

УДК 538.9

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОТРАЖЕНИЯ НЕЙТРОНОВ ОТ ТОНКИХ ПЛЕНОК И СЛОИСТЫХ НАНОСТРУКТУР, СОДЕРЖАЩИХ СИЛЬНОПОГЛОЩАЮЩИЕ ИЗОТОПЫ ГАДОЛИНИЯ И БОРА

© 2023 г. Ю. А. Саламатов<sup>а</sup>, \*, Е. А. Кравцов<sup>а</sup>, \*\*

<sup>а</sup>Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, 620137 Россия

\*e-mail: salamatov@imp.uran.ru

\*\*e-mail: kravtsov@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 17.10.2022 г.

После доработки 19.12.2022 г.

Принята к публикации 19.12.2022 г.

Описано применение метода фазово-амплитудных функций к задачам расчета процессов распространения нейтронов в слоистых средах, содержащих сильнопоглощающие элементы. Данный метод позволяет одновременно рассчитать коэффициенты отражения, прохождения и поглощения нейтронов. Он требует меньше вычислительных ресурсов, чем другие алгоритмы. Представлено также обобщение метода на матричные уравнения, которые возникают в рефлектометрии поляризованных нейтронов. Приведены примеры расчетов различных характеристик распространения нейтронов для слоистых систем резонаторного типа с потенциальной ямой.

**Ключевые слова:** нейтронная рефлектометрия, поглощение нейтронов, плотность длины рассеяния нейтронов, резонансное взаимодействие, детекторы нейтронов, фазовая проблема, планарные наноструктуры, сверхрешетка, потенциал взаимодействия, нелинейное дифференциальное уравнение, метод Рунге–Кутты, алгоритм Левенберга–Марквардта, рефлектометрия поляризованных нейтронов, нелинейное матричное уравнение.

DOI: 10.31857/S1028096023080125, EDN: OELHUM

### ВВЕДЕНИЕ

Развитие микроэлектроники инициирует развитие новых материалов и совершенствование способов их диагностики. Одним из перспективных методов является нейтронная рефлектометрия (в том числе рефлектометрия поляризованных нейтронов), и ее развитие особенно актуально в связи с запуском исследовательского реактора нового поколения ПИК, разработкой компактного источника нейтронов типа DARIA и импульсного реактора “Нептун” и необходимостью создания приборной базы для их инструментов.

Связанное с этим направление, активно развивающееся в последнее время, – использование сильнопоглощающих изотопов для создания твердотельных детекторов нейтронов. Такие устройства представляют большой интерес для применения ввиду дефицита изотопа  $^3\text{He}$ , на основе которого обычно изготавливают газовые детекторы нейтронов. Изотопы с сильным резонансным поглощением нейтронов предоставляют также уникальную возможность – плотность длины рассеяния нейтронов можно изменять контролируемым образом прямо в ходе эксперимента, варьируя длину волны нейтронов. Это можно использовать

для решения фазовой проблемы, вводя в исследуемые образцы опорный слой, содержащий изотопы с резонансным поглощением.

Практически во всех веществах поглощение тепловых нейтронов незначительно, но для некоторых изотопов оно существенно. Например, два изотопа гадолиния,  $^{155}\text{Gd}$  и  $^{157}\text{Gd}$ , имеют очень большие сечения захвата тепловых нейтронов. Благодаря присутствию этих изотопов в природном гадолинии его сечение захвата также значительно. Большие величины сечений связаны с наличием состояний ядер этих изотопов с характерной энергией перехода, лежащей в диапазоне энергии тепловых нейтронов. В результате возникает резонансное взаимодействие ядра с тепловым нейтроном, следствием которого является очень высокая вероятность поглощения нейтрона ядром с последующим испусканием гамма-кванта. Это обусловило широкое применение гадолиния в ядерной энергетике как экранирующего выгорающего поглотителя нейтронов.

Применение этого уникального свойства гадолиния возможно и в научных исследованиях, где используют тепловые нейтроны, в частности, в нейтронной рефлектометрии. Изучение погло-

нения нейтронов одновременно с отражением существенно расширяет возможности диагностики и потому представляет большой интерес. Но процессы распространения нейтронов в сильно-поглощающих средах слабо изучены, и работ по этой тематике не очень много. Группа из Петербургского института ядерной физики (г. Гатчина) исследовала поглощающие свойства гадолиния в целях оптимизации суперзеркал на их основе [1]. В Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна) также проводились теоретические и экспериментальные исследования взаимодействия медленных нейтронов с гадолинием, определена постоянная составляющая действительной части длины рассеяния [2]. Франк [3] получил общее выражение для комплексного показателя преломления нейтронов в средах с поглощением. Также было предсказано необычное поведение эффективного сечения взаимодействия при уменьшении скорости падающих нейтронов [4]. К сожалению, эти результаты не получили широкой известности.

