

# ОСОБЕННОСТИ ДИФРАКЦИИ ЛАУЭ НЕЙТРОНОВ В СИЛЬНОПОГЛОЩАЮЩИХ КРИСТАЛЛАХ

*А. Я. Дзюблик<sup>\*</sup>, В. В. Михайловский, В. Ю. Спивак*

*Институт ядерных исследований Национальной академии наук Украины  
03680, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 2 августа 2018 г.,  
после переработки 23 сентября 2018 г.  
Принята к публикации 25 сентября 2018 г.

Хорошо известная теория Като дифракции Лауэ сферических рентгеновских волн обобщается на случай нейтронной дифракции в сильнопоглощающих кристаллах с учетом как потенциального, так и резонансного рассеяния нейтронов ядрами, а также реальной угловой дисперсии падающих нейтронов. Для оценки угловых интегралов применяется метод перевала, являющийся более адекватным в случае сильнопоглощающих кристаллов, чем обычно используемый метод стационарной точки. Найдено, что распределение интенсивности дифрагированного и преломленного пучков вдоль базиса треугольника Бормана существенно зависит от отклонения энергии нейтронов от резонансного уровня. При сравнении наших расчетов с экспериментальными данными Шалла по дифракции нейтронов в кремнии мы рассматриваем также роль конечной ширины коллимирующей и сканирующей щелей.

DOI: 10.1134/S0044451019030040

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Рассеяние нейтронов является одним из самых мощных инструментов исследования кристаллической структуры твердых тел и их магнитных свойств (см., например, [1–6]). Для интерпретации экспериментальных данных, полученных в очень тонких пленках, достаточно применять кинематическую теорию рассеяния, тогда как для толстых мишеней, где многократное рассеяние нейтронов атомами становится существенным, необходимо использовать уже динамическую версию. Такая динамическая теория рассеяния была развита для упругой дифракции в идеальных кристаллах как для нейтронов [7–9], так и для мессбауэровских лучей [10–13], если рассматривать их как плоские волны. Ее обобщение на случай неупругой дифракции в кристаллах, подверженных влиянию внешних переменных полей, было дано в работах [14, 15].

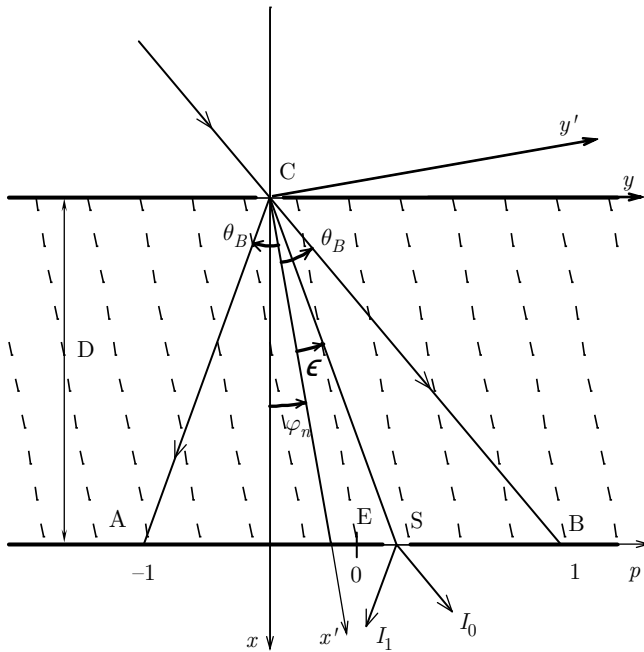
В случае двухволновой дифракции был предсказан эффект подавления реакций и неупругих каналов [8, 10], наблюдавшийся впоследствии в многочисленных мессбауэровских дифракционных экспериментах (см., например, обзоры [16, 17]), а также в

экспериментах по дифракции нейтронов [18, 19], изучавших  $(n, \gamma)$  реакцию в кристалле сульфида кадмия, обогащенном ядрами  $^{113}\text{Cd}$ , имеющими резонансный уровень с энергией 0.178 эВ.

Хотя существует близкая аналогия между подавлением ядерных реакций и аномальным прохождением рентгеновских лучей (эффектом Бормана) [20–25], резонансное ядерное рассеяние обеспечивает принципиально новый характер аномального поглощения нейтронов или  $\gamma$ -фотонов. А именно, при рассеянии рентгеновских лучей на атомных электронах при выполнении условия Брэгга имеет место только частичное подавление неупругого рассеяния. В то же время, в случае резонансного ядерного рассеяния при выборе соответствующей геометрии эксперимента можно добиться полного подавления неупругих каналов и реакций. Этот эффект объясняется теорией динамического рассеяния, которая предсказывает, что обмен энергией между преломленной и дифрагированной волнами внутри кристалла приводит к расщеплению каждой из них на две волны с различными волновыми векторами. Одна такая волна поглощается слабо, а другая сильно.

Еще раз отметим, что в работах [7–15] электромагнитные волны и нейтроны описываются плоскими волнами. В то же время, в типичных экспериментах по дифракции Лауэ падающие волны сначала

<sup>\*</sup> E-mail: dzublik@ukr.net



**Рис. 1.** Схема дифракции Лауэ коллимированной нейтронной волны в идеальном кристалле. Поток нейтронов сосредоточен главным образом внутри треугольника Бормана ABC. Коллимирующая и сканирующая щели обозначены соответственно C и S. Отражающие плоскости вычерчены штриховыми линиями. Точки A и B отмечены приведенными координатами соответственно  $p = -1$  и  $p = 1$ ; средняя точка E отрезка AB —  $p = 0$

ла проходят узкую щель и только потом проникают в кристалл (см. рис. 1). В этом случае падающие нейтроны описываются уже волновым пакетом, записанным как интеграл по углу. Тогда преломленная и дифрагированная волны перемещаются внутри кристалла в пределах области, ограниченной так называемым треугольником Бормана [20–25]. Распределение интенсивности дифрагированного пучка вдоль основания треугольника Бормана осциллирует вследствие интерференции двух волн, движущихся внутри кристалла с различными волновыми векторами. Эта же интерференция обеспечивает также хорошо известный маятниковый эффект [20–24].

Като [26–29] развил теорию такой дифракции, предполагая, что угловая дисперсия падающих рентгеновских волн намного больше, чем малый дифракционный интервал порядка нескольких угловых секунд. Хотя Като говорил о дифракции сферических волн, испускаемых точечным источником, на самом же деле он рассматривал цилиндрические волны, испускаемые нитевидным источником. Точнее, коллимирующая входная щель рассматривалась как сплошная линия таких

точечных излучателей, расположенных вдоль щели.

Шалл [30–32] использовал теорию Като, чтобы интерпретировать результаты своих экспериментов по дифракции Лауэ нейтронов в идеальных кристаллах кремния и германия. Измеряя период интерференционных осцилляций интенсивности дифрагированных пучков нейтронов, он с высокой точностью определил длины когерентного рассеяния нейтронов ядрами кремния [30] и германия [32]. Эти эксперименты были повторены позднее Абовым и Елютиным [5, 6].

Стоит отметить также работы [33–37], в которых изучалась дифракция Лауэ нейтронов в больших кристаллах кремния под углом Брэгга близким к  $\pi/2$ . В этих условиях авторы наблюдали аномальное поглощение и замедление нейтронов. Более того, они надеялись проверить принцип эквивалентности инерциальной и гравитационной масс на примере такого микроскопического объекта, как нейтрон и достичь более высокой точности порядка  $10^{-5}$ .

Ранее мы проанализировали симметричную дифракцию Лауэ расходящихся нейтронных пучков [38] в сильнопоглощающих кристаллах, учитывая как потенциальное, так и резонансное рассеяние нейтронов ядрами. Следуя Като [26–29], мы брали угловую дисперсию падающих нейтронов  $\sigma_a$  значительно больше характерного углового интервала  $|\Delta\vartheta|$ , в котором происходит дифракция. Другими словами, реальное угловое распределение нейтронов в этом приближении было заменено константой. Аналогичная теория симметричной дифракции Лауэ мессбауэровского излучения была построена в работе [39].

