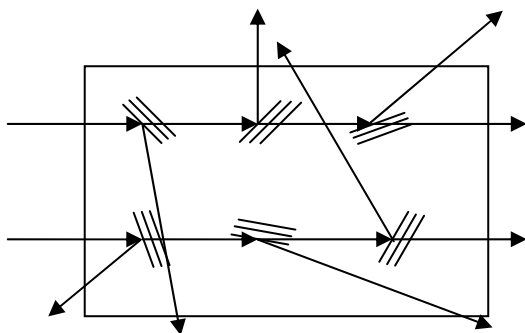


Рис. 9.6. Схема процесса фильтрации нейтронного пучка при его прохождении сквозь поликристаллический

дифракции. Они выделяют из падающего пучка медленных нейтронов часть спектра, соответствующую области низких энергий. Принцип их действия основан на том, что нейтроны с длиной волны, большей удвоенного межплоскостного расстояния в решетке (т. е. с  $\lambda > \lambda_b$ , где  $\lambda_b$  —

граничная длина волны), не испытывают брэгговского отражения. Фильтр изготавливается из поликристалла, причем подбирается вещество с достаточно малым сечением поглощения нейтронов и малой амплитудой некогерентного рассеяния. Для уменьшения влияния неупругого рассеяния фильтр обычно охлаждают жидким азотом (77 К). В таком фильтре основным процессом взаимодействия медленных нейтронов с ядрами будет упругое когерентное рассеяние. Однако нейтроны с длинами волн  $\lambda > \lambda_b$  вообще не испытывают упругого когерентного рассеяния, и поэтому для них фильтр оказывается в значительной степени прозрачным. В то же время нейтроны с длинами волн  $\lambda < \lambda_b$  будут интенсивно рассеиваться и в результате выбывать из направленного пучка.

Поликристаллическость фильтра как раз и обеспечивает интенсивное рассеяние этих нейтронов (рис. 9.6).

На рис. 9.7 приведен энергетический спектр нейтронов до и после прохождения поликристаллического фильтра. Отметим, что для спектра отфильтрованных нейтронов характерно существование достаточно резкого обрыва со стороны малых длин волн (брэгговского скачка).



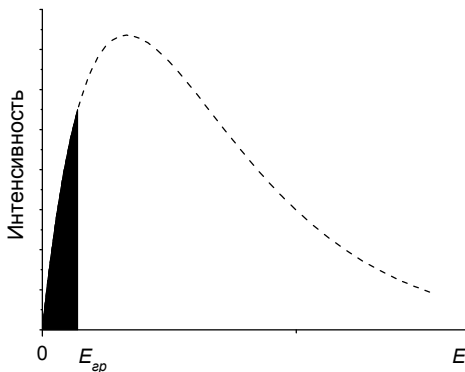


Рис. 9.7. Энергетический спектр отфильтрованных нейтронов (закрашенная область).  $E_{гр}$  — граничная энергия нейтронов, отвечающая граничной длине волны  $\lambda_b$ . Пунктиром показан спектр нейтронов, падающих на фильтр

В табл. 9.1 даны значения граничных длин волн и отвечающих им граничных энергий нейтронов для некоторых фильтров, используемых на практике.

Таблица 9.1

Граничные длины волн и энергии.

| Материал фильтра | $\lambda_b, \text{ \AA}$ | $E_{гр} = \frac{h^2}{2m\lambda_b^2}, \text{ эВ}$ |
|------------------|--------------------------|--|
| Бериллий         | 3,95                     | 0,0052   |
| Оксид бериллия   | 4,4                      | 0,0042   |
| Свинец           | 5,7                      | 0,0025   |
| Графит           | 6,69                     | 0,00183  |
| Висмут           | 8,00                     | 0,00128  |

Большим достоинством поликристаллических фильтров является то, что они обладают наибольшей светосилой по сравнению с прочими монохроматорами. Однако, с другой стороны, у них есть существенный недостаток: большое размытие спектральной линии со стороны больших длин волн ( $\Delta E / E \sim 40 - 50\%$ ).

Размытие первичной линии может быть уменьшено с помощью *метода разностных фильтров*. В этом методе используются два фильтра с близкими граничными энергиями (например, бериллий и оксид бериллия). Измерения проводятся сначала с одним, а затем с

другим фильтром. Далее определяют разность полученных результатов, которая представляет эффект рассеяния нейтронов с энергиями в интервале между двумя граничными значениями.

Наряду с поликристаллическими фильтрами применяют также *монокристаллические фильтры*, обладающие малыми сечениями поглощения и некогерентного упругого рассеяния. Эти фильтры в малой степени ослабляют поток тепловых нейтронов, но в то же время существенно ослабляют нежелательные сопутствующие излучения, такие, как быстрые нейтроны и  $\gamma$ -лучи.

Кварцевый монокристаллический фильтр длиной 27,5 см, охлаждаемый жидким азотом, ослабляет поток быстрых нейтронов в 25 раз, резонансных — в 2000 раз,  $\gamma$ -лучей с энергией 2 МэВ — в 30 раз, а тепловых нейтронов — всего в 2,5 раза.

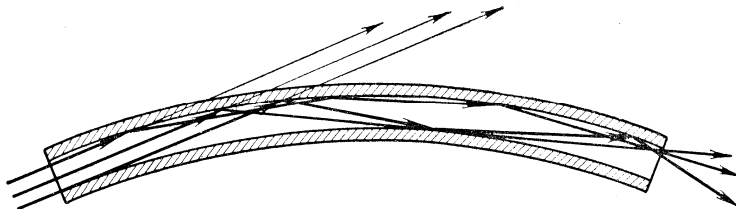


Рис. 9.8. Нейтроны в изогнутом нейтронводе

Наконец, обсудим вопросы транспортировки на большие расстояния и фильтрации тепловых нейтронов. Для этих целей используют изогнутые нейтронводы, действие которых основано на нейтронно-оптическом явлении зеркального отражения (рис. 9.8). Нейтроны с достаточно большой длиной волны (связанной с радиусом закругления нейтронвода) будут испытывать полное отражение от стенок и, таким образом, останутся внутри нейтронвода; отражаясь от стенок, эти нейтроны в конечном счете попадут на образец. Нейтроны же более быстрые пройдут сквозь стенку нейтронвода и поглотятся в окружающей его защите.

## §10. Нейтронные поляризаторы\*

При наличии некоторого физически выделенного направления (например, при включении магнитного поля) спины нейтронов в пучке могут быть ориентированы либо параллельно, либо антипараллельно этому направлению. Обозначим число нейтронов в пучке, спин которых ориентирован по полю, через  $n_+$ , а число нейтронов с противоположной ориентацией спина – через  $n_-$ . Возможность только двух спиновых ориентаций связана, очевидно, с равенством спина нейтрона одной второй. При  $n_+ = n_-$  пучок нейтронов является *неполяризованным*. Если же  $n_+ \neq n_-$ , то в этом случае говорят, что пучок *частично поляризован*. Степень поляризации пучка принято характеризовать величиной  $p$ , которая определяется выражением

$$p = \frac{n_+ - n_-}{n_+ + n_-}. \quad (10.1)$$

Если  $n_{\pm} = 0$ , то величина  $p = \pm 1$ ; в этом случае говорят о пучке, *поляризованном полностью*. В общем случае

$$-1 \leq p \leq 1.$$

Ниже рассматриваются методы получения поляризованных пучков медленных нейтронов.

### Метод пропускания пучка сквозь намагниченный образец

Наиболее ранние эксперименты по поляризации нейтронов были выполнены с помощью метода, в котором нейтронный пучок пропускался сквозь намагниченный до насыщения ферромагнетик (железо). Этот метод поляризации нейтронов был предложен в 1936 г. Блохом. Амплитуда рассеяния определяется суммой ядерного и магнитного взаимодействия

---

\* Материал данного параграфа непосредственно основан на монографии [1].

$$f = -b \pm |f_M|, \quad (10.2)$$

где  $b$  – длина рассеяния нейтрона на ядрах,  $f_M$  – амплитуда магнитного рассеяния. Наличие знака  $\pm$  связано с тем, что энергия магнитного момента  $\boldsymbol{\mu}$  в магнитном поле с индукцией  $\mathbf{B}$  равна  $E = -\boldsymbol{\mu}\mathbf{B}$  и двум противоположным направлениям  $\boldsymbol{\mu}$  отвечают энергии  $\pm E$ . Соответственно и амплитуда магнитного рассеяния нейтронов изменяет знак при изменении ориентации спина нейтрона относительно направления намагничивания.

Обозначим через  $(d\sigma/d\Omega)_+$  и  $(d\sigma/d\Omega)_-$  сечения рассеяния нейтронов, спины которых направлены, соответственно, вдоль и против направления намагничивания. Эти сечения могут быть записаны в виде:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_\pm = b^2 + f_M^2 \pm 2b|f_M|. \quad (10.3)$$

Так как сечение  $(d\sigma/d\Omega)_+$  превышает сечение  $(d\sigma/d\Omega)_-$  на удвоенную величину интерференционного слагаемого  $2b|f_M|$ , то поэтому при прохождении через намагниченный ферромагнетик более эффективно будут рассеиваться и выбывать из пучка нейтроны со спинами, параллельными направлению намагничивания. Следовательно, в пучке, прошедшем сквозь образец, должны преобладать нейтроны с противоположным направлением спина, а это означает, что прошедший пучок будет в какой-то степени поляризованным.

Пусть образец содержит  $N$  ядер в единице объема и имеет толщину  $d$ . Обозначим через  $I_0$  интенсивность падающего неполяризованного пучка, а через  $I_+$  и  $I_-$  интенсивности после образца для нейтронов, поляризованных соответственно вдоль и против направления намагничивания. Для сокращения записи введем обозначения

$$\int d\Omega(b^2 + f_M^2) \equiv \sigma_0, \quad \int d\Omega 2b|f_M| \equiv \sigma_1.$$

Если пучок нейтронов не поляризован, то в нем числа нейтронов с положительно и отрицательно направленными спинами равны. Пренебрегая поглощением нейтронов в образце, получаем

$$I_{\pm} = \frac{1}{2} I_0 \exp[-Nd(\sigma_0 \pm \sigma_1)]. \quad (10.4)$$

Отсюда, используя (10.1), находим:

$$\begin{aligned} p &= \frac{I_- - I_+}{I_- + I_+} = \frac{\exp(Nd\sigma_1) - \exp(-Nd\sigma_1)}{\exp(Nd\sigma_1) + \exp(-Nd\sigma_1)} = \\ &= \text{th}(Nd\sigma_1) = \text{th}\left(2Ndb \int d\Omega |f_M|\right). \end{aligned} \quad (10.5)$$

Из полученного выражения видно, что поляризация нейтронно-го пучка при прохождении сквозь намагниченный образец физически связана с эффектом интерференции между ядерным и магнитным рассеянием нейтронов.

Если сечение  $\sigma_1$  не превышает барна, то для толщины железного блока порядка нескольких сантиметров произведение  $(Nd\sigma_1)$  оказывается порядка 0,1. В этом случае результат (10.5) несколько упрощается:

$$p = \text{th}(Nd\sigma_1) \approx Nd\sigma_1. \quad (10.6)$$

Заметим, что даже при  $Nd\sigma_1 = 0,4$  ошибка от замены гиперболического тангенса его аргументом не превышает 5%.

Следует подчеркнуть, что выражения (10.5) и (10.6) применимы только к тем образцам, которые намагничены до полного насыщения.

Рассматриваемый метод поляризации нейтронов характеризуется рядом неудобств. Во-первых, требуется намагничивание образца практически до полного насыщения, так как в противном случае даже небольшие различия в ориентациях доменных областей приводят к значительной *деполяризации* пучка уже в самом образце. Следовательно, нужны сильные намагничивающие поля. На практике используют поля напряженностью порядка 10 000 э и добиваются при этом поляризации пучка не выше 0,5 – 0,6. Во-вторых, данный метод требует для получения более высокой степени поляризации использования относительно толстых образцов, что, с дру-

гой стороны, приводит к заметной потере в интенсивности нейтронного пучка. На практике используют образцы толщиной около 5 см.

Если поляризованный нейтронный пучок пропускать через немагнитный (или слабо намагнитный) образец, то наблюдается деполяризация пучка. Следует подчеркнуть, что процесс деполяризации первоначально поляризованного нейтронного пучка при прохождении сквозь немагнитный блок осуществляется несравненно легче, нежели процесс поляризации пучка при прохождении сквозь намагнитный блок. Так, например, лист немагнитного железа толщиной всего 0,3 мм деполяризует пучок полностью поляризованных нейтронов до  $p = 0,001$ .

### Метод дифракции на ферромагнитных кристаллах

Другим методом поляризации пучков медленных нейтронов является метод, основанный на дифракции от определенных плоскостей намагнитных ферромагнитных монокристаллов.

Интенсивность когерентного магнитного рассеяния неполяризованных нейтронов на ферромагнетике, намагнитном до насыщения, пропорциональна множителю

$$\delta^2 = 1 - (\mathbf{eh})^2, \quad (10.7)$$

где  $\mathbf{h}$  и  $\mathbf{e}$  – единичные векторы в направлениях намагничивания и изменения импульса нейтрона при рассеянии соответственно. Рассмотрим два крайних случая:

- а)  $\mathbf{e} \uparrow \uparrow \mathbf{h}$ , при этом  $\delta^2 = 0$ ;
- б)  $\mathbf{e} \perp \mathbf{h}$ , при этом  $\delta^2 = 1$ .

В случае а) магнитная дифракция вообще отсутствует (магнитная амплитуда  $f_M$  в этом случае обращается в нуль). В случае б) сечение магнитного когерентного рассеяния (а, следовательно, и магнитная амплитуда  $f_M$ ) оказывается, напротив, максимальным по сравнению с другими возможными относительными ориентациями векторов  $\mathbf{h}$  и  $\mathbf{e}$ . Таким образом, изменяя относительную ориентацию векторов  $\mathbf{h}$  и  $\mathbf{e}$ , можно изменять величину магнитной амплитуды рассеяния  $f_M$  от нуля до некоторого максимального значения, соответствующего случаю б). Это достигается подбором

различных семейств отражающих кристаллических плоскостей и различных направлений намагничивания образца. Следует иметь в виду при этом, что разница в величине амплитуд  $f_M$  для различных брэгговских отражений обуславливается не только множителем  $\delta$ , но также, например, атомным формфактором. Можно в принципе подобрать для данного монокристаллического образца такое брэгговское отражение и такое направление намагничивания, чтобы выполнялось следующее условие:

$$b_{coh} = |f_M|, \quad (10.8)$$

т. е. чтобы ядерная и магнитная амплитуды оказались равны друг другу. Испытав такое отражение, неполяризованный нейтронный пучок станет почти полностью поляризованным, поскольку для указанного отражения

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_- = (b_{coh} - |f_M|)^2 = 0, \quad (10.9)$$

и, следовательно, отражаться будут только те нейтроны, спин которых ориентирован по полю.

Условие (10.8) хорошо выполняется, например, при отражении от плоскости (220) магнетита  $Fe_3O_4$  при намагничивании кристалла в таком направлении, чтобы векторы  $\mathbf{h}$  и  $\mathbf{e}$  оказались взаимно перпендикулярными. В этом случае  $b_{coh} / |f_M| = 0,98$  и, таким образом,  $(d\sigma/d\Omega)_- \ll (d\sigma/d\Omega)_+$ .

Данный метод позволяет получать нейтронные пучки с высокой степенью поляризации ( $p \approx 0,95$ ). Отметим, что получаемые поляризованные пучки оказываются также достаточно высокоэнергетичными.

### Метод отражения от намагниченных зеркал

Данный метод основан на существовании двух критических углов скольжения при полном отражении нейтронов от намагниченных зеркал. Как было показано в § 6 главы 1 (формулы (6.18) и (6.12)), критический угол определяется соотношением:

$$\theta_c = \sqrt{2(1-n)} = \sqrt{2 \frac{mU_0}{\hbar^2 k^2}}, \quad (10.10)$$

где  $U_0$  – средний потенциал взаимодействия нейтрона с веществом, равный сумме энергий взаимодействия нейтронов с ядрами и с магнитным полем. Учитывая, что энергия сильного взаимодействия определяется формулой (6.14), а энергия магнитного взаимодействия равна  $E = -\mu\mathbf{B}$ , получаем

$$U_0 = \frac{2\pi\hbar^2 N}{m} b_{coh} \pm \mu B, \quad (10.11)$$

где  $b_{coh}$  – когерентная амплитуда ядерного рассеяния на закрепленном ядре. Соответственно для критических углов имеем:

$$\theta_c = \lambda \sqrt{\frac{N}{\pi} b_{coh} \pm \frac{m}{2\pi^2 \hbar^2} \mu B}. \quad (10.12)$$

Знак « + » в (10.12) соответствует критическому углу скольжения нейтронов, спин которых направлен вдоль поля (а магнитный момент, соответственно, против поля), тогда как знак « - » связан с нейтронами, спин которых ориентирован против поля. Если падающий нейтронный пучок является моноэнергетическим, то критические углы скольжения имеют определенные значения. Отбирая нейтроны, отраженные в промежутке между этими углами, получают поляризованный пучок с поляризацией вдоль намагничивающего поля.

Данный метод поляризации вряд ли был бы практически удобным, если бы не существовало материалов, для которых при соответствующем намагничивании выполнялось условие

$$N b_{coh} < \frac{\mu B m}{2\pi \hbar^2}. \quad (10.13)$$

Такое условие выполняется для кобальта при намагничивании  $B \geq 0,65 B_{нас}$  ( $B_{нас}$  – величина магнитной индукции, соответствующая насыщению). При выполнении условия (10.13) намагниченное кобальтовое зеркало практически совсем не будет отражать нейтроны, спины которых направлены против намагничивающего по-



ля, поскольку для таких нейтронов эффективная когерентная амплитуда оказывается отрицательной:

$$b_{eff}^- = b_{coh} - \frac{\mu B m}{2N\pi\hbar^2} < 0.$$

Следовательно, в отраженном пучке должны присутствовать практически лишь нейтроны со спинами, направленными по полю; пучок должен быть почти полностью поляризованным. Заметим, что на практике достигается поляризация  $p \approx 0,99$ .

Весьма существенно, что условие (10.13) не содержит характеристик энергии нейтронов. Это означает, что требование предварительной монохроматизации падающего нейтронного пучка может быть снято.

Зеркало изготавливают, нанося электролитическим методом тонкий слой кобальта (толщиной всего около 0,5 мм) на медную подложку. Найдено, что практически удобнее применять не чистый кобальт, а сплав, состоящий на 92 % из кобальта и на 8 % из железа. Добавление железа оказывает влияние на атомную структуру, и из-за этого сплав намагничивается легче, чем чистый кобальт. Зеркало шлифуется и полируется до получения оптически плоской отражающей поверхности. Для намагничивания зеркало помещается внутрь системы из катушек электромагнитов.

Далее, рассмотрим три различных варианта отражения нейтронов от намагниченного зеркала. Они показаны на рис. 10.1. В случае *a* направление намагничивания перпендикулярно, а в случаях *b* и *в* – параллельно отражающей поверхности, причем в случае *b* вектор  $\mathbf{B}$  лежит в плоскости падающего и отраженного пучков, тогда как в случае *в* он перпендикулярен к этой плоскости. Короткие стрелки на рисунке показывают направление нейтронных спинов; спиновые состояния неполяризованных пучков в каждом из рассматриваемых случаев представлены в виде суперпозиции состояний со спинами вдоль и против намагничивающего поля.

Из трех приведенных на рис. 10.1 вариантов осуществляются только два последних (*b* и *в*). Вариант *a* неосуществим, поскольку на поверхности тела нормальная составляющая вектора  $\mathbf{B}$  непрерывна (это есть следствие того, что  $div\mathbf{B} = 0$ ). Следовательно, в случае *a* поверхность тела не является «магнитной» границей для

нейтронов, и поэтому магнитное взаимодействие в этом случае не будет влиять на отражение нейтронных волн от рассматриваемой поверхности.

Варианты  $\bar{b}$  и  $\bar{v}$  осуществимы, поскольку касательные компоненты вектора  $\mathbf{B}$  испытывают скачок на поверхности тела. Заметим, что принципиально оба эти варианта равноценны. На практике обычно применяется вариант  $\bar{v}$ .

Вектор  $\mathbf{H}$  при переходе через границу тело — среда ведет себя иначе, чем вектор  $\mathbf{B}$ . Его касательные компоненты непрерывны (т.к.  $\text{rot}\mathbf{H} = 0$ ), а скачок испытывает нормальная компонента. Если бы магнитное взаимодействие нейтронов с веществом определялось не вектором  $\mathbf{B}$ , а вектором  $\mathbf{H}$ , то тогда бы был осуществим вариант  $\bar{a}$  и неосуществимы варианты  $\bar{b}$  и  $\bar{v}$ . Непрерывность на поверхности тела касательных компонент вектора  $\mathbf{H}$  означает, что, строго говоря, величина  $B$ , входящая в выражение для показателя преломления нейтронов, должна быть заменена величиной  $B - H = B(1 - 1/\mu)$ . Однако поскольку для ферромагнетиков  $\mu \gg 1$ , то указанной поправкой можно пренебрегать.

На рис. 10.2 представлена зависимость степени поляризации нейтронов от напряженности намагничивающего поля для случая кобальтового зеркала. Из рисунка видно, что насыщение достигается при напряженности поля порядка 1000 э.

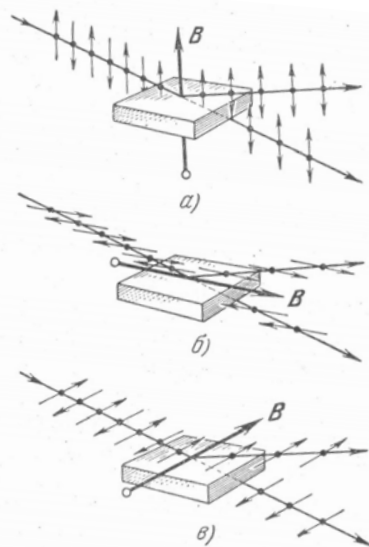


Рис. 10.1. Три варианта отражения нейтронов от намагниченного зеркала

Метод получения поляризованных нейтронов при помощи отражения от намагниченных зеркал широко применяется на практике, причем чаще всего применяют кобальтовые зеркала. Это связано с тем, что ядерное рассеяние нейтронов обычно сильнее магнитного. Поэтому добиться выполнения условия (10.13) можно лишь на ядрах с малой длиной рассеяния, а таким ядром является кобальт.

Данный метод поляризации применим к нейтронам различных энергий, включая область холодных нейтронов. Заметим, что со стороны высоких энергий метод имеет очевидное ограничение, связанное с уменьшением критического угла скольжения при увеличении энергии нейтронов.

Метод отражения от намагниченных зеркал позволяет получить практически полностью поляризованные нейтронные пучки высокой интенсивности (до  $10^8$  нейтронов/сек), ограниченной лишь интенсивностью исходного пучка.

### Измерение степени поляризации

Степень поляризации нейтронного пучка, отраженного от зеркала, может быть исследована с помощью второго зеркала по *эффекту двукратного отражения*: пучок последовательно отражается от двух намагниченных зеркал, из которых первое играет роль поляризатора, а второе — анализатора нейтронов.

Когда оба зеркала (поляризатор и анализатор) намагничены в одном и том же направлении, тогда почти полностью поляризованный нейтронный пучок от поляризатора должен отражаться от второго зеркала практически без потери интенсивности. При намагничивании же зеркал в противоположных направлениях интенсив-

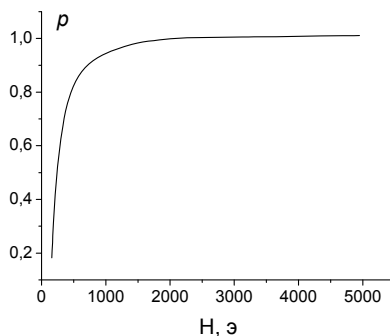


Рис. 10.2. Зависимость степени поляризации нейтронов кристаллом Co + 8% Fe от напряженности намагничивающего поля

ность отраженного от анализатора пучка должна быть близка к нулю.

