

УДК 548.732

## О ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ В КРИСТАЛЛАХ В ПОЛЕ ЗВУКОВОЙ ВОЛНЫ

А.Г. АЙРАПЕТЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван

(Поступила в редакцию 11 марта 2009 г.)

Рассмотрена дифракция нейтронов в кристаллах при воздействии звуковой волны. Вычислена вероятность рассеяния нейтронов при упругом взаимодействии с кристаллом. Рассеяние же нейтронов на звуковом фоне носит неупругий характер. Показана возможность управления фактором Дебая–Валлера.

Рассеяние нейтронов является мощным современным средством исследования строения и свойств кристаллов, которые определяют их широкое использование в современной физике. С помощью нейтронов можно установить атомное строение, определить магнитную структуру, получить информацию о характере тепловых колебаний атомов в жидкостях и кристаллах и т.д. Использование нейтронов несет в себе так много возможностей, порою совершенно уникальных, что, несмотря на большие экспериментальные трудности, нейтронные исследования постоянно расширяются. При этом подавляющее большинство исследований, проводящихся на реакторах с использованием нейтронного излучения, относится сейчас к физике конденсированного состояния.

Дифракция частиц является плодотворным методом для исследования различных видов кристаллических структур. Хорошо известно, что для исследования атомной структуры вещества пользуются дифракцией рентгеновских лучей. Однако интенсивность такого рассеяния на легких атомах, например, атомах водорода, мала, и определить положение таких атомов трудно. Продуктивным методом структурного анализа может являться дифракция электронов. Однако этот метод может быть распространен только на изучение поверхности твердого тела. Эти и другие пробелы в структурной рентгенографии и электронографии можно обойти с помощью структурной нейтронографии.

В книгах [1-3] подробно освещены вопросы, связанные с взаимодействием нейтронов с кристаллами. Наиболее интересные эффекты, которые относятся к дифракции нейтронов в твердых телах, можно найти в статьях [4].

В кристаллическом веществе атомы расположены в упорядоченном виде. Этот факт существенно меняет картину рассеяния. Важно, что характерное расстояние в структуре (период решетки) имеет тот же порядок величины, что и дебройлевская длина волны нейтронов. В этом случае дифрагируют так называемые тепловые нейтроны, длина волны которых порядка  $10^{-8}$  см. Это – ней-

троны, энергия которых порядка  $10^{-2}$  эВ, что соответствует температуре  $\sim 100$  К. Это становится очевидным, если учитывать соотношение  $\lambda = 0.287/\sqrt{E}$  между длиной волны нейтрона  $\lambda$  и его энергией  $E$ , где  $\lambda$  выражена в ангстремах, а энергия – в электронвольтах. Излучения с большей длиной волны не могут выявить деталей структуры на атомном уровне, а более коротковолновое излучение дифрагирует, отклоняясь лишь на очень малые углы, что весьма неудобно. Особый интерес может представлять исследование явления дифракции коротковолновых (высокоэнергетических) нейтронов [5]. Там же рассматривается неупругое по лазерной волне и в то же время упругое по кристаллу рассеяние высокоэнергетических нейтронов. Показана возможность дифракции коротковолновых нейтронов, длина волны которых меньше периода решетки. Решение базируется на многофотонном взаимодействии аномального магнитного момента нейтрона с полем лазерного излучения – представление Фари.

Отметим, что в литературе отсутствуют данные о рассеянии нейтронов при внешних воздействиях, где учитывался бы квантовый характер звукового поля. В настоящей работе решается квантовая задача: рассматривается процесс дифракции нейтронов при наличии гиперзвуковой волны, при этом смещения ядер от положений равновесия подвергаются вторичному квантованию.

Задача дифракции нейтронов в кристаллах при наличии внешней звуковой волны рассматривается в рамках нестационарной теории S-матрицы в представлении взаимодействия, где нейтрон-фононное взаимодействие рассматривается как возмущение к свободному движению нейтрона. Гамильтониан полной системы, зависящий от времени, берется в следующем виде:

$$H(t) = H_0(t) + V(t), \quad (1)$$

где  $H_0(t)$  – гамильтониан свободного нейтрона, а  $V(t)$  – потенциал взаимодействия, куда входят как тепловые, так и внешние фононы.

