

НОБЕЛЕВСКИЕ ЛЕКЦИИ ПО ФИЗИКЕ — 1994

## Спектроскопия медленных нейтронов и Великий Атлас физического мира

Б.Н. Брукхауз

(Нобелевская лекция. Стокгольм, 8 декабря 1994 г.)

PACS numbers: 29.30.Hs

12 октября 1994 г. по телефону из Стокгольма меня оповестили, что мне предоставится честь прочитать Нобелевскую лекцию, за что я благодарю всех тех, кто принял участие в организации этого грандиозного и неожиданного события в моей жизни. Перед лекцией мне нужно было вернуться назад в прошлое — лет на 30, а то и 45 — сначала в своих воспоминаниях, а потом сквозь беспорядок записей в моем архиве и книг в моей библиотеке. Лекция состоялась 8 декабря 1994 г. (и позже несколько раз повторялась). Этот печатный ее вариант освещает те же вопросы (возможно, иногда в другом порядке) и включает несколько добавлений, подготовить которые к устной лекции не было времени.

В августе 1950 г., когда я был зачислен на Физический факультет ядерной лаборатории в Челк-Ривере, уже прошло 18 лет с момента обнаружения испускания нейтронов в некоторых радиоактивных процессах и 14 лет с тех пор, когда было подтверждено предположение о том, что нейтроны должны проявлять корпскулярно-волновые свойства. В библиотеках имелось довольно много литературы по этим вопросам, и все же не настолько много, чтобы всю имеющуюся в наличии литературу не мог прочесть один человек. Были проведены важные измерения полных сечений рассеяния, в которых использовались пучки нейтронов, генерируемые циклотронами. Имелись тестовые реакторы на основе самоподдерживающейся реакции деления урановых ядер, вызванной потоком нейтронов, а также полномасштабные установки, дающие мощные пучки как медленных, так и быстрых нейтронов. Медленные нейтроны от этих реакторов уже использовались в некоторых лабораториях (включая Челк-Ривер) для изучения кристаллов и других веществ. Особенно важными представлялись исследования Е.О. Воллана и К.Дж. Шулля из Национальной лаборатории в Окридже — в них впервые был изучен ряд новых явлений и уже представлены

результаты измерений рассеивающей способности нейтронов для значительного числа элементов. История этих исследований содержится в лекции Клиффорда Шулля — моего старшего коллеги и также лауреата Нобелевской премии за 1994 г. по физике.

К 1951 г. было проведено несколько экспериментов по изучению упругого рассеяния монохроматических медленных нейтронов на образцах, имеющих структуру порошковых кристаллов (нейтронный аналог дифракционных картин Дебая–Шеррера для рентгеновского рассеяния). Они прояснили понимание кристаллографической структуры этих веществ. Было даже несколько работ по исследованию углового распределения при рассеянии медленных нейтронов на ряде жидких и газообразных образцов. И, что особенно важно, был продемонстрирован факт рассеяния нейтронов на кристаллических веществах, содержащих атомы с ненулевым магнитным моментом, и определены некоторые магнитные характеристики. Но вот тепловое диффузное рассеяние, существование которого предсказывалось теорией, было описано лишь как полное сечение падающих нейтронов с большой длиной волны (не допускающей возможности брэгговского рассеяния). Не было никаких спектрометрических измерений, хотя соответствующая теория существовала, а явление замедления нейтронов свидетельствовало о том, что при одиночном рассеянии должны иметь место скачки энергии.

Реактор NRX ("колода") лаборатории Челк-Ривера, по тем временам очень мощный, давал возможность параллельно работать над несколькими экспериментами, в основном по ядерной физике. Наряду с множеством установок по ядерной физике и физике нейтронов использовался и двойной порошковый дифрактометр, сконструированный доктором Дональдом Херстом и его коллегами. Оборудование имело внушительные размеры, что обусловлено необходимостью защиты от быстрых нейтронов, сопровождающих пучки медленных нейтронов (один пучок нам, другой соседу), защиты как биологической, так и установки от внешнего фона.

Нужно еще помнить, что многих вещей, которые современные экспериментаторы воспринимают как должное, тогда было не достать — ни на рынке, ни где бы то

Берtram N. Брукхауз (Bertram N. Brockhouse). Макмастерский университет, физический факультет, Гамильтон, ONT, L8S 4M1  
Канада

ни было. Электронные счетчики были еще на стадии внутренних разработок, записывающие устройства — в основном аналоговые, да и те трудно найти. Первая вычислительная машина поступила в Челк-Ривер в 1954 г., занимала целую большую комнату и работала на ламповой электронике (никаких полупроводников!). Доступные монокристаллы были в основном природного происхождения, хотя крупные слитки NaCl и других щелочных галогенидов производились для нужд инфракрасной спектрометрии и на рынке имелись. Чего было в избытке — так это возможностей для исследований. Начиная эксперимент, можно было быть уверенными — это будет нечто новое, или, на худой конец, повторение недавнего, но никогда — что-то тривиальное.

### **Нейtron и его применения**

В 1982 г. в Кембридже проводилась конференция в честь 50-летия открытия свободного нейтрона Джеймсом Чедвиком. В списке ее трудов [1] есть отчеты об исследованиях, порожденных этим событием, и историю этих исследований. Кроме общественно ощущимых следствий открытия нейтрона — милитаризации и освоения нового источника энергии, кроме применений в ядерной медицине, ядерной физике и химии, оно дало жизнь ряду новых направлений в науке.

Эти направления включают исследования нейтронов, рожденных в ядерных реакциях ("быстрых" нейтронов) с энергиями обычно в несколько МэВ, которым затем дали "замедлиться" в результате многократных столкновений с легкими атомными ядрами и прийти к квазивесенному распределению с температурой чуть выше температуры замедлителя (часто воды с температурой немного выше комнатной). Небольшая трубка в кожухе реактора подает в лабораторию экспериментаторов пучок быстрых, умеренных и медленных нейтронов.

После отсеивания нежелательных быстрых нейтронов отчетливо выраженные пучки "медленных" нейтронов находят разнообразное применение в исследованиях образцов различных материалов, помещенных в эти пучки (или вторичные нейтронные пучки, полученные из первичных). Ключевые слова, которыми традиционно именуют такие исследования — это изучение рассеяния (медленных) нейтронов, или нейтронная дифракция. Рассеяние может быть упругим и неупругим; в последнем случае эксперименты могут включать измерения потерь энергии нейтронов при рассеянии на данном образце, для этого часто используют термин "нейтронная спектрометрия" (спектрометрия медленных нейтронов). Если энергии падающих нейтронов гораздо меньше той, которую они имели бы, находясь в равновесном состоянии при комнатной температуре (0,025 эВ), их обычно называют "холодными нейтронами". Медленные нейтроны имеют энергию от милли-электрон-вольт до нескольких десятых электрон-вольт, тем самым, их длина волны измеряется в пределах от 10 ангстрем или больше до десятых долей ангстрема. То, что нейтроны, с одной стороны, имеют энергию порядка характерных квантовых энергий в конденсированной среде, а с другой, — длину волны порядка межатомных расстояний, имеет огромное значение. Есть еще ряд удачных обстоятельств: скорость нейтронов (сотни метров в секунду) приемлема для механических измере-

ний. Во многие материалы нейтроны проникают довольно глубоко, прежде чем рассеяться или быть захваченными: это позволяет делать с их помощью трюки, невозможные ни с каким другим видом излучения.

В представленной в конце лекции библиографии широко освещены различные направления деятельности в этой области: нейтронная оптика, нейтронная дифракция и нейтронная спектрометрия, и все, что потенциально может иметь отношение к ядерному и/или магнитному рассеянию. В сборнике [2] "Пятьдесят лет дифракции нейтронов" есть множество статей, содержащих различные точки зрения и написанных 35 авторами (включая доктора Шулля и меня), а также факсимильные издания самых первых работ 1936 г. Гораздо более обширная библиография статей до 1974 г., составленная Ларозом и Вандервалем [17], свидетельствует о значительном ежегодном приросте публикаций по этой теме — от приблизительно 50 в 1950-х годах до почти 800 в 1971 г. и, без сомнения, гораздо большем их числе в последующие годы.

Таким образом, область расширилась до таких границ, что одному человеку, и даже группе, не уследить за тем, что сделано или что напечатано. Для большего объема литературы по всей науке в целом или по физике в целом это верно по определению: никто, совсем никто, не может быть полностью уверенным в том, что нет каких-то конкретных результатов, относящихся к его проекту. Это неизбежно, а физика вместе с техникой шаг за шагом продвигаются в будущее; однако состояние дел и прогресс в исследованиях определяются наличием или отсутствием конкретных технологий на открытом рынке. Нейтронная спектроскопия не смогла бы встать на ноги до тех пор, пока источники нейтронов по какой-то причине не стали доступными. Исследования доктора Шулля, мои исследования, исследования наших коллег были побочным продуктом механизма, запущенного в движение совсем с другим замыслом.

### **Великий Атлас**

Вот здесь и открывается перед нами Великий Атлас — многообразие научной литературы, отражающей современное состояние науки. Атлас имеет собственную историю, но в себе содержит лишь исторические факты и исторические теории. В Великом Атласе есть "малый атлас", включающий наиболее достоверные, по современным понятиям, представления о земной географии и геологии и общепринятые в данный момент рецепты из физики и химии. Так, в него входят как "карты" мира, в котором мы живем, так и воображаемые карты, которые лишь могут оказаться реальностью: карты, связывающие наши восприятия объектов (наблюдения этих объектов можно назвать обобщенной географией) с другими восприятиями посредством понятий теории (которую можно называть обобщенной геологией). Восприятия — это данные, полученные нашими органами чувств: число делений на линейке, контуры на фотографии и т.п. Понятия — это имена, которыми оперирует соответствующая теория. Нужно, однако, помнить, что восприятия сами базируются на теории: за фотографией стоит теория фотографии, да и сам фотограф.

Наблюдения (как и теории) — продукт работы людей, которых называют учеными. Наблюдатель (как и теоретик) делает свое дело открыто и докладывает о своих

результатах в форме, позволяющей любому повторить их. Карты Великого Атласа может проверить каждый — это научные карты и считается, что они созданы людьми, имеющими право на собственную точку зрения по данному вопросу. Можно ли считать конкретную карту "научным фактом" определится позже, *a posteriori*, определится теми, кто будет с нею работать. Аналогично, вопрос, имеет ли конкретная карта отношение к метафизической реальности (или даже к реальному миру), — предмет религии и философии.

Для чисто научных и технических задач все выше-сказанное несущественно. С pragmatической точки зрения, как и с религиозной, теории и понятия базируются на вере. То, что нужно pragmatику — эффективность данной теории, т.е. чтобы эта теория "работала", а необходимые предисловия и побочные издержки не отняли бы слишком много времени и усилий. И, наконец, теория и понятия должны дать ему язык, на котором он мог бы изложить и обсудить свои результаты.

Конечно, нам хотелось бы гораздо большего. Мы хотели бы точно знать, можно ли сказать о карте "Альберта, 100 миллионов лет до н.э.": "Тут живут динозавры" (или, по крайней мере, "Тут жили динозавры"), сказать о слитке алюминия: "Вот атомы Al", сказать о карте ядра на карте атома Al: "Вот протоны и нейтроны" или сказать о математической модели его кристаллической решетки: "Здесь есть фононы". Нам нужна уверенность в окончательной значимости карт Великого Атласа. Конечно, попав к нам в руки, настоящий Атлас мог бы прийтись не по вкусу: у каждого в запасе своя готовая версия науки — более или менее осознанный аспект религиозных взглядов на "природу вещей".

На данном этапе развития у нас в руках приложения научных знаний (технические и научные) и, возможно, моральные обязанности, диктующие нам использовать эти приложения или запретить. Еще у нас есть идеи, которые, будучи воплощенными (как и теории после их проверки), могут в конце концов занять место в Великом Атласе. Это означает, что и идеи должны подлежать проверке на адекватность с моральной точки зрения (как, например, идея о ядерном делении или ядерном синтезе). Может быть, лучше, чтобы такие понятия не возникали вообще?

Таким образом, концепции, не допускающие немедленной проверки опытом и не являющиеся чисто научными, всегда сомнительны. В любую эпоху физика истинна по определению; если она сейчас не является истинной, то никогда и не была таковой. То же самое, вообще говоря, верно и для слова "научный". В мире, который описывает Великий Атлас, всегда неспокойно: новые свидетельства в пользу концепции дают новые основания для объявления ее реальностью (порой, и в моральном, а не только познавательном плане), однако бремя доказательства всегда может быть отброшено на второй план. Наблюдатель или экспериментатор может предложить внести изменение в теорию или принять ее в существующей формулировке. Эксперимент может опровергнуть эту формулировку, но может найтись еще одна, согласующаяся с экспериментом в достаточной мере, чтобы быть принятой. Опираясь на глубоком уровне интеллектуальной структуры, очень трудно отвергнуть теорию.