Часто измерение эффекта двукратного отражения проводят по следующей схеме (рис. 10.3). Измеряют интенсивность пучка, отраженного от второго зеркала, в двух случаях: в отсутствие и при наличии в промежутке между поляризатором  $\Pi$  и анализатором  $A$  листа немагнитического железа, играющего роль деполаризатора  $ДП$ . Обозначим измеряемые интенсивности, соответственно, через  $I_A$  и  $I_B$ . В обоих случаях зеркала намагничиваются в одном и том же направлении. Измерение интенсивностей позволяет найти отношение  $R = I_A / I_B$ . Выразим данное отношение через поляризации  $p_1$  и  $p_2$ , получаемые, соответственно, на первом и втором зеркале при условии, что на зеркала падают неполяризованные нейтронные пучки.

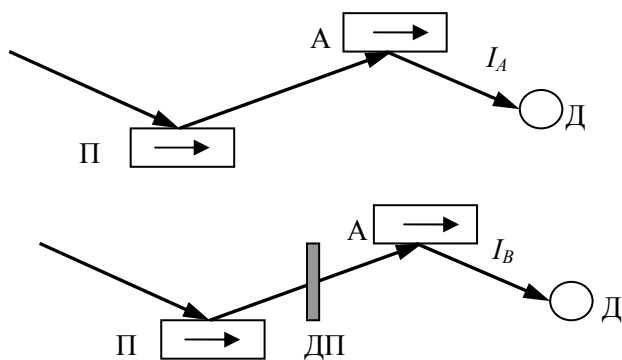


Рис. 10.3. Схема двукратного отражения.  $Д$  — детектор нейтронов

В неполяризованном пучке нейтронов, попадающих в поляризатор,  $I_0/2$  нейтронов имеют «положительно» ориентированные спины и  $I_0/2$  — «отрицательно» ориентированные спины (под «положительным» направлением будем понимать направление вдоль поля). В пучке, выходящем из поляризатора, будет находить-

ся  $\alpha_1 I_0/2$  «положительных» и  $\beta_1 I_0/2$  «отрицательных» нейтронов, где  $\alpha_1$  и  $\beta_1$  — характеристики поляризатора (например,  $\alpha_1$  есть отношение числа «положительных» нейтронов, выходящих из поляризатора, к числу таких нейтронов, входящих в поляризатор).

Если деполяризатор отсутствует, то в анализатор попадут указанные выше количества «положительных» и «отрицательных» нейтронов. Вводя для анализатора характеристики  $\alpha_2$  и  $\beta_2$ , аналогичные характеристикам  $\alpha_1$  и  $\beta_1$  поляризатора, получаем отсюда, что из анализатора выйдут  $\alpha_2 \alpha_1 I_0/2$  «положительных» и  $\beta_2 \beta_1 I_0/2$  «отрицательных» нейтронов. Полная интенсивность результирующего пучка будет равна

$$I_A = (\alpha_2 \alpha_1 + \beta_2 \beta_1) \frac{I_0}{2}. \quad (10.14)$$

Если деполяризатор присутствует, то в этом случае в анализатор попадет одинаковое число «положительных» и «отрицательных» нейтронов — по половине от полного числа нейтронов, вышедших из поляризатора, равного

$$(\alpha_1 + \beta_1) \frac{I_0}{2}$$

(подразумевается, что деполяризатор настолько тонок, что выбыванием нейтронов из пучка в результате рассеяния в деполяризаторе можно пренебрегать). Таким образом, при наличии деполяризатора в анализатор попадают  $\frac{1}{2}(\alpha_1 + \beta_1)I_0/2$  «положительных» и  $\frac{1}{2}(\alpha_1 + \beta_1)I_0/2$  «отрицательных» нейтронов. Из анализатора выйдут  $\alpha_2 \frac{1}{2}(\alpha_1 + \beta_1)I_0/2$  «положительных» и  $\beta_2 \frac{1}{2}(\alpha_1 + \beta_1)I_0/2$  «отрицательных» нейтронов. Полная интенсивность результирующего пучка будет в этом случае равна:

$$I_B = \left( \alpha_2 \frac{\alpha_1 + \beta_1}{2} + \beta_2 \frac{\alpha_1 + \beta_1}{2} \right) \frac{I_0}{2}. \quad (10.15)$$

Из (10.14) и (10.15) получаем:

$$R = \frac{I_A}{I_B} = 2 \frac{\alpha_1 \alpha_2 + \beta_1 \beta_2}{(\alpha_1 + \beta_1)(\alpha_2 + \beta_2)} = 2 \frac{1 + \frac{\beta_1 \beta_2}{\alpha_1 \alpha_2}}{\left(1 + \frac{\beta_1}{\alpha_1}\right) \left(1 + \frac{\beta_2}{\alpha_2}\right)}. \quad (10.16)$$

Отношения  $\beta_1/\alpha_1$  и  $\beta_2/\alpha_2$  могут быть выражены соответственно через  $p_1$  и  $p_2$ . При попадании в поляризатор неполяризованного пучка интенсивности  $I_0$  получается пучок, в котором  $\alpha_1 I_0/2$  «положительных» и  $\beta_1 I_0/2$  «отрицательных» нейтронов; следовательно,

$$p_1 = \frac{\alpha_1 \frac{I_0}{2} - \beta_1 \frac{I_0}{2}}{\alpha_1 \frac{I_0}{2} + \beta_1 \frac{I_0}{2}} = \frac{\alpha_1 - \beta_1}{\alpha_1 + \beta_1} = \frac{1 - \frac{\beta_1}{\alpha_1}}{1 + \frac{\beta_1}{\alpha_1}},$$

откуда находим:

$$\frac{\beta_1}{\alpha_1} = \frac{1 - p_1}{1 + p_1}. \quad (10.17)$$

Аналогично для анализатора получаем:

$$\frac{\beta_2}{\alpha_2} = \frac{1 - p_2}{1 + p_2}. \quad (10.18)$$

Подставляя (10.17) и (10.18) в (10.16), получаем:

$$R = \frac{I_A}{I_B} = 1 + p_1 p_2. \quad (10.19)$$

Если принять  $p_1 = p_2$ , то из (10.19) получаем:

$$R = 1 + p^2. \quad (10.20)$$

Предположим, что  $p \approx 1$ . Тогда (10.20) дает  $R \approx 2$ . Этот результат достаточно очевиден. В самом деле, если  $p \approx 1$ , то, следовательно, зеркало отражает все нейтроны со спином по полю и не отражает ни одного нейтрона со спином против поля. Если  $I_0$  —

интенсивность пучка, падающего на поляризатор, то отсюда следует, что на анализатор должен падать пучок интенсивности  $I_0/2$ . В отсутствие деполяризатора вся эта интенсивность должна отразиться от анализатора (напоминаем, что зеркала намагничены одинаково), так что  $I_A = I_0/2$ . При наличии же деполяризатора от анализатора отразится лишь половина падающей на него интенсивности и, следовательно,  $I_B = I_0/4$ . Отсюда и получаем, что  $R = (I_0/2)/(I_0/4) = 2$ .

Если схему измерения изменить таким образом, чтобы поляризатор и анализатор были теперь намагничены в противоположных направлениях, то в этом случае вместо соотношения (10.19) получаем:

$$R = 1 - p_1 p_2. \quad (10.21)$$

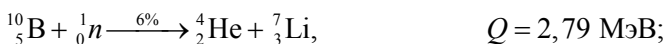
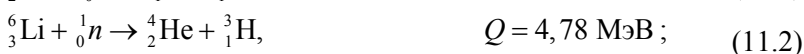
Заметим, однако, что этот вариант измерения эффекта двукратного отражения менее удобен, нежели первый вариант, из-за опасности адиабатического переворачивания нейтронных спинов в промежутке между зеркалами.

Следует подчеркнуть, что при выводе соотношений (10.19) и (10.21) мы использовали только общие характеристики поляризатора и анализатора, но не их конкретный вид. Следовательно, они являются *общими соотношениями*: они применимы к любой системе, состоящей из поляризатора и анализатора. Так, например, его можно применять не только в случае, когда поляризатор и анализатор — намагниченные зеркала, но также и в случае двукратного прохождения или же в любом смешанном случае (например, в случае, когда поляризация происходит при отражении от намагниченного зеркала, а анализ производится посредством пропускания пучка сквозь намагниченный ферромагнетик).

## §11. Детекторы нейтронов

Нейтроны не обладают электрическим зарядом и не оставляют после себя следов (треков) из ионизированных и возбуждённых частиц, появление которых вызывает срабатывание большинства детекторов частиц. Поэтому нейтронный детектор всегда содержит некоторое вещество — конвертер, ядра которого при взаимодействии с нейтронами порождают заряженные частицы или  $\gamma$ -кванты. Для детектирования нейтронов используются различные виды взаимодействия нейтронов с ядрами.

1. **Ядерные реакции с вылетом заряженных частиц.** Для детектирования нейтронов обычно применяют три реакции:



94% ↘



↘



Выбор ядер  ${}^3\text{He}$ ,  ${}^6\text{Li}$ ,  ${}^{10}\text{B}$  в качестве конвертора обусловлен большим сечением захвата нейтронов этими ядрами. Реакции (11.1) – (11.3) являются экзоэнергетическими (идут с выделением энергии) и используются для регистрации как быстрых, так и медленных нейтронов. Пробег в веществе  $\alpha$ -частиц и протонов малы, поэтому ядра  ${}^3\text{He}$ ,  ${}^6\text{Li}$ ,  ${}^{10}\text{B}$  обычно вводятся внутрь газоразрядных или сцинтилляционных детекторов.

С увеличением энергии нейтрона  $E_n$  эффективность падает:  $\varepsilon \sim 1/\sqrt{E_n}$  для  $E_n < 0,1$  МэВ. Поэтому при регистрации быстрых нейтронов нейтронные детекторы окружаются водородсодержащим веществом, в котором происходит замедление нейтронов.

2. **Деление ядер под действием нейтронов.** Разлетающиеся осколки деления, обладая большой энергией ( $\sim 80$  МэВ на 1 осколок),



образуют на выходе нейтронного детектора импульс с амплитудой в 50 – 100 раз большей, чем в предыдущих случаях.

- $n + {}^{235}\text{U} \rightarrow$  продукты деления,  $Q \sim 160$  МэВ.
- $n + {}^{239}\text{Pu} \rightarrow$  продукты деления,  $Q \sim 160$  МэВ.

Конвертерами служат  ${}^{233}\text{U}$  (сечение деления для тепловых нейтронов  $\sigma_f = 533$  барн),  ${}^{235}\text{U}$  ( $\sigma_f = 580$  барн),  ${}^{239}\text{Pu}$  ( $\sigma_f = 750$  барн). Внутренняя поверхность ионизационной камеры покрывается тонким слоем делящихся веществ. Так как пробег осколков в конвертере мал ( $8 \text{ мг/см}^2$ ), то даже для толстого слоя  ${}^{235}\text{U}$  эффективность регистрации тепловых нейтронов невелика. Для ее увеличения камеры делаются многослойными (до 20 слоев).

3. **Упругое рассеяние нейтронов на ядрах.** Нейтроны, упруго рассеивающиеся на ядрах, передают им кинетическую энергию (энергию отдачи), которая зависит от параметра удара, массы ядра и энергии налетающего нейтрона. Для лёгких ядер (H,  ${}^2\text{H}$ , He) доля передаваемой энергии высока. При центральном ударе нейтрон передаёт протону всю энергию. Для регистрации ядер отдачи используются обычно пропорциональные счётчики, наполненные  $\text{H}_2$ ,  $\text{CH}_4$  и  ${}^4\text{He}$ . Этим методом можно регистрировать только нейтроны с энергией больше нескольких десятков кэВ, т. к. слабую ионизацию от ядер отдачи трудно выделить над шумами аппаратуры и фоном от  $\gamma$ -квантов. Для детектирования нейтронов больших энергий обычно используются сцинтилляционные детекторы с органическими сцинтилляторами (содержащие много водорода) значительных размеров, в которых пробеги протонов отдачи велики.

Рассмотрим подробнее конструкцию детекторов, основанных на реакциях (11.1) – (11.3), так как именно они часто используются для детектирования тепловых нейтронов в опытах по изучению конденсированных сред.

### Детекторы нейтронов, содержащие ${}^3\text{He}$ и ${}^{10}\text{B}$

Такие детекторы, принцип действия которых основан на использовании ядерных реакций (11.1) и (11.3), обычно являются газонаполненными (рис. 11.1).

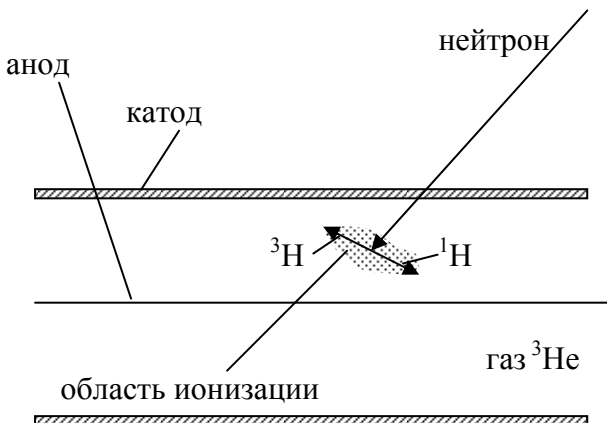


Рис. 11.1. Схема газонаполненного детектора нейтронов

Конструктивно как гелиевые, так и газовые борные счетчики, выполняются в виде цилиндрических конденсаторов, центральным электродом которых является анод из вольфрамовой нити. В  ${}^3\text{He}$  счетчиках он заполняется газовой смесью из  $\text{Ar}$  и  ${}^3\text{He}$ , в которой содержание гелия колеблется от 70 до 95%. В борных детекторах рабочим газом в них является трифторид бора  $\text{BF}_3$ , в состав которого может входить бор естественного изотопного состава или обогащенный изотопом  ${}^{10}\text{B}$  до 96%. При осуществлении реакций  ${}^3\text{He}(n, p)\text{T}$  или  ${}^{10}\text{B}(n, \alpha)\text{Li}$  внутри чувствительного объема счетчика возникает ионизация газа, вызванная продуктами этих реакций. Образованные ионы и электроны собираются на электродах, создавая в цепи камеры ток.

Газовые счетчики могут работать в зависимости от подаваемого на них напряжения и давления газовой смеси в различных режимах.

При небольшом напряжении газовые счетчики работают в режиме ионизационной камеры. Достоинства ионизационной камеры — простота, надёжность; недостаток — малый уровень сигнала, который определяется количеством пар ионов и электронов, образованных в газе заряженной частицей. Ионизационная камера имеет горизонтальный участок на вольт-амперной характеристике, со-

ответствующий полному сборанию ионов и электронов (рис. 11.2).

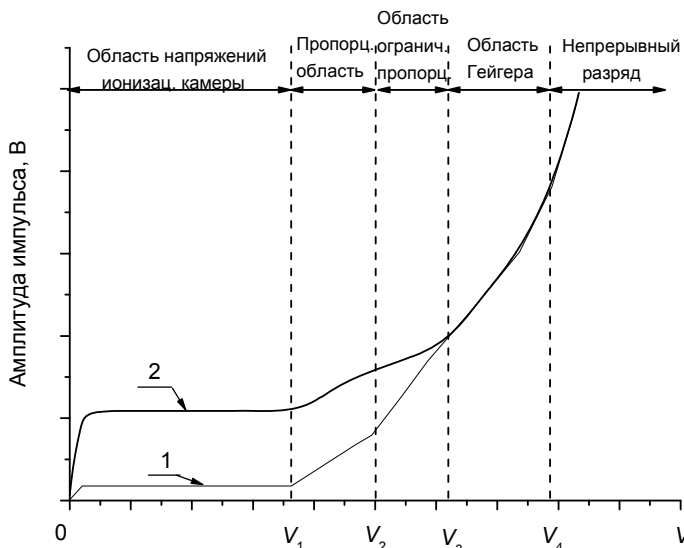


Рис. 11.2. Зависимость амплитуды импульсов, вырабатываемых ионизационными детекторами, от напряжения на электродах в случае прохождения через детектор: 1 – быстрой космической частицы, образующей  $N = 10 - 20$  пар ионов; 2 –  $\alpha$ -частицы, создающей  $N = 10^5$  пар ионов

Если продолжать повышать разность потенциалов на электродах, то электроны, движущиеся к аноду, будут приобретать всё большую энергию и, начиная с некоторого напряжения, будут сами производить ионизацию и рождают новые поколения ионизирующих электронов. В результате заряд, собираемый на аноде, может в  $10^3 - 10^6$  раз превышать первичную ионизацию. Эта область напряжений называется пропорциональной областью, а детектор – *пропорциональным счётчиком* (область напряжений  $V_1 \div V_2$ ). Характерная особенность этой области состоит в том, что при постоянной разности потенциалов и составе газа коэффициент пропорциональности между первичной ионизацией и сигналом на аноде остаётся постоянным.

Продолжая увеличивать напряжение на электродах, мы попадём через область ограниченной пропорциональности в область Гейге-

ра  $V_3 \div V_4$ , где заряд, собираемый на аноде, не зависит от первичной ионизации. Амплитуда импульса в этой области будет зависеть лишь от приложенного напряжения. Это происходит потому, что независимо от первичной затравочной ионизации лавина электронов распространяется вдоль всей нити счётчика и процесс обрывается тогда, когда поле анода полностью экранируется облаком медленных положительных ионов.

Если плотность ядер в счетчике не очень велика и счетчик является "тонким" детектором, то он не искажает пространственного распределения потоков нейтронов. В этом случае число реакций, происходящих в объеме счетчика в секунду, равно

$$N = N_0 \int_0^{\infty} \sigma_{act}(E) v n(E) dE, \quad (11.4)$$

где  $N_0$  — полное число ядер  ${}^3\text{He}$  или  ${}^{10}\text{B}$  в рабочем объеме счетчика,  $n(E)$  — концентрация нейтронов с энергией  $E$ . Сечение захвата изменяется обратно пропорционально скорости нейтрона  $\sigma_{act}(E) = \sigma_0 v_0 / v$ . Следовательно, измеряя число импульсов, мы находим полную плотность нейтронов

$$n = \int_0^{\infty} n(E) dE = \frac{N}{N_0 \sigma_0 v_0}. \quad (11.5)$$

Если счетчик не тонкий, то поток нейтронов  $vn$  уменьшается по мере прохождения нейтронов через объем детектора, и в формуле (11.4) надо ввести поправочный коэффициент. В одной из естественных конфигураций нейтроны летят на торцевую поверхность газонаполненного цилиндрического счетчика вдоль его оси. Так как поток нейтронов экспоненциально уменьшается при прохождении через вещество  $j \sim \exp(-l/l_c)$ , где  $l_c$  — длина свободного пробега, то

$$N = \xi N_0 \int_0^{\infty} \sigma_{act}(E) v n(E) dE, \quad (11.6)$$

$$\xi = \frac{1}{l} \int_0^l \exp(-x/l_c) dx = \frac{l_c}{l} (1 - \exp(-l/l_c)), \quad (11.7)$$

где  $l$  — длина рабочего объема счетчика. Важной характеристикой детектора является его эффективность — доля зарегистрированных нейтронов от общего числа, попавших в объем детектора

$$\varepsilon = 1 - \exp(-l/l_c) = 1 - \exp(-n_0 l \sigma_{act}), \quad (11.8)$$

где  $n_0$  — концентрация ядер  ${}^3\text{He}$  или  ${}^{10}\text{B}$ ,  $\sigma_{act}$  — полное сечение захвата нейтрона ядром  ${}^3\text{He}$  или  ${}^{10}\text{B}$ . Учитывая, что концентрация  $n_0$  пропорциональна давлению  $p$  газа, а сечение захвата обратно пропорционально скорости нейтрона  $\sigma_{act} \sim 1/v$ , находим, что эффективность борного детектора может быть выражена следующей формулой:

$$\varepsilon = 1 - \exp(-1,7 \cdot 10^{-2} pl / \sqrt{E}), \quad (11.9)$$

где длина  $l$  измеряется в см,  $p$  — в атм;  $E$  — энергия нейтронов, эВ. Так, при  $p = 10^5$  Па (1 атм),  $l = 20$  см эффективность регистрации тепловых нейтронов ( $E = 0,025$  эВ) составит примерно 0,9, а при энергии нейтронов 100 эВ она будет равна всего 0,03. Следовательно, обычный борный счетчик пригоден для детектирования только медленных нейтронов.

Удовлетворительно различить импульсы от регистрации нейтронов и  $\gamma$ -квантов можно за счет использования порогового дискриминатора. Для этого, как показано на рис. 11.3, выбирают так называемый порог дискриминации. Все импульсы с амплитудой, меньшей пороговой, отбрасываются. Как видно на рис. 11.3, отброшенные импульсы в основном соответствуют быстрым нейтронам и  $\gamma$ -квантам, т.е. фону.

Реакция  ${}^3\text{He}(n,p)\text{T}$  может быть использована для целей спектрометрии быстрых нейтронов. У ядра трития нет низколежащих уровней возбуждения, поэтому кинетическая энергия нейтрона и энергия реакции 0,764 МэВ целиком перейдут в кинетическую энергию протона и ядра трития.

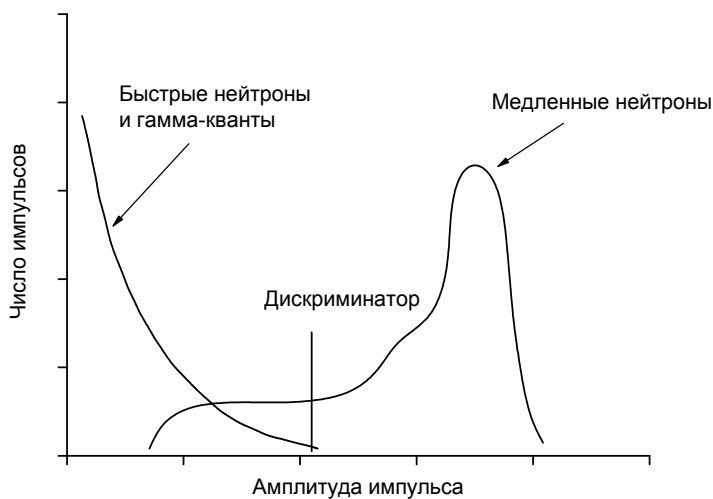


Рис. 11.3. Амплитудное распределение импульсов от пропорционального счетчика с He, облучаемого медленными нейтронами, и от фона быстрых нейтронов и  $\gamma$ -квантов

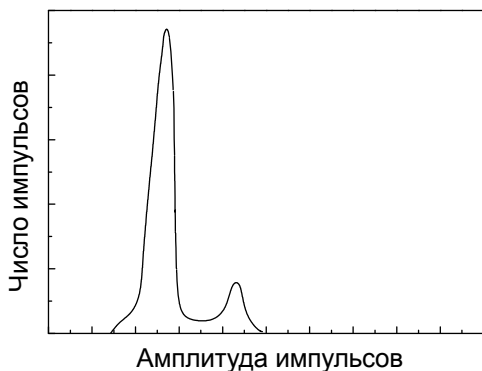


Рис. 11.4. Амплитудное распределение импульсов от пропорционального счетчика с  $\text{BF}_3$ , облучаемого медленными нейтронами

На рис. 11.4 представлен типичный аппаратный спектр импульсов от пропорционального счетчика при регистрации тепловых нейтронов борным счетчиком. На рисунке отчетливо видны два пика от реакций  $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}$  (правый пик) и  $^{10}\text{B}(n, \alpha)^7\text{Li}^*$  (левый пик), с увеличением энергии падающих на счетчик нейтронов оба пика смещаются в сторону больших амплитуд. По этому смещению можно

определить энергию нейтронов, хотя наличие двух аппаратных пиков вместо одного сильно усложняет расшифровку спектра.

### Детекторы нейтронов, содержащие ${}^6\text{Li}$

В отличие от рассмотренных выше газоразрядных детекторов, детекторы нейтронов, содержащие  ${}^6\text{Li}$ , являются сцинтилляционными. Их действие основано на реакции (11.2) и последующей регистрации световых вспышек в видимой или УФ-области, возникающих при прохождении заряженных частиц ( ${}^4\text{He}$  и  ${}^3\text{H}$ ) через сцинтиллятор.

