

УДК 538.97

## ПОГЛОЩЕНИЕ НЕЙТРОНОВ В СЛОИСТОЙ СТРУКТУРЕ

© 2022 г. Ю. В. Никитенко\*

Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка  
Объединенного института ядерных исследований,  
Дубна, Московская область, 141980 Россия

\*e-mail: nikiten@nf.jinr.ru

Поступила в редакцию 12.12.2021 г.

После доработки 25.01.2022 г.

Принята к публикации 25.01.2022 г.

Развитие рефлектометрии нейтронов в настоящее время связано, в частности, с регистрацией вторичного излучения, испускаемого атомными ядрами. В этой связи актуальной является задача определения вероятности поглощения нейтронов в слоистой структуре. Приведены различные выражения для коэффициента поглощения нейтронов. В качестве примера выполнены расчеты для трехслойной резонаторной структуры.

**Ключевые слова:** слоистая структура, поглощение нейтронов.

**DOI:** 10.31857/S1028096022070135

### ВВЕДЕНИЕ

Стандартная рефлектометрия нейтронов использует их отражение от исследуемой структуры [1]. В связи с исследованиями магнитных эффектов близости, возникающих при контакте ферромагнитного и сверхпроводящего слоев [2], принципиально важным является то, с каким из двух контактирующих элементов связаны возникающие на границе раздела изменения пространственного распределения намагниченности. Для выяснения этого необходимо одновременно регистрировать нейтроны и вторичное излучение, возникающее после захвата нейтронов атомными ядрами. В работе приводятся соотношения для вычисления различными способами коэффициента поглощения нейтронов в слоистой структуре. В качестве примера приведены расчеты коэффициента поглощения нейтронов для трехслойной резонаторной структуры.

### ТЕОРИЯ И РАСЧЕТЫ

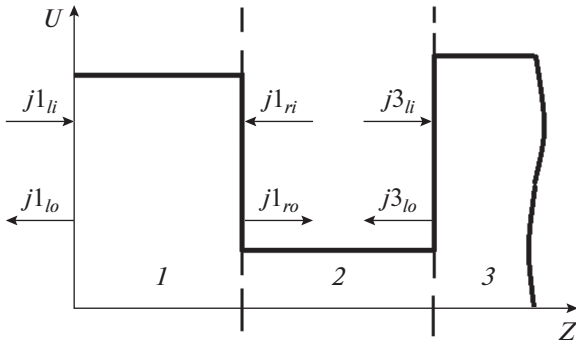
При прохождении нейтронов через слоистую структуру образуются отраженный  $J_R$ , пропущенный через структуру  $J_T$  и поглощенный в структуре  $J_M$  потоки нейтронов. Для количественной характеристики процесса вводят, соответственно, коэффициенты отражения  $R$ , пропускания  $T$  и поглощения  $M$  нейтронов, являющиеся отношением потоков  $J_R$ ,  $J_T$  и  $J_M$  к падающему на структуру потоку  $J_0$ . Для коэффициентов  $R$ ,  $T$  и  $M$  выпол-

няется соотношение, отражающее баланс потоков в структуре [3]:

$$R + T + M = 1. \quad (1)$$

Рассмотрим трехслойную структуру. При определенных значениях параметров данная структура обладает резонансными свойствами (резонаторная структура), что отражается в больших значениях производных для  $R(k)$ ,  $T(k)$  и  $M(k)$ , где  $k$  – волновой вектор нейтрона, [4, 5]. В этом случае вычисление  $M(k)$  необходимо проводить с высокой точностью. На рис. 1 показан пространственный профиль потенциала взаимодействия нейтронов с резонаторной структурой. Нейтроны падают на структуру со стороны первого слоя, имеющего высокий потенциал взаимодействия нейтронов с веществом. Второй слой имеет низкий потенциал взаимодействия. Третий слой, как и первый, имеет высокий потенциал взаимодействия и представлен в виде полубесконечной среды, одновременно играющей роль подложки. Рассмотрим процедуру вычисления амплитуд отражения и пропускания нейтронов. Используем метод введения “вакуумных щелей”, сформулированный В.К. Игнатовичем [6]. Данный метод вычисления амплитуд для всей структуры использует амплитуды отдельных слоев. Для амплитуд отражения  $r$  и пропускания  $t$  отдельного слоя имеем:

$$\begin{aligned} r &= r_0 + t_i (1 - e r_i e r_i)^{-1} e r_i e t_0, \\ t &= t_i (1 - e r_i e r_i)^{-1} e t_0, \quad t_{i,0} = 1 + r_{i,0}, \end{aligned} \quad (2)$$



**Рис. 1.** Пространственный профиль потенциала взаимодействия нейтронов с резонаторной структурой с указанием входящих и выходящих потоков в слоях 1, 2 и 3.

