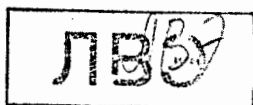


И-265



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

4-2007-62

На правах рукописи

УДК 539.125.517.2

ИГНАТОВИЧ  
Владимир Казимирович

МЕТОД РАССЛОЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА РАССЕЯНИЯ  
В СЛОИСТЫХ СРЕДАХ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ  
В НЕЙТРОННОЙ ОПТИКЕ

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного  
состояния

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Объединенный институт  
ядерных исследований  
Дубна  
БИБЛИОТЕКА

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики  
им. И.М.Франка Объединенного института ядерных исследований.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,  
профессор ОИЯИ

А.М.Балагуров

доктор физико-математических наук  
МГУ им. М.В.Ломоносова

С.А.Гончаров

доктор физико-математических наук, профессор, Российский  
научный центр "Курчатовский институт"

В.А.Соменков

Ведущая организация

ФГУП ГНЦ РФ - "Физико-энергетический институт"  
(г. Обнинск)

Защита состоится *05 октября* 2007 г. в *15:00* часов на за-  
седании диссертационного совета Д720.001.06 при Лаборатории ней-  
тронной физики им. И.М.Франка и Лаборатории ядерных реакций  
им. Г.Н.Флерова Объединенного института ядерных исследований  
(г. Дубна Московской области)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ

Автореферат разослан *20.06* 2007 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета



А.Г.Попеко

#### Актуальность темы

В данной работе теоретически исследуются отражение, пропускание и распростра-  
нение нейтронов в слоистых средах. Эти вопросы относятся к нейтронной оптике и связаны  
с задачами, решаемыми в нейтронной рефлектометрии, дифрактометрии и упругом рас-  
сеянии в неупорядоченных средах.

Нейтронная рефлектометрия и дифрактометрия являются общепризнанными сред-  
ствами исследования магнитной и немагнитной структуры вещества и приготовления по-  
ляризованных и неполяризованных нейтронных пучков. Почти на всех нейтронных ис-  
точниках имеются экспериментальные установки с нейтронными рефлектометрами и ди-  
фрактометрами. Потому теоретическое решение проблем, исследуемых на этих установ-  
ках, является актуальным.

В рефлектометрических экспериментах измеряются коэффициенты отражения в за-  
висимости от угла падения и длины волны падающих нейтронов. Из кривых отражения  
извлекается распределение вещества и магнитного поля вглубь от границы раздела отра-  
жающей среды. Большей частью это делается с помощью численных методов, поскольку  
после многолетних исследований казалось, что аналитические методы уже исчерпали се-  
бя. Их применимость ограничивалась простейшими распределениями типа тех, которые  
описываются прямоугольными потенциалами, или тех, для которых справедлива теория  
возмущений.

Численные методы стали доминирующим средством анализа экспериментальных дан-  
ных. Они оказались очень удобными с точки зрения алгоритмов составления программ  
особенно после открытия в 1954 г. изящного матричного метода Паррэ [53]. Однако ана-  
литические методы всегда оставались желательны, ибо они совместно с численными дают  
более глубокое понимание физических процессов.

Именно аналитический метод, названный здесь методом расслоения, и представлен в  
данной работе. Он позволил в компактном виде представить отражение от произвольных  
периодических систем, в применении к магнитным системам предсказать расщепление  
нейтронного пучка при отражении от магнитных зеркал, рассчитать и объяснить резонан-  
сное отражение с переворотом спина от геликоидальных систем, полностью разобраться  
с задачей о резонансном перевороте спина в радиочастотных полях и сформулировать  
принципы длинноволновой нейтронной голографии без опорных пучков.

Метод расслоения, разработанный для одномерных систем, обобщается на трехмерные  
периодические среды. С его помощью удается по новому взглянуть на процессы динами-  
ческой дифракции нейтронов в идеальных кристаллах, развить алгоритмы для расчета  
дифракционных пиков сколь угодно сложной решетки, не прибегая к теории возмуще-  
ний, и предсказать новые эффекты, которые можно наблюдать экспериментально. Все  
это чрезвычайно важно как для прикладной кристаллографии, так и для фундаменталь-  
ных исследований.

Развитый здесь метод применим не только к волновым, но и к корпускулярным процес-  
сам, о чем свидетельствует проведенное в данной работе исследование альbedo нейтронов  
от мелкодисперсных сред. Он не только применим, но еще и обладает преимуществом по  
сравнению с уже известным диффузионным подходом и потому имеет важное значение  
для проектирования реакторов и радиационных биологических защит.

## Цель работы

Единым методом описать волновые и корпускулярные процессы упругого взаимодействия нейтрона со слоистыми конденсированными средами с тем, чтобы получить более ясное понимание этих процессов, выявить их связь с результатами экспериментов, и предсказать новые явления, доступные экспериментальному исследованию.

## Научная новизна

Найден новый аналитический метод для расчета взаимодействия нейтронов с магнитными и немагнитными слоистыми средами, с трехмерными периодическими и неупорядоченными структурами.

## Практическая ценность

Полученные результаты дают новый способ расчета нейтронных суперзеркал, что позволяет контролировать и тем самым совершенствовать технологию напыления тонких пленок. Обнаруженное явление расщепления нейтронного пучка на поверхности магнитных зеркал может быть использовано для исследования магнетизма. Новые результаты, полученные для альbedo нейтронов, полезны для реакторостроения.

## На защиту выносятся следующие пункты

1. Разработка аналитического метода для расчета отражения нейтронов от периодических зеркал.
2. Разработка алгоритма для расчета суперзеркал.
3. Разработка теории каналирования нейтронов в резонансных слоях.
4. Выявление расщепления нейтронных пучков при когерентном отражении от магнитных зеркал.
5. Аналитическое решение задачи об отражении нейтронов от зеркал с геликоидальной намагниченностью.
6. Аналитическое решение задачи о взаимодействии нейтронов с радиочастотными полями в спин-флиппере.
7. Разработка теории длинноволновой нейтронной голографии без опорного пучка.
8. Обобщение метода расслоения для описания динамической дифракции нейтронов в идеальных кристаллах.
9. Расчет эффекта дифракции нейтронов при одновременном выполнении условий Брэгга и Лауэ.
10. Обобщение метода расслоения для расчета рассеяния нейтронов в неупорядоченных средах. Решение задачи для альбедного отражения от рассеивающих и поглощающих сред.

## Апробация работы

Различные составные части диссертационной работы докладывались на школах ПИЯФ по физике конденсированных сред (С-кт Петербург 1979, 2002 гг. соответственно), 2-nd conference on analogy in optics and microelectronics (Eindhoven, Netherlands 27.04-05.05 1991 [8]), ECM-14 European Crystallography Meeting (Entschede, Netherlands, 1-8.08 1992), Conference on Frontier in Fundamental Physics (Olympia, Greece, 26.09-01.10 1993), рабочих совещаниях по физике УХН (С-кт Петербург 1999, 2001 гг. соответственно), 7-й школе по нейтронной физике (Дубна 1995 г.), зимних школах ПИЯФ по физике ядра и элементарных частиц (С-кт Петербург 2000, 2002 соответственно), 32-й школе ИТЭФ (Москва 2004 г.), семинаре, посвященном 80 летнему юбилею М.И.Подгорецкого (Дубна, 2000 г.), международных семинарах по взаимодействию нейтронов с ядрами (Дубна 1999, 2001, 2004, 2006 гг. соответственно), international conference TFDOM: "Thin film deposition of oxide multilayers. Industrial scale applications" (Vilnius, Lithuania 28-29 September 2000), international conference SPIE-2000 (San Diego California, USA, July 30 – August 4, 2000), Workshop on Neutron Holography (KFKI, Budapest, Hungary, 10-12 November 2005), international conference "Present Status and Future of Very Cold Neutron Applications" (Paul Scherrer Institute (PSI), Switzerland 13-14 February 2006), а также на многих других конференциях и семинарах за рубежом: США (1993, 1999, 2000, 2002, 2005), Канада (2005), Франция (1998, 2002, 2004), Италия (1992, 1993), Германия (1998, 2001, 2003, 2004), и Австрия (1998, 2004) см.: <http://nfdn.jinr.ru/~ignatovi/travels.html>.

## Публикации

Содержание диссертации изложено в книгах [1, 2] и статьях [3-40]. В большинстве публикаций вклад автора определяющий.

## Структура диссертации

Диссертация состоит из введения и 4-х глав. В первой главе рассматривается предлагаемый автором метод расслоения в оптике и его применение. Во второй — рассматривается отражение нейтрона от магнитных зеркал. В третьей — излагается новый подход к динамической теории дифракции в идеальных кристаллах, а в четвертой изучается рассеяние волн в случайных средах и альbedo нейтронов. Каждая глава заканчивается перечислением тех пунктов, в которых содержится новизна.

## СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

### 1 Глава 1. Рассеяние нейтрона в немагнитных слоистых средах

В этой главе представлен аналитический метод расчета немагнитных слоистых сред, названный здесь методом расслоения. Суть метода состоит в том, что для описания отражения и пропускания в сложной системе, ее расщепляют на отдельные слои, отражение и пропускание которых известны в аналитическом виде, а амплитуды отражения и пропускания всей системы записывают с помощью амплитуд отдельных слоев с учетом многократного переотражения между ними.

## 1.1 Рассеяние на двух зеркалах

Для демонстрации метода рассмотрим два произвольных полупрозрачных зеркала 1 и 2, разнесенных на расстояние  $l$  [4]. Каждое из зеркал описывается некоторым потенциалом  $u_i$  ( $i = 1, 2$ ). Рассеяние на каждом потенциале по отдельности характеризуется амплитудами отражения  $r_i$  и пропускания  $t_i$  ( $i = 1, 2$ ). Требуется найти амплитуды совместного отражения  $R_{12}$  и пропускания  $T_{12}$  обоими зеркалами.

Мы будем решать эту задачу следующим образом. Слева на первое зеркало падает плоская волна  $\exp(ikx)$ . На поверхности первого зеркала она равна единице. Обозначим через  $X$  амплитуду волны, падающей на второе зеркало, как показано на рис. 1. Для  $X$  можно составить уравнение,  $X = \exp(ikl)t_1 + \exp(ikl)r_1 \exp(ikl)r_2 X$ , которое означает самосогласованное определение  $X$  как суммы волны, прошедшей сквозь первый потенциал до второго, и волны, созданной самим  $X$ . Вторая волна с амплитудой  $X$  отражается от второго зеркала, доходит до первого, отражается от него и возвращается ко второму. Сумма амплитуд двух волн равна  $X$  по определению.

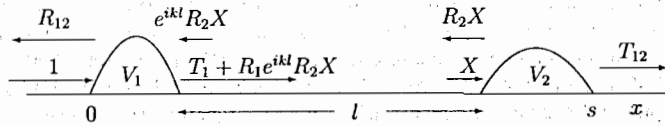


Рис. 1: Два полупрозрачных зеркала представлены двумя одномерными потенциалами, разделенными промежутком длины  $l$

Решение уравнения равно

$$X = \frac{t_1 \exp(ikl)}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}. \quad (1)$$

Амплитуды отражения и пропускания всей системой легко выражаются через  $X$ :

$$R_{12} = r_1 + t_1 \exp(ikl)r_2 X = r_1 + t_1^2 \frac{\exp(2ikl)r_2}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}, \quad T_{12} = t_2 X = \frac{t_2 \exp(ikl)t_1}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}. \quad (2)$$

Сблизим зеркала, т.е. положим  $l = 0$ . Тогда уравнения (2) приводятся к виду

$$R_{12} = r_1 + t_1 r_2 X, \quad T_{12} = t_2 X = \frac{t_2 t_1}{1 - r_1 r_2}. \quad (3)$$

Мы сделали простейший шаг, но он позволил обнаружить, что любой потенциал можно мысленно разделить в любом месте на две части и выразить амплитуды отражения и пропускания всем потенциалом через амплитуды, вычисленные для его частей. Правда, выше мы молчаливо предполагали зеркала (и соответственно их потенциалы) симметричными. В общем же случае и сам потенциал, и его части могут быть несимметричными, как показано на рис. 2, но обобщение - тривиально.

## 1.2 Свойства амплитуд отражения и пропускания одномерными потенциалами

### 1.2.1 Несимметричные потенциалы

Чтобы увидеть отличие амплитуд отражения и пропускания несимметричного потенциала от амплитуд симметричного, достаточно рассмотреть самый простой потенциал, состоя-

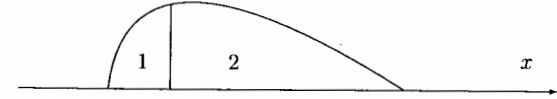


Рис. 2: Любой потенциал может быть разделен на две произвольные части. Амплитуды отражения и пропускания всем потенциалом выражаются через соответствующие амплитуды его частей.

щий из двух симметричных частей.

Формулы (3) показывают, что  $T_{12} = T_{21}$ , а значит, и вообще  $\overleftarrow{t} = \overrightarrow{t}$  для любого потенциала. Что же касается отражения, то амплитуды  $\overleftarrow{r}$  и  $\overrightarrow{r}$  могут различаться только фазовым множителем, т.е.  $\overleftarrow{r} = \exp(i\chi)\overrightarrow{r}$ , где  $\chi$  — вещественное число. Заметим, однако, что это соотношение справедливо только при отсутствии потерь в потенциалах, т.е. когда потенциалы  $u$  вещественны. Если мнимая часть потенциала отлична от нуля, то отлична от нуля и мнимая часть фазы. При этом становятся отличными друг от друга абсолютные значения амплитуд отражения слева и справа. Коэффициенты же пропускания остаются одинаковыми и при наличии потерь.

### 1.3 Соотношение между фазами $r$ и $t$

В случае действительных симметричных потенциалов фазы амплитуд отражения и пропускания различаются на  $\pm\pi/2$ . Это можно доказать исходя из унитарности и с помощью мысленного интерференционного эксперимента. Если записать  $r = |r| \exp(i\chi_r)$  и  $t = |t| \exp(i\chi_t)$  то  $2\chi_r - 2\chi_t = \pm\pi$ , и  $\chi_r = \chi_t \pm \pi/2$ . Это соотношение для фаз легко обобщается на случай несимметричного потенциала. Если представить  $\overrightarrow{r}$  и  $\overleftarrow{r}$  как  $\overrightarrow{r} = |\overrightarrow{r}| \exp(i\overrightarrow{\chi}_r)$  и  $\overleftarrow{r} = |\overleftarrow{r}| \exp(i\overleftarrow{\chi}_r)$ , то получим  $\frac{1}{2}(\overrightarrow{\chi}_r + \overleftarrow{\chi}_r) = \chi_t \pm \frac{\pi}{2}$ .

### 1.4 Периодические системы

Метод расщепления наиболее эффективен применительно к периодическим системам. Можно представить себе периодический потенциал с  $N$  произвольными периодами и поставить задачу найти его амплитуды отражения  $R_N$  и пропускания  $T_N$ . Оказывается, эту задачу проще всего решить, если сначала рассмотреть полубесконечный потенциал с  $N \rightarrow \infty$  и найти для него амплитуду отражения  $R_\infty$ .

Рассмотрим полубесконечный периодический потенциал, показанный на рис. 3 [5–8, 42]. Здесь стрелками слева изображены падающая и отраженная волны, причем амплитуда отражения обозначена через  $R$ , и волна, падающая на второй период, обозначена  $X$ . По аналогии с (3) можно сразу написать систему уравнений для  $X$  и  $R$ :

$$X = t + rRX, \quad R = r + tRX, \quad (4)$$

где  $r$  и  $t$  — амплитуды отражения и пропускания одного отдельно взятого периода (для простоты считаем его симметричным) и учтено, что полубесконечный потенциал не меняется при удалении из него одного периода. Получилась простая и симметричная система уравнений. Второе уравнение переходит в первое при перестановке  $r$  и  $t$ .

