

УДК 53.07+538.97

НЕЙТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ: ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ И ПРИБОРНОЕ ОСНАЩЕНИЕ

© 2022 г. А. С. Иванов¹, П. А. Алексеев^{2,3,*}

¹ Институт Лауэ–Ланжевена, Гренобль, Франция

² Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

³ Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия

*E-mail: Alekseev_PA@nrcki.ru

Поступила в редакцию 01.06.2020 г.

После доработки 08.10.2020 г.

Принята к публикации 08.10.2020 г.

Работа представляет собой краткое описание физических и методических принципов метода неупругого рассеяния тепловых нейтронов для исследований конденсированных сред. Основные сведения, существенные для понимания экспериментального метода, изложены в сжатой и доступной неспециалисту форме. К ним относятся кристаллическая и времяпролетная экспериментальные техники, использование когерентного и некогерентного рассеяния нейтронов, основные подходы к изучению атомной и магнитной динамики конденсированных сред и другие вопросы. Представлены актуальные типы источников нейтронного излучения и способы доставки нейтронного потока к образцу. Кратко описаны основные принципы работающих нейтронных спектрометров. Обсуждается доступное и перспективное оборудование для создания и изменения физических условий на образце, таких как температура, давление, магнитное поле.

DOI: 10.31857/S0023476122010076

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение. Основные понятия и представления

1. Нейтронная спектроскопия атомно-колебательных и магнитных возбуждений

1.1. Атомная динамика

1.2. Магнитные возбуждения

2. Тенденции развития нейтронной спектроскопии

2.1. Особенности развития источников нейтронов

2.2. Структура приборного парка мировых центров, совершенствование TAS- и TOF-техники, оборудование для создания условий на образце

Заключение

ВВЕДЕНИЕ. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Неупругое рассеяние тепловых нейтронов в настоящее время служит основным универсальным методом для исследования атомной и магнитной динамики самых разнообразных материалов, для получения информации о природе и характере сил и взаимодействий, определяющих основные свойства и строение вещества. В настоящей работе ограничимся обсуждением спектро-

скопии тепловых нейтронов и не будем касаться спектроскопии “обратного рассеяния” и техники “спин-эхо”. Эти темы заслуживают отдельного рассмотрения как с точки зрения физических задач, так и методики. “Тепловыми” условно называют нейтроны с энергиями в области $\sim 10^{-2}$ – 10^{-1} эВ, или, в более привычных температурных единицах, 100–1000 К.

Соизмеримость амплитуд ядерного и магнитного (обусловленного присущим нейтрону спиновым магнитным моментом) рассеяния позволяет использовать одну и ту же экспериментальную технику для изучения как решеточных, так и магнитных возбуждений. Детальное рассмотрение свойств и особенностей взаимодействия тепловых нейтронов с веществом приведено в монографиях [1–4].

В эксперименте по рассеянию нейтронов, как и для любого другого излучения, ставится задача контроля за длиной волны нейтронов — или их энергией — до и/или после акта рассеяния на образце, произошедшем в заданном угловом интервале.

Основные принципы нейтронной спектроскопии связаны с использованием корпускулярно-волнового дуализма как фундаментального свойства элементарных частиц в квантовой механике. Соответственно определенная длина волны

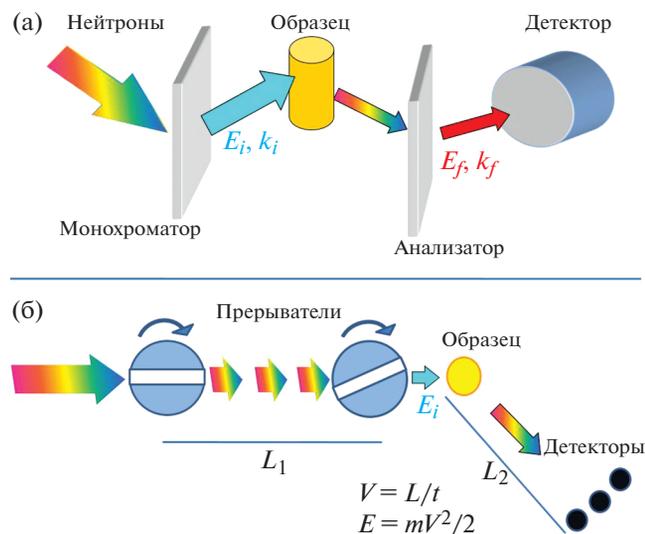


Рис. 1. Принципиальные схемы TAS (а) и TOF (б) спектрометров. Пояснения отдельных структурных узлов спектрометров даны в тексте.

нейтронов в требуемом обычно интервале может быть выделена либо за счет дифракции на упорядоченных атомных решетках (кристаллах), либо за счет определения времени пролета нейтронами известного расстояния и, значит, их скорости, связанной с энергией или длиной волны квантовой частицы с ненулевой массой. В итоге все методы в технике нейтронной спектроскопии делятся на “кристаллические” и “времяпролетные”. Оба этих базовых метода широко применяются в разнообразных вариантах инструментов для нейтронного эксперимента, причем возможна комбинация различных методов в рамках одного такого прибора.

Существуют два основных класса нейтронных спектрометров — так называемые трехосные спектрометры (в английской аббревиатуре **TAS**: three axis spectrometer) и времяпролетные спектрометры (**TOF**: time-of-flight). Эти два класса приборов позволяют получать информацию о деталях дисперсии (зависимости энергии квазичастицы $\hbar\omega$ от волнового вектора \mathbf{q}) конкретных мод возбуждений $\omega(\mathbf{q})$ и обобщенных спектральных характеристиках всего спектра возбуждений, таких как плотность фоновых состояний (в англоязычной литературе устоялся термин **PDOS** — phonon density of states), как функции энергии $g(E)$ или частоты $g(\omega)$ возбуждений¹. Принципи-

¹ Энергия связана с частотой через постоянную Планка и с температурой через постоянную Больцмана: $E = \hbar\omega = k_B T$. Колебания решетки или фононы чаще обсуждают в терминах частоты, тогда как для других возбуждений, в частности электронной природы, более употребительным параметром является энергия, хотя обе величины, конечно, эквивалентны. Примерные соотношения величин для различных единиц измерения энергии, используемых в спектроскопии: $1 \text{ мэВ} \approx 0.242 \text{ ТГц} \approx 8 \text{ см}^{-1} \approx 11.6 \text{ К}$.

альные схемы этих спектрометров приведены на рис. 1.

На рис. 1а показано, как полихроматический (“белый”) нейтронный пучок после отражения под углом Брэгга на монохроматоре становится монохроматическим с номинальной энергией E_i и волновым вектором \mathbf{k}_i . Затем он попадает на исследуемый объект, где в результате взаимодействия с материалом нейтроны изменяют свою энергию и импульс (последний связан также с углом рассеяния). Конкретные величины конечной энергии E_f и волнового вектора \mathbf{k}_f определяются брэгговской дифракцией на кристалле-анализаторе. Далее эти нейтроны, отобранные анализатором, регистрируются детектором.

На рис. 1б показано, как непрерывный полихроматический поток нейтронов, попадая на совокупность двух синхронно вращающихся прерывателей, изготовленных из поглощающего нейтроны материала со щелями для пропускания нейтронов, превращается в последовательность коротких импульсов с энергией E_i . Количество и характеристики таких прерывателей (или “чопперов”, от англ. chopper) могут варьироваться в зависимости от требуемых параметров монохроматических импульсов. Значение E_i определяется фазовым сдвигом между прерывателями, соотношенным с пролетным расстоянием L_1 . Энергия рассеянных образцом нейтронов E_f определяется по времени пролета ими расстояния L_2 от образца до регистрирующего их детектора. Использование позиционно-чувствительных детекторов большой площади позволяет одновременно регистрировать нейтроны с разными волновыми векторами, что делает эту технику весьма эффективной для получения спектра возбуждений образца в большом объеме пространства параметров переданной энергии и импульса.

Очевидной особенностью экспериментов по нейтронной спектроскопии является необходимость определения энергии нейтронов как до, так и после рассеяния на образце. Действительно, для изучения структурных — или статических — свойств вещества основным источником информации является упругое рассеяние нейтронов, т.е. рассеяние без изменения энергии. Сечение упругого рассеяния обычно существенно выше сечения неупругого рассеяния, которое если и проявляется в структурном эксперименте, то только в виде фона, сравнительно слабо изменяющегося в зависимости от угла рассеяния. Поэтому при изучении упругого рассеяния длина волны может определяться только один раз — либо до, либо после рассеяния на образце, так как сравнительно сильное упругое рассеяние само “отбирает” ту же длину волны в другом “плече” дифракционного эксперимента. В экспериментах по нейтронной спектроскопии предметом изучения является не



Рис. 2. Трехосный спектрометр IN14 в ИЛЛ (Гренобль, Франция) [5]: 1 – массивная защита монохроматора, 2 – стол образца со сверхпроводящим магнитом, 3 – анализатор, 4 – детектор, каждый в своей защите.

только угловая зависимость сечения рассеяния, но и его зависимость от переданной энергии в акте рассеяния. Поэтому измерения динамики вещества, как правило, являются технически более сложными, трудоемкими и требующими более длительного времени, чем дифракционные эксперименты, поскольку кроме отмеченной относительно слабой интенсивности сигнала неупругого рассеяния нейтронов в них требуется определять энергию нейтронов в обоих “плечах” эксперимента – как до, так и после акта рассеяния на образце.

Примеры практической реализации идей трехосного спектрометра и спектрометра по времени пролета показаны на рис. 2, 3 (TAS- и TOF-спектрометры соответственно). Обычно трехосные спектрометры более “открыты” для непосредственного доступа к их отдельным узлам (фото на рис. 2) и поэтому более пригодны для быстрого изменения некоторых элементов приборной конфигурации. TOF-спектрометры чисто внешне могут представлять собой массивный объем, иногда в десятки кубических метров, с менее видимой и доступной внутренней структурой (схема на рис. 3).

Особенностью TOF-спектрометра на рис. 3 в отличие от общей схемы, приведенной на рис. 1б, является исходно прерывистая временная структура нейтронного пучка (50 Гц в конкретном варианте источника ISIS). То есть функция первого прерывателя на рис. 1б обеспечивается импульсным источником нейтронов. Различные типы источников нейтронов рассмотрены ниже.

Наряду с приборами по приведенной выше схеме (с некоторыми вариациями в реализации монохроматизации исходного пучка нейтронов) получили распространение TOF-спектрометры, в которых на образец падает полихроматический пучок, а монохроматизация осуществляется для рассеянных нейтронов. Эта схема, получившая название “обратная геометрия” (inversed geometry), в отличие от схемы “прямой геометрии” (direct geometry, представленная на рис. 1б) может быть особенно удобна для импульсных источников нейтронов (например, импульсный ускоритель заряженных частиц с мишенью, служащей источником нейтронов), так как технически проще. Она позволяет работать без механических прерывателей и обеспечивает большой телесный угол регистрации рассеянных нейтронов за счет компактности вторичного спектрометра. Дело в том, что в этой схеме вторая пролетная база L_2 , где теперь размещается кристаллический анализатор, не вносит определяющего вклада в энергетическое разрешение спектрометра и, следовательно, может быть сколь угодно короткой для удобства регистрации в широком интервале углов рассеяния. Разрешение спектрометра обратной геометрии определяется прежде всего расстоянием от источника до образца и длительностью нейтронного импульса.