где  $e = \exp(ik_z d)$ ,  $k_z = (k_{0z}^2 - k_v^2 + ik_w^2)$  – перпендикулярная компонента волнового вектора нейтрона в слое,  $k_{0z}$  – перпендикулярная компонента волнового вектора нейтрона в вакууме,  $k_v = (2mV)^{1/2}/\hbar$ ,  $k_w = (2mW)^{1/2}/\hbar$ ,  $U = V - iW$  – потенциал взаимодействия нейтрона с веществом,  $d$  – толщина слоя,  $r_0 = (k_{0z} - k_z)/(k_{0z} + k_z)$  – амплитуда отражения нейтронной волны от границы раздела вакуум–слой,  $r_i = -r_0$ ,  $t_{0,i} = 1 + r_{0,i}$ ,  $m$  – масса нейтрона,  $\hbar$  – постоянная Планка. Выражения (2) записаны в виде, позволяющем их использовать и в случае магнитных структур, когда составляющие их сомножители представляют собой действующие на спинор операторы в виде матриц  $2 \times 2$ .

Для вычисления амплитуд структуры введем между слоями вакуумные щели бесконечно малой толщины [7], которые на рис. 1 показаны штриховыми линиями. Имеем соотношения для амплитуд структур из двух слоев:

$$\begin{aligned} r_{12} &= r_1 + t_1(1 - r_2 r_1)^{-1} r_2 t_1, & r_{21} &= r_2 + t_2(1 - r_1 r_2)^{-1} r_1 t_2, \\ r_{23} &= r_2 + t_2(1 - r_3 r_2)^{-1} r_3 t_2, & t_{12} &= t_2(1 - r_1 r_2)^{-1} t_1, \\ t_{21} &= t_1(1 - r_2 r_1)^{-1} t_2, & t_{23} &= t_3(1 - r_2 r_3)^{-1} t_2. \end{aligned} \quad (3)$$

В (3) порядок следования подстрочных индексов в направлении слева направо указывает направление распространения нейтронной волны. Для структуры из трех слоев следуют соотношения:

$$\begin{aligned} r_{123} &= r_{12} + t_{21}/(1 - r_3 r_{21})^{-1} r_3 t_{12}, \\ t_{123} &= t_3(1 - r_{21} r_3)^{-1} t_{12}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для коэффициента отражения от всей структуры из трех слоев имеем:

$$R_{\text{str}} = |r_{123}|^2. \quad (5)$$

Поскольку третий слой является в данном случае неограниченной средой, то для коэффициента поглощения нейтронов во всей структуре имеем:

$$M_{\text{str}} = 1 - R_{\text{str}}. \quad (6)$$

Рассмотрим теперь способы вычисления коэффициента поглощения нейтронов в отдельных слоях структуры, в некоторой части слоя, а также в случае отдельного изотопа элемента при наличии их смеси.

В [8] рассматривался вопрос определения интенсивности выхода вторичного излучения из слоя конечной толщины. Было отмечено, что в 1978 г. Афанасьевым и Коном было предложено определять интенсивность поглощенного рентгеновского излучения как разность входящих в слой и выходящих из слоя потоков. Действительно, условие (5), записанное для всей структуры, означает, что поглощенный в структуре поток есть разность между падающим на структуру (входящим в структуру) и отраженным от нее (выходящим из структуры) потоками. Аналогично для отдельного слоя внутри структуры поглощенный в ней поток будет разностью следующих составляющих: суммы двух входящих с разных сторон потоков и суммы двух выходящих из разных сторон слоя потоков. На рис. 1 показаны входящие  $j^1_{li}$ ,  $j^1_{ri}$ ,  $j^3_{li}$  и выходящие  $j^1_{lo}$ ,  $j^1_{ro}$ ,  $j^3_{lo}$  потоки, для слоев 1 и 3 соответственно. Слой 2 находится между слоями 1 и 3; для него входящими будут потоки, выходящие из слоев 1 и 3, а выходящими – потоки, входящие в слои 1 и 3.