Две независимые группы из Национального института стандартов и технологий (NIST) [5] и Делфтского технологического университета (Нидерланды) [6] показали возможность решения фазовой проблемы в нейтронной рефлектометрии путем введения в исследуемый образец опорного слоя, характеристики которого можно изменять в процессе измерений. В этих исследованиях использовали магнитный опорный слой, его характеристики изменяли путем приложения магнитного поля, но сам образец не должен быть магнитным, иначе его характеристики также изменятся.

В дальнейшем этот подход был модифицирован — в качестве материала опорного слоя использовали природный гадолиний. Благодаря резонансному поглощению в слоях нейтронно-оптические характеристики гадолиния можно изменить, меняя длину волны нейтронного пучка. При комнатной температуре гадолиний парамагнитен, что позволяет исследовать образцы с приложением магнитного поля, так как оно не меняет длины рассеяния нейтронов в слоях гадолиния. Методика была апробирована как в ходе теоретических расчетов [7], так и экспериментально [8].

Сильнопоглощающие вещества типа Gd или соединений бора, обогащенных изотопом  $^{10}\text{B}$ , могут быть использованы в качестве материалов для твердотельных детекторов нейтронов. В настоящее время детекторы наполняются изотопом  $^3\text{He}$ . При попадании в него нейтрона происходит реакция с образованием заряженных частиц — тритона и протона, которые регистрируются газовым счетчиком. Но  $^3\text{He}$  — достаточно дорогой изотоп, его запасы в мире малы. Поэтому во многих нейтронных центрах, например, в институте

Лауэ—Ланжевена, сейчас возникает интерес к твердотельным детекторам на основе материалов, сильно поглощающих тепловые нейтроны [9]. Гадолиний может быть достаточно перспективным веществом для развития данного направления. Зависимость поглощения от длины волны, вероятно, может быть использована для создания энергодисперсионного детектора.

Кроме того, тонкие пленки гадолиния используются и в нейтронных поляризаторах, и учет процессов поглощения нейтронов необходим для точного расчета параметров таких устройств. В Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна) были проведены эксперименты по определению длины когерентного рассеяния в Gd [10], но точность этих данных может быть повышена путем проведения одновременных измерений отражения и поглощения в структурах с гадолинием. Сильнопоглощающие вещества типа гадолиния необходимы и для реализации метода нейтронной рефлектометрии с регистрацией вторичного излучения [11].

Соответственно, актуальность исследований сильнопоглощающих систем предопределяется востребованностью результатов как для создания приборной базы для нейтронных рефлектометров, так и для развития методов анализа экспериментальных данных. Резонансное поглощение нейтронов, например, изотопами гадолиния, сопровождается генерацией вторичного излучения, детектирование которого открывает новые возможности в развитии методов нейтронной нанодиагностики.

Настоящая работа направлена на изучение процессов отражения и прохождения нейтронов в многослойных системах, содержащих слои из сильнопоглощающих веществ (природный гадолиний или карбид бора  $\text{B}_4\text{C}$ ). Метод фазово-амплитудных функций адаптирован для расчета коэффициента прохождения нейтронов, что дает возможность сразу определить коэффициент поглощения и плотность вероятности обнаружения нейтронов на различных глубинах. Все расчеты можно проводить и в случае рассеяния поляризованных нейтронов магнитными наноструктурами. Для анализа различных ситуаций используют модельные численные эксперименты. Полученные результаты дадут возможность оптимально выбрать сильнопоглощающие системы для различных задач, как прикладных, так и научных.

## ТЕОРИЯ

Метод фазово-амплитудных функций является подходом для решения широкого круга квантово-механических задач. В его основе лежит представление о так называемой фазовой функции  $\alpha(r)$ , которая имеет простой и наглядный

физический смысл [12]. При заданном центральном потенциале значение этой функции в некоторой точке  $r$  является фазой рассеяния на части потенциального барьера, заключенного в сфере радиуса  $r$ . Фаза рассеяния  $\alpha$  на всем потенциальном барьере определяется как предел  $\alpha = \lim_{r \rightarrow \infty} \alpha(r)$ .

Фазовая функция удовлетворяет дифференциальному уравнению Риккати, которое называется фазовым уравнением. Фазовая функция характеризует эффект действия потенциала и равна нулю, если равен нулю потенциал.

Задача описания отражения нейтронов от металлических пленок представляет собой вариант одномерной задачи о взаимодействии частицы (нейтрона) с потенциальным барьером (ядерной структурой отражающего слоя). Волновое уравнение в этом случае имеет вид:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + [k^2 - V(x)] \psi(x) = 0. \quad (1.1)$$

Волновая функция представляется в виде суперпозиции падающей  $A(x)$  и отраженной  $B(x)$  волн:

$$\psi(x) = A(x)[\exp(ikx) + B(x)\exp(-ikx)]. \quad (1.2)$$

Подставляя это выражение в уравнение (1.2) и проведя преобразования [12], можно получить уравнение для амплитуды отраженной волны  $B(x)$ , имеющее форму фазового уравнения:

$$\frac{d}{dx} B(x) = -\frac{1}{2ik} V(x) \times [\exp(ikx) + B(x)\exp(-ikx)]^2. \quad (1.3)$$

Граничное условие  $B(0) = 0$  соответствует отсутствию отраженной волны за потенциальным барьером.

