Эффект аномального поглощения нейтронов, дифрагирующих по Лауэ, при углах Брэгга, близких к $\pi/2$

Е. О. Вежлев^{*+1}, В. В. Воронин^{*}, И. А. Кузнецов^{*}, С. Ю. Семенихин^{*}, В. В. Федоров^{*+}

* Петербургский институт ядерной физики им. Константинова, 188300 Гатчина, Россия

+ С.-Петербургский государственный политехнический университет, 195251 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 16 мая 2012 г.

Проведено прямое экспериментальное наблюдение эффекта аномального поглощения нейтронов при дифракции по Лауэ в высокосовершенном монокристалле кремния с размерами ~ 200 мм при углах Брэгга, близких к $\pi/2$. Показано, что при дифракции на плоскости (220) длина поглощения нейтрона может составлять несколько метров, что почти на порядок превосходит среднюю длину поглощения нейтронов той же самой длины волны. Данное обстоятельство позволяет исследовать эффекты, возникающие при дифракции по Лауэ, при углах Брэгга вплоть до 88° при размерах кристалла ~ 200 мм.

1.Введение. В рамках подготовки эксперимента по проверке эквивалентности гравитационной и инертной масс нейтрона кристалл-дифракционным методом [1, 2] было проведено детальное исследование дифракции нейтрона по Лауэ при углах Брэгга, близких к $\pi/2$, в толстом (220 мм) высокосовершенном монокристалле кремния.

В случае дифракции по Лауэ (на прохождение) хорошо известен эффект дифракционного усиления, заключающийся в том, что при малом изменении направления движения падающей частицы (или гаммакванта) в пределах брэгговской ширины направление движения частицы внутри кристалла изменяется на угол Брэгга. Поскольку угловая ширина отражения составляет обычно несколько угловых секунд при угле Брэгга $\sim 45^{\circ}$, коэффициент такого дифракционного усиления может достигать $\sim 10^4 - 10^5$. Этот эффект детально исследовался Като, который построил теорию дифракции рентгеновских лучей в слабодеформированных кристаллах [3]. Для нейтронов данный эффект был экспериментально обнаружен в работе [4]. Недавно было экспериментально доказано существование дополнительного усиления эффектов воздействия на нейтрон в кристалле. Оно связано с предсказанным в [5] и экспериментально обнаруженным в [6] эффектом "замедления" нейтрона в кристалле при дифракции по Лауэ при углах Брэгга, близких к $\pi/2$. Данный эффект приводит к тому, что время пребывания дифрагирующего нейтрона в кристалле оказывается пропорциональным $an heta_{
m B}$ и может быть увеличено более чем на порядок при углах дифракции, близких к 90°, по сравнению с $\theta_{\rm B} \sim 45^{\circ}$ [6]. В совокупности данные эффекты могут дать фактор дифракционного усиления малых воздействий на дифрагирующий нейтрон на уровне 10⁹ по сравнению со свободным нейтроном [1]. Это открывает новые возможности по исследованию малых сил, действующих на нейтрон.

В эксперименте по проверке эквивалентности гравитационной и инертной масс нейтрона [2] предложено использовать двухкристальную схему дифракции в совершенном монокристалле кремния с размерами $\oslash 150 \times 220$ мм³. Идея эксперимента основана на прямой коллимации нейтронного пучка двумя щелями на входных поверхностях первого и второго кристаллов с последующим сканированием пространственного смещения нейтронного пучка по выходной грани второго кристалла. Наличие даже небольшой внешней возмущающей силы должно привести к искривлению "траектории" нейтрона в кристалле. (Здесь и далее под траекторией нейтрона мы понимаем траекторию Като, касательная к которой в каждой точке определяет направление плотности потока нейтронов в кристалле [3].) Для дифрагирующего нейтрона присутствие такой силы эквивалентно некоторой деформации кристалла (изгибу кристаллографической плоскости и/или изменению межплоскостного расстояния), см. [7, 8]. При этом произойдет смещение пучка на выходной поверхности второго кристалла относительно первоначального положения, величину которого и предлагается измерять в эксперименте.

