



сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

2504/83

10/5-83

P14-83-102

Ким Чир Сен, С.Кубиак, В.В.Нитц

ПРОПОРЦИОНАЛЬНОСТЬ  
МЕЖДУ СТРУКТУРНЫМ ФАКТОРОМ  
И ИНТЕНСИВНОСТЬЮ  
ДИФРАКЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ  
НА МОЗАИЧНОМ КРИСТАЛЛЕ

1983

В основе большинства нейтронографических исследований структуры кристаллических веществ лежит кинематическое приближение теории дифракции, согласно которому интенсивность рассеяния  $I_p$  пропорциональна  $|F_{hkl}|^2 / F_{hkl}$  - структурный фактор рассеяния/. Однако в случае монокристаллических образцов применимость этого приближения существенно ограничивается первичной и вторичной экстинкцией нейтронов. Если даже размеры отдельных блоков мозаики кристалла достаточно малы/не более нескольких микрометров/, для пренебрежения первичной экстинкцией необходимо использовать кристаллы с толщиной не более нескольких десятков микрометров /при типичных значениях  $|F_{hkl}| \approx 10^{-12}$  см и мозаичности  $\eta = 1\%$ , чтобы сохранялась близкая к квадратичной зависимость  $I_p$  от  $F_{hkl}$ . Введение поправки на вторичную экстинкцию при этом связано с определением характера мозаичности кристалла, что требует проведения специальных измерений. Если же отдельные блоки кристалла имеют размеры порядка 10 мкм или более, решающую роль играет первичная экстинкция. Для измерений в традиционном кинематическом приближении в этом случае пришлось бы вырезать образцы толщиной не более нескольких микрометров. Приготовление таких образцов с сохранением физических свойств и их исследование с учетом необходимости исключения поверхностных эффектов является проблематичным.

Покажем одну из возможностей преодоления сложностей, связанных с экстинкцией.

Если кристалл идеален ( $\eta \rightarrow 0$ ) и представляет собой пластину толщиной  $r$ , для каждого фиксированного направления падения первичных немонахроматических нейтронов вероятность отражения описывается функцией /см., например, <sup>1/1</sup>/

$$p(y) = \left[ y^2 + \frac{1 - y^2}{\text{th}^2(Ar\sqrt{1 - y^2})} \right]^{-1}, \quad /1/$$

где

$$y = \frac{\pi(\lambda - 2d_{hkl} \sin \theta)}{2d_{hkl}^2 N |F_{hkl}| \lambda}; \quad A = 2d_{hkl} N |F_{hkl}|$$

/рассматриваем случай Брэгга,  $\lambda$  - длина волны нейтронов,  $\theta$  - угол между направлением падения и отражающей плоскостью,  $N$  - число ячеек в единице объема/. Полная интенсивность рассеянного пучка получается путем интегрирования вероятности /1/ по  $\lambda$  для фиксированного направления падения:

$$I_p = I_0(\lambda_0) \left( \frac{d\lambda}{dy} \right)_{y=0} \int_{-\infty}^{\infty} p(y) dy =$$

$$= I_0(\lambda_0) 4 d_{hkl}^3 N |F_{hkl}| \sin \theta_0 \operatorname{th}(Ar). \quad /2/$$

Здесь  $I_0(\lambda_0)$  - интенсивность первичного пучка нейтронов /интеграл по направлениям падения/, отнесенная к единичному диапазону длин волн при среднем значении  $\lambda_0$ . Из /2/ при достаточно большой толщине ( $Ar > 1$ ) кристалла следует известная линейная зависимость  $I_p$  от  $F_{hkl}$ . При этом почти полное отражение нейтронов для фиксированного направления падения происходит в диапазоне

$$\Delta \lambda_D = \frac{8}{\pi} d_{hkl}^3 N |F_{hkl}| \cdot \sin \theta_0, \quad /3/$$

и вероятность рассеяния резко падает вне этого диапазона.

Так как при достаточно больших значениях  $Ar$  величина  $I_p$  не зависит от  $r$ , выражение /2/ /при  $\operatorname{th}(Ar) \rightarrow 1$ / справедливо и для кристалла, не представляющего собой строго плоскопараллельной пластины.

В случае мозаичного кристалла имеет место дополнительное к величине /3/ уширение, связанное с мозаичностью:

$$\Delta \lambda_M = 2 d_{hkl} \cos \theta_0 \eta. \quad /4/$$

В обычных случаях  $\Delta \lambda_M \gg \Delta \lambda_D$ , то есть интенсивность  $I_p$ , пропорциональная при этом величине  $\Delta \lambda_M$ , не зависит существенно от  $F_{hkl}$ . И только при  $\theta_0 > \theta^*$ , где

$$\theta^* = \operatorname{arctg} \frac{\pi \eta}{4 d_{hkl}^2 N |F_{hkl}|}, \quad /5/$$

мозаичность кристалла приводит лишь к некоторому размытию границ "столика отражения" /3/ и, следовательно, интенсивность рассеяния, как и в случае идеального кристалла, подчиняется выражению /2/ /при  $Ar \gg 1$ /, то есть пропорциональна  $|F_{hkl}|$ .