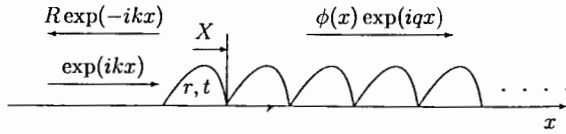


Рис. 3: Полубесконечная периодическая система

Решим эту систему. Для этого выразим  $X$  из первого уравнения и подставим во второе. В результате получим квадратное уравнение, решение которого можно представить в виде [5-8]

$$R = \frac{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} - \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} + \sqrt{(1-r)^2 - t^2}} \quad (5)$$

Вспомним, что волновая функция внутри периодического потенциала (см. рис. 3) представляется в виде произведения периодической функции  $\phi(x)$  на фазовый множитель с вектором Блоха  $q$ . Поэтому, если амплитуда волны, падающей на первый период, равна единице, то у волны, падающей на второй период, она будет равна  $\exp(iqa)$ , где  $a$  — период. Мы обозначили ее  $X$ . Следовательно,  $X = \exp(iqa)$ ! Если учесть симметрию уравнений, то можно сразу получить

$$X \equiv e^{iqa} = \frac{\sqrt{(1+t)^2 - r^2} - \sqrt{(1-t)^2 - r^2}}{\sqrt{(1+t)^2 - r^2} + \sqrt{(1-t)^2 - r^2}} \quad (6)$$

Если положить,  $r = |r| \exp(i\phi_r)$ , и учесть, что  $t = \pm i|t| \exp(i\phi_r)$ , то  $t^2 - r^2 = -\exp(2i\phi_r)$ . Соответственно  $(1 \pm r)^2 - t^2 = 1 \pm 2r + \exp(2i\phi_r)$ , а  $(1 \pm t)^2 - r^2 = 1 \pm 2t - \exp(2i\phi_r)$ . Подстановка в (5), (6) приводит к

$$R = \frac{\sqrt{\cos \phi_r + |r|} - \sqrt{\cos \phi_r - |r|}}{\sqrt{\cos \phi_r + |r|} + \sqrt{\cos \phi_r - |r|}}, \quad e^{iqa} = \mp \frac{\sqrt{\sin \phi_r + |t|} - \sqrt{\sin \phi_r - |t|}}{\sqrt{\sin \phi_r + |t|} + \sqrt{\sin \phi_r - |t|}} \quad (7)$$

Амплитуды  $r$  и  $t$  зависят от энергии, и, согласно (7), при тех ее значениях, когда  $\cos^2 \phi_r - |r|^2 < 0$ , амплитуда  $R$  представляет собой единичное комплексное число, т.е.  $|R| = 1$ . При этих значениях энергии происходит полное отражение от полубесконечного потенциала; такое полное отражение называется дифракцией Брэгга.

Выражения (7) удобны в тех случаях, когда приходится вычислять амплитуду отражения приближенно. В этом случае достаточно  $|t|$  заменить на  $\sqrt{1 - |r|^2}$ . При этом автоматически выполняются все необходимые соотношения между  $r$  и  $t$  и не возникает никакого нарушения унитарности, которое столь характерно для теории возмущений.

### 1.5 Конечное число периодов

Для нахождения амплитуд  $R_N$  и  $T_N$  отражения и пропускания потенциалами с конечным числом периодов  $N$  достаточно учесть, что полубесконечный периодический потенциал с периодом  $a$  периодичен также и с периодом  $Na$ . При этом волновой вектор Блоха остается тем же, но фазовый множитель  $X^N = \exp(iqNa)$ . Перепишем соотношения (4) в виде

$$X^N = T_N + R_N R X^N, \quad R = R_N + T_N R X^N, \quad (8)$$

где мы заменили амплитуды для одного периода на амплитуды для  $N$  периодов. Система (8) разрешается относительно  $R_N$  и  $T_N$ , и в результате получается

$$R_N = R \frac{1 - \exp(2iqNa)}{1 - R^2 \exp(2iqNa)}, \quad T_N = \exp(iqNa) \frac{1 - R^2}{1 - R^2 \exp(2iqNa)} \quad (9)$$

Эти формулы имеют ту же структуру, что и амплитуды отражения и пропускания прямоугольным потенциалом. Амплитуда  $R$  заменяет амплитуду  $r_0 = (k - k')/(k + k')$  отражения от потенциальной ступеньки, а блоховское волновое число заменяет волновое число  $k' = \sqrt{k^2 - u}$  нейтрона внутри потенциального барьера высоты  $u$ .

Если период несимметричен, то нужно различать отражения слева и справа, которые мы будем соответственно обозначать стрелками  $\rightarrow$ ,  $\leftarrow$  над буквами. В диссертации показывается, что несимметрия периодов наследуется амплитудой  $R$ :

$$\overleftarrow{R} = \frac{\overleftarrow{r}}{r} R, \quad \overrightarrow{R} = \frac{\overrightarrow{r}}{r} R, \quad R = \frac{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} - \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} + \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}, \quad (10)$$

где  $r$  — симметризованная амплитуда  $r = \sqrt{\overrightarrow{r} \overleftarrow{r}}$ . Аналогичным образом несимметрия  $\overleftarrow{r}$  и  $\overrightarrow{r}$  наследуется и амплитудами  $\overleftarrow{R}_N$  и  $\overrightarrow{R}_N$ , при этом блоховская экспонента симметрична.

### 1.6 Примеры периодических потенциалов

В качестве примера рассмотрим потенциал Кроннига-Пенни  $u(x) = 2p \sum_n \delta(x - na)$  для него получены выражения

$$R = \frac{\sqrt{k + p \operatorname{tg}(ka/2)} - \sqrt{k - p \operatorname{ctg}(ka/2)}}{\sqrt{k + p \operatorname{tg}(ka/2)} + \sqrt{k - p \operatorname{ctg}(ka/2)}}, \quad e^{iqa} = \frac{\sqrt{p + k \operatorname{ctg}(ka/2)} - \sqrt{p - k \operatorname{tg}(ka/2)}}{\sqrt{p + k \operatorname{ctg}(ka/2)} + \sqrt{p - k \operatorname{tg}(ka/2)}} \quad (11)$$

Соотношения (11) легко проанализировать и найти области полного отражения при малых  $k$  и брэгговских  $k_B = \pi n/a$ .

### 1.7 Суперзеркала

Брэгговскими отражениями можно воспользоваться для производства нейтронных зеркал с желаемыми свойствами [11, 12]. Например, суперзеркал с более высокой критической энергией нежели оптический потенциал  $u_0$ . Они получаются путем напыления на подложку слоев с различными оптическими потенциалами.

Обычно, используются два материала с разным оптическим потенциалом, из которых составляется бислой. На подложку напыляется много таких бислоев с разными толщинами  $a_j$ . Толщина каждого следующего слоя меньше предыдущего, и изменение толщин выбирается в соответствии с неким эмпирическим законом.

В настоящее время суперзеркала находят широчайшее применение в эксперименте [43-52]. Главный вопрос здесь — по какому закону следует изменять толщины бислоев. Обычно толщины последовательных бислоев уменьшаются по эмпирическому закону, указанному в [43]. При этом изменение толщин может быть очень малым — меньше расстояния между атомами, в результате чего появляются естественные шероховатости на границах раздела, что ухудшает отражающие свойства зеркал.

Представляется более правильным напылять бислои периодическими цепочками, а для минимизации количества бислоев при заданных параметрах зеркала оптимизировать ширину периода и количество периодов в каждой цепочке. При аналитическом методе расчета это достигается сравнительно просто, и в диссертации показано как.

На рис. 4 демонстрируется коэффициент отражения для 1139 бислоев FeCo-TiZr (FeCo магнитное вещество, поэтому оптический потенциал этого вещества высок для одной из проекций спина. Это важно для приготовления высоко эффективных поляризаторов.), состоящих из 24 цепочек с оптимально выбранными числами периодов [12]. При расчете

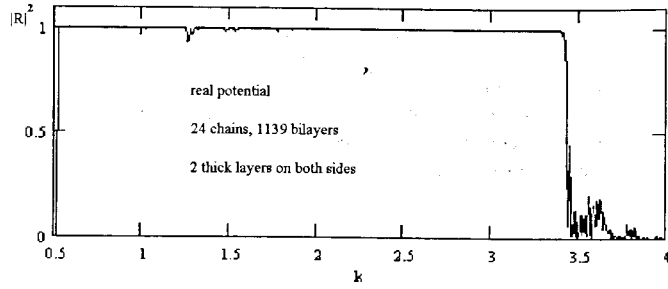


Рис. 4: Зависимость от  $k$  теоретически рассчитанного коэффициента отражения  $|R|^2$  от 24 цепочек 1139 бислоев FeCo-TiZr без учета поглощения.

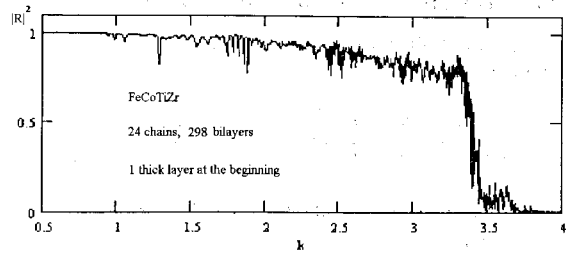


Рис. 5: Зависимость от  $k$  теоретически рассчитанного коэффициента отражения  $|R|^2$  от 24 цепочек 298 бислоев FeCo-TiZr с учетом поглощения.

требовалось, чтобы коэффициент отражения  $|R|^2$  отличался от единицы не больше чем на 1%. С двух сторон этой системы бислоев предполагались два широких барьера (шириной  $l = 10$ ). Мнимой частью потенциалов пренебрегалось. Мы видим почти идеальное полное отражение с граничной энергией в  $\approx (3.5)^2$  выше граничной энергии FeCo. Имеющиеся на кривой небольшие дефекты легко залечиваются напылением дополнительных цепочек.

Если учесть поглощение в слоях, то кривая отражения рис. 4 ухудшается. Отсюда следует, что требование  $1 - |R|^2 < 1\%$  нужно ослабить. При этом количество слоев значительно уменьшается.

На рис. 5 показано, что количество слоев для системы можно уменьшить почти в 4 раза с незначительным ухудшением кривой отражения. В этом случае широкий отражающий барьер предполагался только с одной стороны — на подложке.

## 1.8 Каналирование

Рассматривая периодические потенциалы, мы уже убедились в плодотворности алгебраического подхода. Рассмотрим теперь другие виды потенциалов.

Пусть многослойная система имеет оптический потенциал, показанный на рис. 6. Он отвечает изображенной на рис. 7 вполне реальной системе пленок, напыленных на подложку. Часть системы закрыта кадмиевым поглотителем (Cd). Можно поставить эксперимент, в котором часть системы слева от Cd облучается нейтронным пучком. Пучок проходит

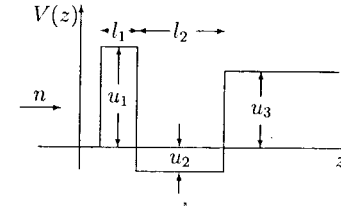


Рис. 6: Резонансная система для изучения каналирования

в резонансный слой 2 (Ti), распространяется в этом слое под Cd и выходит наружу с другой стороны Cd-покрытия. Наша задача — описать прохождение пучка под Cd и оценить интенсивность выходящего пучка [14].

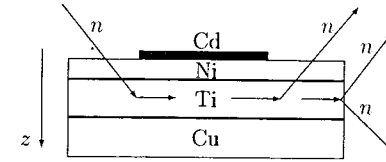


Рис. 7: Реальная конструкция, отвечающая потенциалу рис. 6

В диссертации найдена волновая функция внутри канала, ее затухание вдоль канала, связь затухания с утечкой через боковые стенки канала и распределение нейтронов, вышедших из канала.

## 1.9 Расчет для потенциалов общего вида

До сих пор, когда речь шла о конкретных примерах, мы использовали простые прямоугольные потенциалы или потенциалы типа Кроинга-Пенни. В реальной жизни могут встречаться и более сложные потенциалы. В частности, при исследовании экспериментально измеренной кривой отражения от медной пленки, напыленной на стекло [3], оказалось, что прямоугольными потенциалами описать ее невозможно. Необходимо учесть размытие всех границ раздела. На рис. 9 представлен пример потенциала, описывающего пленку на подложке. Границы у пленки размыты с обеих сторон, причем ширина размытия разная. Удобно представить размытие потенциалом Экарта,

$$u = \frac{u_0}{1 + \exp(-x/\sigma)}$$

для которого существует аналитическое решение уравнения Шредингера [11]. Потенциал представляет собой ступеньку высоты  $u_0$  с плавным краем ширины  $\sigma$ . Чтобы найти отражение от потенциала, показанного на рис. 9, его разбирают на три части [3]. Средняя часть представляет собой прямоугольный потенциал высоты  $u_0$  и ширины  $b_2$ , отражение  $r_2$  и пропускание  $t_2$  которого хорошо известны.

В работе показано, как рассчитываются амплитуды  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{t}_1$  и  $t_1$  для левой части, и соответствующие величины для правой части потенциала. Полная амплитуда отражения слева  $R_{123}$  для всего потенциала составляется в соответствии с выражениями (3):

$$R_{123} = \vec{r}_1 + \frac{t_1^2 R_{23}}{1 - \vec{r}_1 R_{23}}, \quad R_{23} = r_2 + \frac{t_2^2 r_3}{1 - r_2 r_3}. \quad (12)$$

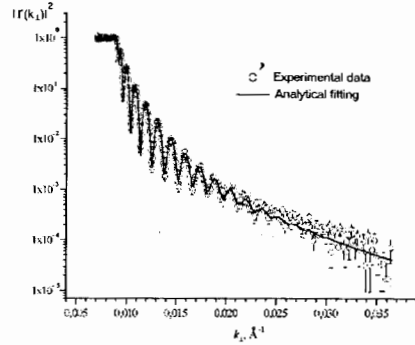


Рис. 8: Экспериментально измеренная кривая отражения пленки и ее теоретическая подгонка [3]

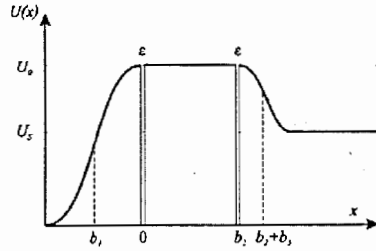


Рис. 9: Пленку с размытыми границами, нанесенную на подложку, можно описать тремя потенциалами: прямоугольным для самой пленки и двумя потенциалами Экарта, описывающими размытие краев

Теоретическая зависимость коэффициента отражения от скорости нейтрона  $k$ , полученная способом подгонки, представлена на рис. 8 сплошной кривой. Скорость подгонки с помощью аналитических формул в данном случае в 7 раз превышал скорость численной подгонки.

### 1.9.1 Метод непрерывных дробей

Для вычисления отражения от периодического потенциала необходимо знать отражение и пропускание одного периода. Возможно, что период описывается таким потенциалом, что найти аналитическое выражение для  $r$  и  $t$  невозможно. Тогда приходится прибегать к приближенным вычислениям. Одним из приближенных методов является метод непрерывных дробей.

Разобьем потенциал на  $n$  частей. Перенумеруем границы от 1 до  $n$  слева направо. Обозначим амплитуды отражения и пропускания одним прямоугольным потенциалом правее  $k$ -й границы через  $r_k$  и  $t_k$  соответственно, а амплитуды отражения и пропускания всех прямоугольников правее  $k$ -й границы через  $R_k$  и  $T_k$  соответственно. Амплитуду отражения  $R_1$

можно преобразовать к виду

$$R_1 = r_1 + \frac{t_1^2 R_2}{1 - r_1 R_2} = r_1 - \frac{t_1^2}{r_1 - 1/R_2}.$$

Подставив сюда аналогичное выражение для  $R_2$ , получим непрерывную дробь, которая заслуживает отдельного исследования:

$$R_1 = r_1 - \frac{t_1^2}{r_1 - \frac{1}{R_2}} = r_1 - \frac{t_1^2}{r_1 - \frac{1}{r_2 - \frac{t_2^2}{r_2 - \frac{1}{r_3 - \frac{t_3^2}{r_3 - 1 \dots}}}}}$$

## 1.10 Заключение к гл. 1

В этой главе сформулирован метод расслоения, с помощью его получены амплитуды отражения и пропускания произвольных периодических потенциалов, сформулирован алгоритм для расчета суперзеркал и исследовано каналирование нейтронов в резонансных многослойных системах.

## 2 Глава 2. Одномерное рассеяние нейтрона со спином

В первой главе метод расслоения, сформулирован для скалярной частицы. Здесь мы его обобщим на частицы спиновые. Это позволит учесть взаимодействие нейтрона с магнитным полем.

Спиновая частица описывается не одной числовой функцией, а двумя:

$$|\psi(\mathbf{r})\rangle = \begin{pmatrix} \psi_u(\mathbf{r}) \\ \psi_d(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \psi_u(\mathbf{r})|\xi_u\rangle + \psi_d(\mathbf{r})|\xi_d\rangle, \quad |\xi_u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\xi_d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

где индексы  $u, d$  указывают на верхнюю и нижнюю компоненты соответственно, и мы ввели два единичных базисных спинора  $|\xi_{u,d}\rangle$ . Две функции  $\psi_{u,d}(\mathbf{r})$  определяют направление спиновой стрелки  $\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \langle \psi(\mathbf{r}) | \boldsymbol{\sigma} | \psi(\mathbf{r}) \rangle$ , где  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  — матрицы Паули, и вместе с нею — направление магнитной стрелки.

Благодаря магнитному моменту нейтрон взаимодействует с магнитным полем  $\mathbf{B}$ . Это взаимодействие описывается оператором  $-\boldsymbol{\mu}\mathbf{B} = |\mu_n|\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}$ . Уравнение Шредингера для волновой функции  $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$  при наличии магнитного поля  $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$  и внешнего потенциала  $U(\mathbf{r}, t)$ , которые, вообще говоря, зависят и от координат и от времени, может быть записано в виде

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \left( \frac{1}{2} [-\Delta + u(\mathbf{r}, t)] + \boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \right) |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle. \quad (14)$$

где мы назвали временем величину  $\hbar/m$ , полем величину  $m|\mu_n|B/\hbar^2$  и обозначили  $u(\mathbf{r}, t) = 2mU(\mathbf{r}, t)/\hbar^2$ .

### 2.1 Отражение нейтронов от магнитного зеркала

Отражение нейтрона в магнитном поле от полубесконечного намагниченного зеркала описывается аналогично отражению от потенциальной ступеньки в скалярном случае. Решается стационарное уравнение

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + u_0\Theta(x > 0) + 2\sigma\mathbf{B}_1\Theta(x < 0) + 2\sigma\mathbf{B}_2\Theta(x > 0) - k^2 \right) |\Psi(x)\rangle = 0. \quad (15)$$

Потенциал взаимодействия содержит оптический потенциал  $u_0$  вещества зеркала (оно занимает полупространство  $x > 0$ ) и постоянные однородные магнитные поля:  $B_1$  вне зеркала ( $x < 0$ ) и  $B_2$  внутри него ( $x > 0$ ). При произвольной поляризации падающего нейтрона  $|\xi_0\rangle = \alpha_u|\xi_u\rangle + \alpha_d|\xi_d\rangle$ , где  $\sigma B_1|\xi_{u,d}\rangle = \pm B_1|\xi_{u,d}\rangle$ , и  $|\alpha_u|^2 + |\alpha_d|^2 = 1$ , решение уравнения (15) представляется в виде

$$|\Psi(x)\rangle = \Theta(x < 0) \left( e^{ik_1x} + e^{-ik_1x}\hat{r} \right) |\xi_0\rangle + \Theta(x > 0) e^{ik_2(x)} \hat{t} |\xi_0\rangle, \quad (16)$$

где  $\hat{r}$  и  $\hat{t}$  — матрицы амплитуд отражения и преломления,  $\hat{k}_1 = \sqrt{k^2 - 2\sigma B_1}$  — оператор волнового вектора вне среды, а  $\hat{k}_2 = \sqrt{k^2 - u - 2\sigma B_2}$  — оператор волнового вектора внутри среды. Чтобы найти  $\hat{r}$  и  $\hat{t}$  нужно сплечь волновую функцию на границе раздела. Это приводит к уравнениям  $\hat{I} + \hat{r} = \hat{t}$ ,  $\hat{k}_1(\hat{I} - \hat{r}) = \hat{k}_2\hat{t}$ . Отсюда следует, что

$$\hat{r} = (\hat{k}_1 + \hat{k}_2)^{-1}(\hat{k}_1 - \hat{k}_2), \quad \hat{t} = (\hat{k}_1 + \hat{k}_2)^{-1}2\hat{k}_1, \quad (17)$$

где  $\hat{k}_1 = \sqrt{k^2 - 2\sigma B_1}$ ,  $\hat{k}_2 = \sqrt{k^2 - u - 2\sigma B_2}$ .

С помощью полученных матриц далее вычисляются вероятности отражения поляризованного нейтрона с переворотом и без переворота поляризации.

### 2.1.1 Тройное расщепление пучка при отражении

Если внутреннее и внешнее поля не коллинеарны, то возникает явление тройного лучсотражения [22, 23] и четверного лучепреломления нейтронов при взаимодействии с магнитным зеркалом. Напомним, что в обычной оптике известно лишь двойное лучепреломление.

Схема эксперимента показана на рис. 10.

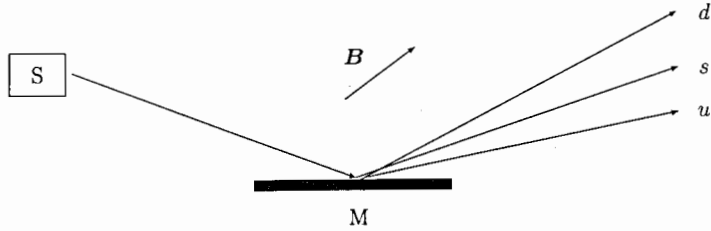


Рис. 10: Схема эксперимента по измерению тройного расщепления неполяризованного пучка нейтронов при отражении от немагнитного зеркала, когда внутреннее и внешнее поля неколлинеарны:  $S$  — источник нейтронов,  $M$  — зеркало,  $B$  — внешнее магнитное поле,  $s$  — зеркально отраженный пучок,  $u$  и  $d$  — пучки, полностью поляризованные по и против внешнего поля соответственно

При отражении от зеркала компонента скорости, параллельная зеркалу, сохраняется. Если отражение происходит без переворота спина, то сохраняется и величина нормальной компоненты скорости, следовательно отражение зеркально. Отражение же с переворотом спина оказывается незеркальным. Нейтроны, которые в падающем пучке поляризованы по полю, после переворота спина при отражении окажутся поляризованными против внешнего поля  $B$ . Поскольку полная энергия в упругом процессе рассеяния не меняется, то возрастает нормальная компонента скорости  $k_{\perp} \rightarrow \sqrt{k_{\perp}^2 + 4B}$ . Это значит, что угол скольжения после отражения увеличивается, и пучок нейтронов, полностью поляризованных против внешнего поля, отражается не в зеркальном направлении, а ближе к нормали. Совершенно аналогично, у нейтронов, которые в падающем пучке поляризованы против

поля, после отражения с переворотом спина угол скольжения по отношению к зеркалу уменьшается.

Таким образом неполяризованный пучок нейтронов после отражения от магнитного зеркала, немагнитности которого неколлинеарна внешнему полю, расщепляется на три пучка. Зеркальный пучок остается почти не поляризован, а два боковых пучка полностью поляризованы. Обычно  $k_{\perp}^2 \gg 4B$ , поэтому

$$\Delta k_{\perp} = \sqrt{k_{\perp}^2 + 4B} - k_{\perp} \approx \frac{2B}{k_{\perp}}, \quad \Delta\theta = \frac{\Delta k_{\perp}}{k} \approx \frac{2B}{k^2} \frac{k}{k_{\perp}} \approx \frac{B}{E\theta},$$

где  $\theta$  — угол скольжения, который при полном отражении теплового нейтрона от зеркала составляет несколько миллирадиан. Из этого выражения видно, что для тепловых нейтронов и внешнего поля порядка 1 кГс изменение угла составляет доли миллирадиана, и потому на расстоянии 1 м от зеркала пучок нейтронов, поляризованных против поля, расходится с зеркально отраженным пучком на доли миллиметра. Тем не менее расщепление отраженного и преломленного нейтронных пучков было обнаружено экспериментально [23, 54–57]. Эксперименты подтвердили правильность теоретических предсказаний [22] и показали, что эффект может быть использован для исследования свойств магнитных веществ [58].

### 2.1.2 Алгебра для магнитных зеркал

Алгебра, развитая для скалярного взаимодействия, легко обобщается на магнитное. Рассмотрим отражение от зеркала толщины  $d$ , полагая поле вне зеркала равным  $B_1$ , а внутри него, в области  $0 \leq x \leq d$ , —  $B_2$ . Пусть волна в спиновом состоянии  $|\xi_0\rangle$  падает на зеркало слева. Обозначим через  $\hat{X}|\xi_0\rangle$  спиновую амплитуду волны, падающей на правый край изнутри зеркала. Теперь легко записать систему уравнений для  $\hat{X}$  и амплитуд отражения  $\hat{R}$  и пропускания  $\hat{T}$ :

$$\hat{X} = \exp(ik_2d)\hat{t} + \exp(ik_2d)\hat{r}' \exp(ik_2d)\hat{r}'\hat{X}, \quad \hat{R} = \hat{r} + \hat{t}' \exp(ik_2d)\hat{r}'\hat{X}, \quad \hat{T} = \hat{t}'\hat{X}, \quad (18)$$

откуда следует  $\hat{X} = (\hat{I} - e^{ik_2d}\hat{r}'e^{ik_2d}\hat{r})^{-1} e^{ik_2d}\hat{t}$ ,

$$\hat{R} = \hat{r} - \hat{t}' e^{ik_2d}\hat{r}' (\hat{I} - e^{ik_2d}\hat{r}'e^{ik_2d}\hat{r})^{-1} e^{ik_2d}\hat{t}, \quad \hat{T} = \hat{t}' (\hat{I} - e^{ik_2d}\hat{r}'e^{ik_2d}\hat{r})^{-1} e^{ik_2d}\hat{t}, \quad (19)$$

и можно непосредственно записать волновую функцию внутри зеркала.

Используя свойства матриц Паули, можно найти все желаемые матричные элементы.

Аналогичным образом находится рассеяние на системе двух зеркал и на периодической системе многих магнитных зеркал. В последнем случае для  $\hat{X} \equiv \exp(i\hat{q}x)$ , где  $\hat{q}$  — матрица вектора Блоха, и амплитуды отражения от полубесконечного потенциала  $\hat{R}$  получаем

$$\hat{X} = \hat{t} + \hat{r}\hat{R}\hat{X}, \quad \hat{R} = \hat{r} + \hat{t}\hat{R}\hat{X}, \quad (20)$$

где  $\hat{r}$  и  $\hat{t}$  — амплитуды отражения и пропускания одним периодом (для простоты мы и здесь считаем период симметричным). Разрешив первое уравнение системы (20) относительно  $\hat{X}$  и подставив результат во второе, найдем уравнение для  $\hat{R}$ :  $\hat{R} = \hat{r} + \hat{t}\hat{R}(\hat{I} - \hat{r}\hat{R})^{-1}\hat{t}$ .

Это уравнение сводится к квадратному матричному уравнению вида  $ZAZ - ZB - CZ + D = 0$ , где  $Z = \hat{R}$ ,  $B = \hat{t}^{-1}$ ,  $A = \hat{t}^{-1}\hat{r}$ ,  $C = \hat{r}\hat{t}^{-1}\hat{r} - \hat{t}$ ,  $D = \hat{r}\hat{t}^{-1}$ . Получить решение этого уравнения в аналитическом виде в общем случае при некоммутирующих матрицах  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  не удастся. В численном же виде решение не представляет труда.



## 2.2 Отражение от геликоидальной системы

Одним из частных случаев периодической системы, для которой получается аналитическое решение, — это геликоидальная система, где вектор намагниченности внутри среды вращается винтообразно по или против часовой стрелки вокруг направления нормали к границе раздела [39].

### 2.2.1 Отражение от полубесконечного зеркала

Рассмотрим сначала полубесконечное зеркало при  $z > 0$ , в котором вектор магнитной индукции  $\mathbf{b}$  вращается в плоскости  $(x, y)$  против часовой стрелки. Внешнее поле  $\mathbf{B}_0$  может быть направлено произвольно. Уравнение Шредингера внутри среды имеет вид

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} - u_0 - 2b[\sigma_x \cos(2qz + 2\varphi) + \sigma_y \sin(2qz + 2\varphi)] + k^2 \right) |\psi(z)\rangle = 0, \quad (21)$$

где  $u_0$  — оптический ядерный потенциал среды, величина  $\pi/q$  определяет шаг винтового вращения. Для общности мы ввели начальную фазу  $2\varphi$  поля  $\mathbf{b}$  у входной поверхности и для удобства выделили множитель 2.

Воспользуемся представлением

$$\sigma_x \cos(2qz + 2\varphi) + \sigma_y \sin(2qz + 2\varphi) = \exp(-i\sigma_z(qz + \varphi))\sigma_x \exp(i\sigma_z(qz + \varphi)), \quad (22)$$

и подставим в (21)  $|\psi(z)\rangle$  в виде  $\exp(-i\sigma_z(qz + \varphi))|\phi(z)\rangle$ . В результате получим уравнение

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} - 2iq\sigma_z \frac{d}{dz} - u_0 - 2b\sigma_x + k^2 - q^2 \right) |\phi(z)\rangle = 0. \quad (23)$$

Это уравнение решалось в [60]. Но там решение записывалось в виде  $\exp(ipz)|\chi(p)\rangle$ . Мы для волны, уходящей от границы раздела, записываем более общее решение:

$$|\phi(z)\rangle = \exp(i[a + p\sigma]z)|\chi\rangle, \quad (24)$$

с четырьмя неизвестными параметрами  $a$  и  $p$ . Подстановка выражения (24) в уравнение (23) приводит к 4-м уравнениям для этих параметров.

Далее находятся амплитуды отражения и преломления полубесконечного зеркала, а затем амплитуды отражения и пропускания зеркала конечной толщины. По этим амплитудам рассчитываются коэффициенты отражения и пропускания с переворотом и без переворота спина. Результаты расчета для модельной полубесконечной системы и для простейшего случая, когда  $\mathbf{B}_0 = 0$ , приведены на рис. 11. При расчетах за единицу длины волнового вектора принята величина  $\sqrt{b}$ , и выбраны параметры  $u_0 = 4 - 0.01i$ ,  $q = 3$ , и соответственно  $b = 1$ . Обратим внимание, что на обоих рисунках видна граница полного отражения при  $k = \sqrt{u_0}$ . Кроме того, на рис. 1 отчетливо виден резонансный пик полного отражения в интервале  $\sqrt{q^2 + u_0 - 2b} \leq k \leq \sqrt{q^2 + u_0 + 2b}$ . В этом интервале величины  $a$  и  $p$  оказываются комплексно сопряженными, поэтому волновой вектор  $a - p$  является чисто мнимой величиной. Такому волновому вектору соответствует полное отражение с переворотом спина. Далее объясняется причина появления этого пика.

В диссертации также представлены результаты расчета для зеркала конечной толщины.

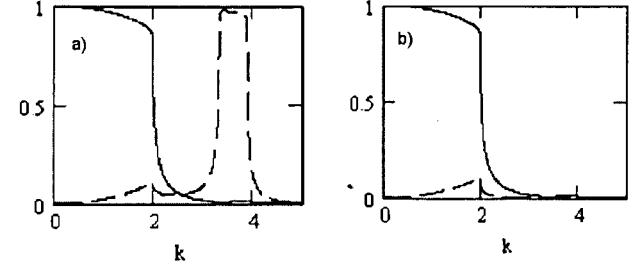


Рис. 11: Зависимость от волнового вектора  $k$  коэффициента отражения а)  $|R|^2_{-}$  без переворота спина (сплошная кривая) и  $|R|^2_{+-}$  с переворотом (пунктирная кривая) при начальной поляризации (правый индекс  $-$ ) в направлении противоположном оси  $z$ , которая параллельна внутренней нормали к зеркалу. б) То же самое но для коэффициентов  $|R|^2_{++}$ ,  $|R|^2_{+-}$  когда начальная поляризация параллельна оси  $z$ .

## 2.3 Обобщенный матричный метод расчета многослойных магнитных систем

В тех случаях, когда аналитически описать систему не удастся, требуются численные методы. Здесь будет рассмотрен матричный метод, который обобщает известный метод Паррэ [53] на магнитные системы [25].

Рассмотрим произвольную многослойную систему. Будем полагать, что все слои имеют различные ядерные потенциалы и магнитные поля. Покажем, как вычисляются матричные амплитуды отражения и пропускания для такой системы. Слева от границы раздела 1 волновая функция равна

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} \exp(i\hat{k}_0^+ x) & 0 \\ 0 & \exp(-i\hat{k}_0^+ x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\xi_0\rangle \\ \hat{\rho}|\xi_0\rangle \end{pmatrix}, \quad (25)$$

а справа от  $n$ -й поверхности раздела —

$$\psi_n = \begin{pmatrix} \exp(i\hat{k}_n^+(x - x_n)) & 0 \\ 0 & \exp(-i\hat{k}_n^+(x - x_n)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\tau}|\xi_0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (26)$$

где  $|\xi_0\rangle$  — произвольный спинор, характеризующий поляризацию падающего нейтрона,  $\hat{\rho}$  и  $\hat{\tau}$  — матрицы отражения и пропускания всей системой, которые необходимо вычислить.

Волновые функции (25) и (26) связаны друг с другом через блочную матрицу  $\hat{M}$ :

$$\Xi_0 = \hat{M}\Xi_n \equiv \begin{pmatrix} |\xi_0\rangle \\ \hat{\rho}|\xi_0\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{M}_{11} & \hat{M}_{12} \\ \hat{M}_{21} & \hat{M}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\tau}|\xi_0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (27)$$

где блоки  $\hat{M}_{ij}$  сами представляют собой матрицы размерности  $2 \times 2$ . Из этого соотношения непосредственно следует, что  $\hat{\tau} = \hat{M}_{11}^{-1}$ , и  $\hat{\rho} = \hat{M}_{21}\hat{M}_{11}^{-1}$ . Таким образом, чтобы найти  $\hat{\rho}$  и  $\hat{\tau}$ , нужно найти матрицу  $\hat{M}$  размерности  $4 \times 4$ . Для этого необходимо сшить волновую функцию на всех границах раздела. Полученные формулы были положены в основу программы расчета отражения нейтронов от произвольных магнитных систем [64].

## 2.4 Резонансный поворот спина

Эксперименты с поляризованными нейтронами обычно содержат спин-ротаторы, позволяющие менять направление поляризации падающих частиц. Мы здесь рассмотрим резонансный метод поворота спина, использующий взаимодействие нейтрона с радиочастотным полем. Особенность его состоит в том, что радиочастотные поля не только меняют направление спина нейтрона, но меняют и его энергию. Это порождает множество интересных явлений, доступных экспериментальному исследованию. Изменение энергии происходит оттого, что в процессе взаимодействия с радиочастотным полем нейтрон может поглотить или испустить электромагнитный квант.

Обычно изменением энергии нейтрона при перевороте спина пренебрегается, т.е. рассматривается самый распространенный случай  $E_0 \gg B_0 \gg B_{\text{rf}}$ , когда изменение скорости нейтрона, влетающего в поле  $B_0$ , пренебрежимо мало. Тогда вероятность переворота спина рассчитывается по формуле Раби

$$w_{\text{fl}} = \left| \frac{\Omega_x}{\Omega} \sin(\Omega t_1) \right|^2 = \frac{B_{\text{rf}}^2}{B_{\text{rf}}^2 + (\omega - B_0)^2} \sin^2 \left( \sqrt{B_{\text{rf}}^2 + (\omega - B_0)^2} t_1 \right), \quad (28)$$

где  $t_1 = D/k_0$  — время пролета нейтрона через флиппер. Эта формула, однако ничего не говорит о том, как меняется энергия при перевороте. Чтобы выяснить, что с нею происходит необходимо точно решить задачу, которая называется задачей Крюгера [62].

Полное решение задачи о рассеянии нейтрона на системе постоянного и радиочастотного полей сопряжено с решением системы 16 линейных уравнений с 16 неизвестными. Принципиальных трудностей здесь нет, но воодушевления такой расчет не вызывает. Сам Крюгер ограничился приближенным решением. Его было достаточно, чтобы доказать возможность ускорения нейтрона с помощью радиочастотных полей. Позже к этой задаче обращались авторы работ [26, 63].

Решение задачи Крюгера можно найти в замкнутом матричном виде без утомительных вычислений. Это решение содержит всю информацию о прошедших и отраженных волнах в общем виде, и для определения вероятности того или иного процесса достаточно воспользоваться свойствами матриц Паули и найти соответствующий матричный элемент.

### 2.4.1 Задача Крюгера

Обратимся к уравнению Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)\rangle = \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left[ \frac{u}{2} + \sigma B_0 + \sigma B_{\text{rf}}(t) \right] \Theta(0 \leq x \leq D) \right\} |\Psi(x, t)\rangle, \quad (29)$$

в котором постоянное  $B_0 = (0, 0, B_0)$  и радиочастотное  $B_{\text{rf}}(t) = B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), \sin(2\omega t), 0)$  поля сосредоточены внутри слоя вещества  $0 \leq x \leq D$  с оптическим потенциалом  $u$ . Вне области  $x \in [0, D]$  нет ни вещества, ни полей.

Поиск решения задачи (29) осложняется тем, что магнитное поле зависит от времени. Мы можем исключить эту зависимость с помощью преобразования

$$\sigma B_{\text{rf}}(t) = B_{\text{rf}}[\sigma_x \cos(2\omega t) + \sigma_y \sin(2\omega t)] = B_{\text{rf}} e^{-i\omega \sigma_z t} \sigma_x e^{i\omega \sigma_z t}, \quad (30)$$

и подстановки  $|\Psi(x, t)\rangle = e^{-i\omega \sigma_z t} |\phi(x, t)\rangle$ . В результате уравнение (29) преобразуется к виду

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\phi(x, t)\rangle = \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \omega \sigma_z + \left[ \frac{u}{2} + \sigma_z B_0 + \sigma_x B_{\text{rf}} \right] \Theta(0 \leq x \leq D) \right\} |\phi(x, t)\rangle. \quad (31)$$

В полученном уравнении магнитные поля не зависят от времени, зато во всем пространстве появляется дополнительное магнитное поле  $-\omega$ , антипараллельное  $B_0$ . Однако решение уравнения (31) эквивалентно решению задачи об отражении и пропускании магнитным зеркалом, намагниченность которого неколлинеарна внешнему полю. Решение этой задачи было приведено выше.

### 2.4.2 $\pi/2$ -Ротатор

В дальнейшем мы в основном будем рассматривать падающую волну, полностью поляризованную вдоль поля  $B_0$ , т.е. со спином  $|\xi_u\rangle$ , и потому при резонансе, когда можно пренебречь отражениями и потенциалом  $u$ , матрица пропускания приводится к виду  $\hat{\tau}_u = \exp(-i\varphi \sigma_x) = \cos \varphi - i \sin \varphi \sigma_x$ , из которого следует, что прошедшая волна переходит в состояние  $|\xi\rangle = \hat{\tau}_u |\xi_u\rangle = (\cos \varphi |\xi_u\rangle - i \sin \varphi |\xi_d\rangle)$  с компонентами вектора спиновой стрелки  $s = \langle \xi | \sigma | \xi \rangle = (0, -\sin 2\varphi, \cos 2\varphi)$ . Отсюда видно, что для угла  $\varphi = \pi/4$  спиновая стрелка оказывается перпендикулярной оси  $z$ , т.е. спин поворачивается на угол  $\pi/2$  против часовой стрелки вокруг оси  $x$ , направленной по радиочастотному полю  $B_{\text{rf}}$ , и ложится в плоскость, перпендикулярную оси  $z$ . Однако радиочастотный ротатор не только поворачивает спин, но и меняет энергию нейтрона. Часть волновой функции, которая отвечает перевернутой спиновой компоненте  $|\xi_d\rangle$ , описывает состояние нейтрона с энергией  $E_- = E_0 - 2\omega$  и скоростью  $k_- = \sqrt{k_0^2 - 4\omega_0}$  меньшими, чем состояние с неперевернутой спиновой компонентой  $|\xi_u\rangle$ . Таким образом, после  $\pi/2$ -спин-ротатора каждый нейтрон находится в суперпозиции двух состояний с разной энергией. Поток нейтронов, прошедших через  $\pi/2$  ротатор содержит в себе волну спиновой прецессии, а если его пропустить через анализатор поляризации, фильтрующий нейтроны, поляризованные вдоль, скажем, оси  $x$ , то после анализатора пучок будет модулирован по плотности, т.е. будет нести в себе звуковую волну.

Далее в диссертации рассмотрены различные конфигурации  $\pi/2$  и  $\pi$ -флипперов соответствующие методу разделенных полей Рамзея и спиновому эхо.

## 2.5 Длинноволновая нейтронная голография без опорного пучка [40]

Нейтрон в суперпозиции двух состояний с разной энергией образует волну с частотой, пропорциональной разности энергий двух состояний и довольно большой длиной волны. Этот факт можно использовать для голографии.

Рассмотрим систему из двух спин-флипперов ( $\pi$ -ротаторов), показанных на рис. 12. Если падающий нейтрон поляризован вдоль оси  $x$ , то после первого спин-флиппера он оказывается в суперпозиции двух спиновых состояний по и против оси  $z$  с разными энергиями  $E_{\pm} = E \pm \hbar\omega$ , где  $\omega$  — резонансная частота спин-флиппера. Суперпозиция двух волн создаст когерентную волну спиновой прецессии (ВСП). Если в точке  $\mathbf{r}_1$  имеется рассеиватель, то он создаст две сферические волны с разными волновыми векторами  $k_{\pm} = \sqrt{k^2 \mp 2\omega}$ . Волновая функция рассеянных нейтронов до второго флиппера равна  $|\psi_s(\mathbf{r}, t)\rangle =$

$$= \exp(-i(E + \omega \sigma_z)t) \int d^3 r' N_0(\mathbf{r}') \frac{b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(i\hat{k}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \exp(i\hat{k}\mathbf{r}') |\chi_{xu}\rangle, \quad (32)$$

где  $N_0(\mathbf{r}')$  и  $b(\mathbf{r}')$  — атомная плотность и амплитуда рассеяния в точке  $\mathbf{r}'$  внутри образца,  $k = \sqrt{k^2 + 2\omega \sigma_z}$  и  $\hat{k} = \sqrt{k^2 + 2\omega \sigma_z} \mathbf{k} / k$ .

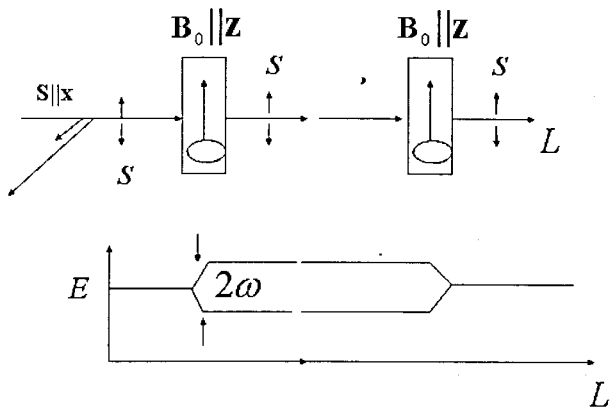


Рис. 12: Схема генерации когерентной ВСП между двумя тождественными спин-флипперами с внутренним магнитным полем  $B_0$ , параллельным оси  $z$  (вверху). Падающий нейтронный пучок поляризован вдоль оси  $x$  и распространяется вдоль оси  $y$ . Магнитное поле вне флипперов отсутствует. После первого флиппера нейтрон оказывается в состоянии с двумя поляризациями по и против оси  $z$ , параллельными внутреннему полю первого флиппера, и состояния эти расщеплены по энергии, как видно из диаграммы внизу. После второго флиппера энергии обеих компонент возвращаются к первоначальному значению  $E$ . ВСП существует между двумя флипперами (см. [40]).

Сферические волны, идущие от одного рассеивателя с разными  $k$ , интерферируют друг с другом, и интерференционная картина содержит голографическую информацию о положении рассеивателя внутри образца.

Две сферические волны имеют разную энергию, поэтому интерференционная картина осциллирует, и если ее регистрировать на позиционно чувствительном детекторе (ПЧД) до второго флиппера, то она усреднится во времени и создаст только однородный фон. Поэтому рассеянные нейтроны следует пропустить через второй флиппер, тождественный первому, после чего обе компоненты спиновой функции возвращаются к первоначальной энергии. Если теперь пропустить их еще через анализатор, фильтрующий нейтроны, поляризованные, например, вдоль оси  $x$ , то интенсивность, зарегистрированная на ПЧД даст голографическое изображение.

Будем считать, что рассеяние некогерентно. Это значит, что интенсивность рассеянных нейтронов на ПЧД, определяемая квадратом волновой функции, усредненным по элементному изотопическому и спиновому состояниям атомов, приводится к виду

$$I(\mathbf{r}) = \langle \langle |\chi_{zu} | \psi_s(\mathbf{r}, t)|^2 \rangle \rangle = \int d^3 r' N(\mathbf{r}') |k b(\mathbf{r}')|^2 \cos^2(\mathbf{q}\mathbf{r}' + \mathbf{q}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) = \\ = C + \frac{1}{2} \int d^3 r' N(\mathbf{r}') |k b(\mathbf{r}')|^2 \cos(2\mathbf{q}\mathbf{r}' + 2\mathbf{q}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}')), \quad (33)$$

где  $C = \int d^3 r' N(\mathbf{r}') |k b(\mathbf{r}')|^2 / 2$ ,  $\mathbf{q} = (\omega/k^2)\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{q}_\Omega = (\omega/k)\Omega$ , и всюду, где это возможно, мы пренебрегли  $\omega$  по сравнению с  $k$ . Мы видим, что интенсивность зависит от координат точки  $\mathbf{r}$  на ПЧД и содержит информацию о фазе ВСП, т. е. о расстоянии между точкой  $\mathbf{r}$  на ПЧД и точкой  $\mathbf{r}'$ , в которой произошло рассеяние.

Поместив фотопленку на ПЧД, получим голограмму. Освещение голограммы восстанавливающей световой волной, позволяет визуально наблюдать структуру рассеивающих непрозрачных веществ.

## 2.6 Заключение к главе 2

В этой главе метод расслоения, сформулированный в главе 1 для скалярных частиц, обобщен на спиновые частицы. В результате обнаружено расщепление нейтронного пучка при отражении и преломлении на границе двух магнитных сред, найдено отражение и пропускание магнитных зеркал с геликоидальной намагниченностью при произвольной поляризации падающего нейтрона, разработан обобщенный матричный метод для численного расчета произвольных одномерных магнитных систем, получено полное решение задачи Крюгера: одномерного рассеяния нейтрона на совокупности постоянного и радиочастотного полей, обнаружены длинноволновые характеристики нейтрона, прошедшего через радиочастотный спин-флиппер, и с их помощью сформулированы принципы нейтронной голографии.

## 3 Глава 3. Динамическая дифракция в трехмерных периодических средах

В данной главе представлен новый подход к описанию динамической дифракции в идеальных кристаллах. Он основан на методе расслоения, обобщенном на частицы с произвольным спином, что позволяет его применить к упругому рассеянию нейтрона трехмерными периодическими средами.

Трехмерные кристаллы периодичны не только вдоль нормали к поверхности раздела, но и вдоль самой поверхности раздела. Если представить кристалл одномерной периодической системой, разбив его на отдельные слои толщиной в период, параллельные входной поверхности, то рассеяние на одном одномерном периоде приводит не только к отражению и пропусканию без изменения компоненты импульса параллельной входной поверхности, но и к дифракции, которая изменяет эту компоненту. Поэтому рассеяние на одном периоде описывается не скалярными числами  $\rho$  и  $\tau$ , а матрицами  $\hat{\rho}$  и  $\hat{\tau}$ , как и в случае спиновых частиц. Здесь мы, однако, отвлечемся от спиновых свойств нейтрона и считаем его скалярной частицей. Тем не менее амплитуды отражения и пропускания остаются матрицами, что обусловлено трехмерной структурой кристалла [2, 30, 31].

Для описания «дифракции» на кристаллической плоскости, представим себе волну  $\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r})$ , падающую на такую плоскость, расположенную в точке  $z = 0$ . Эта волна рассеивается на атомах (для простоты будем считать элементарную ячейку квадратной, со стороной  $a$ ); расположенных в точках  $\mathbf{r}_n = a(n_x, n_y)$ , где  $n_x, n_y$  — целые числа. Каждый из атомов создает сферическую волну, а совокупность сферических волн, идущих от плоскости, по принципу Френеля создает снова плоскую волну. Если бы атомы были расположены на плоскости непрерывно, то получилась бы совокупность сферических волн, испускаемых каждой точкой фронта падающей плоской волны с фазовым множителем  $\exp(i\mathbf{k}_{0\parallel}\mathbf{r}_{\parallel})$ . Такая совокупность вдали от плоскости  $z = 0$  воспроизводит при  $z > 0$  падающую плоскую волну  $\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_{0\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + i\mathbf{k}_{0\perp}z)$  а при  $z < 0$  — отраженную волну  $\exp(i\mathbf{k}_{0\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} - i\mathbf{k}_{0\perp}z)$ , где  $\mathbf{k}_{0\parallel}, \mathbf{k}_{0\perp}$  — компоненты волнового вектора  $\mathbf{k}_0$ , параллельные и перпендикулярная плоскости  $z = 0$  соответственно.

Поскольку атомы на кристаллической плоскости расположены дискретно, они порождают только дискретную совокупность сферических волн с теми же фазовыми множи-

телями  $\exp(ik_{0\parallel}r_n)$ . Эти множители тождественны множителям  $\exp(i[k_{0\parallel} + \kappa]r_n)$  при  $\kappa r_n = 2\pi n$  с целыми  $n$ , поэтому сумма дискретных сферических волн воспроизводит плоскую волну неоднозначно. Она воспроизводит, не только первоначальную и отраженную волны, но также волны  $\exp(ik_{\kappa}r) = \exp(i[k_{0\parallel} + \kappa]r_{\parallel} + ik_{\kappa\perp}z)$  и  $\exp(i[k_{0\parallel} + \kappa]r_{\parallel} - ik_{\kappa\perp}z)$ , где  $k_{\kappa\perp} = \sqrt{k_0^2 - (k_{0\parallel} + \kappa)^2}$ . Последнее равенство следует из закона сохранения энергии: рассеяние на фиксированных в пространстве атомах упруго и  $|k_{\kappa}| = |k_0|$ .

Условие  $\kappa r_n = 2\pi n$  выполняется только для  $\kappa = 2\pi(n_x, n_y)/a$  с целыми  $n_x, n_y$ . Такие  $\kappa$  называются векторами обратной решетки кристаллической плоскости, а плоские волны с  $\kappa \neq 0$  называются дифрагированными.

Таким образом, кристаллическая плоскость преобразует падающую плоскую волну в несколько отраженных и прошедших плоских волн, волновые векторы которых отличаются векторами обратной решетки. Совокупность отраженных и прошедших волн, а также падающую волну можно описать многомерными (вообще говоря, бесконечномерными) векторами амплитуд

$$|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |\psi_r\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ a_{-2} \\ a_{-1} \\ a_0 \\ a_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \hat{\rho}|\psi_0\rangle, \quad |\psi_t\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ b_{-2} \\ b_{-1} \\ b_0 \\ b_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \hat{\tau}|\psi_0\rangle, \quad (34)$$

где  $|\psi_0\rangle$  соответствует единственной падающей волне с волновым вектором  $k_0$ . При этом амплитуды  $\hat{\rho}$  и  $\hat{\tau}$  являются многомерными матрицами, матричные элементы которых связывают компоненты первичного вектора  $|\psi_0\rangle$  падающей волны с компонентами  $a_j, b_j$  векторов отраженных и прошедших волн. Описывая таким образом совокупность всех волн, мы можем трехмерные периодические среды рассматривать как одномерные и воспользоваться алгеброй, развитой для одномерного случая, с учетом матричного характера амплитуд отражения и пропускания. Чтобы понять, каковы эти матрицы, рассмотрим подробнее дифракцию нейтрона на кристаллической плоскости.

### 3.1 Дифракция на кристаллической плоскости

Будем считать, что поверхность идеального кристалла бесконечна, и он может быть разбит на симметричные периоды, каждый из которых содержит бесконечную кристаллическую плоскость и два равных пустых промежутка с обеих сторон от нее. Элементарную ячейку плоскости будем считать квадратной, а элементарную ячейку всего кристалла — кубической.

Рассеяние на одном отдельно взятом периоде (он делит пространство на два полупространства) описывается матрицами амплитуд отражения  $\hat{\rho}$  и пропускания  $\hat{\tau}$ . Матричные элементы первой характеризуют амплитуды зеркального отражения и дифракции в ту же сторону, куда идет зеркально отраженная волна, а матричные элементы второй — амплитуды прошедшей и дифрагированных волн, идущих в то же полупространство, что и прошедшая волна. С помощью  $\hat{\rho}$  и  $\hat{\tau}$  находятся матрицы отражения  $\hat{R}$  от полубесконечного кристалла и блоховского волнового вектора  $\hat{q}$  внутри него. С помощью же  $\hat{R}$  и  $\hat{q}$  находятся матрицы отражения  $\hat{R}_N$  и пропускания  $\hat{T}_N$  кристаллом конечной толщины, состоящим из  $N$  периодов. Таким образом, в первую очередь нужно вычислить  $\hat{\rho}$  и  $\hat{\tau}$ , т.е. найти, как рассеивается падающая плоская волна на совокупности атомов, составляющих кристаллическую плоскость. Этому посвящен следующий подраздел.

## 3.2 Теория многократного рассеяния волн

Будем считать, что атомы, составляющие плоскость, строго фиксированы в пространстве. Это значит, что рассеяние на отдельном атоме и на их совокупности строго упруго.

### 3.2.1 Рассеяние на одном фиксированном центре

Согласно стандартной теории рассеяния рассеяние нейтрона (сейчас мы не будем учитывать его спин) на отдельном центре, фиксированном в точке  $r = 0$ , описывается волновой функцией  $\psi(r) = \exp(ikr) - (b/r)\exp(ikr)$ , где первое слагаемое соответствует падающему нейтрону (плоская волна), а второе — рассеянному (сферическая волна). Множитель  $b$  называется амплитудой рассеяния (мы обозначаем ее со знаком «минус») и имеет размерность длины.

### 3.2.2 Рассеяние на многих фиксированных центрах

При рассеянии на  $N$  центрах волновая функция равна [65, 66]

$$\psi(r) = \exp(ikr) - \sum_{j=1}^N \psi_j \frac{b_j}{|r - r_j|} \exp(ik|r - r_j|), \quad \psi_j = \exp(ikr_j) - \sum_{j' \neq j} \psi_{j'} b_{j'} \eta_{j'j}, \quad (35)$$

где  $b_j$  — амплитуда рассеяния центром, расположенным в точке  $r_j$ , а  $\psi_j$  — полная амплитуда поля, освещающего  $j$ -й центр, которая, как показано во втором уравнении, складывается из амплитуды падающей плоской волны  $\exp(ikr_j)$  и волн  $\eta_{ij} = \exp(ik|r_i - r_j|)/|r_i - r_j|$ , идущих от всех остальных центров. В общем случае решить систему уравнений (35) в аналитическом виде нельзя. Для кристаллической плоскости это возможно.

## 3.3 Рассеяние на бесконечной кристаллической плоскости

Представим себе бесконечную плоскость  $x, y$ , на которой находятся атомы, образующие идеальную решетку с квадратной элементарной ячейкой. Выберем оси  $x$  и  $y$  параллельно сторонам элементарной ячейки. Тогда координаты атомов можно представить в виде  $r_n = an$ , где  $a$  — сторона ячейки, а вектор  $n = (n_x, n_y, 0)$  имеет целочисленные компоненты  $n_x, n_y$ . Атомы будем считать одинаковыми, поэтому  $b_j = b$ .

Если из области  $z < 0$  на плоскость падает плоская волна  $\exp(ikr)$ , то по отношению к ней все атомы плоскости равноправны и освещаются одинаково. Из соображений симметрии амплитуды полей  $\psi_j$  могут различаться только фазой  $\exp(ikr_j)$ . Поэтому решение системы уравнений (35) равно  $\psi_n = C \exp(ikr_n)$ . Подставив его в (35), получим уравнение для  $C$ :  $C = 1 - bSC$ , где  $S = \sum_{n \neq 0} \exp(ikr_n) [\exp(ikr_n)/r_n]$ . Можно вычислить  $S$  и найти  $C = 1/(1 + bS)$  (см [1]).

## 3.4 Рассеянное поле кристаллической плоскости

Впрочем, можно считать  $C$  неким параметром, который перенормирует (перопределяет) амплитуду рассеяния:  $b \rightarrow b_c = bC$ , и сразу вычислить рассеянные поля. Для этого нужно подставить  $\psi_n = C \exp(ikr_n)$  в (35) и просуммировать по бесконечному двумерному множеству точек с координатами  $an$ , в которых находятся рассеиватели. Суммирование приводит к результату

$$\psi(r) = \exp(ikr) - i \sum_n \beta_n \exp(ik_{n\parallel}r_{\parallel} + ik_{n\perp}|z|), \quad (36)$$

где  $\beta_n = p/k_{n\perp}$ ,  $p = 2\pi N_2 b_c$ ,  $k_{n\parallel} = k_{\parallel} + \kappa_n$ ,  $\kappa_n = (2\pi/a)n$ ,  $k_{n\perp} = \sqrt{k^2 - k_{n\parallel}^2}$ ,  $N_2 = 1/a^2$  — двумерная плотность атомов на кристаллической плоскости. При  $z < 0$  слагаемое  $k_{n\perp}|z|$  равно  $-k_{n\perp}z$  и соответствует отраженным, т.е. волнам, уходящим налево от рассеивающей плоскости, а при  $z > 0$  имеем  $k_{n\perp}|z| = k_{n\perp}z$ , что отвечает прошедшим, т.е. волнам, уходящим направо от рассеивающей плоскости.

Вектор  $n = 0$  относится к зеркально отраженной и прошедшей, а векторы  $n \neq 0$  — к дифрагированным волнам. Поскольку величина  $\kappa_n$  не ограничена, то число дифрагированных волн бесконечно. Однако, если  $|k_{n\parallel}| > k$ , то  $k_{n\perp}$  оказывается мнимой, и соответствующие дифрагированные волны экспоненциально убывают при удалении от плоскости. На достаточно большом расстоянии ими можно пренебречь, поэтому число дифрагированных волн оказывается конечным. Распространяются в пространстве только те волны, которым соответствуют  $k_{n\perp}^2 > 0$ .

Далее для простоты будем опускать индекс  $s$  у амплитуды  $b_c$ , но будем помнить о перенормировке и возвращаться к ней, когда это будет необходимо.

### 3.5 Дифракция на полубесконечном монокристалле

Введем понятие вектора состояния  $|\Psi\rangle$ , который определяет, какие из плоских волн, с какими  $\kappa$  и амплитудами входят в волновую функцию. Это состояние записывается в виде бесконечномерного вектора-столбца комплексных чисел, как показано в (34). Состояния  $|\Psi\rangle$  образуют линейное векторное пространство, в котором можно определить базис. В качестве базиса возьмем векторы  $|j\rangle$  — бесконечные столбцы, содержащие единицу на строке  $j$  и нули на всех остальных. Разложив состояние  $|\Psi\rangle$  по этому базису, получим  $|\Psi\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle$ . Таким образом, числа  $\alpha_j$  представляют собой координаты вектора  $|\Psi\rangle$  в базисе  $|j\rangle$ .

Теперь волновая функция (36) представляется в виде

$$|\psi(\mathbf{r})\rangle = \Theta(z < 0) \left[ \exp(i\hat{k}\mathbf{r}) + \exp(i\hat{k}, \mathbf{r})\hat{\rho}_s \right] |\Psi_0\rangle + \Theta(z > 0) \exp(i\hat{k}\mathbf{r})\hat{\tau}_s |\Psi_0\rangle, \quad (37)$$

где введены операторы отражения  $\hat{\rho}_s$  и пропускания  $\hat{\tau}_s$  единственной кристаллической плоскостью, а также операторы  $\hat{k}\mathbf{r}$  и  $\hat{k}, \mathbf{r}$ , которые имеют собственные значения  $k_{j\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + k_{j\perp}z$  и  $k_{j\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} - k_{j\perp}z$  соответственно, и собственные векторы  $|j\rangle$ . При этом

$$\exp(i\hat{k}\mathbf{r})|j\rangle = \exp(i k_{j\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + i k_{j\perp}z) |j\rangle, \quad \exp(i\hat{k}, \mathbf{r})|j\rangle = \exp(i k_{j\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} - i k_{j\perp}z) |j\rangle.$$

Базис, используемый для определения векторов состояния, можно использовать также для записи матриц. Пусть дана матрица  $\hat{M}$  с матричными элементами  $M_{ij}$ , которые переводят вектор  $|j\rangle$  в вектор  $|i\rangle$ . Матрицу  $\hat{M}$  удобно представить в виде  $\hat{M} = \sum_{i,j} |i\rangle M_{ij} \langle j|$ , и тогда в силу ортонормированности базиса  $|i\rangle$ , ее матричные элементы равны  $\langle i|\hat{M}|n\rangle = M_{in}$ .

Матричные элементы матриц  $\hat{\rho}_s$  и  $\hat{\tau}_s$  равны соответственно  $\langle j|\hat{\rho}_s|i\rangle = -i\beta_j$ ,  $\langle j|\hat{\tau}_s|i\rangle = \delta_{ji} - i\beta_j$ , где  $\delta_{ji}$  — символ Кронекера, равный единице при  $i = j$  и нулю при  $i \neq j$ . Заметим, что матричный элемент  $\hat{\rho}_s$  не зависит от начального индекса, а матрицу  $\hat{\tau}_s$  можно представить как  $\hat{I} + \hat{\rho}_s$ , где  $\hat{I}$  — единичная матрица.

Рассмотрим полубесконечный одноатомный кристалл с кубической ячейкой, одна из осей которой перпендикулярна входной поверхности. Такой кристалл представляет собой совокупность кристаллических плоскостей, разделенных пустым промежутком ширины  $a$ . Выберем в нем симметричный период из кристаллической плоскости и двух пустых промежутков ширины  $a/2$  по обе стороны от него.

Матрицы амплитуд отражения  $\hat{\rho}$  и пропускания  $\hat{\tau}$  для одного периода связаны с матрицами  $\hat{\rho}_s$ ,  $\hat{\tau}_s$  для одной-единственной кристаллической плоскости очевидными соотношениями  $\hat{\rho} = \hat{E}\hat{\rho}_s\hat{E}$ ,  $\hat{\tau} = \hat{E}\hat{\tau}_s\hat{E} = \hat{E}^2 + \hat{\rho}$ , где введена диагональная матрица  $\hat{E}$  с матричными элементами  $E_{ji} = \langle j|\hat{E}|i\rangle = \delta_{ji}e_j$ ,  $e_j = \exp(ik_{j\perp}a/2)$ , которые описывают распространение волн по пустому промежутку ширины  $a/2$ . С помощью  $\hat{\rho}$ ,  $\hat{\tau}$  можно найти матрицу отражения  $\hat{R}$  от полубесконечного кристалла так же, как это делается в случае одномерного потенциала.

Обозначим состояние падающей волны у первого периода через  $|\Psi_0\rangle$ , тогда состоянием отраженной будет  $\hat{R}|\Psi_0\rangle$ . Обозначим состояние волны, падающей на второй период, через  $\hat{X}|\Psi_0\rangle$ , где  $\hat{X} = \exp(i\hat{q}a)$  — матрица блоховских фаз, которая выражается через матрицу блоховского волнового вектора  $\hat{q}$  внутри кристалла. Матрицы  $\hat{R}$  и  $\hat{X}$  определяются из системы уравнений  $\hat{X} = \hat{\tau} + \hat{\rho}\hat{R}\hat{X}$ ,  $\hat{R} = \hat{\rho} + \hat{\tau}\hat{R}\hat{X}$ . Первое можно разрешить относительно  $\hat{X}$ :  $\hat{X} = (\hat{I} - \hat{\rho}\hat{R})^{-1}\hat{\tau}$ . Подставив в уравнение для  $\hat{R}$ , получим

$$\hat{R} = \hat{\rho} + \hat{\tau}\hat{R}(\hat{I} - \hat{\rho}\hat{R})^{-1}\hat{\tau}. \quad (38)$$

Это уравнение возможно разрешить, потому, что матрица  $\hat{\rho}$  является диадной, т.е. ее матричные элементы  $\rho_{ji} = \langle j|\hat{\rho}|i\rangle = a_j b_i$ ,  $a_j = -ie_j \beta_j$ ,  $b_i = e_i$  представляются в виде прямого произведения координат  $p_i$ ,  $q_j$  двух векторов  $|p\rangle$  и  $|q\rangle$ .