### Спектрометрия медленных нейтронов

Модели физики конденсированного состояния базируются на наиболее фундаментальных аспектах современной физики: принципах сохранения (энергии, импульса и т.д.), понятиях о различных ионных формах химических элементов, электронах, нейтронах, квантовой механике. Выбор модели для конкретного вещества в определенных условиях включает грубые оценки того, насколько реально проведение необходимых квантово-статистических расчетов. К счастью, ядерное и магнитное взаимодействия между нейроном и атомом являются (в некотором смысле) слабыми, хорошо применимо "древесное борновское приближение", так что нейтроны эффективно "отцепляются" от рассеивающей системы, которая может рассматриваться как изолированная. При рассеянии нейtron вызывает переходы между квантовыми состояниями рассеивающей системы, но не изменяет эти состояния.

Как правило, модель рассеивающей системы строится с учетом экспериментальной информации о ней. Например, химический состав учитывался бы сразу же. Для структуры кристалла алюминия была выбрана гранецентрированная кубическая (ГЦК) модель, подсказываемая экспериментами по рентгеновской и нейтронной дифракции; теоретический расчет вряд ли сразу привел бы к такой модели. Динамика таким образом определенной системы может изучаться априорно на простых моделях или в рамках феноменологической теории с множеством параметров для подгонки. В рамках теории вибраций кристаллической решетки Борна–фон Кармана [15] приемлем любой подход, по крайней мере до определенной степени. Для данной модели могут быть вычислены и сравнены с экспериментом макроскопические свойства (оптические, термодинамические и т.д.). До появления нейтронной спектроскопии, как правило, было возможно лишь качественное сравнение: дистанция между "понятием" на атомном уровне и "объектом" на макроскопическом просто была слишком велика.

Энергии нейтронов (и соответствующие импульсы) обычно вычисляются по длине волны, определяемой из дифракции на монокристалле (с помощью закона Брэгга) или по времени пролета на известное расстояние. В обоих случаях энергия обратно пропорциональна квадрату измеряемой величины. На уровне теории спектрометры, сконструированные на основе этих двух методов, имеют одинаковую дисперсию (сравнение результатов двух методов для одного и того же спектра есть неявный тест квантовой механики). Однако кристаллические спектрометры дают добавочную дисперсию, так как при переходе от угла отражения к длине волны используется преобразование Брэгга. Два метода очень сильно отличаются технически и с точки зрения эксперимента.

В Челк-Ривере (в 1951 г.) и, как мне кажется, во всех других местах тоже, начали с метода измерения времени пролета как влетающих, так и вылетающих нейтронов. В основе этого метода лежало использование двух электрически сформированных прерывателей для отбора по энергии влетающих нейтронов и регистрация времени пролета нейтронов от второго прерывателя до детектора с целью определения энергии рассеянных нейтронов (Бернар Жакро из Сакле сконструировал и некоторое время работал [43] с двойным прерывателем, состоящим

из двух больших колес на вращающемся валу). Вскоре стало ясно, что создание хорошего двойного прерывателя потребует больших технических затрат. Поэтому все внимание в Челк-Ривере было переключено на использование эффекта дифракции на кристаллах для определения энергий, т.е. на применение трехосного нейтронного кристаллического спектрометра, речь о котором пойдет ниже. Метод двойного прерывания позже был развит в других лабораториях, в частности, у Петера Эгельстаффа в Харуэле. Создавались также смешанные установки, из которых наиболее известен спектрометр "Вращающийся кристалл" [60]. В ней в качестве исходного монохроматора использовался вращающийся кристалл, а спектр измерялся по времени пролета.

Исторически важным оказался еще один метод — "Фильтр-прерыватель" или "Холодный нейtron" [46–49]. Идея его зародилась, по-моему, в Брукхейвене. Модифицированный вариант был разработан в Челк-Ривере, в основном, моим коллегой Алеком Т. Стьюартом. В этом методе используются поликристаллические фильтры из определенных материалов (как правило, из металлического бериллия) с довольно низкой адсорбцией нейтронов, и "паразитное" рассеяние с целью отсечения всех медленных нейтронов, кроме тех, длина волн которых настолько велика, что они не испытывают брэгговского рассеяния на фильтре и не выбиваются из пучка. Рассеянные нейтроны анализируются затем установкой на прерывателях для определения времени пролета. В челк-риверском варианте установки для разных экспериментов использовались два фильтра — из бериллия и свинца.

Противоположностью этого метода является метод "Фильтр-детектор", или "Бериллиевый детектор" [60]. В нем используется дифракция на кристалле и регистрируются лишь "холодные" нейтроны. Метод применяется для изучения движущихся компонент конденсированной среды при особенно высоких энергиях.

### Адсорбционные методы

Некоторые элементы имеют большие сечения захвата медленных нейтронов. Сечение захвата бора и лития пропорционально длине волн; у кадмия (и некоторых редкоземельных элементов) наблюдаются нейтронные резонансы и крутая зависимость сечения от энергии. Когда такие поглотители перехватывают нейтроны, рассеянные на изучаемом образце, измеряемая интенсивность рассеянных нейтронов зависит от нейтронного спектра. Действительно, относительное прохождение рассеянных нейтронов для серии поглотителей увеличивающейся толщины есть величина, связанная со спектральным преобразованием Лапласа. В первых экспериментах по нейтронной спектроскопии, проведенных в 1951–1952 гг. П.А. Эгельстаффом [38] и Р.Д. Лоуде [40] в А.Е.Р.Е (Харуэлл) и Брукхаузом и Херсон [39] в Челк-Ривере это использовалось, но существенно по-разному. Ниже обсуждается только последняя работа.

В диапазоне от 0,2 до 0,5 эВ полное сечение для Cd убывает от величины  $> 6000 \text{ б}$  до  $< 150 \text{ б}$ . Для энергии пучка 0,35 эВ коэффициент пропускания кадмииевых поглотителей довольно чувствителен к спектру рассеянных нейтронов. На рис. 1 показаны кривые пропускания кольцевых Cd-поглотителей для нейтронов с начальной энергией 0,35 эВ, рассеянных на угол около 90° в

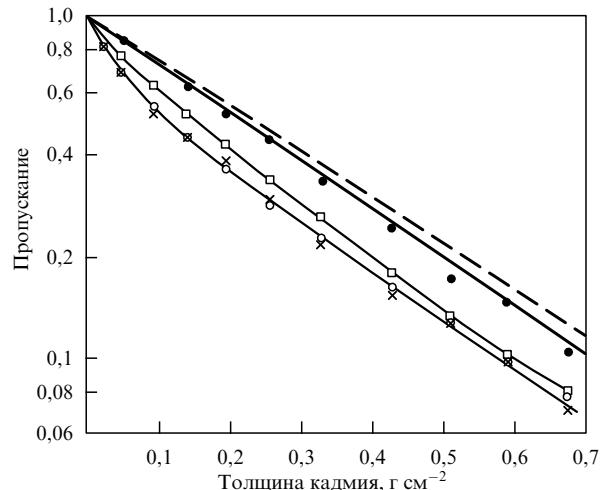


Рис. 1. Относительное пропускание нейтронов (в логарифмическом масштабе) рассеянных в угловом детектор тонкими образцами четырех материалов (свинец •, алюминий □, алмаз ○ и графит ×), для угловых Cd-поглотителей различной толщины, а также оценочная величина пропускания упруго рассеянных нейтронов с начальной энергией 0,35 эВ (штриховая линия, жирной линией показан учет поправок на геометрию). Каждая точка — результат измерения с определенной толщиной поглотителя [39]. Для рассеяния на тяжелом Pb эффект мал, как ожидалось

кольцевой детектор достаточно "тонкими" порошками свинца, алюминия, графита и алмаза. Там же отмечены ожидаемые результаты для упругого рассеяния нейтронов (с поправкой на геометрию; сделаны также небольшие поправки на многократное рассеяние). Так и ожидалось, нейтроны рассеиваются на массивных атомах свинца с небольшой потерей средней энергии. Для более легких Al и C наблюдается гораздо большая передача энергии.

Финкельштейн [22] сравнил эти результаты с данными вычислений рассеяния нейтронов на поликристалле в эйнштейновской модели динамики атомов. В модели Эйнштейна считается, что атомы колеблются независимо друг от друга с определенной частотой, являясь, тем самым, осцилляторами с энергиями кратными эйнштейновской квантовой энергии ( $E_q$ ). Последнюю можно оценить экспериментально, используя определенный нагрев. При рассеянии нейtron может родить или уничтожить один или несколько квантов, что сопровождается изменением его энергии. Для Pb и Al преобладают переходы с изменением энергии на несколько квантов; для двух C-образцов преобладает упругое рассеяние без потери квантов, а остальные 20 % переходов — одноквантовые. Вычисленный таким образом спектр может использоваться для построения кривых пропускания Cd.

Для Pb эффекты слабы: согласие удовлетворительное, но не полное. Для алюминия и двух форм углерода было получено согласие значений  $E_q$  с данными нагрева. При комнатной температуре алюминий находится в "классическом" состоянии ( $E_q \sim kT$ ), а графит и алмаз — в квантовом ( $E_q \gg kT$ ), так что эти результаты весьма удовлетворительны.

Далее были проведены вычисления для очень нереалистичной модели, в которой образцы считались идеальным газом при комнатной температуре, а атомные массы брались равными 12 для C, 27 для Al и 207 для

Pb. Непрерывные спектры, полученные для Al и Pb, очень напоминают гистограммы для эйнштейновского случая, однако спектр для двух форм углерода разительно отличается от них. Из этих результатов следовал вывод, что детали динамического поведения вряд ли можно наблюдать (за исключением случая, когда превалирует одноквантовое рассеяние).

Если бы в нашем распоряжении оказались менее интенсивные нейтронные потоки, адсорбционная нейтронная спектрометрия могла бы развиться в небольшую область исследования; маловероятно, однако, что я имел бы тогда возможность прочитать сегодня эту лекцию и написать этот доклад. Но события опередили это развитие; я перехожу к рассказу о них.

### Трехосный спектрометр

Как уже было сказано, в 1951 г. приняли решение разработать нейтронный спектрометр на брэгговском отражении с двумя монокристаллами в качестве монохроматоров. Пучки должны были иметь 2 квадратных дюйма в сечении, т.е. больше, чем на существующих устройствах. На небольших расстояниях угловое разрешение определялось щелью Золлера. Устройство требовало низкого уровня фона и, следовательно, более массивного защитного экрана, чем те, что были в наличии. Очевидно, что и монохроматоры должны были быть более эффективными, чем существовавшие NaCl-монохроматоры. Поэтому была начата программа по выращиванию крупных металлических кристаллов, для начала, кристаллов свинца и алюминия. Херст развернул деятельность с низкими температурами с перспективой заняться сжиженными инертными газами, в особенности жидким гелием. Тогда Челк-Ривер уже хорошо снабжался жидким азотом, и после нескольких неудачных попыток оживить гелия "Collins" в конце концов был установлен. В 1952 г. приехал опытный низкотемпературщик Дэвид Дж. Хеншоу. Он принял на себя основные обязанности по выращиванию кристаллов и программе сжижения газов.

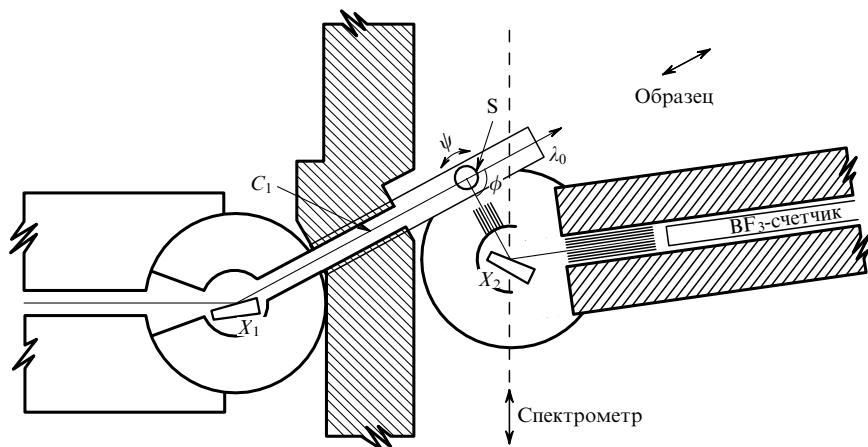
Примитивный трехосный спектрометр был пущен в NRX в 1952 г. Интенсивности были слишком низки для практической работы, однако удалось получить пики

упругого рассеяния для парафина и, кажется, для ванадия. Но в 1952 г. на реакторе случилась авария, и вся экспериментальная работа была прекращена до лета 1954 г. За это время Хеншоу и Джек Фриборн вырастили большие монокристаллические слитки алюминия и свинца, и когда в NRX возобновилась работа, порошковый дифрактометр и трехосная техника были усилены монохроматорами гораздо лучшего качества. Херст и Хеншоу развернули программу по изучению сжиженных инертных газов, которая была продолжена их последователями и растянулась более чем на 40 лет.