В настоящей работе мы изучаем общий случай дифракции Лауэ, когда отражающие плоскости кристалла наклонены под произвольным углом относительно поверхности кристалла. Учтено угловое распределение падающих нейтронов  $G_a(\theta)$  с дисперсией  $\sigma_a$ , которая может быть того же порядка, что и угловой диапазон дифракции  $|\Delta\vartheta|$ . Для расчета угловых интегралов, определяющих нейтронный волновой пакет внутри толстого кристалла, мы используем метод перевала. Он более подходит для сильнопоглощающих кристаллов, чем метод стационарной фазы, который ранее использовался в теории дифракции рентгеновских лучей в слабопоглощающих кристаллах [24]. Отметим, что в приближении Като, когда функция  $G_a(\theta)$  заменяется константой, эти угловые интегралы вычисляются точно [24]. Однако в нашем подходе из-за фактора  $G_a(\theta)$  необходимы оценки интегралов с помощью метода перевала для достаточно больших кристаллов.

Мы рассматриваем типичную экспериментальную ситуацию (см., например, [30–32]), когда нейтроны проходят сначала через входную щель, прорезанную в экране, а затем перемещаются внутри кристалла в пределах треугольника Бормана. Мы предполагаем, что все нейтроны падают перпендикулярно к коллимирующей щели, которая, в свою очередь, параллельна отражающим плоскостям кристалла. Вначале мы рассмотрим щель как нитевидный излучатель. В этом случае нейтронные волны имеют цилиндрическую симметрию с осью симметрии  $z$  вдоль щели. А в разд. 4 мы анализируем роль конечной ширины обеих щелей, используемых в экспериментах.

## 2. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

Пусть падающие нейтроны при  $t \rightarrow -\infty$  описываются начальным волновым пакетом

$$\Psi_{in}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d\boldsymbol{\kappa}}{(2\pi)^3} f(\boldsymbol{\kappa}) e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r} - iEt/\hbar}, \quad (1)$$

где  $\boldsymbol{\kappa}$  — волновые векторы нейтронов,  $E = \hbar^2 \boldsymbol{\kappa}^2 / 2m$  — их энергия и  $m$  — масса нейтрона. Произведение  $|f(\boldsymbol{\kappa})|^2 \Delta\boldsymbol{\kappa}$  интерпретируется как вероятность найти нейтрон с волновым вектором  $\boldsymbol{\kappa}$  в интервале размером  $\Delta\boldsymbol{\kappa}$  около  $\boldsymbol{\kappa}$ . Для краткости, мы опускаем спиновый множитель, который не влияет на когерентное рассеяние в немагнитном кристалле с неполяризованными ядрами.

Введем систему координат  $x, y, z$  с центром на входной поверхности кристалла в середине коллимирующей щели. Ось  $x$  направим в глубь кристалла перпендикулярно поверхности, ось  $z$  вдоль щели (см. рис. 1). Введем еще одну систему координат  $x', y', z'$  так, чтобы ось  $x'$  была направлена параллельно отражающим плоскостям кристалла, а ось  $z'$  совпадала с осью  $z$ . Эта система координат получается из  $x, y, z$  поворотом на угол  $\varphi_n$  вокруг оси  $z$ . Здесь  $\varphi_n < 0$  для поворота по часовой стрелке и  $\varphi_n > 0$  в обратном случае. Обозначим угол между волновым вектором нейтронов  $\boldsymbol{\kappa}$  и осью  $x$  как  $\varphi$ , угол падения на отражающие плоскости —  $\theta$ , угол Брэгга —  $\theta_B$ .

Кроме того, мы вводим углы  $\varphi_0$  и  $\varphi_1$  между осью  $x$  и сторонами треугольника Бормана, соответствующим проходящему и дифрагированному лучам ( $\varphi_0 = \theta_B + \varphi_n > 0$  и  $\varphi_1 = -\theta_B + \varphi_n < 0$ ).

Пусть расходящийся пучок нейтронов движется в плоскости  $x, y$  перпендикулярно щели и «размазан» по углу  $\theta$ . Тогда  $f(\boldsymbol{\kappa}) \sim \delta(\kappa_z)$ , в то время как компоненты  $\boldsymbol{\kappa}(\theta)$  вдоль осей  $x, y, z$  есть

$$\boldsymbol{\kappa}(\theta) = \{\kappa \cos \varphi, \kappa \sin \varphi, 0\}, \quad (2)$$

где  $\varphi = \varphi_n + \theta$ .

Волновую функцию (1) можно переписать как

$$\Psi_{in}(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty G_e(E) \Psi_E^{in}(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} dE, \quad (3)$$

где  $G_e(E)$  характеризует распределение падающих нейтронов по энергиям, а функция

$$\Psi_E^{in}(\mathbf{r}) = \int_{-\pi}^{\pi} G_a(\theta) e^{i\boldsymbol{\kappa}(\theta)\cdot\mathbf{r}} d\theta \quad (4)$$

описывает нейтроны с фиксированной энергией  $E$ . Мы аппроксимируем угловое распределение нейтронов гауссовской функцией с максимумом под углом  $\theta_0$  близким к углу Брэгга  $\theta_B$ :

$$G_a(\theta) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{(\theta_0 - \theta)^2}{4\sigma^2}\right\}, \quad (5)$$

где

$$\sigma^2 = \langle (\theta_0 - \theta)^2 \rangle \quad (6)$$

обозначает среднеквадратичную угловую дисперсию нейтронов. Обычно  $\sigma \ll 1$ , что дает нам возможность расширить пределы интегрирования по  $\theta$  от  $-\infty$  до  $\infty$ . А если  $\sigma$  значительно превышает интервал дифракции  $|\Delta\vartheta|$ , то  $G_a(\theta)$  можно заменить константой.

Распределение нейтронов по энергии также описывается гауссовской функцией:

$$G_e(E) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma_e)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{(E - \bar{E})^2}{4\sigma_e^2}\right\}. \quad (7)$$

Мы рассматриваем рассеяние нейтронной волны на атомных ядрах в кристалле, игнорируя влияние электронов. Тогда когерентное рассеяние нейтронов элементарной ячейкой кристалла из состояния  $\boldsymbol{\kappa}$  в состояние  $\boldsymbol{\kappa}'$  определяется амплитудой

$$F(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa}') = \sum_j e^{i\mathbf{Q}\cdot\rho_j} \bar{f}_j(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa}'), \quad (8)$$

где  $\mathbf{Q} = \boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\kappa}'$  — вектор рассеяния, радиус-вектор  $\rho_j$  определяет положение равновесия  $j$ -го атома в элементарной ячейке,  $\bar{f}_j(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa}')$  — амплитуда когерентного рассеяния нейтронов  $j$ -м ядром:

$$\bar{f}_j(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa}') = -\bar{b}_j e^{-W_j(\mathbf{Q})} + \bar{f}_j^{res}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa}'), \quad (9)$$

$\bar{b}_j$  — длина когерентного рассеяния нейтронов  $j$ -м ядром,  $e^{-W_j(\mathbf{Q})}$  — квадратный корень фактора Дебая–Валлера,  $\bar{f}_j^{res}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa}')$  — амплитуда когерентного резонансного рассеяния. В окрестности изолированного резонанса она дается формулой

$$\bar{f}_j^{res}(\boldsymbol{\kappa}, \boldsymbol{\kappa}') = -c_j \left( \frac{2I_e + 1}{2I_g + 1} \right) \frac{\Gamma_n}{2\kappa_0} \sum_{\{n'_s\}} \left\langle \frac{(\exp[-i\boldsymbol{\kappa}' \cdot \mathbf{u}_j])_{\{n'_s\}} (\exp[i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{u}_j])_{\{n'_s\}}}{E - E_0 - \sum_s \hbar\omega_s(n'_s - n_s^0) + i\Gamma/2} \right\rangle, \quad (10)$$

где  $c_j$  — вероятность нахождения резонансного изотопа в  $j$ -ом узле,  $I_g$  — спин основного состояния исходного ядра,  $I_e$  — спин возбужденного состояния составного ядра,  $E_0 = \hbar^2 \kappa_0^2 / 2m$  — энергия резонансного уровня,  $\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_\gamma + \Gamma_f$  — полная ширина уровня, состоящая из парциальных ширин каналов распада — нейтронного  $\Gamma_n$ , радиационного  $\Gamma_\gamma$  и, возможно, канала деления  $\Gamma_f$ ;  $\mathbf{u}_j$  — смещение  $j$ -го ядра из положения равновесия,  $\{n_s^0\}$  и  $\{n'_s\}$  — наборы чисел фононов в начальном и конечном состояниях кристалла,  $\omega_s$  — частоты фононов, скобки  $\langle \dots \rangle$  означают усреднение по начальным состояниям кристаллической решетки.

