Краткие сообщения по физике № 9-1990 г.

УДК 539.27

ДИФРАКЦИЯ ОЧЕНЬ ХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ НА ПЕРИОДИЧЕСКИХ И КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

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

В кинематическом приближении рассмотрена дифракция очень холодных нейтронов (энергия $< 10^{-4}$ эВ, длина волны > 1 нм) на периодических и квазипериодических надмолекулярных структурах.

В настоящей работе рассматривается рассеяние очень холодных нейтронов (ОХН) (энергия $E < 10^{-4}$, длина волны $\lambda > 1$ нм) веществами, обладающими упорядоченной надмолекулярной структурой (НМС). Таковыми являются жидкие кристаллы, полимеры, биополимеры и др. Соответствие λ ОХН характерным размерам периодических и квазипериодических НМС указывает на то, что упругое рассеяние ОХН является преимущественно когерентным. Рассеяние нейтронной волны происходит на изменениях ядерного потенциала $U(\mathbf{r}) \sim n_j b_j$ (n_j – плотность ядер сорта j с амплитудой когерентного рассеяния b_j) относительно усредненного ядерного потенциала вещества $\langle U(\mathbf{r}) \rangle$. Геометрические размеры таких изменений (рассеивателей) имеют значение порядка λ ОХН, а их формы могут быть самые различные (сферы, диски, цилиндры, слои и др.).

Амплитуда волны ОХН $F(\mathbf{q})$ ($\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}'$, $\mathbf{k}_0$ – волновой вектор падающей волны, $\mathbf{k}'$ – волновой вектор рассеянной волны), рассеянной системой N одинаковых и ориентированных в пространстве рассеивателей, определяется рассеивающим фактором одного рассеивателя $f(\mathbf{q}) \sim U(\mathbf{r}) - \langle U(\mathbf{r}) \rangle$ и фурье-образом $B(\mathbf{q})$ функции распределения центров рассеивателей в пространстве $A(\mathbf{r}_j)$ /1/:

$$F(\mathbf{q}) = f(\mathbf{q})\, B(\mathbf{q}) = f(\mathbf{q}) \sum_{j=1}^{N} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j).$$

Если $A(\mathbf{r}_j)$ строго периодична, то в зависимости от формы единичного рассеивателя и свойств функции $A(\mathbf{r}_j)$ систему можно рассматривать как одно-, двух-, трехмерный сверхкристалл, в узлах сверхрешетки которого находятся точечные рассеиватели с амплитудой рассеяния $f(\mathbf{q})$. Тогда для идеальной сверхрешетки (аналог монокристалла) имеем /1/:

$$F(\mathbf{q}) = N_0 \sum_j f(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) = N_0 F_{hkl},$$

где N_0 – число элементарных ячеек сверхрешетки; F_{hkl} – структурный фактор ячейки; h, k, l – миллеровские индексы отражающей плоскости. Интенсивность I_{hkl} когерентно рассеянных нейтронов под углом θ_B (в геометрии Брэгга) в кинематическом приближении без учета экстинкции можно представить в виде /2, 3/:

$$I_{hkl} = \lambda^4\, |F_{hkl}|^2\, \varphi(\lambda)\, \delta V / 2\Omega_0^2 \sin^2 \theta_B. \tag{1}$$

Здесь $\varphi(\lambda)$ – спектральная плотность потока нейтронов; Ω_0 – объем ячейки; δV – объем кристалла, участвующего в отражении. Для поликристалла выражение (1) принимает вид /1, 3/:

$$I_{hkl} = \frac{\lambda^4\, |F_{hkl}|^2\, \varphi(\lambda)\, \delta V}{4\Omega_0^2 \sin^2 \theta_B}\, p \cos \theta_B\, \Delta\theta,$$

где $\Delta\theta$ – угловое уширение отраженного пучка из-за разориентации блоков; p – фактор повторяемости.

Для интерпретации экспериментальных результатов при использовании времяпролетной методики при постоянных углах отражения ОХН удобно ввести интегральный коэффициент отражения /1, 3/:

$$R_\lambda = (I_{hkl})_{max}\,\Delta\lambda/\varphi(\lambda)\,S = \lambda_0^4\,|F_{hkl}|^2/4\Omega_0^2\,\Sigma_a.$$

Здесь $\Delta\lambda$ – ширина дифракционного пика на полувысоте; λ_0 – положение его максимума; S – площадь пучка ОХН; Σ_a – полное макроскопическое сечение выведения ОХН из пучка.

Таким образом, наблюдая в геометрии Брэгга дифракционные пики от НМС, можно по положению пиков определять межплоскостные расстояния d_{hkl} и тип сверхрешетки, а из величин R_λ получить значения F_{hkl}. Значение структурного фактора позволяет определить параметры единичного рассеивателя. Например, в часто встречающемся случае гексагональной упаковки рассеивателей – длинных цилиндров радиуса r_0 ($r_0 \ll l_0$ – длины цилиндров) с межплоскостными расстояниями d_{hk0} для коэффициента отражения имеем /1/:

$$R_\lambda = 3u^4\Lambda^2\tau^2\lambda^4/256\pi^2\Sigma_a\sin^2\theta_B,$$

где $u^4\Lambda^2(u) = u^4\,[2J_1(u)/u]^2$; $u = 2\pi r_0/d_{hk0}$; J_1 – функция Бесселя первого рода; $\tau^2 = x(1-x)(n_1b_1 - n_2b_2)^2$; x – объемная доля цилиндрических рассеивателей в образце. Отсюда можно определить радиус цилиндрического рассеивателя. Кроме того, для поликристалла анализ формы пика позволяет оценить линейный размер L областей, рассеивающих нейтроны когерентно. Угловое уширение отраженного пучка нейтронов можно представить в виде /2, 3/:

$$\Delta\theta_f = \lambda/L\cos\theta_B. \tag{2}$$

Для относительной полуширины $\Delta\lambda/\lambda$ дифракционного пика гауссовой формы при известном собственном разрешении спектрометра $(\Delta\lambda/\lambda)_{sp}$ имеем /3/:

$$(\Delta\lambda/\lambda)^2 = (\Delta\lambda/\lambda)^2_{sp} + (\Delta\theta_f)^2\cdot\mathrm{ctg}^2\,\theta_B. \tag{3}$$

Из соотношений (2), (3) легко определить L.

Анализ рассеяния ОХН неоднородной средой, состоящей из рассеивателей, расположение которых в пространстве не обладает дальним порядком, можно проводить в модели паракристалла, позволяющей количественно оценить среднее расстояние между соседями, степень разупорядоченности и радиус взаимодействия /1, 4/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кузнецов С.П. и др. Препринт ФИАН № 11, М., 1989.
2. Нозик Ю.З., Озеров Р.П., Хенниг К. Структурная нейтронография. Т. 1, М., Атомиздат, 1979.
3. Александров Ю.А., Шарапов Э.И., Чер Л. Дифракционные методы в нейтронной физике. М., Энергоатомиздат, 1981.
4. Вайнштейн Б.К. Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах. М., Изд. АН СССР, 1963.

Поступила в редакцию 25 июня 1990 г.