Временная эволюция системы от момента  $t'$  до следующего момента  $t$  в представлении взаимодействия описывается унитарным оператором  $U_I(t, t')$ , который имеет следующие свойства (см. [6]):

$$U_I(t, t') U_I^+(t, t') = U_I^+(t, t') U_I(t, t') = 1, \quad (2)$$

$$U_I^+(t, t') = U_I(t', t) = U_I^{-1}(t, t'). \quad (3)$$

Имеет место также закон композиции

$$U_I(t, t') = U_I(t, t'') U_I(t'', t'). \quad (4)$$

Здесь через  $U_I^+(t, t')$  обозначен эрмитово-сопряженный оператор.

Оператор  $U_I(t, t')$  удовлетворяет уравнению

$$i\hbar(\partial U_I(t, t')/\partial t) = V_I(t) U_I(t, t'), \quad (5)$$

с начальным условием  $U_I(t', t') = 1$ . Здесь нами введено обозначение  $V_I(t) \equiv U_0^+(t, t') V(t) U_0(t, t')$ , где  $U_0(t, t')$  – оператор временной эволюции для сво-

бодного нейтрона, описывающегося волновой функцией  $|\psi(t)\rangle$ , которая в представлении Шредингера определяется с помощью соотношения  $|\psi(t)\rangle = U_0(t, t') |\psi(t')\rangle$  с условием  $U_0(t, t') = 1$ .

Можно показать, что унитарный оператор  $U_I(t, t')$  имеет вид

$$U_I(t, t') \equiv U_0^+(t, t') U(t, t'), \quad (6)$$

где  $U(t, t')$  – временной эволюционный оператор для полной динамической системы  $|\Psi(t)\rangle$  и определяется как  $|\Psi(t)\rangle = U(t, t') |\Psi(t')\rangle$  с начальным условием  $U(t, t') = 1$ . Нужно отметить, что  $U_0(t, t')$  и  $U(t, t')$  также являются унитарными операторами со свойствами (2)-(4).

Решение уравнения (5) с соответствующим начальным условием можно записать в виде

$$U_I(t, t') = 1 - (i\hbar)^{-1} \int_{t'}^t V(\tau) U_I(\tau, t') d\tau. \quad (7)$$

Интегральное уравнение (7) решается методом итерации. В результате получаем выражение

$$U_I(t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} U_I^{(n)}(t, t'), \quad (8)$$

где

$$U_I^{(0)}(t, t') = 1, \quad U_I^{(n)}(t, t') \equiv (i\hbar)^{-n} \int_{t > \tau_n > \dots > \tau_1 > t'} d\tau_n \dots d\tau_1 V_I(\tau_n) \dots V_I(\tau_1). \quad (9)$$

Подставляя соотношение (6) в (9) и учитывая свойства оператора  $U_0(t, t')$ , запишем унитарный оператор системы нейтрон-фонон в виде

$$U(t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} U^{(n)}(t, t'), \quad (10)$$

где

$$U^{(0)}(t, t') = U_0(t, t'),$$

$$U^{(n)}(t, t') = (i\hbar)^{-n} \times \int_{t > \tau_n > \dots > \tau_1 > t'} d\tau_n \dots d\tau_1 U_0(t, \tau_n) V(\tau_n) U_0(\tau_n, \tau_{n-1}) V(\tau_{n-1}) \dots U_0(\tau_2, \tau_1) V(\tau_1) U_0(\tau_1, t'). \quad (11)$$

Вышеприведенные разложения являются степенными рядами по  $V(t)$ . Здесь  $U^{(0)}$  представляет собой приближение нулевого порядка, а  $U^{(1)}$ ,  $U^{(2)}$ , ...  $U^{(n)}$  дают соответственно первый, второй, ...  $n$ -ый, вклад в ряде (10). То же самое правильно для  $U_I^{(0)}$ ,  $U_I^{(1)}$ , ...  $U_I^{(n)}$  в (8). Тот факт, что потенциал рассеяния зависит от времени, является хорошей основой для понимания временной эволюции различных динамических квантовых систем. Так, используя этот теоретический подход, в работе [7] было рассмотрено электрон-фотон-фононное взаимодействие в полярных полупроводниках при облучении лазером свободных

электронов. Также, основываясь на этом подходе, было рассмотрено нейтрон-фотон-фононное взаимодействие в [5], где показана возможность дифракции высокоэнергетических (коротковолновых) нейтронов в кристаллах в поле интенсивного лазерного излучения.

Теперь обратимся к рассмотрению процесса рассеяния нейтронов в кристаллах под воздействием внешней звуковой волны. В рамках нестационарной теории S-матрицы в первом приближении вычислим вероятность рассеяния нейтрона. Вычислим вклад первого порядка в (10). Для этой цели построим оператор  $U_0(t, t')$  для свободного нейтрона в форме

$$U_0(t, t') = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t')}, \quad (12)$$

который из состояния  $|\psi(t')\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{Pr} - Et')\right]$  генерирует состояние  $|\psi(t)\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{Pr} - Et)\right]$ . Здесь  $\mathbf{P}$  и  $E$  представляют собой вектор импульса и энергию нейтрона, соответственно.

Время прохождения нейтронов через характеристическое расстояние соизмеримо с периодом распространения возбуждения, которое возникает в кристалле под воздействием внешней звуковой волны. Следовательно, можно считать, что нейтроны взаимодействуют не с отдельным атомом, а с совокупностью атомов. Нейтронные волны суммируются в наблюдаемой точке в соответствии с интерференционными законами. Оператор нейтрон-фононного взаимодействия (псевдопотенциал Ферми) может быть представлен в следующем виде:

$$V(t) = -\left(2\pi\hbar^2 A/m\right) \sum_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (13)$$

где  $A$  – амплитуда рассеяния нейтрона от ядра,  $m$  – масса нейтрона. Радиус-вектор  $\mathbf{R}_n$  определяет местоположение ядра вблизи узла  $\mathbf{n} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$  ( $n_i$  – целые неотрицательные числа и  $\mathbf{a}_i$  – векторы основных трансляций). Здесь рассматриваются кристаллы, состоящие из атомов одноизотопных элементов с нулевым спином. Вектор  $\mathbf{R}_n$  при отсутствии внешнего поля записывается в виде

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{n} + \boldsymbol{\xi}_n, \quad (14)$$

где

$$\boldsymbol{\xi}_n = \sum_{s, \mathbf{q}} \sqrt{\hbar/2MN\Omega_s(\mathbf{q})} \mathbf{e}_s(\mathbf{q}) \left[ b_{qs} e^{i\mathbf{q}\mathbf{n}} + b_{qs}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{n}} \right]$$

– оператор смещения атома от узла  $\mathbf{n}$ , которое является гармоническим, обусловленным тепловыми колебаниями ядер,  $M$  – масса ядра,  $N$  – число элементарных ячеек в кристалле,  $\Omega_s(\mathbf{q})$  – частота теплового фонона,  $\mathbf{e}_s(\mathbf{q})$  – вектор поляризации теплового фонона, наконец,  $b_k$  и  $b_k^+$  – операторы рождения и уничтожения тепловых фононов которые удовлетворяют перестановочным соотношениям Бозе  $[b_k, b_{k'}^+] = \delta_{kk'}$ ,  $[b_k, b_{k'}] = 0$ .

Звуковая волна учитывается новым членом  $\boldsymbol{\zeta}$ , который вводится в (14):

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{n} + \boldsymbol{\xi}_n + \boldsymbol{\zeta}. \quad (15)$$

Здесь  $\zeta$  имеет следующий вид:

$$\zeta = \mathbf{b} \sin(\mathbf{k}\mathbf{n} - \omega t), \quad (16)$$

где  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{k}$  и  $\omega$  – амплитуда, волновой вектор и частота звуковой волны, соответственно. Именно предложенный вид вектора  $\mathbf{R}_n$  (15) позволяет управлять фактором Дебая–Валлера.

В первом приближении теории S-матрицы волновые функции начального и конечного состояний соответственно имеют следующий вид:

$$|\Psi_i\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{P}_i \mathbf{r} - E_i t')} \prod_{S,q} |v_{Sq}\rangle, \quad |\Psi_f\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{P}_f \mathbf{r} - E_f t')} \prod_{S,q} |v_{Sq}\rangle$$

Здесь  $\prod_{S,q} |v_{Sq}\rangle$  представляет собой волновую функцию кристаллического колебания с  $v_{Sq}^{S,q}$  фононами из ветви  $S$  и волновым вектором  $\mathbf{q}$ , а  $\mathbf{P}_i$ ,  $\mathbf{P}_f$  и  $E_i$ ,  $E_f$  – соответствующие значения вектора импульса и энергии нейтрона в начальном и конечном состояниях. Выбор волновых функций в указанном виде означает, что рассеяние нейтрона на кристалле носит упругий характер, т.е. не происходит фононного возбуждения кристалла. В разложении (10) в первом приближении амплитуда вероятности может быть вычислена с помощью следующего выражения:

$$\langle \Psi_f | U^{(1)}(t, t') | \Psi_i \rangle = (i\hbar)^{-1} \langle \Psi_f | \int_{t'}^t d\tau U_0(t, \tau) V(\tau) U_0(\tau, t') | \Psi_i \rangle. \quad (17)$$

Подставляя (12), (13), (15) в (17) и используя разложение экспоненты по бесселевым функциям  $\exp(i\alpha \sin \beta) = \sum_{s=-\infty}^{+\infty} J_s(\alpha) \exp(is\beta)$ , а затем интегрируя по  $\mathbf{r}$  и  $\square$  соответственно, для амплитуды вероятности получим

$$-\frac{2\pi\hbar A}{m} \sum_{s=-\infty}^{+\infty} J_s(\mathbf{Q}\mathbf{b}) \frac{e^{-i\Omega_s t} - e^{-i\Omega_s t'}}{\Omega_s} \sum_n e^{i(\mathbf{Q} + s\mathbf{k})\mathbf{n}} \prod_{S,q} \langle v_{Sq} | e^{i\mathbf{Q}\mathbf{e}_n} | v_{Sq} \rangle, \quad (18)$$

где введены обозначения  $\mathbf{Q} \equiv (1/\hbar)(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f)$  и  $\Omega_s \equiv (1/\hbar)(E_i - E_f + s\hbar\omega)$ .

Теперь производим квантомеханическое усреднение. Учитывая формулу

$$\langle v_s | e^{\alpha b_s + \beta b_s^\dagger} | v_s \rangle = e^{\alpha\beta \left(\frac{1}{2} + v_s\right)},$$

следующую из операторного тождества Вейля [6]

$$e^{\alpha b_s + \beta b_s^\dagger} = e^{-\alpha\beta/2} e^{\beta b_s^\dagger} e^{\alpha b_s},$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  – произвольные числа, для амплитуды вероятности окончательно получим выражение

$$-\frac{2\pi\hbar A}{m} \sum_{s=-\infty}^{+\infty} J_s(\mathbf{Q}\mathbf{b}) e^{-\gamma} \frac{e^{-i\Omega_s t} - e^{-i\Omega_s t'}}{\Omega_s} \sum_n e^{i(\mathbf{Q} + s\mathbf{k})\mathbf{n}}, \quad (19)$$

где введено обозначение

$$v \equiv \sum_{s,q} \frac{\hbar}{2MN\Omega_s(\mathbf{q})} (\mathbf{Qe}_s(\mathbf{q}))^2 \left( \frac{1}{2} + v_{sq} \right).$$

Вероятность рассеяния нейтрона от начального состояния  $|\Psi_i\rangle$  до конечного  $|\Psi_f\rangle$  имеет вид

$$W_{\mathbf{P}_f, \mathbf{P}_i} = \lim_{\Delta t \rightarrow \infty} (\partial \bar{R} / \partial (\Delta t)), \quad (20)$$

где  $R = \left| \langle \Psi_f | U^{(1)}(t, t') | \Psi_i \rangle \right|^2$  – квадрат модуля амплитуд вероятности,  $\Delta t \equiv t - t'$  – промежуток времени, в течение которого происходит рассеяние, черточка означает статистическое усреднение. Для  $\bar{R}$  получим

$$\begin{aligned} \bar{R} &= \frac{(2\pi)^2 \hbar^2 A^2}{m^2} \times \\ &\times \sum_{s,s'} J_s(\mathbf{Qb}) J_{s'}(\mathbf{Qb}) e^{-2w} \frac{e^{i(s-s')\omega t}}{\Omega_s \Omega_{s'}} \left( 1 - e^{-i\Omega_s \Delta t} - e^{i\Omega_{s'} \Delta t} + e^{-i(s-s')\omega \Delta t} \right) \sum_{n,n'} a_{ns}^* a_{n's'}. \end{aligned} \quad (21)$$

