

ДИФРАКЦИОННОЕ ИЗОБРАЖЕНИЕ ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ В СЛАБОДЕФОРМИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ

К.Г. ТРУНИ, В.Р. КОЧАРЯН*, Д.Э. БАГДАСАРЯН, А.В. ШАХВЕРДЯН

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: Vahan2@yandex.ru

(Поступила в редакцию 1 апреля 2022 г.)

Рассмотрена проблема динамической дифракции медленных нейтронов от точечного источника на пространственной решетке кристалла со слабым полем деформации. Теоретический анализ базируется на асимптотическом представлении функции Римана для пары дифференциальных уравнений Гамильтона гиперболического типа, описывающих распространение двух квазиамплитуд дифракционного волнового поля в кристаллической решетке. Выведены условия фокусировки одной из мод волнового поля в решетке. Проведен аналитический и численный анализ поведения основных параметров фокусного пятна в зависимости от расстояния источник-кристалл и параметра деформации.

1. Введение

Динамическая дифракция излучения ангстремной области длин волн является одним из важных, а иногда и единственным с точки зрения неразрушающего метода изучения решетки кристалла. Сюда входят задачи строения вещества, обнаружения и идентификации структурных и иных типов дефектов. Особый интерес представляют проблемы создания базовых элементов оптики коротковолнового излучения, таких как, зеркала, монохроматоры и коллиматоры, дифракционные и рефракционные линзы, интерферометры и др., имеющие целью формирования пучков излучений с заданными параметрами и характеристиками. Эти элементы играют важную роль в спектрометрических, дифрактометрических, томографических, в том числе компьютерных, топографических и др. применениях. В этих применениях особое значение имеет высокая чувствительность динамической дифракции коротковолнового излучения к различным нарушениям периодичности структуры пространственной решетки, обусловленных как внутренними искажениями, так и искажениями, индуцированными различными внешними воздействиями, таких как температурные, механические, ультразвуковые воздействия. Высокая чувствительность динамического рассеяния коротковолнового излучения к таким нарушениям прежде всего обусловлена высокой чувствительностью этого явления к фазам многократно рассеянных

волн, формирующих дифракционное волновое поле в решетке кристалла.

В основе базовых элементов оптики медленных нейтронов [1] лежат различные физические явления, такие как зеркальное отражение от параболических, эллиптических и др. видов [2,3] поверхностей, явление рефракции [4], малоугловое рассеяние [5], голографические решетки [6].

2. Формулировка задачи

Роль кривизны волнового фронта в формировании дифракционного поля в решетке и как результат фокусировку рентгеновских лучей в совершенном монокристалле с исходным точечным источником впервые была рассмотрена в работе [7]. При дифракции первичной волны в монокристалле формируется волновое поле, состоящее из двух мод для данного состояния поляризации излучения. Знаки кривизны фронта волновых мод противоположны и как результат одна из мод формирует расходящийся, а другой сходящийся пучок лучей. Мода со сходящим пучком лучей образует каустическую линию или фокус непосредственно под входной поверхностью кристалла, а другая мода создает общий фон на дифрактограмме [8]. Дальнейшие исследования показали [9], что фокусное пятно в кристалле сопровождается соответствующим изображением в вакууме за кристаллом. В формировании фокусного пятна существенную роль играют несколько факторов, в том числе, расстояние источник-кристалл и как будет показано ниже, параметр деформации решетки кристалла. Сходящаяся мода имеет слабый интерференционный коэффициент поглощения, а расходящаяся мода сильный коэффициент поглощения. Ситуация с медленными нейтронами с энергией порядка мэВ существенно отличается от коротковолнового рентгеновского излучения. Линейный коэффициент поглощения этих нейтронов почти на два порядка меньше чем у рентгеновского излучения и практически ничтожен [10]. Этот факт важен тем, что позволяет использовать кристаллические пластинки достаточно большой толщины. Так как глубина фокусного пятна в кристалле кроме характеристик решетки определяется также расстоянием источник-кристалл и характеристикой деформационного поля, то с изменением этого расстояния и параметра деформации можно в достаточно широком диапазоне варьировать глубину фокусировки.