Сумма в (10) может быть преобразована в интеграл

$$\sum_{\{n'_s\}} \langle \dots \rangle = -ie^{-W_j(\boldsymbol{\kappa})} e^{-W_j(\boldsymbol{\kappa}')} \times \int_0^\infty \frac{dt}{\hbar} \exp \left\{ \frac{i(E - E_0)t}{\hbar} - \frac{\Gamma t}{2\hbar} + \varphi_j(t) \right\}, \quad (11)$$

где  $e^{-W_j(\boldsymbol{\kappa})}$  — фактор Лэмба – Мессбауэра,

$$\varphi_j(t) = \sum_s \frac{\hbar}{2M_j N \omega_s} \times [y_{js} \bar{n}_s e^{i\omega_s t} + y_{js}^* (\bar{n}_s + 1) e^{-i\omega_s t}] \quad (12)$$

и

$$y_{js} = (\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{v}_{js})(\boldsymbol{\kappa}' \cdot \mathbf{v}_{js}^*), \quad (13)$$

$M_j$  — масса  $j$ -го атома,  $N$  — количество элементарных ячеек,  $\bar{n}_s$  — среднее число фононов  $s$ -го нормального колебания с поляризацией  $\mathbf{v}_{js}$ .

В рамках дебаевской модели кристалла с одним атомом в элементарной ячейке, игнорируя анизотропию колебаний, можно переписать это выражение как (см. также [40])

$$\varphi_j(t) = \frac{3}{2} \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}')}{M(k_B \Theta_D)^3} \int_0^{\omega_{max}} \hbar^2 \omega d\omega \times [\bar{n}_\omega e^{i\omega t} + (\bar{n}_\omega + 1) e^{-i\omega t}], \quad (14)$$

где  $\mathbf{p} = \hbar\boldsymbol{\kappa}$  и  $\mathbf{p}' = \hbar\boldsymbol{\kappa}'$  — начальный и конечный импульсы нейтронов,  $\Theta_D$  — температура Дебая,  $\omega_{max} = k_B \Theta_D / \hbar$  — максимальная частота фоно-

нов. В таком дебаевском подходе параметр  $W(\boldsymbol{\kappa}) = (1/2)\kappa^2 \langle u_x^2 \rangle$  задается формулой [41]

$$W(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{3\mathcal{R}}{k_B \Theta_D} \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^2 \int_0^{\Theta_D/T} \left[ \frac{1}{e^z - 1} + \frac{1}{2} \right] z dz, \quad (15)$$

где  $\mathcal{R} = \hbar^2 \kappa^2 / 2M$  представляет собой энергию отдачи ядра с массой  $M$ .

В приближении быстрых столкновений, когда  $\hbar\omega_{max} / \Gamma \ll 1$ , выражение (11) сводится к

$$\sum_{\{n'_s\}} \langle \dots \rangle = \frac{e^{-W_j(\mathbf{Q})}}{E - E_0 + i\Gamma/2}. \quad (16)$$

Это приближение хорошо выполняется для низколежащих резонансов. В частности, для кристалла  $^{113}\text{CdS}$  с параметрами нейтронного резонанса  $E_0 = 0.1779 \pm 0.0002$  эВ,  $\Gamma_n = 0.638 \pm 0.0008$  мэВ,  $\Gamma_\gamma = 112.4 \pm 0.4$  мэВ [42] и  $\Theta_D = 219\text{К}$  имеем  $\hbar\omega_{max} / \Gamma \approx 0.2$ .

### 3. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ

Согласно теории столкновений [43], каждая плоская волна  $e^{i\boldsymbol{\kappa}(\theta) \cdot \mathbf{r}}$  волнового пакета (4) рассеивается независимо, порождая волновую функцию  $\psi_{\boldsymbol{\kappa}(\theta)}(\mathbf{r})$ , поэтому волновой пакет нейтронов, рожденный падающей волной (4), принимает вид

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\theta G_a(\theta) \psi_{\mathbf{k}(\theta)}(\mathbf{r}). \quad (17)$$

В двухволновом случае волна  $\psi_{\mathbf{k}(\theta)}(\mathbf{r})$  внутри кристалла, когда  $0 < x < D$ , где  $D$  — толщина кристалла, состоит из преломленной волны с волновым вектором  $\mathbf{k}(\theta)$  и дифрагированной волны с волновым вектором  $\mathbf{k}_1(\theta) = \mathbf{k}(\theta) + \mathbf{h}$ , где  $\mathbf{h}$  — вектор обратной решетки кристалла. Компоненты векторов  $\mathbf{k}(\theta)$  и  $\boldsymbol{\kappa}(\theta)$  вдоль входной поверхности  $x = 0$  совпадают. Поэтому векторы  $\mathbf{k}_\nu(\theta)$  с  $\nu = 0, 1$  можно записать как

$$\mathbf{k}_\nu(\theta) = \boldsymbol{\kappa}_\nu(\theta) + \delta(\theta)\mathbf{n}, \quad \boldsymbol{\kappa}_1(\theta) = \boldsymbol{\kappa}_0(\theta) + \mathbf{h}, \quad (18)$$

где  $\mathbf{n}$  — единичный вектор вдоль оси  $x$ .

Как следствие, волновая функция  $\Psi_E(\mathbf{r})$  внутри кристалла преобразуется в

$$\begin{aligned}\Psi_E(\mathbf{r}) &= \sum_{\nu=0,1} \Psi_E^{(\nu)}(\mathbf{r}), \\ \Psi_E^{(\nu)}(\mathbf{r}) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\theta G_a(\theta) \psi_{\kappa_\nu(\theta)}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (19)$$

где  $\psi_{\kappa_\nu(\theta)}(\mathbf{r})$  задается формулой

$$\psi_{\kappa_\nu(\theta)}(\mathbf{r}) = \sum_{\iota=1,2} C_\nu^{(\iota)}(\theta) e^{i\kappa_\nu(\theta) \cdot \mathbf{r} + i\delta_\iota(\theta)x}. \quad (20)$$

Следуя [8], мы вводим обозначения

$$k_0(\theta) = \kappa[1 + \varepsilon_0(\theta)], \quad k_1(\theta) = \kappa[1 + \varepsilon_1(\theta)]. \quad (21)$$

Параметры  $\varepsilon_{0(1)}(\theta)$  связаны следующим образом:

$$\varepsilon_1 = \alpha/2 + \gamma_1 \varepsilon_0 / \gamma_0, \quad (22)$$

где

$$\alpha = \frac{2\kappa(\theta) \cdot \mathbf{h} + \mathbf{h}^2}{\kappa^2}, \quad \gamma_\nu = \cos \varphi_\nu. \quad (23)$$

Выражение  $1 + \varepsilon_0(\theta)$  имеет смысл показателя преломления для падающей волны  $\exp\{i\kappa_0(\theta) \cdot \mathbf{r}\}$ .

Напомним, что  $\varphi_\nu$  — угол между векторами  $\kappa_\nu = \kappa_\nu(\theta_B)$  и осью  $x$ . Угол  $\alpha$  указывает отклонение от точного условия Брэгга, соответствующего  $\kappa_1 = \kappa$ . Для нейтронов с фиксированной энергией [21]

$$\alpha = 2 \sin 2\theta_B \Delta\theta, \quad (24)$$

где

$$\Delta\theta = \theta_B - \theta. \quad (25)$$

Поправка  $\delta$  к волновым векторам в среде связана с параметром  $\varepsilon_0$  следующим соотношением:

$$\delta(\theta) = \kappa \varepsilon_0(\theta) / \gamma_0. \quad (26)$$

Амплитуды  $C$  и волновые векторы  $\mathbf{k}$  определяются системой фундаментальных уравнений динамической теории рассеяния [24]. Для двухволнового случая в обозначениях [8] они записываются как

$$\begin{aligned}(k^2(\theta)/\kappa^2(\theta) - 1)C_0 &= g_{00}C_0 + g_{01}C_1, \\ (k_1^2(\theta)/\kappa^2(\theta) - 1)C_1 &= g_{10}C_0 + g_{11}C_1.\end{aligned}\quad (27)$$

Матрица рассеяния  $g_{\mu\nu}$  определяется выражением

$$g_{\mu\nu} = \frac{4\pi}{\kappa^2 v_0} F(\kappa_\nu, \kappa_\mu), \quad \mu, \nu = 0, 1, \quad (28)$$

где  $v_0$  — объем элементарной ячейки кристалла.

