

С 342
7-493

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Лаборатория нейтронной физики

На правах рукописи

Н.А. Черноплеков

ИЗУЧЕНИЕ ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ НЕКОТОРЫХ
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ПО НЕУПРУГОМУ
НЕКОГЕРЕНТНОМУ РАССЕЯНИЮ ХОЛОДНЫХ
НЕЙТРОНОВ

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических
наук М.И. Певзнер

1965

Дубна

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Лаборатория нейтронной физики

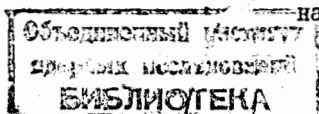
На правах рукописи

Н.А. Черноплеков

ИЗУЧЕНИЕ ФОНОННЫХ СПЕКТРОВ НЕКОТОРЫХ
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ ПО НЕУПРУГОМУ
НЕКОГЕРЕНТНОМУ РАССЕЯНИЮ ХОЛОДНЫХ
НЕЙТРОНОВ

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических
наук М.И. Певзнер



1965

Работа выполнена
в Институте атомной энергии им. И.В. Курчатова

I. При решении многих как теоретических, так и практически задач физики конденсированного состояния большое значение имеет правильное понимание характера колебаний атомов и молекул в кристаллах. В известных предположениях колебания атомов в кристаллах могут быть описаны на языке невзаимодействующих квазичастиц - фононов, характеризующихся определенными законами дисперсии. Для термодинамического описания фононной ветви возбуждения кристалла достаточно знания обобщенной характеристики фононного спектра - функции распределения плотности фононных состояний, а для кинетического описания - законов дисперсии и векторов поляризации. Уровень представлений современной физики о силах межатомного взаимодействия не позволяет проводить надежное количественное предвычисление фононных спектров кристаллов, и поэтому весьма важным становится их опытное определение. Среди различных экспериментальных методов исследования спектров колебаний кристаллов, интенсивно развивающихся в течение последнего десятилетия, особое место занимает метод неупругого рассеяния медленных и холодных нейтронов веществом. Этот метод представляет уникальные возможности прямого определения фононной и магной ветвей возбуждения кристалла, закономерностей движения атомов и молекул в жидкости и других связанных явлений.

II. В данной диссертационной работе проведено исследование фононных спектров переходных металлов V и Ni и сплава переходных металлов $Ti - Zr$ методом измерения сечения неупругого некогерентного рассеяния холодных нейтронов образцами указанных

веществ. Диссертация состоит из 4-х глав.

Первая глава диссертации посвящена рассмотрению возможностей изучения фоновых спектров кристаллов с помощью ряда экспериментальных методов: калориметрического метода, основанного на измерении температурной зависимости теплоемкости и последующем обращении этой зависимости с целью восстановления функции распределения частот колебаний; метода, основанного на измерении интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей кристаллами и восстановлении кривых дисперсии для фононов, а также метода, основанного на использовании эффекта Мессбауэра.

Во второй главе диссертации проводится подробное обсуждение возможностей изучения фоновых спектров кристаллов с помощью методов нейтронной физики - измерения сечений когерентного и некогерентного неупругого рассеяния тепловых и холодных нейтронов, сравнение метода неупругого рассеяния нейтронов с другими экспериментальными методами исследования фоновых спектров кристаллов, а также кратко описываются, в качестве иллюстрации, и обсуждаются результаты некоторых работ по фоновым спектрам кристаллов, выполненных методом неупругого рассеяния нейтронов.

Из приведенного сравнения различных методов экспериментального изучения фоновых спектров кристаллов сделан вывод, что наилучшим методом, позволяющим получать необходимую и достаточную информацию для описания (как термодинамического, так и кинетического) фоновой ветви возбуждения кристалла, является метод неупругого рассеяния нейтронов. При использовании этого метода данные о фоновом спектре кристалла могут быть получены без привлечения каких-либо модельных предположений о характере его динамики и с удовлетворительной для современного уровня физики точностью.

III. В третьей главе диссертации описывается установка для исследования динамики вещества в конденсированном состоянии с помощью неупругого рассеяния холодных нейтронов. Установка смонтирована на горизонтальном канале реактора ИРТ-1000 ИАЭ им. И.В. Курчатова. Монохроматизация первичного пучка нейтронов в установке осуществляется с помощью нейтронного фильтра из охлаждаемого поликристаллического бериллия. Пучок холодных нейтронов характеризуется следующими параметрами: угловая расходи-

мость $\sim 4^\circ$ поток в области расположения образца (при мощности реактора 10^3 квт) $\sim 6 \cdot 10^6$ н/см²сек, кадиное отношение в пучке $\sim 7 \cdot 10^3$, средняя энергия нейтронов $\sim 4 \cdot 10^{-3}$ эв. Энергетическое распределение рассеянных образцом под углом 90° нейтронов исследуется по методу времени пролета с помощью трех сменных механических прерывателей. Использование этих прерывателей позволяет обеспечить в представляющем интерес интервале энергий рассеянных нейтронов (10^{-3} эв $\rightarrow 2 \cdot 10^{-1}$ эв) разрешение по энергии $5 \rightarrow 8\%$ без существенной потери интенсивности. Рассеянные на образце и прошедшие через прерыватель нейтроны после пролета расстояния 494,5 см попадают в детектор установки. Детектор представляет собой пакет пропорциональных счетчиков, заполненных обогащенным BF_3 . Он разбит на 5 групп счетчиков по 4 счетчика в каждой группе. Нейтронные импульсы от каждой предыдущей группы счетчиков по отношению к последующей (в направлении движения нейтронного пятна) задерживаются с помощью магнотриксционных линий на время, определяемое скоростью вращения прерывателя. Таким образом, геометрические размеры детектора сводятся к размерам одной группы счетчиков и разрешение спектрометра улучшается \sim в 2,5 раза. Отбор импульсов в зависимости от времени пролета нейтронами базы спектрометра осуществляется 128-канальным временным анализатором. Ширины каналов анализатора изменяются от 2 до 128 мксек. При мощности реактора 1000 квт, размерах ванадиевого рассеивателя $15 \times 12 \times 1$ см³ и ширине каналов анализатора 32 мксек интенсивность неупруго рассеянных нейтронов составляет 0,5 \rightarrow 1 отсчет на канал в мин. при фоне 0,3 отсчета на канал в минуту. К моменту своего создания описываемая установка была одной из лучших среди установок подобного типа.

IV. Четвертая глава диссертации посвящена описанию проведения измерений неупругого рассеяния холодных нейтронов, обработки экспериментальных данных и обсуждению результатов. Исследованные образцы металлов реализуют различные возможные случаи подавления когерентности, возникающей при рассеянии нейтронов кристаллической решеткой. Образец одноизотопного металла ванадия представляет собой пример спиновой некогерентности, образец никеля, являющийся сплавом естественного никеля с изотопом Ni^{62}

и имеющий нулевую среднюю амплитуду когерентного рассеяния нейтронов, пример изотопической некогерентности, а образец неупорядоченного сплава $Ti - Zr$ - пример некогерентности, возникающей при смещении ядер с амплитудами рассеяния нейтронов противоположного знака. Как следует из теории взаимодействия нейтронов с кристаллами, сечение неупругого рассеяния нейтронов одноатомными некогерентно рассеивающими кристаллами оказывается практически пропорциональным функции распределения частот фононного спектра. Поэтому измерения дважды дифференциального сечения некогерентного рассеяния позволяют получать необходимую и достаточную информацию для термодинамического описания фононной ветви возбуждения кристалла.

Спектр неупруго рассеянных нейтронов на исследованных образцах измерялся в интервале энергий $10^{-2} + 5 \cdot 10^{-2}$ эв. В экспериментальные данные вводились поправки на деформацию спектра рассеянных нейтронов функцией пропускания прерывателя, на ослабление воздухом, на отклонение эффективности детектора от закона $1/\sqrt{v}$. Далее производилось приведение экспериментального спектра к спектру, рассеянному на бесконечно тонком образце, учитывалась деформация падающего и рассеянного спектров по толщине образца и вклад многократных процессов и, как итог, после вычета вклада многофононных процессов, из экспериментальных данных восстанавливалась функция распределения частот колебаний исследуемого вещества $g(\omega)$. Восстановление функции $g(\omega)$ из спектра на бесконечно тонком образце проводилось с учетом полного разрешения установки, представляющего собой свертку первичной спектральной линии холодных нейтронов и функции разрешения спектрометра по времени пролета. Функция распределения частот $g(\omega)$ на исследованном интервале восстанавливалась в виде разложения

$$g(\omega) = \sum_{\alpha=0}^n g_{\alpha} f_{\alpha}(\omega)$$

с точностью

$$\delta(\omega) = \left\{ \sum_{\alpha=0}^n f_{\alpha}^2(\omega) \right\}^{1/2}$$

Здесь α - целочисленный индекс, g_{α} - коэффициенты разложения, $f_{\alpha}(\omega)$ - базисные функции, по которым проводилось разложение, число восстанавливаемых гармоник разложения " n " определялось

точностью исходных экспериментальных данных. Указанная процедура обработки экспериментальных данных выполнялась с помощью электронной вычислительной машины.