Динамическая дифракция медленных или тепловых нейтронов описывается парой дифференциальных уравнений Гамильтона [11,12] гиперболического типа:

$$\frac{\partial \varphi_0}{\partial s_0} = -i\pi k \sigma_h \varphi_h, \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \varphi_h}{\partial s_h} = -i\pi k \sigma_h \varphi_0 + 2i\pi k \alpha_h \varphi_h, \quad (1.2)$$

где φ_0 и φ_h квазиамплитуды проходящих и отраженных волн, составляющих дифрагированное волновое поле медленных нейтронов, в косоугольной системе координат (s_0, s_h) , с осями, параллельными направлениям волновых векторов $\mathbf{K}_0$ и $\mathbf{K}_h$, удовлетворяющих точному условию Брэгга

$$\mathbf{K}_h = \mathbf{K}_0 + \mathbf{h}, \quad (2)$$

($\mathbf{h}$ – вектор дифракции отражающих атомных плоскостей с миллеровскими индексами (hkl)), $k = 1/\lambda$ (λ – дебройловская длина волны нейтронов), α_h – параметр локального смещения от условия Брэгга, σ_h и $\sigma_{\bar{h}}$ Фурье коэффициенты потенциала Ферми:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2\pi m_n} \sum_j b_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (3)$$

где b_j – длина рассеяния нейтрона, $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ – функция Дирака, $\mathbf{r}_j$ – радиус вектор j -го ядра среды, а суммирование ведется по всем $\mathbf{r}_j$, m_n – масса нейтрона.

Общее решение гиперболических уравнений Гамильтона строится с помощью соответствующей функции Грина-Римана $G(s_0, s_h)$ для этих уравнений [13]. В частности, квазиамплитуда отраженного в решетке волнового поля определяется как:

$$\varphi(x, z) = \int G(x - x', z - z') \varphi_i(x', z') dx', \quad (4)$$

где интегрирование проводится по сечению $z' = 0$ ($s'_0 + s'_h = 0$).

В свертке (4) исходным пучком для нашей задачи является сферическая волна от точечного источника. Из-за малости эффективной угловой ширины берегового отражения, можно ограничиться так называемым параболическим приближением [8,14], заменив сферический фронт параболическим, ограничиваясь линейным и квадратичным членами по переменному интегрирования x' .

В этой работе мы рассмотрим случай симметричного прохождения в геометрии Лауэ в решетке с деформационным полем кристалла с квадратичной зависимостью от координат:

$$\mathbf{h}\mathbf{u} = q s_0 s_h, \quad (5)$$

при условии слабой деформации:

$$q \ll \sigma \bar{\sigma}. \quad (6)$$

В этом приближении функция Грина-Римана представляется виде [8,16]

$$G(s_0, s_h) = e^{iq s_0 s_h} J_0 \left(2 \sqrt{s_0 s_h (\sigma \bar{\sigma} - iq)} \right), \quad (7)$$

где $J_0(\zeta)$ – функция Бесселя нулевого порядка. Внутри треугольника Бормана в областях, удаленных от сторон и представляющих интерес для нашей задачи

$$\sigma \bar{\sigma} s_0 s_h \gg 1 \quad (8)$$

мы можем использовать известное асимптотическое представление [15] функции Бесселя для больших значений аргумента:

$$J_0(\zeta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi \zeta}} \cos(\zeta - \pi/4), \quad (9)$$

представляющее эту асимптотику в виде суммы двух экспоненциальных функций, что соответствует представлению волнового поля как суперпозицию двух волновых мод с различными фазовыми функциями или эйконалами из (4) следует:

$$\varphi_h(x, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sqrt[4]{\frac{(\sigma\bar{\sigma}-iq)}{\sin^2 \theta_B}}} \times \int_{x+z \tan \theta_B}^{x-z \tan \theta_B} \frac{e^{iS_+(x', x, z)} e^{R_+(x', x, z)} + e^{iS_-(x', x, z)} e^{R_-(x', x, z)}}{\sqrt[4]{(z \tan \theta_B)^2 - (x - x')^2}} dx'. \quad (10)$$

