

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ
ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 539.171.4

ИНСТРУМЕНТАЛЬНАЯ ЛИНИЯ ДВУХКРИСТАЛЬНОГО СПЕКТРОМЕТРА
В БРЭГГ–БРЭГГ-ГЕОМЕТРИИ С УЧЕТОМ ЗАВИСИМОСТИ
КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ ОТ ДЛИНЫ ВОЛНЫ НЕЙТРОНОВ© 2023 г. Й. Шмайсер^{1,2,*}, А. Н. Тюлюсов^{1,2}¹Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия²Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия

*E-mail: yokhan.schmeissner@itep.ru

Поступила в редакцию 16.12.2022 г.

После доработки 16.03.2023 г.

Принята к публикации 03.04.2023 г.

Получено аналитическое выражение для инструментальной линии двухкристального спектрометра, не требующее ограничения на характер зависимости сечения поглощения от длины волны. Рассчитана модельная инструментальная линия (кривая качания) для спектрометрической схемы Брэгг–Брэгг на примере кристалла InSb в области слабой зависимости сечения поглощения от длины волны и в области длин волн, близких к резонансу поглощения.

DOI: 10.31857/S0023476123600180, EDN: JOUCLS

ВВЕДЕНИЕ

При проведении нейтронно-оптических экспериментов в схеме двухкристального спектрометра (рис. 1) важную роль в определении параметров спектрометрической схемы играет построение инструментальной линии (т.е. кривой качания спектрометра без образца), которая содержит информацию о конструктивных особенностях дифрактометра, связанных с начальной и конечной расходимостью нейтронного пучка и его спектральной ширины. Известно аналитическое выражение для инструментальной линии при отражении как рентгеновских, так и нейтронных волн от пары совершенных кристаллов, описанное в монографии Комптона–Алиссона [1] и впоследствии приводимое в [2, 3] для рентгеновского случая, а в [4] — для нейтронной дифракции. Это выражение используется для обработки результатов экспериментов вплоть до настоящего времени [5–7]. Его основанием является приближение, связанное с симметричной линейной зависимостью отражательной способности кристалла от энергии и угловой расходимости падающих нейтронов. Этот подход основан на том, что длина волны и брэгговский угол связаны соотношением Вульфа–Брэгга [8]. Угловая зависимость кривой дифракционного отражения содержит отклонение от угла Брэгга, таким образом, изменение длины волны эквивалентно повороту кристалла.

Однако от длины волн зависит и сечение поглощения нейтронов ядрами кристалла. В случае потенциального характера сечения поглощения эта зависимость незначительна. Кроме того, у наиболее часто используемых для спектрометрических пар кристаллов поглощение слабое (обратная длина поглощения кристалла Ge: $\mu_{\text{Ge}} = 0.06 \text{ см}^{-1}$). Поэтому зависимость сечения поглощения от длины волны не учитывают при моделировании инструментальной линии. Но ситуация разительно меняется при приближении энергии нейтронов к резонансному уровню ядра. Так, для ядра In изменение длины волны от 1 до 2 Å приводит к изменению сечения поглощения примерно в 2 раза, а от 0.25 до 0.3 Å — в 90 раз. Для сравнения с Ge обратная длина поглощения для InSb будет: $\mu_{\text{InSb}} = 1.95 \text{ см}^{-1}$. Отсюда следует, что в

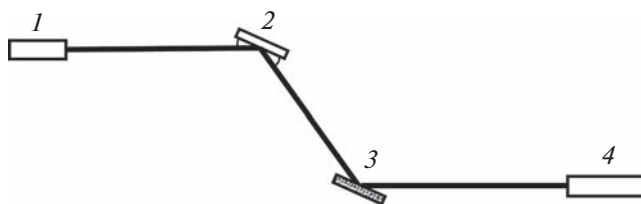


Рис. 1. Принципиальная схема двухкристального спектрометра геометрии Брэгг–Брэгг с коллиматором (1) и детектором (4), где первый кристалл выступает в качестве монохроматора (2), а второй кристалл — в качестве анализатора (3).

таких условиях ранее применяемый подход становится непригодным.