Здесь обозначено  $a_{ns} \equiv \exp(i(\mathbf{Q} + s\mathbf{k}) \cdot \mathbf{n})$ , а среднее  $w$  по ансамблю имеет вид

$$w = \bar{v} = \sum_{s,q} \frac{\hbar}{2MN\Omega_s(\mathbf{q})} (\mathbf{Qe}_s(\mathbf{q}))^2 \left( \frac{1}{2} + \bar{v}_{sq} \right),$$

и  $\bar{v}_{sq} = \left( \exp(\hbar\Omega_s(\mathbf{q})/(kT)) - 1 \right)^{-1}$  – среднее число бозонов (тепловых фононов). Усреднение по статистическому ансамблю производится по теореме Вика [8].

Для упрощения (21) учтем тот факт, что все реальные процессы, происходящие в пространстве-времени, ограничены соответствующими промежутками  $\Delta r$  и  $\Delta t$ . Ввиду того, что экспонента  $\exp(-i(s-s')\omega\Delta t)$  сильно осциллирует, естественно, что наибольшее ее значение получится при условии  $s=s'$ . Основываясь на этих рассуждениях, а также на представлении  $\delta$ -функции  $\pi\delta(X) = \lim_{L \rightarrow \infty} (\sin(LX)/X)$ , для вероятности рассеяния получим

$$W_{\mathbf{P}_f, \mathbf{P}_i} = \frac{(2\pi)^3 \hbar^2 A^2}{m^2} \sum_{s=-\infty}^{+\infty} e^{-2w} J_s^2(\mathbf{Qb}) \left| \sum_n e^{i(\mathbf{Q}+s\mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}} \right|^2 \delta(\Omega_s).$$

Здесь сумму по векторам  $\mathbf{n}$  при больших  $N$  можно заменить интегралом по правилу  $\sum_n \dots = (N/V) \int \dots d\mathbf{n}$ , где интегрирование выполняется по объему, соответствующему первой зоне Бриллюэна. Кроме того учтем также соотношение  $\delta^2(\mathbf{r}) = \left( V / (N(2\pi)^3) \right) \delta(\mathbf{r})$  для квадрата  $\delta$ -функции, где  $V/N = \mathbf{a}_1[\mathbf{a}_2\mathbf{a}_3]$  – объем элементарной ячейки прямой решетки. В итоге квадрат модуля суммы можно заменить  $\delta$ -функцией следующим образом:

$$\left| \sum_n e^{i(\mathbf{Q}+s\mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}} \right|^2 = \frac{(2\pi)^3 N}{V} \delta(\mathbf{Q} + s\mathbf{k} + \mathbf{g}),$$

где  $V$  – объем кристалла,  $\mathbf{g}$  – вектор обратной решетки, определенный как  $\mathbf{g} = g_1\mathbf{b}_1 + g_2\mathbf{b}_2 + g_3\mathbf{b}_3$  ( $g_i$  – целые неотрицательные числа,  $\mathbf{b}_i$  – элементарные

векторы обратной решетки). Окончательно для вероятности рассеяния нейтрона получим

$$W_{\mathbf{P}_f, \mathbf{P}_i} = \frac{(2\pi)^6 \hbar^4 A^2 N}{m^2 V} \sum_{s=-\infty}^{+\infty} e^{-2w} J_s^2(\mathbf{Qb}) \delta(E_i - E_f + s\hbar\omega) \delta(\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f + s\hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{g}). \quad (22)$$

Множитель  $\exp(-2w)$  – известный фактор Дебая–Валлера. Он служит мерой влияния теплового движения на наблюдаемое нарушение периодичности решетки, а  $\delta$ -функции, стоящие в последнем выражении, гласят о законах сохранения энергии и импульса. Они описывают дифракцию нейтронов в кристалле под воздействием внешней звуковой волны при вынужденном многофононном процессе испускания (поглощения) внешних фононов.