В (10) эйконалы $S_{\mp}(x', x, z)$ определяются как:

$$S_{\mp}(x', x, z) = \frac{2qxx'}{\sin^2 \theta_B} + \left(\frac{k \cos^2 \theta_B}{2l} - \frac{q}{\sin^2 \theta_B} \right) x'^2 \mp \frac{\sqrt{\sigma\bar{\sigma}}}{\sin \theta_B} \sqrt{(z \tan \theta_B)^2 - (x - x')^2}, \quad (11)$$

а амплитудные функции $R_{\mp}(x', x, z)$ как:

$$R_{\mp}(x', x, z) = \mp \frac{q}{2 \sin \theta_B \sqrt{\sigma\bar{\sigma}}} \sqrt{(z \tan \theta_B)^2 - (x - x')^2}. \quad (12)$$

В формулах (10–12) совершен переход от косоугольной системы (s_0, s_h) к декартовой системе (x, z) с осями вдоль входной поверхности кристалла и внутренней нормали к этой поверхности:

$$x = (s_0 - s_h) \sin \theta_B, \quad z = (s_0 + s_h) \cos \theta_B, \quad (13)$$

(l – расстояние источник-кристалл по направлению K_0 , удовлетворяющему условию (2)).

3. Аналитический и численный анализ дифракционного поля кристалла

Очевидно, что поведение вторых производных двух эйконалов $S_{xx}^+(x', x, z)$ и $S_{xx}^-(x', x, z)$ существенно отличаются друг от друга. Если для S^+ эта производная сохраняет свой знак во всей области существования волнового поля, то для S^- этот знак меняется при прохождении через некоторую точку, где вторая производная приравнивается нулю. Это означает, что эта мода образует каустику или фокус вблизи этой области. Теперь, из совместного решения двух уравнений равенства нулю первой и второй производных эйконала $S_{xx}^-(x', x, z)$, мы имеем:

$$x = \frac{bz \tan \theta_B}{a+b} \left[1 - \left(\frac{z_F}{z} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^{\frac{3}{2}}, \quad (14)$$

где

$$a = \frac{2q}{\sin^2 \theta_B}, \quad b = \left(\frac{k \cos^2 \theta_B}{2l} - \frac{q}{\sin^2 \theta_B} \right). \quad (15)$$

Откуда для координат фокуса получаем:

$$x = 0, \quad z = z_f = \frac{\sqrt{\sigma\bar{\sigma}}}{2 \sin \theta_B \tan \theta_B \left| \frac{k \cos^2 \theta_B}{2l} - \frac{q}{\sin^2 \theta_B} \right|}. \quad (16)$$

Из (16) видно, что фокусное пятно передвигается вглубь решётки с увеличением параметра деформации q и при

$$q = \frac{k \cos^2 \theta_B \sin^2 \theta_B}{2l} \quad (17)$$

z_f становится бесконечным. Из (11) видно, что при этом выпадает квадратичный член в экспоненте, что в свою очередь означает, что знак кривизны волнового

фронта отражённой волны стремится к бесконечности и лучи распространяются по параллельным прямым. Дальнейшее увеличение q приводит к обратному перемещению фокусного пятна в сторону входной поверхности кристалла. Рассмотренное выше поведение фокусного пятна иллюстрировано на рис.1, где приведены кривые, где вторая производная эйконала $S_{xx}^-(x, z) = 0$ и их пересечение с осью z ($x = 0$).

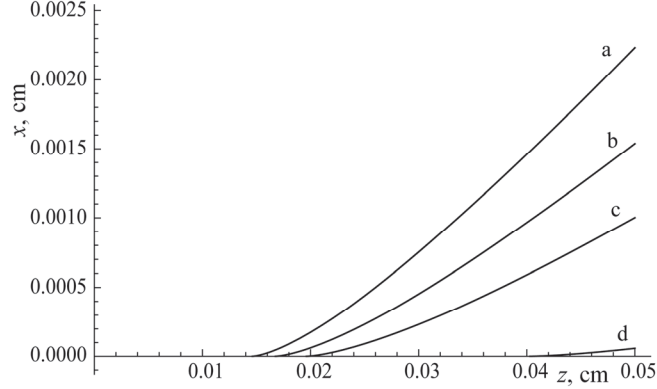


Рис.1. Распределение кривых $x = x(z)$ с $S_{xx}^-(x, z)=0$ в плоскости дифракции и их пересечение с осью z ($x = 0$) при (a) $q = 0$, (b) $q = 10 \text{ м}^{-2}$, (c) $q = 20 \text{ м}^{-2}$, (d) $q = 50 \text{ м}^{-2}$.