В частности, такая ситуация возникает при изучении одного из интереснейших интерференционных явлений при рассеянии нейтронов на совершенных поглощающих кристаллах — эффекта “аномального пропускания” — аналога эффекта Борманна в рентгеновской кристаллооптике [9]. Он представляет собой заметное уменьшение поглощения в совершенном кристалле при углах падения, близких к брэгговскому положению.

Впервые эффект аномального пропускания при дифракции тепловых нейтронов был исследован Ноулсом на кристалле кальцита CaCO_3 [10], Соменковым — на CdS [11], исследовавшим область резонансного поглощения, и Зиппелем — на InSb [12]. Теоретическая формулировка эффекта аномального пропускания в случае дифракции нейтронов в геометрии Лауэ была проведена Каганом и Афанасьевым [13]. Также эффект аномального пропускания нашел интересное применение в исследовании по проверке эквивалентности гравитационной и инертной масс нейтрона при дифракции нейтронов по геометрии Лауэ на совершенном монокристалле кремния большой толщины [14].

Сложный характер взаимодействия нейтрона с ядром вблизи резонанса поглощения вызывает вопрос об экспериментальной проверке эффектов динамической дифракции в этих условиях. Для этого необходимо изучение угловых зависимостей отражения и пропускания нейтронов с длинами волн, перекрывающими диапазоны преимущественно потенциального и преимущественно резонансного рассеяния. В рамках этого изучения требуется развитие аналитического выражения инструментальной линии спектрометра, которое бы учитывало зависимость сечения поглощения нейтронов от длины волны.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Для расчета дифракции нейтронных волн в совершенном кристалле было применено решение системы волновых уравнений из теории динамической дифракции в двухволновом приближении, с которым подробнее можно ознакомиться в [4].

В экспериментах непосредственно измеряемыми величинами являются интенсивности нейтронных волн, пришедших на детектор, которые можно описать с помощью коэффициентов динамического отражения R и пропускания T (интенсивность начальной волны принята за единицу):

$$R = |\Psi_B(z=0)|^2, \quad T = |\Psi_0(z=l)|^2, \quad (1)$$

где $\Psi_B(z=0)$ и $\Psi_0(z=l)$ — волновые функции отраженной и прошедшей волн из решения системы в геометрии Брэгга.

Потенциал взаимодействия нейтронов с кристаллом запишем в виде псевдопотенциала Ферми, фурье-компоненты которого:

$$V_B = \frac{2\pi\hbar^2}{V_0 m} \sum_j b_j \exp(-i(\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}_j)). \quad (2)$$

Суммирование ведется по положениям ядер $\mathbf{r}_j$ в элементарной ячейке кристалла объема V_0 , $\mathbf{B}$ — вектор обратной решетки, $E = (\hbar/2m)k^2$ — энергия нейтронов с волновым вектором $\mathbf{k}$, b_j — эффективная длина рассеяния, которая связана с длиной упругого рассеяния b^{el} и сечением поглощения σ как:

$$b_j = b_j^{el} - i\sigma_j \frac{\sqrt{2mE}}{4\pi\hbar}. \quad (3)$$

Данная запись потенциала взаимодействия имеет смысл при дифракции неполяризованных нейтронов на идеальном кристалле без учета тепловых колебаний решетки.

Согласно [1] полная интенсивность отраженного от второго кристалла пучка без учета вертикальной угловой расходимости будет равна:

$$I = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \int_{-\alpha}^{\alpha} G(\alpha) J(\lambda - \lambda_0) \times \\ \times R_A \left[\alpha - (\lambda - \lambda_0) \frac{\partial}{\partial \lambda} \theta(\lambda_0, n_A) \right] \times \\ \times R_B \left[\pm \beta \mp \alpha - (\lambda - \lambda_0) \frac{\partial}{\partial \lambda} \theta(\lambda_0, n_B) \right] d\alpha d\lambda, \quad (4)$$

где функция G зависит от геометрии спектрометра, а J дает распределение энергии в спектре падающего пучка. Функции R_A и R_B описывают зависимость от угла падения интенсивности отражения от первого и второго кристалла, α — горизонтальная угловая расходимость начального пучка, β — угол отклонения второго кристалла от угла отражения центрального луча, (n_A, n_B) — порядки отражения кристаллов.