Первоначально спектрометр выглядел так, как показано на рис. 2. Образец помещался на градуированном столе, передвигавшемся вдоль направления "монохроматического" нейтронного пучка от монохроматора. Другой одноосный спектрометр [24], "видящий" образец сквозь щели Золлера, двигался по рельсам параллельно передней части реактора. Угол рассеяния вычисляется путем триангуляции и поэтому меняется редко.

Замысел с трехосным спектрометром почти сразу же увенчался успехом. Было внесено несколько мелких добавлений в конструкцию кожуха; в целом же установка работала так, как надо. Было поставлено множество экспериментов, как навеянных существующей теорией, так и нет. Отчет об этой деятельности был переработан в текст лекции [41], прочитанной на ежегодном собрании Американского физического общества в январе 1955 г. в Нью-Йорке, где были представлены предварительные результаты рассеяния для жидкого и твердого Pb, воды, тяжелой воды, ванадия и некоторых парамагнитных материалов с различными характеристиками (включая  $MnSO_4$ ,  $Mn_2O_3$  и  $MnO$ ).

Работа над частью этих проектов была продолжена и затем освещена в печати. Первыми были опубликованы результаты для двух парамагнетиков  $MnSO_4$  и  $Mn_2O_3$  [42]. Восприимчивость  $MnSO_4$  хорошо описывается законом Кюри, поэтому взаимодействие между ионами  $Mn^{2+}$  можно было ожидать слабым. По той же причине ожидалось, что диффузионное магнитное рассеяние будет почти упругим. В действительности при углах рассеяния меньше угла Дебая–Шеррера линии имели точно такую же энергетическую толщину, как при



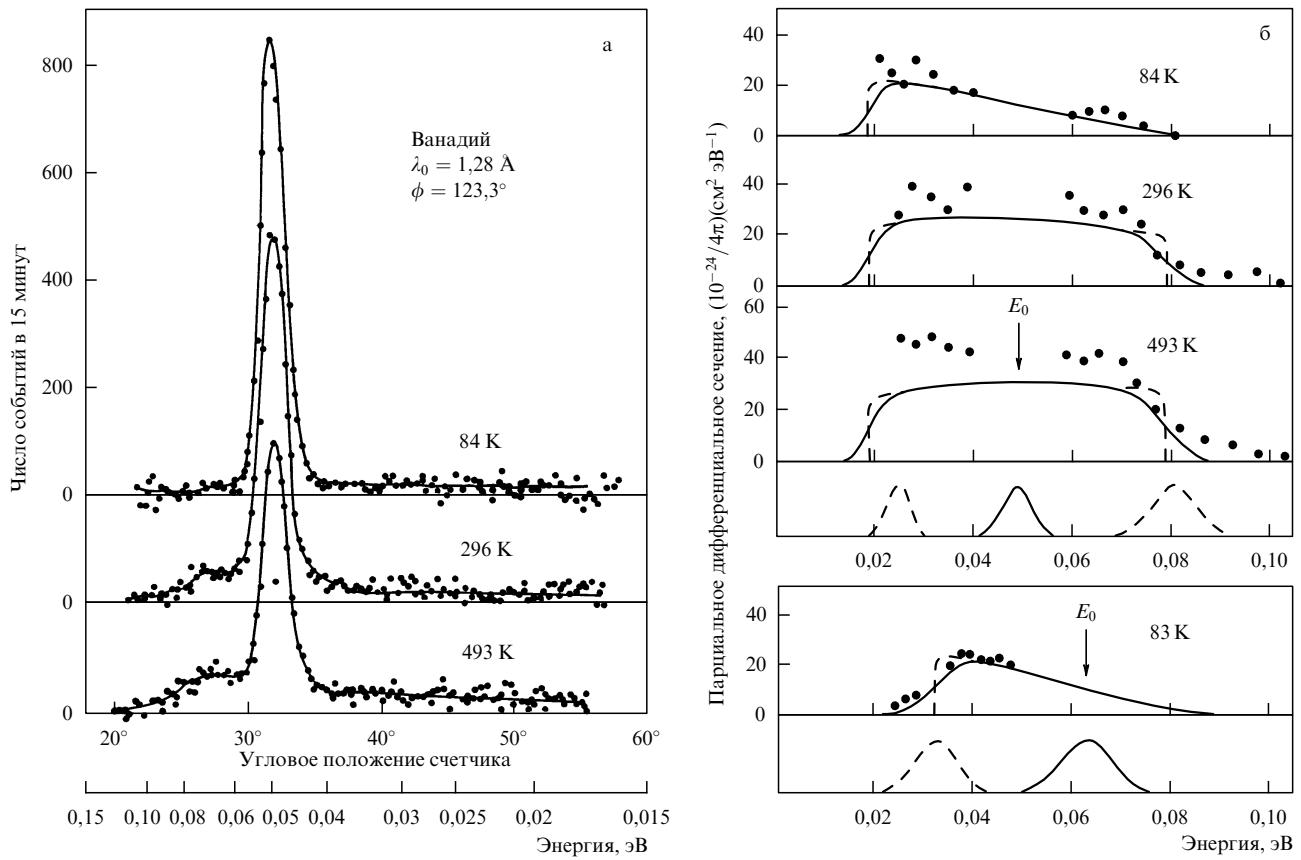
**Рис. 2.** Первый грубый вариант трехосного кристаллического спектрометра [41–43]. Моноэнергетические нейтроны отсеиваются массивным монокристалльным монохроматором  $X_1$  и бомбардируют образец  $S$ , расположенный на подставке с регулировкой ориентации  $\psi$  в горизонтальной плоскости. Эту подставку можно двигать вдоль падающего пучка в желаемое положение. Спектрометр-анализатор с кристаллом  $X_2$  — это дифрактометр (очень большой светосилы), который передвигается как единое целое; угол  $\phi$ , с которого ведется наблюдение рассеянных нейтронов, определяется путем триангуляции

некогерентном упругом рассеянии на ванадии. Для  $Mn_2O_3$ , наоборот, наблюдалась значительная величина неупругого рассеяния с энергетической шириной, соглашающейся с вычислениями Ван Флека [32]. Аналогичные результаты были получены для  $MnO$ , где энергетическая ширина коррелировала с показателями порядка близкодействия в дифракционных картинах. Эти результаты, успешно дополненные затем П.К. Иенгаром и Р.С. Вивером, нигде специально не публиковались, но были включены в обзорные работы — может быть, это тоже своего рода виртуальные публикации?

С самого начала наша программа была нацелена на изучение дисперсионных соотношений частота—волновое число (или энергия—импульс) в обычных моделях кристаллов (решеточная вибрация) путем исследования однофононного рассеяния. (По аналогии считалось, что так же могут быть изучены и спиновые волны в кристаллах. Позже это подтвердилось.) В 1954 г. в теоретической работе Плацека и Ван Хова [26] был дан детальный анализ фононного эксперимента. Для нас наиболее существенным было то, что авторы предлагали новый вид эксперимента — определение частотного распределения нормальных мод некогерентного однофононного рассеяния на кубической кристаллической решетке с одним атомом элементарную ячейку. С практической точки зрения, единственным подходящим кандидатом (из природных элементов) на такой эксперимент

является ванадий. Мы сразу же включили его в нашу программу.

Эксперимент был проведен [44] на примитивной трехосной установке, изображенной на рис. 2. Результаты показаны на рис. 3а. Виден острый пик упругого рассеяния, интенсивность которого падает с увеличением температуры — это и ожидалось из модели расширяющегося теплового облака Дебая—Валлера. Заметна также слабая неупругая компонента, интенсивность которой растет с ростом температуры: именно она и интересовала нас больше всего. Если сделать преобразование этой компоненты от распределения по углам (анализатора) к распределению по энергиям, мы получим кривые, приведенные на рис. 3б. Эйнштейновскую модель можно исключить из рассмотрения. Здесь также показаны однофононные распределения, вычисленные в модели Дебая для дебаевских температур, согласованных с дебай-валлеровским поведением пика упругого рассеяния. (Добавочное рассеяние можно отнести на счет многофононных процессов.) Таким образом, эксперименты подтвердили справедливость теории, но разрешение не хватало, чтобы выйти за рамки дебаевской модели для частотного распределения нормальных мод. Поздние эксперименты, использовавшие метод фильтра-прерывателя, проведенные группой Стьюарта [49] в Челк-Ривере и группой Эйзенхауэра [48] в Брукхейвене, дали явную структуру частотного распределения и



**Рис. 3.** а — Измеряемые энергетические распределения рассеянных нейтронов на ванадии как функции угловых положений спектрометра для трех температур с вычитенным фоном и нормализованными интенсивностями [44]. Интенсивность упругого пика убывает с температурой примерно так, как это следует из теории Дебая—Валлера. Неупругая компонента испытывает сильнейшую дисперсию в нейтронном спектрометре и требует преобразования к истинному распределению энергии. б — Преобразованные энергетические распределения (точки) неупругой компоненты в ванадии. Кривые — вычисленные (однофононные) сечения рассеяния для распределения дебаевской частоты колебаний решетки. Упругая компонента дает меру разрешающей функции для падающего потока энергии

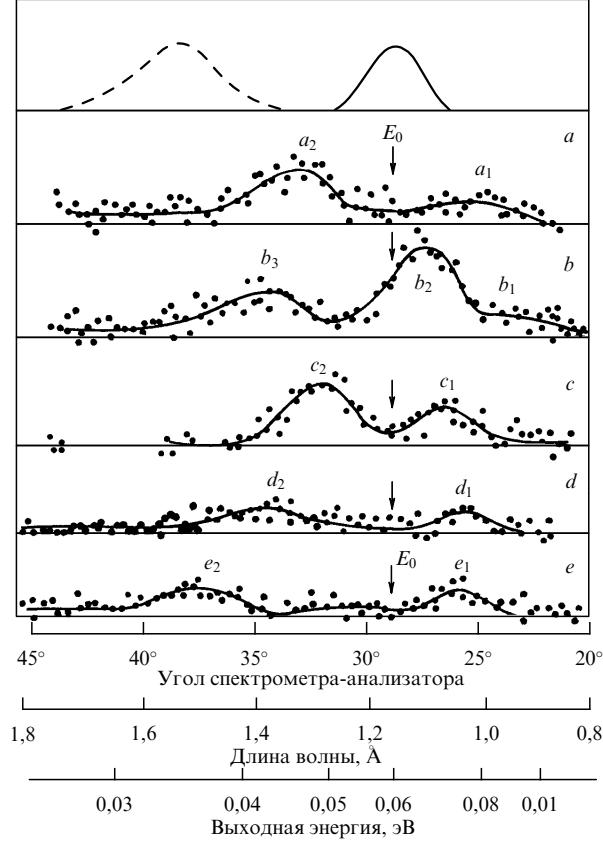
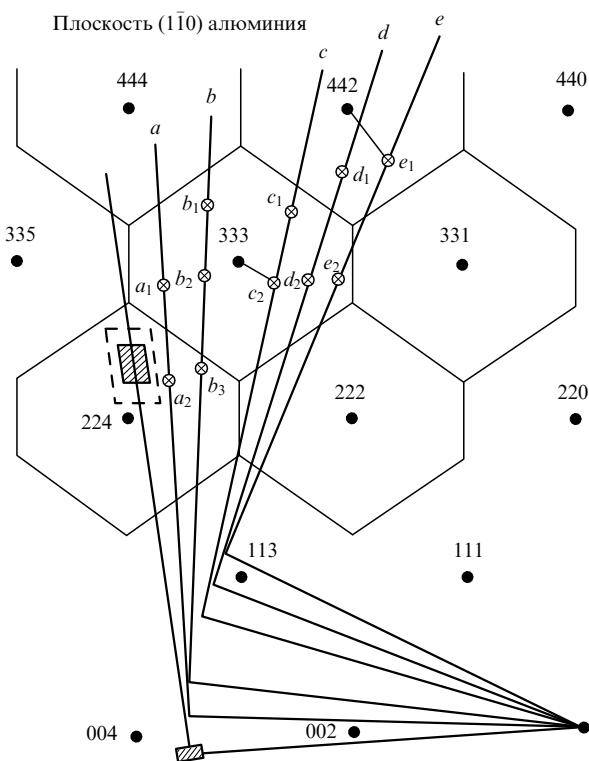
указали (см. [13–15]) на реалистический механизм решеточных колебаний вне рамок дебаевской модели.