Восстановленный из экспериментальных данных фононный спектр ванадия представлен на рис. 1. Если сравнивать между собой исходные данные по спектру нейтронов, неупруго рассеянных на ванадии, полученному в настоящей работе, с результатами других исследований, то практически не наблюдается никакого различия. Однако на уровне функции $g(\omega)$ различие оказывается заметным (в данной работе максимумы $g(\omega)$ более острые и провал между ними более глубокий). Это является следствием учета полной функции разрешения установки. Из сравнения экспериментально определенной для ванадия функции $g(\omega)$ с результатами теоретических расчетов в различных приближениях следует, что на основе только упругих постоянных не представляется возможным даже для такой простой решетки, как решетка ванадия, получить удовлетворительное согласие между теорией и экспериментом. Экспериментальная $g(\omega)$ содержит значительно большую информацию о фононном спектре ванадия, чем та, которую можно получить по упругим постоянным. В то же самое время, экспериментальная $g(\omega)$ и упругие постоянные в совокупности дают удовлетворительную основу для приближенного восстановления кинетических характеристик фононного спектра ванадия, кривых дисперсии и векторов поляризации. Из такого восстановления можно сделать заключение, что в решетке ванадия сильны нецентральные взаимодействия, а само взаимодействие является не резко обрывающимся и простирается до 4-ой координационной сферы.

Определенный экспериментально фононный спектр ванадия был использован для расчета температурной зависимости решеточного вклада в теплоемкость ванадия, вклада электронной теплоемкости, а также расчета температурной зависимости фактора Дебая-Валлера. Результаты расчета сравнены с известными экспериментальными данными.

Измерения спектров нейтронов, неупруго рассеянных на образце сплава изотопов никеля с нулевой средней амплитудой когерентного рассеяния нейтронов, позволили впервые осуществить безмодельное восстановление функции $g(\omega)$ для решетки никеля.

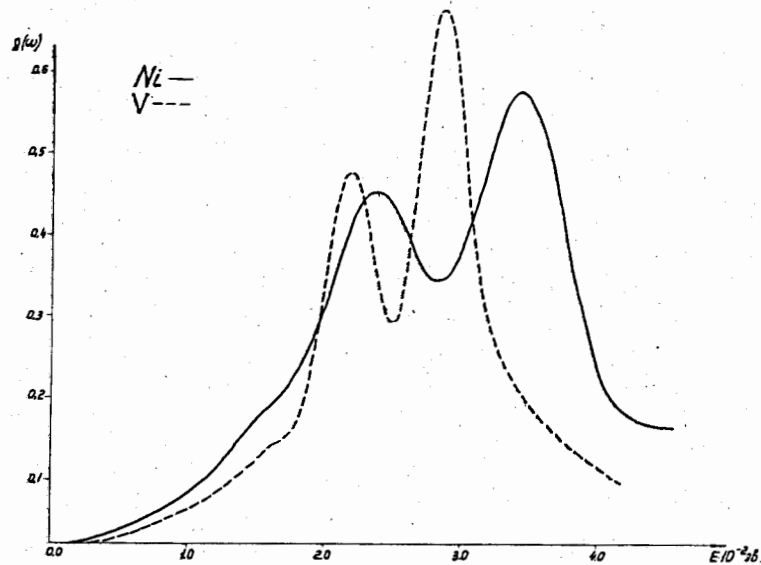


Рис. 1. Функции распределения частот колебаний ванадия и никеля.

(рис. 1). Проведено сравнение функции распределения частот для никеля, полученной на основании нейтронного эксперимента, с результатами других исследований фонов спектра никеля и, в частности, с результатами изучения диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Показано, что определение функции $g(\omega)$ по неупругому рассеянию нейтронов является более точным. При сравнении между собой спектров нейтронов, рассеянных неупруго на образце сплава изотопов никеля с нулевой средней амплитудой когерентного рассеяния и на образце естественного никеля со значительной средней амплитудой когерентного рассеяния, обнаружилось совпадение спектров в пределах точности опытов. Это экспериментально указало на возможность использования так называемого некогерентного приближения при исследовании фонов спектров по неупругому рассеянию нейтронов на поликристаллах с заметным вкладом когерентного рассеяния.