Полагая  $|\psi_0|^2 = 1$ , имеем для входящего и выходящего потоков  $j^1_i$  и  $j^1_o$  и коэффициента поглощения  $M_1$  в первом слое:

$$\begin{aligned} j^1_i &= v_0 \left( 1 + |(1 - r_{23} r_1)^{-1} r_{23} t_1|^2 \right), \\ j^1_o &= v_0 \left( R_{\text{str}} + |(1 - r_1 r_{23})^{-1} t_1|^2 \right), \\ M_1 &= \left( 1 + |(1 - r_{23} r_1)^{-1} r_{23} t_1|^2 \right) - \\ &\quad - \left( R_{\text{str}} + |(1 - r_1 r_{23})^{-1} t_1|^2 \right). \end{aligned} \quad (7)$$

Аналогично для коэффициентов поглощения в слоях 2 и 3 имеем:

$$\begin{aligned} M_2 &= |(1 - r_1 r_{23})^{-1} t_1|^2 + |(1 - r_3 r_{21})^{-1} r_3 t_{12}|^2 - \\ &\quad - |(1 - r_{23} r_1)^{-1} r_{23} t_1|^2 + |(1 - r_{21} r_3)^{-1} t_{12}|^2, \\ M_3 &= |t_3(1 - r_{21} r_3)^{-1} t_{12}|^2 - |(1 - r_3 r_{21})^{-1} r_3 t_{12}|^2. \end{aligned} \quad (8)$$

Из (7), (8) для коэффициента поглощения в структуре из трех слоев следует:

$$M_{\text{str}} = M_1 + M_2 + M_3 = 1 - R_{\text{str}}. \quad (9)$$

Отметим, что коэффициент поглощения нейтронов в слое 3 пропорционален потоку  $j_3$ , входящему в этот слой:

$$M_3 = \text{Re}(k_3) |t_{123}|^2 / k_{0z} = j_3 / v_0. \quad (10)$$

В слое 3 в виде полубесконечной среды, характеризуемой потенциалом с мнимой частью, поток  $j_3$  будет полностью поглощаться. В среде с потенциалом без мнимой части поток будет распространяться в слое 3 без поглощения.

Как уже отмечалось, для решения некоторых задач необходимо определять пространственное распределение элементов в структуре. Для нейтронов соответствующая задача состоит в определении парциального (для конкретного изотопа элемента) коэффициента поглощения нейтронов.

Запишем выражение для парциального коэффициента поглощения. Поглощенный в структуре поток нейтронов  $j_{\text{abs}}$  пропорционален установившемуся в структуре потоку нейтронов  $j_{\text{str}} = nv$  ( $n = |\psi|^2$  – плотность нейтронов), умноженному на макроскопическое сечение поглощения нейтронов ядрами  $N\sigma$ , где  $N$  – плотность ядер,  $\sigma$  – сечение поглощения нейтронов ядром. С другой стороны,  $N\sigma v = 2W/\hbar$  [9]. В результате имеем для парциального (индекс “ $p$ ”) коэффициента поглощения [10]:

$$M_p(k_{0z}) = \int |\psi(z)|^2 k_{p,w}^2(z) / (k_{0z} |\psi_0|^2) dz, \quad (11)$$

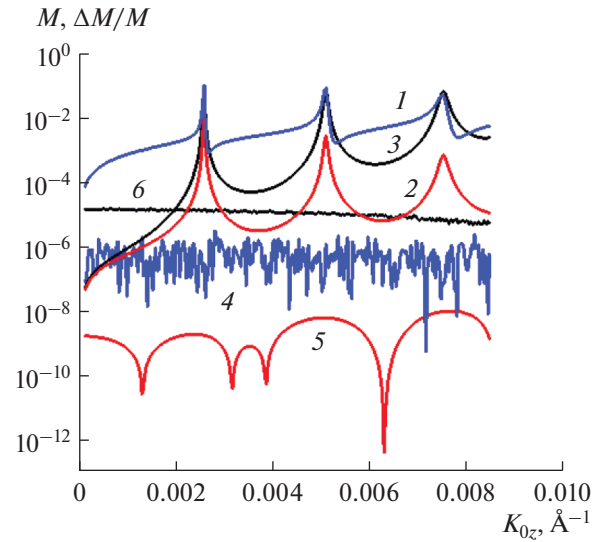
где  $k_{p,w}^2 = 2mW_p/\hbar^2$ .