Характерной особенностью спектрометров прямой геометрии является то обстоятельство, что их энергетическое разрешение в наиболее распространенной схеме работы с $E_i > E_f$ улучшается по мере увеличения переданной энергии $\hbar\omega = E_i - E_f$, так как в любом методе точность

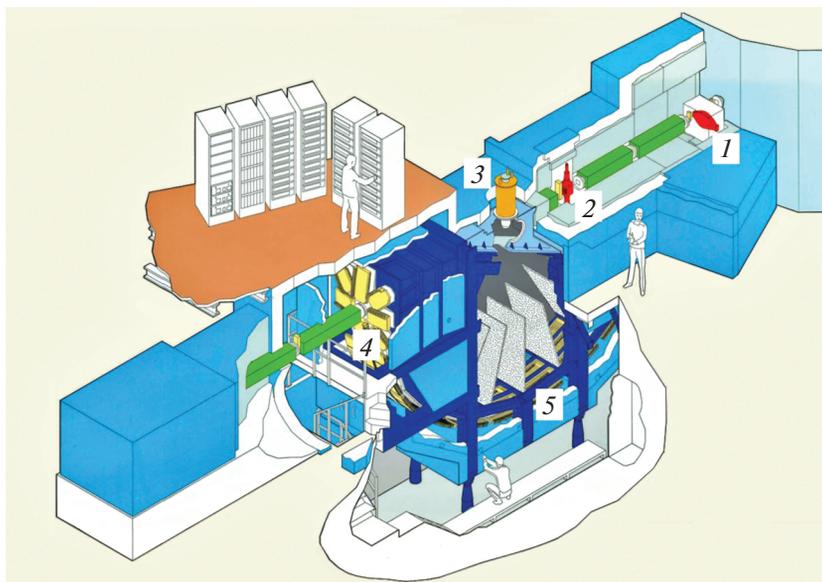


Рис. 3. Спектрометр по времени пролета “MARI” на импульсном источнике нейтронов ISIS (Лаборатория Резерфорда–Эплтона, Дидкот, Великобритания) [6]: 1 – прерыватель для уменьшения фона, 2 – ферми-прерыватель для монохроматизации, 3 – образец в криостате, 4, 5 – многодетекторные системы, обеспечивающие регистрацию нейтронов под углами рассеяния от 3° до 134° в вертикальной плоскости рассеяния.

определения энергии естественным образом лучше при меньших значениях этой энергии. Следовательно, низкоэнергетическая часть спектра измеряется с меньшей точностью. Для “компенсации” этого обстоятельства и получения информации в разных участках измеряемого спектра возбуждений образца может потребоваться несколько измерений с разными значениями E_i . С этой целью конструкция спектрометра прямой геометрии позволяет варьировать значение падающей энергии для выбора наиболее подходящей ее величины. Это осуществляется, например, за счет изменения скорости вращения прерывателей, их относительной фазировки.

В спектрометрах обратной геометрии изменение фиксированной рассеянной энергии обычно не предусматривается. В современных работающих схемах эта энергия практически всегда выбирается за счет отражения от кристалла-анализатора. При измерении спектра возбуждений разрешение такого спектрометра изменяется “естественным” образом, монотонно ухудшаясь по мере увеличения измеряемой энергии возбуждения. Ограничением для подобных спектрометров является то обстоятельство, что рассеянная энергия по ряду причин, как правило, выбирается сравнительно низкой. Это сужает доступную для измерений область в пространстве переданных энергий и импульсов нейтронов. Приборы обратной геометрии могут реализовываться как во время-пролетном, так и в кристаллическом вариантах техники изменения энергии падающих на образец нейтронов.

1. НЕЙТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМНО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ И МАГНИТНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

Обычно результаты спектроскопических измерений на нейтронном спектрометре представляются в виде так называемого дважды дифференциального сечения рассеяния $\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}$, которое определяется как отношение интенсивности (счет зарегистрированных нейтронов в единицу времени dC/dt) в заданном интервале рассеянных углов $d\Omega$ и энергий $d(\hbar\omega)$ к величине этих интервалов и к плотности потока падающих на образец нейтронов j_0 :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{1}{j_0} \frac{dC/dt}{d\Omega d\omega}.$$

Эта величина в теории выражается через функцию волнового вектора \mathbf{Q} и энергии $\hbar\omega$, которые вследствие законов сохранения энергии и импульса совпадают с переданными в процессе рассеяния моментом $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ и энергией $\hbar\omega = E_i - E_f$, где индексы i и f относятся к начальному и конечному состояниям нейтрона до и после рассматриваемого процесса рассеяния:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k_f}{k_i} \hat{S}(\mathbf{Q}, \omega).$$

В этом выражении параметры, относящиеся к нейтрону, вынесены в отдельный, “кинематический”, множитель, а сама функция $\hat{S}(\mathbf{Q}, \omega)$ назы-

вается законом рассеяния и содержит основные спектральные характеристики изучаемого вещества. При этом фундаментальные количественные характеристики взаимодействия нейтрона и атомов, составляющих вещество, такие как длина (амплитуда) ядерного и магнитного рассеяния, входят в закон рассеяния только как параметрические множители, не меняя существенных функциональных зависимостей. Удобство использования функции рассеяния вместо дважды дифференциального сечения рассеяния заключается в том, что функция рассеяния полностью определяется спектральными свойствами рассеивающей системы, ее температурой, а также импульсом и энергией, полученными системой в результате взаимодействия с нейтроном.

Все детали соответствующего формализма подробно изложены в [1–4, 7, 8]. Из теории следует, что закон рассеяния $\hat{S}(\mathbf{Q}, \omega)$ представляет собой фурье-компоненту функции парных корреляций частиц, входящих в состав вещества. Эти корреляции в пространстве и времени определяют, например, реакцию вещества на изменение положения в пространстве и движения во времени ядер или изменения состояния их электронных оболочек. Именно это определяет важность информации обо всех взаимодействиях в материале, определяющих его физическую природу, которую можно получить при измерении интенсивности неупругого рассеяния нейтронов в спектроскопическом эксперименте.

Ниже кратко рассмотрим основные соотношения, позволяющие понять связь между измеряемыми величинами и физическими характеристиками исследуемых систем.

1.1. Атомная динамика

При рассмотрении ядерного рассеяния нейтронов нужно в первую очередь учитывать, что даже для одного и того же химического элемента длина рассеяния может различаться для его различных изотопов, которые существуют у подавляющего большинства элементов. Кроме того, если ядро имеет ненулевой спин, то также возможны две разные длины рассеяния для двух возможных, различающихся взаимной ориентацией спинов, состояний системы (спин ядра + спин нейтрона) при рассеянии. Только в некоторых специальных случаях может иметь место корреляция в расположении изотопов или ориентации ядерных спинов. Во всех других реальных системах корреляция между различными длинами рассеяния в веществе отсутствует, что приводит к появлению двух составляющих — когерентной и некогерентной компонент рассеяния:

$$\hat{S}(\mathbf{Q}, \omega) = b_{\text{coh}}^2 S_{\text{coh}}(\mathbf{Q}, \omega) + b_{\text{inc}}^2 S_{\text{inc}}(\mathbf{Q}, \omega).$$

В этой записи, справедливой только для вещества, состоящего из одного химического элемента, закон рассеяния представлен в виде суммы двух слагаемых — когерентной S_{coh} и некогерентной S_{inc} компонент закона рассеяния. Они “взвешены” с соответствующими длинами рассеяния — средней по всем изотопам с учетом их концентрации и двум спиновым компонентам каждого изотопа: когерентной длины рассеяния $b_{\text{coh}} = \bar{b}$ и некогерентной длины рассеяния $b_{\text{inc}}^2 = \overline{b^2} - \bar{b}^2$, которая выражается через дисперсию распределения длин ядерного рассеяния по изотопам и спиновым ориентациям².

Если выбранный химический элемент содержит всего один изотоп с нулевым спином ядра, то некогерентная составляющая рассеяния выпадает, так как $b_{\text{inc}} = 0$. В отдельных случаях при наличии у химического элемента изотопов с положительной и отрицательной амплитудами рассеяния можно подобрать такой изотопический состав образца, в котором $b_{\text{coh}} = 0$, и таким образом подавить когерентное рассеяние. Различие амплитуд нейтронного рассеяния у изотопов одного элемента позволяет извлекать динамические характеристики этого элемента в сложных многокомпонентных соединениях за счет сопоставления интенсивности рассеяния изотопно-замещенными составами — так называемый метод изотопического контраста в рассеянии нейтронов.

Длины рассеяния нейтронов для большого количества изотопов химических элементов хорошо известны и сведены в таблицы [9, 10]. Почти все они по абсолютной величине находятся в интервале $(0.1–1) \times 10^{-12}$ см, что дает типичные значения интегральных сечений рассеяния $\sigma = 4\pi b^2$ порядка 1–10 барн (1 барн = 10^{-24} см²). Отметим наиболее заметное и важное исключение для водорода — некогерентное рассеяние на протоне ¹H необычно велико, и его сечение для связанного в веществе атома водорода составляет ~80 барн.

Разделение ядерного рассеяния на когерентную и некогерентную составляющие имеет важный физический смысл: когерентное рассеяние определяется коллективными свойствами всего ансамбля атомов в веществе, согласованными их движениями, тогда как некогерентное рассеяние “отслеживает” движения только одного атома. Некогерентное рассеяние возникает также в си-

² Спиновая некогерентность при взаимодействии нейтрона с ядром, несущим спин, имеет двойную природу, обусловленную возможностью рассеяния нейтрона на ядре как с переворотом спина, так и без его переворота, при равновероятной ориентации ядерных спинов в образце. Изотопическая некогерентность определяется процессами рассеяния на ядре без переворота спина нейтрона. Когерентное рассеяние также происходит без изменения спиновых состояний нейтрона и ядра.

стемах с нарушенным дальним порядком, в том числе при наличии внутренней диффузии составляющих вещество атомов или молекул. Разумеется, оба слагаемых имеют разную функциональную зависимость от волнового вектора и энергии.

Когерентное рассеяние $S_{\text{coh}}(\mathbf{Q}, \omega)$ в упорядоченных кристаллах имеет четко выраженную пиковую структуру в зависимости от волнового вектора и энергии. Это позволяет экспериментально определять кривые дисперсии коллективных возбуждений $\omega_j(\mathbf{q})$ для всех ветвей спектра. Количество разных ветвей j зависит от типа возбуждений и особенностей структуры – например, в фононном спектре кристалла с r атомами в примитивной ячейке имеются $3r$ таких ветви, которые можно идентифицировать и различать по интенсивности рассеяния, зависящей от векторов поляризации или волновых функций фононов.

Кривые дисперсии $\omega_j(\mathbf{q})$ коллективных возбуждений (фононов, магнонов) содержат детальную информацию о природе и характере совокупности взаимодействий в веществе. Именно с целью определения этих соотношений в монокристаллических образцах были первоначально использованы и получили впоследствии распространение упомянутые выше трехосные спектрометры (TAS). Они позволяют определять компоненты вектора переданного импульса \mathbf{Q} и величины передачи энергии $\hbar\omega$ с необходимой точностью, что обеспечивает сканирование выбранных интервалов этих параметров в достаточно большом объеме фазового пространства (\mathbf{Q}, ω) с целью измерения интенсивности когерентного рассеяния $S_{\text{coh}}(\mathbf{Q}, \omega)$.