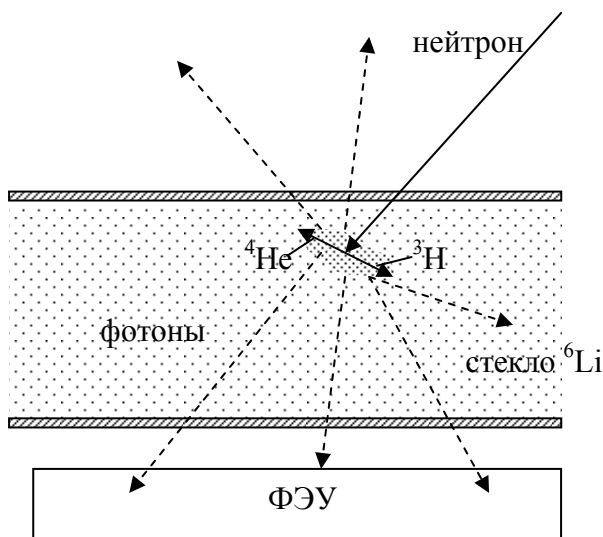


Рис. 11.5. Схема сцинтилляционного детектора нейтронов.

Основные элементы сцинтилляционного детектора (рис. 11.5) — сцинтиллятор и соединённый с ним оптически фоторегистратор, преобразующий энергию световой вспышки в электрический импульс. В качестве фоторегистратора обычно используют фотоэлектронный умножитель (ФЭУ). Световые фотоны, попадая на фотокатод ФЭУ, выбивают из него электроны, которые фокусируются на 1-й динод, размножаются динодной системой в результате про-

песса вторичной электронной эмиссии и окончательно собираются на аноде ФЭУ, создавая в его цепи электрический импульс.

Доля энергии, конвертированная в световую вспышку от полной энергии, потерянной частицей в сцинтилляторе, называется конверсионной эффективностью  $C_k$ . Она является основным параметром сцинтилляционного детектора. Для наиболее эффективных сцинтилляторов значение  $C_k$  достигает 0,1 – 0,3. Конверсионная эффективность зависит от типа регистрируемой частицы и от её удельных потерь энергии.

Параметры различных сцинтилляторов, используемых для детектирования нейтронов, приведены в табл. 11.1.

Таблица 11.1

Сцинтилляторы, применяемые для нейтронных детекторов

| Материал       | Концентрация атомов ${}^6\text{Li}$ (см <sup>-3</sup> ) | Эффективность сцинтиллятора | Длина волны фотона (нм) | Число фотонов на 1 нейтрон |
|----------------|---|-----------------------------|-------------------------|----------------------------|
| Li стекло (Ce) | $1.75 \times 10^{22}$                                   | 0.45 %                      | 395                     | ~7,000                     |
| LiI (Eu)       | $1.83 \times 10^{22}$                                   | 2.8 %                       | 470                     | ~51,000                    |
| ZnS (Ag) - LiF | $1.18 \times 10^{22}$                                   | 9.2 %                       | 450                     | ~160,000                   |

Твердотельные детекторы, основанные на использовании реакции (11.2), чаще всего представляют собой сцинтилляционные монокристаллы йодистого лития, активированные европием —  ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$ . В сцинтилляционном счетчике, помещенном в поле тепловых нейтронов, возникают импульсы, амплитудное распределение которых имеет достаточно острый пик, соответствующий суммарной энергии  $\alpha$ -частицы и ядра трития. Разрешающее время сцинтилляционного счетчика составляет около 0,3 мкс. Эффективность по отношению к медленным нейтронам зависит от размеров монокристалла и может достигать 98%, 2% следует отнести захвату нейтрона на йоде. Размеры детекторов на основе  ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$ : диаметр 20—30 мм, высота 2—30 мм. Кристаллы гигроскопичны, и их упаковывают в защитные контейнеры. Для улучшения амплитудного



разрешения кристалл  ${}^6\text{Li}(\text{Eu})$  полезно охлаждать до температуры жидкого азота.

Высокоэффективными детекторами тепловых и медленных нейтронов являются сцинтилляционные алюмо-магниево-силикатные литиевые стекла, активированные церием. Одними из основных преимуществ литиевых стекол являются их негигроскопичность и стойкость к воздействию атмосферных факторов. Детекторы из них можно изготовить любой формы, необходимой для условий эксперимента. Постоянная времени высвечивания составляет около 60 нс. Недостатками их являются низкий световой выход и худшее амплитудное разрешение, чем у монокристаллов йодистого лития.

Также используют для регистрации медленных нейтронов дисперсионные детекторы на основе светосоставов, содержащих  ${}^6\text{Li}$ . Обычно приготавливают конгломерат из  $\text{ZnS}(\text{Ag})$  и  ${}^6\text{LiF}$ , а связующим является полиметилметакрилат.

Реакция  ${}^6\text{Li}(n, \alpha){}^3\text{H}$  может быть использована и для регистрации быстрых нейтронов с энергиями от 1 до 12 МэВ. Созданный на основе сцинтилляционного кристалла  ${}^6\text{Li}(\text{Eu})$  спектрометр не требует предварительной коллимации потока нейтронов, так как суммарная энергия продуктов реакции не зависит от направления падения нейтрона, вызвавшего рассматриваемую реакцию. Как и в случае регистрации тепловых нейтронов, сцинтилляционные кристаллы йодистого лития желательно охлаждать до температуры жидкого азота в целях улучшения амплитудного разрешения импульсов. Связано это с тем, что  $\alpha$ -частицы и ядра трития могут получать различные доли энергии нейтрона, а световой выход сцинтиллятора сильно зависит от удельной ионизации, производимой ими, что и приводит к большому разбросу амплитуд импульсов, соответствующих нейтронам определенной энергии.

Механизмы преобразования энергии частицы в световую вспышку различны для разных сцинтилляторов. В большинстве случаев они могут быть сведены к следующей (упрощённой) схеме: 1) ионизация и возбуждение атомов и молекул, образование радикалов; 2) перенос энергии возбуждения к центрам свечения (радиационный, резонансный, экситонный, электронно-дырочный); 3) возбуждение и высвечивание центров свечения.

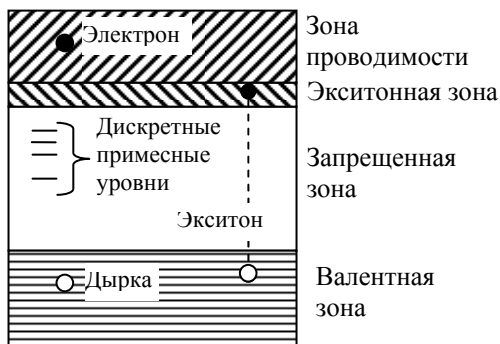


Рис. 11.6.  
Зонная диаграмма  
ионного кристалла

Неорганические сцинтилляторы — монокристаллы с добавкой активатора. Они обладают высокой эффективностью и достаточно большой длительностью высвечивания. Механизм высвечивания неорганических сцинтилляторов иллюстрирует зонная диаграмма ионных кристаллов (рис. 11.6). Внутри запрещённой энергетической зоны могут быть дискретные уровни энергии ионов активатора (напр.,  $\text{Eu}$  для  $\text{LiI}$ ), а также других неизбежных примесей и дефектов кристаллической решётки.

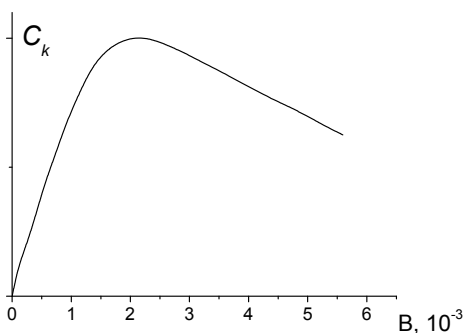


Рис. 11.7. Зависимость  
световыхода  $C_k$  кристалла  
 $\text{NaI}$  от концентрации  $\text{Tl}$

При прохождении заряженной частицы электроны могут получать энергию, достаточную для перехода из валентной зоны в экситонную зону и зону проводимости. Обратные переходы электронов в зону валентности с промежуточным захватом на дискретных уровнях запрещенной зоны приводят к испусканию оптических фотонов. Поскольку их энергия  $\hbar\omega$  меньше ширины запрещённой

зоны, а плотность дискретных уровней мала, кристалл оказывается для них прозрачным. Световой выход зависит от концентрации активатора В (рис. 11.7). Уменьшение световыхода при больших концентрациях связано с ростом вероятности поглощения фотонов на активаторных уровнях.

Сцинтиллятор может быть как неорганическим, так и органическим (кристаллы, пластики или жидкости). В качестве органических сцинтилляторов часто используются антрацен ( $C_{14}H_{10}$ ), стильбен ( $C_{14}H_{12}$ ), нафталин ( $C_{10}H_8$ ). Жидкие сцинтилляторы обычно известны под фирменными именами (например NE213). Пластиковые и жидкие сцинтилляторы представляют собой растворы органических флуоресцирующих веществ в прозрачном растворителе.

# Глава 3. Экспериментальные методики нейтронных исследований конденсированных сред

## ***§12. Структурная нейтронография\****

Экспериментальные данные по упругому когерентному ядерному рассеянию тепловых нейтронов используются для получения сведений об атомной структуре кристаллических решеток, жидкостей и молекул газа. Получение и интерпретация этих данных составляют предмет структурной нейтронографии.

Нейтронографические исследования проводят в сочетании с рентгено- и электронографическими. Использование медленных нейтронов позволяет в целом ряде случаев получать данные, которые не могут быть получены с помощью рентгеновских лучей и электронов (или же получаются с плохим разрешением). Эти случаи можно разбить на четыре группы:

а) исследования структуры водородсодержащих и, в частности, органических соединений, позволяющие фиксировать положения водородных атомов, длину и форму водородных связей;

б) исследования структуры соединений, включающих элементы с сильно различающимися атомными номерами (например, PbS, ThD<sub>2</sub>, WO<sub>2</sub>, ThC<sub>2</sub> и др.);

в) исследования структуры соединений из элементов с достаточно близкими атомными номерами — случай, диаметрально противоположный предыдущему; в частности, изучение явления упорядочивания в таких сплавах, как, например, FeCo или Ni<sub>3</sub>Mn;

г) структурные исследования систем, состоящих из определенных изотопов одного и того же элемента.

Неудобства или даже невозможность применения рентгеновских лучей для структурных исследований в указанных случаях связаны с тем, что рентгеновские амплитуды рассеяния пропорциональны атомному номеру рассеивателя. Эта пропорциональность приводит к тому, что в случае соединений из элементов с сильно различаю-

---

\* Материал данного параграфа непосредственно основан на монографии [1].

щимися номерами (в особенности в случае водородсодержащих соединений) рентгеновские лучи как бы «не замечают» легких атомов на фоне более тяжелых и фиксируют структуру, образованную только тяжелыми атомами. Так, например, рентгеновские лучи явно не годятся для исследования атомной структуры  $\text{ThD}_2$ , поскольку сечение рассеяния рентгеновских лучей на атомах тория в  $10^4$  раз превосходит сечение рассеяния на дейтерии. В случае же соединений из элементов с очень близкими атомными номерами рентгеновские лучи «не различают» вкладов отдельных компонент соединения. Например, в случае  $\text{MnCo}$  весьма трудно обнаружить с помощью рентгеновских лучей переход этого сплава из неупорядоченного состояния в упорядоченное, поскольку сечение рассеяния на марганце составляет 95% от сечения на кобальте.

Так как в отличие от рентгеновских лучей (а также и электронов) амплитуды ядерного рассеяния нейтронов испытывают нерегулярные изменения от элемента к элементу и от изотопа к изотопу, оставаясь в то же время одного порядка величины, то медленными нейтронами можно с успехом пользоваться во всех указанных выше случаях.

К сожалению, нейтронографическое исследование водородсодержащих соединений в значительной мере затруднено аномально большим вкладом со стороны некогерентного рассеяния на протонах — отношение квадрата когерентной амплитуды нейтрон-протонного рассеяния к квадрату некогерентной амплитуды составляет всего 2,2%. В связи с этим структурные исследования часто выполняют на образцах, в которых атомы обычного водорода замещены атомами дейтерия (квадрат когерентной амплитуды нейтрон-дейтронного рассеяния в два с лишним раза больше квадрата некогерентной амплитуды). Очевидно, что указанный выход из положения может быть применим лишь в тех случаях, когда в результате замещения атомов водорода атомами дейтерия структура исследуемого соединения практически не изменяется.

При проведении нейтронографических исследований обычно снимают нейтронограмму образца — зависимость интенсивности нейтронов, упруго рассеянных из падающего моноэнергетического пучка, от угла рассеяния.

В этом методе измеряется дифференциальное сечение рассеяния нейтронов  $d\sigma/d\Omega$ . Принципиальная схема установки для снятия

нейтронограмма образца представлена на рис. 12.1. Коллимированный пучок тепловых нейтронов из реактора падает на монокристалл-монокроматор  $M$  (в нейтроноструктурных исследованиях монокроматизация нейтронов производится, как правило, методом дифракции от кристалла; см. § 9 главы 2). Моноэнергетический нейтронный пучок падает на образец  $O$ . Детектор нейтронов  $D$  может поворачиваться вокруг образца, что позволяет измерять интенсивность нейтронов, рассеянных под разными углами, и тем самым строить нейтронограмму образца.

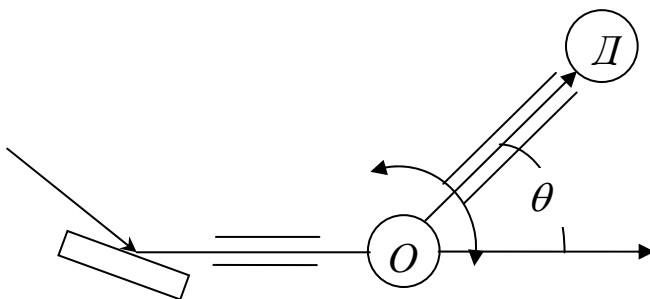


Рис. 12.1. Принципиальная схема установки для снятия нейтронограммы образца

Укажем два метода расшифровки структуры соединения по данным нейтронографических измерений.

*Метод проб.* В этом методе экспериментальные данные сравниваются с теоретическими результатами, вычисленными для различных возможных структурных моделей. Однако такой метод может оказаться некорректным, поскольку может случиться так, что к удовлетворительному согласию с экспериментом приводят несколько разных моделей; к тому же всегда остается сомнение, что какая-то неопробованная модель может оказаться более точной.

*Метод фурье-синтеза.* Более точным методом расшифровки нейтронографических данных является метод фурье-синтеза. Из измерений нейтронограммы можно восстановить структурный фактор элементарной ячейки. Этот фактор может быть записан в виде:

$$F(\mathbf{q}) = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}), \quad (12.1)$$

где  $\rho(\mathbf{r})$  — функция, описывающая распределение ядерной плотности. Фурье-обращение этого соотношения позволяет определить функцию  $\rho(\mathbf{r})$ . На первый взгляд кажется, что функция распределения ядерной плотности не является плавной функцией, а имеет вид  $\delta$ -функции. Однако это не так, поскольку ядра совершают тепловые колебания около равновесных положений, и поэтому вместо точечного ядра нейтроны «ощущают» некоторую «размазанную» по пространству область. Именно в этом смысле и следует понимать распределение ядерной плотности.

### Нейтронотграфия кристаллических образцов

Дифференциальное сечение рассеяния  $d\sigma/d\Omega$ , измеряемое при снятии нейтронотграммы кристаллического образца, может быть представлено в виде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{ког}} + \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неког}} + \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неупр}}, \quad (12.2)$$

где  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{ког}}$  и  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{неког}}$  — соответственно, когерентная и некогерентная составляющие сечения упругого рассеяния, а  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{неупр}}$  — вклад неупругого рассеяния. В соответствии с § 5 главы 1 имеем:

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{ког}} = \sum_{\mathbf{s}} \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N b_{j\text{ког}} e^{-W_j} \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}_j) \right|^2 \frac{(2\pi)^3}{v_0} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{s}), \quad (12.3)$$

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{неког}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N b_{j\text{неког}}^2 e^{-2W_j}, \quad (12.4)$$

где  $\mathbf{s}$  — вектора обратной решетки,  $\mathbf{r}_j$  — координаты ядер,  $N$  — число ядер в элементарной ячейке,  $v_0$  — объем элементарной ячейки. Фактор Дебая – Валлера  $e^{-W_j}$  отвечает учету тепловых колебаний ядер около положений равновесия и определяет вероятность безотдачного (безфононного) рассеяния нейтронов.

Вид составляющей  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{неупр}}$  не очень существен по двум причинам. Во-первых, в области энергий тепловых нейтронов и при относительно невысоких температурах образца вклад неупругой компоненты сечения рассеяния оказывается значительно меньше вклада упругой компоненты. Во-вторых, составляющая  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{неупр}}$  (совместно с составляющей  $(d\sigma/d\Omega)_{\text{неког}}$ ) обуславливает на нейтронограммах некоторый плавный фон, который практически не мешает наблюдать положение когерентных максимумов, хотя, безусловно, затрудняет измерение интенсивности этих максимумов. Если фон на нейтронограмме связан главным образом с некогерентной составляющей упругого рассеяния, то для него характерно постепенное спадание с ростом угла рассеяния, обусловленное угловой зависимостью теплового фактора Дебая – Валлера.

Основным соотношением в нейтронографии кристаллов является соотношение типа (12.3). В случае решеток, состоящих из атомов одного и того же элемента, это соотношение несколько упрощается:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{ког}} = \sum_{\mathbf{s}} b_{\text{ког}}^2 e^{-2W_{\mathbf{s}}} \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{s}\mathbf{r}_j} \right|^2 \frac{(2\pi)^3}{v_0} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{s}). \quad (12.5)$$

Выражаемое дельта-функцией условие отражения Брэгга — Вульфа позволяет связать наблюдаемый при данном угле рассеяния когерентный (дифракционный) максимум с определенным семейством кристаллических плоскостей, которое задается вектором обратной решетки  $\mathbf{s}$ . Измеряя интенсивность отражения для данного вектора  $\mathbf{s}$  и зная при этом величину когерентной амплитуды рассеяния нейтронов, можно рассчитать, исходя из (12.5), структурный фактор:

$$\frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{s}\mathbf{r}_j} \right|^2.$$

Это позволяет затем определить радиус-векторы  $\mathbf{r}_j$  атомов в элементарной ячейке решетки. Роль теплового фактора при расчетах по формуле (12.5) малосущественна. Тепловой фактор или полагают попросту равным единице, или же приближенно вычисляют



с помощью упрощенной динамической модели кристаллической решетки.

Нейтронографические измерения предпочтительнее выполнять на монокристаллах. При этом нейтронограмма снимается для многих положений (ориентаций) образца по отношению к падающему пучку, что позволяет измерить интенсивности отражений для многих семейств кристаллических плоскостей. К сожалению, приготовление монокристаллических образцов встречает затруднения и не всегда оказывается возможным. В этом случае нейтронографические измерения проводят на поликристаллических образцах. Очевидно, что поворот поликристаллического образца по отношению к пучку не имеет физического смысла. Поэтому нейтронограмма снимается для одного положения образца. Полученная при этом нейтронограмма содержит одновременно множество максимумов, отвечающих самым различным семействам кристаллических плоскостей.

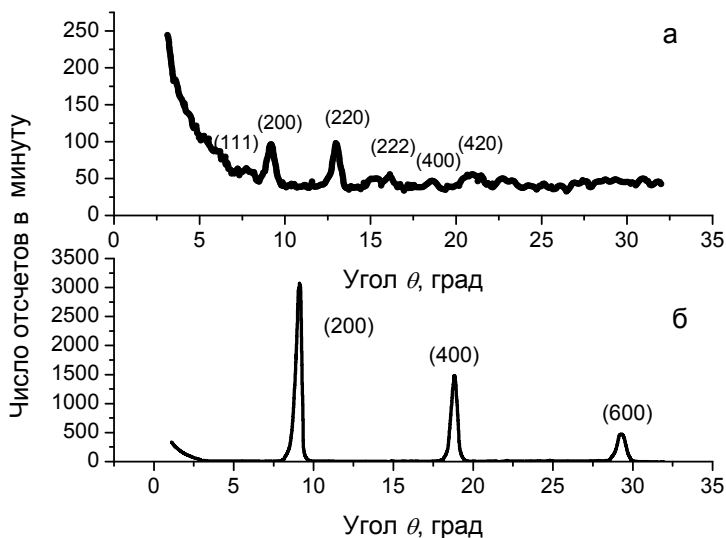


Рис. 12.2. Сравнение нейтронограмм, полученных на поликристаллическом образце (а) и монокристалле (б) КВг. Цифры в скобках — миллеровские индексы

Недостатки поликристаллических образцов связаны с получением более плохого, нежели в случае монокристаллов, разрешения. Во-первых, на нейтронограмме поликристалла имеют место перекрытия (полные или частичные) отдельных дифракционных максимумов. Во-вторых, в случае поликристалла значительно сильнее выражен фон, поскольку дифракционный максимум обуславливается лишь небольшим специально ориентированным объемом (несколькими определенно ориентированными кристаллитами), тогда как в создании фона участвует, очевидно, весь облучаемый объем образца. В качестве примера на рис. 12.2 сопоставляются нейтронограммы, полученные на монокристалле и на поликристаллическом образце КВг. Рисунок хорошо иллюстрирует сделанные выше замечания по поводу разрешения, получаемого в измерениях на монокристаллах и на поликристаллах.

Более плохое разрешение в случае поликристаллических образцов ограничивает применение таких образцов при исследовании структуры достаточно сложных соединений, нейтронограммы которых характеризуются наличием большого числа близко расположенных максимумов. Применение поликристаллических образцов допустимо лишь при исследовании относительно простых структур.

### **Исследования водородсодержащих структур**

Как уже подчеркивалось, с точки зрения структурных исследований использование тепловых нейтронов наиболее важно при изучении обширного класса водородсодержащих соединений.

Одни из первых исследований были выполнены на гидридах щелочных металлов (натрия, калия, лития). Предварительные рентгеноструктурные измерения указывали, что атомы металлов образуют в этих соединениях ГЦК-подрешетку. Однако эти измерения не позволяли определить положения водородных атомов, в результате чего оставались открытыми две возможности: либо гидриды образуют структуры, подобные структуре NaCl, либо они образуют структуры типа ZnS.

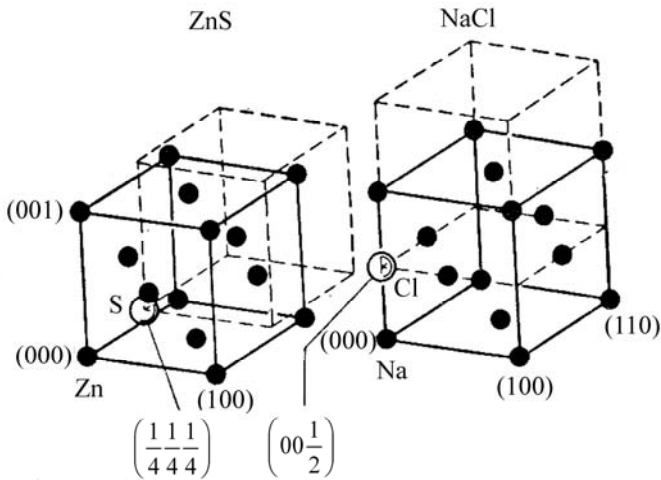


Рис. 12.3. Структуры ZnS и NaCl

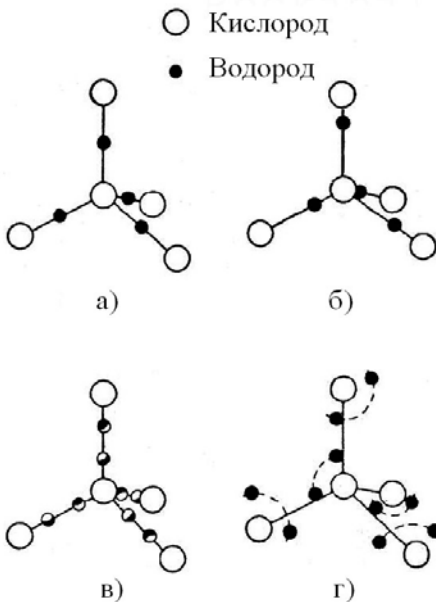


Рис. 12.4. Четыре вероятных структурных модели льда

Указанные структуры сопоставляются на рис. 12.3 (легко видеть, что в обоих случаях атомы металлов образуют ГЦК-подрешетку). Нейтронографические измерения определенно показали, что гидриды щелочных металлов имеют кристаллическую решетку типа NaCl.