Это уравнение не зависит от амплитуды прошедшей волны, поэтому в ряде задач коэффициент прохождения можно не рассчитывать, экономя вычислительные ресурсы. В отличие от исходного уравнения Шредингера фазовое уравнение является уравнением первого порядка, хотя и нелинейным. Оно не имеет аналитического решения для произвольной функции  $V(x)$ , но численно решается быстрее и проще, чем уравнение (1.1). В настоящей работе для решения уравнения (1.3) использовали неявный метод Рунге–Кутты второго порядка. В связи с тем, что функция  $B(x)$  обладает свойствами фазовой функции из квантовой механики, но фактически описывает амплитуду отраженной волны, ее называют фазовой амплитудной функцией.

При непосредственном рассмотрении уравнения (1.3) предполагают нормальное падение волны на потенциальный барьер, т.е. поток нейтронов должен падать на пленку перпендикулярно ее

поверхности. На самом деле рефлектометрия имеет дело со скользящими углами падения. В этом случае в отражении от барьера участвует лишь нормальная составляющая волнового вектора. Тогда в уравнении (1.3)  $k = 2\pi/\lambda \sin \theta$ , где  $\theta$  – угол падения, отсчитанный от поверхности пленки,  $\lambda$  – длина волны нейтронов. Вводя обозначение  $k_0 = 2\pi/\lambda$ , получим  $k = k_0 \sin \theta$ . В рефлектометрии также часто используют величину  $q = 2k$ , которая имеет смысл нормальной компоненты изменения волнового вектора при отражении. В дальнейшем будем использовать именно такую нотацию.

Потенциал взаимодействия  $V(x)$  связан с плотностью длины рассеяния следующим соотношением [13]:

$$V(x) = 4\pi[\delta(x) + i\beta(x)]. \quad (1.4)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \text{Re}[N(x)b(x)], \\ \beta(x) &= \text{Im}[N(x)b(x)], \end{aligned} \quad (1.5)$$

где  $b(x)$  – длина ядерного рассеяния нейтронов на глубине  $x$ ,  $N(x)$  – число частиц в единице объема на глубине  $x$ . Величина  $\delta(x)$  описывает преломление и отражение нейтронов в веществе,  $\beta(x)$  – поглощение. Их численные значения для различных материалов и длин волн могут быть найдены в справочных таблицах или на интернет-ресурсах [14], а также рассчитаны самостоятельно. Для большинства веществ  $\beta(x) \approx 0$ , и потенциал можно рассматривать как действительный. Но для сильнопоглощающих изотопов величина  $\beta(x)$  становится существенной, а потенциал взаимодействия – комплексным. Поэтому в дальнейшем будем считать  $V(x)$  только комплексной величиной.

При определении начального условия к уравнению (1.3) предполагали, что слева и справа от потенциального барьера находится вакуум. В случае рефлектометрии это соответствовало бы изолированной пленке. К сожалению, такие пленки слишком тонки, чтобы они могли существовать сами по себе. Их всегда синтезируют на подложках, очень толстых ( $\sim 10^{-3}$  м) по сравнению с характерными толщинами пленок ( $\sim 10^{-9}$ – $10^{-8}$  м), и их можно рассматривать как полубесконечную среду с одной стороны пленки. Это приводит к тому, что за исследуемой структурой пленки тоже возникает отраженная от подложки волна, и именно ее амплитуда должна быть взята в качестве граничного условия для уравнения (1.3).

Амплитуда отражения от поверхности среды описывается формулой Френеля [13]:

$$r_F(k) = \frac{k - \sqrt{k^2 - V(0)}}{k + \sqrt{k^2 - V(0)}}. \quad (1.6)$$

Тогда начальное условие в уравнении (1.3) для заданного  $k$  будет иметь вид  $B(k, 0) = r_F(k)$ , если отсчет координаты начинается от нуля.

Уравнение для амплитуды прошедшей волны выводится аналогично уравнению (1.3) и имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} A(x) = \\ = -\frac{1}{2ik} V(x) A(x) [\exp(ikx) + B(x) \exp(-ikx)]. \end{aligned} \quad (1.7)$$

В отличие от (1.3) это уравнение линейно, и можно записать формальное решение для произвольного вида функций  $V(x)$  и  $B(x)$  через неопределенный интеграл. Но численное решение методом Рунге–Кутты оказывается проще.