При некогерентном рассеянии получаемая информация об индивидуальных движениях частиц вещества носит менее детальный характер, однако ее извлечение во многих случаях предоставляет уникальные сведения о межчастичном взаимодействии. Например, в материалах с преобладанием некогерентного рассеяния можно измерить функцию плотности фазонных состояний $g(\omega)$, которая является интегральной характеристикой спектра колебаний. Эта функция отражает основные особенности атомной динамики вещества, отвечающие за совокупность его важнейших физических (термодинамических) свойств, таких как теплоемкость, средняя энергия колебаний и т.п. Спектрометры по времени пролета (TOF) прямой или обратной геометрии исходно были ориентированы как раз на изучение этих спектров. При этом изотропия некогерентного рассеяния позволяла, с одной стороны, использовать более доступные в нужных количествах поликристаллические (порошковые) образцы новых материалов. С другой стороны, можно было увеличивать интегральную интенсивность за счет расширения детектирующих систем на возможно больший интервал углов рассеяния.

Позднее было показано, что, используя позиционно-чувствительную детектирующую систему, обеспечивающую широкую апертуру по углу рассеяния, включая достаточно большие углы, удается достичь условий “некогерентного приближения” даже для веществ с преимущественно когерентным сечением рассеяния [11] при условии использования поликристаллических (порошковых) образцов. Это справедливо для большинства порошковых образцов неорганических материалов при достижении интервала передачи импульса более $|\mathbf{Q}| \sim 6-7 \text{ \AA}^{-1}$. С другой стороны, современные TOF-спектрометры прямой геометрии (рис. 4), с помощью которых получают детальную информацию о совокупности углов рассеяния и энергии рассеянных нейтронов, позволяют изучать спектральные характеристики не только порошковых материалов, но и в случае монокристаллических образцов извлекать данные о кривых дисперсии коллективных возбуждений, составляя таким образом определенную конкуренцию парку трехосных спектрометров.

В заключение раздела обратимся к ярко выраженной температурной зависимости для сечения рассеяния нейтронов. Она отражает общее для закона рассеяния так называемое условие детального равновесия (detailed balance factor):

$$\hat{S}(-\mathbf{Q}, -\omega) = \exp(-\hbar\omega/k_B T) \hat{S}(\mathbf{Q}, \omega),$$

которое связывает вероятности рассеяния (или интенсивности) для прямого процесса рассеяния (\mathbf{Q}, ω) и обратного процесса $(-\mathbf{Q}, -\omega)$. Для центросимметричных кристаллических решеток, которые представляют основное большинство структур известных материалов, можно не разделять процессы с \mathbf{Q} и $-\mathbf{Q}$. Фактор детального равновесия указывает на большую интенсивность процессов рассеяния с положительной передачей энергии $\hbar\omega = E_i - E_j > 0$, что становится особенно существенным при $\hbar\omega > k_B T$. Это определяет предпочтительное использование инструментальных конфигураций с $E_i > E_j$ на практике при проведении экспериментов по нейтронной спектроскопии, особенно при низких температурах образца.

Вследствие резкой температурной зависимости фактора “детального равновесия” иногда удобно оперировать не законом рассеяния, а динамической восприимчивостью системы $\chi(\mathbf{Q}, \omega)$, которая в общем случае является комплексной функцией. Ее мнимая часть, описывающая процессы диссипации энергии в системе, оказывается связанной с законом для неупругого рассеяния нейтронов:

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\chi''(\mathbf{Q}, \omega)}{1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T)}.$$

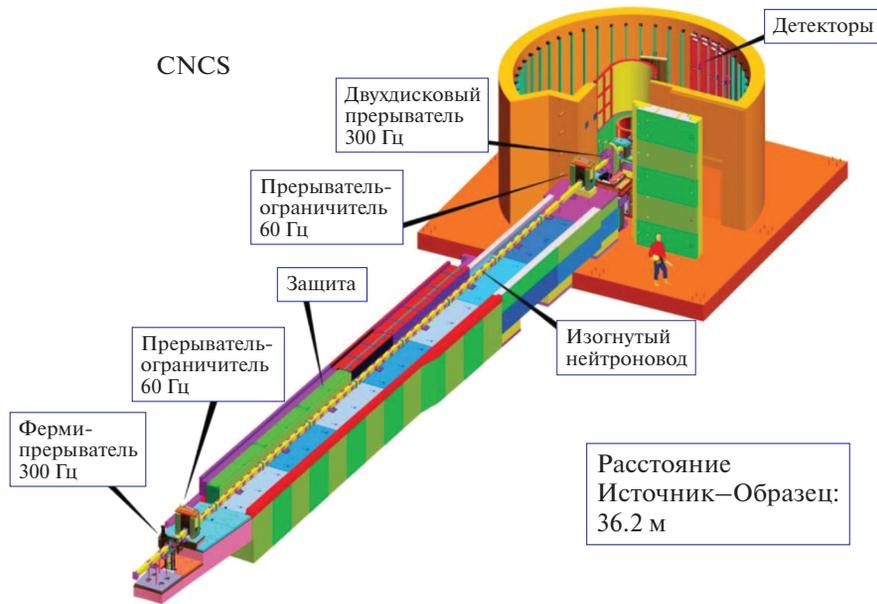


Рис. 4. Схема спектрометра CNCS для холодных нейтронов с прерывателями на импульсном источнике нейтронов SNS (Oak Ridge, USA). Отмечены положения прерывателей, работающих с разной частотой вращения. Верхняя часть защиты нейтронотвода от источника до образца и детекторного банка открыты для наглядности [22].

Очевидно, что мнимая часть обобщенной восприимчивости уже не содержит “тривиальной” температурной зависимости условия детального равновесия, и возможные физические эффекты температуры оказываются не замаскированными “простыми” факторами типа заселенности возбужденных состояний.

Связь с обобщенной восприимчивостью напоминает о существовании определенных законов или “правил сумм”, которым подчиняются компоненты этой восприимчивости (например, соотношения Крамерса–Кронига и др.) и, соответственно, закон рассеяния нейтронов. Эти “правила” задокументированы в цитированной литературе и составляют набор существенных условий для анализа эксперимента и проверки полноты выполненных измерений.

Понятие обобщенной динамической восприимчивости особенно удобно использовать в случае магнитных систем, поскольку для них часто имеются результаты макроскопических измерений статической магнитной восприимчивости, с которыми (в интегральной форме) должны согласовываться результаты нейтронного эксперимента. Некоторые особенности магнитного рассеяния нейтронов затронуты в следующем разделе.

1.2. Магнитные возбуждения

Магнитное рассеяние нейтронов в основном связано с дипольным взаимодействием магнитного момента нейтрона и электронов незаполненных электронных оболочек, находящихся в

электронном облаке вокруг ядра. Это взаимодействие пропорционально произведению магнитных моментов нейтрона и электронной оболочки и в конечном итоге аналогично ядерному, так что сечение магнитного рассеяния можно записать в виде

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k_f}{k_i} (\gamma r_e)^2 S_{\text{mag}}(\mathbf{Q}, \omega),$$

где $\gamma = 1.9132$ – экспериментальная константа (гиромагнитное отношение для момента нейтрона), $r_e = e^2/(m_e c^2) = 0.28179 \times 10^{-12}$ см – “классический” (электромагнитный) радиус электрона, а закон рассеяния связан с динамической магнитной восприимчивостью. Соответственно, произведение $\gamma r_e \approx 0.54 \times 10^{-12}$ см является мерой интенсивности магнитного взаимодействия нейтрона с веществом. Оно по порядку величины совпадает с характерными длинами ядерного рассеяния.

В магнитном рассеянии нет аналога изотопической некогерентности ядерного рассеяния, так как все изотопы одного элемента обладают одинаковыми электронными оболочками. Точно также магнитное рассеяние от строго упорядоченной системы магнитных моментов будет когерентным. Некогерентная составляющая возникает, например, при наличии диффузного движения или беспорядка по направлениям магнитных моментов.

Наличие дипольного взаимодействия между магнитным моментом нейтрона и локальным магнитным моментом в веществе позволяет изу-

чать магнитные возбуждения. Под ними в общем случае понимаются как одноузельные возбуждения типа переходов между расщепленными в кристаллическом электрическом поле (КЭП) уровнями локализованных f -электронов, так и коллективные возбуждения магнитной подсистемы, а также различные виды возбуждений неупругого диффузного или квазиупругого типа.

Коллективные возбуждения магнитно-упорядоченных систем, например магноны, изучаются методами и на экспериментальных установках, которые подобны тем, что используются для спектров атомных колебаний. Останемся немного подробнее на возбуждениях другого типа, специфичных для магнитных систем.

В редкоземельных (РЗ) соединениях в отличие от переходных d -металлов (в которых полный магнитный момент определяется только спином S) магнитный момент в силу спин-орбитального взаимодействия связан с полным моментом $J = L + S$ для f -электронной оболочки (предполагается LS-тип электронного спаривания). Кристаллическое электрическое поле в той или иной мере снимает вырождение с основного J -мультиплета, что и определяет низкотемпературные свойства таких соединений [12–14]. Магнитно-дипольные переходы между уровнями КЭП соответствуют области энергий тепловых нейтронов, что определяет эффективность нейтронной спектроскопии для изучения свойств РЗ-систем, особенно металлов, для которых оптическая спектроскопия затруднена.

Закон рассеяния на уровнях магнитного РЗ-иона, расщепленных КЭП, представляет собой совокупность пиков, энергетическое положение которых определяется энергией возможных магнитно-дипольных переходов. Измеряемый спектр неупругого рассеяния нейтронов содержит информацию как об энергии, так и о волновых функциях состояний f -электронов. Обычно экспериментальные спектры для f -состояний, возникших в результате расщепления основного спин-орбитального мультиплета в КЭП, интерпретируются в зависимости от релаксационных свойств магнитной подсистемы и роли кооперативных эффектов.

Магнитное рассеяние определяется *вектором* намагниченности образца и имеет более сложную форму сечения по сравнению с ядерным. Эта форма сохраняется и для других типов магнитного рассеяния по сравнению с рассмотренным выше случаем локализованного на ионах полного момента. Например, в металлах в случае гибридизации f -электронов РЗ-иона с электронами проводимости можем получить особое состояние ионов, которое называется промежуточно-валентным (intermediate valence state или mixed-valence state) [15]. В этом состоянии когерентно

смешаны конфигурации РЗ-иона с разным числом f -электронов, и оператор магнитного взаимодействия нейтрона имеет более сложную форму.