Дальнейший анализ проведен численным методом с помощью разработанной компьютерной программы, некоторые результаты которых приведены ниже на рис.2.

Рис.2 иллюстрируют поведение фокального пятна в зависимости от параметра деформации, в частности, перемещение фокальной точки вглубь от поверхности кристалла, при данном расстоянии от источника до кристалла. Из рис.2 видно, что в кристалле с параметром деформации $q = 10 \text{ м}^{-2}$ фокусное пятно внутри кристалла передвигается в точку $z = 0.09 \text{ см}$, а при $q = 50 \text{ м}^{-2}$ в точку $z = 0.12 \text{ см}$. Одновременно, происходит сужение фронта отраженного волнового поля. Заметим, что значение параметра деформации $q = 50 \text{ м}^{-2}$

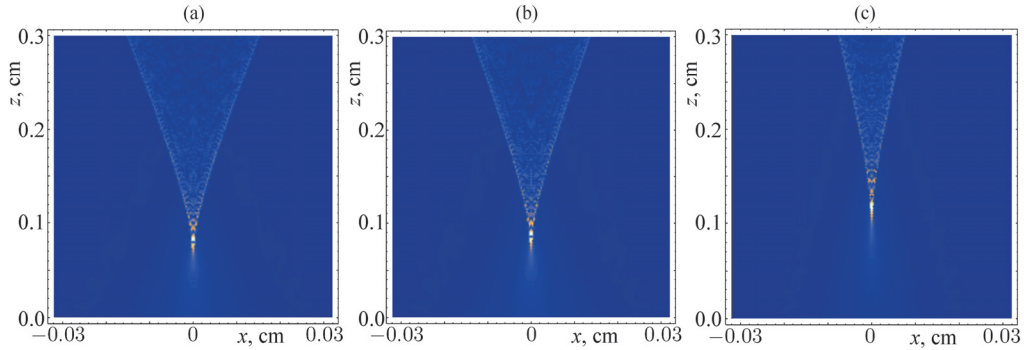


Рис.2. Распределение плотности энергии поля отраженных медленных нейтронов в плоскости дифракции. Расстояние источник–кристалл $l = 5 \text{ м}$. (a) параметр деформации $q = 0$, (b) $q = 10 \text{ м}^{-2}$, (c) $q = 50 \text{ м}^{-2}$.

сравнительно небольшое, с точки зрения слабости деформационного поля. Приближение слабого деформационного поля имеет место вплоть до $q \sim 50 \text{ м}^{-2}$. Это означает, что глубину фокусировки можно варьировать в достаточно широком интервале вплоть до нескольких см. Численные расчеты проведены также для отдельных мод волнового поля, которые подтверждают результаты теоретического анализа.

На рис.2 видны также интерференционные полосы маятникового решения (Pendelung-effect [17]) в виде V-образных полос как результат интерференции двух мод отраженного волнового поля. Вершины этих полос направлены в противоположные стороны в областях до и после фокусировки, т.е. интерференционная картина претерпевает инверсию при прохождении через фокальную плоскость. До плоскости фокусировки интерферируют сходящиеся, а за этой плоскостью расходящиеся пучки нейтронов.

4. Заключение

Сформулировано интегральное представление квазиамплитуды отраженного поля медленных нейтронов в решётке кристалла со слабым полем деформации с использованием асимптотического представления функции Грина-Римана для пары уравнений Гамильтона гиперболического типа. Детально рассмотрена задача о формировании кристаллического дифракционного поля при исходном точечном источнике. Выведены условия фокусировки одной из мод волнового поля отраженного пучка медленных нейтронов в решетке. Выведена формула для координат фокусного пятна и показано, что его глубина в кристалле зависит не только от расстояния источник-кристалл, но и от параметра деформации. Показано, что фокусное пятно передвигается вглубь решётки с увеличением параметра деформации и при некотором значении этого параметра глубина становится бесконечным. Дальнейшее увеличение параметра приводит к обратному перемещению фокусного пятна в сторону входной поверхности кристалла.