Большой интерес представляют нейтронографические исследования структуры решетки льда. Рентгенографически лед изучался в течение длительного времени, однако рентгеновские лучи не позволяли полностью расшифровать его структуру. Было лишь установле-

но, что лед кристаллизуется в гексагональную структуру, причем атомы кислорода занимают вершины и центры тетраэдров. Положение же водородных атомов оставалось неопределенным. В связи с этим были предложены четыре вероятные структурные модели льда, выбор между которыми рентгеновские лучи произвести не могли. Эти модели представлены на рис. 12.4: а) протон находится строго посередине между ближайшей парой атомов кислорода; б) протон смещен по направлению к одному из атомов кислорода (в этой модели оказываются *выделенными* отдельные молекулы  $H_2O$ ); в) предыдущая модель с заменой статического положения протонов на *нестатическое*: половину времени протон находится вблизи одного атома кислорода, а половину времени — вблизи другого, смещаясь вдоль линии, соединяющей соседние кислородные атомы (можно говорить, что распределение протонной плотности характеризуется *двумя* симметричными максимумами — вблизи одного и вблизи другого атомов кислорода); г) вокруг атома кислорода вращается пара протонов (модель с вращениями молекул  $H_2O$  при условии фиксированного положения вершин молекул, т. е. атомов кислорода). При нейтронных исследованиях структуры льда в целях уменьшения некогерентного фона был использован тяжелый лед  $D_2O$ . Для интерпретации полученных данных были построены теоретические нейтронограммы для всех четырех предполагаемых структурных моделей, а затем проведено сравнение с экспериментальными результатами. Оказалось, что эксперимент хорошо согласуется с моделью (в) (модель Поллинга) и в то же время, противоречит остальным трем моделям.

### Упорядоченные и разупорядоченные сплавы

В обычных твердых растворах атомы разного типа статистически перемешаны по узлам кристаллической решетки. Такие растворы называют *разупорядоченными* сплавами. Соответствующей термической обработкой (медленным охлаждением сплава, предварительно нагретого до высокой температуры) можно добиться, чтобы каждый тип атомов в сплаве занял узлы решетки строго определенным образом, образовав тем самым собственную подрешетку. В результате возникает *сверхструктура* из вставленных

друг в друга геометрически одинаковых подрешеток. Такой сплав называют *упорядоченным*.

Явления перехода сплавов из разупорядоченного состояния в упорядоченное (явления упорядочивания сплавов) исследуются рентгено- и нейтронографически. Нейтронографические исследования проводятся в случае сплавов из элементов с близкими атомными номерами, поскольку в этом случае рентгеновские лучи плохо разрешают атомы разного типа и поэтому мало пригодны для обнаружения сверхструктуры, возникающей при упорядочивании.

В качестве примера можно отметить сплав Fe–Co. Рентгеновская амплитуда рассеяния на железе составляет 96% амплитуды рассеяния на кобальте, т. е. эти амплитуды практически равны друг другу. В то же время амплитуды ядерного рассеяния нейтронов различаются для указанных элементов более чем в три раза.

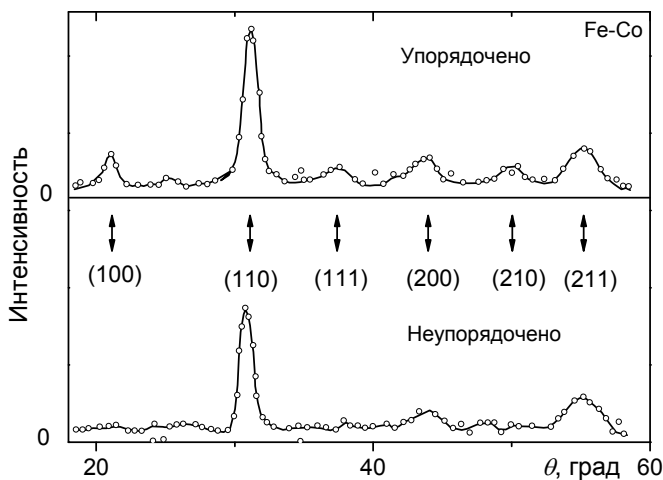


Рис. 12.5. Сравнение нейтронограмм для упорядоченного и разупорядоченного состояний сплава Fe–Co

На рис. 12.5 сопоставляются нейтронограммы, полученные для упорядоченного и разупорядоченного состояний сплава Fe–Co. На нейтронограмме упорядоченного состояния хорошо видны дополнительные дифракционные максимумы, обусловленные сверхструктурой. Заметим, что возникновение сверхструктуры приводит

к появлению новых семейств отражающих кристаллических плоскостей — со своими значениями межплоскостных расстояний (в частности, увеличивается максимальное межплоскостное расстояние в решетке). Фон на нейтронограмме упорядоченного сплава примерно на 20% ниже по сравнению со случаем разупорядоченного сплава. Расшифровка полученных для Fe–Co нейтронограмм позволяет заключить, что в разупорядоченном состоянии сплав характеризуется ОЦК-решеткой (рис. 12.6, а). При переходе в упорядоченное состояние решетка сплава превращается в две простые кубические подрешетки из атомов железа и атомов кобальта, вставленные друг в друга (рис. 12.6, б).

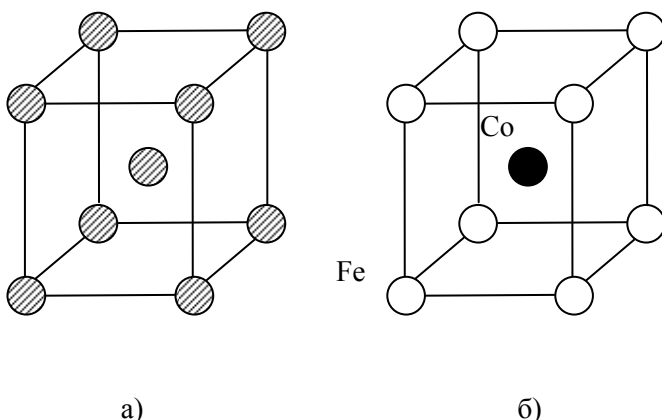


Рис. 12.6. Структура решетки и явление упорядочивания сплава на примере Fe–Co

## Нейтронография газов и жидкостей

**Газы.** Нейтронографические исследования газов проводятся с целью либо расшифровки структуры молекул газа, либо определения когерентных амплитуд рассеяния нейтронов на ядрах молекулы. В соответствии с результатом (5.6) дифференциальное сечение рассеяния медленных нейтронов на молекуле из  $N$  одинаковых атомов, рассматриваемое в системе центра масс молекулы и нейтрона, имеет при условии пренебрежения обменом энергией между нейтроном и внутренними степенями свободы молекулы следующий вид:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = D^2 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_i a_j \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)], \quad (12.6)$$

где  $D = N(A+1)/(NA+1)$ ,  $A$  — атомный вес ядра молекулы,  $a_i$  — амплитуда рассеяния нейтронов на  $i$ -м свободном ядре,  $\mathbf{r}_i$  — радиус-вектор  $i$ -го ядра. Заметим, что сечение (12.6) относится к одному ядру молекулы. Поясним происхождение коэффициента  $D$ . При рассеянии на свободном ядре в выражении для амплитуды рассеяния (см., например, (2.12)) надо использовать вместо массы нейтрона  $m$  приведенную массу  $\mu = \frac{A}{A+1}m$ . При упругом рассеянии на молекуле приведенная масса равна  $\mu_1 = \frac{NA}{NA+1}m$ , соответственно при вычислении дифференциального сечения рассеяния на молекуле вместо  $a_i$  надо использовать  $\frac{\mu_1}{\mu} a_i = D a_i$ .

После выполнения усреднения сечения (12.6) по спиновым состояниям системы нейтрон + ядро и по распределениям различных изотопов приходим к сумме сечений когерентного и некогерентного рассеяния (процедура указанных усреднений рассмотрена для общего случая в § 5 главы 1):

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{ког}} = D^2 a_{\text{ког}}^2 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)], \quad (12.7)$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{неког}} = D^2 a_{\text{нк}}^2. \quad (12.8)$$

Применим (12.7) к простейшему случаю двухатомной молекулы. Пусть  $d$  — расстояние между ядрами молекулы. Обозначим через  $\theta'$  угол между направлениями вектора  $\mathbf{q}$  и оси молекулы. Тогда сечение когерентного рассеяния для некоторой определенной ориентации молекулы относительно пучка может быть записано в виде

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{ког}} = D^2 a_{\text{ког}}^2 [1 + \cos(qd \cos \theta')]. \quad (12.9)$$

Чтобы получить сечение, сравнимое с экспериментальным сечением, необходимо усреднить выражение (12.9) по ориентациям мо-

лекулы, т. е. выполнить интегрирование по телесному углу  $d\Omega'$  и разделить на  $4\pi$  :

$$\left\langle \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{кор}} \right\rangle = \frac{1}{4\pi} \int \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{кор}} 2\pi \sin\theta' d\theta' = D^2 a_{\text{кор}}^2 \left[ 1 + \frac{\sin(qd)}{qd} \right]. \quad (12.10)$$

На рис. 12.7 представлен вид сечения (12.10) как функции от величины  $q$ .

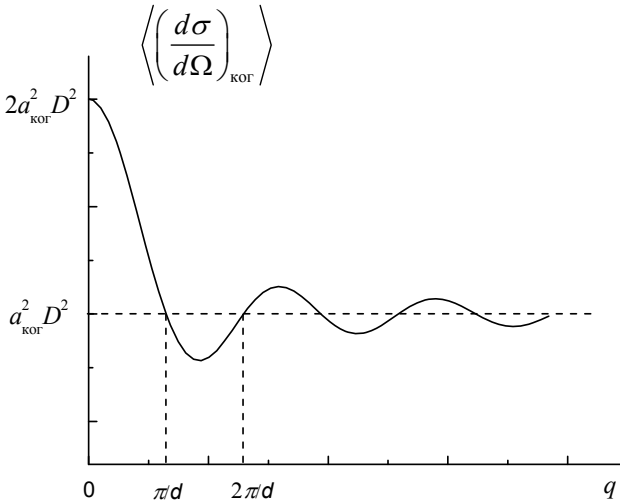


Рис. 12.7. Расчетная кривая, показывающая интерференционные эффекты при рассеянии на двухатомной молекуле

Результат (12.10) можно сравнить с экспериментальными данными по дифракции нейтронов в газе двухатомных молекул. В качестве примера на рис. 12.8 приведены данные для рассеяния нейтронов на молекулах кислорода. Сплошные кривые на рисунке соответствуют расчету по формуле

$$\left\langle \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \right\rangle = D^2 a_{\text{нк}}^2 + D^2 a_{\text{кор}}^2 \left[ 1 + \frac{\sin(qd)}{qd} \right] \quad (12.11)$$

с введением доплеровской поправки; точки представляют собой результаты измерений. Расчетные кривые и данные опыта хорошо согласуются друг с другом.



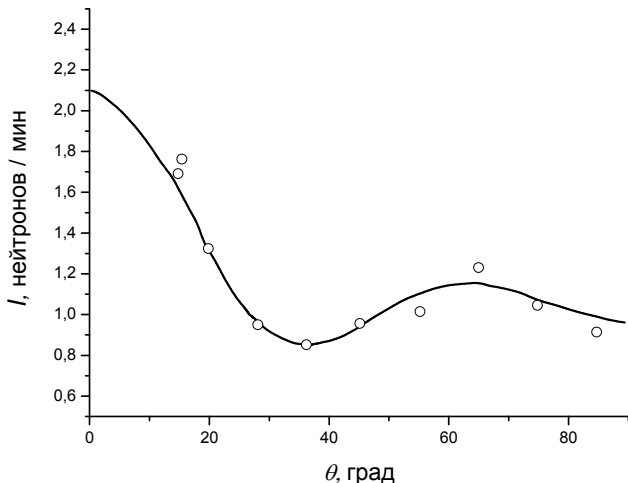


Рис. 12.8. Дифференциальное сечение рассеяния нейтронов на кислороде

**Жидкости.** Нейтронографические измерения, выполненные на жидких образцах, позволяют определить статическую корреляционную функцию  $g(\mathbf{r}) \propto 1 - P(\mathbf{r})$ , описывающую мгновенное распределение атомов жидкости относительно произвольно выбранного атома (см. § 7 главы 1). В соответствии с (7.8) запишем рассматриваемое в нейтронографии жидкостей дифференциальное сечение рассеяния нейтронов в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b_{\text{нк}}^2 + b_{\text{кор}}^2 \left[ 1 + \int d^3r g(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \right], \quad (12.12)$$

или, принимая во внимание, что для жидкости вследствие ее макроизотропности функция  $g$  изотропна, в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b_{\text{нк}}^2 + b_{\text{кор}}^2 \left[ 1 + \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr r g(r) \sin(qr) \right]. \quad (12.13)$$

Из (12.13) следует, что для получения функции  $g(r)$  сечение рассеяния должно быть фурье-обращено. Для выполнения фурье-обращения необходимо провести измерения по достаточно широкому диапазону углов рассеяния. В случае рентгеновских лучей измерение сечения при больших углах рассеяния затруднено благодаря наличию быстро уменьшающегося с ростом угла атомного

формфактора. В случае же нейтронов это затруднение отсутствует по причине изотропности амплитуды ядерного рассеяния нейтронов. Поэтому нейтроны более удобны для восстановления функции  $g(r)$  из данных по рассеянию. Кроме того, нейтроны практически совсем не поглощаются в стенках контейнера, в котором содержится жидкость. Таким образом, при применении к исследованию структуры жидкостей нейтроны обладают рядом преимуществ перед рентгеновскими лучами, связанных со спецификой жидкого состояния.

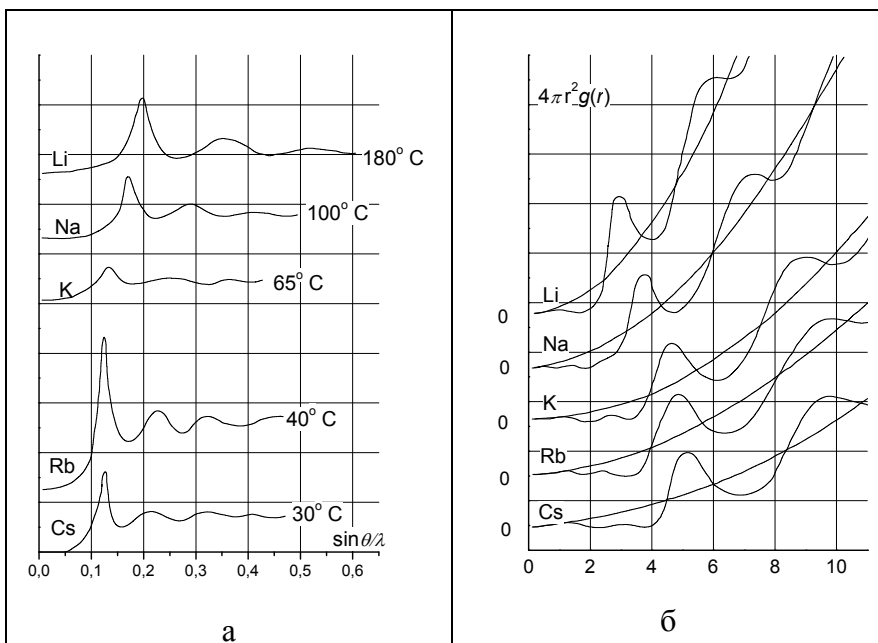


Рис. 12.9. Нейтронографическое исследование жидких щелочных металлов, взятых вблизи точки плавления: а) нейтронограммы; б) результаты фурье-преобразования нейтронографических данных

В качестве примера на рис. 12.9а представлены нейтронограммы жидких щелочных металлов (лития, натрия, калия, рубидия, цезия), взятых вблизи точки плавления. На рис. 12.9б приведены результаты фурье-обращения нейтронографических данных в виде функции

$4\pi r^2 g(r)$ . Нерегулярный ход кривых на рис. 12.9б подтверждает наличие ближнего порядка в расположении атомов жидкости. Расположение максимумов на этих кривых позволяет оценить межатомные расстояния, а величина площади под первым максимумом позволяет рассчитать число ближайших соседей, которое характеризует степень плотности упаковки атомов в жидкости.

### **Исследование точечных дефектов в кристаллической решетке**

Всякая реальная кристаллическая решетка обладает *дефектами*, характер и происхождение которых могут быть весьма различными. Для исследования дефектов решетки может быть использовано упругое рассеяние медленных нейтронов.

Ограничимся рассмотрением дефектов двух типов: *вакансий* и *внедренных атомов*. Вакансии возникают, когда атом покидает узел решетки, который остается незаполненным. При этом в некоторой степени искажается расположение соседних с данным узлом (вакансией) атомов решетки. Впоследствии вакансия может быть занята каким-либо другим атомом. Атом, который покинул «свой» узел, может, диффундируя по кристаллу, занять какую-либо другую вакансию, а может временно «застрять» где-нибудь между узлами (при этом ближайшие атомы будут несколько раздвинуты). «Застрявший» в междоузлии атом называют внедренным или междоузельным атомом.

Будем полагать, что число дефектов, т. е. число вакансий и внедренных атомов относительно мало — много меньше всего числа атомов в образце (отсюда, в частности, следует, что можно пренебрегать эффектом искажения структуры решетки вблизи дефектов). Кроме того, будем полагать, что дефекты не группируются, т. е. являются сугубо единичными. В этом случае легко показать, как можно выразить сечение упругого некогерентного рассеяния медленных нейтронов через величину средней плотности рассматриваемых дефектов.

Пусть имеется образец, состоящий из  $N$  атомов. Предположим, что  $m/2$  атомов покинули «свои» узлы, вследствие чего возникло  $m$  точечных дефектов:  $m/2$  вакансий и  $m/2$  внедренных атомов. Будем рассматривать эти  $m$  дефектов как  $m$  дополнительных рассеиваю-

щих центров, приписывая им амплитуды рассеяния  $b_i$ . При этом для вакансии, существующей на месте  $\nu$ -го узла,  $b_i = -b_\nu$ . В этом случае дифференциальное сечение упругого рассеяния нейтронов в пренебрежении тепловыми колебаниями решетки можно согласно (5.4) записать в виде:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{N} \left| \sum_{\nu=1}^N b_\nu \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\nu) + \sum_{i=1}^m b_i \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i) \right|^2. \quad (12.14)$$

Здесь первая сумма берется по всем атомам, как если бы дефектов не было вовсе, а вторая сумма учитывает вклад дефектов. Соответственно слагаемые для вакантных узлов в первой и второй суммах имеют разные знаки и поэтому уничтожаются. Далее, выполним спиновое и изотопное усреднения выражения (12.14). Эти усреднения приводят к следующему результату:

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{\nu=1}^N b_\nu \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_\nu) \right|^2 \right\rangle + \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{i=1}^m b_i \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i) \right|^2 \right\rangle. \quad (12.15)$$

Интерференционные члены при усреднении обратились в нуль, поскольку при равном числе вакансий и внедренных атомов:

$$\langle b_i \rangle = \langle b \rangle - \langle b \rangle = 0. \quad (12.16)$$

Первое слагаемое в (12.15) есть сумма некогерентной и когерентной составляющих сечения рассеяния нейтронов идеальной кристаллической решеткой. Второе слагаемое представляет собой возмущение, обусловленное дефектами. Наличие множителя  $1/N$  показывает, что при  $m \ll N$  это слагаемое является весьма малой поправкой.

Будем рассматривать холодные нейтроны, для которых условие Брэгга (9.3) не может быть выполнено ни при каком угле рассеяния  $\theta$ . В этом случае первое слагаемое в выражении (12.15) превращается в некогерентную компоненту сечения рассеяния нейтронов идеальной решеткой. В этом случае выражение (12.15) можно переписать в виде:

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle = b_{\text{неког}}^2 + \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m b_i b_j \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \right\rangle. \quad (12.17)$$

Выполним усреднение  $\langle \dots \rangle$  во втором слагаемом, воспользовавшись при этом еще раз результатом (12.16):

$$\frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m b_i b_j \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] \right\rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^m b_i^2 \right\rangle = \langle b^2 \rangle \frac{m}{N} = \langle b^2 \rangle f,$$

где  $f$  — доля дефектов в решетке. Подставляя полученный результат в (12.17) и переходя к интегральному сечению, получаем:

$$\sigma_{\text{неког}}^1 = \sigma_{\text{неког}}^0 + 4\pi \langle b^2 \rangle f. \quad (12.18)$$

Здесь  $\sigma_{\text{неког}}^0$  и  $\sigma_{\text{неког}}^1$  — интегральные сечения некогерентного упругого рассеяния холодных нейтронов, соответственно, для идеальной решетки и для решетки с дефектами.

Выражение (12.18) может быть использовано для экспериментального определения величины  $f$ . Для этого надо измерить интенсивности нейтронного пучка, прошедшего сквозь образец без дефектов и образец с дефектами  $I_1$  и  $I_2$  соответственно. Тогда согласно (12.18):

$$\frac{I_2}{I_1} = \frac{\exp(-nl\sigma_{\text{неког}}^1)}{\exp(-nl\sigma_{\text{неког}}^0)} = \exp(-nl4\pi \langle b^2 \rangle f). \quad (12.19)$$

где  $n$  — число ядер в единице объема образца, а  $l$  — толщина образца.

### **§13. Нейтронная спектроскопия\***

Медленные нейтроны имеют энергию, равную по порядку величины энергии межатомного взаимодействия в веществе. Поэтому, измеряя неупругое рассеяние нейтронов можно судить о динамике взаимодействия атомов.

Наиболее ранние измерения по исследованию атомной динамики кристаллов при помощи неупругого рассеяния медленных ней-

---

\* Материал данного параграфа непосредственно основан на монографии [1].

тронов были выполнены Кассельсом в 1948 г. В этих опытах измерялось ослабление пучка холодных нейтронов при прохождении сквозь кристалл в зависимости от температуры последнего. В 1951 г. оценили дебаевскую характеристическую температуру ряда кристаллов, выполнив измерения средней величины изменения энергии нейтрона при рассеянии.

Все эти эксперименты представляли собой первые и, естественно, довольно грубые шаги. Никакой новой информации о динамике кристаллов они не давали и использовались лишь для сравнения с теоретическими работами, в которых рассматривалось неупругое рассеяние медленных нейтронов фононами.

Качественный перелом произошел в 1957 г., когда были выполнены первые измерения дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния холодных нейтронов. Кривые дисперсии фононов в алюминии и фононный спектр ванадия были получены без привлечения каких-либо модельных представлений о динамике решетки.

Начиная с этого времени, нейтронные исследования динамики кристаллов стали быстро расширяться. В процессе расширения стала совершенствоваться методика измерений, и стали выявляться новые возможности данного метода. Выполненные на медленных нейтронах исследования в существенной мере уточнили наши представления о характере динамики ряда кристаллов и особенно в сферах сил межатомного взаимодействия.

Неупругое рассеяние медленных нейтронов на немагнитных кристаллах позволяет определить все основные динамические характеристики кристаллической решетки: фононный спектр, дисперсионные соотношения, векторы поляризации и, кроме того, позволяет оценить средние времена жизни и средние длины пробега фононов. Фононный спектр наиболее просто может быть восстановлен из данных по *некогерентному* неупругому рассеянию нейтронов. Для определения остальных перечисленных характеристик решетки требуются данные по *когерентному* неупругому рассеянию.

## Общие замечания о нейтродинамическом эксперименте

Рассмотрим в самых общих чертах постановку эксперимента по исследованию атомной динамики кристалла с помощью нейтронов. Будем называть такой эксперимент *нейтродинамическим*. Единой схемы эксперимента не существует: выбор конкретной схемы определяется характером той информации о рассеивателе, которую желают получить в проводимых измерениях.

Нейтродинамический эксперимент характеризуется следующими параметрами, находящимися в распоряжении экспериментатора: а)  $E_0$  — энергией падающих на образец нейтронов; б)  $E$  — энергией регистрируемых рассеянных нейтронов; в)  $\theta$  — углом рассеяния; г)  $T$  — температурой образца; д)  $\Phi$  — совокупностью углов, определяющих ориентацию образца по отношению к падающему пучку. В случае макроизотропных поликристаллических образцов последний параметр, очевидно, теряет смысл.

Фиксируя определенным образом четыре из перечисленных выше пяти параметров, экспериментатор исследует зависимость интенсивности рассеянных нейтронов от пятого параметра. Обычно исследуется энергетическое распределение рассеянных нейтронов, т. е. снимается кривая  $N_{E_0\theta T\Phi}(E)$ . После учета

поправок, связанных с фоном, чувствительностью детектора, разрешением установки и др., эта кривая передает энергетическое поведение дважды дифференциального сечения рассеяния  $d^2\sigma/d\Omega dE$ .