Как отмечалось выше, для спектральной функции $S(\mathbf{Q}, E, T)$, во-первых, реализуется принцип детального равновесия, т.е. при $T \rightarrow \infty$ спектральная часть, соответствующая отрицательной передаче энергии при рассеянии (neutron energy gain), имеет интенсивность, равную интенсивности части с положительной передачей энергии (neutron energy loss), а при $T \rightarrow 0$ вся интенсивность рассеяния сосредоточена в части с положительной передачей. Во-вторых, в силу Больцмановской статистики системы локализованных моментов при конечном числе энергетических уровней основного мультиплета интеграл по энергии по всему спектру при заданном \mathbf{Q} есть величина постоянная при всех температурах. Этот интеграл (конечно, с учетом упругого и квазиупругого магнитного рассеяния), будучи приведенным к $\mathbf{Q} = 0$ и проинтегрированным по телесному углу, равен полному магнитному сечению РЗ-иона, определяемому величиной квадрата магнитного момента $|\mathbf{M}|^2 = |(1/2g_J)\mathbf{J}|^2 = (1/2g_J)^2 J(J+1)\mu_B^2$ как

$$\sigma_{\text{mag}} = 4\pi \left(\frac{\gamma r_e}{2\mu_B} \right)^2 |\mathbf{M}_\perp|^2 = 4\pi \left(\frac{\gamma r_e}{2\mu_B} \right)^2 \frac{2}{3} |\mathbf{M}|^2 \approx (0.61 \text{ барн}/\mu_B^2) |\mathbf{M}|^2.$$

Количественно эта связь означает, что $M \cong 1.3 \mu_B$ дает величину $\sigma_{\text{mag}} \sim 1$ барн. Отметим, что характерные величины магнитных моментов основных мультиплетов РЗ-ионов приходятся на диапазон $1 \dots 10 \mu_B$, т.е. характерные величины магнитных сечений близки к сечениям ядерного рассеяния. С другой стороны, характерные энергетические расщепления $E_m - E_n$ уровней основного мультиплета в кристаллическом поле составляют $1 \text{--} 100$ мэВ. Это позволяет использовать для нейтронной спектроскопии f -электронных возбуждений ту же экспериментальную технику, что и для спектроскопии атомных колебаний (фононов).

Совпадение характерных масштабов интенсивностей ядерного и магнитного рассеяния в нейтронной спектроскопии наряду с удобством использования одной и той же экспериментальной техники создает проблему – необходимость их количественного разделения при интерпретации экспериментальных результатов. Это реализуется несколькими алгоритмами, прежде всего при сопоставлении спектров изоструктурных соединений, одно из которых вместо магнитных РЗ-ионов содержит лантан или лютеций. Наиболее надежный способ – это использование поляризационного анализа при неупругом рассеянии нейтронов. К сожалению, эта методика сопряже-

на с существенной потерей интенсивности полезного сигнала (1.5–2 порядка величины). Практические аспекты всех этих методов обсуждаются, например, в [13].

В заключение раздела отметим особенности методики, обусловленные наличием материалов, содержащих сильно поглощающие тепловые нейтроны элементы, такие как Sm, Gd, Cd, В и ряд других. Для существенного ослабления нейтронного пучка достаточно пластины толщиной ~0.1 мм такого материала, что делает практически невозможным измерения спектров образцов, содержащих эти элементы в естественном виде. Здесь так же, как и в случае упомянутого выше метода изотопического контраста, может помочь использование непоглощающих нейтроны изотопов одного и того же химического элемента. Действительно, проблему удастся обычно решить, используя для приготовления образцов материалы, содержащие малопоглощающие изотопы, такие как ^{11}B , ^{154}Sm , ^{110}Cd и другие. В некоторых случаях фундаментальный научный интерес заставляет изучать даже дважды изотопически-замещенные образцы [16]. Однако это делает такие измерения уникальными из-за исключительно высокой стоимости большинства стабильных изотопов необходимой чистоты.

2. ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ НЕЙТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Оптимизация измерений нейтронного рассеяния с использованием той или иной экспериментальной техники существенным образом зависит от источника нейтронов, на котором базируется тот или иной инструмент. Так, основным типом источников в начале массового развития методов рассеяния нейтронов для исследования вещества стали ядерные реакторы, появившиеся в 50-х годах прошлого столетия. В них воспроизводится постоянный во времени поток нейтронов, полезная плотность которого пропорциональна мощности ядерного реактора и зависит от особенностей конструкции его активной зоны. Выделение определенной длины волны нейтронов на таких источниках выполнялось преимущественно методом дифракции на кристаллах. Времяпролетная техника также применялась и применяется по настоящее время на реакторных источниках нейтронов. Этот тип источников фактически достиг предела возможностей повышения интенсивности потока нейтронов в замедлителе к 80-м годам.

В дальнейшем, особенно в последние десятилетия, получили приоритетное распространение импульсные источники нейтронов как менее радиационно-опасные физические установки и приближающиеся – даже превосходящие (проект ESS, Швеция) – стационарные реакторы по среднему потоку, не говоря уже о максимуме в им-

пульсе. Нейтронный поток этих источников уже имеет подходящую временную структуру, что благоприятствует широкому распространению на них именно времяпролетной техники.

2.1. Особенности развития источников нейтронов

Экспериментальные исследования спектров возбуждений в веществе методами нейтронной спектроскопии выполняются как на стационарных, так и на импульсных источниках, которые представляют собой сложные и дорогостоящие физические установки. В мире в настоящее время существует около 20 источников нейтронов подобных типов.

Стационарные источники – это в основном специализированные ядерные реакторы, использующие цепную реакцию деления топлива, высокообогащенного изотопом урана ^{235}U , с предельно компактной активной зоной. Количество таких установок в мире постепенно сокращается из-за выработки их ресурса после бурного всплеска их появления в 50-х и 60-х годах прошлого столетия и ужесточения требований по безопасности. Например, в последние годы (2018–2019) закрыты реакторы “Ogrhée” в Центре исследований в Сакле (Франция), где базировалась Лаборатория Леона Бриллюэна (LLB), реактор “BeR-II” в Центре Гельмгольца в Берлине (Германия), NRU в Канадском национальном центре, которые присоединились к списку ранее закрытых реакторов, в частности HFBR в Брукхейвенской национальной лаборатории (США). В то же время появляются новые реакторные источники, такие как FRM-2 в центре Майер-Лейбница (Гархинг, Германия) и OPAL (центр ANSTO в Австралии), готовящиеся к полноценной работе реакторы CARR в Пекине (Китай) и ПИК в Гатчине (Россия). Наиболее высокопоточный источник реакторного типа был запущен в начале 70-х годов в Европейском Институте Лауэ–Ланжевена (ILL, Гренобль, Франция), который и в настоящее время остается лидирующим в этом классе установок.

Импульсные источники нейтронов постоянно развиваются в течение последних десятилетий. Они используют иной физический процесс, а именно возбуждение тяжелых ядер высокоэнергетическими протонами, что приводит к выбросу нескольких нейтронов из возбужденного ядра. Этот процесс можно охарактеризовать как “испарение” нейтронов с поверхности ядра (в англоязычной литературе используется термин “spallation”, так что подобные источники называют “spallation source”). То есть импульсный источник этого типа сопряжен с ускорителем заряженных частиц. В зависимости от характеристик этого ускорителя, типа мишени и замедлителей изменяются такие важнейшие параметры импульсного источника, как временная длитель-

ность (ширина) импульса, количество импульсов в секунду, мощность (средняя по времени и “пиковая”, в максимуме импульса). Из-за отсутствия необходимости использования делящихся изотопов импульсные источники нейтронов считаются более экологичными, чем источники реакторного типа. В связи с этим в настоящее время им отдается предпочтение, несмотря на то, что они в большинстве своем уступают реакторным источникам в величине среднего по времени потока нейтронов. Импульсные источники со сравнительно малой мощностью, например установка “Факел” в Институте атомной энергии им. И.В. Курчатова в Москве или IPNS в Аргоннской национальной лаборатории в США, уже выведены из эксплуатации. Современные источники подобного типа постепенно наращивают свои параметры по мощности и представлены в различных странах, например ISIS в Великобритании, J-PARC в Японии, SNS в Ок-Риджской Национальной лаборатории (США), недавно введенный в эксплуатацию CSNS в Китае. В ближайшие годы ожидается ввод в строй нового Европейского источника ESS в Швеции. Этот самый мощный в мире импульсный источник должен даже по среднему потоку нейтронов (при средней мощности порядка 5 МВт) сравняться с лучшим реакторным источником ILL (тепловая мощность 57 МВт), не говоря уже о значениях мгновенного потока нейтронов в импульсе.

Отметим, что имеются специальные “гибридные” типы источников нейтронов. Например, в Швейцарии работает установка SINQ на базе ускорителя, но с непрерывным по времени потоком. В России в Объединенном институте ядерных исследований в Дубне на протяжении десятилетий развивается импульсный источник реакторного типа ИБР-2 с достаточно высокой средней/импульсной мощностью (2 МВт/1600 МВт), в котором нейтронный поток рождается в ядерном реакторе, кратковременно – на время вспышки – переводимом из подкритического в надкритический режим.

Остается добавить, что в любом из источников нейтроны рождаются с очень высокими энергиями (по сравнению с энергиями, характерными для взаимодействий в конденсированных средах) в несколько мегаэлектронвольт (МэВ). Для изучения структуры и динамики требуются так называемые тепловые нейтроны со значительно меньшими энергиями – масштаба десятка миллиэлектронвольт (мэВ). Замедление первичных нейтронов осуществляется в среде замедлителя (moderator). Наиболее эффективно процесс замедления происходит в водородсодержащих средах, обычно в обыкновенной или тяжелой воде. Использование тяжелого изотопа водорода – дейтерия – связано с его меньшим сечением поглощения нейтронов, что дает ряд существенных преимуществ при оп-

тимизации нейтронных приборов. Спектр замедленных в такой среде нейтронов подчиняется законам статистической физики и оказывается близок к максвелловскому спектральному распределению частиц по скоростям для идеального газа, находящегося в термодинамическом равновесии с температурой нейтронного замедлителя. Получающееся таким образом распределение нейтронов называют тепловым спектром, его средняя температура (максимум распределения по энергии) и ширина близки к “комнатной” температуре ~ 300 К (или ~ 30 мэВ). Для увеличения плотности потока нейтронов в области более низких и более высоких энергий в зоне замедления устанавливают так называемые “холодные” или “горячие” источники, в которых спектр нейтронов локально термализован до температуры этого источника. Наиболее часто применяют жидкий дейтерий при температуре кипения 24 К в качестве “холодного источника” и нагретый блок графита при температуре ~ 2300 – 2500 К в качестве “горячего источника”. Получаемые при этом распределения нейтронного потока смешены примерно на порядок величины соответственно в сторону низких или высоких энергий по сравнению с тепловым спектром.

В большинстве современных реакторных нейтронных центров реализуются два варианта размещения спектрометров: в зале реактора для того, чтобы максимально приблизиться (ради повышения светосилы) непосредственно к физическому источнику потока нейтронов (замедлителю вблизи активной зоны реактора) и в так называемом нейтронноводном зале. В нем приборы размещены на нейтронноводах, представляющих собой специальные каналы для транспортировки нейтронов на значительные расстояния, до нескольких десятков метров, использующие высокотехнологичные зеркала в качестве стенок. По сути нейтронноводы аналогичны световодам, использующим физическое явление полного внутреннего отражения. Существенная количественная разница заключается в гораздо меньших значениях критического угла (доли градуса), обеспечивающего транспортировку нейтронов. При этом сами значения критических углов захвата нейтронного потока уменьшаются пропорционально длине волны нейтронов. Следовательно, нейтронноводы наиболее эффективны для транспортировки холодных нейтронов по сравнению с тепловыми и тем более горячими нейтронами. Технологический прогресс последних лет в изготовлении нейтронных зеркал на основе многослойного напыления позволил значительно увеличить критический угол захвата. Однако эффективное использование нейтронноводов для оптимизации транспорта нейтронов сравнительно высоких энергий ограничивается как соответствующим уменьшением вероятности отражения

Таблица 1. Структура приборного парка ряда нейтронных центров мира

Нейтронный источник	Приборы для изучения динамики вещества методами неупругого рассеяния нейтронов	Приборы для изучения структуры вещества методами упругого рассеяния нейтронов	Приборы, не использующие методы рассеяния нейтронов
ISIS (Rutherford Appleton Laboratory, Didcot, United Kingdom)	8	22	7
SNS (Oak-Ridge National Laboratory, TN, USA)	7	11	2
J-PARC (Ibaraki Quantum Beam Research Center, Tokai, Japan)	6	11	4
ILL (European Neutron Centre, Grenoble, France)	14	25	8
FRM-2 (Heinz Maier-Leibnitz Zentrum, Garching bei München, Germany)	11	16	17
NIST (Center for Neutron Research, Gaithersburg MD, USA)	9	11	9

нейтронов от зеркала, так и его повышенной стоимостью.