Наименее подкрепленными теоретически, но считавшимися наиболее важными, были эксперименты с жидкостями, особенно эксперименты с легкой и тяжелой водой [50]. Здесь было обнаружено квазиупругое рассеяние, энергетические ширины которого качественно могли быть связаны с типом диффузии в жидкости. Аналоги коэффициента Дебая–Валлера для квазиупругой компоненты и энергетических ширин для неупругой компоненты можно связать с общими принципами теплового движения молекул. В поздней работе автора, Сакамото и др. [50] наряду с трехосной установкой использовался спектрометр с вращающимся кристаллом. Исследования Ван Хова [30] по обобщенным (пространство–время вместо энергии–импульса) корреляционным функциям внесли вклад в понимание этого чрезвычайно сложного направления — физики жидкостей.

Фононный эксперимент, задуманный в самом начале — гвоздь всей программы — был осуществлен Брукхазом и Стьюартом [45] на крупном монокристалле алюминия. Выбор этого материала был продиктован техническими соображениями. Захват нейтронов алюминием невелик, как невелико когерентное рассеяние и сечение некогерентного рассеяния. Поэтому физические размеры могут быть достаточно велики без опасности частого многократного рассеяния. А у нас был такой кристалл! Первые результаты мы получили на старом кристаллическом спектрометре с фиксированным углом

рассеяния. Кристалл был ориентирован своей (110)-гранью в плоскости спектрометра и слегка повернут вдоль оси нормальной к этой плоскости, чтобы иметь возможность последовательно проводить эксперименты с разной ориентацией (рис. 4). Нейтронные группы, имеющие ожидаемые свойства однофононных групп, наблюдаются в серии экспериментов, различающихся положениями спектрометра-анализатора и интенсивностями (многофононное рассеяние привело бы к континууму). Из импульсной диаграммы можно выразить волновой вектор фона  $\mathbf{q}$  и найти его частоту из закона сохранения энергии. Для нескольких фонах с параллельными  $\mathbf{q}$  можно убедиться (это не показано на рисунке), что фоны подчиняются дисперсионному соотношению частота–волновой вектор.

Эксперименты были продолжены и на установке "фильтр-прерыватель", и на трехосном аппарате; около 210 фононов были распределены по двум плоскостям симметрии в импульсном пространстве кристалла (обратной решетки). Результаты позволили опровергнуть еще бытовавшие простые модели межатомных взаимодействий. Теория же Борна–фон Кармана сама по себе может рассматриваться как феноменологическая модель с неисчислимыми вариантами подгонки параметров, так что ее опровергнуть крайне трудно. В буквальном понимании, с учетом сил между ионами и кристаллом уже эти ранние результаты свидетельствуют о необычайном диапазоне дальнодействия межатомных сил в системе. В ходе работы для поляризации

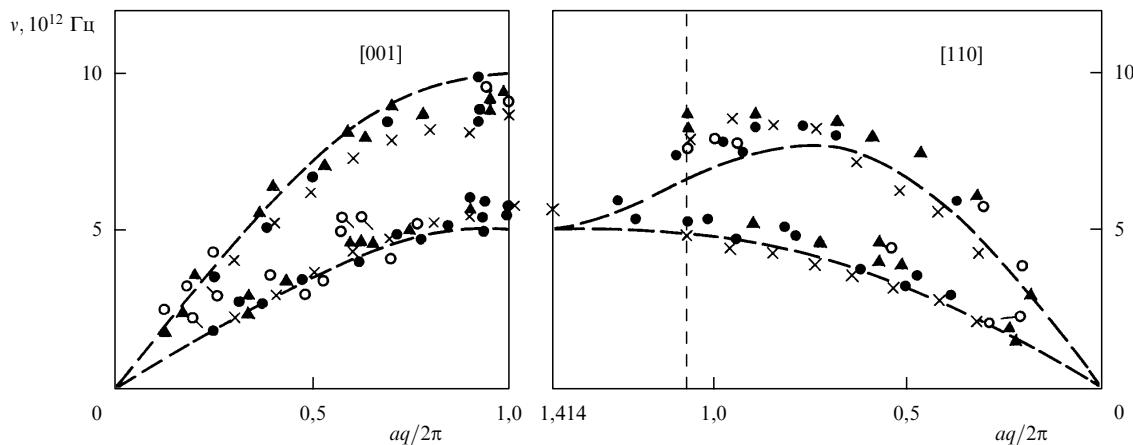


**Рис. 4.** Фоны в алюминии при комнатной температуре [43]. Некоторые снятые распределения в (110)-плоскости монокристалла при фиксированном угле рассеяния  $95^\circ$ ,  $1^\circ$  соответствующая обратная решетка для (110)-плоскости с импульсами. Один типичный случай показан детально, схематично изображено разрешение по импульсу

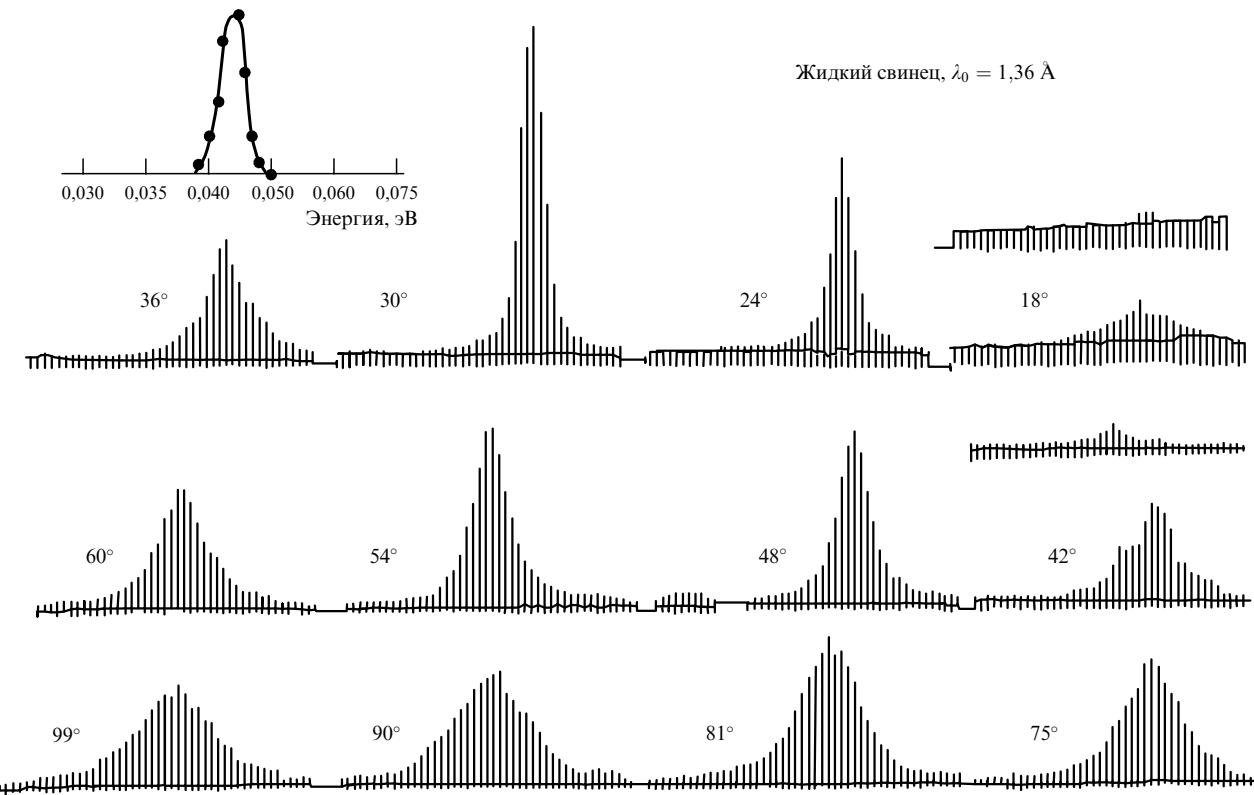
фононов в направлениях симметрии были использованы интенсивности. Далее, чтобы избежать трудностей с интерпретацией результатов, в экспериментах проводились измерения при максимально возможном удалении в направлениях симметрии.

Дисперсионные кривые фононов в двух симметрийных направлениях для монокристаллического алюминия, полученные в соответствии с описанными выше экспериментами, а также взятые из работ Картера,

Палевского и Хьюгса из Брукхэвена [46] и Ларссона, Далборга и Холмрида из Стокгольма [47], показаны на рис. 5. Обе последние группы использовали метод "фильтра-прерывателя" на бериллии. Различные эксперименты согласуются между собой в пределах все же еще существенных неопределенностей. Дисперсионные кривые Уолкера [35], построенные после проведения измерений рентгеновской интенсивности, также находятся в хорошем (но не полном) согласии с ними. Результаты



**Рис. 5.** Дисперсионные кривые для алюминия при комнатной температуре для двух направлений симметрии кристалла (суммарный результат работ [45–47],  $\times$  — Уолкер, рентгеновские лучи,  $\bullet$  — Брукхаз и Стюарт,  $\circ$  — Картер, Палевский и Хьюгс,  $\triangle$  — Ларссон, Далборг и Холмрид). Данные нейтронных измерений из трех лабораторий согласуются друг с другом в пределах ошибок и почти согласуются с результатами [35], полученными при анализе интенсивностей рентгеновских лучей. Несоответствия были бы, однако, очень важны при попытках извлечь из данных информацию о межатомных силах



**Рис. 6.** Гистограммы [60] энергетических распределений нейтронов, рассеянных жидким свинцом под некоторыми углами [51]. Углы рассеяния связаны с передачей импульса  $Q$ ; по оси абсцисс — передача энергии; также отложены значения фона. Функция разрешения для ванадиевого рассеивателя показана слева вверху

экспериментов с нейтронами считаются более надежными, так как в последних частоты выражаются непосредственно из законов сохранения, в то время как рентгеновские лучи довольно сложно откалибровать и скорректировать.

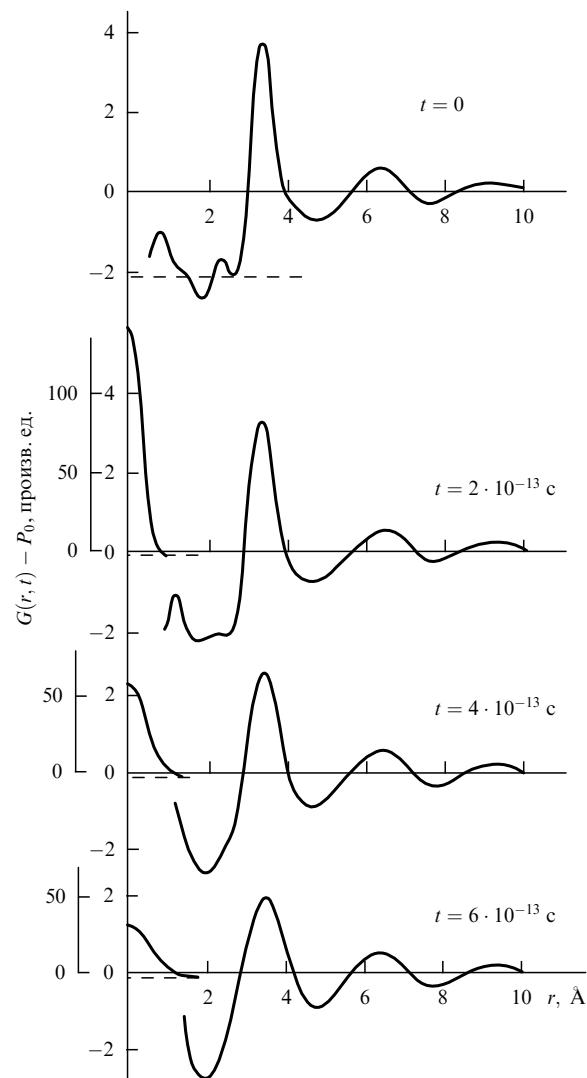
Были проведены эксперименты по изучению спиновых волн ("магнонов") в монокристалле магнетита ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ). Этот феррит с кубической решеткой ("магнитный железняк") был выбран потому, что в наличии имелись его большие монокристаллы естественного происхождения. Предполагалось, что при небольших волновых векторах будут получены более или менее изотропные квадратичные дисперсионные кривые, близкие к областям сильного брэгговского рассеяния в обратном пространстве. Оказалось [56], что это действительно так. Более поздний эксперимент [56] подтвердил, что рассматриваемые группы нейтронов меняют интенсивность под воздействием достаточно сильного магнитного поля, так что наблюдаемые кванты действительно являются магнонами, а не фононами.