#### 3.5.1 Собственные векторы и собственные значения оператора $\hat{X}$

Для того чтобы понять, какие волны распространяются внутри кристалла, нужно найти собственные значения и собственные вектора матрицы  $\hat{X}$ . Допустим, мы найдем и то и другое. Какой мы будем обладать информацией о волнах внутри среды и о волнах, выходящих из кристалла?

Собственными значениями оператора  $\hat{X}$  являются комплексные числа  $\exp(iqa)$  с различными  $q$ . Собственный вектор, соответствующий числу  $q$ , обозначим  $|q\rangle$ . Его можно нормировать и разложить по базису  $|j\rangle$ :  $|q\rangle = \sum_j Q_j(q)|j\rangle$ , где  $Q_j(q)$  — координаты вектора  $|q\rangle$  в базисе  $|j\rangle$ , однако нормированные собственные векторы  $|q\rangle$  и сами могут служить базисом. Падающую волну  $\exp(i\hat{k}\mathbf{r})|\Psi_0\rangle$  в точке  $z = 0$  начала первого периода можно разложить по базису  $|q\rangle$ :

$$\exp(i\hat{k}\mathbf{r}_{\parallel})|\Psi_0\rangle = \exp(i\hat{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}) \sum_q \psi_q |q\rangle, \quad (39)$$

где  $\psi_q$  — координаты вектора  $|\Psi_0\rangle$  в базисе  $|q\rangle$ . При этом волновое поле  $|\psi_{\text{ins}}(\mathbf{r})\rangle$  внутри кристалла, если можно пренебречь отражением, оказывается равным

$$|\psi_{\text{ins}}(z)\rangle = e^{i\hat{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}} \sum_q \psi_q e^{iqz} |q\rangle = \sum_j e^{i\hat{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}} \left( \sum_q Q_j(q) \psi_q e^{iqz} \right) |j\rangle. \quad (40)$$

Если кристалл имеет толщину  $D$ , то поле нейтронов, вышедших из кристалла, будет

$$|\Psi_t(\mathbf{r})\rangle = \sum_j e^{i\hat{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + ik_{j\perp}(z-D)} \left( \sum_q Q_j(q) \psi_q e^{iqD} \right) |j\rangle = \sum_j \psi_{tj} e^{i\hat{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + ik_{tj}(z-D)} |j\rangle, \quad (41)$$

где координаты  $\psi_{tj}$  определяют интенсивность  $k_{j\perp}|\psi_{tj}|^2$  нейтронов, вышедших из кристалла с волновым вектором  $\mathbf{k}_j = (\mathbf{k}_{\parallel} + \kappa_{j\parallel}, k_{j\perp})$ ,  $k_{j\perp} = \sqrt{k^2 - (\mathbf{k}_{\parallel} + \kappa_{j\parallel})^2}$ . Согласно (41), амплитуды  $\psi_{tj}$  равны  $\psi_{tj} = \sum_q Q_j(q) \psi_q \exp(iqD)$ . Как раз для их вычисления нам и нужны и собственные числа  $q$ , и собственные векторы матрицы  $\hat{X}$ .

Далее получены собственные векторы и собственные значения оператора  $\hat{X}$  для случая когда нет дифракции, и когда имеет место дифракция Лауэ, а дифракцией Брэгга можно пренебречь. В первом случае мы получаем обычный закон преломления, а во втором — собственные вектора матрицы  $\hat{X}$  представляют собой суперпозицию состояний, из которых, при симметричном выполнении условия Лауэ, одно — имеет максимум, а второе — ноль на узлах решетки.

Затем находится матрица отражения в случае дифракции Брэгга, после чего определяются собственные вектора и собственные числа матрицы  $\hat{X}$  в случае дифракции Брэгга. Видно, что при дифракции Брэгга волновая функция экспоненциально затухает внутри среды. Рассмотрено зеркальное и незеркальное брэгговские отражения.

### 3.5.2 Дифракция на кристалле конечной толщины

Вычислив  $\hat{X}$  и  $\hat{R}$ , переходим к исследованию дифракции на кристалле содержащем  $N$  кристаллических плоскостей. Для этого выделяем в полубесконечном кристалле первые  $N$  плоскостей и обозначим отражение от них  $\hat{R}_N$  а пропускание  $\hat{T}_N$ . Вектор амплитуд волновой функции, падающей на  $N + 1$ -й период, равен  $\hat{X}_N|\Psi_0\rangle$ , где  $\hat{X}_N = \hat{X}^N$  — блочовская матрица фаз. Теперь система уравнений для полубесконечного кристалла имеет вид  $\hat{X}_N = \hat{T}_N + \hat{R}_N \hat{R} \hat{X}_N$ ,  $\hat{R} = \hat{R}_N + \hat{T}_N \hat{R} \hat{X}_N$ , где  $\hat{R}$  и  $\hat{X}$  уже известны. Отсюда находятся отражение и пропускание  $N$  кристаллических плоскостей  $\hat{T}_N = (\hat{I} - \hat{R}^2) \hat{X}_N [\hat{I} - \hat{R} \hat{X}_N \hat{R} \hat{X}_N]^{-1}$ ,  $\hat{R}_N = [\hat{R} - \hat{X}_N \hat{R} \hat{X}_N] [\hat{I} - \hat{R} \hat{X}_N \hat{R} \hat{X}_N]^{-1}$ .

При зеркальной дифракции Брэгга имеем фактически скалярный одномерный результат, поскольку самым существенным является единственный матричный элемент  $(R_N)_{00} = R_{00}[1 - \exp(2iqD)]/[1 - R_{00}^2 \exp(2iqD)] =$

$$= \frac{u \operatorname{sh}(q''D)}{(k_{\perp}^2 - k_B^2 - u) \operatorname{sh}(q''D) + i\sqrt{(k_{\perp}^2 - k_B^2)(k_B^2 - k_{\perp}^2 + 2u)} \operatorname{ch}(q''D)}, \quad (42)$$

где  $q'' = \sqrt{(k_{\perp}^2 - k_B^2)(k_B^2 - k_{\perp}^2 + 2u)}/2k_{\perp}$  и  $D = Na$ . Обозначив  $y = (k_B^2 - k_{\perp}^2 + u)/u$ ,  $A = uD/2k_{\perp}$ , запишем вероятность отражения  $W = |(R_N)_{00}|^2$  в области полного отражения  $y^2 < 1$  в известном виде

$$W(y) = \frac{\operatorname{sh}^2(A\sqrt{1-y^2})}{1-y^2 + \operatorname{sh}^2(A\sqrt{1-y^2})} = \frac{1}{y^2 + (1-y^2) \operatorname{cth}^2(A\sqrt{1-y^2})}. \quad (43)$$

Далее рассматривается угловая ширина, брэгговская дифракция от мозаичного кристалла и вводится вторичный коэффициент экстинкции.

При дифракции Лауэ нейтроны проходят сквозь кристалл. Это значит, что отражением можно пренебречь, т.е. можно положить  $\hat{R} = \hat{R}_N = 0$ . Пропускание кристалла в этом случае целиком определяется  $\hat{X}_N$ :  $\hat{T}_N = \hat{X}_N$ .

Волновая функция прошедших нейтронов приводится к сумме двух волн

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} e^{i\mathbf{k}_{0\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + i\mathbf{k}_{0\perp}(z-D)} (e^{iq_1 D} + e^{iq_2 D}) + \frac{1}{2} e^{i\mathbf{k}_{1\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + i\mathbf{k}_{1\perp}(z-D)} (e^{iq_1 D} - e^{iq_2 D}). \quad (44)$$

Одна из них, с волновым вектором  $\mathbf{k}_0$ , распространяется в направлении падающей (будем называть ее прямой), а другая, с  $\mathbf{k}_1$ , является дифрагированной. Интенсивность прямой волны равна  $I_1 = \cos^2(\delta q D/2)$ , а интенсивность дифрагированной —  $I_2 = \sin^2(\delta q D/2)$ , где  $\delta q = q_1 - q_2$ . При изменении  $D$  или  $k_0$  полная интенсивность прошедших нейтронов осциллирует между двумя направлениями маятниковобразно. Это явление получило немецкое название Pendellösung, т.е. маятниковое решение.

При наличии поглощения на атомах кристалла потенциал  $u_0$  содержит мнимую часть, поэтому  $q_2$  тоже содержит мнимую часть, а величина  $\exp(iq_2 D)$  экспоненциально уменьшается с ростом  $D$ . В этом случае при достаточно больших толщинах в волновой функции (44) можно пренебречь  $\exp(iq_2 D)$ , и осцилляции с ростом  $D$  прекращаются.

Поскольку  $q_1$  не содержит потенциала, то, несмотря на поглощение, половина интенсивности проходит через кристалл без затухания. Способность волн проходить через поглощающий кристалл при дифракции Лауэ без ослабления называется аномальным пропусканием. В рентгеновской оптике это явление носит название эффекта Бормана, а в нейтронной — эффекта Кагана-Афанасьева.

Одновременное выполнение условия Брэгга и Лауэ. Брэгговская дифракция характеризуется полным отражением и условием  $k_{n\perp} = k_B = \pi n/a$ , т.е.  $e_n^4 = 1$ . Дифракция Лауэ возникает тогда, когда для некоторых векторов обратной решетки  $\mathbf{k}_m$  и  $\mathbf{k}_n$  имеет место приближенное равенство  $k_{m\perp} \approx k_{n\perp}$ , или  $e_m^2 \approx e_n^2$ . Вполне можно представить себе случай, когда  $e_m^2 = e_n^2$  и одновременно  $e_m^4 = 1$ . При этом должна наблюдаться дифракция Брэгга, т.е. отражение от кристалла, и дифракция Лауэ, т.е. пропускание падающей волны и расщепление ее на две части. Возникает вопрос: что же будет на самом деле? Будут ли нейтроны отражаться по Брэггу или проходить через кристалл по Лауэ?

Ответ достаточно прост. При дифракции Лауэ внутри кристалла возникают две пары волн. Одна пара интерферирует так, что на узлах решетки волны гасят друг друга, а в другой паре они друг друга усиливают. Первая пара проходит через кристалл, не замечая его, и потому даже при выполнении условия Брэгга она пройдет через него и создаст прямую и дифрагированную волны после кристалла. Вторая же пара волн при выполнении условия Брэгга будет отражаться от кристалла, причем прямая волна выйдет в качестве зеркально отраженной, а дифрагированная выйдет незеркально отраженной. В случае симметричных условий незеркально отраженная волна будет распространяться точно назад по отношению к первичной падающей. Интенсивности всех волн равны четверти интенсивности падающей, а у прошедших волн не будет маятникового перераспределения интенсивности с ростом толщины кристалла [30].

### 3.6 Унитарность, условие детального равновесия, оптический потенциал

В этом разделе рассматриваются вопросы унитарности и оптическая теорема, которые позволяют контролировать перенормировку амплитуды рассеяния при переходе от единичного рассеивателя к кристаллической плоскости. Кроме того, исследуются условия детального равновесия, выполнение которых напрямую связано с термодинамикой. Нарушение этих условий приводит к уменьшению энтропии при рассеянии, что с физической точки зрения недопустимо для пассивных систем. Затем показывается, как при низких энергиях с помощью вышеуказанного метода дифракции вычисляется оптический потенциал взаимодействия нейтрона с кристаллической средой с любой заданной степенью точности.

### 3.7 Заключение к главе 3

Принцип расслоения, сформулированный в первой главе для скалярных частиц и обобщенный во второй для спинорных, в этой главе обобщается для частиц произвольного спина, что позволяет применить его к трехмерным периодическим средам, по новому описать процессы динамической дифракции и предсказать явления, возникающие при одновременном выполнении условий Брэгга и Лауэ. С его помощью удастся единым алгоритмом

находить положения и форму дифракционных пиков для рассеяния нейтронов от идеальных кристаллов со сколь угодно сложной элементарной ячейкой и с любым количеством дифрагируемых волн, а также с любой контролируемой степенью точности вычислять оптический потенциал взаимодействия нейтронов с конденсированными средами.

## 4 Глава 4. Неупорядоченные среды, волновое и корпускулярное рассеяние в них

В предыдущих главах метод расслоения применялся только к волновым процессам и в тех случаях, когда рассеяние нейтрона сопровождается его переходами между дискретными состояниями: двумя в случае спиновых частиц и многими при дифракции на идеальных кристаллах. При исследовании неупорядоченных сред, которому посвящена данная глава, метод расслоения будет применен к процессам, которые сопровождаются переходами с непрерывным изменением параметров состояния. Это позволит использовать его не только для волновых, но и корпускулярных явлений, и по повому рассмотреть подход к альбедному отражению нейтронов от конденсированных сред, отличному от диффузионного.

Исследование случайных сред и взаимодействия излучения с ними всегда содержит элементы феноменологии. Это связано с необходимостью введения корреляционных функций вида, определяемого исходя из заданных условий, но все же достаточно произвольно. Введение корреляционных функций эквивалентно введению феноменологических параметров, физический смысл которых достаточно ясен, но величина может быть найдена только из эксперимента.

### 4.1 Волновые процессы в трехмерных неупорядоченных средах

Рассмотрим отражение плоской волны падающего нейтрона от вещества с неупорядоченным расположением атомов. Можно заранее ожидать, что помимо зеркального будет иметь место также и незеркальное отражение. Зеркальная волна определяется усредненными характеристиками среды, а незеркальные возникают вследствие флуктуаций, присущих любой случайной среде. Все это следует из строгой теории многократного рассеяния волн.

Нас будут интересовать в основном вопросы рефлектометрии, поэтому будем вещество считать полубесконечным пространством  $z > 0$ , заполненным хаотически расположенными неподвижными, т.е. закрепленными в пространстве, атомами. Для характеристики хаотичности потребуется ввести корреляционную функцию положений атомов.

### 4.2 Уравнения теории многократного рассеяния волн

Воспользуемся уравнениями (35) теории многократного рассеяния волн [65, 66] (МРВ). Если рассеиватели расположены неупорядоченно, и (или) амплитуды  $b_j$  — случайные величины, то и волновая функция  $\Psi(\mathbf{r})$ , и коэффициенты  $\psi(\mathbf{r}_n)$  — тоже случайные величины [67], и мы можем попытаться найти их средние,  $\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \langle \langle \Psi(\mathbf{r}) \rangle \rangle$ ,  $\phi(\mathbf{r}_n) = \langle \langle \psi(\mathbf{r}_n) \rangle \rangle$ , и корреляции  $\Xi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \langle \Psi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}') \rangle \rangle - \langle \langle \Psi^*(\mathbf{r}) \rangle \rangle \langle \langle \Psi(\mathbf{r}') \rangle \rangle$ , где двойные угловые скобки означают усреднение по элементам (атомам и изотопам, т.е. по амплитудам  $b_j$ ), и по координатам атомов.

Примем, что  $b_j = b + \delta b_j$ ,  $\psi(\mathbf{r}_j) = \phi(\mathbf{r}_j) + \delta\psi(\mathbf{r}_j)$ , где  $b = \langle b_j \rangle$ , а  $\delta b$  и  $\delta\psi$  — флуктуации соответствующих величин. Будем считать, что  $\delta b_j$  не коррелируют между собой и с  $\delta\psi(\mathbf{r}_j)$ . Последнее объясняется тем, что коэффициент  $\psi(\mathbf{r}_j)$  — это сумма волн, идущих от всех

других рассеивателей, кроме  $j$ -го, поэтому с хорошим приближением можно считать, что  $\delta\psi(\mathbf{r}_j)$  от  $\delta b_j$  не зависит.

Будем считать, что среда однородна и потому распределение рассеивателей можно описывать постоянной плотностью  $N_0$ . Таким образом, среднюю (или когерентную) волновую функцию  $\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  можно представить в виде

$$\langle \langle \Psi(\mathbf{r}) \rangle \rangle \equiv \Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - N_0 b \int \phi(\mathbf{r}') \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r', \quad (45)$$

где функция  $\phi(\mathbf{r})$  удовлетворяет уравнению

$$\langle \langle \psi(\mathbf{r}) \rangle \rangle \equiv \phi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - N_0 b \int w(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3r' \phi(\mathbf{r}') \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (46)$$

В последнее уравнение введена корреляционная функция  $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , характеризующая вероятность найти второй рассеиватель в точке  $\mathbf{r}'$ , когда первый находится в точке  $\mathbf{r}$ . Для того чтобы решить уравнения (46), нужно задать эту функцию. Функция  $w(\mathbf{r})$  должна быть положительной, поскольку характеризует вероятность, во-вторых, она должна стремиться к нулю при  $\mathbf{r} \rightarrow 0$ , поскольку точка  $\mathbf{r} = 0$  уже занята, к единице при  $\mathbf{r} \rightarrow \infty$ , поскольку удаленные частицы не коррелируют друг с другом, и осциллировать с затухающей амплитудой около значения  $w = 1$ , поскольку в системе всегда есть некоторое характерное расстояние между атомами. Его можно записать в виде  $w(\mathbf{r}) = 1 - \gamma(\mathbf{r})$ , и должно выполняться условие  $\int w(\mathbf{r}) N_0 d^3r = N - 1$ , где  $N$  — полное число атомов в системе, откуда следует, что  $\int \gamma(\mathbf{r}) N_0 d^3r = 1$ . Кроме того,  $\gamma(\mathbf{r})$  должна равняться единице при  $\mathbf{r} = 0$ , стремиться к нулю при  $\mathbf{r} \rightarrow \infty$  и осциллировать с постепенно уменьшающейся амплитудой вокруг нуля. В дальнейшем нам понадобится только вышеуказанные свойства и существование положительного среднего квадрата радиуса  $\langle r^2 \rangle = N_0 \int \gamma(\mathbf{r}) r^2 d^3r > 0$ .

### 4.3 Решения для когерентных величин

Естественно предположить, что внутри однородной среды вдали от границы раздела усредненная, т.е. когерентная, волновая функция имеет вид  $\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = A \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r})$ , где  $A$  — постоянная, не зависящая от  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{k}' = (\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\perp})$ . Естественно также считать, что  $\phi(\mathbf{r}) = C\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = CA \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r})$ .

Для определения  $A$  и  $\mathbf{k}'_{\perp}$  подставим указанные  $\phi$  и  $\Phi$  в выражение (45), предполагая, что точка  $\mathbf{r}$  находится внутри среды. В результате получим

$$A \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - N_0 b C A \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r}) \int \exp(i\mathbf{k}'(\mathbf{r}' - \mathbf{r})) \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r'. \quad (47)$$

Воспользовавшись двумерным Фурье-представлением сферической функции, проинтегрировав по  $d^3r'$  и приравняв коэффициенты при экспонентах с одинаковыми показателями, находим, что отражение и преломление на границе происходит так, как если бы среда описывалась оптическим потенциалом  $4\pi N_0 b A C$ , где постоянная  $C$  перенормирует амплитуду, меняется с энергией и видоизменяет условие унитарности в зависимости от поглощения, некогерентного рассеяния и неупорядоченного расположения атомов.

### 4.4 Рассеяние

Неупорядоченность в расположении атомов приводит к рассеянию внутри среды и к незеркальному отражению даже при чисто когерентном рассеянии отдельных атомов.

Рассеянные нейтроны описываются плоскими волнами, уходящими от границы раздела в зеркальных направлениях. Они содержатся в случайной части волновой функции  $\delta\Psi = \Psi - \langle\langle\Psi\rangle\rangle$ , и, чтобы их найти, нужно исследовать корреляционную функцию  $\Xi(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle\langle\Psi(\mathbf{r})\Psi^*(\mathbf{r}')\rangle\rangle - \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})\Psi^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}')$ . Для последовательного описания рассеяния требуется использовать модифицированные сферические волны внутри среды. Поиск модифицированных функций приводит к методу искаженных волн. В этом разделе получены корреляционные функции зеркально отраженных волн в зависимости от корреляционных функций распределения атомов внутри среды.

#### 4.5 Альbedo для нейтронов

Метод расслоения может быть применен и к корпускулярному излучению. В качестве примера рассмотрим альбедное отражение нейтронов от веществ [36], которое наблюдается при исследовании радиационных эффектов и в реакторостроении.

Альbedo — это полный коэффициент отражения  $R_L$  под всевозможными углами от среды заданной толщины  $L$ . Чтобы его рассчитать, необходимо задать дифференциальное сечение упругого рассеяния  $\sigma'(\Omega \rightarrow \Omega')$  нейтронов на одном рассеивателе внутри среды.

Здесь для вычисления альbedo сначала находится рассеяние на тонком слое, а затем альbedo  $R_\infty$  от бесконечно толстой среды и аналог блоховского волнового вектора  $q$ , который характеризует глубину затухания  $L_0 = 1/q$  плотности нейтронов вглубь среды, которая обычно называется длиной диффузии. Далее с помощью  $R_\infty$  и  $q$  находится альbedo  $R_L$  и пропускание  $T_L$  слоя конечной толщины  $L$ .

Помимо указанных характеристик желательно также найти и угловое распределение отраженных нейтронов. Эту задачу можно решить для случая изотропного рассеяния. При этом получается результат, тождественный полученному ранее методом инвариантного погружения Амбарцумяном и Чапдрассекаром при исследовании излучения звезд [68].

#### 4.6 Основные понятия

Для применения метода расслоения вводятся следующие понятия: 1) Элементарные ортонормированные вектора состояния  $|\Omega\rangle$ , описывающие нейтроны, летящие в направлении  $\Omega$ ; 2) Общий вектор состояния  $|\psi\rangle = \int d\Omega \psi(\Omega)|\Omega\rangle$ ; 3) Изотропное состояние  $|\psi\rangle = \int_{n\Omega>0} d\Omega [\cos\theta/\pi]|\Omega\rangle$ ; 4) Нормировочный вектор  $|e\rangle = \int_{4\pi} d\Omega |\Omega\rangle$ ; 5) Оператор  $\hat{F} = \int \int |\Omega\rangle F(\Omega \leftarrow \Omega') d\Omega d\Omega' \langle\Omega'|$ , где  $F(\Omega \leftarrow \Omega')$  — числовая функция, характеризующая вероятность перехода из направления  $\Omega'$  в направление  $\Omega$ .

#### 4.7 Альbedo бесконечно толстой стенки

##### 4.7.1 Уравнение для отражения

Отделим мысленно от бесконечно толстой стенки слой малой толщины  $\zeta$  и введем оператор вероятности отражения от этого слоя  $\hat{\rho}_b = \zeta \hat{\Sigma}_b$ , где

$$\hat{\Sigma}_b = \int_{n\Omega<0} \int_{n\Omega'>0} |\Omega\rangle d\Omega \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{\cos\theta'} \langle\Omega'| \equiv \int_{n\Omega>0} \int_{n\Omega'<0} |\Omega\rangle d\Omega \Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') \frac{d\Omega'}{|\cos\theta'|} \langle\Omega'|. \quad (48)$$

Индекс  $b$  обозначает рассеяние от слоя назад, в то же полупространство, в котором находится падающий нейтрон. Первое равенство относится к отражению от слоя слева, а второе — к отражению от него справа. Множитель  $1/\cos\theta'$ , показывает, что при малых углах

вероятность рассеяния от слоя возрастает, поскольку возрастает количество атомов на пути нейтрона, а  $\Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega')$  обозначает дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния  $\Sigma_s(\Omega \leftarrow \Omega') = N d\sigma_s(\Omega' \rightarrow \Omega)/d\Omega$ , в которое входит плотность рассеивателей  $N$  и дифференциальное сечение  $d\sigma(\Omega \leftarrow \Omega')/d\Omega$  рассеяния из направления  $\Omega'$  в направлении  $\Omega$ .

Введем оператор вероятности пропускания слоем  $\hat{\tau} = \hat{I} - \hat{s} + \hat{\rho}_f$ , где  $\hat{I} = \int |\Omega\rangle d\Omega \langle\Omega|$  — единичный оператор,  $\hat{s} = \zeta \Sigma_t \hat{S}$ ,  $\hat{S} = \int |\Omega\rangle [d\Omega/|\cos\theta|] \langle\Omega|$ ,  $\Sigma_t = N\sigma_t = \Sigma_a + \Sigma_s$  — макроскопическое сечение поглощения  $\Sigma_a$  и полного рассеяния  $\Sigma_s$ , а  $\hat{\rho}_f = \zeta \hat{\Sigma}_f$ , причем индекс  $f$  означает, что после рассеяния нейтрон оказывается по другую сторону слоя.

Введем оператор отражения  $\hat{R}$  от бесконечно толстой стенки и оператор  $\hat{X}$ , преобразующий состояние  $|\psi\rangle$  нейтронов, падающих на входную поверхность, в состояние нейтронов  $\hat{X}|\psi\rangle$ , падающих на остальную среду. Они удовлетворяют системе уравнений  $\hat{X} = \hat{\tau} + \hat{\rho}_b \hat{R} \hat{X}$ ,  $\hat{R} = \hat{\rho}_b + \hat{\tau} \hat{R} \hat{X}$ . Исключив из них  $\hat{X}$ , получим уравнение для  $\hat{R}$ , которое после линеаризации по малой толщине отщепленного слоя  $\zeta$  приводится к виду

$$\hat{R} \hat{\Sigma}_b \hat{R} + (\hat{\Sigma}_f - \Sigma_t \hat{S}) \hat{R} + \hat{R} (\hat{\Sigma}_f - \Sigma_t \hat{S}) + \hat{\Sigma}_b = 0. \quad (49)$$

Предположим, что под каким бы углом нейтрон ни падал на поверхность, отраженные нейтроны распределены изотропно, т.е., что  $\hat{R} = R_\infty |\psi\rangle \langle e|$ . Умножив уравнение (49) справа на  $|\psi\rangle$  и слева на  $\langle e|$ , получим уравнение для  $R_\infty$ , которое имеет решение

$$R_\infty = \frac{\sqrt{\Sigma_a + \Sigma_{tr}} - \sqrt{\Sigma_a}}{\sqrt{\Sigma_a + \Sigma_{tr}} + \sqrt{\Sigma_a}}. \quad (50)$$

Здесь  $\Sigma_{tr} = 2\Sigma_b$ ,  $\Sigma_a = \Sigma_t - \Sigma_f - \Sigma_b$ . Отсюда следует естественный результат: при  $\Sigma_a = 0$  альbedo бесконечно толстой стенки равно единице, а при  $\Sigma_{tr}/\Sigma_a \rightarrow 0$  альbedo стремится к нулю.

##### 4.7.2 Убывание плотности нейтронов внутри вещества

Для того чтобы найти альbedo стенки конечной толщины, необходимо найти убывание нейтронов при удалении от границы раздела. Это убывание описывается оператором  $\hat{X}$ , выражение для которого представляется следующим образом:

$$\hat{X} = (\hat{I} - \hat{\rho}_b \hat{R})^{-1} \hat{\tau} \approx \hat{I} + \hat{\rho}_b \hat{R} - \hat{s} + \hat{\rho}_f. \quad (51)$$

Оператор  $\hat{X}$  преобразует состояние  $|\psi\rangle$  у входной поверхности в состояние  $\hat{X}|\psi\rangle$  на глубине  $\zeta$  внутри вещества. Норма этого состояния равна  $\langle e|\hat{X}|\psi\rangle = 1 - 2\zeta[\Sigma_a + \Sigma_b(1 - R_\infty)] \approx \exp(-q\zeta)$ . Это значит, что на расстоянии  $z$  от поверхности раздела вглубь вещества плотность нейтронов падает пропорционально  $X(z) = \exp(-qz) = \exp(-z/L_0)$  с показателем экспоненты  $q = 2\sqrt{\Sigma_a(\Sigma_a + \Sigma_{tr})}$ , или

$$L_0 = 1/2\sqrt{\Sigma_a(\Sigma_a + \Sigma_{tr})}, \quad (52)$$

и оператор  $\hat{X}$  представляется как

$$\hat{X}(z) = \exp(-z/L_0) |\psi\rangle \langle e|. \quad (53)$$



#### 4.8 Альbedo стенки конечной толщины $L$

Теперь можно найти отражение  $\hat{R}_L$  от стенки конечной толщины  $L$ . Для этого запишем систему уравнений для полубесконечной стенки, отделив от нее слой конечной толщины  $L$ :  $\hat{X}_L = \hat{T}_L + \hat{R}_L \hat{R} \hat{X}_L$ ,  $\hat{R} = \hat{R}_L + \hat{T}_L \hat{R} \hat{X}_L$ . Здесь  $\hat{X}_L = \hat{X}(L)$ , а  $\hat{T}_L$  — оператор пропускания стенкой толщины  $L$ .

Исключив  $\hat{T}_L$  из второго уравнения, получим уравнение для  $\hat{R}$ , из которого следует  $\hat{R}_L = R_L |\psi\rangle \langle e|$ , где

$$R_L \equiv \langle e | \hat{R}_L | \psi \rangle = R_\infty \frac{1 - \exp(-2L/L_0)}{1 - R_\infty^2 \exp(-2L/L_0)}. \quad (54)$$

В отсутствие поглощения имеем  $R_\infty = 1$ ,  $q = 0$ , и правая часть выражения (54) вырождается в неопределенное отношение  $0/0$ . Раскрыть неопределенность можно по правилу Лопитала, продифференцировав числитель и знаменатель дроби в (54) по  $\sqrt{\Sigma_a}$  при  $\Sigma_a = 0$ .

##### 4.8.1 Сравнение с диффузионными формулами альbedo

Выражения (50) и (54) отличаются от формул альbedo, получаемых в диффузионном приближении. При некоторых значениях сечения захвата и малых толщинах стенки диффузионная теория приводит к бессмысленным отрицательным результатам, тогда как изложенная здесь теория применима при любых значениях параметров.

#### 4.9 Альbedo ультрадисперсного вещества

Здесь рассмотрено альbedo ультрадисперсного порошка, т. е. вещества, состоящего из мелких крупинок с радиусом в несколько нанометров. Ультрадисперсность порождает дополнительное рассеяние, т. е. эффективно увеличивает  $\Sigma_{tr}$  и потому увеличивает альbedo. Вещество, состоящее из отдельных крупинок, неоднородно. Неоднородностью является сама крупинка. Поэтому рассеяние происходит не только на отдельных атомах, но и на неоднородности, т. е. на крупинке в целом. Важно оценить вклад этого дополнительного рассеяния в альbedo. Если этот вклад велик, то при конструировании реакторов можно сэкономить на размерах активной зоны и на массе топлива [69, 70], используя их в ультрадисперсном виде. Эта экономия происходит от того, что рождающийся в зоне нейтрон с большей вероятностью может вернуться в зону и породить в результате цепной реакции большее число нейтронов. Проведенный здесь анализ показывает, что ультрадисперсность может помочь только в случае аномально низких энергий.

#### 4.10 Угловое распределение отраженных нейтронов при изотропном рассеянии

Выше отражение предполагалось изотропным. На самом деле оно может быть неизотропным. В диссертации рассматривается угловое распределение отраженных нейтронов, когда каждый акт рассеяния внутри среды изотропен. Исследование показывает, что с помощью метода расслоения получаются интегральные уравнения идентичные тем, которые были получены Чандрасекаром [68, глава 9.3] для излучения звезд. При этом анизотропия никак не сказывается на полной величине альbedo. Оно остается точно таким же, как было получено в предположении изотропного распределения отраженных нейтронов.

#### 4.11 Заключение к главе 4

Метод расслоения, который в предыдущих главах использовался для рассеяния в дискретных конечных состояниях, в этой главе обобщен на непрерывный спектр конечных состояний, что позволило применить его к рассеянию нейтронов в неупорядоченных средах и к классической задаче альbedo, которая раньше решалась только численными методами Монте-Карло или в рамках диффузионной модели. Полученные результаты имеют преимущество по сравнению с диффузионными, поскольку оказываются справедливыми в значительно более широкой области значений физических параметров. Это важно в таких областях физики и техники, как реакторостроение и радиационная защита.