При дифракции по Лауэ для углов Брэгга, близких к $\pi/2$, существенную роль начинает играть эффект, обусловленный различным поглощением в кристалле нейтронных волн, отвечающих разным ветвям дисперсионной поверхности и имеющих, соответственно, разные симметрии (эффект Бормана) (см., например, [9, 10]). Он впервые наблюдался Г. Борманом [11]

¹⁾e-mail: vezhlev@pnpi.spb.ru

для рентгеновских лучей как эффект аномального прохождения лучей через толстый кристалл в условиях дифракции. Для нейтронов эффект аномального прохождения впервые экспериментально наблюдался Ноулсом [12] (см. также [13]). Аналогичный эффект при дифракции нейтронов, имеющих энергии, близкие к резонансным [14, 15], в кристаллах промежуточной толщины наблюдался в работах [16, 17].

Забегая вперед, отметим, что наличие эффекта аномального прохождения (т.е. существенно более слабого поглощения одной из нейтронных волн) дает возможность проводить эксперименты при больших толщинах рабочих кристаллов (> 200 мм) и больших углах дифракции (вплоть до 88°). Это позволяет значительно увеличить чувствительность предлагаемого метода к малым воздействиям на нейтрон.

2. Распространение нейтронных волн в совершенном кристалле. Влияние поглощения. Рассмотрим процесс дифракции по Лауэ в совершенном кристалле. В силу периодичности потенциала взаимодействия нейтрона с кристаллом можно провести его разложение по векторам обратной решетки g [9], т.е. представить его в виде суммы потенциалов всевозможных кристаллографических плоскостей:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{g} V_{\mathbf{g}} \exp(i\mathbf{g}\mathbf{r}) = V_0 + \sum_{g} 2v_{\mathbf{g}} \cos\left(\mathbf{g}\mathbf{r} + \phi_g\right).$$
(1)

Здесь учтено, что, в силу вещественности ядерного потенциала, $V_{\mathbf{g}} = V_{-\mathbf{g}}^*$. Если кристалл обладает центром симметрии, то поместив в него начало координат, будем иметь $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$ и тем самым $V_g = V_g^*$, т.е. в этом случае все фазы ϕ_g обращаются в нуль, а V_g становятся вещественными.

При выполнении условия Брэгга для одной из систем кристаллографических плоскостей, характеризуемой вектором обратной решетки \mathbf{g} , с очень хорошей точностью можно использовать двухволновое приближение. В этом приближении решения волнового уравнения Шредингера внутри кристалла представляют собой две блоховские волны разного типа, являющиеся ортогональными суперпозициями прямой и отраженной кристаллографическими плоскостями волн: $|\mathbf{k}\rangle$ и $|\mathbf{k} + \mathbf{g}\rangle$ (рис. 1). При дифракции по Лауэ в кристалле возбуждаются оба типа волн, и волновая функция представляет собой их суперпозицию.

При точном выполнении условия Брэгга эти волны возбуждаются в кристалле с одинаковыми амплитудами и являются симметричной и антисимметричной комбинациями волн $|\mathbf{k}\rangle$ и $|\mathbf{k} + \mathbf{g}\rangle$ (см., например, [9]):

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \exp(i\mathbf{k}^{(1)}\mathbf{r}) + \exp[i(\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{g})\mathbf{r}] \} = \dots$$

$$\dots = \sqrt{2}\cos(\mathbf{gr}/2)\exp[i(\mathbf{k}^{(1)} + \mathbf{g}/2)\mathbf{r}],$$

$$\psi^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\exp(i\mathbf{k}^{(2)}\mathbf{r}) - \exp[i(\mathbf{k}^{(2)} + \mathbf{g})\mathbf{r}] \} = \dots$$

$$\dots = i\sqrt{2}\sin(\mathbf{gr}/2)\exp[i(\mathbf{k}^{(2)} + \mathbf{g}/2)\mathbf{r}].$$