Первые результаты с жидким свинцом были трудно объяснимы. Из-за значительной массы атома Pb передача энергии мала. Если бы имелась решетка, узкую неупругую компоненту невозможно было бы отделить от квазиупругой ввиду ограниченного аппаратного разрешения. Поэтому ранние результаты никогда не публиковались, хотя и докладывались на конференциях. Но когда появились гораздо более мощные средства, мы с Ноузлом К. Поупом [51] провели новые измерения (рис. 6). Проведенный анализ с использованием преобразований Ван Хова [30] позволил явно вычислить автокорреляцию и парную корреляционную функцию атомов жидкого свинца (рис. 7). Временная эволюция этих функций из исходной точки при  $t = 0$  в сторону спада корреляций несколькими пикосекундами позже дает нам что-то вроде статистического "кинофильма" движения атомов в жидкости.

В столь многоплановом мемуаре, как этот, нельзя обойти вниманием работы [52–55] по жидкому гелию, хотя я лично принимал в них мало участия. В начале своей работы Хеншоу и Херст планировали включить в нее эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов в жидком гелии как часть программы исследования жидкостей разреженных газов. Но перспективы этих экспериментов выглядели зловеще как в плане технической реализации, так и в плане анализа результатов. Все резко изменилось после выхода теоретической статьи Коэна и Фейнмана [52], предсказавших линейчатый спектр вместо подразумевавшегося тогда непрерывного спектра непонятной структуры. Немедленно была начата подготовительная работа. Палевский, Отнес и Ларссон [53] из Стокгольма обнаружили предсказанный линейчатый ("ротонный") спектр, используя метод прерывателей на бериллии. Вскоре последовали похожие работы Ярнела и др. [54] и Хеншоу [55], улучшившие и расширявшие стокгольмские результаты. В Челк-Ривере работа над различными аспектами физики жидкого гелия продолжалась практически по сей день.

#### Усовершенствование установки и методов исследования

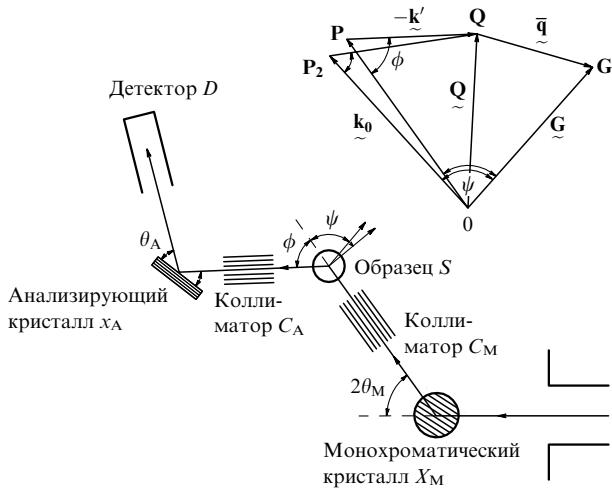
В 1956 г. к установке был добавлен сконструированный в Отделе инженерного планирования Челк-Ривера спектрометр-анализатор. Его установили на кронштейне



**Рис. 7.** Преобразование Ван Хова данных рис. 6 [51]. Распределение при времени  $t = 0$  есть, по сути, известное распределение пар в экспериментах по рентгеновскому рассеянию. Пик ( $\delta$ -функция) в начале отсчета постепенно расплывается со временем  $t$ , как расползаются первый и соседние пики в своего рода фильме о движении в жидкости

старого одноосного аппарата [24], на "полурастворный" стан которого теперь помещались образцы. Сейчас все подвижные части трехосной установки, кроме первичного монохроматора на первой (закрепленной) оси, перемещались с помощью моторов. Изменить начальную энергию стало можно, просто заменив монохроматор. Когда в 1959 г. спектрометр переместили к реактору NRU, первая ось была также модернизирована (У. Макальпином) так, чтобы в ходе эксперимента иметь возможность менять начальную энергию ( $E^0$ ). На рис. 8 дано схематичное изображение расстановки аппаратуры в трехосном спектрометре. Нужно отметить, что относительное расположение падающего и выходящего пучков играет важную роль вследствие корреляций, влияющих на разрешение в импульсном пространстве.

Во время всех исследований интенсивность входящего пучка контролировалась с помощью "тонкого" нейтронного датчика известной чувствительности. Во всех описанных выше экспериментах менялся именно спектрометр-анализатор, и, как следствие, изменялась



**Рис. 8.** Схематический рисунок трехосного спектрометра и диаграмма импульсного пространства в той же системе координат. Массивный кожух, особенно необходимый вокруг монохроматора, не показан

энергия выходящего пучка. Нужно было делать поправки к интенсивности на чувствительность анализатора. Для спектрометра на кристалле эти поправки непосредственно не вычисляются, и часто требовались дополнительные измерения. Если же анализатор фиксирован, перерасчет на его чувствительность нужен лишь для исследования абсолютных парциальных дифференциальных сечений рассеяния. Поэтому начиная с 1959 г. распределения часто измерялись при постоянной выходной энергии.

В рамках кристаллографии в качестве "естественных переменных" удобно выбирать волновые векторы (импульсы) переноса, а не углы рассеяния и не ориентацию кристалла. Это можно было бы заметить и в наших первых исследованиях, а также в теоретическом анализе рассеяния фононов в кристаллах Вайнстока [36] и др. Годами позже пришло понимание того, что при рассеянии сохраняются суммарный импульс и энергия нейтрона и рассеиваемого образца — переданный импульс ( $Q$ ) может переноситься либо целиком всем образцом, либо его внутренними составляющими, либо комбинацией этих двух факторов. Если образец крупный, энергия  $\hbar\omega = E - E'$  неминуемо будет передана квазичастицам внутри него. Когда таких квазичастиц нет, рассеяние "упругое". В эксперименте все могло бы выглядеть так, как будто к концу наблюдения закон сохранения энергии-импульса  $\omega, Q$  нарушился. Эта аргументация была усиlena использованием преобразований Ван Хова. Интенсивности теперь стали описывать обобщенным структурным фактором, аналогичным структурным факторам в нейтронной и рентгеновской кристаллографии. Как и в случае квазиупругого рассеяния, требуется, конечно, некоторая осторожность в таком полуклассическом описании: необходимо учитывать все внутренние компоненты образца.

То была эра раннего развития цифровых компьютеров. В Челк-Ривер подобное устройство поступило примерно в 1954 г. Написанные на предшественнике Фортрана программы можно было запускать на «девятитроне» и получать "оттиски" результатов расчетов. Вычисления могли дать последовательность угловых

сдвигов переменных для трехосного спектрометра: углы анализатора и монохроматора, угол рассеяния и угловое положение образца в плоскости спектрометра (см. схему на рис. 8).

В работе одну переменную фиксировали, другая изменялась линейно с постоянным шагом, а еще две менялись нелинейно, по закону, вычисленному компьютером. Начальные значения последних переменных устанавливались с помощью 52-х поворотных переключателей. Таким образом, в эксперименте ("сканирование") участвовало до 26 точек. Шаговый переключатель принимал последовательность двух команд и декодировал ее в соответствии с количеством замыканий микропереключателей по данной угловой переменной. Суммарный угловой поворот складывался из числа постоянных шагов изменения угловой переменной. Эта система, главным разработчиком которой был Е.А. Глазер, начала действовать в 1959 г. Чуть позже вместо нее была установлена система, созданная Хорузлом, в которой для передачи данных спектрометру использовалась перфолента, обрабатываемая компьютером. На рис. 8 показана начальная позиция перед сканированием, при котором положение анализатора будет меняться линейно, а значения угловых переменных будут установлены так, чтобы обеспечить необходимую передачу импульса.

Изложенный метод можно представлять себе в терминах оптической аналогии. Есть входящий пучок "зеленых" нейтронов, а анализатор проходит "радужную" последовательность, в то время как угловые переменные последовательно меняются с тем, чтобы обеспечить постоянную передачу импульса. Или иначе: анализатор устанавливается так, чтобы регистрировать "зеленые" нейтроны, а падающие нейтроны проходят сквозь "радужную" последовательность. Теоретически результаты эквивалентны, но технические соображения могут сделать один из вариантов более предпочтительным.

Переменные импульс  $Q$  и энергия  $\omega$  часто даются в единицах постоянной Планка  $\hbar$  и именуются волновым вектором и (угловой) частотой соответственно.

Связанный рядом геометрических ограничений эксперимент, в принципе, мог бы проходить вдоль любого контура в пространстве  $Q-\omega$ . Наиболее удобным, однако, является метод с постоянным импульсом "Constant- $Q$ ". (Использовался и метод с постоянной энергией, в основном для снятия крутых дисперсионных зависимостей.) Главным достоинством этих методов [60] является, несомненно, возможность выбора нужных для данного контекста данных из всего множества, вообще говоря, бесполезной информации. В этом, правда, есть и свой минус — что-то важное может остаться незамеченным. Хорошим тоном является поэтому занесение в протокол значений фиксированной переменной, входной и выходной энергий — несмотря на то, что эти величины и не присутствуют явно в анализе эксперимента. (Они могут влиять на рассеяние в присутствие примесей.) У метода "Constant- $Q$ " есть еще одна технически важная черта: точность его выше, а интенсивности легче анализировать, чем в обычной нейтронной спектроскопии. (Это связано с появлением в теории якобиана Валлера-Фрумана [34].)

С появлением новых возможностей благодаря использованию метода "Constant- $Q$ " и значительным

усовершенствованиям при переходе к новому реактору NRU стали возможны эксперименты с гораздо большими разрешением и точностью. Для этих технических новшеств требовалось теперь найти "золотые правила" выбора точек импульсного пространства, которые обеспечивают наилучшее разрешение, разделение нейтронных групп разных типов симметрии и т.д. А по мере того, как появлялись новые устройства, такие как пропорциональные счетчики на  ${}^3\text{He}$ , они немедленно брались нами на вооружение.

Используя новые методы и возможности работы с NRU, Ватанабе и Брукхауз [57] удалось значительно развить свои ранние исследования [56] по спиновым волнам в магнетите (рис. 9). Была снята вся "акустическая" дисперсионная кривая, а также "оптические" ветви рядом с зонным центром. Обе кривые находились в качественном согласии с теоретическими прогнозами [21, 57].

Существование спиновых волн в металлах было в то время еще открытым вопросом. Синклер и Брукхауз [58] исследовали рассеяние нейтронов в ГЦК-кристалле сплава кобальта с железом (8 % Fe). (Этот кристалл использовался в качестве нейтронного поляризатора. Магнитное и ядерное рассеяние оказались эффектами одного порядка, и это перевесило первоначальные серьезные аргументы против использования Со, имеющего большое сечение захвата.) Довольно крутую дис-

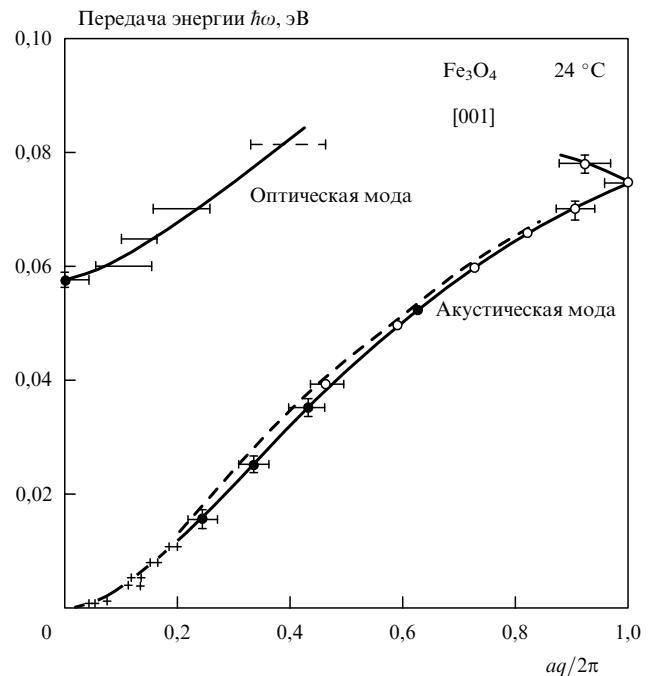


Рис. 9. Дисперсионные кривые для спиновых волн в кристалле магнетита ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) [57], демонстрирующие ожидаемое квадратичное поведение и начало оптической моды