Система двух уравнений (27) имеет следующее решение [8]:

$$\varepsilon_0^{(1,2)} = \frac{1}{4} [g_{00} + \beta g_{11} - \beta\alpha] \pm \frac{1}{4} \left\{ [g_{00} + \beta g_{11} - \beta\alpha]^2 + 4\beta [g_{00}\alpha - (g_{00}g_{11} - g_{01}g_{10})] \right\}^{1/2}, \quad (29)$$

где

$$\beta = \gamma_0 / \gamma_1. \quad (30)$$

Здесь и далее знак плюс соответствует  $\varepsilon_0^{(1)}$ , а знак минус —  $\varepsilon_0^{(2)}$ .

Более удобно выразить их через новый параметр отклонения

$$\eta = \frac{1}{2} \left( \frac{\beta}{g_{01}g_{10}} \right)^{1/2} (\alpha - \alpha_0), \quad (31)$$

где угловое смещение

$$\alpha_0 = g_{11} - g_{00} / \beta. \quad (32)$$

Обратим внимание, что  $\eta$  уже комплексное число.

Тогда параметры  $\varepsilon_0^{(1,2)}$  принимают простой вид

$$\varepsilon_0^{(\iota)} = \frac{1}{2} g_{00} - \frac{1}{2} \sqrt{g_{01}g_{10}\beta} \left[ \eta + (-1)^{\iota+1} \sqrt{1 + \eta^2} \right] \quad (33)$$

и  $\delta_\iota(\eta)$ , определенные в (26), могут быть записаны следующим образом:

$$\delta_\iota(\eta) = \frac{\kappa g_{00}}{2\gamma_0} - \frac{\pi}{\Lambda_L} \left[ \eta + (-1)^{\iota+1} \sqrt{1 + \eta^2} \right], \quad (34)$$

где

$$\Lambda_L = \frac{2\pi\gamma_0}{\kappa \sqrt{g_{01}g_{10}\beta}} \quad (35)$$

означает маятниковую длину в случае слабопоглощающих кристаллов (см., например, [24]).

Для дифракции Лауэ ( $\beta > 0$ ) амплитуды волн удовлетворяют следующему граничному условию при  $x = 0$ :

$$\sum_{\iota=1,2} C_0^{(\iota)}(\theta) = 1, \quad \sum_{\iota=1,2} C_1^{(\iota)}(\theta) = 0. \quad (36)$$

Будучи выраженными через переменную  $\eta$ , они переписываются в виде

$$\begin{aligned}C_0^{(\iota)}(\eta) &= \frac{1}{2} \left[ 1 + (-1)^\iota \frac{\eta}{\sqrt{1 + \eta^2}} \right], \\ C_1^{(\iota)}(\eta) &= \frac{(-1)^\iota}{2} \left( \frac{g_{10}}{g_{01}} \right)^{1/2} \sqrt{\frac{\beta}{1 + \eta^2}}.\end{aligned}\quad (37)$$

Выразим угловое распределение  $G_a(\theta)$  как функцию  $\eta$ . С помощью уравнений (24) и (31), находим вначале связь между отклонениями  $\Delta\theta$  и  $\eta$ :

$$\theta_B - \theta = \Delta\theta\eta - \Delta\theta_B, \quad (38)$$

где

$$\Delta\vartheta = \frac{1}{\sin 2\theta_B} \sqrt{\frac{g_{01}g_{10}}{\beta}}, \quad \Delta\theta_B = -\frac{\alpha_0}{2 \sin 2\theta_B}. \quad (39)$$

Здесь  $|\Delta\vartheta|$  имеет смысл характерной дифракционной области, соответствующей изменению  $|\eta|$  от нуля до единицы.

Согласно (37) максимальная амплитуда дифрагированной нейтронной волны достигается при  $\eta = 0$ , т. е. если

$$\theta = \theta'_B, \quad \theta'_B = \theta_B + \Delta\theta_B. \quad (40)$$

Отсюда мы видим, что  $\theta'_B$  можно интерпретировать как угол Брэгга, сдвинутый на  $\Delta\theta_B$ .

Предполагая, что падающий пучок ориентирован вдоль уточненного угла Брэгга, т. е.  $\theta_0 = \theta'_B$ , мы переписываем угловое распределение в виде

$$G_a(\theta) \rightarrow \mathcal{G}_a(\eta) = \frac{1}{(2\pi\overline{\eta^2})^{1/4}} \exp\left\{-\frac{\eta^2}{4\overline{\eta^2}}\right\}, \quad (41)$$

где среднеквадратичная ширина

$$\overline{\eta^2} = (\sigma/\Delta\vartheta)^2. \quad (42)$$

Из определения  $\eta$  также следует, что

$$G_a(\theta) d\theta = -\sqrt{\Delta\vartheta} \mathcal{G}_a(\eta) d\eta. \quad (43)$$

Распределение интенсивности нейтронов по основанию треугольника Бормана обычно анализируется с помощью сканирующей щели, расположенной на задней поверхности кристалла и направленной вдоль оси  $z$ . Пусть  $\mathbf{r}_S = \{D, y_S, z\}$  является радиус-вектором какой-либо точки S внутри щели, в то время как  $y_0$  координата средней точки E на стороне АВ треугольника Бормана (см. рис. 1). Следуя [24] мы определяем приведенную координату этой точки как

$$p = \frac{\Delta y_S}{L}, \quad (44)$$

где  $2L$  — длина отрезка АВ,  $\Delta y_S = y_S - y_0$  — координата точки S относительно средней точки E. Определение (44) эквивалентно

$$p = 2 \frac{\Delta y_S/D}{\text{tg } \varphi_0 - \text{tg } \varphi_1}, \quad (45)$$

которое в случае симметричной дифракции,  $\beta = 1$ , сводится к определению  $p$ , данному в [22, 26]:

$$p = \frac{\text{tg } \epsilon}{\text{tg } \theta_B}, \quad (46)$$

где  $\epsilon$  — угол между отражающими плоскостями и прямой CS, соединяющей входную щель и точку S (см. рис. 1).

Теперь осталось разложить плоскую волну  $e^{i\boldsymbol{\kappa}(\theta) \cdot \mathbf{r}}$  в точке  $\mathbf{r} \approx \mathbf{r}_S$  по степеням  $\Delta\theta$ . Удерживая только линейное слагаемое в разложении  $\boldsymbol{\kappa}(\theta) \cdot \mathbf{r}$  и вводя обозначение  $\boldsymbol{\kappa}_\nu = \boldsymbol{\kappa}_\nu(\theta_B)$ , получаем

$$e^{i\boldsymbol{\kappa}(\theta) \cdot \mathbf{r}} = \exp\left[i\kappa D \sin \varphi_0 \left(1 - \frac{y_S/D}{\text{tg } \varphi_0}\right) \Delta\theta\right] \times \exp\{i\boldsymbol{\kappa}_0 \cdot \mathbf{r}\}. \quad (47)$$

С помощью соотношений

$$\text{tg } \varphi_0 + \text{tg } \varphi_1 = \frac{\sin 2\varphi_n}{\gamma_0 \gamma_1} \quad (48)$$

и

$$\text{tg } \varphi_0 - \text{tg } \varphi_1 = \frac{\sin 2\theta_B}{\gamma_0 \gamma_1}, \quad (49)$$

которые следуют из равенств

$$\varphi_0 + \varphi_1 = 2\varphi_n, \quad \varphi_0 - \varphi_1 = 2\theta_B, \quad (50)$$

мы находим, что

$$\frac{\Delta y_S}{D} = \frac{1}{2\gamma_0 \gamma_1} [\sin 2\varphi_n + p \sin 2\theta_B]. \quad (51)$$

Подстановка этой формулы в (47) после некоторых тригонометрических манипуляций дает

$$\exp\{i\boldsymbol{\kappa}(\theta) \cdot \mathbf{r}\} = \exp\left\{i \frac{\kappa D}{4\gamma_1} [1 - p] \alpha_0\right\} \times \exp\left\{i \frac{\pi D}{\Lambda_L} [1 - p] \eta\right\} e^{i\boldsymbol{\kappa}_0 \cdot \mathbf{r}}. \quad (52)$$

Учитывая уравнение (34), мы приходим к следующему выражению для волн в выходной щели:

$$\exp\{i\boldsymbol{\kappa}(\theta) \cdot \mathbf{r} + i\delta_i(\theta)D\} = \Phi(p; E) \times \exp\left\{-i \frac{\pi D}{\Lambda_L} [p\eta + (-1)^{\iota+1} \sqrt{1 + \eta^2}]\right\} e^{i\boldsymbol{\kappa}_0 \cdot \mathbf{r}}, \quad (53)$$

