

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 539.171.4

РАСЧЕТ КРИВОЙ КАЧАНИЯ ДВУХКРИСТАЛЬНОГО НЕЙТРОННОГО СПЕКТРОМЕТРА НА СИЛЬНОПОГЛОЩАЮЩИХ КРИСТАЛЛАХ InSb В ГЕОМЕТРИИ ЛАУЭ–ЛАУЭ

© 2024 г. Й. Шмайснер^{a, b, *}, А. Н. Тюлюсов^{a, b}

^aНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123182 Россия

^bНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409 Россия

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

Поступила в редакцию 20.06.2023 г.

После доработки 07.07.2023 г.

Принята к публикации 17.07.2023 г.

Представлены расчетные кривые качания для спектрометрической схемы двухкристального дифрактометра из кристаллов InSb в геометрии Лауэ–Лауэ для диапазонов длин волн нейтронов, соответствующих слабому потенциальному и сильному резонансному поглощению. Приведено сравнение вида и формы кривых, рассчитанных по расширенному выражению с учетом сечения поглощения и рассчитанных по выражению Комптона–Алиссона.

Ключевые слова: двухкристаллический нейтронный спектрометр, кристалл InSb, геометрия Лауэ–Лауэ

DOI: 10.56304/S2079562923030326

ВВЕДЕНИЕ

В экспериментах по дифракции нейтронов на кристаллах с совершенной решеткой важную роль в определении параметров спектрометрической схемы играет построение кривой качания (т.е. инструментальной линии спектрометра без образца), которая содержит информацию о конструктивных особенностях дифрактометра, связанных с начальной и конечной расходимостью нейтронного пучка и его спектральной шириной. Известно аналитическое выражение для кривой качания 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. Данное выражение используется для обработки результатов экспериментов вплоть до настоящего времени [5–7]. Этот подход основан на том факте, что длина волны и брэгговский угол связаны соотношением Вульфа–Брэгга [8] и, 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 кривой качания. Но ситуация значительным образом ме-

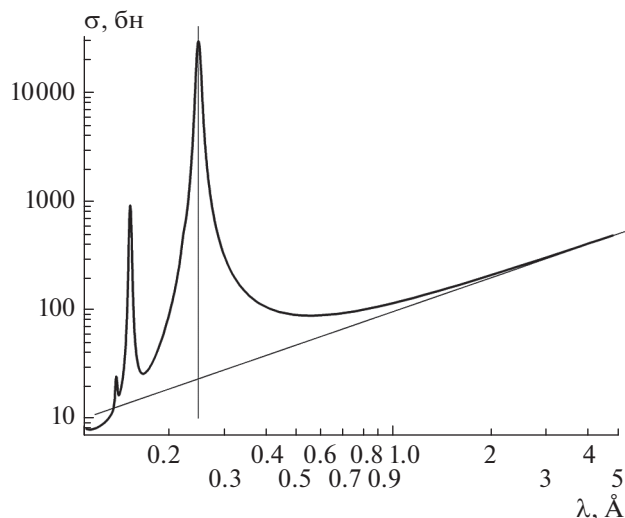


Рис. 1. Зависимость сечения поглощения от длины волны нейтронов для ядер ^{115}In [9]. Характерны три пика резонансного поглощения.

няется 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 (рис. 1) [9]. Для сравнения с Ge обратная длина поглощения для InSb будет: $\mu_{\text{InSb}} = 1.95 \text{ см}^{-1}$. Отсюда следует, что в таких условиях ранее используемый подход становится неприменимым.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ВЫРАЖЕНИЕ

Согласно [1] выражение для интенсивности при отражении от двухкристального дифрактометра имеет следующий вид:

$$I(\beta) = K \int_{-\infty}^{+\infty} R(\alpha) R(\beta - \alpha) d\alpha, \quad (1)$$

где функции R 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, а множитель K пропорционален интенсивности падающего на первый кристалл пучка и экспериментально определяется снятием кривой качания от известного образца. Также можно заметить, что форма кривой отражения не зависит от величины горизонтальной расходимости пучка и от вида функции распределения энергии начального пучка по спектру в силу малой угловой ширины функции отражения от одного кристалла.

Однако в выражении по Комптону—Аллисону не рассматривается случай зависимости сечения поглощения от длины волны падающего излучения. Для учета этого преобразуем выражение кривой качания до следующего вида:

$$I(\beta) = K^* \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} \int_{-\infty}^{+\infty} R(\alpha, \lambda(\theta_B), \mu(\lambda)) \times \\ \times R(\beta - \alpha, \lambda(\theta_B), \mu(\lambda)) d\alpha d\lambda. \quad (2)$$

Функции R описывают теперь не только зависимость интенсивности отражения от угла падения, но также зависимость от обратной длины поглощения $\mu(\lambda)$ и длины волны нейтронов. K^* будет определяться новой нормировочной постоянной. Как видно из (2), отражательная способность кристаллов зависит не только от углов скольжения, но и от поглощательной способности кристаллов и энергии падающих на них нейтронов.