В отсутствие подложки граничное условие имеет простой вид:  $A(0) = 1$ . При ее наличии амплитуда прошедшей волны уменьшается на величину амплитуды многократно отраженной волны на границе раздела пленка–подложка. Граничное условие в этом случае выглядит следующим образом:

$$A(k, 0) = 1 - |B(k, 0)|^2. \quad (1.8)$$

Коэффициенты отражения и прохождения для всей пленки (значения, измеряемые в эксперименте) выражаются через значения функций  $A$  и  $B$  на поверхности пленки:

$$R(k) = |B(k, x_N)|^2, \quad T(k) = |A(k, x_N)|. \quad (1.9)$$

Зная вид функций  $A(k, x)$  и  $B(k, x)$ , можно восстановить волновую функцию в зависимости от глубины и волнового числа, используя соотношение (1.2). Это дает возможность рассчитать плотность вероятности обнаружения нейтрона на любой глубине и решать иные квантово-механические задачи. Таким образом, метод фазово-амплитудных функций очень удобен для анализа процессов распространения нейтронов в конденсированных средах. Простота используемых уравнений обеспечивает высокую скорость и точность расчетов. В среднем расчет происходит в два–три раза быстрее, чем при использовании других методов: алгоритма Парратта [15], формализма оптических матриц [16], рекуррентных соотношений, предложенных В.К. Игнатовичем [17].

В отличие от ядерного рассеяния нейтронов взаимодействие поляризованных нейтронов с магнитными моментами атомов является более сложной задачей многоканального рассеяния. Возникают два канала рассеяния – для нейтронов со спином “вверх” и для нейтронов со спином “вниз” (направления выбраны условно). Для

упрощения дальнейших выкладок введем обозначения: канал нейтронов со спином “вверх” обозначим знаком “+” (плюс); канал нейтронов со спином “вниз” знаком “–” (минус). Кроме того, имеет место перемешивание каналов – нейтроны могут изменить направление спина в момент рассеяния на образце.

В результате получим четыре, различных в общем случае, коэффициента отражения: два основных, без изменения состояния (“++” и “--”), и два с изменением состояния (“+-” и “-+”). Из-за наличия взаимодействия каналов невозможно получить независимые уравнения для каждого коэффициента отражения. Фазовое уравнение принимает матричный вид, хотя схема его вывода остается аналогичной [12, 18, 19]:

$$\frac{d}{dx} \mathbf{B} = (\mathbf{E}^+ + \mathbf{B}\mathbf{E}^-) \mathbf{V} (\mathbf{E}^+ + \mathbf{B}\mathbf{E}^-). \quad (1.10)$$

Здесь  $\mathbf{B}$  – матрица коэффициентов отражения:

$$\mathbf{B} \equiv \begin{pmatrix} B_{++}(x, k) & B_{+-}(x, k) \\ B_{-+}(x, k) & B_{--}(x, k) \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

каждый элемент матрицы является коэффициентом отражения в определенном канале рассеяния и представляет собой функцию глубины  $x$  и волнового числа  $k$ .

Матрица  $\mathbf{V}$  описывает потенциал взаимодействия в каждом канале:

$$\mathbf{V} \equiv \begin{pmatrix} V_{++}(x) & V_{+-}(x) \\ V_{-+}(x) & V_{--}(x) \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

Чаще всего потенциал взаимодействия является функцией только глубины. Но для некоторых веществ, ядра которых резонансно взаимодействуют с тепловыми нейтронами, может возникнуть зависимость потенциала от длины волны и, следовательно, от волнового числа. Примером такого вещества является гадолиний.

Матрицы  $\mathbf{E}^+$  и  $\mathbf{E}^-$  связаны с падающей и отраженной волнами соответственно:

$$\mathbf{E}^+ \equiv \begin{pmatrix} \frac{\exp(ikx)}{\sqrt{-2ik}} & 0 \\ 0 & \frac{\exp(ikx)}{\sqrt{-2ik}} \end{pmatrix}, \quad (1.13)$$

$$\mathbf{E}^- \equiv \begin{pmatrix} \frac{\exp(-ikx)}{\sqrt{-2ik}} & 0 \\ 0 & \frac{\exp(-ikx)}{\sqrt{-2ik}} \end{pmatrix}.$$

Все произведения в уравнении (1.10) являются матричными и в общем случае некоммутативны.

По аналогии с (1.5) введем обозначения для описания ядерного рассеяния:

$$\begin{aligned}\delta_n(x) &= \operatorname{Re}[N(x)b_n(x)], \\ \beta_n(x) &= \operatorname{Im}[N(x)b_n(x)],\end{aligned}\quad (1.14)$$

где  $b_n(x)$  – длина ядерного рассеяния нейтронов на глубине  $x$ ,  $N(x)$  – число частиц в единице объема на глубине  $x$ . Величина  $\delta_n(x)$  описывает преломление и отражение нейтронов в веществе,  $\beta_n(x)$  – поглощение.

Для магнитного рассеяния:

$$\delta_m(x) = \mu(x)N(x)b_m(x), \quad \beta_m(x) = 0, \quad (1.15)$$

где  $b_m(x)$  – длина магнитного рассеяния нейтронов,  $\mu(x)$  – магнитный момент частиц на глубине  $x$  в магнетонах Бора. Мнимая часть длины рассеяния отсутствует, поскольку взаимодействие с магнитной подсистемой не приводит к поглощению нейтронов. Если в системе имеется некий эффективный канал убывания нейтронов вследствие магнитного рассеяния, то  $\beta_m(x) \neq 0$ . Это редкие случаи, поэтому в дальнейших выкладках этот вариант не рассматривается. Но при необходимости  $\beta_m(x)$  может быть учтена в потенциале взаимодействия.

Тогда элементы матрицы потенциала  $V$  могут быть представлены следующим образом [13]:

$$\begin{aligned}V_{++}(x) &= 4\pi[\delta_n(x) + \delta_m(x)\cos\alpha + i\beta_n(x)], \\ V_{--}(x) &= 4\pi[\delta_n(x) - \delta_m(x)\cos\alpha + i\beta_n(x)], \\ V_{+-}(x) &= V_{-+}(x) = 4\pi\delta_m(x)\sin\alpha.\end{aligned}\quad (1.16)$$

Здесь введена величина  $\alpha$  – угол между направлением магнитного момента падающих нейтронов и направлением магнитного момента частиц образца. Если в образце не ферромагнитное упорядочение, то  $\alpha$  различен в разных слоях. В геликоидальных системах с плавным поворотом магнитного момента угол является функцией глубины  $\alpha(x)$ . В случае несимметричного взаимодействия каналов рассеяния  $V_{+-}(x) \neq V_{-+}(x)$ , но в рефлектометрии поляризованных нейтронов такие задачи не рассматривают.

Матричное уравнение (1.10) может быть представлено и в виде системы из четырех связанных дифференциальных уравнений для каждого коэффициента отражения. Такая система является весьма громоздкой для записи и неудобной для численного решения, хотя может быть полезна для теоретического анализа частных случаев при определенных значениях и соотношениях между элементами потенциала. Например, используя систему, легко показать, что, если  $V_{+-}(x) = V_{-+}(x)$ , то и  $B_{+-}(x) = B_{-+}(x)$ . Но для расчетных задач предпочтительнее более компактная матричная форма.

Коэффициент поглощения нейтронов может быть рассчитан исходя из закона сохранения чис-

ла частиц. Нейтроны первичного пучка могут быть отражены от пленки, пройти сквозь нее или быть поглощенными в объеме пленки. Рассматривая общий случай поляризованных нейтронов и нормируя интенсивность первичного пучка на единицу, получим расчетные формулы для каналов:

$$\begin{aligned}a_+(k) &= 1 - R_{++}(k) - R_{+-}(k) - T_{++}(k) - T_{+-}(k), \\ a_-(k) &= 1 - R_{--}(k) - R_{-+}(k) - T_{--}(k) - T_{-+}(k).\end{aligned}\quad (1.17)$$

В случае неполяризованных нейтронов формула несколько упрощается:

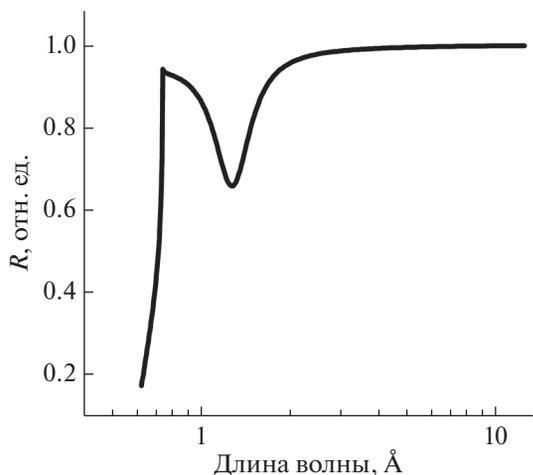
$$a(k) = 1 - R(k) - T(k). \quad (1.18)$$

## МОДЕЛЬНЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Рассмотрим образец типа резонатора:  $\text{Al}_2\text{O}_3//\text{Ta}(100 \text{ \AA})/\text{V}(250 \text{ \AA})/^{10}\text{B}_4\text{C}(25 \text{ \AA})/\text{V}(250 \text{ \AA})/\text{Ta}(10 \text{ \AA})$ . Тантал выполняет роль сильноотражающих обкладок, которые формируют потенциальную яму. Ванадий имеет очень малую по модулю отрицательную плотность длины рассеяния нейтронов и хорошо подходит для заполнения внутреннего пространства ямы. Карбид бора, обогащенный изотопом  $^{10}\text{B}$ , является сильнопоглощающим слоем внутри потенциальной ямы, его мнимая часть плотности длины рассеяния  $\beta = 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$ , тогда как для большинства веществ она на два-три порядка меньше. В резонаторе (в потенциальной яме) возникает стоячая нейтронная волна, что приводит к уменьшению интенсивности отражения (грубо это можно объяснить тем, что часть нейтронов захватывается потенциальной ямой и поглощается в расположенном там слое  $^{10}\text{B}_4\text{C}$ ). Подробно процессы возникновения стоячих нейтронных волн и явления, порождаемые ими, рассмотрены в [20]. На рис. 1 приведена область полного внешнего отражения для указанного выше образца. Хорошо виден резонансный минимум. Длина волны  $\lambda \approx 0.75 \text{ \AA}$  соответствует критическому значению изменения волнового вектора, при меньших длинах волн наблюдается значительное проникновение нейтронов в образец и спад интенсивности отражения.