Нейтронотводы впервые массово были применены на высокопоточном реакторе в ILL и оказались очень удобным техническим решением, позволяющим кратно умножать количество приборов и проводить исследования в условиях пониженного экспериментального фона. Изначально концепция серии нейтронотводов, выводящих пучки нейтронов подальше от зоны, предполагала их использование в приборах, которые адаптировались к характеристикам того или иного нейтронотода. В настоящее время тенденция сменилась в том направлении, что современные нейтронные спектрометры требуют специально адаптированных нейтронотводов с максимальной оптимизацией их транспортной способности под нужды именно этого прибора. Подобная смена концепции приводит к перестройке изначальной схемы распределения нейтронотводов на реакторных источниках нейтронов.

На импульсных источниках, для которых характерно наличие сравнительно длинной первой пролетной базы от источника до прибора, необходима оптимизация нейтронотводов по форме и распределению критического угла отражения по длине. Это позволяет улучшить рабочие параметры существующих приборов и является абсолютно обязательным условием для проектируемых спектрометров уже на уровне концепции, как это

происходит, например, при формировании приборного парка для нового Европейского источника ESS (г. Лунд, Швеция).

2.2. Структура приборного парка мировых центров, совершенствование TAS- и TOF-техники, оборудование для создания условий на образце

Структура приборного парка. Для наиболее развитых современных источников нейтронов характерно наличие от 20 до 40 приборов для исследований вещества с помощью рассеяния нейтронов (как упругого, так и неупругого), а также до десятка других приборов, использующих нейтроны при исследованиях другими методами (ядерная физика, томография и получение изображения объектов, облучение, мюонная спектрометрия). В табл. 1 собраны данные по приборному парку некоторых источников нейтронов, включающих как импульсные (ISIS, J-PARC, SNS), так и реакторные (ILL, FRM-2, NIST) установки. В колонке “неупругое рассеяние” сведены спектрометры типа TAS и TOF, в колонке “упругое рассеяние” объединены порошковые и монокристалльные дифрактометры, приборы для изучения малоуглового рассеяния и нейтронные рефлектометры.

Из табл. 1 видно, что в ведущих мировых центрах доля приборов для нейтронной спектроскопии составляет 30–40% от общего числа приборов, использующих рассеяние нейтронов для изу-

чения свойств вещества. На среднепоточных источниках нейтронов относительное количество инструментов для изучения структуры (упругое рассеяние) обычно выше.

В зависимости от типа нейтронного источника приборный парк для экспериментов по рассеянию нейтронов может выглядеть по-разному. Для импульсных источников очевидно преобладание времяпролетных методов с отдельными вариантами, позволяющими изучать монокристаллы. На реакторных источниках, наоборот, использование кристаллической техники выделения длины волны нейтронов более предпочтительно. Поэтому доля трехосных спектрометров нейтронов соизмерима или выше, чем спектрометров по времени пролета в спектроскопическом сегменте парка. Отметим, что TOF-техника используется в некоторых других приборах, например для изучения малоуглового рассеяния нейтронов, и рефлектометрах.

Совершенствование TOF- и TAS-техники. TOF-спектрометры прямой геометрии в большинстве конструкций используют времяпролетный метод определения энергии нейтронов как до, так и после рассеяния на образце. В падающем пучке располагается система прерывателей с различными характеристиками и назначением, которая формирует временную структуру пучка и нужна как в случае реакторных, так и импульсных источников нейтронов.

Особенностью времяпролетных приборов прямой геометрии на импульсных источниках с короткой вспышкой (ISIS, SNS) является возможность существенного расширения диапазона передачи энергий и получения достаточно высокого разрешения (до 1–2% по упругой линии) для тепловых и эпитепловых нейтронов (энергии до 200–300 мэВ и выше). Эта возможность реализуется оптимальным образом, т.е. с сохранением высокой светосилы, в случае, когда длительность нейтронной вспышки на мишени не превышает 10–20 мкс, а замедлитель достаточно тонкий и не дает полной термализации нейтронной вспышки, сохраняя ее длительность.

Особое место среди нейтронных спектрометров занимают трехосные спектрометры, которые, как было сказано выше, широко применяются только на реакторных источниках. В них способ определения энергии до и после рассеяния одинаков и осуществляется за счет дифракции на кристаллах – монохроматоре и анализаторе. При этом характерные углы захвата (расходимости) рассеянного пучка примерно сопоставимы с подобными характеристиками падающего пучка и составляют единицы тысячных долей стерадиана. Такие спектрометры позволяют сконцентрироваться практически на любой выбранной области интересующих исследователей углов рассеяния и

переданных энергий, сравнительно быстро и в широких пределах изменять конфигурацию и требуемое энергетическое и угловое разрешение. Для этого современные трехосные спектрометры, как правило, оснащены сложными фокусирующими монохроматорами с несколькими рабочими кристаллическими отражающими плоскостями, а также сменными коллиматорами. Они могут работать как в прямой, так и обратной геометрии, хотя по ряду причин наиболее оптимальной во многих случаях оказывается обратная геометрия с фиксированной рассеянной энергией на анализаторе.

Использование дифракции на кристаллах для выделения заданной длины волны нейтронов сопряжено с необходимостью подавления рассеяния второго и более высоких порядков по длине волны нейтрона на трехосных спектрометрах и некоторых спектрометрах обратной геометрии. Это осуществляется с помощью различных фильтров из ориентированного пиролитического графита в тепловой области энергий или поликристаллического бериллия в случае более низких энергий. В последнее время для спектрометров, работающих в основном с холодными нейтронами (энергии ниже 10 мэВ), получили распространение механические селекторы скоростей. Применение таких устройств в тепловой области спектра ограничено необходимостью использования более высоких скоростей вращения селекторов, что трудно совместимо с большими поперечными размерами используемых пучков нейтронов.

Возможности повышения потока нейтронов на образце

Первичный пучок. Увеличение потока нейтронов в источнике представляет собой очевидный путь к повышению производительности приборного парка. Несмотря на колоссальную дороговизну этого пути, он, тем не менее, реализуется, и новые улучшенные источники появляются с определенной периодичностью по мере развития технологий создания таких устройств. Конечно, приборный парк изначально “подстраивается” под источник. Но и в пределах “жизни” одного источника обновление парка и повышение производительности приборов являются необходимой и даже “рутинной” работой.

Формирование потока нейтронов в современных источниках нейтронов происходит по законам физической статистики. Это означает, что по мере удаления от источника поток уменьшается, причем уменьшение происходит сравнительно быстро и пропорционально квадрату расстояния от источника. Использование нейтронпроводов частично уменьшает скорость этого падения, однако из-за увеличения числа отражений от ней-

тронных зеркал и их не 100%-ной вероятности уменьшения потока с расстоянием полностью избежать нельзя. Поэтому наиболее светосильные приборы, особенно в области тепловых и более высоких энергий, несмотря на практически неизбежно увеличенный инструментальный фон, обычно находятся как можно ближе к источнику.

Дальнейшее формирование наиболее оптимального пучка падающих на образец нейтронов зависит от используемой техники – кристаллической или времяпролетной, а также от наличия или отсутствия нейтронновода в этом плече спектрометрического тракта. Увеличение потока нейтронов в этом случае практически всегда достигается за счет использования пространственной фокусировки первичного нейтронного пучка.

Эта фокусировка может осуществляться непосредственно отражающим кристаллом-монокроматором, изогнутым в соответствии с выбранными расстояниями от монокроматора до источника и до образца. Такой фокусирующий монокроматор играет роль фокусирующей линзы в оптике. При наличии фокусирующего нейтронновода от первичного источника он формирует пространственный максимум потока либо сразу на образце, либо на выходе из нейтронновода. В последнем случае этот максимум становится новым “источником” нейтронов для последующего использования, например отражения от кристалла-монокроматора. При использовании пространственной фокусировки увеличение потока на образце фактически достигается за счет увеличения угловых размеров источника – он как бы приближается к образцу. Получается, что реальные размеры источника заменяются размерами монокроматора (аналогично соотношению большая/маленькая линза при формировании интенсивности в оптическом фокусе). Отметим, что при этом размывается угловое распределение в падающем на образец пучке, т.е. падает чувствительность прибора к измерению угловых отклонений нейтронов в процессе рассеяния.

Здесь следует отметить особенность трансформации фазового объема в специальном случае применения концепции “виртуального источника” при использовании фокусирующих кристаллов-монокроматоров. “Виртуальный источник” представляет собой сравнительно узкую щель, устанавливаемую в падающем из первичного источника на монокроматор пучке нейтронов на расстоянии, равном расстоянию от монокроматора до образца. Это также может быть выход из фокусирующего нейтронновода. Для такого “виртуального” источника в условиях “идеальной” фокусировки на образец энергетическое разрешение в пучке, достигающем образца, практически не зависит от размеров монокроматора и первичного источника. Этот эффект позволяет выигрывать

в интенсивности такого кристаллического спектрометра до 10–15 раз за счет увеличения расходимости пучка (т.е. увеличения размеров первичного источника и самого кристалла-монокроматора) без потери чувствительности спектрометра к передаче энергии, что может быть важно для ряда приложений нейтронной спектроскопии.

При рассмотрении особенностей пространственной фокусировки сталкиваемся со “статистической” природой нейтронного пучка. Согласно теореме Лиувилля в любой замкнутой системе плотность частиц в объеме фазового пространства (т.е. пространства положений и скоростей частиц) остается неизменной. Увеличение интенсивности, или в данном случае потока нейтронов, возможно только за счет увеличения объема фазового пространства, в частности, за счет увеличения размеров источника. При пространственной фокусировке происходит также трансформация формы объема в фазовом пространстве, что не запрещено теоремой Лиувилля – при уплотнении по положениям в прямом пространстве пропорционально увеличивается разброс по сопряженным координатам – углам падения.

На практике эти законы означают, что при желании увеличить разрешение нейтронного спектрометра приходится “отсеивать” ненужные нейтроны, выходящие за пределы желаемой ширины функции разрешения. Это неизбежно ведет к потере светосилы нейтронных спектрометров при улучшении их разрешающей способности. Конечно, важно найти способы не отбрасывания “плохих” нейтронов, а возвращения их в пределы нужной ширины без потери интенсивности, что должно увеличить производительность и информативность экспериментов по рассеянию нейтронов.