(2)

Из выражений для волновых функций (2) следует, что нейтроны в этих состояниях распространяются вдоль кристаллографических плоскостей, образуя стоячие волны в перпендикулярном направлении



Рис. 1. Схема дифракции по Лауэ в ограниченном кристалле. На входной и выходной гранях кристалла расположены коллимирующие щели. Здесь **j**₁ и **j**₂ – направления распространения плотности потока нейтронов для разных типов блоховских волн

(направлении вектора **g**). При этом нейтроны в состоянии $\psi^{(1)}$ сконцентрированы преимущественно в максимумах ядерного потенциала (1):

$$\left|\psi^{(1)}\right|^2 = 1 + \cos\left(\mathbf{gr}\right),\tag{3}$$

а в состоянии $\psi^{(2)}$ – в его минимумах (рис. 1):

$$\psi^{(2)}\Big|^2 = 1 - \cos\left(\mathbf{gr}\right).$$
 (4)

Следовательно, нейтроны движутся в разных потенциалах и имеют разные кинетические энергии (волновые вектора $\mathbf{k}^{(1)}$ и $\mathbf{k}^{(2)}$ принадлежат разным ветвям дисперсионной поверхности [9]).

При наличии поглощения разная симметрия волн приведет к тому, что нейтроны в состоянии $\psi^{(2)}$ будут поглощаться меньше нейтронов, находящихся в состоянии $\psi^{(1)}$. Учет поглощения осуществляется путем введения мнимой части в потенциал взаимодействия нейтрона с кристаллом: $V(\mathbf{r}) + iV'(\mathbf{r})$. Следует отметить, что мы рассматриваем случай $V(\mathbf{r}) \gg$ $\gg V'(\mathbf{r})$, т.е. пренебрегаем сдвигом фазы нейтронной волны за счет наличия поглощения. В таком случае мнимую часть также можно представить в виде фурье-разложения по векторам обратной решетки с соответствующими гармониками разложения v_0' и v_g' . С учетом поглощения волновые функции нейтрона в кристалле можно записать в следующем виде:

$$\phi^{(1,2)} = \psi^{(1,2)} \exp\left[-\frac{v_0'L}{\hbar \mathbf{v}_{\parallel}} \left(1 \pm \frac{v_g'}{v_0'}\right)\right], \qquad (5)$$

где v_0' – средняя величина поглощающей части потенциала, v_{g}' – амплитуда *g*-гармоники этой части потенциала; *L* – толщина кристалла, $\mathbf{v}_{\parallel} = \mathbf{v} \cos \theta_{\rm B}$ – компонента скорости нейтрона параллельная кристаллографическим плоскостям. Удобно ввести величину коэффициента поглощения $\mu_0 = 2v'/\hbar\mathbf{v}$ и определить безразмерный параметр $\varepsilon_g = v'_g/v'_0$, с помощью которого можно характеризовать величину эффекта Бормана для данной системы кристаллографических плоскостей. Тогда волновые функции перепишутся следующим образом:

$$\phi^{(1,2)} = \psi^{(1,2)} \exp\left[-\frac{\mu_0 L}{2\cos\theta_{\rm B}}(1\pm\varepsilon_g)\right].$$
 (6)

При точном выполнении условия Брэгга амплитуды блоховских волн с учетом поглощения будут иметь следующий вид:

$$|a_0^{(1,2)}| = |a_g^{(1,2)}| = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left[-\frac{\mu_0 L_{\text{eff}}}{2} (1 \pm \varepsilon_g)\right], \quad (7)$$

где $L_{
m eff} = L/\cos heta_{
m B}$ — эффективная толщина кристалла.

Из приведенного рассмотрения следует, что различие в поглощении двух волн определяется величиной ε_g , которая лежит в пределах $0 < \varepsilon_g < 1$. В частности, существуют кристаллографические плоскости, для которых структурный фактор отражения тождественно равен единице. Тогда возникает ситуация, в которой $\varepsilon_g \sim 1$, а отличие ε_g от единицы обусловлено исключительно тепловыми колебаниями атомов (фактором Дебая). В таком случае одна из волн, возбуждаемых в кристалле, имеет практически нулевое поглощение. Это позволяет исследовать дифракцию в очень больших монокристаллах при углах дифракции, близких к $\pi/2$, т.е. $\cos \theta_{\rm B} \to 0$ и $L_{\rm eff} \to \infty$.

3. Экспериментальные результаты. Эксперимент проводился на втором горизонтальном пучке реактора ВВР-М (ПИЯФ, Гатчина). Исследовалась дифракция нейтронов по Лауэ при углах Брэгга, близких к $\pi/2$, на системе кристаллографических плоскостей (220) (межплоскостное расстояние

Письма в ЖЭТФ том 96 вып. 1-2 2012

 $d = 1.92 \cdot 10^{-8}$ см) монокристалла кремния с размерами $\oslash 150 \times 150 \times 220$ мм³, выращенного методом бестигельной зонной плавки, с удельным сопротивлением $\rho > 10^3$ Ом·см, что соответствует примеси фосфора $n_{pl} < 10^{13}$ см⁻³. Использованный монокристалл имеет поперечный разрез на половине толщины для возможности проведения исследований по двухкристальной схеме (рис. 2).



Рис. 2. Двухкристальная схема дифракции по Лауэ. На входных и выходных гранях кристаллов расположены коллимирующие щели. Здесь \mathbf{j}_1 и \mathbf{j}_2 – направления распространения плотности потока нейтронов для разных типов блоховских волн в первом, а $\mathbf{j}_{i\to j}$ (i, j = 1, 2) – во втором кристалле

Коллимация нейтронного пучка осуществляется двумя щелями на входной поверхности и в разрезе кристалла. Подвижная щель, расположенная на выходной грани, дает возможность сканировать пространственное смещение пучка (рис. 2), что планируется использовать для эксперимента по проверке слабого принципа эквивалентности для нейтрона [2]. Из рис. 2 видно, что волны $\psi^{(1
ightarrow 2)}$ и $\psi^{(2
ightarrow 1)}$ фокусируются на выходной грани кристалла. Другими словами, половина интенсивности продифрагировавшего пучка, фокусируясь, дает изображение щели, поставленной на входной грани кристалла. Такое явление называют эффектом дифракционной фокусировки [18, 19]. Первоначально этот эффект планировалось использовать для эксперимента по проверке слабого принципа эквивалентности для нейтрона. Однако предпочтение было отдано схеме эксперимента с прямой коллимацией пучка и возможностью непосредственного сканирования смещения пучка по выходной грани кристалла под воздействием внешней силы. Такая реализация кажется нам более привлекательной в силу того, что величина самого смещения

на выходной грани кристалла может быть в два раза больше [20]. Рабочий кристалл был заключен в термостат для минимизации эффекта деформации кристалла, вызванного возможным появлением температурных градиентов, что приводит к вариациям межплоскостного расстояния по объему. Используемый термостат обеспечивает стабильность поддержания температуры кристалла с точностью ≈ 0.01 K/сут. При этом градиент межплоскостного расстояния в кристалле не превышает 10^{-12} см⁻¹ [20], пренебрежимо мало влияя на интенсивность подифрагировавшего пучка.

В эксперименте снимались зависимости интенсивности продифрагировавших нейтронов от угла Брэгга для однокристальной и двухкристальной схем дифракции по Лауэ (рис. 3). В данной геометрии экс-



Рис. 3. Зависимости интенсивности от угла Брэгга для однокристальной и двухкристальной схем дифракции по Лауэ в кристалле кремния. Плоскость отражения (220). Размер кристалла L = 220 мм

перимента регистрировались нейтроны, продифрагировавшие в кристалле и вылетающие в направлении прямого пучка.

Теоретическая зависимость рассчитана для длины поглощения в кремнии $L_{abs} = 40$ см с учетом разного поглощения двух блоховских волн (5). Коэффициент поглощения для блоховской волны $\phi^{(1)}$, полученный из эксперимента, составляет

$$\mu_1 = \mu_0 (1 + \varepsilon_{\mathbf{g}}^{220}) = 0.05 \text{ cm}^{-1}.$$

К сожалению, из-за относительно малой по сравнению с длиной поглощения волны второго типа толщины используемого кристалла (220 мм) была получена лишь верхняя граница на значение коэффициента поглощения для этой волны:

$$\mu_2 = \mu_0 (1 - arepsilon_{f g}^{220}) < 0.003 \ {
m cm}^{-1}.$$

Тем не менее даже такое ограничение говорит о том, что для волны $\phi^{(2)}$ длина поглощения нейтрона, дифрагирующего на плоскости (220) кристалла кремния, как минимум на порядок превосходит среднюю длину поглощения нейтрона в кремнии ($L_{abs} = 40 \,\mathrm{cm}$, $\mu_0 = 0.025 \,\mathrm{cm}^{-1}$) и составляет $L_{abs}^{(2)} > 300 \,\mathrm{cm}$. Величина параметра $\varepsilon_{220} > 0.9$ свидетельствует об очень сильном эффекте Бормана для этой системы плоскостей. Она не противоречит теоретическому предсказанию ($\varepsilon_{220} \simeq 0.97$) для данных условий проведения эксперимента.

На верхней оси рис. 3 приведена эффективная толщина кристалла $L_{\rm eff} = L/\cos\theta_{\rm B}$, которая достигает 6 м при угле Брэгга, равном 88°. Кроме того, на рис. 3 приведена расчетная зависимость интенсивности от угла Брэгга без учета эффекта аномального прохождения. Видно, что в этом случае при углах Брэгга, больших 84°, интенсивность практически равна нулю. В расчетах же с учетом эффекта аномального похождения предсказывается заметная интенсивность вплоть до угла Брэгга в 88°, что и подтверждается экспериментально.

Зависимость от угла Брэгга отношения интенсивностей для однокристальной и двухкристальной схем дифракции показана на рис. 4. Важно отметить, что



Рис. 4. Зависимость отношения интенсивностей для однокристальной и двухкристальной схем дифракции по Лауэ в кристалле кремния от угла Брэгга. Сплошной линией показана теоретическая зависимость

с учетом эффекта двухкристальной фокусировки [18] и эффекта аномального прохождения теория предсказывает выход кривой на плато в 1/2 при больших углах дифракции, что соответствует ситуации, когда выживает только слабопоглощаемая волна $\phi^{(2)}$, а

Письма в ЖЭТФ том 96 вып. 1-2 2012

вклад других волн пренебрежимо мал. Таким образом, экспериментально измеренная зависимость с рис. 4 является еще одним подтверждением правильного описания процесса дифракции нейтронов при больших углах Брэгга.

4. Заключение. Нами проведено исследование дифракции нейтронов по Лауэ в кристалле кремния с размером L = 220 мм при углах Брэгга, близких к $\pi/2$. Показано, что для плоскости (220) эффект аномального поглощения приводит к тому, что длина поглощения одной из блоховских волн, возбуждаемых в кристалле, как минимум почти на порядок превосходит среднюю величину (длина поглощения для этой волны $L_2 > 300$ см, в то время как $L_{abs} = 40$ см). Данное обстоятельство в совокупности с ранее обнаруженными явлением дифракционного усиления и эффектом "замедления" в кристалле нейтрона, дифрагирующего по Лауэ при углах Брэгга, близких к $\pi/2$, открывает новые перспективы по созданию экспериментальной установки для исследования малых сил, действующих на нейтрон [1]. В частности, удается достичь углов дифракции $\theta_{\rm B} \sim (86-87)^{\circ}$. Чувствительность метода к внешней силе при таких углах примерно в 300 раз выше, чем при углах Брэгга $\sim 45^{\circ}$.

В настоящее время создается кристаллдифракционная установка для проверки эквивалентности инертной и гравитационной масс нейтрона, основанная на использовании вышеуказанных явлений. Предварительные оценки [1, 20] и тестовые эксперименты [2] показывают, что для имеющегося в наличии монокристалла кремния разрешение установки по внешней силе может достигать:

$$W_f \cong 10^{-13}$$
 эВ/см.

Это позволит достичь точности в определении отношения инертной и гравитационной масс нейтрона на уровне $\sigma(m_i/m_G) \sim 10^{-5}$, что более чем на порядок превосходит современное значение для данной величины [21]. Работа поддержана РФФИ (гранты #11-02-00188 и 11-02-12161-офи-м-2011) и программой Министерства образования и науки РФ "Развитие научного потенциала высшей школы".

- 1. В. В. Воронин, И. А. Кузнецов, Е. Г. Лапин и др., Ядерная физика 72(2), 1 (2009).
- V. V. Voronin, V. V. Fedorov, I.A. Kuznetsov et al., Physics Procedia 17, 232 (2011).
- N. Kato, Acta Cryst. 11, 885 (1958); P. P. Ewald, Acta Cryst. 11, 888 (1958).
- A. Zeilinger, C.G. Shull, M.A. Horne, and K.G. Finkelstein, Phys. Rev. Lett. 57, 3089 (1986).
- V. V. Fedorov, V. V. Voronin, and E. G. Lapin, J. Phys. G 18, 1133 (1992).
- 6. В. В. Воронин, Е. Г. Лапин, С. Ю. Семенихин, В. В. Федоров, Письма в ЖЭТФ 71, 110 (2000).
- 7. S.A. Werner, Phys. Rev. B 21, 1774 (1980).
- В. Л. Алексеев, Е. Г. Лапин, Е. К. Леушкин и др., ЖЭТФ 94, 371 (1988).
- 9. П. Хирш, А. Хови, Р. Николсон и др., Электронная микроскопия тонких кристаллов, М.: Мир, 1968.
- H. Rauch and D. Petrachek, in Neutron diffraction (ed. by H. Duchs), Berlin: Springer, 1978, p.303.
- 11. G. Borrmann, Z. Physik 42, 157 (1941).
- 12. J.W. Knowles, Acta Cryst. 9, 61 (1956).
- D. Sippel, K. Kleinstk, and G. E. R. Schulze, Phys. Lett. 14, 174 (1965).
- 14. Ю. Каган, А. М. Афанасьев, ЖЭТФ 49, 1504 (1965).
- 15. Ю. Каган, А. М. Афанасьев, ЖЭТФ 59, 271 (1966).
- С. Ш. Шильштейн, В. И. Марухин, М. Каланов и др., Письма в ЖЭТФ 12, 80 (1970).
- С. Ш. Шильштейн, В. А. Соменков, В. П. Докашенко, Письма в ЖЭТФ 13, 301 (1971).
- В. И. Инденбом, И.Ш. Слободецкий, К.Г. Труни, ЖЭТФ 66, 1110 (1974).
- J. Arthur, C. G. Shull, and A. Zeilinger, Phys. Rev. B 32, 5753 (1985).
- 20. В.В. Воронин, Ю.П. Брагинец, Е.О. Вежлев и др., Препринт ПИЯФ-2849. Гатчина, 2010, 27 с.
- 21. J. Schmiedmayer, Nucl. Instr. Meth. A 284, 59 (1989).