Рассмотрим схему $(n, -n)$ из параллельно расположенных одинаковых совершенных кристаллов с равными индексами отражения: $n_A = n_B$.

При стандартном описании дифракции пучков от двух кристаллов принимают, что эффективная область длин волн, которую отражает второй кристалл при некотором угле β , не зависит от β и захватывает относительно большой интервал λ :

$$\lambda = \lambda_0 \pm \frac{\partial \lambda_0}{\partial \theta} \alpha_{\max}. \quad (5)$$

Также при интегрировании (4) полагают, что величины λ и β остаются постоянными. Поэтому

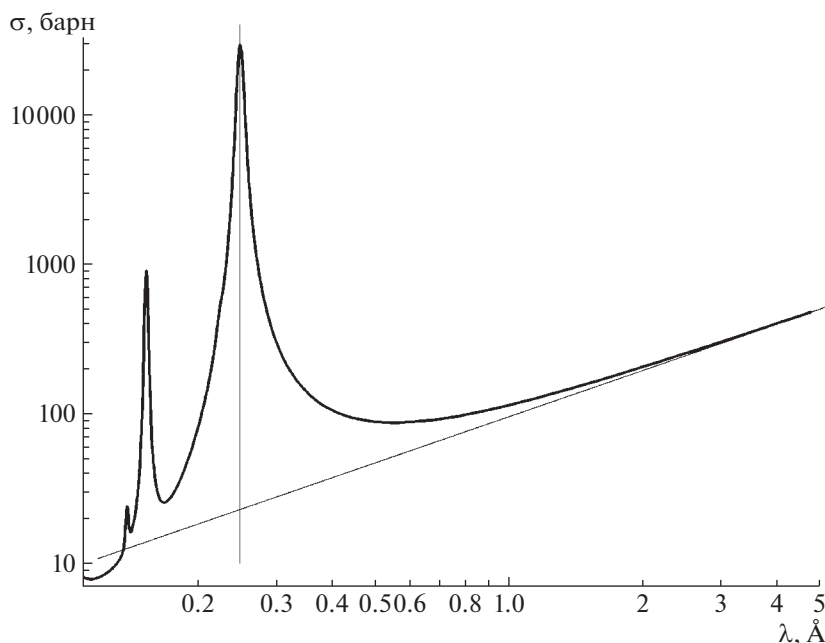


Рис. 2. Зависимость сечения поглощения от длины волны нейтронов для ядер ^{115}In [15]. Характерны три пика резонансного поглощения.

подынтегральная функция зависит только от α , и удовлетворяющие этим условиям значения α лежат в области, ограниченной из условия (5). Затем расширяя пределы интегрирования до $\pm\infty$ и проведя замену переменных интегрирования, получают конечное выражение полной интенсивности отражения:

$$I(\beta) = K \int_{-\infty}^{+\infty} R(\alpha) R(\beta - \alpha) d\alpha, \quad (6)$$

где K пропорционален интенсивности падающего на первый кристалл пучка и экспериментально определяется снятием инструментальной линии от известного образца. Заметим здесь, что форма кривой отражения не зависит от величины горизонтальной расходимости пучка и от вида функции распределения энергии начального пучка по спектру.

Однако в приближении по Комптону–Аллисону не рассматривается случай сильной зависимости сечения поглощения от длины волны падающего излучения. Для учета этого представим выражение инструментальной линии в следующем виде:

$$I(\beta) = K^* \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \int_{-\infty}^{+\infty} R(\alpha, \lambda(\theta_B), \mu(\lambda)) \times R(\beta - \alpha, \lambda(\theta_B), \mu(\lambda)) d\alpha d\lambda. \quad (7)$$

Функции R описывают теперь не только зависимость интенсивности отражения от угла падения, но и от обратной длины поглощения $\mu(\lambda)$ и длины волны нейтронов. K^* будет определяться новой нормировочной постоянной. Функции кривых отражения кристаллов задаются через выражения волновых функций из теории динамической дифракции. Как видно из (7), отражательная способность кристаллов зависит не только от углов скольжения, но и от поглощательной способности кристаллов и энергии падающих на них нейтронов.