Как следует из (11), парциальный коэффициент  $M_p$  является сверткой плотности конкретного элемента  $N_p$  и плотности нейтронов  $|\psi(z)|^2$ . Зависимость  $|\psi(z)|^2$  определяется суммарным распределением потенциалов изотопов элементов, в то время как  $k_{p,w}^2$  пропорционально мнимой части парциального потенциала. Из (10) и соотношения для потенциала смеси элементов  $U = \sum_p U_p$  следует, что полный коэффициент поглощения в структуре  $M$  равен сумме парциальных коэффициентов  $M = \sum_p M_p$ . Рассмотрим для примера выражение  $\psi(z)$  в среднем слое резонаторной структуры:

$$\begin{aligned} \psi(z) = & (1 - \exp(ik_2(d_2 - z)))r_{2r}\exp(ik_2d_2)r_{2l} \times \\ & \times \exp(ik_2z)^{-1} [1 + \exp(ik_2(d_2 - z)) \times \\ & \times r_{2r}\exp(ik_2(d_2 - z))] \times \\ & \times \exp(ik_2z)t_{2o}(1 - r_{1r}r_{2o})^{-1}t_{1}\psi_0, \end{aligned} \quad (12)$$

где  $r_{2l} = -r_{2i} + t_{2o}(1 - r_{1r}r_{2o})^{-1}r_{1t}t_{2i}$  – амплитуда отражения от структуры “левая граница второго слоя–первый слой”,  $r_{2r} = -r_{2i} + t_{2,o}(1 - r_{3r}r_{2o})^{-1}r_{3t}t_{2i}$  – амплитуда отражения от структуры “правая граница второго слоя–третий слой”.

В принципе, для вычисления  $\psi(z)$  в слое можно поступить аналогично способу вычисления амплитуд для структуры, сделав в слое на уровне с координатой “ $z$ ” вакуумный разрез. В результате получим структуру с подложкой и четырьмя следующими слоями: первый слой, “второй слева



**Рис. 2.** Зависимости коэффициентов поглощения  $M_i$  и их относительной разности  $\Delta M_i/M_i$  от  $k_{0z}$  для слоев  $i = 1-3$  структуры: 1 –  $M_1$ , 2 –  $M_2$ , 3 –  $M_3$ , 4 –  $\Delta M_1/M_1$ , 5 –  $\Delta M_2/M_2$ , 6 –  $\Delta M_3/M_3$ . Параметры структуры:  $d_1 = 20$  нм,  $d_2 = 100$  нм,  $k_{1v} = k_{3v} = 0.091$  нм $^{-1}$ ,  $k_{1w}^2 = k_{3w}^2 = 3 \times 10^{-3} k_{1v}^2$ ,  $k_{2v} = 0$ ,  $k_{2w}^2 = 10^{-5}(0.055)^2$  нм $^{-2}$ . Шаг интегрирования 0.1 нм, верхний предел интегрирования в слое 3 равен 1 мм.

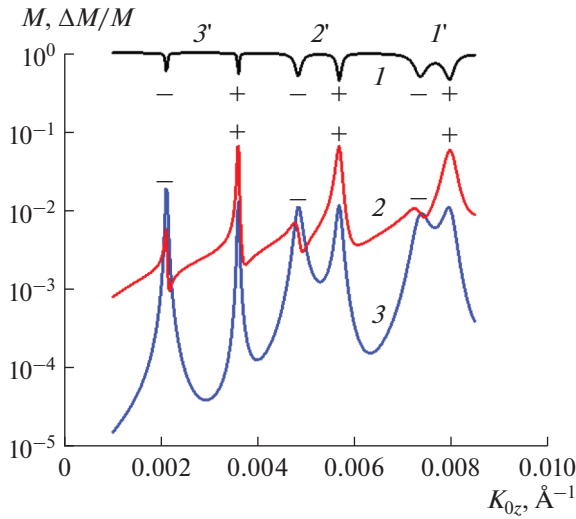
слой” от начала второго слоя до координаты “ $z$ ”, “второй справа слой” от координаты “ $z$ ” до конца второго слоя и третий слой. После этого волновую функцию в точке “ $z$ ”, являющуюся суммой встречно распространяющихся функций, определим, используя рекуррентные соотношения для амплитуд отражения и пропускания четырех полуплечных слоев.

