

УДК 539.27

РАССЕЯНИЕ ОЧЕНЬ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ НА КРУПНОМАСШТАБНОЙ НАДМОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЕ

А. И. Исаков, С. П. Кузнецов, И. В. Мешков, А. Д. Перекрестенко, А. В. Шелагин,
Д. А. Шелагин

На основе геометрического приближения рассмотрены теоретические основы нового метода изучения крупномасштабной надмолекулярной структуры с помощью рассеяния очень холодных нейтронов.

Как показано ранее [1, 2], аппроксимация экспериментально определенных зависимостей от скорости макроскопических сечений рассеяния очень холодных нейтронов (ОХН) $\Sigma_{es}(v)$ теоретическими дает возможность определять характерные размеры надмолекулярной структуры (НМС). Используемые в практике приближенные методы вычисления сечений взаимодействия – борновское, эйкональное, геометрическое приближения обычно характеризуются параметром $\nu = |U|a/\hbar v$, определяющим область их применения. Здесь U – потенциал рассеивателя, a – радиус рассеивателя, v – скорость падающего на рассеиватель нейтрона, \hbar – постоянная Планка. Область применимости борновского приближения – $\nu \ll 1$, эйконального – $\nu \approx 1$. Частицы, для которых $\nu \gg 1$, обычно считаются большими, и для $\nu \approx 10$ хорошим приближением является геометрическое.

В данной работе впервые рассмотрено рассеяние ОХН на сферических рассеивателях большого размера. Рассматриваемая задача в общем случае является задачей о рассеянии скалярной плоской волны прозрачной сферой радиуса a при условии $ka \gg 1$, $(ka)^{1/3} \gg 1$. Здесь k – волновой вектор волны в среде, окружающей сферу.

Если справедливо геометрическое приближение, то после взаимодействия с рассеивателем имеем отраженные, преломленные и дифрагированные лучи. Дифрагированные лучи находятся в области углов $\theta \sim (ka)^{-1} \ll 1$ и в физическом эксперименте неотделимы от падающего пучка; задача заключается в нахождении распределения по углу

преломленных и отраженных лучей. В точке падения поток плотности вероятности через площадку ds равен

$$\delta J = N_t k_0 \cos \theta_i a^2 \sin \theta_i d\theta_i d\phi |\psi_i|^2 = T(\theta_i, n) |\psi_i|^2 k_i \cos \theta_i a^2 \sin \theta_i d\theta_i d\phi.$$

Здесь θ_i , θ_t – соответственно, углы падения и преломления, $n = N_t/N_i$ – относительный показатель преломления рассеивателя; N_t , N_i – показатели преломления сферы и окружающей среду относительно вакуума; k_0 – волновое число ОХН в вакууме, k_i – в среде, ϕ – азимутальный угол точки падения, $t(n, \theta_i) = 2\cos \theta_i / [\cos \theta_i + n \cos \theta_t]$; $T = |t(\theta_i, n)|^2 n \cos \theta_t / \cos \theta_i$ – соответственно, коэффициент прохождения волны и коэффициент прохождения по интенсивности. Поток отраженной волны в точке падения $\Delta J = k_i |r|^2 \cos \theta_i |\psi_i|^2 a^2 \sin \theta_i d\theta_i d\phi$, $k_i R \cos \theta_i |\psi_i|^2 a^2 \sin \theta_i d\theta_i d\phi$, где $r(\theta_i, n) = [\cos \theta_i - n \cos \theta_t] / [\cos \theta_i + n \cos \theta_t]$, $R = |r|^2$ – соответственно, коэффициент отражения падающей волны по амплитуде и интенсивности. Здесь мы пренебрегаем поглощением в среде и рассеивателе, то есть пренебрегаем мнимой частью показателя преломления.

Сечение рассеяния большого шара σ_{es} , с учетом конечного размера детектора θ_d , можно представить в виде

$$\sigma_{es} = 2\pi a^2 \left(\int_0^{\pi/2 - \theta_d/2} R \sin \theta_i \cos \theta_i d\theta_i + \sum_j^{\infty} J_j \right) = 2\pi a^2 J, \quad (1)$$

$$J_j = \int T^2 R^{j-1} \sin \theta_i \cos \theta_i d\theta_i. \quad (2)$$

Пределы интегрирования в (2) следует выбирать таким образом, чтобы выходящие лучи не попадали в детектор – угол выхода луча из рассеивателя должен быть больше половины угла, под которым "виден" детектор. Например, для $j = 1, 2$

$$J_1 = \int_{\theta_0}^{\arcsin n_{12}} T^2 \sin \theta_i \cos \theta_i d\theta_i, \quad (3)$$

нижний предел интегрирования в (3) определяется из уравнения $\arcsin(\sin \theta_0 / n_{12}) - \theta_0 = \theta_d/2$;

$$J_2 = \int_0^{\arcsin n_{12}} T^2 R \sin \theta_i \cos \theta_i d\theta_i. \quad (4)$$

Здесь верхний предел интегрирования определяется углом полного отражения.