РАСЧЕТ ИНСТРУМЕНТАЛЬНОЙ ЛИНИИ ДВУХКРИСТАЛЬНОГО СПЕКТРОМЕТРА

Выявление диапазонов длин волн, в которых расширенная формула (7) будет давать явные различия со стандартным выражением из [1], проводилось путем численного расчета инструментальной линии для двухкристалльной схемы, где в качестве совершенного кристалла был взят InSb, ядра индия в составе которого являются сильно поглощающими для нейтронов с пиками резонансного поглощения в области, близкой к энергии тепловых нейтронов (1.46, 3.8, 8.5 эВ). Зависимость сечения поглощения InSb от длины волны нейтронов показана на рис. 2 [15], в котором заметны три резонансных пика и линейная часть, связанная с потенциальным характером поглощения для широко используемой в опытах длины волны тепловых нейтронов ($\lambda = 1.7 \text{ \AA}$).

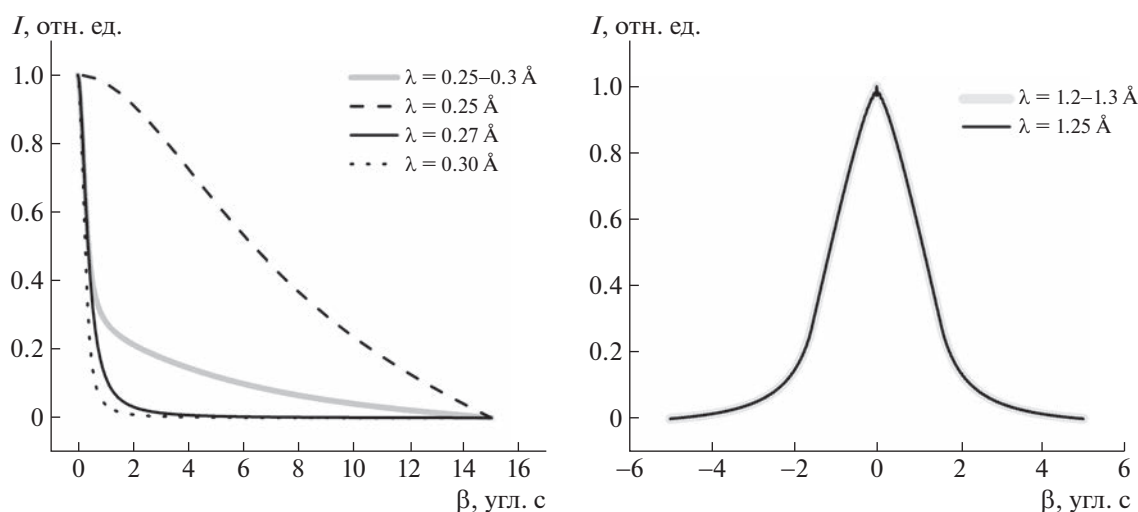


Рис. 3. Расчетные инструментальные линии при двойном отражении ($R-R$) для двухкристального спектрометра из (111) InSb. Конечная интенсивность нормирована на единицу.

При расчете инструментальной линии вблизи резонанса поглощения требовалось выбрать диапазоны немонохроматичности для падающей волны нейтронов, где критериями выступают присутствие нелинейного характера зависимости сечения поглощения от энергии нейтронов и максимально возможное сохранение интенсивности волны после отражения с учетом поглощения кристаллом. Поэтому для дифракции вблизи резонанса поглощения были взяты диапазоны длин волн $\lambda = 0.25-0.4$ Å, а для дифракции вдали от резонанса — диапазон $\lambda = 1.2-1.3$ Å, при котором зависимость сечения поглощения от длины волны выражена слабо и носит линейный характер. Также для последнего диапазона форма кривой отражения (111) InSb почти полностью совпадает с отражением (111) при дифракции на слабопоглощающем совершенном кристалле Ge из-за схожести его кристаллической структуры со структурой InSb [15].

Изучаемой двухкристальной схемой являлась система из двух тонких кристаллов ($l = 0.1$ см) (111) InSb, расположенных в геометрии Брэгг—Брэгг с угловой отстройкой первого кристалла в диапазоне $\alpha = \pm 30$ угл. с и угловым отклонением второго кристалла в меньших диапазонах $\beta = \pm 5$, ± 15 угл. с для дифракции при двойном отражении ($R-R$) и $\alpha = \pm 200$ угл. с, $\beta = \pm 100$ угл. с — для дифракции при отражении от первого и пропускания от второго кристалла соответственно ($R-T$). Численное интегрирование по угловым координатам проводилось с равным шагом при 501 узловой точке в каждом направлении. Для сравнения предлагаемого в работе выражения с описанным в [1] был также проведен расчет инструменталь-

ных линий по формуле (6) для фиксированных длин волн крайних и среднего значений диапазонов. Нормировку интенсивностей проводили по максимальному значению для ($R-R$), а в случае ($R-T$) — по совмещению интенсивностей в области большого углового отклонения с учетом суммарного поглощения кристалла: $I = I_0 \exp(-\mu l)$.

Полученные расчетные инструментальные линии при двойном отражении ($R-R$) в областях близкой к резонансному поглощению и вдали от него представлены на рис. 3. По ним наблюдаются изменение формы кривой качания при приближении к резонансному поглощению и различие кривых с расчетом по выбранному диапазону немонохроматичности по (7) и для средней длины волны диапазона по исходной формуле Комптона—Аллисона (6). В области длин волн при преимущественно потенциальном поглощении заметного различия в форме расчетных кривых нет.

Был проведен расчет для данной кристаллической схемы инструментальных линий после отражения и пропускания от двух кристаллов ($R-T$) (рис. 4). Если в диапазоне длин волн, соответствующем потенциальному поглощению, инструментальная линия по расширенной формуле совпадает с расчетом при строго мономонхроматическом случае, то для области резонансного поглощения заметно различие в форме инструментальных кривых. Таким образом, в указанном диапазоне длин волн нейтронов использование модели инструментальной линии по (6) менее подходит для обработки экспериментальных данных по сравнению с предлагаемой в данной работе.

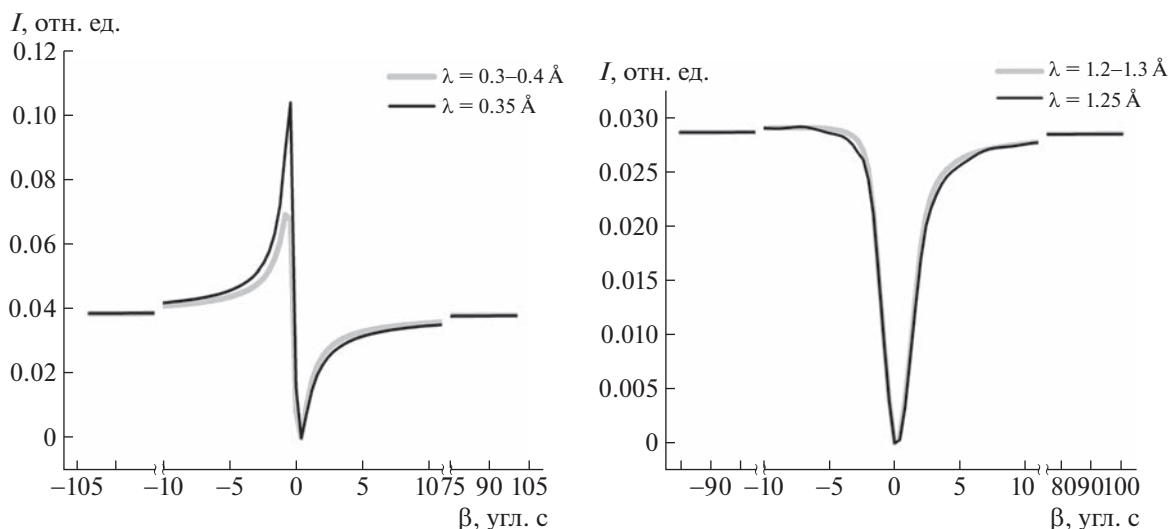


Рис. 4. Расчетные инструментальные линии после отражения и пропускания ($R-T$) для двухкристального спектрометра из (111) InSb.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В исследовании взаимодействия нейтронов с ядрами кристаллов в дифракционных экспериментах и при изучении эффекта аномального пропускания большое значение имеет область резонансного поглощения нейтронов [16].

Резкая зависимость сечения поглощения от длины волны в области преимущественно резонансного рассеяния потребовала построения новой методики расчета инструментальной линии двухкристального спектрометра. В работе приведен метод расчета, основанный на решении уравнений теории динамической дифракции, который позволяет учесть такую зависимость. Рассчитаны модельные инструментальные линии для спектрометрической схемы в геометрии Брэгг–Брэгг на примере сильнопоглощающего кристалла InSb в области длин волн, перекрывающих диапазоны потенциального и резонансного поглощения. Показано, что в области преимущественно потенциального рассеяния результаты расчетов совпадают с получаемыми с помощью используемой ранее методики. А в области, где влияние резонансного рассеяния становится определяющим, разница интенсивности достигает 50% в центральной, т.е. наиболее интересной части кривой качания.

Развитая методика моделирования инструментальной линии будет полезна при планировании экспериментов на двухкристальных спектрометрах, когда материал кристаллов спектрографической схемы будет содержать ядра с резонансным уровнем вблизи используемой энергии нейтронов. В частности, при исследовании эффекта аномального пропускания нейтронов.

Работа выполнена в рамках исполнения государственного заказа и при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Соглашение № 075-15-2021-1352).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Compton A., Allison S. X-rays in theory and experiment. New York: D. Van Nostrand Company. Inc. 1935. <https://doi.org/10.1148/25.5.640>
2. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982.
3. Authier A. Dynamical theory of X-ray diffraction. IUCr. Oxford Science. Oxford. U.K. 2001. <https://doi.org/10.1107/97809553602060000569>
4. Абов Ю.Г., Елютин Н.О., Тюлюсов А.Н. // Ядерная физика. 2002. Вып. 65. С. 1989. <https://doi.org/10.1134/1.1522085>
5. Willis B.T.M. // Acta Cryst. B. 1960. V. 13. P. 763. <https://doi.org/10.1107/S0365110X60001849>
6. Szabo C.I., Cline J.P., Henins A. et al. // J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. 2021. V. 126. P. 126049. <https://doi.org/10.6028/jres.126.049>
7. Dolzhenkova E., Babenko G., Voronov A. et al. // Acta Phys. Pol. A. 2022. V. 141. <https://doi.org/10.12693/aphyspola.141.41>
8. Bragg W.H., Bragg W.L. // P. R. Soc. Lond. A. 1913. V. 88. P. 428. <https://doi.org/10.1098/rspa.1913.0040>
9. Borrmann G. // Physik Z. 1941. B. 42. S. 157.
10. Knowles J.W. // Acta Cryst. 1956. V. 9. P. 61. <https://doi.org/10.1107/S0365110X56000115>
11. Шильштейн С.Ш., Соменков В.А. // Кристаллография. 1975. Т. 20. Вып. 5. С. 1096.
12. Zippel D., Kleinstuck K., Schulze G.E.R. // Phys. Lett. 1964. V. 8. P. 241.
13. Каган Ю.М., Афанасьев А.М. // ЖЭТФ. 1966. Т. 49. Вып. 5. С. 1504.
14. Везлев Е.О., Воронин В.В., Кузнецов И.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 96. Вып. 1. С. 3. <https://doi.org/10.1134/S0021364012130127>
15. Абов Ю.Г., Елютин Н.О., Львов Д.В., Тюлюсов А.Н. // Ядерная физика. 2019. Т. 82. Вып. 4. <https://doi.org/10.1134/S0044002719040032>
16. Абов Ю.Г. // Успехи физ. наук. 1996. Вып. 166. С. 949. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0166.199609d.0949>