На рис. 2 приведены зависимости  $M_1$ ,  $M_2$  и  $M_3$ , полученные из соотношений (7), (8), и зависимости  $\Delta M_1/M_1$ ,  $\Delta M_2/M_2$  и  $\Delta M_3/M_3$ , где  $\Delta M_{1,2,3}$  – разность коэффициентов, рассчитанных по соотношениям (7), (8) и (10). Из рисунка видно, что отличие расчетных значений коэффициентов, полученных исходя из формул (7), (8) и (10), не превышает  $10^{-5}$  для  $M_1$ ,  $10^{-6}$  для  $M_2$  и  $10^{-8}$  для  $M_3$  и обусловлено точностью вычисления коэффициентов.

В случае магнитных слоев и поляризованных нейтронов используются те же соотношения, но для операторов амплитуд. Уравнение баланса потоков выглядит как

$$\sum_f R_{if} + T_{if} + M_{if} = 1, \quad (13)$$

где “ $i$ ” – индекс начального спинового состояния, “ $f$ ” – индекс конечного спинового состояния. Суммирование в (13) идет по конечному состоянию.



**Рис. 3.** Зависимости коэффициентов отражения  $R^{++}$  (1), поглощения  $M^{++}$  (2) и  $M^{+-}$  (3) для магнитно-неколлинеарной структуры. Области 1', 2', 3' на кривой 1 соответствуют трем интерференционным порядкам (текст). Параметры структуры:  $d1 = 15$  нм,  $d2 = 100$  нм,  $k1_v = k3_v = 0.091$  нм $^{-1}$ ,  $k1_w^2 = k3_w^2 = 3 \times 10^{-3} k1_v^2$ ,  $k2_v = 0.015$  нм $^{-1}$ ,  $k2_w^2 = 10^{-5} k2_v^2$ . X- и Z-компоненты намагниченности слоев 1–3:  $m1_x = m1_z = m3_x = m3_z = 2$  кГс,  $m2_x = m2_z = 1$  кГс.

Запишем выражение для коэффициента поглощения в случае магнитной неколлинеарной структуры, когда имеют место переходы из начального спинового состояния в другое, конечное:

$$M_{if} = \int |\psi_f(z)|^2 k_w^2(z) / (k_{0z,i} |\psi_{0,i}|^2) dz. \quad (14)$$

При записи (14) предполагается, что оператор волнового вектора имеет вид:

$$k(\sigma) = (k_{0z}^2 - k_v^2 + ik_w^2 - k_B^2 \sigma \mathbf{b})^{1/2}, \quad (15)$$

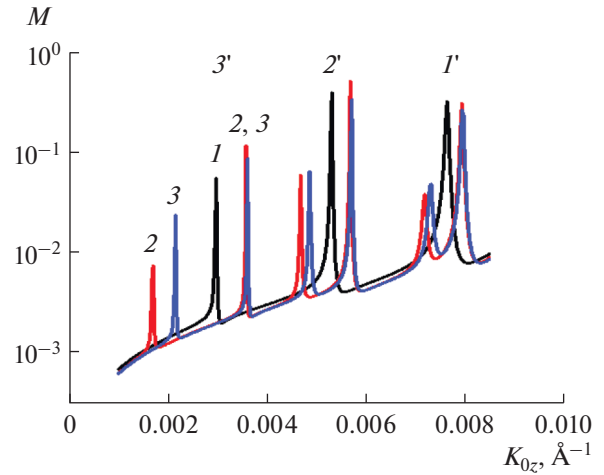
где  $\mathbf{b}$  – единичный вектор индукции магнитного поля  $\mathbf{B}$ ,  $k_B^2 = 2m\mu B/\hbar^2$ ,  $B$  – модуль вектора магнитной индукции,  $\mu$  – магнитный момент нейтрона,  $\sigma$  – вектор матриц Паули.

В случае структуры, находящейся в магнитном поле с напряженностью  $H$ , для оператора волнового вектора при начальном спиновом состоянии нейтрона “+(-)” имеем [7]:

$$k_{\pm}(\sigma) = (k_{0z}^2 - k_v^2 \pm k_H^2 + ik_w^2 - k_B^2 \sigma \mathbf{b})^{1/2}, \quad (16)$$

где  $k_H^2 = 2m\mu H/\hbar^2$ .