Теорему Лиувилля можно было бы “обойти” за счет возможности обмена энергии, т.е. делая систему нейтронов незамкнутой. Однако до сих пор, по-видимому, не было не только реализации подобного подхода, но и сформулированных в литературе предложений по его осуществлению (кроме, может быть, [17]). Здесь следует заметить, что применяемый для ультрахолодных нейтронов способ дополнительного “охлаждения” пучка нейтронов за счет эффекта Доплера (отражение от “убегающих” лопаток “нейтронной турбины” [18]) не нарушает указанную выше теорему – уменьшение продольной составляющей скорости приводит к соответствующему увеличению угловой расходимости и площади сечения пучка нейтронов. Это относится и к другим типам потенциальных сил, способных воздействовать на нейтронный пучок, как, например, в случае гравитации или постоянного магнитного поля.

В то же время изменение спектрального распределения нейтронов в равновесии с замедлите-

лем при изменении температуры последнего как раз представляет собой случай обмена между нейтронами и внешней средой, в котором не соблюдены условия теоремы Лиувилля. Если предположить, что в замедлителе, охлажденном, например, до температуры 1 К, находится нейтронный газ в тепловом равновесии с ним, то ширина этого распределения будет тоже порядка 1 К или 0.1 мэВ, что является хорошим энергетическим разрешением даже для многих экспериментов с “холодными” нейтронами, не говоря о “тепловых” и “горячих”. Если можно было бы транспортировать некий объем этого нейтронного газа в направлении образца с заданной скоростью, или наоборот, перемещать образец с нужной скоростью внутри этого газа, то имели бы поток нейтронов на образце с узкой энергетической шириной. Осуществимы ли на практике такие эксперименты?

Рассеянный пучок. Тем или иным способом созданный пучок падающих на образец нейтронов претерпевает рассеяние на различные углы и с изменением энергии. Интенсивность этого рассеяния как функция $S(\mathbf{Q}, \omega)$ переданных образцу нейтронами импульса \mathbf{Q} и энергии $\hbar\omega$ содержит исчерпывающую информацию о динамике исследуемого вещества при условии, что зарегистрированные интервалы значений \mathbf{Q} и $\hbar\omega$ достаточно широки. В реальном спектроскопическом эксперименте эти интервалы в существенной мере задаются именно системой регистрации рассеянных нейтронов, которая может быть сделана таким образом, что телесный угол захвата будет очень большим. Например, если угловая расходимость потока нейтронов в падающем пучке составляет до нескольких тысячных единицстерадиана, то в рассеянном пучке могут быть собраны нейтроны в интервале углов в единицыстерадиан, как это реализовано в некоторых современных спектрометрах.

В спектрометрах прямой геометрии по времени пролета это достигается за счет покрытия как можно большей угловой зоны вокруг образца детекторами нейтронов. Современные технологии позволяют изготавливать, например, нитевые счетчики длиной до трех метров с возможностью определения положения регистрации нейтрона по длине счетчика — так называемые позиционно-чувствительные детекторы (ПЧД). При заполнении участка длины окружности протяженностью 5 м при радиусе окружности 4 м (вторая пролетная база L_2 , рис. 1) получаем телесный угол регистрации практически в 1 ср, заполненный почти ста тысячами чувствительных “пикселей” для регистрации нейтронов (приведены примерные параметры спектрометра IN5 в ILL, Гренобль [19]). Похожие многодетекторные схемы применяются и на импульсных источниках, например в спектрометрах ARCS, Sequoia, CNCS на источни-

ке SNS (Oak-Ridge, USA) [20] (рис. 4) или таких как MAPS или LET на источнике ISIS (Didcot, United Kingdom) [21]. По сути увеличение угла регистрации рассеянных нейтронов является “компенсацией” потери интенсивности в падающем пучке из-за того, что в TOF-спектрометрах “полезные” нейтроны попадают на образец только малую часть времени работы прибора.

В спектрометрах обратной геометрии телесный угол регистрации может достигать подобных или даже больших величин при использовании пространственной фокусировки нейтронов, отраженных от специально построенного анализатора на сравнительно небольшой детектор (спектрометр IN1-LAGRANGE [23] (рис. 5), спектрометр обратного рассеяния высокого разрешения IN16B [24] в ILL) или за счет увеличения размеров отражающей кристаллической поверхности вместе с размерами детекторов (спектрометр VISION на источнике SNS [25]).

Спектрометры обратной геометрии обычно применяются для исследования динамики поликристаллических (порошковых) образцов. Современные мультипиксельные спектрометры прямой геометрии могут эффективно применяться и для изучения дисперсионных кривых возбуждений монокристаллов (рис. 6) в зависимости от требуемого интервала энергий и доступности соответствующей энергии падающих на образец нейтронов.

Возможности умножения производительности трехосных спектрометров обычно связаны с увеличением количества кристаллов-анализаторов в некоторой, сравнительно ограниченной, области углов рассеяния. Это ограничение связано с конструктивными трудностями взаимного расположения совокупности анализаторов при сохранении других преимуществ методики и приемлемых фоновых условий. Различные схемы, как правило, с использованием двумерных ПЧД были реализованы или опробованы (RITA в RISO, Дания [27], IMPS на IN8 в ILL [28], PUMA в FRM-2 [29]) или ждут завершения тестов (UFO на IN12 в ILL [30]). В указанных схемах имеется возможность одновременной регистрации нескольких (от 5 до 15, по количеству анализаторов) отдельных спектров при сканировании энергии падающих на образец нейтронов. При этом анализаторы в условиях их оптимального пространственного расположения могут быть настроены на разные энергии рассеянных нейтронов. Наряду с ростом скорости получения информации это означает, что все измеренные спектры регистрируются при несколько различных условиях по разрешению. Последнее обстоятельство может затруднять получение “однородной” информации о различных участках измеряемых спектров

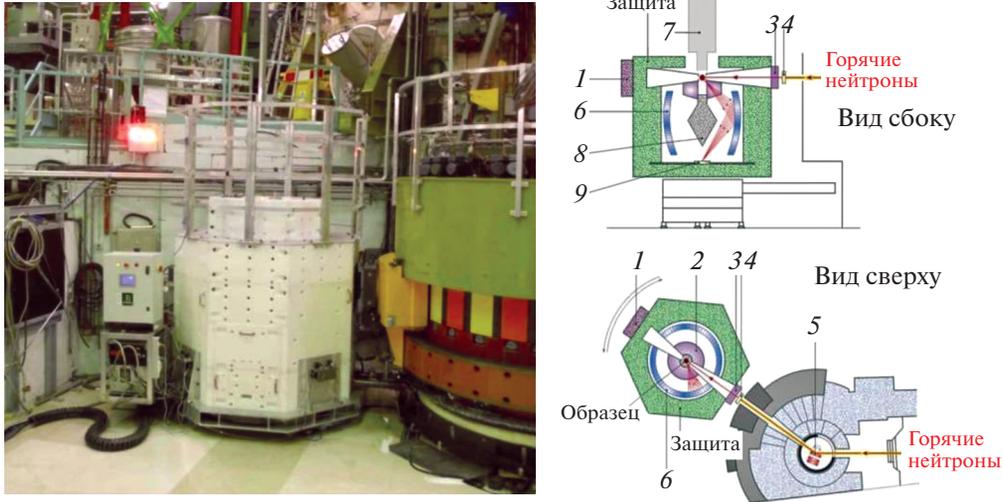


Рис. 5. Кристаллический спектрометр обратной геометрии IN1-Lagrange (ИЛЛ, Гренобль) [23], установленный на источнике “горячих” нейтронов. Слева на фото – общий вид в рабочем положении. Справа – схематически представлены сечения в вертикальной и горизонтальной плоскостях: 1 – заглушка пучка, 2 – Ве-фильтр, 3 – диафрагма, 4 – монитор, 5 – монохроматор, 6 – кристаллы пирографита, 7 – криостат с образцом, 8 – поглощающий экран, 9 – детектор. Монохроматические нейтроны, рассеянные образцом с фиксированной энергией, фокусируются на детекторе системой кристаллов пиролитического графита, размещенных на поверхности эллипсоида вращения, в геометрических фокусах которого на вертикальной оси расположены образец и детектор. Большой телесный угол для рассеянных нейтронов (~2.5 ср) и эффективный кристаллический монохроматор с тремя рабочими плоскостями и контролируемой 2D-фокусировкой обеспечивают высокую светосилу спектрометра, позволяющую изучать образцы с содержанием водорода менее 1 мг.

возбуждений, например, при построении “карт” интенсивности рассеяния.

Многоанализаторные варианты TAS с несколькими десятками эквивалентных каналов регистрации, но без применения ПЧД, также были осуществлены за счет размещения индивидуальных детекторов в каждом канале. В этом смысле прослеживается аналогия с успешными порошковыми многодетекторными дифрактометрами (D2B, D4, D20 и другие в ILL, ДИСК в НИЦ “Курчатовский институт” и другие). Многоанализаторный спектрометр MAD [31] был одной из первых подобных попыток, потенциал которых представляется пока не полностью реализованным.

Более востребованным оказался специальный вариант многоанализаторного спектрометра с эквивалентными каналами FlatCone [32, 33] (рис. 7), рассчитанный на работу в диапазоне как “теплых”, так и “холодных” нейтронов. Особой опцией этого спектрометра является возможность анализа рассеяния не только в базисной плоскости образца, но и в параллельных ей плоскостях обратного пространства за счет наклона образца и согласованного наклона набора анализаторов по аналогии с подобной функцией в дифракционном эксперименте [34]. К недостаткам этого спектрометра можно отнести его сравнительно низкое энергетическое разрешение из-за использования вертикальной плоскости отражения от анализаторов. Возможно, дальнейший прогресс

может быть связан с реализацией многоанализаторного спектрометра типа MAD с улучшенными характеристиками.

Описанные выше основные направления увеличения светосилы или “конечной” производи-

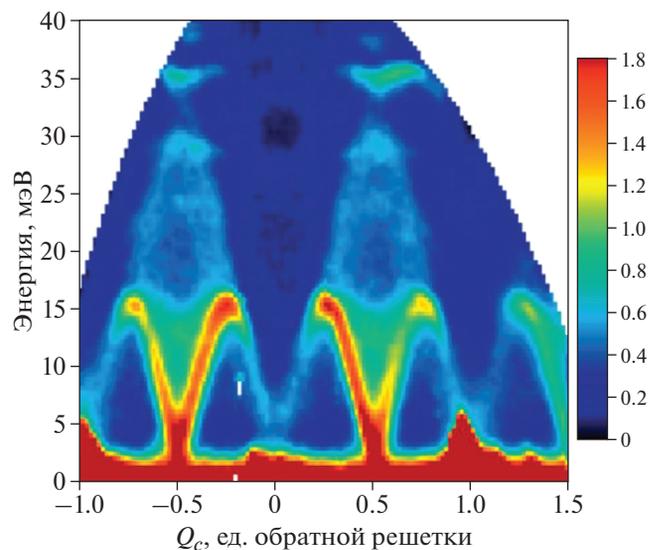


Рис. 6. Дисперсионные кривые магновов в одномерном магнетике – монокристалле CuGeO_3 , полученные на многодетекторном времяпролетном спектрометре MAPS (ISIS) [26].

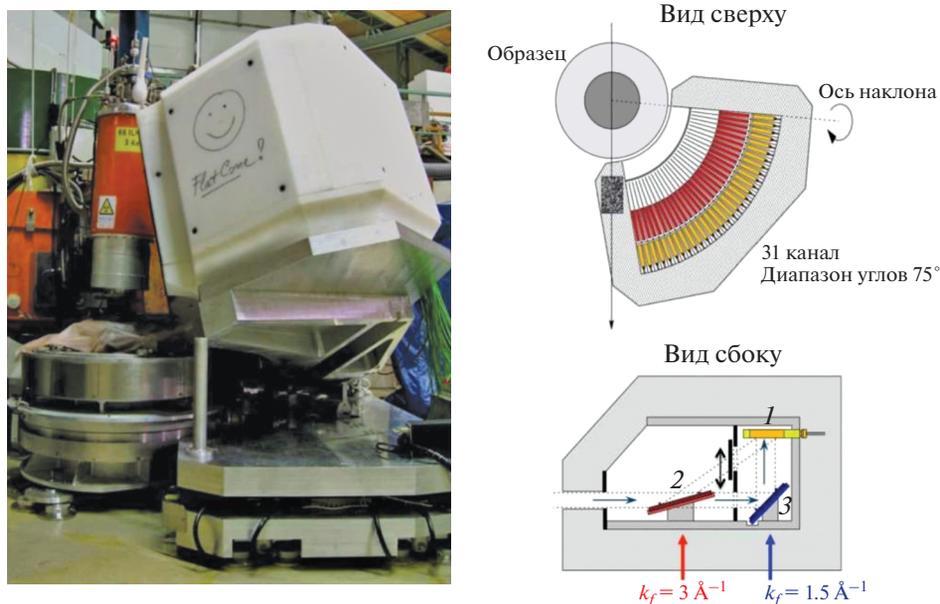


Рис. 7. Многоанализаторный (“33-осный” тридцатитрехосный) кристаллический спектрометр FlatCone (ИЛЛ, Гренобль) [33]. Слева – фото в рабочем положении на IN20 (ИЛЛ). Справа схематически показаны сечения в двух плоскостях. 31 канал этого компактного спектрометра рассеянных нейтронов состоит каждый из двух отдельных анализаторов из упругодеформированного идеально-кристаллического кремния и гелиевого счетчика нейтронов (1). Анализаторы в каждом канале, настроенные на отражение фиксированной энергии ~ 18 мэВ ($k_f = 3 \text{ \AA}^{-1}$ (2)) и ~ 4.5 мэВ ($k_f = 1.5 \text{ \AA}^{-1}$ (3)), позволяют оптимально использовать этот спектрометр на пучках “теплых” и “холодных” нейтронов соответственно. Выбор одной или другой траектории регистрируемых детекторами нейтронов осуществляется с помощью подвижного поглощающего экрана. Весь спектрометр может быть наклонен как целое (показана конструкционно реализованная ось наклона), расширяя возможности измерения спектров рассеяния в разных кристаллических плоскостях образца.

тельности нейтронных спектрометров применительно ко всему нейтронному тракту, начиная от параметров источника нейтронов и далее к эффективности первичного и вторичного спектрометров (т.е. от формирования падающего на образец пучка нейтронов до системы регистрации нейтронов, рассеянных образцом), служат получению наиболее подробной информации о динамике вещества или о движениях составляющих их ионов и магнитных моментов. Эти меры актуальны и необходимы, с одной стороны, из-за тенденции к уменьшению размеров доступных качественных образцов новых материалов и, соответственно, уменьшению интенсивности сигнала от таких образцов. С другой стороны, современные методы расчета свойств материалов для сопоставления с измеренными стали настолько детальными, что для проверки заложенных представлений о взаимодействиях в веществе требуются все более подробные экспериментальные данные. Такая же тенденция прослеживается в развитии методов и приемов получения разнообразных внешних условий на образце (температура, давление, внешнее магнитное и электрическое поле). Они необходимы для выяснения и анализа природы их физических свойств, а также изучения реак-

ции материалов на возможные воздействия, испытываемые, например, при их функционировании в полезных устройствах.

Аппаратура для создания условий на образце

Современные источники нейтронов оснащены самым современным и совершенным оборудованием для создания совокупности внешних условий на изучаемых образцах. Очевидным условием для любой подобной аппаратуры является высокая прозрачность для нейтронного излучения в области размещения образца и возможно большее открытие углового диапазона для рассеянных нейтронов. Сложность отдельных видов оборудования заставляет различные центры объединять свои усилия для создания тех или иных специальных устройств, необходимых для проведения исследований свойств вещества.

Температура. Наиболее распространенным и доступным внешним воздействием является температура образца. Абсолютным стандартом стал так называемый “оранжевый криостат” (Orange cryostat), созданный во второй половине 70-х годов в Институте Лауэ–Ланжевена. Он основан на использовании жидкого гелия в качестве охлади-

теля и позволяет получать контролируемую и практически неограниченно по времени стабильную температуру от 1.5 до 320 К. Достаточно широко распространены и различные варианты “сухих” (т.е. без применения жидкого гелия) криорефрижераторов, работающих вместе с компрессором газообразного гелия и позволяющих “опускаться” до 2.5 К в лучших экземплярах этого оборудования. Вариант “оранжевого криостата” в виде крио-печи (cryofurnace) позволяет расширить температурный интервал на образце до ~575 К или 300°C. Более высокие температуры достигаются в специальных печах с рабочим интервалом температур от комнатной до 1650°C, ставших уже стандартным оборудованием для нейтронного эксперимента.

Получение температур ниже 1.5 К требует специального дополнительного оборудования. Обычно такие температуры достигаются в специальных “вставках” или криостатах второй ступени, охлажденных изначально в стандартном криостате. Наиболее распространенный метод охлаждения в этих устройствах основан на понижении температуры при смешивании различных пропорций изотопов ^4He и ^3He в одном объеме или их “растворении”. В подобных “криостатах растворения” достигаются температуры до нескольких сотых долей градуса, минимально до 0.03 К. Получение самых низких температур в этом интервале может быть иногда ограничено разогревом образца из-за поглощения в нем нейтронов падающего пучка.

Магнитное поле. В настоящее время самые высокие магнитные поля, используемые в экспериментах по нейтронной спектроскопии, достигают 15 Тл. Ограничение связано с пределом для плотности электрического тока, который может быть заведен в обмотки сверхпроводящих катушек (соленоидов), применяемых для создания магнитного поля. Подобные криогенные устройства конструируются с учетом требования нейтронного эксперимента и, как правило, обеспечивают доступ к достаточно широкому интервалу углов для рассеянных нейтронов.

Температурный режим для образца в сверхпроводящих магнитах такой же, как и в “оранжевых криостатах” — от 1.5 до 320 К. При этом низкотемпературные вставки могут быть использованы и в магнитах для расширения пределов работы с магнитными полями в области сверхнизких температур. Отметим, что сверхпроводящие магниты характеризуются сравнительно большим потреблением жидкого гелия. В современных конструкциях используется процесс конденсации испаряющегося гелия внутри криостата за счет дополнительного охлаждения встроенным гелиевым рефрижератором. Это позволяет продлить автономный режим работы магнита,

т.е. без внешнего подлива жидкого гелия, на комфортный срок до недели. Современные проекты получения более высоких магнитных полей для нейтронного эксперимента связываются с “гибридными” конструкциями, включающими как сверхпроводящую, так и резистивную компоненты, создающие магнитное поле.

Давление. Создание высокого давления на образце является во многих случаях предпочтительным воздействием, поскольку позволяет непосредственно изучать зависимость межатомных сил в веществе от расстояния между атомами, что не всегда получается при температурных изменениях. Но это является и наиболее трудно технически осуществимым воздействием. С одной стороны, создание более высоких давлений сопряжено с необходимым уменьшением размеров изучаемого образца того или иного вещества. С другой — удержание этого давления требует наличия значительного количества дополнительных материалов в нейтронном пучке и собственно камеры высокого давления. Все это приводит к уменьшению полезного сигнала и возрастанию экспериментального фона. Поэтому в зависимости от требуемого давления применяются разнообразные технические решения, позволяющие в той или иной степени оптимизировать эксперимент по нейтронной спектроскопии.

Для давлений до 5–6 кбар (5–6 тысяч атмосфер) обычно применяют камеры газового давления, сопряженные с компрессором для создания и изменения давления. Практически всегда в качестве передающего давления газа используется гелий. Этот способ обеспечивает наиболее мягкое воздействие на образец, но и достижимый диапазон давлений является весьма низким с точки зрения получения значимых изменений свойств в подавляющем большинстве материалов. Такие камеры изготавливают из “упрочненного” алюминия, т.е. сплавов на его основе, что обусловлено “прозрачностью” алюминия для нейтронного пучка и пониженным “паразитным” рассеянием нейтронов.

Давления в интервале до 10–12 кбар обычно создаются в “зажимных” ячейках давления (clamp cells) из других, более прочных сплавов, которые, к сожалению, не так оптимальны с точки зрения эксперимента по рассеянию нейтронов. Различные вариации таких ячеек могут позволить создание давлений до 30 кбар при нарастающих трудностях с выделением полезного рассеяния на фоне паразитного из-за увеличенных размеров самих камер высокого давления. Тем не менее применяемые “зажимные” ячейки этого типа остаются сравнительно компактными для того, чтобы поместиться в обычный или модифицированный криостат для их последующего охлаждения или, в более редких случаях, нагрева.

Для уменьшения возможных разрушающих сдвиговых деформаций в образце при приложении давления применяют специальные жидкости в качестве передающей давление среды. При этом следует учитывать, что в данном диапазоне давлений практически нет веществ, остающихся действительно в жидкой фазе даже при комнатной температуре, не говоря уже о более низких температурах.

Еще более высокие давления в совместимых с нейтронным экспериментом устройствах получают в технике наковален (anvil cells), в которой образец помещается в объем, создаваемый между двух наковален из твердого материала и раздавливаемой ими металлической “прокладки” (gasket). Наибольшее распространение в этой технике получили специальные ячейки с тороидальной поддерживающей прокладкой и твердосплавными (из спеченного карбида вольфрама) наковальнями, позволяющими получать давления до 120 кбар в реальных экспериментах по нейтронной спектроскопии [35]. Отметим, что кроме некоторых жидкостей в качестве передающей давление среды при достаточно твердых образцах мог быть использован сравнительно пластичный металлический свинец. Несмотря на свои достаточно внушительные размеры, подобные устройства в некоторых случаях могут быть использованы в экспериментах при низких температурах.

Другие возможности создания специальных условий на образце. Кроме рассмотренных выше устройств, создающих заданные условия на образце, применяются другие способы для изменения физического состояния изучаемого материала. Они часто реализуются в виде специальной вставки в криостат, что позволяет совмещать действие выбранного параметра с температурным воздействием. Например, образец материала, изолированный в специальной ячейке, может быть соединен с внешней системой подачи специального газа, например, для наблюдения изменения свойств материала при поглощении определенного количества этого газа. Другой вариант такой вставки может обеспечить подачу электрического поля непосредственно на образец через специальные электрические вводы. В некоторых случаях требуется создать однодоменный образец при фазовом переходе из высокосимметричной в менее симметричную низкотемпературную кристаллическую фазу. Если температура такого перехода ниже комнатной, то однодоменный образец может быть получен при приложении одноосного давления при переходе через точку фазового перехода. Передача механического усилия внутри криостата может быть осуществлена в специально сконструированной вставке в криостат. Возможно использование специальных вставок для изменения ориентации монокристаллических образцов и их подстройки в нейтронном пучке в

условиях низких температур. При исследовании поликристаллических материалов в ряде случаев применяются особые устройства, позволяющие закрепить в них сразу несколько образцов и автоматически сменять их один за другим в нейтронном пучке, включая измерения при низких температурах, для экономии времени на перегрузку.