На рис. 13.1 представлена в наиболее общем виде схема рассматриваемого нейтродинамического эксперимента. Нейтронный пучок из реактора (или из ускорителя) проходит через монохроматор  $M$ , затем рассеивается на образце  $O$  и под определенным

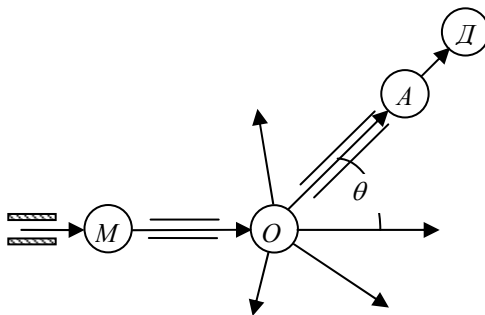


Рис. 13.1. Принципиальная схема измерения дважды дифференциального сечения рассеяния

углом  $\theta$  исследуется анализатором  $A$ , после чего попадает в детектор  $D$ . В некоторых случаях анализатор может явно не присутствовать — анализ нейтронов производят при помощи техники времени пролета. В этом случае нейтронный пучок должен быть пульсирующим, для чего в схему вносится прерыватель пучка.

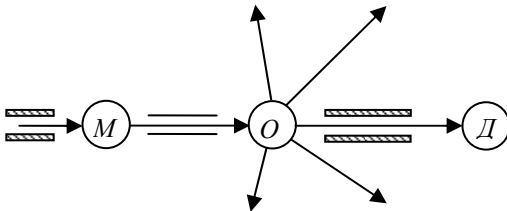


Рис. 13.2. Принципиальная схема измерения интегрального сечения

такого эксперимента представлена на рис. 13.2. Нейтронный пучок, пройдя через монохроматор  $M$ , проходит затем сквозь образец  $O$  и регистрируется детектором  $D$ . Очевидно, что количество информации, получаемой при измерении интегрального сечения, существенно меньше, нежели при измерении дважды дифференциального сечения рассеяния.

Максимальная информация получается в тех случаях, когда снимают не одну кривую  $N_{E_0\theta T\Phi}(E)$ , а целое семейство таких кривых, варьируя различные параметры. Так, например, зависимость интенсивности рассеянных нейтронов от их энергии может быть снята при различных углах рассеяния (варьируется параметр  $\theta$ ) и при различных ориентациях образца (варьируется параметр  $\Phi$ ). Чем богаче семейство экспериментальных кривых, тем большее количество полезной информации содержится в экспериментальных данных.

В нейтронодинамических измерениях используются пучки как тепловых, так и холодных нейтронов. При использовании холодных нейтронов регистрируют рассеянные нейтроны с энергиями  $E > E_0$ . Иными словами, в этом случае исследуются неупругие столкновения, сопровождающиеся уничтожением некоторого числа фононов в решетке. Однако в некоторых случаях это может оказаться неудобным, например, при исследовании высокочастотных



оптических колебаний. В самом деле, в выражение для сечения рассеяния с уничтожением фонона входит множитель

$$\beta = \left[ \exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) - 1 \right]^{-1},$$

где  $\varepsilon$  — разность энергий падающего и рассеянного нейтрона. Этот множитель связан с «заселенностью» уровней решетки при заданной температуре образца. Если, например, образец взят при комнатной температуре и передача энергии составляет 0,1 эВ, то множитель  $\beta$  составляет всего 0,02. В результате сечение с уничтожением фонона оказывается незначительным.

В таких случаях (т. е. при исследовании высокоэнергетических переходов) более удобно работать на сбросе, а не на приобретении нейтронами энергии при столкновении, так как в сечение рассеяния с рождением фонона входит вместо  $\beta$  множитель

$$\beta_1 = \exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) \left[ \exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) - 1 \right]^{-1}.$$

Для того чтобы работать на сбросе нейтронами энергии, пользуются пучками тепловых нейтронов.

Измеряемое на опыте дважды дифференциальное сечение рассеяния включает в себя фононные процессы различной кратности и обе составляющие — когерентную и некогерентную. Однако для восстановления по данным рассеяния тех или иных динамических характеристик решетки требуется использовать данные либо только когерентного, либо только некогерентного рассеяния и, кроме того, в обоих случаях требуется исходить из данных по однофононному рассеянию. Таким образом, при постановке нейтронодинамического эксперимента приходится сталкиваться с двумя проблемами: а) проблемой разделения вкладов когерентной и некогерентной составляющих; б) проблемой выделения вклада однофононного рассеяния на фоне многофононного и многократного рассеяния (последнее существенно, если образец недостаточно тонок, так что нейтрон, пролетая сквозь него, может испытать несколько столкновений).

## Методика измерения неупругого рассеяния медленных нейтронов

Различные методики проведения нейтродинамических измерений предполагают различные комбинации способов монохроматизации падающих нейтронов и способов анализа рассеянных нейтронов по энергиям. Ниже приводится табл. 13.1, суммирующая обычно применяемые комбинации.

Таблица 13.1

Перечень методик измерения неупругого рассеяния нейтронов

|   | Способ монохроматизации падающих нейтронов   | Способ анализа по энергиям рассеянных нейтронов                 |
|---|--|---|
| 1 | Поликристаллический фильтр   | Механический прерыватель в сочетании с техникой времени пролета |
| 2 | Кристаллический монохроматор   | Кристаллический спектрометр                                     |
| 3 | Монохроматор в виде вращающегося монокристалла   | Техника времени пролета   |
| 4 | Кристаллический монохроматор   | Поликристаллический фильтр                                      |
| 5 | Многороторный механический прерыватель   | Техника времени пролета   |
| 6 | Импульсный источник нейтронов в сочетании с поликристаллическим фильтром или механическим прерывателем | Техника времени пролета   |

Рассмотрим комбинации, перечисленные в таблице.

*Комбинация 1.* Для монохроматизации падающих нейтронов используют поликристаллический фильтр. Пучок «рвется» при помощи механического прерывателя, что позволяет анализировать энергию рассеянных нейтронов по времени пролета. Энергетический спектр рассеянных нейтронов исследуется одновременно под несколькими углами рассеяния при расположении прерывателя между фильтром и образцом или же под некоторым фиксированным углом, когда прерыватель помещается после образца. Принципиальная схема установки с фиксированным углом рассеяния (равным  $90^\circ$ ) приведена на рис. 13.3.

Данный метод обладает наибольшей светосилой по сравнению с другими методами и поэтому может применяться на реакторах с относительно невысоким потоком тепловых нейтронов —  $10^{12}$ —

$10^{13}$  н/см<sup>2</sup>сек. Метод характеризуется двумя существенными недостатками: а) большим размытием спектральной линии падающих нейтронов ( $\Delta E_0 / E_0 \approx 40 - 50\%$ ) и б) узким диапазоном возможного изменения энергии падающих нейтронов (фактически в пределах от  $1 \cdot 10^{-3}$  эВ до  $5 \cdot 10^{-3}$  эВ). Размытие первичной линии может быть несколько уменьшено с помощью метода разностных фильтров (см. § 9 главы 2).

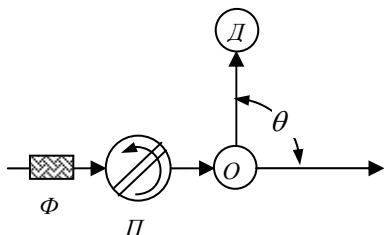


Рис. 13.3. Комбинация 1.  
 Ф — фильтр, П — прерыватель,  
 О — образец, Д — детектор

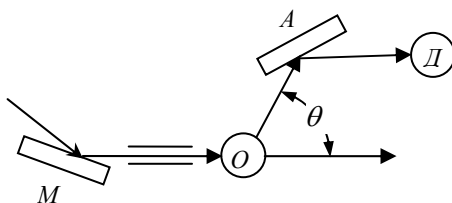


Рис. 13.4. Комбинация 2.  
 Трехосный кристаллический спектрометр

*Комбинация 2.* Монохроматизация падающих нейтронов и энергетический анализ рассеянных нейтронов производится методом дифракции от монокристалла. Установка такого типа (ее принципиальная схема представлена на рис. 13.4) называется *трехосным кристаллическим спектрометром* — одна ось связана с кристаллом-монокристаллом *М*, вторая — с кристаллом-образцом *О*, третья — с кристаллом-анализатором *А*, кристаллы могут поворачиваться около этих осей.

Данная установка допускает изменение энергии падающих нейтронов в широком интервале значений и обладает по сравнению с другими установками самым высоким разрешением (порядка 1%). Недостатком является малая светосила. Кроме того, к недостаткам данной установки следует отнести наличие в падающем пучке примеси нейтронов, соответствующих высшим порядкам отражения, и невозможность выполнения измерений одновременно под несколькими углами рассеяния. Трехосный кристаллический спектрометр может использоваться на реакторах с достаточно интенсивным потоком тепловых нейтронов — не ниже  $10^{14}$  н/см<sup>2</sup> сек.

*Комбинация 3.* Вращающийся монокристалл служит одновременно и монохроматором, и прерывателем нейтронного пучка. Для энергетического анализа рассеянных нейтронов применяется техника времени пролета. Принципиальная схема установки дана на рис. 13.5. Измерения могут производиться одновременно под несколькими углами. Данная установка обладает достаточно высоким разрешением. Однако применение ее затруднено примесью в дифрагированном пучке нейтронов высших порядков отражения и наличием большого фона, связанного с рассеянием нейтронов прямого пучка самим кристаллом и его держателем. Поэтому спектрометр с вращающимся кристаллом применяют в сочетании с монокристаллическими фильтрами.

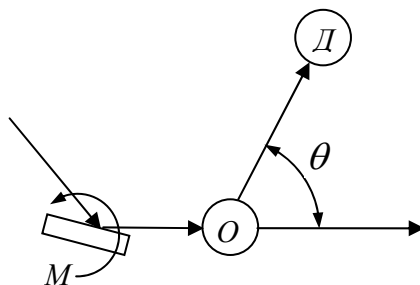


Рис. 13.5. Комбинация 3.  
*M* — вращающийся монокристалл,  
*O* — образец, *D* — детектор

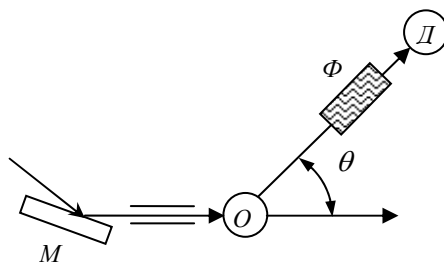


Рис. 13.6. Комбинация 4.  
*M* — вращающийся монокристалл,  
*O* — образец,  $\Phi$  — фильтр, *D* — детектор

*Комбинация 4.* Монохроматизация падающих нейтронов производится с помощью кристалла-монохроматора. Монохроматический пучок нейтронов, энергия которых может варьироваться, падает на образец и рассеивается. Рассеянные нейтроны регистрируются, пройдя предварительно через поликристаллический фильтр (в установках такого типа применяют преимущественно бериллиевые фильтры). Принципиальная схема установки дана на рис. 13.6. Данный метод называют *методом обращенного фильтра* либо *методом бериллиевого детектора*.

Как известно, бериллиевый поликристаллический фильтр пропускает практически только нейтроны с энергиями ниже  $5 \cdot 10^{-3}$  эВ

(со средней энергией около  $3 \cdot 10^{-3}$  эВ). Поэтому при заданном значении начальной энергии нейтронов  $E_0$  в детектор могут попасть лишь те нейтроны, которые при рассеянии в образце потеряли энергию порядка  $(E_0 - 3 \cdot 10^{-3})$  эВ; остальные нейтроны будут эффективно выводиться из направленного пучка благодаря дифракционным отражениям в фильтре. Если энергия падающих нейтронов существенно превышает энергию  $3 \cdot 10^{-3}$  эВ, то в этом случае потеря энергии зарегистрированных нейтронов будет практически равняться начальной энергии. Варьируя начальную энергию, можно снять, очевидно, зависимость интенсивности рассеянных нейтронов от величины потери энергии. Данная установка удобна при исследовании высокочастотных оптических колебаний, инициирующих высокоэнергетические переходы.

Применение поликристаллического фильтра в экспериментальной схеме всегда приводит к значительному выигрышу в светосиле установки. Это обстоятельство имеет большое практическое значение для исследовательских реакторов, не дающих потоков тепловых нейтронов достаточно высокой интенсивности. Для таких реакторов данная установка и установка комбинации 1 оказываются основными. Эти установки можно рассматривать как взаимодополняющие: установка комбинации 1 (с прямым фильтром) удобна для исследования низкочастотных колебаний, тогда как установка комбинации 4 (с обращенным фильтром) может быть использована для изучения высокочастотных колебаний.

*Комбинация 5.* Система строго сфазированных между собой механических прерывателей создает пульсирующий моноэнергетический нейтронный пучок; анализ рассеянного пучка производится по времени пролета. Подобные системы обладают высоким разрешением и большей по сравнению с трехосными кристаллическими спектрометрами светосилой. В нейтродинамических измерениях эти системы находят весьма большое применение. В качестве дополнительных достоинств многороторных систем можно указать возможности: а) изменения в широком интервале энергии нейтронов падающего пучка, б) существенного снижения фона быстрых нейтронов в падающем пучке, в) одновременного энергетического анализа рассеянных нейтронов под несколькими углами рассеяния.

*Комбинация 6.* В случае импульсных источников анализ рассеянных нейтронов производится по времени пролета, а монохроматизация — одним из рассмотренных выше способов. Распространены системы с поликристаллическим фильтром и с механическим прерывателем, сфазированным с импульсом источника. Система со сфазированным прерывателем, очевидно, эквивалентна двухроторной системе. В случае поликристаллического фильтра образуется моноэнергетический пульсирующий пучок холодных нейтронов; для увеличения потока замедлитель источника и фильтр охлаждаются, например, до температуры жидкого азота. Вследствие меньшего среднего во времени нейтронного потока уровень активации меньше, чем в случае реактора непрерывного действия; поэтому существенно облегчено использование криогенной техники для увеличения интенсивности потока холодных нейтронов. По сравнению с аналогичной установкой на реакторе непрерывного действия с потоком тепловых нейтронов  $10^{13}$  н/см<sup>2</sup> сек при той же интенсивности рассеянных нейтронов установка с импульсным реактором обладает в несколько раз более высоким разрешением.

Каждая из рассмотренных выше комбинаций используется при проведении измерений тех или иных динамических характеристик кристаллических решеток. Так, например, для измерения дисперсионных соотношений, когда требуется достаточно высокое разрешение, обычно применяют трехосные кристаллические спектрометры (могут использоваться также многороторные системы), тогда как для исследования фоновых спектров, когда влияние размытия первичной линии на разрешение менее существенно, используют установки с поликристаллическими фильтрами.

## **§14. Малоугловое рассеяние нейтронов**

При изучении современных материалов часто требуется исследование не на атомном, а на надатомном ( $> 1$  нм) масштабе, так как кристаллическая структура известна. При этом определяются характеристики неоднородностей структуры вещества, такие, как кластеры, микропоры, вкрапления фаз и др., которые в значительной степени определяют свойства материалов. Характерный угол рассеяния на объекте размера  $d \gg \lambda$ , где  $\lambda$  – длина волны нейтрона, равен  $\theta \sim \lambda/d \ll 1$ , поэтому для исследования таких неоднородностей используется метод малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). Любая малоугловая установка содержит следующие основные элементы: источник излучения, коллиматор узкого пучка с монохроматором, блок образца и детектор рассеянного излучения.

### **Принципы построения малоугловых установок**

Рассмотрим основные условия измерения интенсивности при малых углах рассеяния и проанализируем принципы построения и характеристики малоугловых установок. Эти принципы не зависят от вида используемого излучения и конкретного типа примененного детектора. Главное, что отличает малоугловые установки от других дифракционных приборов — это высокое угловое разрешение, дающее возможность исследовать структуру высокодисперсных систем. Поэтому сейчас мы остановимся на условиях достижения в экспериментальных установках высокого углового разрешения.

### **Угловое разрешение**

Цель малоуглового эксперимента — это измерение интенсивности рассеяния  $I(q)$  при малых величинах модуля вектора рассеяния  $q = 4\pi \sin(\theta/2)/\lambda$ , существенно меньших, чем  $r_0^{-1}$ , где  $r_0$  — межатомное расстояние. Для исследования частиц или вообще каких-либо неоднородностей плотности масштаба  $10 - 10^4$  Å нужно иметь возможность вести измерения рассеянного излучения в интервале значений  $q$  от  $10^{-4}$  до  $10^{-1}$  Å<sup>-1</sup>. Для более крупномас-

штабных дисперсных систем соответственно надо использовать еще меньшие значения  $q$ . Поэтому измерения рассеянного излучения необходимо проводить при очень малых углах рассеяния  $\theta$ , так как реально используемые длины волн не могут существенно превышать межплоскостные расстояния: для рентгеновского излучения это  $1 - 2 \text{ \AA}$ , а для тепловых нейтронов —  $2 - 10 \text{ \AA}$ .

При построении малоугловых установок возникают две взаимно связанные проблемы — измерение интенсивности, начиная с очень малых значений  $q_{\min}$ , и достижение высокого разрешения по  $q$ , т. е. существование достаточно малых  $\Delta q$ , для которых возможно различить интенсивность при значениях  $q$  и  $q + \Delta q$ . При малых  $q$  значение  $\Delta q$  становится величиной того же порядка, что и  $q$  — в этом состоит специфика малоуглового эксперимента.

Наконец, помимо  $q_{\min}$  и  $\Delta q$  есть и третий параметр, характеризующий пространственное разрешение малоуглового эксперимента — максимальная величина  $q_{\max}$ , до которой ведутся измерения, интенсивности. Значение  $q_{\max}$  характеризует нижний предел пространственных неоднородностей, который может быть зафиксирован в эксперименте.

### **Источники тепловых нейтронов, монокроматизация, детекторы**

Реакторное излучение содержит  $\gamma$ -фон и быстрые нейтроны, а спектр тепловых нейтронов является полихроматическим. Поэтому необходимо отфильтровать определенную часть спектра и монокроматизировать пучок. Фильтрация  $\gamma$ -излучения и быстрых нейтронов может быть проведена путем применения нейтронновода-отсекателя. Принцип действия такого устройства (описанный в § 6 главы 1) основан на явлении зеркального отражения нейтронов от стенок нейтронновода: отражаются лишь нейтроны с длинами волн  $\lambda > \lambda_{\text{кр}}$  (где  $\lambda_{\text{кр}}$  — граничная длина волны для материала зеркального покрытия), а нейтроны с  $\lambda < \lambda_{\text{кр}}$  и  $\gamma$ -излучение гасятся окружающей нейтронвод защитой.



Проблема монохроматизации решается существенно разными способами при работе на источниках нейтронов стационарного и импульсного типов. В первом случае используются кристаллические монохроматоры, механические селекторы, а также магнитные монохроматоры поляризованных нейтронов; во втором — измерения ведутся по времяпролетной методике, позволяющей оптимально использовать поток импульсов источника. Спектр длин волн нейтронов на выходе канала реактора имеет форму максвелловского типа, обычно с максимумом в области  $1,1 - 1,6 \text{ \AA}$ . Применение источника холодных нейтронов позволяет получить существенный выигрыш потока нейтронов в области  $2 - 4 \text{ \AA}$  и расширить диапазон рабочих длин волн в длинноволновую область до  $\sim 20 \text{ \AA}$ , что очень важно в малоугловом нейтронном эксперименте по ряду причин. Во-первых, увеличение длины волны позволяет оптимизировать условия эксперимента без изменения геометрии прибора. Действительно, при увеличении длины волны  $\lambda$  увеличивается угол  $\theta \sim \lambda / d$ , и снижаются требования к разрешающей способности прибора. Во-вторых, увеличение длины волны позволяет изучать неоднородности в кристаллах, отстраиваясь от двойного брэгговского рассеяния с помощью выбора длины волны  $\lambda > 2d_{\max}$ .

Для детектирования тепловых нейтронов в малоугловых экспериментах в настоящее время наиболее широко применяются газонаполненные счетчики, в которых в качестве конвертирующего газа обычно используются  $\text{BF}_3$  либо  $^3\text{He}$ . Принцип их работы описан в § 11 главы 2. Для регистрации малоуглового рассеяния созданы мультidetекторные системы, представляющие собой как общую одно- или двухкоординатную камеру, так и многоканальные секции из отдельных стандартных счетчиков. Оба типа мультidetекторов имеют свои недостатки и преимущества конструктивного плана, однако, следует отметить, что не удастся получить пространственное разрешение выше нескольких миллиметров. Это обстоятельство является одной из основных причин больших геометрических размеров нейтронных малоугловых дифрактометров. Что касается эффективности регистрации нейтронов, то она особенно высока при использовании  $^3\text{He}$  и может достигать  $\sim 90 - 95\%$ .

## Малоугловые дифрактометры

Рассмотрим некоторые примеры установок, построенных для изучения рассеяния тепловых нейтронов под малыми углами.

Одним из примеров рациональной организации может служить Национальный центр малоугловых исследований при Окриджской национальной лаборатории в США. Там собраны пять малоугловых установок — три нейтронных и два рентгеновских дифрактометра, что позволяет в одном месте решать широкий круг малоугловых задач.

Основным нейтронным малоугловым прибором центра является 30-метровый дифрактометр. В дифрактометре осуществлена точечная коллимация первичного пучка, монохроматизация достигается с помощью плоского кристалла графита на входе, рассеянное излучение падает на двумерный позиционно-чувствительный детектор. Длина волны имеет два фиксированных значения 4,75 и 2,38 Å,  $\Delta\lambda/\lambda = 6\%$ , расстояние источник — образец 10 м, образец — детектор 1,5—18 м, размер детектора 64×64 см с пространственным разрешением 0,5×0,5 см. Интервал значений  $q$  изменяется от  $5 \cdot 10^{-3}$  до  $0,6 \text{ \AA}^{-1}$ .

Несколько нейтронных дифрактометров работают в Институте Лауэ — Ланжевена (Гренобль, Франция).

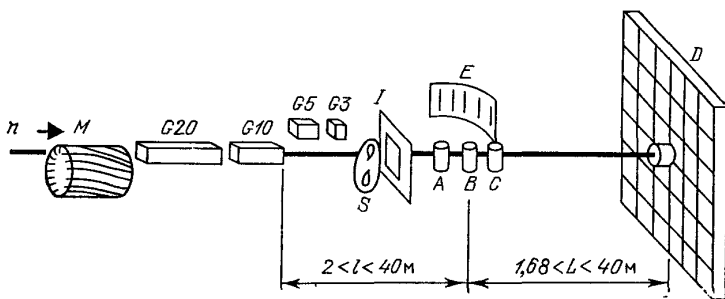


Рис. 14.2. Схема расположения узлов в нейтронном малоугловом дифрактометре D11 (Гренобль, Институт Лауэ — Ланжевена):  $n$  — поток нейтронов из реактора;  $M$  — механический селектор скоростей нейтронов;  $G3$ ,  $G5$ ,  $G10$ ,  $G20$  — сменяемые нейтронпроводы, позволяющие иметь коллиматоры длиной 3, 5, 10 и 20 м;  $S$  — прерыватель;  $I$  — диафрагма;  $A$ ,  $B$ ,  $C$  — места для установки образцов;  $E$  — гребенка из 32 одноканальных счетчиков;  $D$  — мультidetектор

Очень большое число ставших уже классическими малоугловых исследований (особенно в области биологии) было выполнено на одном из первых нейтронных приборов — дифрактометре D11. Основные его элементы показаны на рис. 14.2: вращающийся селектор со спиральными канавками для монохроматизации потока нейтронов от холодного источника, почти точечная коллимационная система первичного пучка, двумерный детектор для регистрации рассеянного излучения. Длина волны может меняться от 4,5 до 20 Å при использовании холодного источника,  $\Delta\lambda/\lambda = 50\%$  и 9%. Максимальный размер пучка на образце 3×5 см. Детектор имеет 64×64 элемента, размер каждого 1×1 см. Измерения ведутся в области  $7,4 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-1} < q < 0,44 \text{ \AA}^{-1}$ . Прибор позволяет также измерять диффузное рассеяние в средних и больших углах. Общая длина этого гиганта составляет почти 100 м.

В Гатчине в ПИЯФ построен многоканальный нейтронный малоугловой дифрактометр «Мембрана II» (рис. 14.3).