На рис. 3 приведены зависимости  $R^{++}$  (кривая 1),  $M^{++}$  (кривая 2) и  $M^{+-}$  (кривая 3) для магнитно-неколлинеарной структуры. Здесь наблюдаются три интерференционных порядка при  $k_{0z} \approx 0.008$  \AA $^{-1}$



**Рис. 4.** Зависимость  $M(k_{0z})$ : немагнитной структуры (1); магнитной структуры при  $H=0$  (2); при  $H=340$  \AA $^{-1}$  (3). Области 1', 2', 3' соответствуют трем интерференционным порядкам (текст). Параметры немагнитной структуры:  $d1 = 30$  нм,  $d2 = 100$  нм,  $k1_v = k3_v = 0.091$  нм $^{-1}$ ,  $k1_w = k3_w = 3 \times 10^{-3} k1_v^2$ ,  $k2_v = 0.015$  нм $^{-1}$ ,  $k2_w = 10^{-5} k2_v^2$ . X- и Z-компоненты намагниченности слоев 1–3:  $m1_x = m1_z = m3_x = m3_z = 2$  кГс,  $m2_x = m2_z = 1$  кГс.

(обозначен как 1'),  $0.0055$  \AA $^{-1}$  (обозначен как 2') и  $0.003$  \AA $^{-1}$  (обозначен как 3'), каждый из которых представлен двумя провалами для  $R$  и двумя пиками для  $M$ , соответствующих потокам в состояниях “+” и “-” нейтронов в слоях структуры. Поток в состоянии “-” обусловлен переходом из начального “+” в конечное состояние “-”.

На рис. 4 приведены зависимости коэффициента поглощения в случае немагнитной структуры (кривая 1), магнитной структуры при  $H=0$  (кривая 2) и магнитной структуры в магнитном поле  $H=340$  \AA $^{-1}$  (кривая 3). Видно, что магнитное поле сдвигает в основном пики, соответствующие потоку в спиновом состоянии “-” (кривая 2). Расчеты зависимостей на рис. 3 и 4, выполненные по соотношениям (7)–(10) и (14), совпадают с точностью, не превышающей 0.05%.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено и проведено сравнение различных соотношений для коэффициента поглощения нейтронов в отдельных слоях трехслойной резонаторной структуры. Представлены и обоснованы соотношения, позволяющие проводить расчеты парциальных коэффициентов поглощения, соответствующих пространственным распределениям изотопов элементов.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Автор выражает благодарность В.Д. Жакетову за проведение отдельных тестовых расчетов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Никитенко Ю.В., Сыромятников В.Г.* Рефлектометрия поляризованных нейтронов. М.: Физматлит, 2013. 218 с.
2. *Жакетов В.Д., Никитенко Ю.В., Раду Ф., Петренко А.В., Чик А., Борисов М.М., Мухамеджанов Э.Х., Аксенов В.Л.* // ЖЭТФ. 2017. Т. 151. № 1. С. 132.
3. *Никитенко Ю.В., Игнатович В.К.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2011. № 12. С. 1.
4. *Khaidukov Yu.N., Nikitenko Yu.V.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2011. V. 629. P. 245.
5. *Никитенко Ю.В.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2012. № 10. С. 25.
6. *Игнатович В.К.* Новый метод решения одномерного уравнения Шредингера. ОИЯИ Р4–87–878. Дубна: ОИЯИ, 1987.
7. *Игнатович В.К.* // УФН. 1986. Т. 150. С. 145.
8. *Ковальчук М.В., Кон В.Г.* // УФН. 1986. Т. 149. Вып. 1. С. 69.
9. *Шапиро Ф.Л.* Нейтронные исследования. М.: Наука, 1976. 348 с.
10. *Жакетов В.Д., Храмо К., Петренко А.В., Хайдуков Ю.Н., Чик А., Копач Ю.Н., Гундорин Н.А., Никитенко Ю.В., Аксенов В.Л.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 6. С. 10.

## Neutron Absorption in a Layered Structure

Yu. V. Nikitenko\*

*Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow oblast, 141980 Russia*

*\*e-mail: nikiten@nf.jinr.ru*

The development of neutron reflectometry is currently associated, in particular, with the detection of secondary radiation emitted by atomic nuclei. In this regard, the problem of determining the probability of neutron absorption in a layered structure is very important. Various expressions are derived for the neutron absorption coefficient. As an example, calculations are performed for a three-layer resonator structure.

**Keywords:** layered structure, neutron absorption.