Поляризационный анализ. Особого внимания заслуживают устройства, используемые в современном эксперименте с поляризованными нейтронами. Контроль за направлением магнитного момента нейтрона позволяет при необходимости отделить различные виды рассеяния как в магнитно-чувствительных, так и немагнитных материалах. Например, разделить ветви магнитных и немагнитных возбуждений, или компоненты когерентного и некогерентного рассеяния нейтронов, чувствительные к коллективным или индивидуальным движениям атомов в веществе.

Нейтроны, рождающиеся в известных источниках в процессе ядерных реакций, не имеют предпочтительной поляризации, т.е. исходные пучки нейтронов не поляризованы. Методы создания и анализа предпочтительной поляризации нейтронных пучков включают в себя отражение от намагниченного кристалла-ферромагнетика (применяется обычно для тепловых или холодных нейтронов). Наиболее часто для этого используется сплав Гейслера (Heusler alloy) Cu_2MnAl . Такой монокристалл, помещенный в насыщающее магнитное поле, является одновременно монохроматором и поляризатором отраженного пучка. Разделение монохроматизации и поляризации может быть реализовано несколькими способами, например при прохождении пучка через намагниченные зеркала (обычно применяется для холодных нейтронов) или через специальные спиновые фильтры с газом из изотопа ^3He , в котором ядерные спины поляризованы специфической оптической накачкой. Такие спиновые фильтры могут применяться в широком диапазоне нейтронных энергий и представляют собой практически единственный реальный способ для поляризации “горячих” нейтронов. Увеличение времени “жизни” спиновых фильтров требует создания внутри объема поляризованного газа исключительно однородного магнитного поля, а также специальных мер для уменьшения потерь поляризации газа из-за столкновения его молекул с материалом стенок объема.

После создания поляризации нейтронного пучка требуется ее контроль на всем пути от поляризатора до образца и затем до анализатора поляризации в рассеянном пучке. Это осуществляется за счет создания ведущего магнитного поля с областями его плавного изменения для адиабатического поворота момента или резкого изменения для

введения заданной нейтронной поляризации в область другого значения или направления поля.

Использование поляризованных пучков сопряжено с существенными потерями регистрируемой интенсивности. По сравнению с “неполяризованными” конфигурациями потери в сопоставимом по разрешению эксперименте с поляризационным анализом могут составлять десятки раз. Это приводит к сравнительно низкой светосиле спектроскопических измерений с поляризационным анализом. Однако его практическое применение оказывается достаточно востребованным из-за высокой информативности метода.

Наиболее надежный метод для выделения магнитного рассеяния в спектроскопическом эксперименте состоит в измерении сечения рассеяния с переворотом спина нейтрона (spin-flip, SF) или без его переворота (non-spin-flip, NSF). Сопоставление трех компонент рассеяния с различной исходной поляризацией нейтронов по отношению к переданному при рассеянии импульсу позволяет, в принципе, однозначно решить эту задачу и составляет основу “классического” эксперимента с анализом поляризации нейтронов [36]. Этот метод, получивший название метода “продольной поляриметрии”, реализуется при конечном магнитном поле на образце и позволяет измерять проекцию на направление этого поля вектора поляризации в рассеянном пучке. Недавнее развитие этого метода, или “сферическая поляриметрия” [37], позволяет осуществлять контроль за изменением всех декартовых компонент спина при рассеянии и таким образом определять практически все девять компонент тензора изменения нейтронной поляризации. Новый метод требует отсутствия магнитного поля вокруг образца. Технически такая область пониженного поля, на несколько порядков меньшего, чем магнитное поле Земли, создается в специальных устройствах для магнитной экранировки. Их практическими реализациями для трехосного спектрометра являются Стурад (устройство со сверхпроводящим экраном) [38] или Мурад (с использованием магнитных экранов из пермаллоя – так называемый μ -metal) [39].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предельно кратко представлены основные типы источников нейтронного излучения и приборов (спектрометров), используемых в экспериментах по неупругому рассеянию нейтронов в ведущих исследовательских центрах мира. На этой основе можно попытаться сформулировать “минимальные” требования к приборному парку нового источника, для определения – реакторного типа. На наш взгляд в этот список обязательно должны входить трехосные спектрометры для работы с тепловыми и холодными нейтронами.

Каждый из этих типов следует оснастить средствами для работы с пучками поляризованных нейтронов. Кроме этого, необходимо обеспечить наличие времяпролетного спектрометра прямой геометрии с массивом позиционно-чувствительных детекторов большой площади и кристаллического спектрометра обратной геометрии с максимальным стерическим углом для рассеянных нейтронов. Как минимум, на начальном этапе все эти спектрометры должны быть оснащены криостатами для регулировки температуры образцов в интервале от гелиевой до комнатной.

В этой минимальной конфигурации набор нейтронных спектрометров позволит проводить исследования большой группы материалов, представляющих сегодня интерес для фундаментальной и прикладной науки, таких как необычные сверхпроводники и другие сильно коррелированные электронные системы, мультиферроики и релаксоры, аморфные, композитные, нанокристаллические и углеродные материалы, водородсодержащие соединения для энергосбережения и изучения водородных связей в биологических и многих других объектах. Таким образом, уникальные возможности нейтронной спектроскопии для изучения новых материалов и физических основ, определяющих их строение и свойства, несомненно, создадут захватывающие перспективы для привлечения молодых специалистов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965. 608 с.
2. Носик Ю.З., Озеров Р.П., Хенниг К. Структурная нейтронография. Т. 1. Нейтроны и твердое тело. М.: Атомиздат, 1979. 344 с.; Изюмов Ю.А., Найш В.Е., Озеров Р.П. Т. 2. Нейтронография магнетиков. 1981. 312 с.; Изюмов Ю.А., Черноплеков Н.А. Т. 3. Нейтронная спектроскопия. М.: Энергоатомиздат, 1983. 328 с.
3. Турчин В.Ф. Медленные нейтроны. М.: Госатомиздат, 1963. 372 с.
4. Squires G.L. Introduction to the theory of thermal neutron scattering. Cambridge Univ. Press, 2012. 260 p. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139107808>
5. <https://www.ill.eu/users/instruments/instruments-list/thales/>
6. <http://www.isis.stfc.ac.uk/instruments/mari/>
7. Dorner B. Coherent Inelastic Neutron Scattering in Lattice Dynamics. Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1982. 96 p.
8. Shirane G., Shapiro S.M., Tranquada J.M. Neutron Scattering with a Triple-Axis Spectrometer. Cambridge University Press, 2004. 273 p. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511534881>
9. Sears V.F. // Neutron News. 1992. V. 3. № 3. P. 26. <https://doi.org/10.1080/10448639208218770>
10. <http://www.atl.ac.at/%7Eneutropt/scattering/ScatteringLengthsAdvTable.pdf>

11. Бредов М.М., Котов Б.А., Окунева Н.М. и др. // ФТТ. 1967. Т. 9. С. 237.
12. Marshall W., Lovesey S.W. Theory of Thermal Neutron Scattering. Clarendon Press. Oxford, 1971. 600 p.
13. Holland-Moritz E., Wohlleben D., Loewenhaupt M. // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. P. 7482.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.25.7482>
14. Balcar E., Lovesey S.W. Theory of magnetic neutron and photon scattering. Oxford University Press, 1989. 240 p.
15. Mixed valence compounds. NATO Advanced Study Institute Series C: Mathematical and Physical Sciences. Ed. Brown D.B. V. 58. Kluwer Group. Dordrecht: Holland, 1980. 522 p.
<https://doi.org/10.1007/978-94-009-9076-0>
16. Alekseev P.A., Ivanov A.S., Dorner B. et al. // Europhys. Lett. 1989. V. 10. P. 457.
<https://doi.org/10.1209/0295-5075/10/5/012>
17. Rauch H., Summhammer J., Weinfurter H. // Neutron Scattering in the ‘Nineties’. Proc. Int. Conf. IAEA Vienna, 1985. P. 53.
18. Steyerl A. // Nucl. Instrum. Methods. A. 1975. V. 125. P. 461.
[https://doi.org/10.1016/0029-554X\(75\)90265-7](https://doi.org/10.1016/0029-554X(75)90265-7)
19. <https://www.ill.eu/fr/utilisateurs/instruments/instruments-list/in5/>
20. Stone M.B., Niedziela J.L., Abernathy D.L. et al. // Rev. Sci. Instrum. 2014. V. 85. P. 045113.
<https://neutrons.ornl.gov/instruments/>
<https://doi.org/10.1063/1.4870050>
21. <https://www.isis.stfc.ac.uk/Pages/Instruments.aspx>
22. Ehlers G., Podlesnyak A.A., Niedziela J.L. et al. // Rev. Sci. Instrum. 2011. V. 82. P. 085108.
<https://doi.org/10.1063/1.3626935>
23. <https://www.ill.eu/fr/utilisateurs/instruments/instruments-list/in1-taslagrange/>
24. <https://www.ill.eu/fr/utilisateurs/instruments/instruments-list/in16b/>
25. <https://neutrons.ornl.gov/vision/>
26. Arai M. // Neutron Scattering – Fundamentals. Experimental Methods in the Physical Sciences. Eds. Fernandez-Alonso F., Price D.L. New York: Academic Press, 2013. Ch. 3. P. 245.
27. Lefmann K., McMorro D.F., Rønnow H.M. et al. // Physica B. 2000. V. 283. P. 343.
[https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(00\)00335-5](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(00)00335-5)
28. Jimenez-Ruiz M., Hiess A., Currat R. et al. // Physica B. 2006. V. 385–386. P. 1086.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2006.05.373>
29. Sobolev O., Hoffmann R., GIBHARDT H. et al // Nucl. Instrum. Methods. A. 2015. V. 772. P. 63.
<https://doi.org/10.1016/j.nima.2014.11.007>
30. <https://www.ill.eu/users/instruments/instruments-list/in12/ufo/>
31. Demmel F., Fleischmann A., Gläser W. // Nucl. Instrum. Methods. A. 1998. V. 416. P. 115.
[https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(98\)00559-2](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(98)00559-2)
32. Kempa M., Janousova B., Saroun J. et al // Physica B. 2006. V. 385–386. P. 1080.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2006.05.371>
33. <https://www.ill.eu/users/instruments/instruments-list/flatcone/>
34. Hohlwein D., Hoser A., Prandl W. // J. Appl. Cryst. 1986. V. 19. P. 262.
<https://doi.org/10.1107/S002188988608946X>
35. Klotz S. // Z. Kristallogr. 2001. B. 216. S. 420.
<https://doi.org/10.1524/zkri.216.8.420.20359>
36. Moon R.M., Riste T., Koehler W.C. // Phys. Rev. 1969. V. 181. № 2. P. 920.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.181.920>
37. Tasset F. // Physica B. 2001. V. 297. P. 1.
[https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(00\)00874-7](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(00)00874-7)
38. Tasset F., Brown P.J., Lelievre-Berna E. et al. // Physica B. 1999. V. 267–268. P. 69.
[https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(99\)00029-0](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(99)00029-0)
39. Janoschek M., Klimko S., Gähler R. et al. // Physica B. 2007. V. 397. P. 125.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2007.02.074>