где использовано сокращение

$$\Phi(p; E) = \exp\left\{i \frac{\kappa D}{4} \left[\frac{g_{00}}{\gamma_0} + \frac{g_{11}}{\gamma_1} + p \left(\frac{g_{00}}{\gamma_0} - \frac{g_{11}}{\gamma_1}\right)\right]\right\}. \quad (54)$$

Подставляя (52) в (19), (20) и вводя обозначения

$$\mathcal{N} = \frac{\pi D}{|\Lambda_L|}, \quad (55)$$

$$\mathcal{S}_l(\eta) = -i(|\Lambda_L|/\Lambda_L) \left[ p\eta + (-1)^{l+1} \sqrt{1+\eta^2} \right], \quad (56)$$

находим интегральное представление для волновой функции в точке  $\mathbf{r} \approx \mathbf{r}_S$ :

$$\Psi_E^{(\nu)}(\mathbf{r}) = -\sqrt{\Delta\vartheta} \Phi(p; E) \times \int_C d\eta \mathcal{G}_a(\eta) \sum_{\iota=1,2} C_\nu^{(\iota)}(\eta) e^{\mathcal{N}\mathcal{S}_l(\eta)} e^{i\boldsymbol{\kappa}_\nu \cdot \mathbf{r}}, \quad (57)$$

где путь интегрирования  $C$  на комплексной плоскости  $\eta = \eta_r + i\eta_i$  является прямой линией, заданной условием  $\text{Im}[\alpha_0 + 2(g_{01}g_{10}/\beta)^{1/2}\eta] = 0$ .

Для кристалла, чья толщина  $D \gg |\Lambda_L|/\pi$ , большой параметр  $\mathcal{N}$  позволяет оценить интеграл по  $\eta$  с помощью метода перевала (см., например, [44]). Здесь мы предполагаем, что  $C(\eta)$ , а также  $G_a(\theta)$  — гладкие функции. Сначала из уравнения  $\mathcal{S}'_\iota(\eta) = 0$  находим седловые точки

$$\eta_0^{(\iota)} = (-1)^\iota \frac{p}{\sqrt{1-p^2}}. \quad (58)$$

Поскольку подынтегральная функция в (57) является аналитической, можно деформировать контур интегрирования  $C$  на комплексной плоскости  $\eta$ . Этот контур должен пересекать  $\iota$ -ю седловую точку вдоль линии, которая указывает наиболее крутой спуск функции  $\mathcal{S}_l(\eta)$ . Вдоль такой линии  $\text{Im} \mathcal{S}_l(\eta) = \text{const}$  и функция  $\text{Re} \mathcal{S}_l(\eta)$  максимальна в точке  $\eta_0$ . Эти требования выполняются, если эта линия направлена относительно действительной оси  $\eta_r$  под углом

$$\vartheta_\iota = \pm \frac{\pi}{2} - \frac{1}{2} \arg \mathcal{S}_l''(\eta_0), \quad (59)$$

где вторая производная  $\mathcal{S}_l(\eta)$  в седловой точке равна

$$\mathcal{S}_l''(\eta_0) = i(-1)^\iota \left( \frac{|\Lambda_L|}{\Lambda_L} \right) [1-p^2]^{3/2}. \quad (60)$$

Подставляя (60) в (59), получаем при  $|p| < 1$

$$\vartheta_\iota = (-1)^\iota \frac{\pi}{4} + \arg \sqrt{\Lambda_L}. \quad (61)$$

Оценивая интеграл (57) с помощью метода перевала, имеем

$$\Psi_E^{(\nu)}(\mathbf{r}) = -\sqrt{\Delta\vartheta} \mathcal{G}_a(\eta_0) \Phi(p; E) \times \sum_{\iota=1,2} C_\nu^{(\iota)} e^{\mathcal{N}\mathcal{S}_l(\eta_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{\mathcal{N}|\mathcal{S}_l''(\eta_0)|}} e^{i\vartheta_\iota} e^{i\boldsymbol{\kappa}_\nu \cdot \mathbf{r}}, \quad (62)$$

где амплитуды  $C_\nu^{(\iota)} = C_\nu^{(\iota)}(\eta_0^{(\iota)})$  в седловых точках имеют вид

$$C_0^{(\iota)} = \frac{1}{2} (1+p), \quad (63)$$

$$C_1^{(\iota)} = \frac{(-1)^\iota}{2} \left( \frac{g_{10}}{g_{01}} \beta \right)^{1/2} \sqrt{1-p^2},$$

а угловой множитель

$$\mathcal{G}_a(\eta_0) = \frac{1}{(2\pi\eta^2)^{1/4}} \exp \left\{ -\frac{1}{4\eta^2} \frac{p^2}{|1-p^2|} \right\}. \quad (64)$$

Подставляя (60), (61) и (63) в (62), получаем волновую функцию нейтронов в точке  $\mathbf{r} \approx \mathbf{r}_S$  внутри сканирующей щели. Для преломленных нейтронов волновая функция

$$\Psi_E^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \frac{\mathcal{A}_0(p)}{(1-p^2)^{1/4}} \left( \frac{1+p}{1-p} \right)^{1/2} \Phi(p; E) \times \sqrt{\frac{2\Lambda_L}{D}} \left[ e^{i\zeta(p)} + e^{-i\zeta(p)} \right] e^{i\boldsymbol{\kappa}_0 \cdot \mathbf{r}} \quad (65)$$

и для дифрагированных нейтронов

$$\Psi_E^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \frac{\mathcal{A}_1(p)}{(1-p^2)^{1/4}} \Phi(p; E) \times \sqrt{\frac{2\Lambda_L}{D}} \left[ e^{i\zeta(p)} - e^{-i\zeta(p)} \right] e^{i\boldsymbol{\kappa}_1 \cdot \mathbf{r}}, \quad (66)$$

где

$$\zeta(p) = \frac{\pi D}{\Lambda_L} \sqrt{1-p^2} + \frac{\pi}{4} \quad (67)$$

и амплитуды

$$\mathcal{A}_0(p) = -\sqrt{\Delta\vartheta} \mathcal{G}_a(\eta_0), \quad (68)$$

$$\mathcal{A}_1(p) = \left( \frac{g_{10}}{g_{01}} \beta \right)^{1/2} \mathcal{A}_0(p).$$

Соответствующие интенсивности монохроматических нейтронных пучков определяются как

$$I_\nu(p, E) = |\Psi_E^{(\nu)}(p)|^2. \quad (69)$$

Вводя обозначение

$$\frac{1}{\Lambda_L} = \frac{1}{\tau_L} + i \frac{1}{\sigma_L}, \quad (70)$$

мы получаем следующее распределение интенсивности преломленного пучка вдоль основания треугольника Бормана ( $|p| < 1$ ):

$$I_0(p, E) = \frac{|\mathcal{A}_0(p)|^2}{\sqrt{1-p^2}} \left( \frac{1+p}{1-p} \right) e^{-\mu D} \frac{2|\Lambda_L|}{D} \times \left[ \text{sh}^2 \left( \frac{\pi D}{\sigma_L} \sqrt{1-p^2} \right) + \cos^2 \left( \frac{\pi D}{\tau_L} \sqrt{1-p^2} + \frac{\pi}{4} \right) \right], \quad (71)$$

в то время как для распределения интенсивности дифрагированного пучка имеем

$$I_1(p, E) = \frac{|\mathcal{A}_1(p)|^2}{\sqrt{1-p^2}} e^{-\mu D} \frac{2|\Lambda_L|}{D} \times \left[ \text{sh}^2 \left( \frac{\pi D}{\sigma_L} \sqrt{1-p^2} \right) + \sin^2 \left( \frac{\pi D}{\tau_L} \sqrt{1-p^2} + \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (72)$$

Здесь

$$\mu = \frac{1}{2} \left[ \frac{\mu_0}{\gamma_0} + \frac{\mu_1}{\gamma_1} + p \left( \frac{\mu_0}{\gamma_0} - \frac{\mu_1}{\gamma_1} \right) \right], \quad (73)$$

$\mu_0$  и  $\mu_1$  — коэффициенты поглощения для нейтронов, падающих при  $1 \gg |\Delta\theta| \gg |\Delta\vartheta|$ , когда нет дифракции, с волновыми векторами соответственно  $\kappa_0$  и  $\kappa_1$ . Они определяются как

$$\mu_\nu = \kappa \text{Im } g_{\nu\nu} = \sigma_t(\kappa_\nu)/v_0, \quad (74)$$