##### Основные результаты работы

1. Разработан аналитический метод для расчета отражения нейтронов от периодических зеркал. Получены замкнутые выражения (5), (5) для амплитуды отражения от произвольного полубесконечного периодического потенциала и блоховской фазы внутри него, когда отдельно взятый период характеризуется амплитудами отражения  $r$  и пропускания  $t$ . Получены также замкнутые выражения (9) для амплитуд отражения и пропускания периодического потенциала с произвольным числом периодов.
2. Разработан алгоритм для расчета суперзеркал, согласно которому слои должны папыляться периодическим цепочками с периодами и числом периодов выбранными так, чтобы минимизировать число слоев и сделать периоды соразмерными межатомному расстоянию.
3. Создана теория капалирования нейтронов в резонансных слоях. Найдена волновая функция внутри слоя, ее затухание вдоль него и рассчитан выход нейтронов из резонансного слоя.
4. Предсказано расщепление нейтронных пучков при когерентном отражении от магнитных зеркал. Показано, что при отражении от магнитного зеркала с намагнитченностью искривленной внешнему полю неполяризованный пучок расщепляется на три части. Найдено угловое расхождение компонент и их интенсивности.
5. Найдено полное решение задачи об отражении нейтронов от зеркал с геликоидальной намагнитченностью. Показано, что для одной из поляризаций падающего пучка имеет место почти полное резонансное отражение с переворотом спина (см. рис. 11). Дано физическое объяснение этому явлению.
6. Найдено полное аналитическое решение задачи взаимодействия нейтронов с радиочастотными полями в спин-флиппере. Получено замкнутое матричное выражение для амплитуд отражения и пропускания спин-флиппера для двух независимых компонент спина падающего нейтрона. Матричные элементы этих матриц определяют и вероятности рассеяния нейтрона спин-флиппером с переворотом и без переворота спина, и характеризуют изменение энергии при рассеянии.
7. Разработана теория длинноволновой нейтронной голографии без опорного пучка. Она основана на том, что после пропускания через радиочастотный спин-флиппер нейтрон оказывается в суперпозиции двух состояний с разной энергией. Разностная энергия придает нейтронному пучку когерентные волновые свойства с длиной волны значительно превышающей волну де Бройля.

8. Метод расслоения обобщен на трехмерные периодические среды для описания динамической дифракции нейтронов в идеальных кристаллах. Он приводит к результатам согласующимся с результатами стандартного подхода, но позволяет по-новому взглянуть на дифракционные процессы и разработать единый алгоритм для расчета интенсивностей дифракции при учете любого числа дифрагируемых волн и при сколь угодно сложной элементарной ячейке.
9. Предсказан и рассчитан эффект дифракции нейтронов при одновременном выполнении условий Брэгга и Лауэ. Показано, что в этом случае брэгговское отражение играет роль поглощения в эффекте Бормана или Каган-Афанасьева.
10. Метод расслоения обобщен для расчета рассеяния нейтронов в неупорядоченных средах. Найдены новые выражения для альbedo от бесконечно толстой стенки (50) и глубины затухания (52) нейтронного потока внутри рассеивающей среды, а также альbedo (54) для стенки конечной толщины. Указанные формулы имеют преимущество перед уже известными, полученными из диффузионной теории, поскольку применимы без ограничений в полном диапазоне изменения параметров.

## Список литературы

- [1] *Игнатович В.К.* Физика ультрахолодных нейтронов.— М.: Наука, 1986; *Ignatovich V.K.* The Physics of Ultracold Neutrons (UCN).— Oxford: Clarendon Press, 1990.
- [2] *Игнатович В.К.* Нейтронная оптика.— М.: Физматлит, 2006.
- [3] *Корнеев Д.А., Игнатович В.К., Ярадайкин С.П., Боднарчук В.* Отражение нейтронов от потенциалов с размытыми границами.— ОИЯИ, Р4-2002.— Дубна, 2002; *Specular reflection of neutrons from potentials with smooth boundaries // Physica B: Condensed Matter.*— 2005.— V. 364, N. 1-4.— P. 99-110.
- [4] *Игнатович В.К.* Принцип инвариантности или расслоения в нейтронной оптике и фундаментальные свойства нейтрона // *Ядерная физика.* — 1999.— Т. 62, №5.— С. 792-806 (*Ignatovich V.K.* Principle of invariance, or splitting, in neutron optics and basic properties of the neutron // *Physics of Atomic Nuclei.*— 1999.— V. 62, N. 5.— P. 738-753).
- [5] *Игнатович В.К.* Рассеяние волн и частиц на одномерных периодических потенциалах.— ОИЯИ, Р4-10778.— Дубна, 1977.
- [6] *Игнатович В.К.* Этюд об одномерном периодическом потенциале // *УФН.*— 1986.— Т. 150.— С. 146-158 (*Ignatovich V.K.* // *Sov. Phys. Usp.*— 1986.— V. 29(9).— P. 880-887).
- [7] *Ignatovich V.K.* The remarkable capabilities of recursive relations // *Am. J. Phys.*— 1989.— V. 57, N. 10.— P. 873-878.
- [8] *Ignatovich V.K.* An Algebraic Approach to the Propagation of Waves and Particles in Layered Media // *Physica B.*— 1991.— V. 175, N. 1-3.— P. 33-38.
- [9] *Ignatovich V.K., Protopopescu D., Utsuro M.* Darwin table width for forbidden reflections // *Phys. Rev. Lett.*— 1996.— V. 77, N. 20.— P. 4202.

- [10] *Ignatovich V.K., Utsuro M.* Optical Potential and Dispersion Law for Long-Wavelength Neutrons.//*Phys. Rev. B.* - 1997.- v.55, N.22. - p.14774-14783.
- [11] *Ignatovich V.K., Ignatovitch F.V.* Multilayered Systems with Forbidden Reflections // *Proc. of the Int. Conf. «Thin films deposition of oxide multilayers. Industrial-scale processing».* Vilnius, Lithuania, September 28-29, 2000.— Vilnius University Press, 2000.— P. 103-107.
- [12] *Carron I., Ignatovich V.* Algorithm for preparation of multilayer systems with high critical angle of total reflection // *Phys. Rev. A.*— 2003.— V. 67.— P. 043610.
- [13] *Ignatovich V.K., Ignatovitch F.V., Andersen D.R.* Algebraic description of multilayer systems with resonances // *Particles and Nuclei Lett.*— 2000.— V. 3[100].— P. 48-61.
- [14] *Ignatovich V.K., Radu F.* Theory of neutron channeling in resonant layer of multilayer systems // *Phys. Rev. B.*— 2001.— V. 64.— P. 205408.
- [15] *Bloch J.-F., Ignatovich V.K.* A new approach to bound states in potential wells // *Am. J. Phys.*— 2001.— V. 69.— P. 1177.
- [16] *Игнатович В.К.* Новый метод решения одномерного уравнения Шрёдингера.— ОИЯИ, Р4-87-878.— Дубна, 1987.
- [17] *Игнатович В.К., Терезов Г.И.* Удержание УХН в плоской гравимагнитной ловушке.— ОИЯИ, Р4-10102.— Дубна, 1976.
- [18] *Игнатович В.К., Никитенко Ю.В.* Физические особенности действия гравитационного спектрометра ультрахолодных нейтронов.— ОИЯИ, Р3-87-832.— Дубна, 1987.
- [19] *Игнатович В.К.* Диффузия ультрахолодных нейтронов по нейтроноводу в присутствии гравитационного поля.— ОИЯИ, Р4-87-402.— Дубна, 1987.
- [20] *Голиков В.В., Игнатович В.К., Никитенко Ю.В.* Диффузия ультрахолодных нейтронов в разветвленном нейтроноводе.— ОИЯИ, Р3-88-48.— Дубна, 1988.
- [21] *Korneev D.A., Bodnarchuk V.I., Yaradaikin S.P., Peresedov V.F., Ignatovich V.K., Menelle A., Gähler R.* Reflectometry study of the coherent properties of neutron // *Physica B.*— 2000.— V. 276-278.— P. 973-974.
- [22] *Ignatovich V.K.* // *Письма в ЖЭТФ.*— 1978.— Т. 28.— С. 311.
- [23] *Korneev D.A., Bodnarchuk V.I., Ignatovich V.K.* Off-specular neutron reflection from magnetic media with nondiagonal reflectivity matrices // *Письма в ЖЭТФ.*— 1996.— Т. 63.— С. 900 (*J. Exp. Theor. Phys. Lett.*— 1996.— V. 63.— P. 944); *Proc. of the Int. symp. on advance in neutron optics and related research facilities. (Neutron Optics in Kumatori '96) // J. Phys. Soc. Japan.*— 1996.— V. 65, Suppl. A.— P. 7-12.
- [24] *Аксенов В.Л., Игнатович В.К., Никитенко Ю.В.* Нейтронные стоячие волны в слоистых системах // *Кристаллография.*— 2006. Т. 51.— С. 23-43.
- [25] *Radu F., Ignatovich V.K.* Generalized matrix method for the transmission of neutrons through multilayer magnetic systems with noncollinear magnetization // *Physica B.*— 1999.— V. 267-268.— P. 175-180.

- [26] *Ignatovich V.K., Ignatovich F.V.* The Krüger problem and neutron spin games // Am. J. Phys.— 2003.— V. 71.— P. 1013–1024; ОИЯИ, Е4-2002-121.— Дубна, 2002.
- [27] *Felber J., Gähler R., Golub R., Hank P., Ignatovich V., Keller T., Rauch U.* Neutron time interferometry // Foundation of Phys.— 1999.— V. 29, N. 3.— P. 381–396.
- [28] *Игнатович В.К., Остапевич Ю.М., Подгорецкий М.И.* Способ получения голограмм без опорного пучка // Гос. реестр изобретений СССР. — 08.01.1980.— Авт. свид. № 745271 (08.01.1979).
- [29] Открытия, изобретения, промышленные образцы, товарные знаки: Бюллетень.— 1980.— Т. 24.— С. 351.
- [30] *Игнатович В.К.* Algebraic Approach to the Dynamical Diffraction Theory for Polyatomic Ideal Monocrystals. ZhETF 97(5):1616–1625, 1990. (see Sov. Phys. JETP 70(5):913–917, 1990.)
- [31] *Игнатович В.К.* Многоволновой алгебраический подход Дарвина к динамической теории дифракции // Кристаллография.— 1992.— Т. 37, №5.— С. 1100–1112 (*Ignatovich V.K.* Multiwave algebraic Darwin method in dynamic theory of diffraction // Sov. Phys. Crystallogr.— 1992.— V. 37, N. 5.— P. 588).
- [32] *Ignatovich V.K.* The ball lightning // Laser Phys.— 1992.— V. 2, N. 6.— P. 991–996.
- [33] *Ignatovich V.K.* Neutronstriction in neutron stars // arXiv: astro-ph/0311471.— 2006.
- [34] *Ignatovich V.K.* Neutron stars without gravity // Proc. of the XXXVII–VIII Winter school in PINPI on physics of atomic nuclei and elementary particles.— St. Petersburg, 2004.— P. 446–466.
- [35] *Ignatovich V.K.* Measuring surface roughness in transmission geometry // Proc. SPIE. Scattering and surface roughness III. / Zu-Han Gu, A.A. Maradudin (eds.).— 2000.— V. 4100.— P. 190–198.
- [36] *Игнатович В.К., Шабалин Е.П.* Альbedo нейтронов.— ОИЯИ, Р4-2005-107.— Дубна, 2005.
- [37] *V.K. Ignatovich.* About linear problems of radiation transfer. Dokl. Ac. of Sc. of USSR 318(2):332–336, 1991; Sov. Phys. Dokl. 36, 382 (1991).
- [38] *V.K. Ignatovich.* Propagation of Acoustic Waves in Layered Elastic Media. Acoustic Journal 38(1):70–78, 1992. (see Sov. Physics Acoustics-USSR 38(1):34–39, 1992.)
- [39] *Аксенов В.Л., Игнатович В.К., Никитенко Ю.В.* Отражение нейтронов от геликоидальных систем. Письма в ЖЭТФ т. 84, в. 9, с. 563–569 (2006).
- [40] *R. Gähler, V.K. Ignatovich,* Neutron holography without reference beams, Physics letters A, — 2007. — V. 362, — No. 5-6. P. 393–400.
- [41] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* // Квантовая механика. Нерелятивистская теория.— М.: Наука, 1989. С. 106.
- [42] *Darwin C.G.* // Phil. Mag. 1914. V. 27. P. 675–686.
- [43] J. B. Hayter and H. A. Mook. // Appl. Cryst. (1989), 22, 35–41.

- [44] O. Shärf. // Physica B (1991), 174, 514–527.
- [45] P. Böni, D. Clemmens, M. S. Kumar, C. Papas. // Physica B (1999), 267–268, 320–327.
- [46] A. Ioffe, P. Fischer, T. Krist, F. Mezei. // J.Phys.Soc. Jap. (1996), 65, Suppl. A, 80–81.
- [47] A. Schebetov a.o. // J.Phys.Soc. Jap. (1996), 65, Suppl. A, 195–198.
- [48] S. Itoh, M. Takeda. // J.Phys.Soc. Jap. (1996), 65, Suppl. A, 199–202.
- [49] M. Takeda, K. Kurahashi, Y. Endoh, S. Itoh. // J.Phys.Soc. Jap. (1996), 65, Suppl. A, 234–237.
- [50] T. Kawai a.o. // J.Phys.Soc. Jap. (1996), 65, Suppl. A, 230–233.
- [51] K. Al Usta, K. N'guy, A. Menelle, F. Samuel. // J.Phys.Soc. Jap. (1996), 65, Suppl. A, 249–251.
- [52] S. Basu a.o. // J.Phys.Soc. Jap. (1996), 65, Suppl. A, 289–291.
- [53] *Parratt L.G.* // Phys. Rev.— 1954.— V. 95.— P. 359.
- [54] *Felcher G.P.* et al. // Nature.— 1995.— V. 377.— P. 409.; *Felcher G.P.* et al. // Physica B.— 1996.— V. 221.— P. 494.; *Felcher G.P.* Polarized neutron reflectometry—a historical perspective // Physica B.— 1999.— V. 267–268.— P. 154.
- [55] *Aksenov V.L.* et al. // Physica B.— 1997.— V. 234–236.— P. 513.
- [56] *Fredrikze* et al. // Physica B.— 1998.— V. 248.— P. 157.
- [57] *Aksenov V.L., Nikitenko Yu. V., Kozhevnikov S.V.* Spin-flip spatial neutron beam splitting in magnetic media // Physica B: Condensed Matter.— 2001.— V. 297, Iss. 1–4.— P. 94–100.
- [58] *Aksenov V.L., Lauter-Pasyuk V.V., Lauter H., Nikitenko Yu. V., Petrenko A.V.* Polarized neutrons at pulsed sources in Dubna // Physica B: Condensed Matter.— 2003.— V. 335, Iss. 1–4.— P. 147–152.
- [59] *Aksenov V.L., Nikitenko Yu.V.* Neutron interference at grazing incidence reflection. Neutron standing waves in multilayered structures: applications, status, perspectives // Physica B: Condensed Matter.— 2001.— V. 297, Iss. 1–4.— P. 101–112.
- [60] M. Calvo, // Phys.Rev. B 18, 5073 (1978)
- [61] *Lamago D. a.o.* Magnetic field induced instability around A-phase of MnSi. Bulk and SANS measurements. Physica B — 2006— V. 385–386, P. 385–387.
- [62] *Krüger E.* Acceleration of polarized neutrons by rotating magnetic field // Nukleonika.— 1980.— V. 25.— P. 889–893.
- [63] *Golub R., Gähler R., Keller T.* A plane wave approach to particle beam magnetic resonance // Am. J. Phys.— 1994.— V. 62.— P. 779–788.
- [64] *F.Radu.* Polarized Neutron Reflectometry Software “POLAR” <http://www.ep4.rub.de/radu/welcome/polar.html>.

- [65] *Foldy L.L.* The multiple scattering of waves // *Phys. Rev.*— 1945.— V. 67.— P. 107–119.
- [66] *Lax M.* Multiple scattering of waves // *Rev. Mod. Phys.*— 1951.— V. 23.— P. 287–310.
- [67] *Кляцкин В.И.* Стохастические уравнения и волны в случайно-неоднородных средах.— М.: Наука, 1980.
- [68] *Кейз К., Цвайфель П.* Линейная теория переноса.— М.: Мир, 1972.
- [69] *Артемов В.А.* Оценка критических параметров реакторов на тепловых нейтронах с активной зоной из наноструктурного материала // *Вопр. атом. науки и техники. Сер. «Физика ядерных реакторов».* 2003.— № 1–2.— С. 7–12.
- [70] *Артемов В.А.* Оценка критических параметров реакторов на тепловых нейтронах с активной зоной из наноструктурного материала // *Атомная энергия.*— 2003.— Т. 94, № 3.— С. 231–233.

Получено 23 апреля 2007 г.