Функции кривых отражения кристаллов будут задаваться через выражения волновых функций, полученных в теории динамической дифракции в двухволновом приближении для геометрии Лауэ, с выводом которых подробнее можно ознакомиться в [4]. Так для получения интенсивностей

нейтронных волн, пришедших на детектор, можно задать коэффициенты динамического отражения R и пропускания T , где интенсивность падающей волны принята за единицу:

$$R = |\Psi_B(z=l)|^2, \quad T = |\Psi_0(z=l)|^2, \quad (3)$$

здесь $\Psi_B(z=l)$ и $\Psi_0(z=l)$ — волновые функции отраженной и пройденной волн из решения системы в геометрии Лауэ.

Взаимодействие неполяризованных нейтронов с идеальной кристаллической решеткой без учета тепловых колебаний представляется в виде псевдопотенциала Ферми, фурье-компоненты в разложении по векторам обратной решетки которого:

$$V_B = \frac{2\pi\hbar^2}{V_0 m} \sum_j b_j \exp(-i(\mathbf{B} \cdot \mathbf{r}_j)). \quad (4)$$

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 $\mathbf{k}$ и массой m , b_j — эффективная длина рассеяния, которая связана с длиной упругого рассеяния b^{el} и сечением поглощения σ как:

$$b_j = b_j^{el} - i\sigma_j \frac{\sqrt{2mE}}{4\pi\hbar}. \quad (5)$$

РАСЧЕТ КРИВОЙ КАЧАНИЯ ДВУХКРИСТАЛЬНОГО СПЕКТРОМЕТРА

Изучаемая кристаллическая схема двухкристального спектрометра представлена в виде двух совершенных кристаллов из InSb толщиной $l = 0.01 \text{ см}$, расположенных в параллельных положениях по геометрии Лауэ—Лауэ (рис. 2). Угловая отстройка $\alpha = \pm 30$ угл. с и с угловым отклонением второго кристалла в меньшем диапазоне $\beta = \pm 5$ 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 ($R-T$). Диапазоны монохроматичности для падающей волны нейтронов были выбраны в пределах длин волн $\lambda = 0.3-0.4 \text{ Å}$ для случая зависимости сечения поглощения от энергии нейтронов в области резонансного поглощения и диапазон длин волн $\lambda = 1.2-1.3 \text{ Å}$ — для преимущественно потенциального характера поглощения.

Численное интегрирование проводилось по угловым координатам с равным шагом при 501 узловой точке в каждом направлении. Для сравнения расширенного выражения по формуле (2) с описанным в [1] был также проведен расчет кривых качания в монохроматическом случае для нейтронных пучков с длинами волн крайних и среднего значений диапазонов. Нормировка интенсивно-

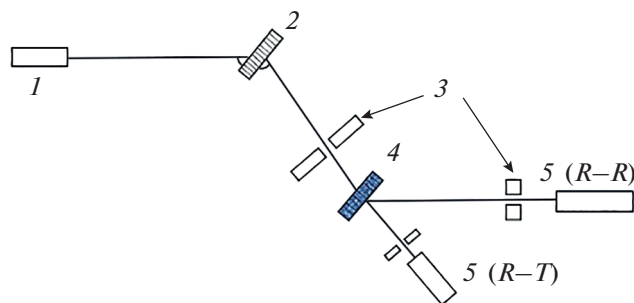


Рис. 2. Принципиальная схема двухкристального спектрометра геометрии Лауэ-Лауэ с коллиматором (1), коллимирующими щелями (3) и детектором (5), который может размещаться в положениях измерения интенсивностей для случаев (R-R) и (R-T). Первый кристалл выступает в качестве монокристалла (2), а второй кристалл — в качестве анализатора (4).

стей проводилась по их максимальному значению для случая двойного отражения (R-R), а в случае (R-T) — по совмещению интенсивностей в области большого углового отклонения с учетом суммарного поглощения кристалла: $I = I_0 \exp(-\mu l)$.

Расчетные кривые качания при двойном отражении (R-R) в областях энергий нейтронов близкой к резонансному поглощению и вдали от него представлены на рис. 3. Наблюдается изменение формы кривой качания при приближении к резонансному поглощению и различие кривых с расчетом по выбранному диапазону немонохроматичности по (2) и для среднего значения длины волны диапазона по исходной формуле Комптона-Аллисона (1) (рис. 3а). В области длин волн (рис. 3б), где основное влияние имеет потенциальное поглощение, заметного различия в форме расчетных кривых нет, однако проявляется осцилляция интенсивности, связанная с интерференцией дифрагированных волн от абсолютно идентич-

ных кристаллов — одно из следствий теории динамической дифракции [10].

Модельные кривые качания в случае (R-T) для данной спектрометрической схемы приведены на рис. 4. Заметно различие в форме кривых в диапазоне длин волн для области резонансного поглощения (рис. 4а) по сравнению с построенными кривыми качания в диапазоне, соответствующем потенциальному поглощению (рис. 4б). Также в области резонансного поглощения присутствует интерференционный эффект аномального пропускания нейтронов кристаллом — аналог эффекта Борманна в рентгеновской кристаллооптике [11–12]. Таким образом, в случае дифракции нейтронов при энергиях близких к резонансному уровню поглощения ядром кристалла, модель кривой качания по (1) менее подходит для обработки экспериментальных данных по сравнению с предлагаемой в данной работе.

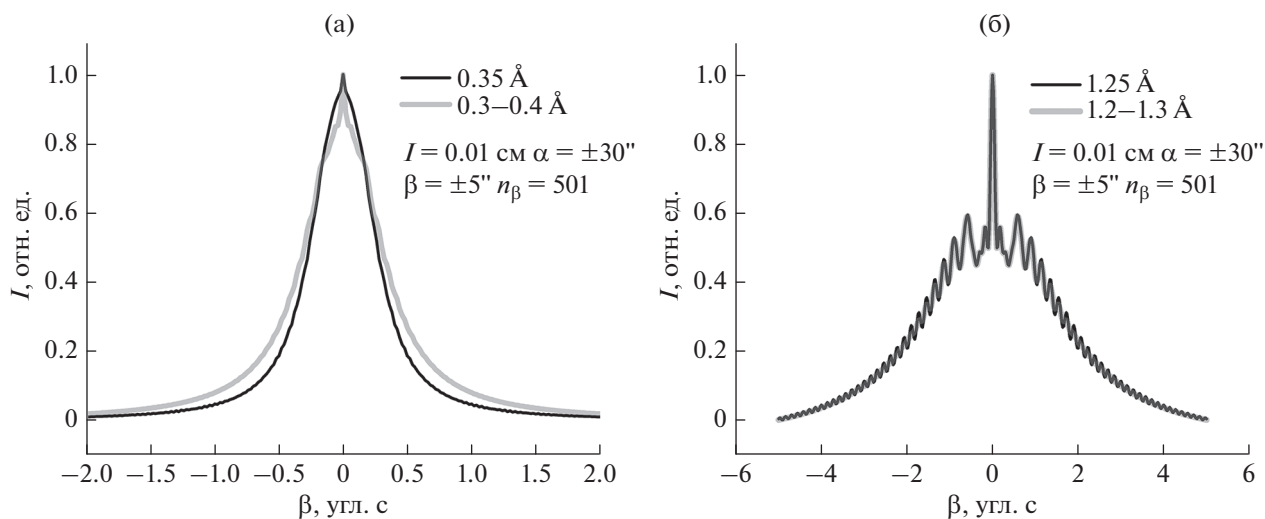


Рис. 3. Расчетные инструментальные линии при двойном отражении (R-R) для двухкристального спектрометра из (111) InSb. Конечная интенсивность нормирована на единицу.

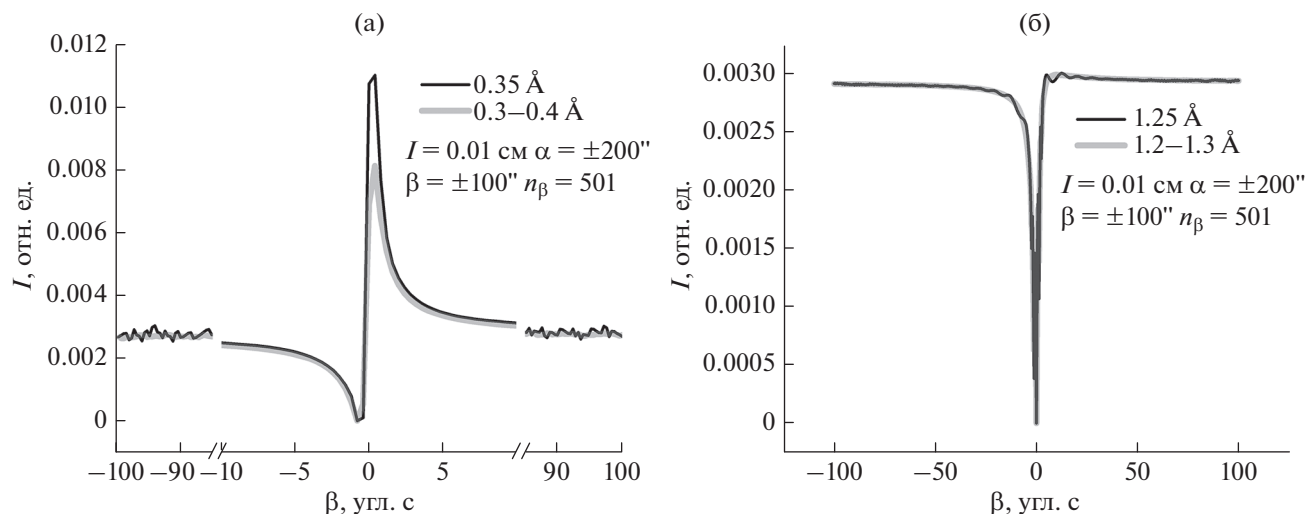


Рис. 4. Расчетные инструментальные линии после отражения и пропускания (R – T) для двухкристального спектрометра из (111) InSb.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Взаимодействие нейтронов с ядрами кристалла носит сложный характер, например, резкое изменение зависимости сечения поглощения от длины волны. Поэтому при изучении дифракции нейтронов в экспериментах в двухкристальной схеме, в том числе при исследовании эффекта аномального пропускания существенное значение будет иметь область резонансного поглощения нейтронов [13].

Это потребовало построения новой методики расчета кривой качания двухкристального спектрометра. В работе приведен метод расчета, основанный на решении уравнений теории динамической дифракции, который позволяет учесть такую зависимость. Рассчитаны модельные кривые качания для спектрометрической схемы в геометрии Лауэ–Лауэ на примере сильнопоглощающего кристалла InSb в области длин волн, соответствующей диапазонам потенциального и резонансного поглощения. Показано, что в области преимущественно потенциального поглощения результаты расчетов совпадают с полученными с помощью используемой ранее методики. Однако в области энергии нейтронов, где резонансное рассеяние на кристаллах вносит основной вклад, разница интенсивности может достигать 30% в области малых отклонений от брэгговского угла, т.е. наиболее интересной части кривой качания, где возможно наблюдение за эффектом аномального пропускания нейтронов, требующим использования именно сильнопоглощающих совершенных кристаллов.

Поэтому предлагаемая методика будет полезна при проведении и последующей обработке дифракционных экспериментов на двухкристальной схеме с кристаллами, имеющими резонансный уровень в диапазоне монохроматичности падающих ней-

тронов, при исследовании эффекта аномального пропускания.

БЛАГОДАРНОСТИ

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Compton A., Allison S. X-rays in Theory and Experiment. 1935. New York: D. Van Nostrand Company. Inc. <https://doi.org/10.1148/25.5.640>
2. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. 1982. Москва: Наука.
3. Authier A. Int. Tables Crystallogr. B. 2006. Ch. 5.1. P. 534. <https://doi.org/10.1107/97809553602060000569>
4. Абов Ю.Г., Елютин Н.О., Тюлюсов А.Н. // Ядерная физика. 2002. Т. 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. et al. // J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. 2021. V. 126. P. 126049. <https://doi.org/10.6028/jres.126.049>
7. Dolzhenkova E. et al. // Acta Phys. Pol. A. 2022. V. 141. <https://doi.org/10.12693/aphyspol.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. Абов Ю.Г. и др. // Ядерная физика. 2019. Т. 82 (4). С. 279. <https://doi.org/10.1134/S0044002719040032>
10. Bonse U. et al. // Phys. Stat. Sol. A. 1977. V. 43. P. 487. <https://doi.org/10.1002/pssa.2210430216>
11. Borrmann G. // Z. Phys. 1941. V. 42. P. 157.

12. Zippel D., Kleinstuck K., Schulze G.E.R. // Phys. Lett. 1964. V. 8. P. 241. 13. Абов Ю.Г. // Успехи физ. наук. 1996. Т. 166. С. 949. <https://doi.org/10.3367/UFNr.0166.199609d.0949>

Calculation of the Rocking Curve of a Double-Crystal Neutron Spectrometer on Strongly Absorbing InSb Crystals in Laue–Laue Geometry

J. Schmeissner^{1, 2, *} and A. N. Tyulyusov^{1, 2}

¹National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182 Russia

²National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

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

Received June 20, 2023; revised July 7, 2023; accepted July 17, 2023

Abstract—Calculated rocking curves are presented for the spectrometric scheme of a double-crystal diffractometer made of InSb crystals in the Laue–Laue geometry for neutron wavelength ranges corresponding to the weak potential and strong resonant absorptions. The appearance and shape of the curves calculated using the extended expression with allowance for the absorption cross section and the curves obtained using the Compton–Alison expression are compared.

Keywords: double-crystal neutron spectrometer, InSb crystal, Laue–Laue geometry