Известно, что для многих областей физики конденсированного состояния большой интерес представляет экспериментальное исследование спектров возбуждения неупорядоченных систем. В настоящей работе в качестве примера такой системы исследован неупорядоченный сплав $Ti - Zr$, обладающий нулевой средней амплитудой когерентного рассеяния. Поскольку обычные выражения для сечения неупругого некогерентного рассеяния нейтронов, основанные на фоновом разложении смещений атомов в упорядоченной кристаллической решетке, неприменимы к анализу данных по сплаву $Ti - Zr$, было проведено рассмотрение связи между динамикой неупорядоченного кристалла с атомами разных сортов и сечением неупругого некогерентного рассеяния нейтронов. В результате было установлено, что из спектра неупруго некогерентно рассеянных нейтронов на неупорядоченной системе невозможно прямое безмодельное восстановление функции распределения частот колебаний $g(\omega)$. Связь между одноквантовым сечением и функцией $g(\omega)$ оказывается более сложной:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} \sim \Psi(\omega) \equiv g(\omega) \sum_j e^{-2W_j} A_j \frac{\sigma_j}{M_j} \overline{|C_j(\epsilon)|^2}$$

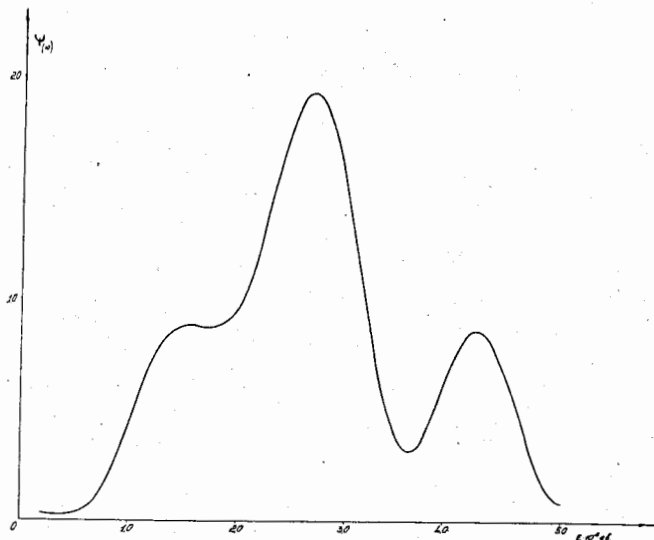


Рис. 2. Функция $\psi(\omega)$, характеризующая распределение квадратов динамических смещений атомов сплава $Ti - Zr$.

Здесь $d^2\sigma/d\Omega d\epsilon$ - дважды дифференциальное сечение неупругого некогерентного рассеяния, ϵ - изменение энергии нейтрона при рассеянии, $\exp(-2W_j)$ - фактор Дебая-Валлера для j -той компоненты системы, A_j - концентрация, σ_j и M_j соответственно сечение рассеяния и масса j -того ядра, $|\langle \epsilon_j(\epsilon) \rangle|^2$ - усредненный по изоэнергетической поверхности квадрат вектора поляризации j -того ядра. Поэтому из экспериментальных данных по неупругому рассеянию холодных нейтронов на сплаве $Ti - Zr$ восстановлена лишь функция $\psi(\omega)$, качественно характеризующая функцию распределения частот колебаний исследованного неупорядоченного сплава (рис. 2). Сравнение этих данных с результатами различных теоретических расчетов по динамике неупорядоченных кристаллов показало, что в общих чертах спектр неупорядоченного кристалла подобен спектру упорядоченного, но его особенности оказываются более размытыми.

Основные результаты работы докладывались на симпозиуме МАГАТЭ по физическим исследованиям на ядерных реакторах в Вене в 1960 г., на совещании по физике медленных нейтронов в Дубне в 1961 г., на конференции по физике низких температур в Ленинграде в 1962 г., на симпозиуме МАГАТЭ по неупругому рассеянию нейтронов твердыми телами и жидкостями в Чок-Ривере (Канада) в 1962 г. и опубликованы в следующих статьях:

1. Н.А. Черноплеков, М.Г. Землянов. Материалы совещания по физике низких энергий в Дубне, 1961 г.
2. М.Г. Землянов, Н.А. Черноплеков "Pile Neutron Research in Physics" JAEA, Vienna, 1962
3. М.Г. Землянов, Н.А. Черноплеков ИТЭ, 5, 40 (1962).
4. А.Е. Головин, М.Г. Землянов, А.П. Цитович, Н.А. Черноплеков, ИТЭ, 5, 77 (1962).
5. Н.А. Черноплеков, М.Г. Землянов, А.Г. Чичерин ЖЭТФ, 43, 2080 (1962).
6. М.Г. Землянов, Д.М. Каган, Н.А. Черноплеков, А.Г. Чичерин. "Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids", JAEA, Vienna, 1963

7. Н.А. Черноплеков, М.Г. Землянов, Е.Г. Бровман, Б.Г. Лященко, ЭТФ, 44, 858 (1963); *"Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, IAEA, Vienna, 1963"*
8. Н.А. Черноплеков, М.Г. Землянов, Е.Г. Бровман, А.Г. Чичерин, ФТТ, 5, 112 (1963); *"Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids" IAEA, Vienna, 1963*

Л-139939, ИАЗ-995. Зак. 3439. Тир. 200. 13. II. 65 г.

Отв. за выпуск Черноплеков Н.А.