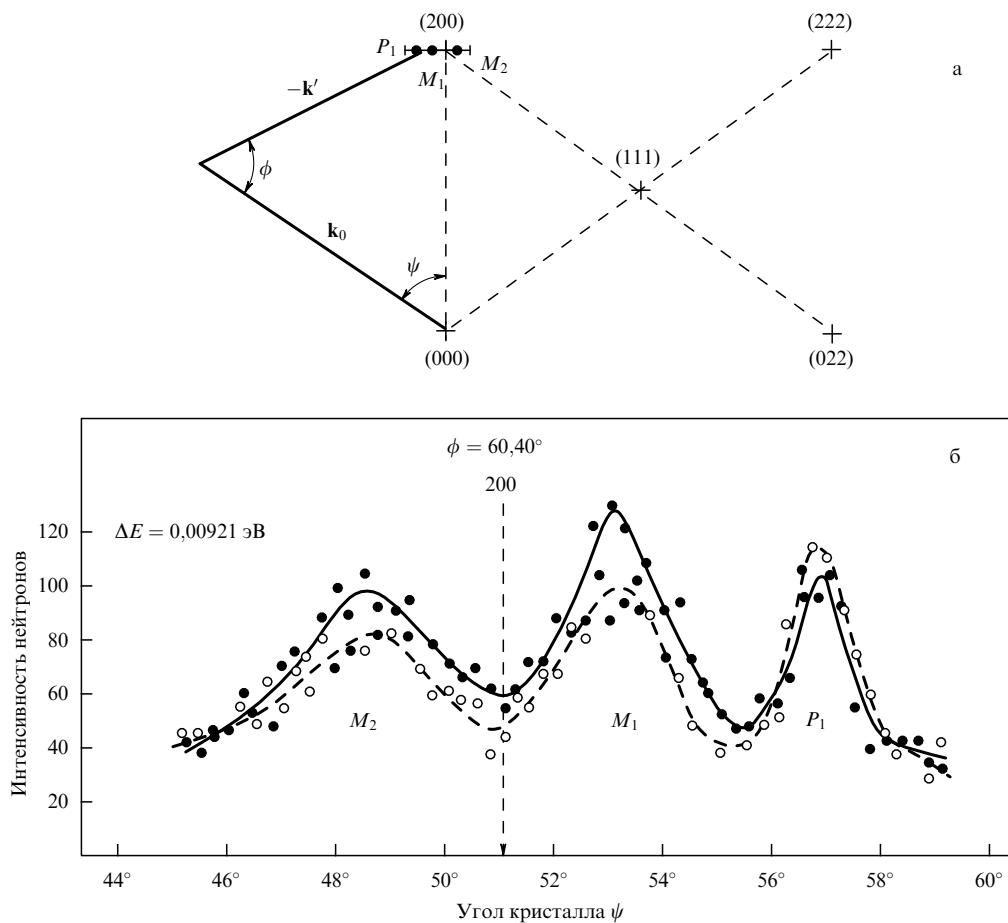


Рис. 10. Импульсная диаграмма (а) и нейтронные группы (б) для кристалла (ГЦК) Со (8 % Fe) в отсутствие (●) и в присутствии (○) поля. "Магнитный автограф" говорит о том, что  $M_1$  и  $M_2$  являются группами квантов спиновых волн (магнонами) и что  $P_1$  — это фононная группа [58]

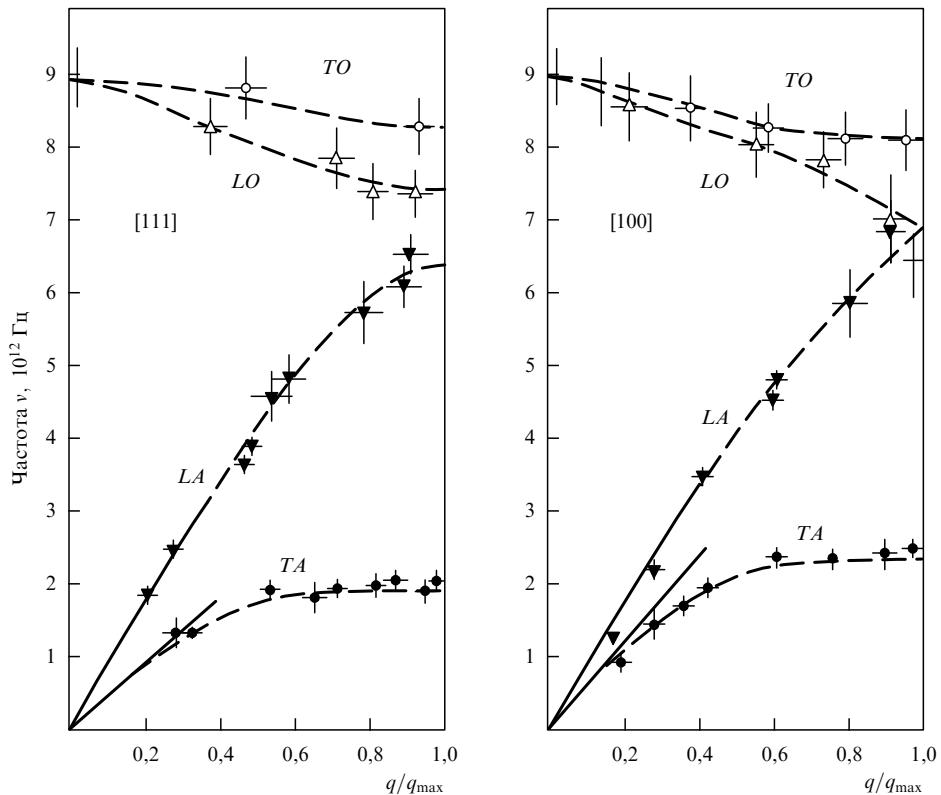


Рис. 11. Дисперсионные кривые для германия при комнатной температуре. Виден баланс между оптической и акустической ветвями в двух направлениях симметрии [62].

персиионную кривую (рис. 10) можно было измерить лишь для малых волновых векторов (примерно до 20 % зонного центра). Из "автографа" приложенного магнитного потока мы установили, что нейтронные группы действительно являются спиновыми волновыми квантами (магнонами).

Ставились эксперименты и других типов. Полевой спектр кристаллов ряда редкоземельных оксидов изучался в работе [59], однако анализ оказался крайне запутанным; здесь мы не будем обсуждать эти результаты. Ватанабе и Брукхауз [57] изучали расщепление обменных сил в железо-иттербииевом гранате. Командированный к нам Л.Н. Бекка исследовал вращательные моды ряда органических соединений. Но главной целью моей работы с тех пор оставалась физика фононов.

#### Фононы, дисперсионные кривые и межатомные силы

Еще до исторических перемен 1959 г. нами проводились исследования фононов, которые, оставляя желать лучшего в смысле разрешения и точности, имели полное право заявить о себе в физике пространства-времени. Первым опытом было изучение Брукхаузом и Иенгаром [62] колебаний решетки в двух симметрийных направлениях германия (рис. 11). Были тщательно сняты дисперсионные кривые акустической и оптической ветвей и проведен их анализ в терминах простых моделей с постоянной межатомной силой. Согласование оказалось неполным, и это свидетельствовало о том, что в моделях чего-то недостает. Обнаружилась замечательная схожесть с дальними инфракрасными спектрами и согласие с принятыми соображениями о положении полосы валентности и полосы минимума проводимости. В других экспериментах изучались фононы в силиконах

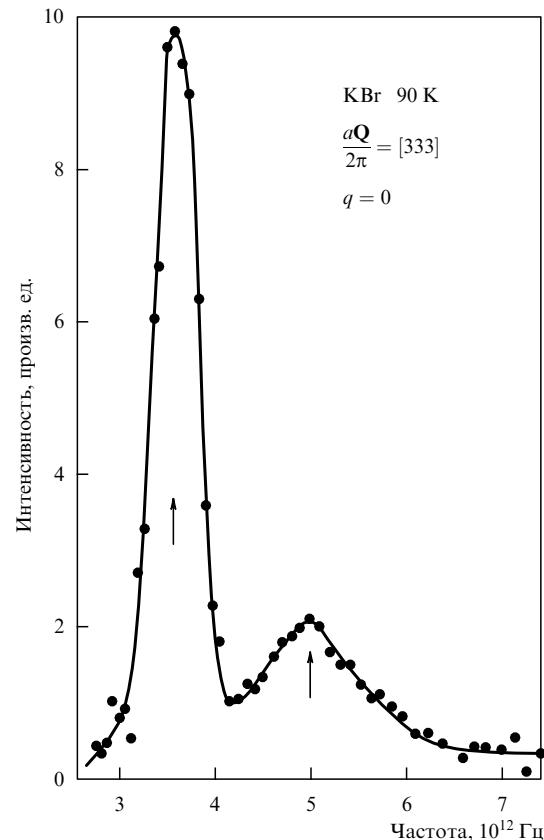


Рис. 12. Фононы зонного центра в кристалле KBr [67]. Поперечная оптическая мода активна в инфракрасной спектрометрии, а продольная — нет. Обе видны на этой нейтронной картине; отношение их частот примерно такое, какое предсказывает теория [15].

[63], их результаты оказались схожими с данными для германия и с температурной зависимостью поведения фононов в германии [64]. Необходимо отметить, что некоторые результаты, полученные в Брукхэйвене (где использовался метод фильтра-прерывателя), также могут быть найдены в [62].

Была проведена развернутая программа изучения кристаллов щелочных галидов. При отборе кристаллов для экспериментов обращалось внимание на их нейтронные свойства и на отношение масс двух атомов-компонент. Широко исследовались двухатомные кристаллы: сперва иодид натрия [66], а затем бромид калия [67]. В ходе этой работы командированный к нам коллега Уильям Кохран открыл свою знаменитую и весьма полезную "оболочечную модель" поляризации ионов в кристаллах. Одним из результатов этих исследований явилась проверка известной формулы Лиданна–Сачса–Теллера [15] для зонного центра оптических фононов в терминах диэлектрических постоянных (рис. 12).

Мы провели обширную работу с металлами, особое внимание уделяя натрию, считавшемуся тогда самым "простым", и свинцу, фонон-электронное взаимодействие в котором является ощутимым (это было известно, так как свинец — сверхпроводник с высокой температурой сверхпроводящего перехода). И, как все-

гда, на выбор влияла возможность достать подходящий образец монокристалла. На монохроматорах у нас стояли свинцовые кристаллы Хеншоу, а Раймонду Боуэрсу из Корнельского университета удалось вырастить нужные нам массивные натриевые кристаллы.

Для Pb [68] и Na [71] мы сделали измерения при низкой температуре (кристаллы охлаждались жидким азотом) для всех направлений симметрии, а также ряд измерений на поверхности зоны Бриллюэна. В обоих случаях эксперименты дублировались при высоких температурах с целью изучения температурного уширения и эффектов сдвига фононов (рис. 13). Были обнаружены заметные эффекты, трудно объяснимые количественно атомными силами. Для обоих металлов времена жизни и средний свободный пробег при комнатных температурах становятся очень короткими для волновых векторов, удаленных от зонного центра. Похожие результаты для Al получили независимо Ларссон с сотр. [47], работавшие методом фильтра-прерывателя. Наши высокотемпературные результаты были опубликованы лишь частично или позже.