где  $\sigma_t(\kappa_\nu)$  — полное сечение рассеяния и поглощения элементарной ячейкой нейтронов, имеющих в начальном состоянии волновой вектор  $\kappa_\nu$ . В соответствии с оптической теоремой [45]

$$\sigma_t(\kappa_\nu) = \frac{4\pi}{\kappa} \text{Im } F(\kappa_\nu, \kappa_\nu). \quad (75)$$

Вне треугольника Бормана вблизи точек  $p = \pm 1$  эти интенсивности принимают вид

$$I_0(p, E) = \frac{|\mathcal{A}_0(p)|^2}{\sqrt{p^2-1}} \left| \frac{1+p}{1-p} \right| e^{-\mu D} \frac{2|\Lambda_L|}{D} \times \left[ \text{sh}^2 \left( \frac{\pi D}{\tau_L} \sqrt{p^2-1} \right) + \sin^2 \left( \frac{\pi D}{\sigma_L} \sqrt{p^2-1} + \frac{\pi}{4} \right) \right] \quad (76)$$

и

$$I_1(p, E) = \frac{|\mathcal{A}_1(p)|^2}{\sqrt{p^2-1}} e^{-\mu D} \frac{2|\Lambda_L|}{D} \times \left[ \text{sh}^2 \left( \frac{\pi D}{\tau_L} \sqrt{p^2-1} \right) + \cos^2 \left( \frac{\pi D}{\sigma_L} \sqrt{p^2-1} + \frac{\pi}{4} \right) \right]. \quad (77)$$

Вне треугольника Бормана интенсивность дифрагированных нейтронов (77) в сильнопоглощающем кристалле сначала быстро падает, а затем начинает расти с увеличением  $|p|$  вследствие гиперболического синуса. Но в этой области наш подход неприемлем, так как отклонение  $|\Delta\theta|$  становится слишком большим.

Чтобы проиллюстрировать роль резонансного рассеяния, мы провели численные расчеты для симметричной дифракции Лауэ в изотропном кристалле, содержащем одно резонансное ядро в каждой элементарной ячейке. Мы пренебрегли амплитудой потенциального рассеяния по сравнению с резонансной амплитудой. Последняя описывалась формулой (16) с фактором Дебая – Воллера  $e^{-2W(Q)} = 0.8$ . В этом приближении коэффициент поглощения, зависящий от параметра расстройки резонанса  $x = 2(E - E_0)/\Gamma$ , записывается как

$$\mu(x) = \frac{\mu_{res}}{1+x^2}, \quad (78)$$

где  $\mu_{res}$  — резонансное значение коэффициента поглощения:

$$\mu_{res} = \frac{4\pi}{\kappa^2 v_0} \left( \frac{2I_e + 1}{2I_g + 1} \right) \frac{\Gamma_n}{\Gamma}. \quad (79)$$

Что касается функций  $1/\tau_L$  и  $1/\sigma_L$ , то они определяются следующими выражениями:

$$\frac{1}{\tau_L} = -\frac{\mu_{res}}{2\pi\gamma_0} \frac{x e^{-W(Q)}}{1+x^2}, \quad \frac{1}{\sigma_L} = \frac{\mu_{res}}{2\pi\gamma_0} \frac{e^{-W(Q)}}{1+x^2}. \quad (80)$$

Интенсивности дифрагированного и преломленного пучков как функции  $p$ , рассчитанные в единицах  $e^{-\mu_{res}D/\gamma_0}$  с  $\gamma_0 \approx 1$  и  $G_a(\theta) = 1$ , приведены на рис. 2 и 3 для  $\mu_{res}D = 20$ , и на рис. 4, 5 для более толстых кристаллов с  $\mu_{res}D = 100$ .

#### 4. УСРЕДНЕННЫЕ ИНТЕНСИВНОСТИ

Напомним, что до сих пор мы рассматривали нейтронные волны, исходящие из нитевидного источника с координатами  $x = y = 0$  и  $z$ , изменяющимися от  $-\infty$  до  $+\infty$ . А теперь мы проанализируем роль конечной ширины  $l$  входной щели, рассматривая ее как сумму параллельных нитевидных источников, распределенных по интервалу  $-l/2 < y < l/2$ , что соответствует изменению координаты  $p$  в интервале шириной  $\Delta p = l/L$ . В случае симметричной дифракции  $\Delta p = l \text{ctg } \theta_B/D$ .

Нейтронная волна в любой точке  $p$  сканирующей щели представляет собой суперпозицию волн, излучаемых каждой такой нитью, а затем проходящую через область кристалла, ограниченную собственным треугольником Бормана. Результирующая волна в точке  $p$  будет

$$\tilde{\Psi}_E^{(\nu)}(p) = \int_{-\Delta p/2}^{\Delta p/2} \Psi_E^{(\nu)}(p + \xi) d\xi. \quad (81)$$



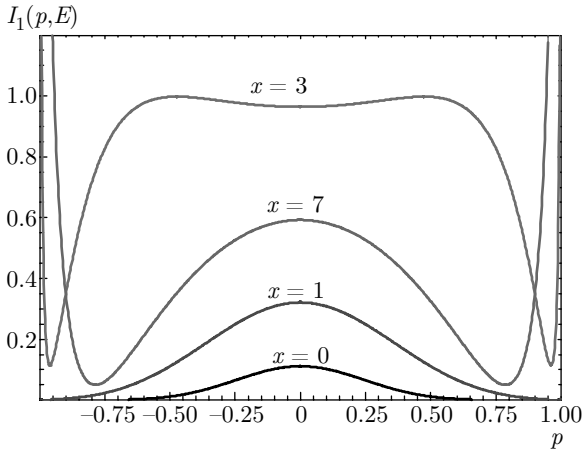


Рис. 2. Распределение интенсивности  $I_1(p, E)$  монохроматического дифрагированного пучка вдоль основания треугольника Бормана для нескольких значений параметра расстройки резонанса  $x$  при  $\mu_{res}D = 20$

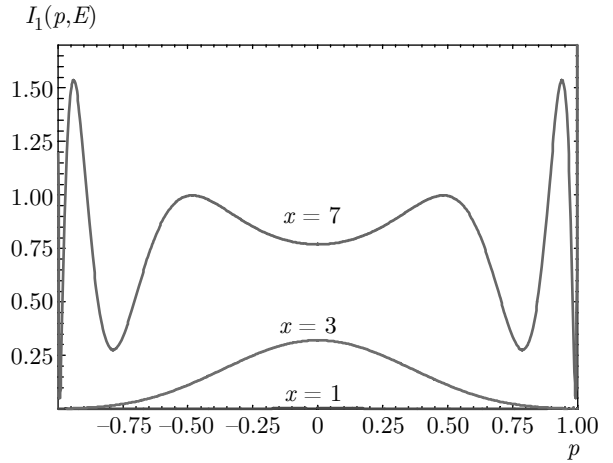


Рис. 4. То же, что и на рис. 2, но при  $\mu_{res}D = 100$

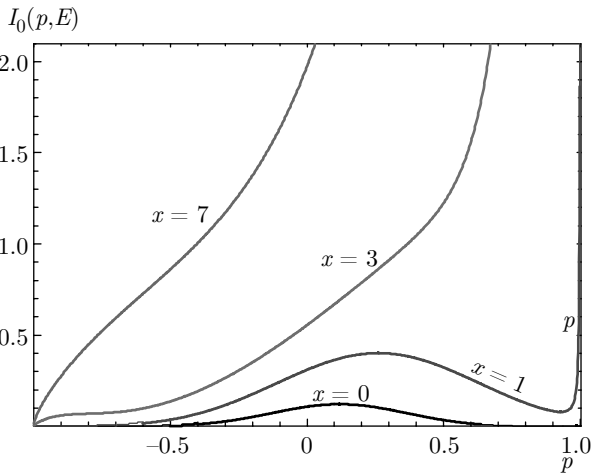


Рис. 3. Распределение интенсивности  $I_0(p, E)$  монохроматического преломленного пучка вдоль основания треугольника Бормана для нескольких значений параметра расстройки резонанса  $x$  при  $\mu_{res}D = 20$