Из расчетов по формулам (1) – (4) для конкретного случая (алюминиевые сферы в полиэтиленовой матрице) следует, что в диапазоне скоростей ОХН $10 \leq v \leq 33$ м/с основной вклад в ослабление пучка вносит отражение от сферы. При скорости $v = 33$ м/с нет лучей, испытавших полное "внешнее" отражение и проходящих вне детектора. Вклад в ослабление лучей, проходящих через сферу, невелик ($\leq 4\%$). Это происходит вследствие того, что, например, в J_1 (3) значительная часть лучей, проходящих через сферу, тем не менее, попадает в детектор и неотличима от первичного пучка.

Для корректности расчета следует учесть ослабление первичного пучка из-за отражения при прохождении границы матрицы, а также преломления рассеянного луча при выходе из матрицы. Это приводит к замене θ_d на $\arcsin[(\sin\theta_d)/(1 - U_0/E)^{1/2}]$, где U_0 – ядерный потенциал матрицы, E – энергия нейтрона в вакууме.

В связи с исследованиями структуры наполненных полимеров с помощью ОХН важной задачей является рассмотрение рассеяния ОХН на каплях с переходными слоями (оболочками) от капли к матрице. В качестве модельного объекта для расчетов использовалась алюминиевая сфера радиуса a_1 (с потенциалом U_1), на поверхности которой находится некий переходный слой с внешним радиусом a_2 , предположительно из окиси алюминия Al_2O_3 . Толщина слоя $l = a_2 - a_1$, потенциал – U_2 . В этом случае сечение упругого некогерентного рассеяния в геометрическом приближении можно представить в виде

$$\sigma_{es} = a_2^2(J_1 + J_2 + J_3 + J_4) = a_2^2 J, \quad (5)$$

где

$$J_1 = 2\pi \int_0^{\pi/2 - \theta_d} R_{20} \sin\theta_i \cos\theta_i d\theta_i, \quad (6)$$

$$J_2 = 2\pi \int_0^{\theta_1} (1 - R_{20})^2 R_{12} \sin\theta_i \cos\theta_i d\theta_i, \quad (7)$$

$$J_3 = 2\pi \int_{\arcsin(a_1/a_2) - \theta_d/2}^{\theta_1} (1 - R_{20}^2) \sin\theta_i \cos\theta_i d\theta_i, \quad (8)$$

$$J_4 = 2\pi \int_{\theta_{i0}}^{\theta_1} (1 - R_{20})^2 (1 - R_{12})^2 \sin\theta_i \cos\theta_i d\theta_i, \quad (9)$$

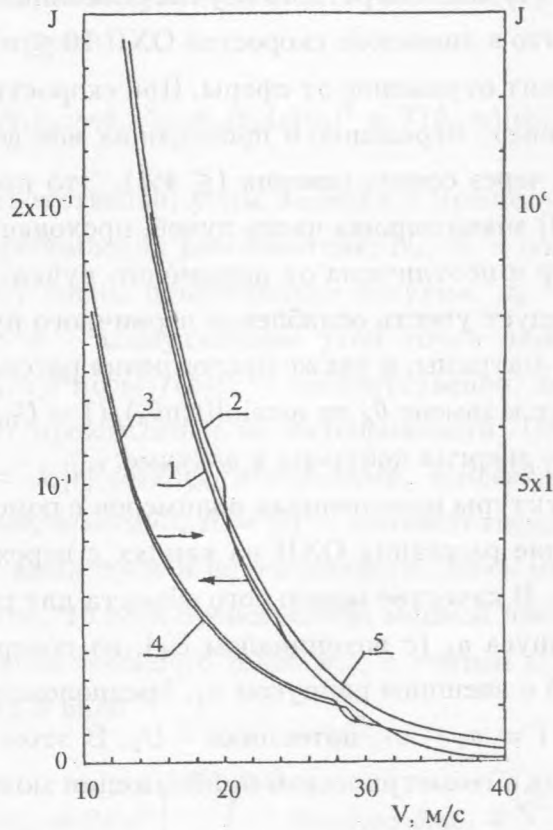


Рис. 1. Расчетные значения интегралов (1) и (5) в зависимости от скорости нейтронов. Интеграл (5): 1 - $U_2 = 0,75 \cdot 10^{-7}$ эВ, $l = 5$ нм; 2 - $U_2 = 0,75 \cdot 10^{-7}$ эВ, $l = 20$ нм; 3 - $U_2 = 1,38 \cdot 10^{-7}$ эВ, $l = 10$ нм; 4 - $U_2 = 1,38 \cdot 10^{-7}$ эВ, $l = 15$ нм. Интеграл (1): 5 - $U_1 = 0,55 \cdot 10^{-7}$ эВ, $l = 5$ нм.