Анализ результатов для свинца [68] дал описание системы дальнодействующих межатомных сил и был достаточно сложен. Расчеты Вальтера Кона [69] для щелочных металлов предсказывали, что аномалии в

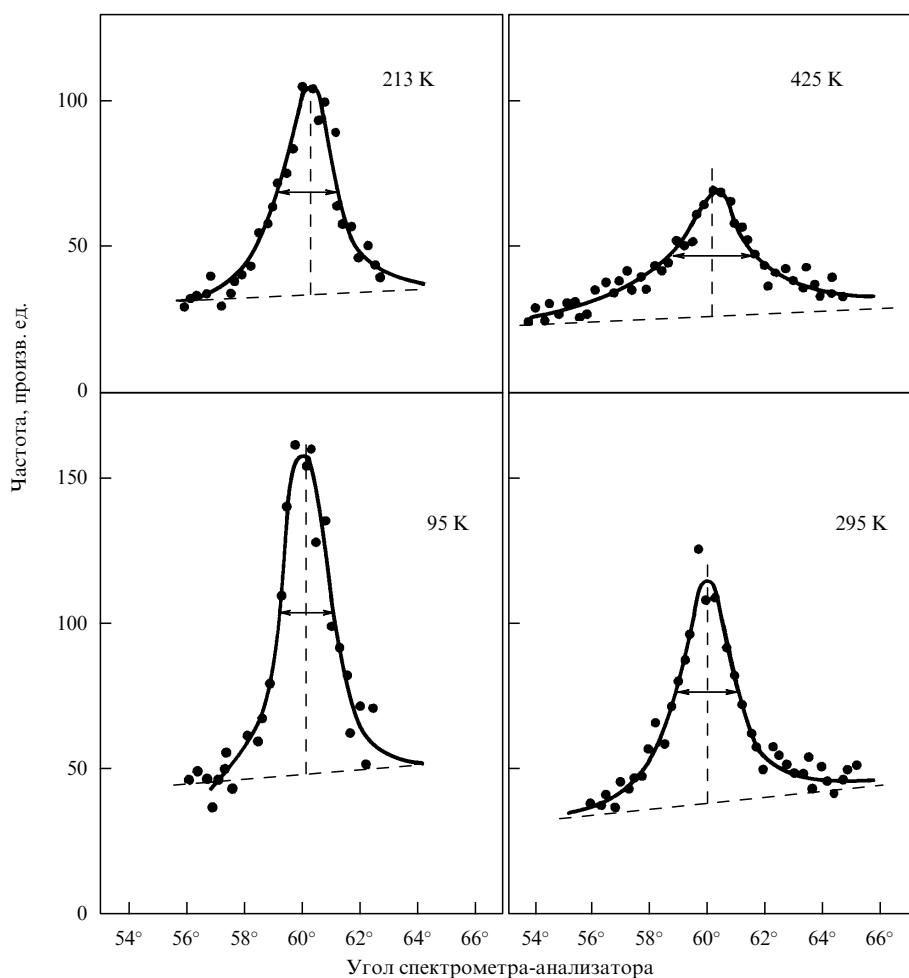


Рис. 13. Нейтронные группы для симметрийного фонона в кристалле Pb для четырех температур. Видно, что ширины линий растут с температурой [77]. Это допускает естественное объяснение: с температурой время жизни и длина когерентности уменьшается из-за взаимодействия с другими фононами

фононных дисперсионных кривых вследствие электрон-фононного взаимодействия можно обнаружить при волновых векторах на ферми-поверхности металла. Был проведен ряд экспериментов с целью найти эти аномалии на дисперсионных кривых Pb. И аномалии Коны действительно были найдены [70] при многократных измерениях для более или менее предсказуемых положений волновых векторов (рис. 14). Поиск был повторен и для Na [71] (где электрон-фононные силы должны быть малы), но не дал положительных результатов, тем самым косвенно подтверждая специфику Pb.

Результаты Вудса и др. [71] для натрия можно анализировать в рамках модели Борна-фон Кармана с гораздо более коротким радиусом действия, чем у свинца. Диксон с сотр. [72] использовали эту модель для вычисления распределения частот нормальных мод, которое дало прекрасное согласие с известными из литературы результатами при специфическом нагреве (рис. 15). Компьютерные вычисления обладали достаточным разрешением, чтобы точно найти топологически важные критические точки Ван Хова [31].

Наконец, на рис. 16 даны для сравнения окончательные результаты для (пространственно-центрированного кубического) Na и результаты, полученные на той же установке Гилатом и Доллингом [73] для  $\beta$ -бронзы (CuZn) при упорядочении, в котором медь располагалась в основном у вершин куба, а цинк — у пространственных центров. Вот пример того, как важно знание симметрии: свойства систем, очень сильно отличающихся своими межатомными свойствами,нейтронной спектроскопии кристаллов. Несмотря на значительное количество изображенных данных, нужно отдавать себе отчет, что еще большее их число скрыто для случая несимметрийных частот и для измерений интенсивностей нейтронных групп. Но и описание, и анализ сложны. Описание — потому, что наша интуиция и процесс зрительного восприятия базируются на трех пространственных и одном временному измерении, а данные для кристалла с одним атомом на элементарную ячейку его решетки требуют пятимерного представления, а для кристаллов сложной структуры — еще больше. Анализ — потому, что конкретной частоте или интенсивности, вообще говоря, нельзя сопоставить определенную формулу — сперва необходимо отсортировать данные. В нескольких цитированных выше работах сделан небольшой шаг на этом пути — вычисления и экспериментальное определение динамических структурных факторов.

Рисунки 11–16 иллюстрируют главную черту нейтронной спектроскопии кристаллов. Несмотря на значительное количество изображенных данных, нужно отдавать себе отчет, что еще большее их число скрыто для случая несимметрийных частот и для измерений интенсивностей нейтронных групп. Но и описание, и анализ сложны. Описание — потому, что наша интуиция и процесс зрительного восприятия базируются на трех пространственных и одном временному измерении, а данные для кристалла с одним атомом на элементарную ячейку его решетки требуют пятимерного представления, а для кристаллов сложной структуры — еще больше. Анализ — потому, что конкретной частоте или интенсивности, вообще говоря, нельзя сопоставить определенную формулу — сперва необходимо отсортировать данные. В нескольких цитированных выше работах сделан небольшой шаг на этом пути — вычисления и экспериментальное определение динамических структурных факторов.

Результаты этих и других работ следующих нескольких лет широко представлены в обзора [77–80]. В то же время появились сравнительные результаты из других

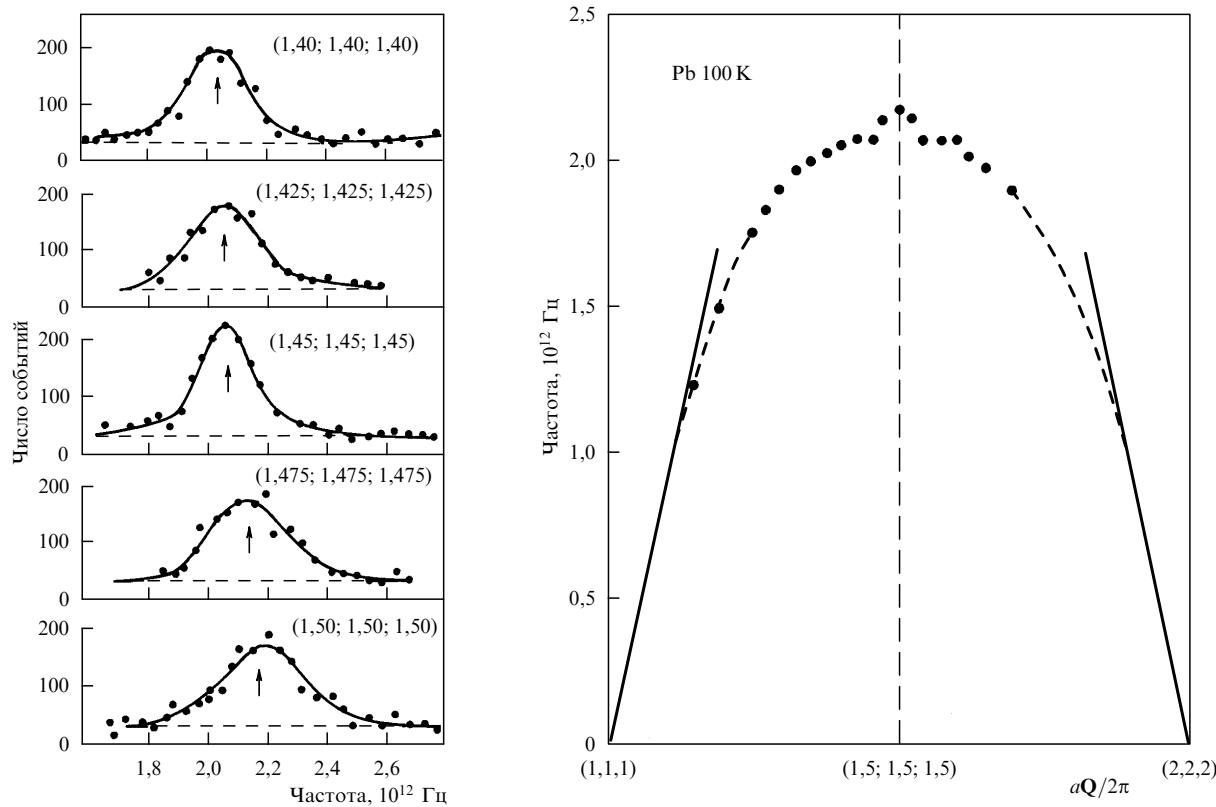
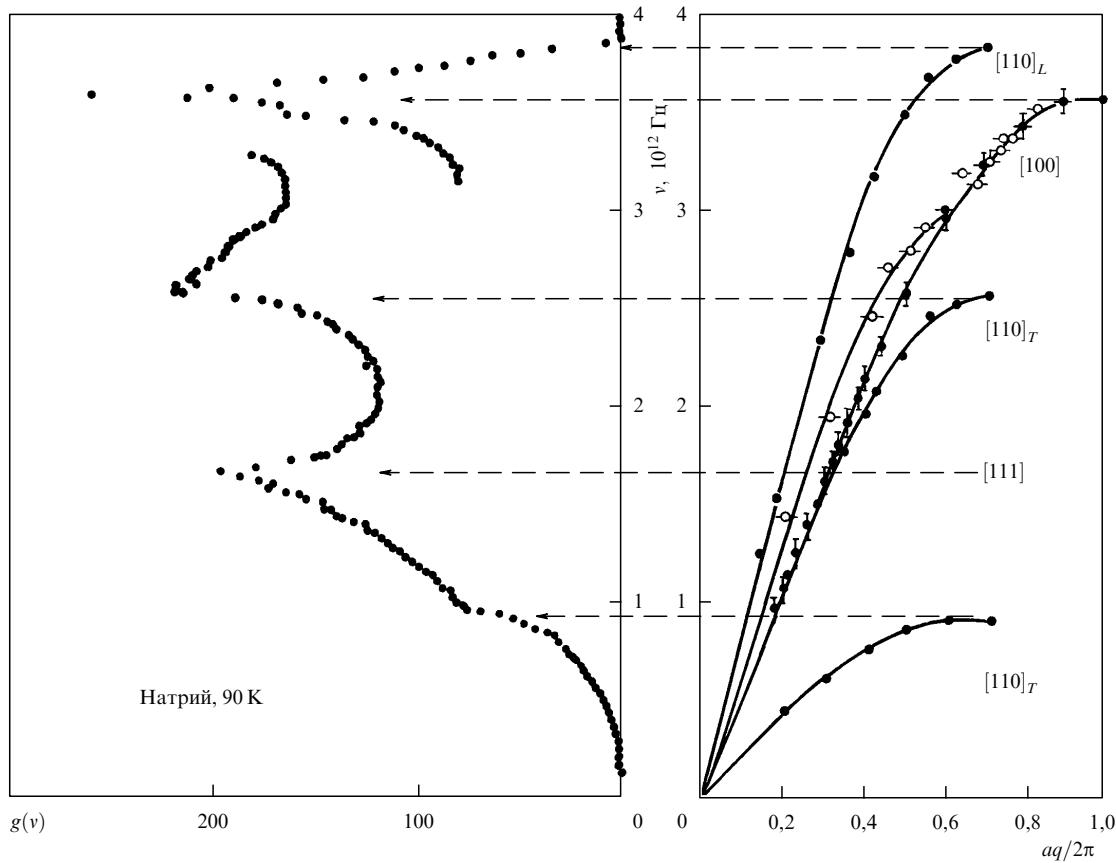


Рис. 14. Эффект Коны в дисперсионных кривых Pb [70]. Ряд близко расположенных фононов приводит к аномальному отклонению в соответствующем дисперсионном соотношении  $v(q)$ , в данном случае по шкале поверхности Ферми в направлении  $(\zeta, \zeta, \zeta)$



**Рис. 15.** Распределение частот  $g(v)$  для Na при 90 К [72], вычисленное исходя из модели постоянных сил. Приведены соответствующие кривые  $v(q)$  [73], а также показана связь между частотами в точках симметрии и сингулярности Ван Хова  $q(v)$  [31]