Как видно из (22) для замкнутой системы нейтрон–кристалл–звуковая волна законы сохранения энергии и импульса записываются в виде

$$E_i - E_f + s\hbar\omega = 0, \quad (23)$$

$$\mathbf{P}_i - \mathbf{P}_f + s\hbar\mathbf{k} + \hbar\mathbf{g} = 0. \quad (24)$$

В выражении (23) тепловые фононы отсутствуют, так как при получении (22) было принято, что энергетический спектр колебаний кристаллической решетки не меняется: начальное  $|\Psi_i\rangle$  и конечное  $|\Psi_f\rangle$  состояния выбраны соответственно этому предположению.

Законы сохранения (23) и (24) описывают процессы неупругого по полю рассеяния нейтронов. Число  $s$  принимает как положительные, так и отрицательные значения и показывает число звуковых фононов. Положительные значения соответствуют процессу поглощения фононов из звукового поля, а отрицательные значения – вынужденному испусканию фононов со звуковыми частотами. При этом число фононов уменьшается по мере возрастания частоты звука. Это очевидно, так как при вынужденных многофононных процессах число фононов с большими энергиями мало.

Далее, учитывая законы сохранения (23) и (24), можно записать

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{1 + (ms\omega\lambda_i^2/2\pi^2\hbar)}} \left[ 1 + \frac{ms\omega\lambda_i^2}{4\pi^2\hbar} - \frac{\lambda_i^2}{8\pi^2} (s^2k^2 + g^2 + 2s\mathbf{k}\mathbf{g}) \right], \quad (25)$$

где  $\lambda_i = 2\pi\hbar/P_i = 2\pi\hbar/\sqrt{2mE_i}$  – длина волны де-Бройля рассеивающегося нейтрона,  $\theta$  – угол рассеяния (угол между начальным и конечным направлениями импульса нейтрона).

Из выражения (25) видно, что при отсутствии поля получается условие Брэгга  $2d \sin(\theta/2) = \lambda_n$ , где  $d = 2\pi/|\mathbf{g}|$  – расстояние между атомными плоскостями. При  $\cos\theta \leq 1$  и при учете условия неотрицательности подкоренного выражения видно, что число фононов ограничено. Приведем оценки числа фононов для тепловых нейтронов при следующих значениях физических параметров: вектор обратной решетки  $g \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$ , частота гиперзвука  $\omega \sim 10^{10} \text{ Гц}$ , волновой вектор гиперзвука  $k \sim 10^5 \text{ см}^{-1}$ . Оценки показывают, что при испускании

фононов (отрицательные значения  $s$ ) может наблюдаться дифракция тепловых нейтронов. Этому случаю соответствуют значения  $|s| < 10^3$  испускаемых фононов. Угол дифракции  $\theta$  тепловых нейтронов может принимать значения от  $25^\circ$  до  $43^\circ$ , когда  $|s|$  меняется от 1 до  $10^3$ .

Отметим, что поскольку фактор Дебая–Валлера зависит от температуры, то он приводит к ослаблению упругого когерентного рассеяния для всех углов рассеяния  $\theta \neq 0$ . Величина  $w$  возрастает с ростом угла рассеяния, энергии нейтрона и температуры кристалла. При  $T \rightarrow 0$  функция  $\bar{v}_{sq}$  обращается в нуль и, следовательно, множитель  $\exp(-2w)$  принимает свое максимальное значение.

В случае, когда нейтрон рассеивается в кристалле при отсутствии внешнего звукового поля, для тяжелых ядер  $\exp(-2w) \sim 1$ , и смещение ядер из положений равновесия существенно не влияет на интенсивность когерентного рассеяния. Но в этом случае возникают затруднения, связанные с анализом структуры вещества с легкими ядрами: интенсивность рассеяния может существенно уменьшиться. Однако присутствие звуковой волны может устранить эту проблему. И при подходящем выборе параметров можно также подавлять интенсивность дифракции. Все это становится возможным, если учитывать законы сохранения. Из (24) для  $w$  имеем

$$w = \sum_{s,q} \frac{\hbar}{2MN\Omega_s(\mathbf{q})} ((s\mathbf{k} + \mathbf{g}) \mathbf{e}_s(\mathbf{q}))^2 \left( \frac{1}{2} + \bar{v}_{sq} \right). \quad (26)$$