здесь $\theta_1 = \arcsin(n_{20}a_1/a_2) \geq \arcsin(a_1/a_2) - \theta_d/2$ в (7), $\theta_1 = \arcsin n_{20} \leq \pi/2 - \theta_d/2$ в (8) и (9), θ_{i0} в (9) определяется из уравнения $\theta_{i0} + \arcsin(a_2 \sin \theta_{i0}/a_1 n_{20}) - \arcsin(\sin \theta_{i0}/n_{20}) + \arcsin(a_2 \sin \theta_{i0}/a_1 n_{12}) = \pi/2 - \theta_d/2$, $R_{20} = [(1 - \sin^2 \theta_i)^{1/2} - (n_{10}^2 - \sin^2 \theta_i)^{1/2}]^2 / [(1 - \sin^2 \theta_i)^{1/2} + (n_{10}^2 - \sin^2 \theta_i)^{1/2}]^2$, $n_{20} = [(E - U_0)/(E - U_2)]^{1/2}$,

$$R_{12} = \frac{[(n_{20}^2 - a_2^2 \sin^2 \theta_i / a_1^2)^{1/2} - (n_{12}^2 - a_2^2 \sin^2 \theta_i / a_1^2)]^2}{[(n_{20}^2 - a_2^2 \sin^2 \theta_i / a_1^2)^{1/2} + (n_{12}^2 - a_2^2 \sin^2 \theta_i / a_1^2)]^2}$$

$$n_{12} = [(E - U_2)/(E - U_1)]^{1/2}, \theta_i \leq \arcsin(n_{20}a_1/a_2).$$

Интеграл J_1 (6) описывает ослабление волны при отражении от поверхности оболочки;

интеграл J_2 (7) дает вклад от лучей, прошедших в оболочку, испытавших одно отражение от внутренней поверхности, и вышедших из оболочки в матрицу; интеграл J_3 (8) учитывает вклад от лучей, проходящих только через оболочку и не попадающих в детектор. Наконец, J_4 (9) описывает вклад от лучей, прошедших всю сферу с оболочкой.

На рисунке 1 представлены рассчитанные значения интегралов (1) и (5) в зависимости от скорости ОХН для двух моделей рассеивателей: алюминиевый шар и шар с оболочкой. Из сравнения этих моделей видно, что рассеяние на шаре описывается гладкой кривой, в то время как кривые рассеяния, описывающие вторую модель, имеют характерные особенности, связанные с рассеянием нейтронов на оболочке. Важно то обстоятельство, что форма кривой $J(v)$ и величина сечения рассеяния ОХН зависят как от толщины оболочки, так и от рассеивающего нейтроны потенциала оболочки [3] $U_2 = (2\pi\hbar^2/m) \sum_k N_k b_k$, где m – масса нейтрона, N_k – число ядер сорта k в 1 см^3 , b_k – амплитуда когерентного рассеивания на ядре сорта k .

В заключение следует отметить, что созданная оригинальная методика исследования сложных композиционных систем с характерными размерами наполнителя $\approx 1 \text{ мкм}$ позволяет определять эффективный размер зерна наполнителя, толщину и плотность переходного слоя от зерна к матрице.

Авторы считают своим приятным долгом выразить глубокую благодарность Л. А. Новокшеновой за стимулирующие обсуждения результатов.

Данная работа выполнена по программе "Исследование структуры наполненных полиолефинов с помощью очень холодных нейтронов", финансируемой Российским фондом фундаментальных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Гринев В. Г., Кузнецов С. П., Мешков И. В. и др. ВМС, **35А**, N 2, 179 (1993).
- [2] Кузнецов С. П., Мешков И. В., Перекрестенко А. В., Шелагин А. В. ВМС, **35А**, N 2, 195 (1993).
- [3] Гуревич И. И., Тарасов Л. В. Физика нейтронов низких энергий, Наука, Москва, 1965.

Поступила в редакцию 6 декабря 1995 г.