Сильнопоглощающий слой (в рассматриваемом примере  $^{10}\text{B}_4\text{C}$ ) делает резонансный провал более выраженным. Если известна ширина потенциальной ямы (слоя V), то из анализа формы провала можно определить плотность длины рассеяния  $^{10}\text{B}_4\text{C}$  путем уточнения параметров по алгоритму Левенберга–Марквардта.

Если использовать в качестве поглощающего слоя гадолиний, ядра изотопов которого резонансно взаимодействуют с тепловыми нейтронами, то можно еще больше увеличить глубину про-



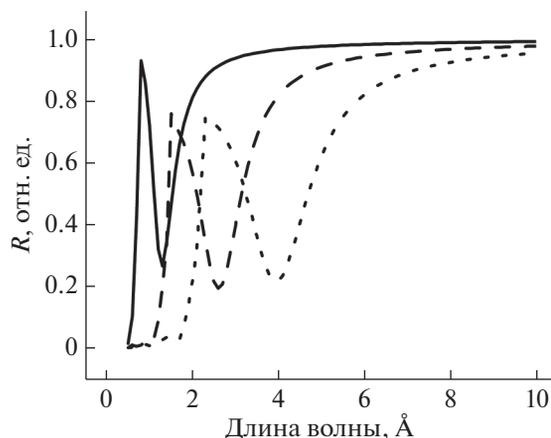
**Рис. 1.** Резонансный минимум в области полного внешнего отражения в системе  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ta}(100 \text{ \AA})/\text{V}(250 \text{ \AA})/^{10}\text{B}_4\text{C}(25 \text{ \AA})/\text{V}(250 \text{ \AA})/\text{Ta}(100 \text{ \AA})$ .

вала. Кроме того, его положение и форма зависят от угла падения, что показано на рис. 2. Тем не менее поглощающий слой изменяет свойства резонатора, поэтому в общем случае возможно и уменьшение интенсивности сигнала.

Приведенный расчет (и все последующие) соответствует времяпролетному рефлектометру и углу падения 1 мрад. Определить непосредственно плотность длины рассеяния Gd в этом случае нельзя, поскольку она зависит от энергии нейтронов [21]. Но, также применяя алгоритм Левенберга–Марквардта, можно определить энергетические характеристики резонансов Gd, а затем рассчитать плотность длины рассеяния как функцию энергии нейтронов, используя формулу Брейта–Вигнера. При больших длинах волн мнимая часть плотности длины рассеяния Gd почти постоянна,  $\beta \approx 3 \times 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$ , что даже больше, чем у  $^{10}\text{B}_4\text{C}$ .

Возникающую в резонаторе стоячую волну можно визуализировать, если, используя приведенные выше алгоритмы, рассчитать волновую функцию нейтронов и построить квадрат модуля этой функции (рис. 3). На рисунке также приведена проекция поверхности в виде карты в оттенках серого.

Математический смысл поверхности, изображенной на рис. 3, – плотность вероятности обнаружить нейтрон с определенной энергией на некоторой глубине в образце. Перепад высот примерно по средней линии – поглощающий слой Gd, который уменьшает количество нейтронов за ним. “Долина”-минимум является узлом стоячей волны. Энергия, при которой узел “входит” в область потенциальной ямы, соответствует минимуму отражения. На рис. 4 показано поведение

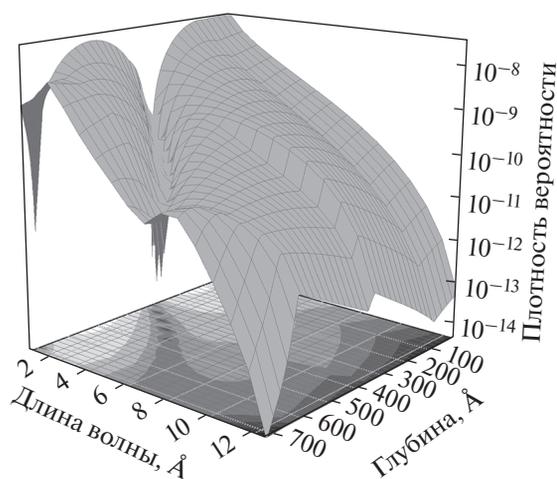


**Рис. 2.** Резонансные минимумы в области полного внешнего отражения в системе  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ta}(100 \text{ \AA})/\text{V}(250 \text{ \AA})/\text{Gd}(25 \text{ \AA})/\text{V}(250 \text{ \AA})/\text{Ta}(100 \text{ \AA})$  при углах падения 1 мрад (сплошная линия), 2 мрад (штриховая линия) и 3 мрад (пунктирная линия).