Например, в типичном случае  $d_{hkl} = 3 \text{ \AA}$ ,  $N = 10^{22} \text{ см}^{-3}$ ,  $\eta = I'$ ,  $F_{hkl} = 3 \cdot 10^{-12} \text{ см}$  параметр  $\theta^* = 83^\circ$ .

Сравним интенсивности в линейной области ( $\theta_0 \gg \theta^*$ ) и в условиях применимости кинематического приближения для образцов, приготовленных из одного кристалла. Для приведенных выше параметров и значений  $\theta_{ok} = 45^\circ$ ,  $r_k = 2 \cdot 10^{-4} \text{ см}$  в условиях кинематического приближения /при такой толщине образца  $r_k$  отклонение от квадратичной зависимости из-за первичной экстинкции в соответствии с /2/ составляет 5%/ отношение рассматриваемых интенсивностей равно 1,25. При этом учтен фактор  $\sin^5 \theta_{ok}$ , связанный с пропорциональностью спектра первичного "белого" пучка нейтронов величине  $\lambda^{-5}$ .

Таким образом, в типичных случаях для крупноблочного кристалла ( $r > A^{-1}$ ) дифракционные измерения в условиях линейной зависимости  $I_p(F_{hkl})$  при  $\theta_0 > \theta^*$  не связаны с уменьшением интенсивности.

С другой стороны, отсутствие жестких требований к толщине кристалла и независимость интенсивности от параметров  $\eta$  и  $r$  при  $\theta_0 > \theta^*$  могут оказаться существенными достоинствами такой геометрии.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Пинскер З.Г. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. "Наука", М., 1974.

### НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

|               |   |            |
|---------------|---|------------|
| D3-11787      | Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.   | 3 р. 00 к. |
| D13-11807     | Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.  | 6 р. 00 к. |
| D1,2-12036    | Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/   | 7 р. 40 к. |
| D1,2-12450    | Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978  | 5 р. 00 к. |
| D1,2-12450    | Труды XIII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.  | 3 р. 00 к. |
| D11-80-13     | Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/  | 8 р. 00 к. |
| D11-80-13     | Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979            | 3 р. 50 к. |
| D4-80-271     | Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.  | 3 р. 00 к. |
| D4-80-385     | Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.  | 5 р. 00 к. |
| D2-81-543     | Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981  | 2 р. 50 к. |
| D10,11-81-622 | Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980                      | 2 р. 50 к. |
| D1,2-81-728   | Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.  | 3 р. 60 к. |
| D17-81-758    | Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.   | 5 р. 40 к. |
| D1,2-82-27    | Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.  | 3 р. 20 к. |
| P18-82-117    | Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981. | 3 р. 80 к. |
| D2-82-568     | Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.  | 1 р. 75 к. |
| D9-82-664     | Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.   | 3 р. 30 к. |
| D3,4-82-704   | Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.   | 5 р. 00 к. |

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Kim Chir Sen, Kubiak S., Nitts V.V.

P14-83-102

Пропорциональность между структурным фактором и интенсивностью дифракционного рассеяния нейтронов на мозаичном кристалле

Исходя из динамической теории дифракции рассмотрено рассеяние нейтронов на крупноблочном мозаичном кристалле. Показано, что если угол Брэгга достаточно близок к  $90^\circ$ , должна выполняться пропорциональность между интенсивностью рассеяния и структурным фактором. Это обстоятельство может быть использовано при выборе условий для нейтронографических исследований. При этом нет существенного уменьшения интенсивности по сравнению с условиями кинематического приближения. До некоторой степени устраняются сложности, связанные с учетом экстинкции.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Kim Chir Sen, Kubiak S., Nitts V.V.

P14-83-102

The Proportionality between the Structure Factor and the Intensity of the Diffractive Neutron Scattering on Mosaic Crystal

The neutron scattering on a large-scale blocked mosaic crystal is considered in the framework of the dynamic theory of diffraction. It is shown that the proportionality between the intensity of scattering and structural factor should take place if the Bragg angle is close to  $90^\circ$ . This circumstance could be used when choosing optimal conditions for neutronographical investigations. There is no sufficient intensity decrease in comparison with the conditions of kinematic approach. The difficulties due to encountering extinction are eliminated to a certain extent.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой.