

Письма в ЖЭТФ, том 15, вып. 7, стр. 398 – 400 5 апреля 1972 г.

ЭЛЕКТРОННАЯ ПЛОТНОСТЬ В КРИСТАЛЛАХ ВОЛЬФРАМА ПО ДАННЫМ НЕЙТРОН-ЭЛЕКТРОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Ю. А. Александров, Р. П. Озеров, Н. В. Ранев

Из числа взаимодействий между нейтроном и атомом наиболее изучены ядерное и магнитное (в первом случае нейtron взаимодействует с ядром атома, во втором – с электронной оболочкой). Эти взаимодействия характеризуются амплитудой, по величине равной $b \sim 10^{-12} \text{ см}$.

Однако существуют взаимодействия иной природы и более слабые по величине. К их числу относится релятивистское нейtron-электронное ($n\text{-e}$) взаимодействие (см., например, [1]). Экспериментальное определение амплитуды этого процесса рассеяния $\sigma_{n\text{-e}}$ сопряжено с большими трудностями, так как этот эффект очень мал (амплитуда $n\text{-e}$ -взаимодействия по своей величине на четыре порядка меньше указанных выше, т. е. $\sigma_{n\text{-e}} \sim 10^{-16} \text{ см}$).

В работе [2] был предложен метод определения величины $\sigma_{n\text{-e}}$, основанный на измерениях интенсивности дифракционных отражений монохроматических нейтронов от монокристалла вольфрама, сильно обогащенного изотопом W^{186} : в этом случае ядерное рассеяние очень мало вследствие интерференции резонансного и потенциального рассеяния нейтронов, а магнитное рассеяние, если и существует, то не является когерентным. Предварительные результаты этих измерений приведены в [3].

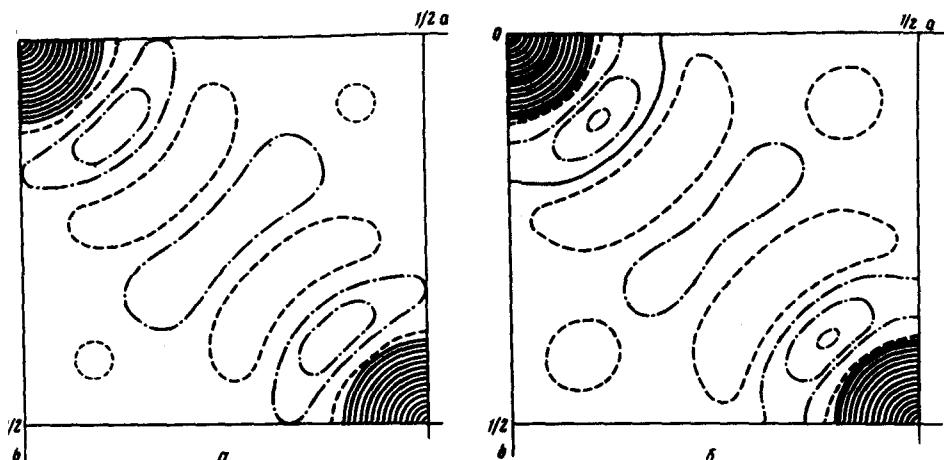


Рис. 1. Проекция электронной плотности на плоскость (001) в кристалле вольфрама: *а* – по экспериментальным нейтронографическим данным, *б* – по вычисленным $F(hk0)$ с использованием рентгеновской атомной кривой. Пунктиром показан нулевой уровень, штрих-пунктиром – области "отрицательной" электронной плотности

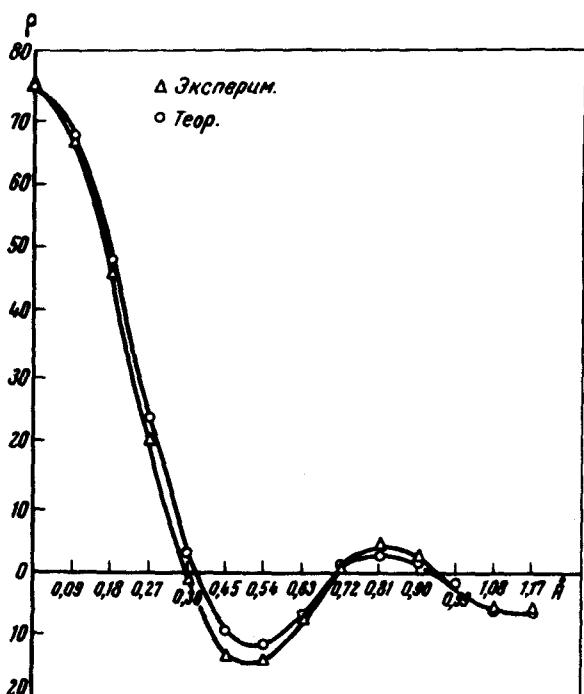


Рис. 2. Зависимость электронной плотности в кристалле вольфрама от расстояния в направлении [110], по экспериментальным данным рассеяния нейтронов и расчетным рентгеновским данным

Мы использовали значения интенсивности отражений нейтронов от всех плоскостей зоны $[00\ell]$ монокристалла вольфрама, обогащенного до 90,7% изотопом W^{186} , для построения распределения электронной плотности в кристалле. В связи с тем, что ρe – рассеяние нейтронов атомом характеризуется той же угловой зависимостью,

что и рассеяние рентгеновских лучей (ибо геометрические соотношения в обоих случаях предполагаются полностью идентичными) распределение электронной плотности, полученное этими двумя методами, должно быть одинаковым.

Интенсивности отражений измерялись на монокристальной установке на реакторе ВВР-Ц филиала НИФХИ им. Л.Я.Карпова [4]. Были использованы монохроматические нейтроны с длиной волны $\lambda = 1,145 \text{ \AA}$. От сферического образца W^{186} диаметром 5,5 мм в пределах $\sin \theta / \lambda < 0,85$ было примерно 44 рефлекса, из которых независимыми являются 8.

Интенсивности пересчитывались к структурным амплитудам обычным способом с учетом поглощения с $\mu R = 0,39$, при тепловом изотропном факторе $B = 0,17 \text{ \AA}^2$ [5]. По этим данным построена проекция электронной плотности на плоскость (001), приведенная на рис. 1, а.

Естественно, при использовании такого малого числа отражений на картину электронной плотности очень большое влияние будет оказывать эффект обрыва ряда. Для того, чтобы оценить его влияние была построена аналогичная рентгеновская проекция: коэффициентами ряда Фурье были взяты теоретические структурные амплитуды, посчитанные для известной структуры вольфрама с использованием f_w – кривой из [6]; при этом ряд был искусственно оборван на восьмом члене. Полученная проекция приведена на рис. 1, б. Сравнение зависимости электронной плотности от расстояния в направлении [110] для указанных двух случаев приведено на рис. 2.

Полная идентичность картин показывает, что полученное по данным не-взаимодействия Фурье-преобразование действительно отражает распределение электронной плотности в кристалле.

Научно-исследовательский
физико-химический институт
им. Л.Я.Карпова

Поступила в редакцию
29 февраля 1972 г.

Литература

- [1] И.И.Гуревич, Л.В.Тарасов. Физика нейtronов низких энергий, М., Изд. Наука, 1965, стр. 258
- [2] Ю.А.Александров. Препринт ОИЯИ 3-3442 Дубна, 1967.
- [3] Ю.А.Александров. Препринт ОИЯИ РЗ-4783, Дубна, 1969; ЭЧАЯ, М., Атомиздат, 1, 547, 1971.
- [4] Т.С.Зимин, И.Р.Карпович, А.Н.Кшнякина, С.Д.Прокудин, Р.П.Озеров, И.Е.Раниев, С.В.Киселев, И.Д.Датт. Аппаратура и методы рентгеновского анализа, вып. IV, СКБ РА, Л., 1969, стр. 14.
- [5] Ю.А.Александров, А.М.Балагуров, Г.С.Самосват, Л.Е.Фыкин. Препринт ОИЯИ Р14-5358, Дубна, 1970.
- [6] International Tables of X-ray Crystallography, The Kynoch Press, Birmingham, England, 3, 202, 1962.