коэффициентов прохождения и поглощения образца вблизи минимума.

Видно, что коэффициент прохождения очень мал, и поведение коэффициента отражения полностью определяется коэффициентом поглощения. Следовательно, измерив рефлектометрическую кривую в данной области, что является более простым экспериментом, получим полную информацию о поглощении.

Если сделать потенциальную яму достаточно широкой, то в ней может оказаться несколько узлов стоячей волны. Тогда в области полного внешнего отражения окажется столько же минимумов. На рис. 5 показано отражение для системы  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ta}(100 \text{ \AA})/\text{V}(1000 \text{ \AA})/\text{Gd}(25 \text{ \AA})/\text{V}(1000 \text{ \AA})/$



**Рис. 3.** Плотность вероятности обнаружить нейтрон в системе  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ta}(100 \text{ \AA})/\text{V}(250 \text{ \AA})/\text{Gd}(25 \text{ \AA})/\text{V}(250 \text{ \AA})/\text{Ta}(100 \text{ \AA})$ . На проекции более темные цвета соответствуют меньшим значениям.

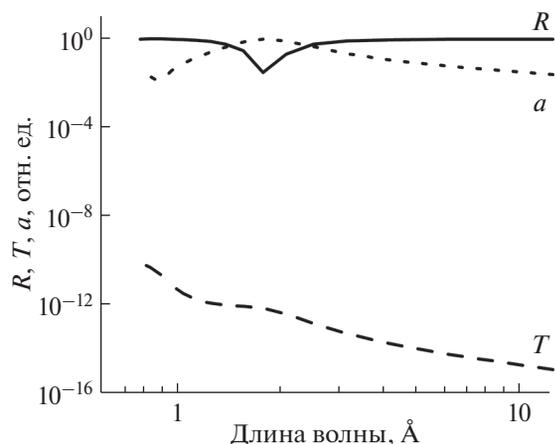


Рис. 4. Коэффициенты отражения  $R$ , прохождения  $T$  и поглощения  $a$  в области полного внешнего отражения.

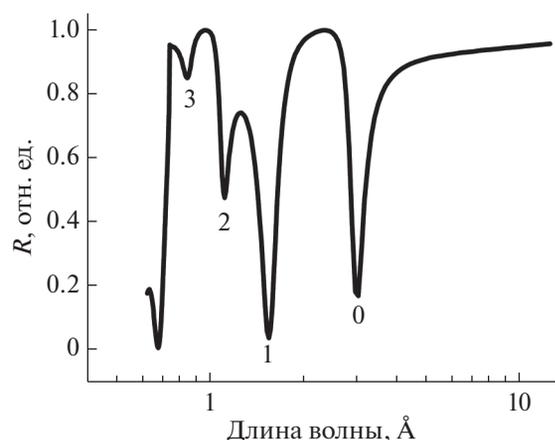


Рис. 5. Коэффициент отражения для системы  $\text{Al}_2\text{O}_3//\text{Ta}(100 \text{ \AA})/\text{V}(1000 \text{ \AA})/\text{Gd}(25 \text{ \AA})/\text{V}(1000 \text{ \AA})/\text{Ta}(100 \text{ \AA})$  с большим количеством резонансных минимумов. Цифрами отмечены порядки резонансов.

$\text{Ta}(100 \text{ \AA})$ , в которой возникают четыре минимума, их порядки указаны на рисунке цифрами.

Такая сложная картина полного внешнего отражения позволяет с большей точностью определить энергетические характеристики резонансов гадолиния или плотность длины рассеяния карбида бора.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе проведено теоретическое исследование особенностей распространения нейтронов в многослойных системах с сильнопоглощающими слоями (гадолиний или карбид бора). Предложен подход для расчета коэффициентов отражения, прохождения и поглощения, в том числе и поляризованных нейтронов, основанный

на использовании метода фазово-амплитудных функций. Скорость расчетов при использовании данного подхода примерно в два раза выше для неполяризованных нейтронов и в три раза выше в случае поляризованных по сравнению с другими известными методами. Показано, что анализ минимумов в области полного внешнего отражения позволяет определить плотность длины рассеяния сильнопоглощающих изотопов и ее зависимость от энергии нейтронов. Написаны программы для ЭВМ, реализующие предложенные алгоритмы, они апробированы на модельных численных экспериментах. Наличие глубоких узких минимумов в области полного внешнего отражения дает возможность применять такие многослойные системы для реализации селективного поглощения низкоэнергетических нейтронов. Визуализация стоячей волны позволяет подбирать оптимальные для поставленной задачи ширину потенциальной ямы, положение и толщину сильнопоглощающего слоя. Это может быть полезно при расчете реальных устройств — твердотельных детекторов и нейтронотводов. Все полученные теоретические результаты могут быть проверены экспериментально.

### БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема “Спин” 22021000036-3) и в рамках Соглашения № 075-10-2021-115 от 13 октября 2021 г. (внутренний номер 15.СИН.21.0021) в части проведения нейтронографических исследований.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pleshanov N.K., Peskov B.G., Pusenkov V.M. et al. // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A. 2006. V. 560. P. 464. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2005.12.243>
2. Frank A.I., Bodnarchuk V.I., Geltenbort P. et al. // Phys. At. Nucl. 2003. V. 66. № 10. P. 1831. <https://doi.org/10.1134/1.1619495>
3. Франк И.М. // Успехи физ. наук. 1991. Т. 161. № 11. С. 109.
4. Gurevich A.I., Lomonosov V.V. // Phys. At. Nucl. 1997. V. 60. P. 510.
5. Majkrzak C.F., Berk N.F. // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. № 15. P. 10827. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.52.10827>
6. De Haan V.O., Van Well A.A., Sacks P.E. et al. // Physica B. 1996. V. 221. P. 524. [https://doi.org/10.1016/0921-4526\(95\)00975-2](https://doi.org/10.1016/0921-4526(95)00975-2)
7. Nikova E.S., Salamatov Yu.A., Kravtsov E.A. et al. // Superlatt. Microstruct. 2017. V. 109. P. 201. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.05.013>
8. Никова Е.С., Саламатов Ю.А., Кравцов Е.А. и др. // Физика металлов и металловедение. 2019. Т. 120.

- C. 913.  
<https://doi.org/10.1134/S0015323019090109>
9. *Piscitelli F., Khaplanov A., Devishvili A. et al.* // Proc. Math. Phys. Eng. Sci. 2016. V. 472. P. 20150711.  
<https://doi.org/10.1098/rspa.2015.0711>
  10. *Франк А.И., Боднарчук В.И., Кулин Г.В. и др.* О длине когерентного рассеяния естественного гадолиния. Дубна: Препринты ОИЯИ. 2002. РЗ-2002-288. 12 с.
  11. *Жакетов В.Д., Храпко К., Петренко А.В. и др.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 6. С. 10.  
<https://doi.org/10.31857/S1028096021060170>
  12. *Бабиков В.В.* Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976. 288 с.
  13. *Lekner J.* Theory of Reflection of Electromagnetic and Particle Waves. Dordrecht: Springer Science+Business Media, 1987. 281 p.
  14. Neutron Activation and Scattering Calculator.  
<https://www.ncnr.nist.gov/resources/activation/>.
  15. *Parratt L.G.* // Phys Rev. 1954. V. 95. № 2. P. 359.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.95.359>
  16. *Abeles F.* // Annales de Physique. 1950. V. 12. № 5. P. 596.  
<https://doi.org/10.1051/anphys/195012050596>
  17. *Игнатович В.К.* Нейтронная оптика. М.: Физматлит, 2006. 336 с.
  18. *Calogero F.* Variable Phase Approach to Potential Scattering. N.Y.: Academic Press Inc., 1967. 243 p.
  19. *Саламатов Ю.А., Кравцов Е.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2021. № 5. С. 3.  
<https://doi.org/10.31857/S1028096021050174>
  20. *Никитенко Ю.В.* // ЭЧАЯ. 2009. Т. 40. № 6. С. 1682.
  21. *Mughabghab S.F., Divadeenam M., Holden N.E.* Neutron Resonance Parameters and Thermal Cross Sections. N.Y.: Brookhaven National Laboratory, 1981. 826 p.

## Theoretical Study of Neutron Reflection from Thin Films and Layered Nanostructures Containing Highly Absorbing Gadolinium and Boron Isotopes

Yu. A. Salamatov<sup>1, \*</sup>, E. A. Kravtsov<sup>1, \*\*</sup>

<sup>1</sup>*M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of Ural Branch RAS, Ekaterinburg, 620137 Russia*

*\*e-mail: salamatov@imp.uran.ru*

*\*\*e-mail: kravtsov@imp.uran.ru*

The application of the method of phase-amplitude functions to the calculation of neutron propagation processes in layered media containing highly absorbing elements is described. This method allows us to simultaneously calculate the reflection, transmission and absorption coefficients of neutrons. It requires less computing resources than the other algorithms. A generalization of the method to matrix equations used in polarized neutron reflectometry is also presented. Examples of calculations of various characteristics of neutron propagation for layered resonator-type systems with a potential well are given.

**Keywords:** neutron reflectometry, neutron absorption, neutron scattering length density, resonant interaction, neutron detectors, phase problem, planar nanostructures, superlattice, interaction potential, nonlinear differential equation, Runge–Kutta method, Levenberg–Marquardt algorithm, polarized neutron reflectometry, nonlinear matrix equation.