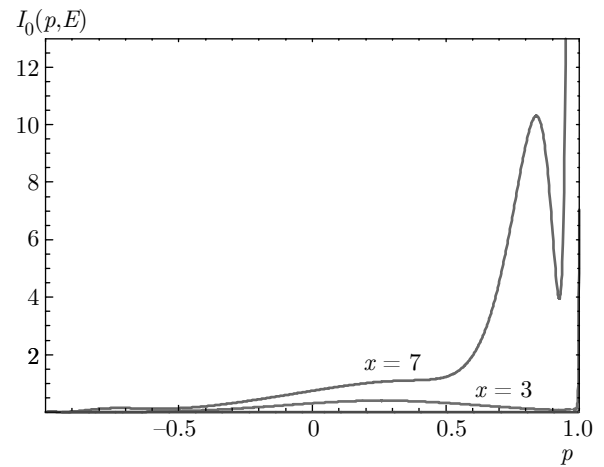


Рис. 5. То же, что и на рис. 3, но при  $\mu_{res}D = 100$

Соответствующая интегральная интенсивность

$$\tilde{I}_\nu(p) = \int_0^\infty |G_e(E)|^2 |\tilde{\Psi}_E^{(\nu)}(p)|^2 dE. \quad (82)$$

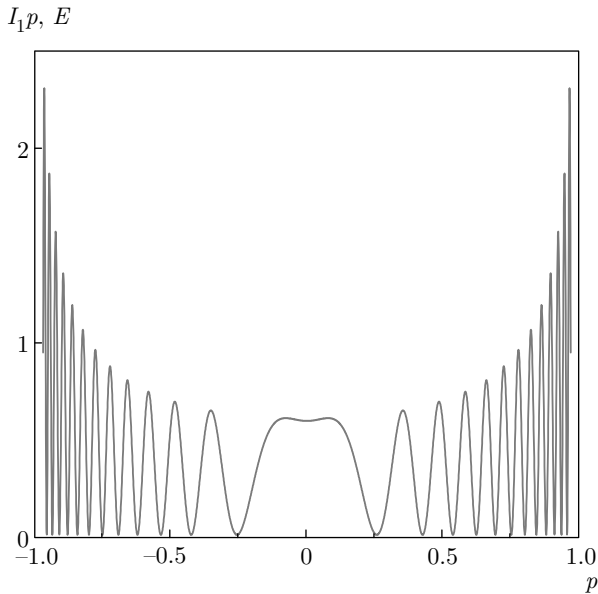
Кроме того, когда сканирующая щель имеет ширину  $l$ , интенсивность  $\tilde{I}_\nu(p, E)$  должна быть проинтегрирована по  $p$  от  $\bar{p} - \Delta p/2$  до  $\bar{p} + \Delta p/2$ , где  $\bar{p}$  обозначает координату середины щели. Таким образом, поток нейтронов в единицу времени, выходящий из сканирующей щели в  $\nu$ -ом направлении, определяется выражением

$$J_\nu(\bar{p}) = \bar{v} \int_{\bar{p}-\Delta p/2}^{\bar{p}+\Delta p/2} \tilde{I}_\nu(p) dp, \quad (83)$$

где  $\bar{v}$  — скорость нейтронов, связанная со средней энергией  $\bar{E}$ :

$$\bar{v} = \hbar \bar{\kappa} / m, \quad \bar{\kappa} = \sqrt{2m\bar{E}} / \hbar. \quad (84)$$

Мы сравнили наши результаты с данными Шалла [30], который наблюдал симметричную дифракцию Лауэ нейтронов на плоскостях (111) кристалла кремния. Кремний имеет структуру алмаза с постоянной решетки  $a = 5.4311 \text{ \AA}$  и содержит 8 атомов в элементарной ячейке [46]. Расстояние между соседними плоскостями (111) равно  $d = a/\sqrt{3}$ . Соответствующие амплитуды рассеяния



**Рис. 6.** Интенсивность монохроматического пучка нейтронов, дифрагированного на плоскостях (111) кристалла кремния, в зависимости от приведенной координаты  $p$ . Длина волны нейтронов  $\lambda = 1.034 \text{ \AA}$

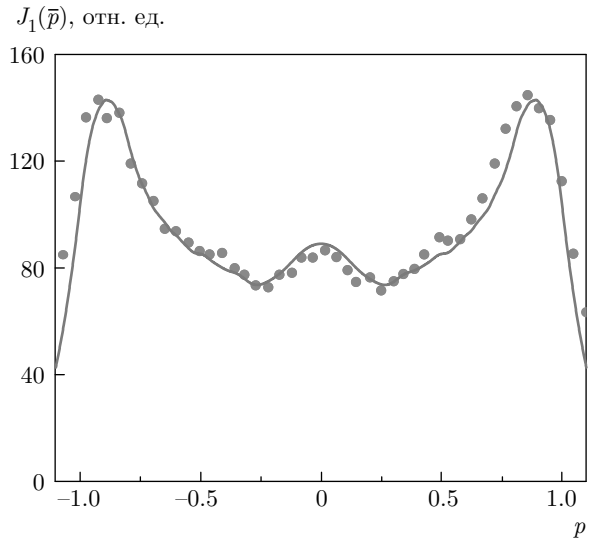
$$F(\kappa_0, \kappa_0) = F(\kappa_1, \kappa_1) = -8\bar{b}, \quad (85)$$

$$(F(\kappa_0, \kappa_1)F(\kappa_1, \kappa_0))^{1/2} = 4\sqrt{2} \cdot \bar{b}e^{-W(Q)}, \quad (86)$$

где вектор рассеяния  $Q = h = 2\pi n/d$  и  $n$  — целое число. Мы брали  $n = 1$ .

В численных расчетах интенсивности  $I_1(p, E)$  мы использовали следующие экспериментальные параметры: длина волны  $\lambda = 1.034 \text{ \AA}$ , толщина кристалла  $D = 0.3315 \text{ см}$ , длина когерентного рассеяния  $\bar{b} = 0.41786 \cdot 10^{-12} \text{ см}$  и фактор  $e^{-W(Q)} = 0.9984$  [30]. Вычисленная зависимость  $I_1(p, E)$  от  $p$  изображена на рис. 6, где отчетливо видна волнистая структура, становящаяся все более плотной по мере приближения  $p$  к краям треугольника Бормана. Эти расчеты были выполнены в приближении Като  $\sigma_a \gg |\Delta\vartheta|$  в пренебрежении конечными размерами щелей.

Экспериментальные кривые [30] демонстрируют слабые осцилляции только в центральной части треугольника Бормана при  $p$  близким к нулю. Чтобы воспроизвести их мы провели расчеты потока дифрагированных нейтронов с приведенными выше параметрами и при ширине  $l = 0.13 \text{ мм}$  для обеих щелей, выбирая значения дисперсий  $\sigma_e = 1.8 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$  и  $\sigma = 0.0025$ . Теоретическая кривая, усредненная таким образом, сравнивается с экспериментальными данными Шалла на рис. 7. Следует отметить, что все эти экспериментальные данные оценены весьма грубо при сканировании статьи [30].



**Рис. 7.** Усредненный поток нейтронов, дифрагированных на плоскостях (111) кристалла кремния, испускаемый из выходной щели. Экспериментальные данные [30] указаны кружками, расчеты — сплошной линией

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы построили общую теорию дифракции Лауэ в идеальных кристаллах нейтронов с малой энергией, испускаемых из узкой входной щели. Учтено резонансное рассеяние нейтронов на ядрах по аналогии с теорией [8]. Кроме того, мы включили в наши уравнения угловое распределение падающих нейтронов  $G_a(\theta)$  с произвольной дисперсией  $\sigma$ , которая может быть порядка дифракционного углового интервала  $|\Delta\vartheta|$ , в то время как теория [26–29] рассматривает только случай  $\sigma \gg |\Delta\vartheta|$ . В этом предельном случае в отсутствие резонансов выведенные формулы хорошо коррелируют с формулами динамической дифракционной теории рентгеновских лучей в совершенных кристаллах [24].