Таким образом, как видно из выражения (26), при  $\mathbf{k} = 0$  ( $s = 0$ ), когда отсутствует звуковое поле, получается известное выражение для фактора Дебая–Валлера [9]. Из (26) становится очевидным, что даже если температура кристалла не равна нулю ( $T \neq 0$  К) и среда состоит из атомов с легкими ионами, то соответствующим выбором параметров данного звукового поля (число и волновой вектор фононов), можно как увеличить, так и подавить интенсивность когерентного рассеяния нейтронов, т.е. управлять фактором Дебая–Валлера. В зависимости от направлений векторов  $\mathbf{g}$  и  $\mathbf{k}$  интенсивность упругого рассеяния может как убывать, так и увеличиваться, а в случае  $\mathbf{g} = -s\mathbf{k}$  она приобретает свое максимальное значение. Это условие реально можно осуществить в экспериментах с гиперзвуковыми полями.

Выражаю глубокую благодарность академику А.Р. Мкртчяну и канд. физ.-мат. наук Р.Г. Петросяну за обсуждение результатов работы и полезные советы.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **G.E.Bacon**. Neutron Diffraction. Oxford, Clarendon Press, 1975; **W.Marshall, S.W.Lovesey**. Theory of Thermal Neutron Scattering. Oxford, Oxford Univ. Press, 1971.
2. **Ю.З.Нозик, Р.П.Озеров, К.Хенниг**. Нейтроны и твердое тело: структурная нейтронография, т. 1; Нейтроны и твердое тело: нейтронография магнетиков, т. 2; Нейтроны и твердое тело: нейтронная спектроскопия, т. 3. М., Атомиздат, 1979.
3. **В.К.Игнатович**. Нейтронная оптика. М., Физматлит, 2006.
4. **M.Agamalian, E.Iolin, L.Rusevich, C.J.Glinka, G.D.Wignall**. Phys. Rev. Lett., **81**, 602 (1998); **B.Sur, V.N.P.Anghel, R.B.Rogge, J.Katsaras**. Phys. Rev. B, **71**, 014105 (2005).
5. **A.R.Mkrtchyan, A.G.Hayrapetyan, B.V.Khachatryan, R.G.Petrosyan**. 27<sup>th</sup> International Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics, Yerevan, Armenia, 2008 (accepted for publication in "Physics of Atomic Nuclei").
6. **A.Messiah**. Quantum Mechanics, vol. 1,2. Amsterdam, North-Holland, 1970.
7. **W.Xu**. J. Phys.: Condensed Matter, **10**, 6105 (1998).
8. **Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц**. Электродинамика сплошных сред, М., Наука, 1982.
9. **C.Kittel**. Quantum Theory of Solids. New York, London, John Wiley and Sons, Inc., 1963; **А.С.Давыдов**. Теория твердого тела. М., Наука, 1976.

### ԲՅՈՒՐԵՂՆԵՐՈՒՄ ՉԱՅՆԱՅԻՆ ԱԼԻՔԻ ԴԱՇՏՈՒՄ ՆԵՅՏՐՈՆՆԵՐԻ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՄԱՍԻՆ

Ա.Գ. ՀԱՅՐԱՊԵՏՅԱՆ

Բյուրեղներում ձայնային ալիքի ազդեցությամբ դիտարկված է նեյտրոնների դիֆրակցիան: Բերված է նեյտրոնների ցրման հավանականությունը բյուրեղի հետ առաձգականորեն փոխազդելու դեպքում: Նեյտրոնի՝ ձայնային ֆոնոնների հետ փոխազդեցությունն ունի ոչ առաձգական բնույթ: Ցույց է տրված Դեբայի-Ուոլլերի գործոնի կառավարման հնարավորությունը:

### ON THE NEUTRON DIFFRACTION IN CRYSTALS IN THE FIELD OF SOUND WAVE

A.G. HAYRAPETYAN

The neutrons diffraction in crystals under the influence of a sound wave is considered. The neutrons scattering rate at the elastic interaction with a crystal is calculated. The scattering of neutrons on sound phonons has an inelastic nature. The possibility of tuning the Debye-Waller factor is shown.