

Академик АН БССР Н. Н. СИРОТА, И. А. БУЛАТ

КОГЕРЕНТНЫЕ ЭФФЕКТЫ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ ПРИ НЕУПРУГОМ РАССЕЯНИИ НЕЙТРОНОВ ПОЛИКРИСТАЛЛОМ ЖЕЛЕЗА

При неупругом рассеянии медленных нейтронов поликристаллами на спектрах энергии наблюдаются особенности — пики интенсивности, обусловленные когерентными эффектами. Особенности такого рода наблюдались, в частности, на спектрах алюминия, свинца ⁽¹⁾ и железа ^(2, 3). Анализируя данные работы ⁽¹⁾, можно сделать вывод, что при использованной геометрии эксперимента основной вклад в образование указанных эффектов вносят однократно рассеянные нейтроны.

Как отмечалось ранее ⁽⁴⁾, а затем и в работах ^(2, 5), появление особенностей на спектрах неупругого рассеяния может быть вызвано попаданием конца вектора передачи момента нейтрона κ в области вблизи центров зон Бриллюэна. Поскольку информацию об этом несут в основном однократно рассеянные нейтроны, то по ширине когерентных пиков можно определить линейный размер этих областей, которые будем называть областями когерентного рассеяния.

При неупругом когерентном рассеянии нейтронов выполняются два закона сохранения: энергии (1) и импульса (2)

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m} = \hbar\nu; \quad (1)$$

$$\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \hbar(2\pi\boldsymbol{\tau} + \mathbf{q}) = \hbar\boldsymbol{\kappa}. \quad (2)$$

Модуль вектора $\boldsymbol{\kappa}$ связан с углом рассеяния θ и волновыми векторами падающих и рассеянных нейтронов k_0 и k соотношением

$$|\boldsymbol{\kappa}| = (k^2 - 2kk_0 \cos \theta + k_0^2)^{1/2}. \quad (3)$$

После однократного неупругого рассеяния на детектор попадут только те нейтроны из $(\varepsilon - \kappa)$ -пространства, энергия и импульс которых удовлетворяют условиям (1), (2) и (3). Для таких нейтронов возможно при определенной передаче энергии ε указать значение $|\boldsymbol{\kappa}|$, при котором произошло рассеяние:

$$|\boldsymbol{\kappa}| = \left[\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} - 2k_0 \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} + k_0^2 \right)^{1/2} \cos \theta + 2k_0^2 \right]^{1/2}. \quad (4)$$

Если в измеренном экспериментально спектре нейтронов, неупруго рассеянных на образце, присутствует хорошо выраженная когерентная особенность, расположенная в пределах передач энергии от ε_1 до ε_2 , то с помощью выражения (4) можно определить величины κ_1 и κ_2 , соответствующие указанным значениям ε . При этом абсолютные значения κ_1 и κ_2 есть радиусы сферических поверхностей в обратной решетке с центром вокруг нулевого узла, а разность $\kappa_2 - \kappa_1$ равна толщине сферического слоя или линейному размеру области когерентного рассеяния D . В прямом пространстве получим

$$D = 2\pi \left(\frac{1}{\kappa_1} - \frac{1}{\kappa_2} \right).$$

При численном определении энергетической ширины когерентной осо-

бенности на спектре нужно учесть разрешение спектрометра Q , тогда

$$D = 2\pi Q \left(\frac{1}{\kappa_1} - \frac{1}{\kappa_2} \right). \quad (5)$$

Спектр нейтронов, неупруго рассеянных образцом α -Fe, нами измерен при комнатной температуре на спектрометре нашего института по времени пролета холодных нейтронов ⁽⁶⁾. Средняя энергия падающих нейтронов составляла 4,54 Мэв. Геометрия данного эксперимента была близка к использованной в работе ⁽¹⁾. Пропускание образца для средней энергии падающих нейтронов составляло 80%, угол рассеяния $90 \pm 3^\circ$.

На спятем нами спектре неупругого рассеяния нейтронов в области передач энергии 6,45—13,2 Мэв находится заметный подъем интенсивности. Как отмечалось ранее в ⁽²⁾, в этом диапазоне энергий фоновый спектр железа не имеет особенностей; указанный пик обусловлен когерентными эффектами.

Используя соотношение (5), мы определили размер области когерентного рассеяния D ; он оказался равным 0,336 Å; при этом $\kappa_1 = 2,74 \text{ Å}^{-1}$, а $\kappa_2 = 3,28 \text{ Å}^{-1}$. В случае α -железа в данном интервале изменения κ лежит величина первого вектора обратной решетки $2\pi|\tau_1| = |\kappa| = 3,0984 \text{ Å}^{-1}$, которому соответствует семейство узлов 011. В первом приближении когерентную область можно представить в виде сферы диаметром D вокруг каждого узла данного семейства. Поэтому определенный диаметр области когерентного рассеяния вблизи узла обратной решетки α -Fe соответствует удвоенному значению квадратного корня из среднеквадратичного смещения атомов железа при комнатной температуре, которое, по данным работы ⁽⁷⁾, составляет 0,12 Å; при этом $D = 2u_m$, где u_m — максимальное смещение атома из положения равновесия (ϵ_1 и ϵ_2 определяли по положению крыльев когерентного пика).

Высота наблюдавшегося в работе ⁽³⁾ когерентного пика в области малых передач энергии при увеличении температуры в пределах 300—900° K падала, однако при этом пик расширялся, что в свете изложенных нами данных можно объяснить увеличением динамических смещений атомов из положений равновесия с повышением температуры. Заметное смещение максимума когерентного пика в сторону более низких передач энергии вызвано расширением кристаллической решетки α -Fe при нагревании.

Диаметр области когерентного рассеяния связан с величиной среднеквадратичных динамических смещений простым соотношением

$$\sqrt{u^2} = A \frac{D}{2},$$

где A — числовой коэффициент, который в данном случае равен 0,7.

На основании изложенного можно прийти к заключению, что измерения ширины и положения когерентных особенностей на спектрах неупруго рассеянных нейтронов поликристаллами можно использовать для получения информации о динамических смещениях атомов из положения равновесия и об изменении параметров кристаллической решетки вещества при внешних воздействиях. Предложенный метод определения значений среднеквадратичных динамических смещений в ряде случаев может дополнить существующие способы.

Институт физики твердого тела и полупроводников
Академия наук БССР
Минск

Поступило
7 VII 1975

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ F. Gompf, H. Lau et al., Neutron Inelastic Scattering, IAEA, Vienna, 1972, p. 137.
- ² Б. И. Горбачев, П. Г. Иваницкий и др., Укр. физ. журн., т. 18, № 8, 1384 (1973).
- ³ Б. И. Горбачев, П. Г. Иваницкий и др., Там же, т. 18, № 9, 1528 (1973). ⁴ В. С. Оскоцкий, ФТТ, т. 9, в. 1, 550 (1967).
- ⁵ Б. И. Горбачев, П. Г. Иваницкий, В. Т. Кротенко, Укр. физ. журн., т. 19, № 9, 1511 (1974).
- ⁶ Н. Н. Сирота, И. А. Булат и др., Весті АН БССР, сэр. физ.-мат. н., № 2, 64 (1975).
- ⁷ Narain Singh, P. K. Sharma, Phys. Rev. B, Solid State, v. 3, № 4, 1441 (1971).