На рис. 2–5 показаны распределения прошедших и дифрагированных нейтронов, рассчитанные в окрестности изолированного резонанса для нескольких значений расстройки резонанса  $x$ . Они напоминают картины рентгеновской оптики [24]. А именно, вдали от резонанса,  $x \gg 1$ , где кристалл поглощает слабо, интенсивность  $I_1(p, E)$  дифрагированного луча стремится к бесконечности на границах треугольника Бормана,  $p \rightarrow \pm 1$ , а преломленный луч в основном концентрируется в прямом направлении,  $p \rightarrow 1$ . В то же время при приближении к резонансу,  $x \rightarrow 0$ , когда поглощение возрастает, обе кривые

сконцентрированы в основном в центре треугольника Бормана  $p = 0$ . Если имеет место сильное ядерное поглощение, из двух волн, проходящих кристалл в направлении вперед или в направлении дифракции, только слабопоглощенная волна достигает выходной поверхности кристалла. В соответствии с (71) и (72) ее интенсивность

$$I_\nu(p, E) \sim \exp\left(-\mu_s D + \frac{\pi D}{\sigma_L} \sqrt{1-p^2}\right), \quad (87)$$

где  $\nu = 0$  или 1. Отсюда мы видим, что эта функция имеет максимум при  $p = 0$  и убывает с ростом  $|p|$ . Следовательно, подавление захвата нейтронов ядрами ослабевает с отклонением от центра треугольника Бормана. Другими словами, нейтронные волны движутся внутри кристалла в основном вдоль отражающих плоскостей. Это качественно объясняет поведение кривых на рис. 2 и 4 для малых  $x$ , которые описывают дифракцию близко к резонансу.

В то время как в слабопоглощающем кристалле волнистая структура вдоль задней поверхности кристалла проявляется весьма явно (см. рис. 6), она становится смазанной в случае сильного поглощения, как показано на рис. 2–4. Наиболее отчетливо эта структура появляется на крыле резонанса при  $x = 7$  в толстых кристаллах с  $\mu_{res} D = 100$  (см. рис. 4, 5). Кривые  $x = 0$  и 1 там практически совпадают с осью  $p$ . Любопытно, что на рис. 2 кривые  $x = 3$  и  $x = 7$  расположены в обратном порядке в центральной части треугольника Бормана. Это еще одно проявление все той же двухволновой интерференции, отображенной в квадрате синуса в (72). Усреднение по ширине щелей интенсивности дифрагированного луча  $I_1(p, E)$  в слабопоглощающем кристалле подавляет его бесконечный рост при  $p \rightarrow \pm 1$  и сдвигает максимумы  $I_1(p, E)$  внутрь треугольника Бормана. Тот же эффект обеспечивается угловым распределением  $G_a(\theta)$  с дисперсией  $\sigma$ , сравнимой с интервалом дифракции  $|\Delta\vartheta|$ . В предельном случае  $\sigma \ll |\Delta\vartheta|$  кривая  $I_1(p, E)$  коллапсирует в узкий пик при  $p = 0$  подобный дельта-функции.

Для понимания роли угловой расходимости пучка нейтронов желательно проведение экспериментов, подобных экспериментам [19] по подавлению захвата нейтронов. Отметим, что экспериментальные данные в [19] значительно отличаются от результатов, предсказанных теорией для плоских волн [8]. В любом случае, мы надеемся, что наша теория может быть использована для точного определения длин ядерного рассеяния и параметров нейтронных резонансов в экспериментах по дифракции, аналогичных исследованиям Шалла. Она также может

быть полезна для планирования других нейтронно-оптических экспериментов подобных [33–37].

## ЛИТЕРАТУРА

1. И. И. Гуревич, Л. В. Тарасов, *Физика нейтронов низких энергий*, Наука, Москва (1965).
2. *Динамические свойства твердых тел и жидкостей*, ред. С. Лавси, Т. Шпрингер, Мир, Москва (1980).
3. H. Rauch and D. Petráček, in: *Neutron Diffraction*, ed. by H. Duchs, Springer, Berlin (1978), p. 303–351.
4. V. F. Sears, *Phys. Rep.* **82**, 1 (1982).
5. Ю. Г. Абов, Н. О. Елютин, А. Н. Тюлюсов, *ЯФ* **65**, 1989 (2002) [*Phys. Atom. Nucl.* **65**, 1933 (2002)].
6. Ю. Г. Абов и Н. О. Елютин, *Когерентное рассеяние нейтронов*, МИФИ, Москва (1988).
7. M. L. Goldberger and F. Seitz, *Phys. Rev.* **71**, 294 (1947).
8. Ю. Каган, А. М. Афанасьев, *ЖЭТФ* **49**, 1504 (1965) [*Sov. Phys. JETP* **22**, 1032 (1966)].
9. V. F. Sears, *Canad. J. Phys.* **56**, 1261 (1978).
10. А. М. Афанасьев, Ю. Каган, *ЖЭТФ* **48**, 327 (1965) [*Sov. Phys. JETP* **21**, 2151 (1965)].
11. J. P. Hannon and G. T. Trammell, *Phys. Rev.* **169**, 315 (1968).
12. J. P. Hannon and G. T. Trammell, *Phys. Rev.* **186**, 306 (1969).
13. J. P. Hannon, N. J. Carron, and G. T. Trammell, *Phys. Rev.* **9**, 2791 (1974).
14. A. Ya. Dzyublik, *Phys. Stat. Sol. (b)* **123**, 53 (1984); **134**, 503 (1986).
15. А. Я. Дзюблик, *ЖЭТФ* **85**, 1658 (1983) [*Sov. Phys. JETP* **58**, 965 (1983)].
16. В. А. Беляков, *УФН* **115**, 553 (1975) [*Sov. Phys. USP* **18**, 267 (1975)].
17. G. V. Smirnov, in *The Rudolf Mössbauer Story*, ed. by M. Kalvius and P. Kienle, Springer, Heidelberg (2012).
18. С. Ш. Шильштейн и др., *Письма ЖЭТФ* **12**, 80 (1970) [*JETP Lett.* **12**, 56 (1970)].
19. С. Ш. Шильштейн, В. А. Соменков, В. П. Докашенко, *Письма ЖЭТФ* **13**, 301 (1971) [*JETP Lett.* **13**, 214 (1971)].

20. G. Borrmann, *Z. Physik* **42**, 157 (1941).
21. W. H. Zachariasen, *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals*, Wiley, New York (1945).
22. B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.* **36**, 681 (1964).
23. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика*, Наука, Москва (1982).
24. André Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction*, Oxford Univ. Press Inc., New York (2001).
25. M. K. Balyan, *Acta Cryst. A* **74**, 204 (2018).
26. N. Kato, *Acta Cryst.* **13**, 349 (1960).
27. N. Kato, *Acta Cryst.* **14**, 526 (1961).
28. N. Kato, *Acta Cryst.* **14**, 627 (1961).
29. N. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn* **19**, 971 (1964).
30. C. G. Shull, *Phys. Rev. Lett.* **21**, 1585 (1968).
31. C. G. Shull, *J. Appl. Phys.* **6**, 257 (1973).
32. C. G. Shull and W. M. Shaw, *Z. Naturforsch.* **28a**, 657 (1973).
33. V. V. Fedorov, V. V. Voronin, and E. G. Lapin, *J. Phys. G* **18**, 1133 (1992).
34. V. V. Voronin, I. A. Kuznetsov, E. G. Lapin et al., *Phys. At. Nucl.* **72**, 470 (2009).
35. V. V. Voronin, V. V. Fedorov, I. A. Kuznetsov, et al., *Phys. Proc.* **17**, 232 (2011).
36. Е. О. Вежлев и др., Письма ЖЭТФ **96**, 3 (2012) [*JETP Lett.* **96**, 1 (2012)].
37. В. В. Воронин и др., Письма ЖТФ **43**, 75 (2017) [*Technical Phys. Lett.* **43**, 270 (2017)].
38. А. Я. Дзюблик, В. И. Слисенко, В. В. Михайловский, *УФЖ* **63**, 174 (2018).
39. А. Я. Дзюблик, В. Ю. Спивак, *УФЖ* **61**, 826 (2016).
40. А. Ахизер, И. Померанчук, *Некоторые проблемы теории ядра*, Гостехиздат, Москва (1950).
41. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1966).
42. G. Leinweber, *Neutron Capture and Total Cross Section Measurements of Cadmium at the RPI LINAC*, <https://accapp17.org/wp-content/uploads/2017/09/Neutron-Capture>.
43. М. Гольдбергер, К. Ватсон, *Теория столкновений*, Мир, Москва (1967).
44. М. А. Лаврентьев, В. В. Шабат, *Методы теории функций комплексного переменного*, Наука, Москва (1973).
45. А. Г. Ситенко, *Теория рассеяния*, Выща Школа, Киев (1975); Springer, Berlin Heidelberg (1999).
46. J. T. Yardley, *Silicon Basics — General Overview*, <https://www1.columbia.edu/sec/itc/ee/test2/pdf%20files/silicon%20basics.pdf>.