Показано, что в приближении слабой деформации наблюдаются также интерференционные полосы маятникового решения в виде V-образных полос, как результат интерференции двух мод отраженного волнового поля. Вершины этих полос направлены в противоположные стороны в областях до и после фокусировки, т.е. интерференционная картина претерпевает инверсию при прохождении через фокальную плоскость.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета по науке РА в рамках научного проекта № 21AG-1C069.

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Shimizu. Appl. Phys. A, **74**, 326 (2002).
2. T. Hosobata, N.L. Yamada, M. Hino, H. Yoshinaga, F. Nemoto, K. Hori, T. Kawai, Y. Yamagata, M. Takeda, S. Takeda. Opt. Express, **27**(19), 26807 (2019).
3. J. Guo, S. Takeda, S. Y. Morita, M. Hino, T. Oda, J. Kato, Y. Yamagata, M. Furusaka.

- Opt. Express, **22**(20), 24666 (2014).
4. **T. Shinohara, K. Hirota, T. Adachi, K. Ikeda, H.M. Shimizu, J. Suzuki, T. Oku.** Physica B, **385-386** (Part 2), 1232 (2006).
 5. **D. Liu, B. Khaykovich, M.V. Gubarev, J.L. Robertson, L. Crow, B.D. Ramsey, D.E. Moncton.** Nat. Commun., **4**, 2556 (2013).
 6. **J. Klepp, C. Pruner, Y. Tomita, P. Geltenbort, I. Drevenšek-Olenik, S. Gyergyek, J. Kohlbrecher, M. Fally.** Materials, **5**(12), 2788 (2012).
 7. **S. Homma, Y. Ando, N. Kato.** J. Phys. Soc. Japan, **21**, 1160 (1966).
 8. **A.M. Afanas'ev, V.G. Kon.** FTT, **19**, 1775 (1977) [in Russian].
 9. **L.V. Levonyan.** Letters to JTP, **7**, 269 (1981) [in Russian].
 10. **J. Als-Nielsen.** Diffraction, Refraction and Absorption of X-Rays and Neutrons: A Comparative Exposition in Neutron and Synchrotron Radiation for Condensed Matter Studies, vol. I. Springer-Verlag, 1993.
 11. **W.C. Hamilton.** Acta. Cryst., **10**, 629 (1957).
 12. **J.S. Desjardins.** Acta Cryst. A, **32**, 299 (1976).
 13. **A. Sommerfeld.** Lectures on theoretical physics, vol.6. Partial Differential Equations in Physics. New York: Academic Press. (1964).
 14. **K.G. Trouni, L.A. Arutyunyan.** Phys. Stat. Sol. (a), **92**, 369 (1985).
 15. **M. Abramovitz, I.A. Stegun.** Handbook of mathematical functions, US Government Printing Office, Washington, 1968.
 16. **K.G. Trouni, V.R. Kocharyan, G.R. Grigoryan.** J. Contemp. Phys., **47**, 87 (2012).
 17. **A. Authier.** Dynamical Theory of X-ray Diffraction. New York: Oxford University Press, 2001.

DIFFRACTION IMAGE OF A POINT SOURCE OF SLOW NEUTRONS IN A WEAKLY DEFORMED CRYSTAL

K.G. TROUNI, V.R. KOCHARYAN, D.E. BAGHDASARYAN, A.V. SHAHVERDYAN

The problem of dynamic diffraction of slow neutrons from a point source on the spatial lattice of a crystal with a weak deformation field is considered. The study based on the asymptotic representation of the Green-Riemann function for a pair of Hamilton's equations of hyperbolic type and describing the propagation of quasi-amplitudes of slow neutrons diffracted waves in a crystal lattice. The conditions for focusing one of the wave modes inside the crystal considered. The main parameters of the focal spots inside of lattice investigated depending on the distance between the source of slow neutrons and crystal. The behavior of focal spots from the parameter of the deformation field also analyzed in detail.