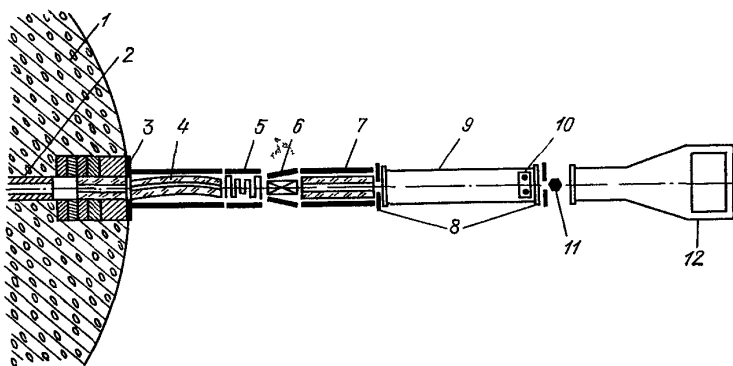


Рис. 14.3. Схема дифрактометра «Мембрана II»: 1 — биологическая защита реактора; 2 — коллиматор; 3 — прямой нейтронный канал; 4 — изогнутый нейтронный канал с поляризатором; 5 — магнитный резонатор; 6 — адиабатический переворачиватель спина; 7 — прямой нейтронный канал-анализатор; 8 — кадмиевые щели; 9 — вакуумный канал; 10 — мониторный модуль; 11 — узел образца; 12 — детекторная система

Особенностями этого прибора являются применение магнитного монохроматора поляризованных нейтронов, использование мультidetектора и чрезвычайно низкий уровень фона в канале каждого

счетчика — 2 – 4 имп/ч. Последнее обстоятельство, обеспеченное за счет конструкции и расположения прибора, позволило при относительно невысокой светосиле дифрактометра проводить измерения малоуглового рассеяния даже слаборассеивающих объектов.

Некоторые основные характеристики дифрактометра «Мембрана II». Монохроматизация в интервале  $2,2 \text{ \AA} < \lambda < 5 \text{ \AA}$  достигает величины  $\Delta\lambda/\lambda = 7\%$ , плотность потока на образце  $0,7 \cdot 10^4$  нейтрон/см<sup>2</sup>с. Размеры пучка на образце  $0,7 \times 6$  см, расстояние источник — образец и образец — детектор 8 м. Число счетчиков (наполненных <sup>3</sup>He) в детекторе — 41, угловое расстояние между соседними счетчиками  $2 \cdot 10^{-3}$  радиан. Перекрываемый диапазон в обратном пространстве  $1,3 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1} < q < 0,6 \text{ \AA}^{-1}$ .

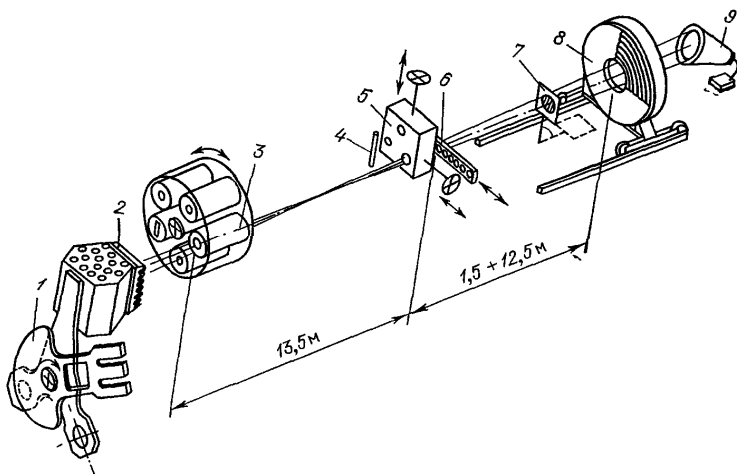


Рис. 14.4. Основные узлы установки малоуглового рассеяния нейтронов по методу времени пролета: 1 — активная зона ИБР-2 с главным и дополнительным подвижными отражателями; 2 — гребенчатый замедлитель; 3 — сменный коллиматор K1; 4 — мониторный детектор; 5 — юстируемый коллиматор K2; 6 — образец; 7 — ванадиевый рассеиватель; 8 — кольцевой многолитровой детектор рассеянных нейтронов; 9 — детектор прямого пучка

В Объединенном институте ядерных исследований (Дубна) построен малоугловой дифрактометр на импульсном реакторе ИБР-2. Этот прибор (рис. 14.4) использует широкий спектр длин волн ней-

тронов (времяпролетная методика) и кольцевой детектор. Оба этих фактора позволяют существенно повысить интенсивность рассеяния при сохранении преимуществ точечной коллимационной системы (для изотропных образцов), но угловое разрешение дифрактометра при этом невысоко. Диапазон переданных импульсов:  $8 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1} < q < 2 \text{ \AA}^{-1}$ . При этом, как и во всех экспериментах по методу времени пролета, рассеяние объектом регистрируется как зависимость интенсивности рассеяния от длины волны, которая затем с помощью специальной процедуры обработки преобразовывается в первичную функцию  $I(q)$ .

### Двухкристальный дифрактометр

Продвижение в область меньших углов рассеяния нейтронов позволяет осуществить двухкристальный дифрактометр на совершенных кристаллах. Схематически дифрактометр изображен на рис. 14.5.

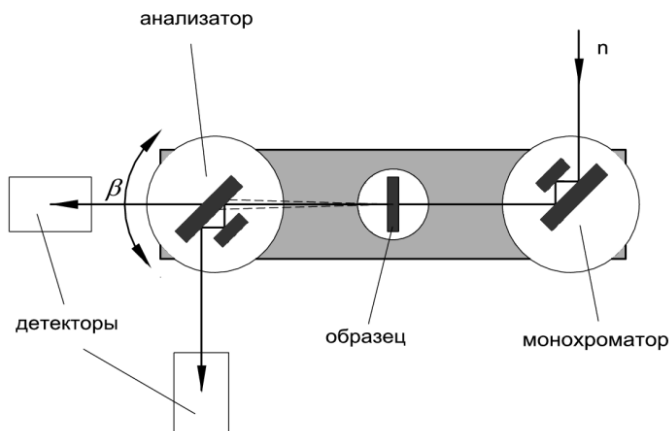


Рис. 14.5. Схема двухкристального дифрактометра на совершенных кристаллах

Первый кристалл служит монохроматором, а второй – анализатором пучка нейтронов, прошедших через прибор. Снятие информации осуществляется путем поворота кристалла-анализатора на угол в доли секунд с последующей экспозицией в каждой точке, в это время кристалл-монохроматор должен быть неподвижен. По

мере вращения кристалла-анализатора счёт на основном детекторе (интенсивность отражения) сначала возрастает, достигает максимума при значении угла  $\beta$  между кристаллическими плоскостями кристаллов анализатора и монохроматора, равному нулю, и затем уменьшается до фона. В случае одного отражения от кристалла при больших углах образуется заметный “хвост”, спадающий как  $\beta^{-2}$ . Способ подавления показан на рис. 14.5 – это использование в качестве монохроматора и анализатора кристаллов с пропилом, обеспечивающих многократное отражение пучка от одноимённых плоскостей ( $hkl$ ). Для некоторых экспериментов также используется второй детектор, регистрирующий нейтроны, прошедшие через кристалл-анализатор.

В отсутствие образца интенсивность монохроматических нейтронов, отражённых от кристалла-анализатора, описывается формулой:

$$I_0(\beta) = \kappa \cdot \int_{-\infty}^{\infty} R^n(\xi) \cdot R^m(\xi - \beta) d\xi = \kappa R^n * R^m, \quad (14.1)$$

где  $\kappa$  – постоянная величина, зависящая от характеристик нейтронного спектра и расходимости первичного пучка;  $R(\xi)$  – коэффициент брэгговского отражения от “идеального” кристалла;  $\xi = \vartheta - \theta_B$ ;  $\vartheta$  – угол падения луча,  $\theta_B$  – угол Брэгга,  $n$  и  $m$  – число отражений нейтрона в монохроматоре и анализаторе соответственно. Очевидно схеме на рис. 14.5 отвечают  $n = 3$ ,  $m = 3$ . Поясним происхождение формулы (14.1). Нейтрон, пройдя через систему коллиматоров, падает на монохроматор под углом  $\xi$  (относительно угла Брэгга) и отражается под тем же углом. Вероятность однократного отражения равна  $R(\xi)$ , соответственно  $n$ -кратного –  $R^n(\xi)$ . После этого нейтрон падает на анализатор под углом  $\xi - \beta$ , отражается от него с вероятностью  $R^m(\xi - \beta)$  и попадает в детектор. Угол падения  $\xi$  лежит в пределах от  $\theta_B - \theta_{coll}$  до  $\theta_B + \theta_{coll}$ , где  $2\theta_{coll}$  – разброс углов коллимации. Так как данный разброс много больше ширины линии отражения  $R(\xi)$ , то пределы интегрирования в (14.1) можно взять бесконечными. Кривая  $I_0(\beta)$  носит название инструментальной линии двухкристалльного дифрактометра.

Коэффициент отражения от передней плоскости толстого совершенного кристалла определяется формулой Дарвина:

$$R_D(y) = \begin{cases} 1 & |y| \leq 1 \\ \left[ |y| - \sqrt{y^2 - 1} \right]^2 & |y| > 1 \end{cases}, \quad (14.2)$$

где  $y = \xi / \Delta\theta_D$  – нормированная разность угла падения и угла Брэгга. Параметр Дарвина  $\Delta\theta_D$  определяет полуширину кривой брэгговского отражения, для симметрично вырезанных кристаллов (кристаллические плоскости параллельны поверхности) он равен:

$$\Delta\theta_D = \exp(-W) b_c |F_{hkl}| N \lambda^2 / [\pi \sin(2\theta_B)], \quad (14.3)$$

где  $W$  – фактор Дебая – Валлера,  $b_c$  – длина когерентного рассеяния,  $F_{hkl}$  – формфактор для брэгговского отражения от плоскостей ( $hkl$ ),  $N$  – число элементарных ячеек в единице объема. Хотя существует большое число различных высококачественных монокристаллов, требуемые для малоугловых экспериментов высокое совершенство кристаллической структуры и большой размер кристалла приводят к тому, что в экспериментах используют в основном кристаллы кремния или германия. Для кремния (220)  $b_c = 4,15 \cdot 10^{-15}$  м,  $F_{hkl} = 8$ ,  $N = 6,24 \cdot 10^{21}$  см<sup>-3</sup>, и для длины волны  $\lambda = 2,4$  Å,  $\theta_B = 0,67$  рад (38,4°) и  $W = 0,03$  получаем  $\Delta\theta_D = 3,72 \cdot 10^{-6}$  рад.

Для тепловых нейтронов большинство кристаллов являются слабо поглощающими, и отражение нейтронов от задней поверхности кристалла также дается вклад в коэффициент отражения, который в этом случае определяется формулой Эвальда:

$$R_E(y) = 2R_D(y) / [1 + R_D(y)]. \quad (14.4)$$

Ширина  $\Delta$  инструментальной линии  $I_0(\beta)$  при использовании совершенных кристаллов Si или Ge и  $\lambda \sim 2$  Å определяется формулами (14.3), (14.4) и равна  $\Delta \sim 10^{-5}$  рад (2 – 3 угл. сек), что определяет угловой диапазон:  $3'' \leq \theta \leq 5'$ , пригодный для опытов по малоугловому рассеянию нейтронов двухкристалльным методом.

То, что ширина  $I_0(\beta)$  близка к ширине дарвиновского профиля отражения (14.2) объясняется тем, что в отличие от "белого" пучка в отраженном от монохроматора пучке разброс нейтронов по  $\lambda$  и

направлению их распространения не является независимым: он подчиняется соотношению Брэгга:  $2d \cdot \sin \vartheta = n \cdot \lambda$ . В этом "коррелированном" пучке каждому значению  $\lambda$  соответствует определенное с точностью до дарвиновской ширины направление распространения нейтронов. Таким образом, кристалл-анализатор в строго параллельной позиции с монохроматором одновременно отражает всю совокупность узких дарвиновских профилей  $R_i$ , вошедших в угловые пределы, определенные горизонтальной расходимостью. При повороте кристалла-анализатора вокруг вертикальной оси из строго параллельной позиции происходит одновременная расстройка всех  $R_i$ .

Прецизионная узость инструментальной кривой двухкристального дифрактометра на совершенных кристаллах позволяет применять их для проведения малоугловых опытов с высоким разрешением по вектору  $q$ . В более широких угловых пределах методика проигрывает в светосиле описанному выше методу, основанному на использовании коллиматоров, нейтронотводов и позиционно-чувствительных детекторов. Диапазон векторов рассеяния  $q$ , доступный для изучения с помощью двухкристального дифрактометра составляет  $2 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}^{-1} \leq q \leq 3 \cdot 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ , что делает возможным изучение неоднородностей с размером  $300 \text{ \AA} \leq D \leq 10^5 \text{ \AA}$ .

Если теперь в пространство между кристаллами монохроматора и анализатора поместить рассеиватель (см. рис. 14.5), то форма кривой отражения изменяется, и над хвостами кривой  $I_0(\beta)$  появляется "гало", соответствующее нейтронам, испытавшим малоугловое рассеяние. Таким образом, двухкристальный дифрактометр представляет собой нейтронооптическую систему, фиксирующую угловое отклонение в "коррелированном" пучке нейтронов между кристаллами, и любое отклонение может быть обнаружено, если его величина порядка  $\gamma_0 \sim 2''$  или больше.

### Особенности двухкристальной методики

Существенным обстоятельством является то, что в опытах на двухкристальном дифрактометре высокое угловое разрешение достигается только в горизонтальной плоскости, т. е. точно фиксируется лишь горизонтальная составляющая углового отклонения нейтронов. Поэтому необходимо введение "коллимационных попра-



вок", связанных с тем, что измеряемое распределение интенсивности представляет собой истинное распределение, проинтегрированное по вертикальным отклонениям.

Из-за аксиальной симметрии МУРН распределение интенсивности излучения после образца  $I(\theta, \varepsilon)$ , где  $\theta, \varepsilon$  – сферические координаты вектора  $\mathbf{k}_s$ , является функцией только угла рассеяния  $\theta$  (рис. 14.6). Так как рассеяние происходит на небольшие углы ( $\theta \sim 10^{-3}$  рад), то без ущерба для строгости можно перейти к декартовой системе координат и характеризовать отклонение луча от первоначального направления углами  $\gamma$  и  $\varphi$ , определяющими отклонение, соответственно, в горизонтальной и вертикальной плоскости, считая при этом, что  $\theta^2 = \gamma^2 + \varphi^2$ . Таким образом,  $I(\theta, \varepsilon) \rightarrow I(\theta) = I(\sqrt{\gamma^2 + \varphi^2})$ .

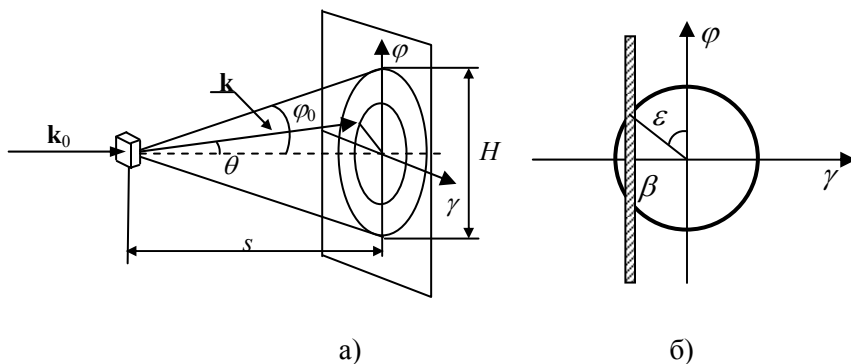


Рис. 14.6. а) Диаграмма МУРН с аксиальной симметрией, на которой  $\mathbf{k}_0, \mathbf{k}$  – соответственно, волновые векторы падающего и рассеянного излучения;  $\theta, \varepsilon$  – сферические координаты вектора  $\mathbf{k}_s$ ;  $\gamma$  и  $\varphi$  – декартовы координаты;  $\varphi_0$  – максимальный угол рассеяния, при котором происходит регистрация излучения;  $s$  – расстояние от образца до детектора;  $H$  – размер окна детектора; б) рассеяние в декартовой системе координат, где заштрихованной полосой изображена область в импульсном пространстве рассеянного излучения, регистрируемого с помощью двухкристалльного дифрактометра

При фиксированном угле  $\beta$  между кристаллами монохроматора и анализатора детектором регистрируется рассеянное излучение, распространяющееся в диапазоне, который представлен графиче-

ски на рисунке 14.6б в виде вертикальной заштрихованной полосы. Ширина этой полосы определяется угловой шириной кривой отражения совершенного кристалла, составляющей в нашем случае около 3".

Получим выражение для экспериментально наблюдаемого распределения интенсивности малоуглового рассеяния нейтронов. Пусть нейтрон падает на монокроматор под углом  $\alpha$ , тогда он отражается от него с вероятностью  $R^n(\alpha)$ . Затем он рассеивается на образце на угол  $\gamma$  в горизонтальной плоскости с вероятностью  $\tilde{I}(\gamma)$ . Далее, если анализатор повернут на угол  $\beta$  относительно монокроматора, то нейтрон падает на него под углом  $\alpha + \gamma - \beta$  и отражается с вероятностью  $R^m(\alpha + \gamma - \beta)$ . Вероятность попадания нейтрона в детектор равна произведению указанных выше вероятностей, так как все отражения нейтрона независимы. Поскольку углы  $\alpha$  и  $\gamma$  произвольны, по ним надо проинтегрировать. В итоге измеряемое угловое распределение интенсивности МУРН описывается следующим образом:

$$I^{\text{exp}}(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \int_{-\infty}^{\infty} d\gamma R^n(\alpha) \tilde{I}(\gamma) R^m(\alpha + \gamma - \beta), \quad (14.5)$$

где, как и в (14.1) пределы интегрирования взяты бесконечными, так как линии отражения от совершенных кристаллов много уже разброса углов в падающем пучке нейтронов. Легко видеть, что интеграл по  $\alpha$  дает инструментальную линию, следовательно

$$I^{\text{exp}}(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} d\gamma I_0(\beta - \gamma) \tilde{I}(\gamma) = I_0 * \tilde{I}, \quad (14.6)$$

т.е. измеряемая интенсивность определяется сверткой инструментальной линии с линией рассеяния образца. Если  $I(\theta)$  – вероятность рассеяния на угол  $\theta$  при прохождении через образец, то вероятность рассеяния на угол  $\gamma$  в горизонтальной плоскости получается интегрированием по углу рассеяния в вертикальной плоскости

$$\tilde{I}(\gamma) = \int_{-\varphi_0}^{\varphi_0} I(\sqrt{\gamma^2 + \varphi^2}) d\varphi, \quad (14.7)$$

а пределы интегрирования ( $\pm\varphi_0$ ) определяются геометрией опыта (рис. 14.6а):

$$\varphi_0 = \arctg(H/2s) \sim H/2s. \quad (14.8)$$

В типичных опытных условиях,  $H \approx 40$  мм,  $s \approx 1200$  мм, при этом  $\varphi_0 \approx 1^\circ = 0,017$  рад.

Обычно угловой диапазон, в котором интенсивность МУРН отлична от нуля,  $\theta_{\max} \ll \varphi_0$ , что позволяет в (14.7) перейти к интегрированию в бесконечных пределах и переписать его в виде

$$\tilde{I}(\gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\sqrt{\gamma^2 + \varphi^2}) d\varphi. \quad (14.9)$$

Из (14.9) легко показать, что если  $I(\theta) \sim \theta^{-\delta}$  при  $\theta \rightarrow \infty$ , то  $\tilde{I}(\gamma) \sim \gamma^{-\delta+1}$ , т.е. при использовании двухкристалльной методики степень зависимости интенсивности от угла повышается на единицу. Например, при изучении МУРН на сплошных, однородных по плотности, компактных частицах с резкой границей вместо известной асимптотической зависимости Порода  $I(\theta) \sim \theta^{-4}$  при использовании двухкристалльной методики наблюдается зависимость  $\tilde{I}(\gamma) \sim \gamma^{-3}$ .

### Экспериментальные установки

Исследования по методу ультрамалоуглового рассеяния нейтронов, основанные на использовании двухкристалльного дифрактометра, активно проводятся в США, Европе, Японии и России. Планируется создание времяпролетного двухкристалльного дифрактометра на источнике SNS (США).

На реакторе ИРТ МИФИ работает универсальный дифрактометр высокого углового разрешения, показанный на рис. 14.7. В этом приборе для изменения длины волны нейтронов используется сдвоенный монохроматор 6. Особенность двойной монохроматизации заключается в том, что изменение длины волны производится одновременным перемещением кристаллов вдоль оси пучка нейтронов и их поворотом на угол, определяющийся из условий Брэгга. При этом моноэнергетический пучок не меняет своего по-

ложения в пространстве и выводится в зал реактора через эффективную стационарную биологическую защиту 8.

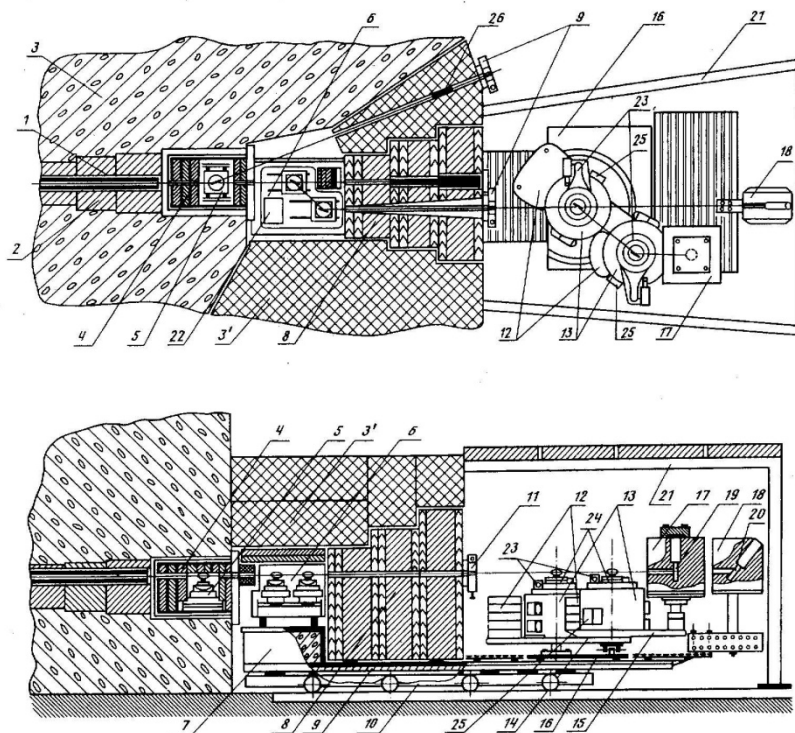


Рис. 14.7. Общий вид универсального нейтронного дифрактометра МИФИ:

1 – коллиматор; 2 – шибберные секции реактора; 3 – защита ИРТ; 3' – стационарная защита дифрактометра; 4 – внутришибберное устройство; 5 – юстировочная головка внутришибберного устройства; 6 – блок двухкристального монохроматора (БДМ); 7 – основание дифрактометра; 8 – лобовая защита; 9 – противовибрационная защита; 10 – подвижная платформа, установленная на рельсовом пути; 11 – автономные шибберы монохроматических пучков; 12 – противовесы гониометров дифрактометра; 13 – гониометры; 14 – основная консоль с опорной тележкой; 15 – консоль детектора; 16 – плита; 17 – защита основного детектора; 18 – защита детектора прямого пучка; 19 – основной детектор; 20 – детектор прямого пучка; 21 – термостат; 22 – датчик положения БДМ; 23 – механизмы прецизионных угловых перемещений; 24 – юстировочные головки; 25 – фотодатчики гониометров; 26 – мониторный счетчик СНМ-20

Высокое угловое разрешение прибора реализуется при повороте кристалла-анализатора на углы  $\sim 0,1''$ ; такие повороты возможно осуществить лишь с помощью специального сканирующего устройства 23, установленного на консольно-связанных гониометрах 14. Белый пучок нейтронов с расходимостью  $2^\circ$  формируется дырчатым коллиматором длиной 0,9 м и ограничивается при входе в блок сдвоенного монохроматора до размеров  $24 \times 36 \text{ мм}^2$ ; плотность тепловых нейтронов в этом месте составляет порядка  $10^9$  нейтрон-см $^{-2}$ ·с $^{-1}$  при мощности аппарата 2,5 МВт. Отражаясь сначала от дислокационного кристалла Ge (111), а затем от высокосовершенного кристалла-монохроматора, пучок нейтронов через канал в защите выходит в экспериментальный зал, где далее испытывает малоугловое рассеяние на образце, помещаемом после автономного шибера 11, и, отражаясь от кристалла-анализатора, регистрируется пропорциональным счетчиком 19.

Для проведения измерений по методу МУРН в качестве спектрометрической пары используются совершенные монокристаллы Ge с отражением (111) и  $\lambda = 1,75 \text{ \AA}$ , при этом ширина инструментальной кривой  $I_0(\beta)$  составляет  $\omega_0 = (3,1'' \pm 0,2'')$ . Фильтрация нейтронов, отвечающих высшим порядкам отражения, осуществляется с помощью монокристаллического кварца.

Образец помещается в пространство между кристаллами Ge и ограничивается по размеру так, чтобы с одной стороны он перекрывал наиболее плотную и однородную часть поперечного сечения пучка ( $20 \times 8 \text{ мм}^2$ ), а с другой обеспечивалась его постоянная толщина на облучаемой площади. Далее, последовательным поворотом кристалла-анализатора и экспонированием в точке измеряется кривая рассеяния  $I^{\text{exp}}(\beta)$ .

Приведем для сравнения параметры еще одного двухкристального нейтронного дифрактометра, расположенного в Окридджской национальной лаборатории в США. В приборе использованы кремниевые монокристаллы для монохроматора и для анализатора, применены щелевая коллимация первичного и рассеянного пучков, одноканальный детектор. Рабочая длина волны  $\lambda = 2,6 \text{ \AA}$ ,  $\Delta\lambda/\lambda = 2\%$ , расстояние источник — монохроматор равно 4,5 м, монохроматор — образец — 2,5 м, образец — детектор — 1 м, размеры пучка на образце  $4 \times 2 \text{ см}$ . Максимальная плотность потока  $10^4$

нейтрон/см<sup>2</sup>с. Измерения ведутся в области  $10^{-3} < q < 2 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^{-1}$ , разрешение по  $q$  составляет  $4 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$ . Прибор снабжен криостатом ( $1,5 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$ ), устройством для получения вертикального магнитного поля до 20 кГс и горизонтального поля до 6 кГс.

### **Примеры исследования материалов по методу МУРН**

Перечислим некоторые приложения метода малоуглового рассеяния.

1. **Изучение металлов и керамик.** Кинетика и морфология роста неоднородностей в сплавах и стеклах. Структура дефектов (например, микротрещины, поры), образовавшихся в результате деформаций, усталости материала или радиационных повреждений. Структура дефектов и зерен в нанокристаллических металлах и керамике.

2. **Магнетизм.** Магнитное упорядочение и фазовые переходы в ферромагнетиках, спиновых стеклах, магнитных сверхпроводниках и т.д. Вихревые решетки в сверхпроводниках.

3. **Полимеры.** Структура полимерных молекул в растворах и в объеме вещества. Факторы, влияющие на смешиваемость полимерных смесей.

4. **Биология.** Организация биомолекулярных комплексов в растворах. Структурные изменения, влияющие на функции протеинов, ферментов, ДНК-белковых комплексов, мембран и т.д.

5. **Химия.**

Структура и взаимодействия в коллоидных суспензиях, микроэмульсиях, поверхностно-активных мицеллах и т.д. Микропористость химических абсорбентов. Механизмы молекулярной самосборки в растворах и на поверхностях микропористых сред.

Остановимся подробнее на исследованиях радиационных дефектов и конструкционных материалов будущих ядерных и термоядерных реакторов. Методом МУРН проводят изучение механизма радиационного охрупчивания реакторных сталей. Исследования обычно проводятся по следующей схеме. Сначала создается набор образцов, включающий необлученный и облученные образцы, полученные при различных условиях облучения. Основными варьи-

руемыми параметрами облучения являются поток нейтронов, флюенс и температура. Главными параметрами сталей, влияющими на их поведение под облучением, являются содержание Cu, Ni, Mn и, в меньшей степени, P и Si. Далее проводятся исследования образцов методами МУРН, атомно-силовой и автоионной спектроскопий, позитронной аннигиляционной спектроскопии и др. МУРН исследования, направленные на обнаружение и изучение нанометровых неоднородностей структуры, проводятся следующим образом. Образцы помещают в сильное магнитное поле, чтобы намагнитить  $\alpha$ -Fe матрицу до насыщения. Далее измеряют ядерное и магнитное МУРН для облученных и необлученного (контрольного) образцов. МУРН, вызванное радиационно-индуцированными неоднородностями, получается вычитанием контрольного спектра из спектра облученного материала. Исходя из формы спектра определяют распределение неоднородностей по размерам, а по абсолютной интенсивности МУРН находят концентрацию неоднородностей. Вычисляя отношение магнитного МУРН к ядерному находят элементный состав неоднородностей.

В результате исследований было получено, что под воздействием облучения образуются нанометровые неоднородности, препятствующие движению дислокаций, что ведет к радиационному упрочнению и охрупчиванию. В сталях, содержащих более 0,1% Cu, образуются Cu кластеры, обычно также содержащие Mn, Ni и Si. В сталях с низким содержанием Cu в качестве нанометровых особенностей выступают комплексы вакансий, а также Mn-Ni кластеры.

Активно изучается динамика растворения кластеров при отжиге (изменение характерных размеров и совокупного объема). Рассмотрим исследования облученных корпусных сталей реактора с различным содержанием Cu, подвергнутые отжигу при различных температурах. Полученные экспериментальные зависимости сечения от вектора рассеяния для необлученного и облученного образцов, а также для образцов отожженных при различных температурах, представлены на рис. 14.8. Температуры отжига приведены на графике.

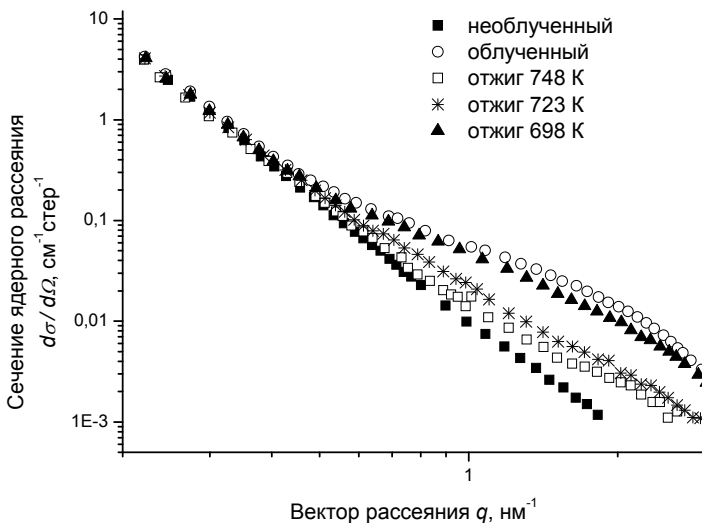


Рис. 14.8. Экспериментальные спектры ядерного рассеяния нейтронов

В исследованиях дефектов материалов часто форма неоднородностей не важна и предполагается сферической, а интерес представляет распределение дефектов по размерам. Так как концентрация кластеров невелика, то малоугловое рассеяние нейтронов является однократным и отсутствуют парные корреляции в их расположении. В этом случае интенсивность МУРН согласно формуле (7.8) определяется усредненным формфактором неоднородностей и ее можно представить в виде

$$I(q) = \int_0^{\infty} c_R F^2(q, R) dR,$$

где  $c_R$  – плотность вероятности того, что неоднородность имеет размер  $R$ ;  $F^2(q, R)$  – нормированная интенсивность рассеяния одной частицей размера  $R$  (предполагается известной a priori). Действительно,  $F^2(q, R)$  представляет собой интенсивность рассеяния на одной неоднородности, а для получения полной интенсивности рассеяния на образце проведено усреднение по распределению не-



однородностей. Полученное на основе обработки графиков рис. 14.8 распределение неоднородностей по размерам представлено на рис. 14.9. Анализ полученных распределений показывает, что с увеличением температуры отжига объемная плотность радиационно-индуцированных кластеров уменьшается, но максимум распределения практически не сдвигается (т.е. средний размер кластеров не уменьшается). Это доказывает, что характерное время растворения кластеров много меньше, чем время отжига.

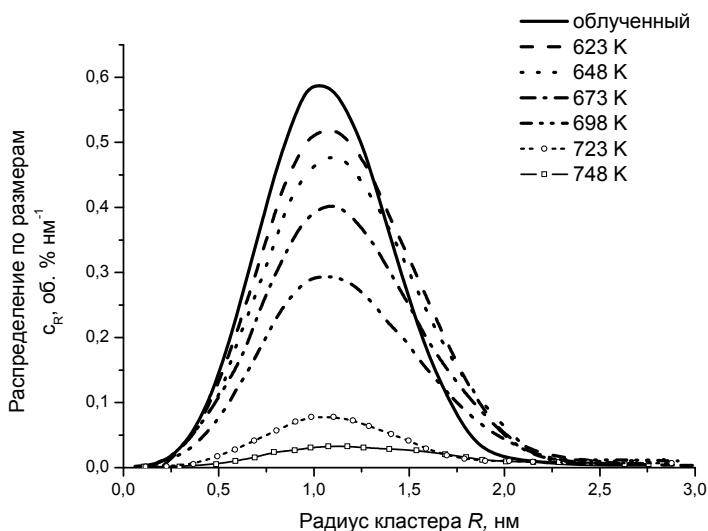


Рис. 14.9. Объемная доля рассеивателей радиуса  $R$  для облученного образца, а также облученных и затем отожженных образцов с различными температурами отжига

Часто метод МУРН используется для анализа влияния параметров синтеза материалов на неоднородности его структуры. Опишем кратко работу, посвященную МУРН исследованию направленно-кристаллизованной керамики. Целью работы являлось изучение влияния скорости роста керамики состава  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  на степень совершенства микроструктуры обеих фаз образца. Исходный образец был получен путем направленной кристаллизации. В процессе изготовления скорость роста кристалла была резко уве-

личена с  $v_1 = 4,15$  мм/час до  $v_2 = 10,9$  мм/час, вследствие чего полученный цилиндрический образец оказался состоящим из двух одинаковых по размеру частей, выращенных при разных скоростях.

В идеале полученный материал должен был представлять собой двухфазную систему, состоящую из монокристалла-матрицы  $Al_2O_3$  (1-я фаза), пронизанной плотноупакованными монокристаллическими волокнами иттрий-алюминиевого граната  $Y_3Al_5O_{12}$  (2-я фаза), причем предполагалось, что преимущественное направление роста волокон должно было совпадать с осью цилиндра.

Эксперименты проводились на описанном выше универсальном нейтронном дифрактометре МИФИ. Схема эксперимента приведена на рис. 14.10.

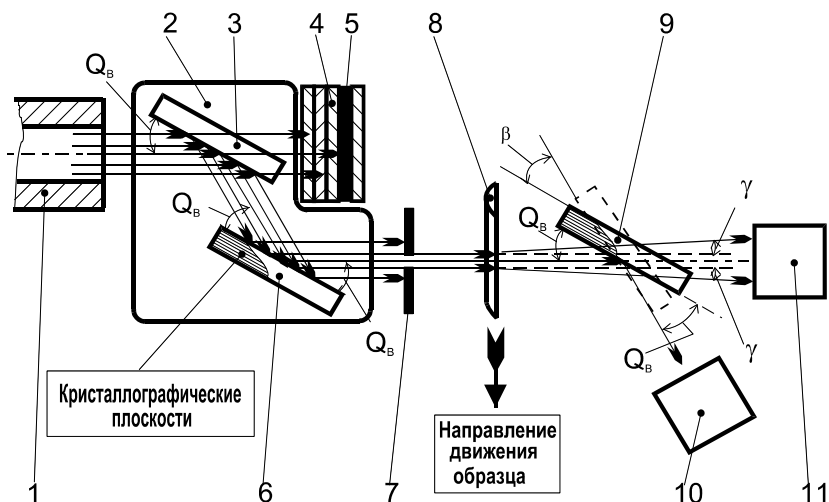


Рис. 14.10. Схема эксперимента на двухкристальном нейтронном дифрактометре: 1 – коллиматор; 2 – блок сдвоенного монокроматора; 3 – первый (предварительный) монокроматор из Ge; 4 – защита мониторинной камеры от прямого нейтронного и гамма-пучков; 5 – мониторинная камера; 6 – кристалл-монокроматор (основной) из Ge; 7 – маска; 8 – исследуемый образец; 9 – кристалл-анализатор из Ge; 10 – основной детектор для регистрации дважды отраженных нейтронов; 11 – дополнительный детектор для регистрации нейтронов, прошедших через кристалл-анализатор

Прошедший через коллиматор 1 пучок нейтронов из активной зоны реактора последовательно отражается кристаллами 3 и 6. По-

лученный монохроматический пучок с интенсивностью  $G_0$  попадает на кристалл-анализатор 9, отражается от него и регистрируется детектором 10. Часть нейтронов, с интенсивностью, равной  $J_0(\beta) = G_0 \cdot T_c(\beta)$ , проходит через кристалл-анализатор и регистрируется детектором прямого пучка 11. Здесь  $T_c(\beta)$  – фактор, учитывающий ослабление пучка кристаллом 9.

Если между кристаллами спектрометра находится образец 8, то часть монохроматических нейтронов выводится из пучка из-за поглощения и брэгговского рассеяния, а часть рассеивается на малые углы на неоднородностях в образце, например, таких как микропоры, вкрапления одной фазы в другую, дислокации и т.д. Для исследуемого образца преобладающим является однократное малоугловое рассеяние. Выполняя свертку интенсивности МУРН (см (7.20)) и инструментальной линии согласно (14.6), для интенсивности, измеряемой детектором 10, получаем:

$$I(\beta) = T_0 \cdot [T_s \cdot I_0(\beta) + I_s(\beta)], \quad (14.10)$$

где  $T_0$  – коэффициент, учитывающий ослабление интенсивности пучка при прохождении через образец,  $T_s$  – относительная доля нейтронов, не претерпевших ни одного акта малоуглового рассеяния при движении через образец,  $I_s$  – интенсивность рассеянных нейтронов, отразившихся от кристалла-анализатора. При строго параллельном расположении кристаллов 6 и 9, т.е. при  $\beta = 0$ , и слабо рассеивающих образцах, когда  $T_s$  близок к единице, величиной  $I_s(0)$  можно пренебречь и записать (14.10) в виде:

$$I(0) \approx T_0 \cdot T_s \cdot I_0(0). \quad (14.11)$$

Если повернуть кристалл анализатора на угол  $\beta_m \gg \omega_0$ , где  $\omega_0$  – ширина инструментальной линии, отражение от него практически прекращается, и для интенсивности  $J$  нейтронов, прошедших через кристалл-анализатор, справедливо очевидное соотношение:

$$J(\beta_m) = T_c(\beta_m) \cdot T_0 \cdot G_0 = T_0 \cdot J_0(\beta_m). \quad (14.12)$$

Итак, измерив две пары значений интенсивностей  $I_0(0)$ ,  $I(0)$  и  $J_0(\beta_m)$ ,  $J(\beta_m)$ , с помощью формул (14.11) и (14.12) легко определить величину  $T_s$ , которую можно представить в виде:

$$T_s = \exp(-\Sigma_{\text{МУРН}} \cdot L), \quad (14.13)$$

где  $L$  – толщина образца,  $\Sigma_{\text{МУРН}}$  – полное макроскопическое сечение МУРН (линейный коэффициент ослабления) пучка нейтронов.

В простейшем случае изолированных, равномерно распределенных по объему, одинаковых неоднородностей:

$$\Sigma_{\text{МУРН}} = \sigma_i \cdot c, \quad (14.14)$$

где  $c$  – концентрация неоднородностей,  $\sigma_i$  – полное сечение МУРН на единичном рассеивателе, зависящее от характерного размера и состава неоднородности. Следовательно, просвечивая различные области образца узким пучком нейтронов и сравнивая соответствующие значения  $T_s$  (или  $\Sigma_{\text{МУРН}}$ ), можно зафиксировать относительные изменения его микроstructures в диапазоне надатомных размеров. Для проведения такого сканирования образец помещался на специальное устройство, обеспечивающее его поступательное перемещение с заданным шагом (см. рис. 14.10). Перед образцом помещалась маска 7 из Cd и борированного полиэтилена.

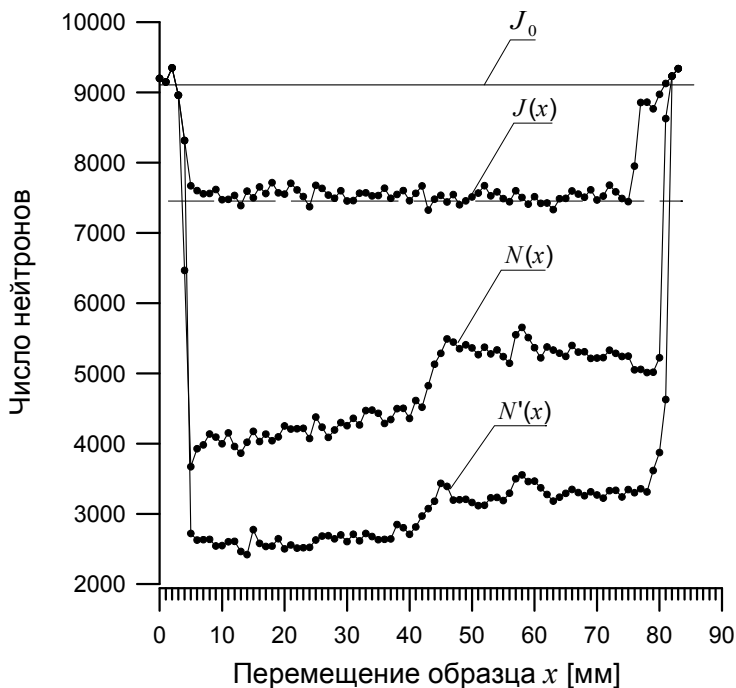


Рис. 14.11. Зависимости интенсивностей нейтронов, регистрируемых детекторами 10 и 11 от величины  $x$  поступательного перемещения образца

Были произведены четыре таких измерения, отличающиеся друг от друга направлением перемещения образца и угловым положением кристалла-анализатора. Два измерения с движением образца в горизонтальной плоскости при настроенном ( $\beta = 0$ , и отражение нейтронов максимально) и расстроенном ( $\beta > 2'$ , и отражение отсутствует) положении кристалла-анализатора, и два аналогичных измерения, но с движением образца в вертикальном направлении. Перед началом движения образец устанавливался вне пучка.

Полученные результаты представлены на рис. 14.11, где  $J(x)$  – измеренная при полностью расстроенном спектрометре зависимость интенсивности нейтронов, прошедших через кристалл-анализатор, от величины  $x$  поступательного перемещения образца при сканировании в горизонтальной плоскости. Аналогичная кривая для вертикального сканирования  $J'(x)$ , естественно, совпадает с  $J(x)$  и на рисунке не приводится (далее в тексте штрихом будут помечаться величины, полученные при вертикальном сканировании). Верхняя и нижняя штрихованные прямые показывают средние уровни интенсивностей  $J_0$  и  $J(x)$  соответственно.

Величины  $I(x)$ ,  $I'(x)$  отвечают интенсивностям отраженных нейтронов при горизонтальном и вертикальном сканировании соответственно. Кривые  $N(x)$ ,  $N'(x)$  на рис. 14.11 получены путем пересчёта экспериментальных зависимостей  $I(x)$ ,  $I'(x)$  по формуле:

$$N(x) = J_0 \cdot [I(x)/I_0] = J(x) \cdot T_s. \quad (14.15)$$

Так как, фактически,  $J(x)$  и  $J'(x)$  – постоянные величины, то средняя и нижняя кривые на рис. 14.11 представляют собой зависимости  $T_s(x)$ ,  $T_s'(x)$ , умноженные на постоянную величину. По определению, при отсутствии МУРН в образце величины  $T_s$ ,  $T_s'$  должны были быть тождественно равны 1, а кривые  $N(x)$  и  $J(x)$  (а также  $N'(x)$  и  $J'(x)$ ) – совпасть.

"Ступенчатый" характер  $N(x)$  и  $N'(x)$ , очевидно, связан с изменением скорости вытягивания в процессе роста образца, так как наблюдается (см. рис. 14.11) скачок интенсивности при просвечивании той области образца, которая формировалась в момент изменения скорости вытягивания. Такой вид зависимостей  $N(x)$  и  $N'(x)$  указывает на присутствие дополнительных неоднородностей структуры в половине образца, выращенной при более высокой скорости.

## **§15. Нейтронная интерферометрия\***

Интерферометры – широкий класс приборов, основанных на явлении интерференции волн самой различной природы. Известны акустические интерферометры и интерферометры электромагнитного излучения. В последние годы к этим приборам добавился новый класс интерферометров, основанный на наблюдении интерференции волн иной природы – волн "материи", или нейтронных волн. Область исследований, где применяют эти приборы, получила название нейтронной интерферометрии. Ее развитие стало возможным в результате применения интерферометров на совершенных монокристаллах.

### **1. Принцип действия нейтронных интерферометров**

Принцип действия интерферометров един для волн любой природы. Он состоит в том, что первичную волну расщепляют на некоторое количество когерентных волн (чаще всего на две волны) и заставляют расщепленные волны проходить различные пути для набора определенной разности фаз, и затем сводят их вместе в некоторой пространственной области и наблюдают интерференционную картину. Полученная таким способом интерференционная картина зависит от способа расщепления первичной на когерентные волны, от числа и относительной интенсивности интерферирующих волн, от размеров источника и т.д.

Учитывая особенности взаимодействия нейтронов с веществом нетрудно предположить, за счет чего в нейтронном интерферометре может быть выбрана разность фаз волн. Она может возникнуть, например, при ядерном рассеянии нейтронов, взаимодействии магнитного момента нейтрона с внешним магнитным полем, при взаимодействии гипотетического электрического дипольного момента с внешним электрическим полем, наконец, она может быть следствием того, что когерентные пучки нейтронов движутся в различных гравитационных или "слабых" полях.

---

\* Материал данного параграфа непосредственно основан на пособии [3].

Будем рассматривать двулучевой нейтронный интерферометр. Допустим, что одна из когерентных нейтронных волн движется в интерферометре свободно, а другая волна движется в поле с постоянным потенциалом  $V$  заданной природы. Тогда разность фаз двух когерентных пучков нейтронов в общем случае можно найти как

$$\beta = 2\pi \frac{x_0}{\lambda_0} - 2\pi \frac{x_1}{\lambda_1} = \frac{x_0 p_0}{\hbar} - \frac{x_1 p_1}{\hbar}, \quad (15.1)$$

где  $x_0$  и  $x_1$ ,  $\lambda_0$  и  $\lambda_1$ ,  $p_0$  и  $p_1$  есть, соответственно, длины пути, длины волн и импульсы нейтронов, движущихся свободно (индекс "0") и в среде с потенциалом  $V$  (индекс "1"). При одинаковых геометрических путях пучков ( $x_0 = x_1$ ) разность фаз будет  $\beta = x_0 \Delta p / \hbar$ , где  $\Delta p$  – изменение импульса нейтронов, обусловленное действием потенциала  $V$ .

В силу закона сохранения энергии кинетическую энергию  $\Delta E$ , приобретаемую или теряемую нейтроном, можно связать со средним потенциалом взаимодействия нейтрона с внешним полем  $\langle V \rangle$  соотношением  $\Delta E = \langle V \rangle$ . Так как при малом  $\Delta p$  для медленных нейтронов  $\Delta E = v \Delta p$ , где  $v$  – скорость нейтрона, окончательно находим:

$$\beta = \frac{x_0 \langle V \rangle}{\hbar v}. \quad (15.2)$$

Выражение (15.2) показывает, что сдвиг фаз, набираемый двумя когерентными волнами, определяется потенциалом взаимодействия нейтронов с внешним полем. Эта связь использовалась в очень тонких опытах с нейтронными интерферометрами, в которых был продемонстрирован и изучен целый ряд существенно квантовомеханических явлений.

Напомним, что сдвигом фаз определяются особенности наблюдаемой интерференционной картины. Если разность хода волн  $\Delta = \lambda \beta / 2\pi$  кратна целому четному числу полуволен, т.е.  $\Delta = 2m \cdot \lambda / 2$ , то результирующая волна будет усиливаться, а интенсивность ее будет максимальной; в том же случае, когда разность хода волн равна нечетному числу полуволен, т.е.  $\Delta = (2m + 1) \cdot \lambda / 2$ , результирующая волна ослабляется, а интенсивность ее минималь-

на. Целое число  $m$  называют, как известно, порядком интерференции.

## 2. Интерферометры нейтронов на совершенных монокристаллах

Во многих действующих в настоящее время нейтронных интерферометрах когерентные пучки получают с помощью совершенных кристаллов. Они позволяют развести пучки на расстояние порядка 1 см и наблюдать несколько сотен порядков интерференции.

Конструктивно нейтронные интерферометры могут различаться выполнением основных элементов: расщепителя, зеркала (устройства, сводящего воедино расщепленные пучки) и анализатора. Эти элементы могут быть независимыми частями конструкции и применяться как в геометрии Брэгга (на отражение), так и в геометрии Лауэ (на прохождение). Однако наиболее удачными оказались конструкции, изготовленные из единого монокристалла кремния.

Функциональными элементами большинства интерферометров на совершенных монокристаллах являются три плоскопараллельные пластины, находящиеся на общем основании. Эти интерферометры имеют форму буквы Ш (рис. 15.1а). Все три пластины по отношению к пучку находятся в геометрии Лауэ. Первая пластина (S) служит для расщепления нейтронного пучка на две когерентные составляющие, вторая (M) играет роль зеркала, а третья (A) является анализатором.

Если на расщепитель (рис. 15.1б) под углом к межкристаллическим плоскостям, близким к брэгговскому  $\theta_B$ , направить нейтронный пучок, то за пластиной он разделится на две части: одна будет двигаться в направлении первоначального пучка, а направление другой будет определяться условием Брэгга-Вульфа (5.9) (дифракционно отраженный пучок). Угол между пучками за расщепителем составит  $2\theta_B$ . При этом важно отметить, что, как и в случае обычной оптики, фаза нейтронной волны для прошедшего пучка не изменится, а фаза дифракционно отраженных волн изменится на угол  $\pi$ . После прохождения зеркала каждым из расщепленных пучков будут наблюдаться уже четыре пучка: два распространяющихся в направлении падающих – 1 и 4 (прошедшие пучки) и два дифракционно отраженных – 2 и 3 (рис. 15.1). Два прошедших пучка для



интерференции не существенны, и в эксперименте обычно используются для абсолютной привязки (нормировки) результатов. Нейтроны в этом случае регистрируются, например, счетчиком  $C_1$ .

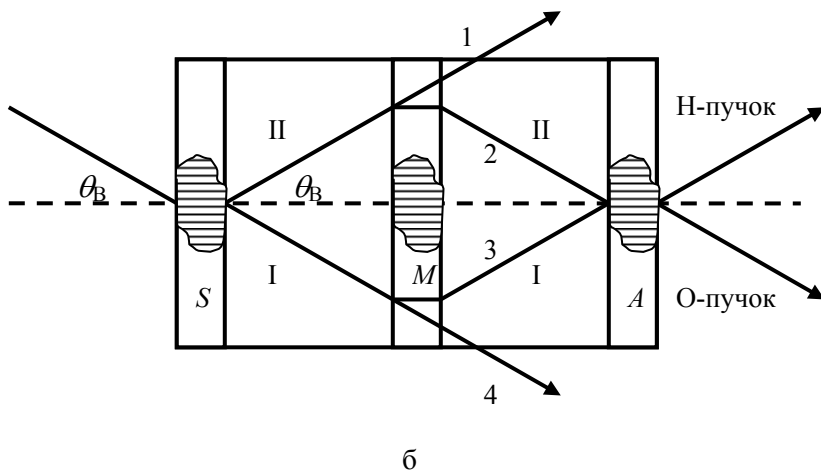
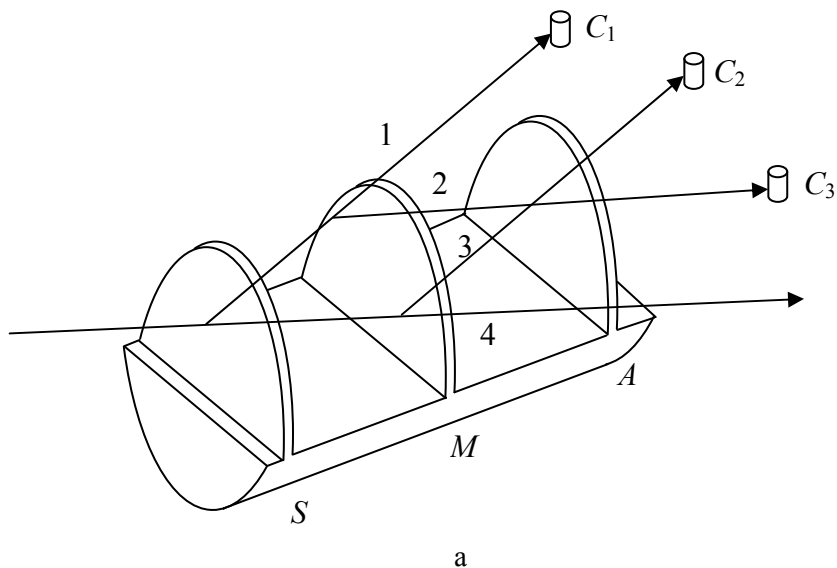


Рис. 15.1. Схема интерферометра на совершенных кристаллах.

Два дифракционно отраженных пучка 2 и 3 сходятся в том месте, где расположен анализатор. Последний в свою очередь расщепляет каждый падающий на него пучок на аналогичные две компоненты. В результате за интерферометром нейтроны будут вылетать в двух направлениях: в направлении первичного пучка (назовем этот пучок "О-пучком") и в направлении дифракционно отраженного ("Н-пучок"). "О-пучок" является, как видно, результатом когерентного сложения дифракционно отраженной волны пучка 3 и прошедшей волны пучка 2, а "Н-пучок" – результатом когерентного сложения дифракционно отраженных волн пучка 3 и прошедших волн пучка 2. Нейтроны "О-пучка" регистрируются счетчиком  $C_3$ , а "Н-пучка" – соответственно счетчиком  $C_2$ .

Из рис. 15.16 нетрудно видеть, что "Н-пучок" является наложением волн двух типов: одни из них распространяются вдоль пути II и поэтому испытывают только отражения, а другие распространяются вдоль пути I, и поэтому испытывают одно отражение и два преломления. Общее изменение фазы этих волн по отношению к первичному пучку и в том и в другом случае составляет  $\pi$ . "О-пучок" является наложением волн одного типа. Эти волны, распространяясь и по пути I и по пути II, испытывают по одному преломлению и по два отражения. Так как одно отражение изменяет фазу на угол  $\pi$ , то волны "О-пучка" не будут иметь сдвига фаз по отношению к первичному пучку.

Интерференция нейтронов как в "О-пучке", так и в "Н-пучке" наблюдается в условиях, когда между волнами, следующими по путям I и II, существует относительный сдвиг фаз из-за различия ядерного, магнитного или гравитационного потенциала в плечах интерферометра.

При расчетах интерферометров толщину пластин ( $S$ ,  $M$  и  $A$ ) выбирают из условия равенства интенсивностей нейтронов в прошедшем и дифракционно отраженном пучках. Обе эти величины являются периодическими функциями толщины пластин, причем амплитуда дифракционно отраженной волны максимальна, когда амплитуда прошедшей волны минимальна и наоборот.

Качество получаемой интерференционной картины зависит от соблюдения ряда основных требований к конструкции интерферометра и к характеристикам пучка, а именно: 1) от строгой параллельности межкристаллических плоскостей всех трех пластин ин-

терферометра, необходимой для обеспечения последовательного отражения под брэгговскими углами нейтронных волн, падающих на расщепитель; 2) от строгой параллельности поверхностей пластинок, необходимой для той же самой цели и, кроме того, для уменьшения расфокусировки пучка и исключения возможного случайного сдвига фаз; 3) от степени монохроматичности пучка нейтронов и т.д.

Первому требованию можно удовлетворить, если интерферометр изготовлен из совершенного монокристалла, выращенного из чистого исходного материала. Выполнение второго требования зависит от качества механической обработки, при которой, как показывают расчеты, следует соблюдать микронную точность.

В качестве примера приведем характеристики нейтронного интерферометра, с помощью которого был выполнен ряд прецизионных измерений на высокопоточном реакторе в г. Гренобле. Интерферометр изготовлен из совершенного монокристалла кремния диаметром 80 мм и длиной 70 мм. Толщина пластинок была одинаковой и составляла  $d = 4,3954 \pm 0,0008$  мм. Расстояние между пластинками  $a = 27,2936 \pm 0,0009$  мм. Нарезка пластин проводилась алмазной пилой с последующим травлением и шлифовкой. Пластины нарезались так, чтобы отражающие плоскости были расположены вертикально и перпендикулярно поверхности пластин. Измерения проводились на вертикально щелевом пучке монохроматических нейтронов ( $5 \times 2,5$  мм) с длиной волны  $\lambda = 1,835 \text{ \AA}$ . При эксплуатации прибора применялись меры предосторожности с целью предохранения его от вибраций на уровне  $10^{-3} - 10^{-4} \text{ g}$ . При настройке интерферометра выравнивались механические напряжения, возникающие в нем от изгиба отдельных частей интерферометра под действием собственной массы.

Интенсивности  $I_1$  и  $I_2$  нейтронов, попадающих соответственно в детекторы  $C_3$  и  $C_2$ , являются периодическими функциями относительного сдвига фаз  $\beta$ , набранного нейтронами на пути I и II:

$$I_1 = \alpha(1 + \cos \beta), \quad (15.3)$$

$$I_2 = \gamma + \alpha \cos(\pi + \beta), \quad (15.4)$$

где  $\alpha$  и  $\gamma$  – некоторые постоянные. Докажем соотношение (15.3) для интенсивности нейтронов "О-пучка". Волновая функция "О-пучка" равна  $\psi_o = \psi_o^I + \psi_o^{II}$ , где индексы I и II обозначают волны, которые проходят по путям I и II. Если взаимодействие нейтронов с внешними полями на путях I и II отсутствует, то

$$\psi_o^I = \psi_o^{II}. \quad (15.5)$$

Соотношение (15.5) очевидно, поскольку каждая из волн "О-пучка" в интерферометре испытывает одинаковые воздействия: дважды отражается от межкристаллических плоскостей и один раз проходит их насквозь. Если волна I движется в некотором потенциале, то две волны, выходящие из интерферометра в направлении "О-пучка", будут иметь вид

$$\psi_o^I = e^{i\beta} \psi_o^I, \quad (15.6)$$

$$\psi_o^{II} = \psi_o^{II}, \quad (15.7)$$

где  $\beta$  – сдвиг фазы, обусловленный ядерным или гравитационным потенциалом. Следовательно, волновую функцию "О-пучка" можно записать в виде

$$\psi_o' = (e^{i\beta} + 1)\psi_o^I. \quad (15.8)$$

Для интенсивности этого пучка имеем

$$I_1 = |\psi_o'|^2 = (2 + 2 \cos \beta) |\psi_o^I|^2. \quad (15.9)$$

Учитывая, что интенсивность "О-пучка" в отсутствие сдвига фаз равна  $I = |\psi_o|^2 = 4 |\psi_o^I|^2$ , получаем

$$I_1 = \frac{I}{2} (1 + \cos \beta), \quad (15.10)$$

что совпадает с выражением (15.3).

Соотношения (15.3) и (15.4) показывают, что интерференционную картину можно наблюдать как детектором  $C_3$ , так и детектором  $C_2$ . Однако интерференционный эффект можно усилить. Возьмем разность показаний этих двух детекторов:

$$I_1 - I_2 = \alpha - \gamma + 2\alpha \cos \beta. \quad (15.11)$$

Тогда интерференционный эффект, как видим, увеличивается вдвое. Заметим, что при сложении показаний детекторов, т.е.  $I_1 + I_2 = \alpha + \gamma$ , интерференционный эффект исчезает.

### 3. Опыты по интерференции нейтронов. Точное измерение длины рассеяния

Нейтронные интерферометры на совершенных монокристаллах позволяют провести очень точные измерения определенных характеристик вещества: показателя преломления  $n$  или связанной с ним соотношением (6.15) длины когерентного рассеяния. Высокая точность опытов достигается благодаря наблюдению многих (около нескольких сотен) порядков интерференции. Возможности применения кристаллических интерферометров для этих целей довольно разнообразны, хотя и имеются определенные ограничения, обусловленные конечными геометрическими размерами интерферометров и геометрией расщепленных пучков в них. В уже выполненных исследованиях проводились измерения показателей преломления некоторых твердых материалов и газообразных веществ.

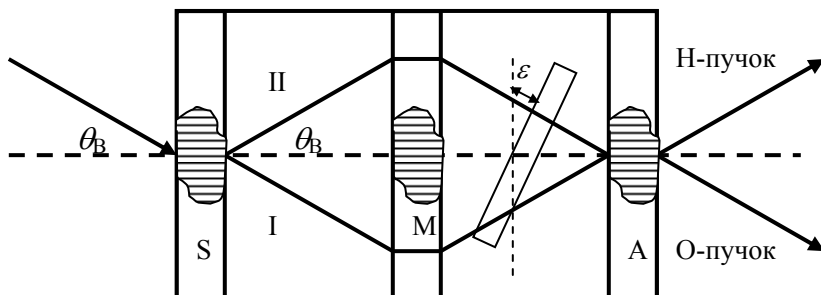


Рис. 15.2. Схема опыта по измерению показателя преломления вещества

В опыте по определению показателя преломления твердых тел плоскопараллельная пластинка из исследуемого материала определенной толщины  $t$  устанавливается либо между расщепителем и зеркалом, либо между зеркалом и анализатором (рис. 15.2). Метод измерения основан на вращении образца вокруг оси: при повороте

пластинки меняется длина пути проходимого в образце каждым из пучков I и II (для одного она увеличивается, а для другого уменьшается) и, соответственно, появляется относительный сдвиг фаз.

Пусть  $\varepsilon$  – угол поворота пластинки относительно положения симметрии (см. рис. 15.2). Из рисунка видно, что длины путей, проходимых каждым нейтронным пучком через образец, будут отличаться для путей I и II на величину

$$\Delta t = t \left[ \frac{1}{\cos(\theta_B + \varepsilon)} - \frac{1}{\cos(\theta_B - \varepsilon)} \right]. \quad (15.12)$$

Соответствующий этой разности  $\Delta t$  относительный сдвиг фаз нейтронных волн можно записать как

$$\beta = k\Delta t - k_0\Delta t, \quad (15.13)$$

где  $k$  – волновой вектор нейтрона в веществе исследуемого образца,  $k_0$  – волновой вектор нейтрона в вакууме. В соотношении (15.13) первое слагаемое есть разность фаз, набираемая волнами в среде на пути  $\Delta t$ , а второе – разность фаз, набираемая на том же пути в пустоте. Знак минус появляется из-за того, что относительное удлинение пути одной из волн в среде сопровождается точно таким же удлинением пути другой волны в пустоте, а геометрически, как видно из рис. 15.2, длины путей для пучков I и II равны.

Так как  $k = k_0 n$ , а  $k_0 = 2\pi / \lambda$ , то

$$\beta = \frac{2\pi}{\lambda} (n - 1) \Delta t. \quad (15.14)$$

Принимая во внимание соотношение (6.10), формулу для  $\beta$  можно записать также в виде

$$\beta = -\rho \lambda b \Delta t, \quad (15.15)$$

где  $\rho$  – число ядер в единице объема,  $b$  – когерентная длина рассеяния. Как видно из (15.14) и (15.15), сдвиг фаз является функцией  $\Delta t$  и, следовательно, учитывая (15.12), функцией  $\varepsilon$ . Поэтому интенсивность нейтронов для "О-пучка" в соответствии с (15.10) будет периодической функцией  $\Delta t$ :

$$I_1 = I \cos^2 \pi(n-1) \frac{\Delta t}{\lambda} = I \cos^2 \frac{\rho \lambda b \Delta t}{2}. \quad (15.16)$$

Для примера экспериментальные зависимости интенсивности от  $\Delta t$  в "О" и "Н-пучках" для алюминия приведены на рис. 15.3. Из рисунка видно, что максимумы интенсивности для "О-пучка" и минимумы для "Н-пучка" находятся при одних и тех же значениях  $\Delta t$ .

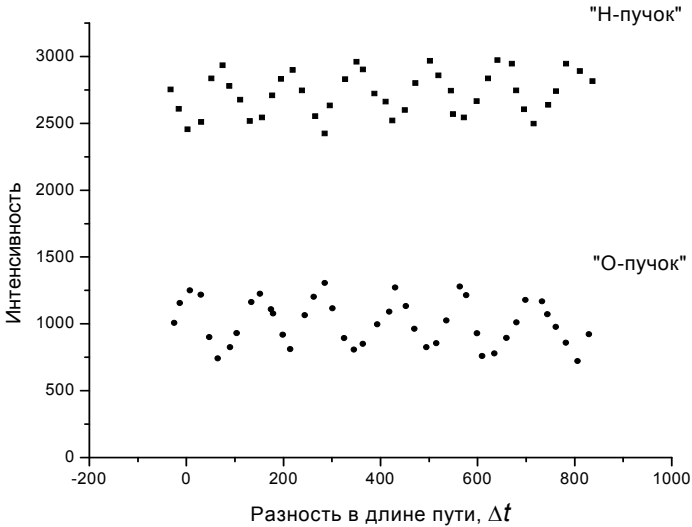


Рис. 15.3. Результаты измерения интенсивностей нейтронов в "О" и "Н-пучках" на пластине алюминия

Поскольку в экспериментальном спектре наблюдают большое количество пульсаций, то фурье-анализ его позволяет с высокой точностью найти коэффициент

$$A = \frac{\pi(1-n)}{\lambda} = \frac{\rho \lambda b}{2} \quad (15.17)$$

перед переменной в аргументе косинуса и, следовательно,  $b$  или  $n$ . Конечно, для этого, как видно из (15.17), длина волны падающих нейтронов должна быть известна с той же точностью, с какой желательна определение  $b$  или  $n$ .

## Список литературы

1. Гуревич И.И., Тарасов Л.А. Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965.
2. Абрагам А., Гольдман М. Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок. Т. 2. М.: Мир, 1984.
3. Гуревич И.И., Протасов В.П. Волновые свойства медленных нейтронов. М: МИФИ, 1986.
4. Ишханов Б.С., Капитонов И.М., Кэбин Э.И. Частицы и ядра. Эксперимент, М.: МГУ, 2005.  
<http://nuclphys.sinp.msu.ru/experiment/index.html>
5. Свєргун Д.И., Фейгин Л.А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. М.: Наука, 1986.
6. Турчин В. Ф. Медленные нейтроны. М.: Атомиздат, 1963.
7. Абов Ю.Г., Елютин Н.О. Пучки нейтронов и нейтронооптические явления. М: МИФИ, 1983.
8. Александров Ю.А., Шарапов Э.И., Чер Л. Дифракционные методы в нейтронной физике. М.: Энергоиздат, 1981.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2008.
10. Крамер-Агеев Е.А., Лавренчик В.Н., Самосадный В.Т., Протасов В.П. Экспериментальные методы нейтронных исследований. М.: Энергоатомиздат, 1990.
11. Федоров В.В. Нейтронная физика. СПб.: ПИЯФ, 2004.
12. Абов Ю.Г., Гулько А.Д., Крупчицкий П.А. Поляризованные медленные нейтроны. М.: Атомиздат, 1966.
13. Абов Ю.Г., Елютин Н.О. Свойства и взаимодействия медленных нейтронов, М.: МИФИ, 1985.
14. Абов Ю.Г., Елютин Н.О. Нейтроны и фундаментальные симметрии. М.: МИФИ, 1986.
15. Абов Ю.Г., Елютин Н.О. Когерентное рассеяние нейтронов. М.: МИФИ, 1988.
16. Александров Ю.А. Фундаментальные свойства нейтрона. М.: Энергоатомиздат, 1982.
17. Барышевский В.Г. Ядерная оптика поляризованных сред. М.: Энергоатомиздат, 1995.



18. Бекурц К., Виртц К. Нейтронная физика. М.: Атомиздат, 1968.
19. Бэкон Дж. Дифракция нейтронов, М.: ИЛ, 1957.
20. Власов Н.А. Нейтроны. М.: Наука, 1971.
21. Гуревич И.И., Протасов В.П. Нейтронная физика. М.: Энергоатомиздат, 1997.
22. Гуревич И.И., Протасов В.П. Ультрахолодные нейтроны. М.: МИФИ, 1987.
23. Игнатович В.К. Физика ультрахолодных нейтронов. М.: Наука, 1986.
24. Изюмов Ю.А., Найш В.Е., Озеров Р.П. Нейтронография магнетиков. Т.2. М.: Атомиздат. 1981.
25. Изюмов Ю.А., Черноплеков Н.А. Нейтронная спектроскопия. Т.3. Энергоатомиздат. 1983.
26. Крупчицкий П.А. Фундаментальные исследования с поляризованными медленными нейтронами. М.: Энергоатомиздат, 1985.
27. Нозик Ю.З., Озеров Р.П., Хенниг К. Структурная нейтронография. Т. 1. М.: Атомиздат, 1979.
28. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, Глав. ред. физ.-мат. лит., 1982.
29. Тейлор Дж. Теория рассеяния: Пер. с англ. М.: Мир, 1975.
30. Уиндзор К. Рассеяние нейтронов от импульсных источников. Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат, 1985.
31. Шапиро Ф.Л. Собрание трудов. Нейтронные исследования. М.: Наука, 1976.
32. Абов Ю.Г., Гулько А.Д., Джеббаров Ф.С. Бета-ЯМР спектроскопия. Современное состояние и перспективы. // Ядерная Физика. Т. 69. С. 1737. 2006.
33. Абов Ю.Г., Елютин Н.О., Тюлюсов А.Н. Динамическая дифракция нейтронов на совершенных кристаллах. // Ядерная физика. Т. 65. С. 1933. 2002.
34. Абов Ю.Г., Елютин Н.О., Львов Д.В., Смирнов Ю.И. Исследование направленно-кристаллизованной керамики нейтрон-дифракционными методами. // ЖТФ. Т. 73. С. 71. 2003.

## Оглавление

|  |     |
|--|-----|
| Введение.....  | 3   |
| Глава 1. Теория рассеяния нейтронов на ядрах.....                                      | 8   |
| § 1. Фазовая теория рассеяния и ее применение к рассеянию нейтронов на ядрах.....      | 8   |
| § 2. Борновское приближение. Квазипотенциал Ферми.....                                 | 23  |
| § 3. Эйкональное приближение. Нейтронооптический потенциал.....                        | 29  |
| § 4. Псевдомагнитное взаимодействие нейтронов с ядрами ...                             | 36  |
| § 5. Дифракция нейтронов. Изотопическая и спиновая некогерентность.....                | 43  |
| § 6. Преломление нейтронов на границе раздела сред.....                                | 51  |
| § 7. Малоугловое рассеяние нейтронов на неоднородностях вещества.....                  | 57  |
| Глава 2. Основные узлы нейтронных установок.....                                       | 67  |
| § 8. Источники нейтронов.....  | 67  |
| § 9. Нейтронные монохроматоры.....   | 89  |
| § 10. Нейтронные поляризаторы.....   | 99  |
| § 11. Детекторы нейтронов.....   | 112 |
| Глава 3. Экспериментальные методики нейтронных исследований конденсированных сред..... | 124 |
| § 12. Структурная нейтронография.....  | 124 |
| § 13. Нейтронная спектроскопия.....  | 141 |
| § 14. Малоугловое рассеяние нейтронов.....   | 151 |
| § 15. Нейтронная интерферометрия.....  | 174 |
| Список литературы.....   | 184 |

*Джепаров Фридрих Саламонович  
Львов Дмитрий Владимирович*

## **НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД**

Учебное пособие

Редактор Е.К. Коцарева  
Оригинал-макет изготовлен Д.В. Львовом

Подписано в печать 15.11.2012. Формат 60×84 1/16  
Печ. л. 11,75. Уч.-изд. л. 11,75. Тираж 100 экз.  
Изд. № 092-1. Заказ № 65.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».  
115409, г. Москва, Каширское ш., 31.

ООО «Полиграфический комплекс «Курчатовский».  
144000, Московская область, г. Электросталь, ул. Красная, д. 42.

**ДЛЯ ЗАМЕТОК**