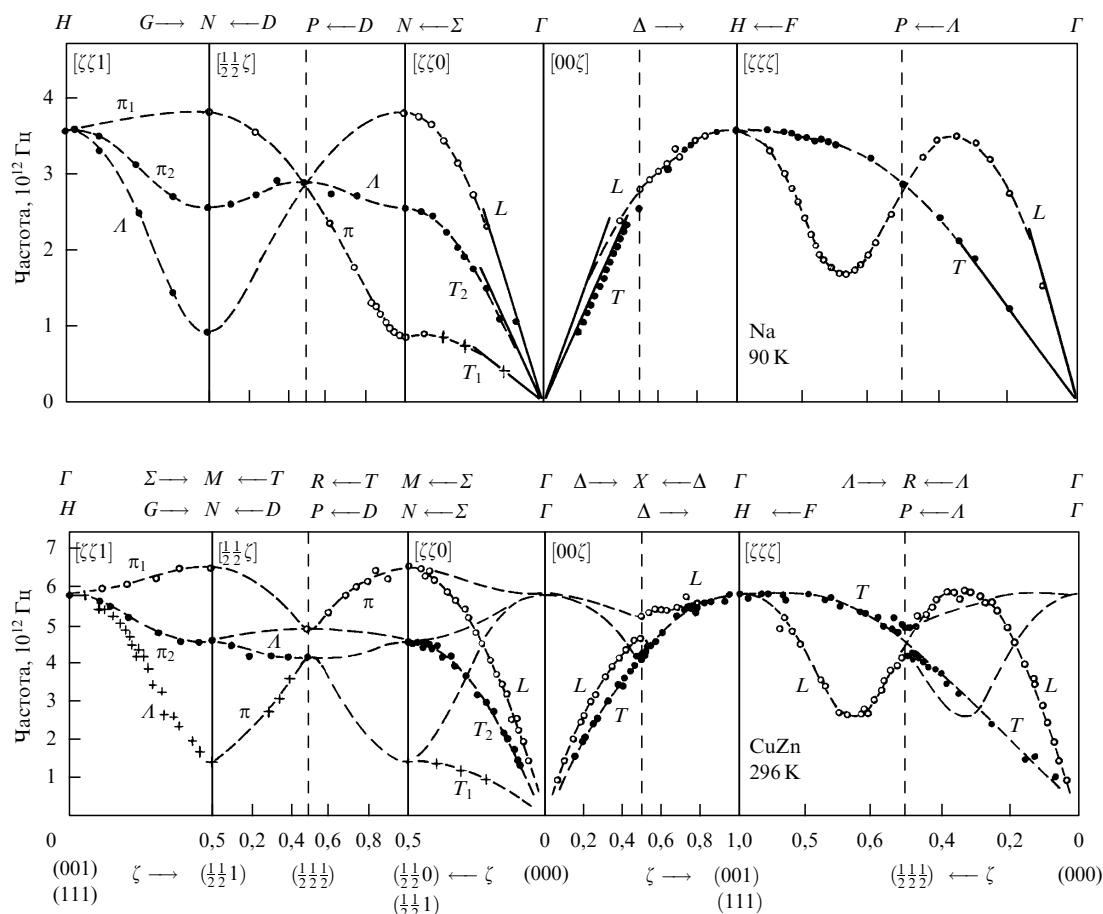
лабораторий [65, 74]. Из фазы развития область вступила в фазу реальной жизни. Центром моей собственной программы, проводимой теперь в Макмастерском университете, оставалось изучение физики фононов с особым упором на исследования металлов и сплавов. Я сослался на работу [61] моих первых двух студентов в этом университете — Эрика Свенссона и Майкла Роу, — посвященную фононам в кристаллах с точечными массовыми дефектами. Первые эксперименты были проведены на монокристаллах сплава меди с золотом (9,3 ат. %). Несмотря на то, что число дефектов было большим, чем хотелось бы, получены интересные результаты, которые Свенсон и Роу улучшили в дальнейшем.

**Природа, нейтронная спектроскопия и Великий Атлас**  
Результат — это награда за деятельность человека. При выборе своей деятельности для физических экспериментов путеводителем для нас является существующая теория и вычисления, основанные на ней. Если получится так, как ожидалось, наградой станет дополнительное свидетельство в пользу теории. Если нет — открываются новые возможности для экспериментирования и построения теорий. Ранние работы по нейтронной физике мало что могли противопоставить основным физическим теориям (в частности, квантовой механике), но, как мне кажется, добавили кое-что для уверенности в них. С теориями, бытовавшими в то время в литературе, ситуация иная. Я не припомню ни одного случая, когда экспериментальные результаты находились бы в количественном согласии с расчетами в существующей модели.

4\*

В действительности, как правило, несогласие результатов с моделью оказывалось качественным, но в той мере, в какой оно позволяло подсказать необходимые модификации модели, требуемые для того, чтобы модель соответствовала действительности. Обычно существующая модель служила хорошим языком для изложения результатов эксперимента, но требовала модификации, чтобы удовлетворительно описывать эти результаты. И лишь для феноменологических теорий с их многообразием подгоночных параметров (таких, как теория Борна—фон Кармана) модификация была "тривиальной".

То, что теория служила хорошим языком, означает, что иногда возникала возможность прямо сравнить результаты нейтронных экспериментов и экспериментов другого типа (как, например, инфракрасная адсорбция) и, в каком-то смысле, интерпретировать последние. Но главное значение нейтронных экспериментов в их влиянии на процесс построения новых моделей микромира, которые могли бы применяться и для вычислений других величин. Огромное число "миров под вопросом" (физических систем при определенной температуре, под определенным давлением и т.д.) поднимает вопрос: какие именно из них могут быть включены в Великий Атлас и в какой пропорции? Понятия о химических и кристаллографических структурах уже, вероятно, можно найти на любой карте Атласа. Стоит ли пускать туда фононы с их дисперсионными кривыми и описаниями распадов ("законами"), магноны с их "законами" и другие многочисленные квантовые объекты со своими "законами"? А зависящие от времени функции распределения? Или мы



**Рис. 16.** Полные дисперсионные кривые для Na [71] и упорядоченного CuZn [73]. Буквами обозначены теоретико-групповые названия каждой ветви

должны констатировать, что все это уже есть в изначальной теории и нужно выбирать лишь из того, что может явиться характеристикой системы? У меня были мысли по этому поводу, но это уже другая история.

### Благодарности

Кроме всех многочисленных коллег, внесших много лет назад вклад в упомянутые мной работы, многих из которых я назвал в тексте и ссылках, я должен выразить благодарность Atomic Energy of Canada Ltd. и Макмастерскому университету, ряду его сотрудников за помощь в подготовке к этому замечательному событию. В частности, миссис Пэт Картер, которая помогла мне с этой лекцией и взяла на себя другие секретарские обязанности.

(Перевод с англ. А.В. Субботина)

### Список литературы

1. *The Neutron and its Applications*, 1982 (Ed. P Schofield) (Conference Series Number 64). (Bristol, London: The Institute Physics, 1983). *Pile Neutron Research in Physics* (Vienna: International Atomic Energy Agency, 1962)
2. *Fifty Years of Neutron Diffraction* (Ed. G E Bacon) (Bristol: Adam Hilger, 1986)
3. *Inelastic Scattering of Neutrons by Solids and Liquids* (Vienna: International Atomic Energy Agency, 1961)
4. *Inelastic Scattering of Neutrons by Solids and Liquids* (Vienna: International Atomic Energy Agency, Vols. I, II: 1963, I, II: 1965, I, II: 1968, 1972)
5. *Proc. of International Conference of Magnetism and Crystallography* Vol. II, III (1961) (*J. Phys. Soc. Jpn* **17** Suppl. B-II, B-III (1962))
6. *The Interaction of Radiation with Solids* (Eds R Strumane, J Nihoul, R Givers, S Amelinckx) (North-Holland Publishing, 1964)
7. *Neutron Physics* (Ed. M L Yeager) (New York: Academic Press, 1962)
8. *Solid State Physics* (Eds F Seitz, D Turnbull) (London, New York: Academic Press, 1955–1994)
9. *Phonons and Phonon Interactions* (Ed. Thor A Bak) (New York, Amsterdam W A Benjamin Inc., 1964)
10. *Phonons in Perfect Lattices and in Lattices with Point Imperfections* (Ed. R W H Stevenson) (Edinburgh, London: Oliver and Boyd, 1966)
11. *Thermal Neutron Scattering* (Ed. P A Egelstaff) (London, New York: Academic Press, 1965)
12. *Magnetic and Inelastic Scattering of Neutrons by Metals* (Eds T J Rowland, P A Beck) (Metallurgical Society Conferences, Vol. 43) (New York: Gordon and Breach, 1968)
13. Mott N F, Jones H *Properties of Metals and Alloys* (Oxford University Press, 1936)
14. Seitz F *The Modern Theory of Solids* (New York, London: McGraw Hill, 1940)
15. Max Born, Kun Huang *Dynamical Theory of Crystal Lattices* (Oxford University Press, 1954)
16. Bacon G E *Neutron Diffraction* (Oxford University Press, Ed. 1955, 1962, 1975)
17. *Scattering of Thermal Neutrons (A Bibliography 1932–1974)* (Eds A Laros, J Vanderwal) (Solid State Literature Guides Volume 7) (New York, London: IFI/PLenum, 1974)
18. Brockhouse B N *Slow neutron spectroscopy: an historical account over the years 1950–1977*. [1] p. 193–198
19. Cassels J M *The Scattering of Neutrons by Crystals* *Prog. Nucl. Phys.* (Ed. O R Frisch) **1** 185 (1950)
20. De Gennes P G *Liquid Dynamics and Inelastic Scattering of Neutrons* *Physica* **25** 825 (1959)

21. Elliott R J, Lowde R D *The inelastic scattering of neutrons by magnetic spin waves Proc. Roy. Soc. (London) A* **230** 46 (1955)
22. Finkelstein R J Scattering of Neutrons in Polycrystals *Phys. Rev.* **72** 907 (1947)
23. Halpern O, Johnson M H On the Magnetic Scattering of Neutrons *Phys. Rev.* **55** 898 (1938)
24. Hurst D G, Pressesky A J, Tunnicliffe P R The Chalk River Single-Crystal Neutron Spectrometer *Rev. Sci. Instr.* **21** 705 (1950)
25. Moorhouse R G Slow Neutron Scattering by Ferromagnetic Crystals *Proc. Phys. Soc. A* **64** 1097 (1951)
26. Placzek G, Van Hove L Crystal Dynamic and Inelastic Scattering of Neutrons *Phys. Rev.* **93** 1207 (1954)
27. Seeger R J, Teller E On The Inelastic Scattering of Neutrons by Crystal Lattices *Phys. Rev.* **62** 37 (1942)
28. Shull C G Wave properties of the neutron. [1] p. 157. Early Neutron Diffraction Technology. [2] p. 19
29. Squires G L *Multi-oscillator processes in the scattering of neutrons by crystals Proc. Roy. Soc. (London) A* **212** 192 (1952)
30. Van Hove L Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles *Phys. Rev.* **95** 249 (1954). Time-Dependent Correlations between Spins and Neutron Scattering in Ferromagnetic Crystals *Phys. Rev.* **95** 1374 (1954)
31. Van Hove L The Occurrence of Singularities in the Elastic Frequency Distribution of a Crystal *Phys. Rev.* **89** 1189 (1953)
32. Van Vleck J H On the Theory of the Forward Scattering of Neutrons by Paramagnetic Media *Phys. Rev.* **55** 924 (1939)
33. Vineyard G H Scattering of Slow Neutrons by a Liquid *Phys. Rev.* **110** 999 (1958)
34. Waller I, Froman P O On neutron diffraction phenomena according to the kinematical theory *Arkiv for Fysik* **4** 183 (1952). Froman P O *ibid* **4** 191 (1951)
35. Walker C B X-Ray Study of Lattice Vibrations in Aluminum *Phys. Rev.* **103** 547 (1956)
36. Weinstock R Inelastic Scattering of Slow Neutrons *Phys. Rev.* **65** (1944)
37. Brockhouse B N A Childhood of Slow Neutron Spectroscopy. [2] p. 35
38. Egelstaff P A Inelastic Scattering of Cold Neutrons *Nature* **168** 290 (1951)
39. Brockhouse B N, Hurst D G Energy Distribution of Slow Neutrons Scattering from Solids *Phys. Rev.* **88** 542 (1952)
40. Lowde R D Diffuse Reflection of Neutrons from a Single Crystal *Proc. Phys. Soc. A* **65** 857 (1952). On the diffuse reflexion of neutrons by a single crystal *Proc. Roy. Soc. A* **221** 206 (1954)
41. Brockhouse B N A New Tool for the Study of Energy Levels in Condensed Systems (A). Study of Energy Levels in Solids, Liquids and Magnetic Materials by Scattered Slow Neutrons (T) *Phys. Rev.* **98** 1171 (1955)
42. Brockhouse B N Energy Distribution of Neutrons Scattered by Paramagnetic Substances *Phys. Rev.* **99** 601 (L) (1955)
43. Jacrot B Mesure de l'énergie de neutrons très lents après une diffusion inélastique par des polycristaux et des monocrystaux *Compt. Rend.* **240** 745 (1955)
44. Brockhouse B N Neutron Scattering and the Frequency Distribution of the Normal Modes of Vanadium Metal *Can. J. Phys.* **33** 889 (1955)
45. Brockhouse B N, Stewart A T Scattering of Neutrons by Phonons in an Aluminum Single Crystal *Phys. Rev.* **100** 756 (1955). Normal Modes of Aluminum by Neutron Spectrometry *Rev. Mod. Phys.* **30** 236 (1958)
46. Carter R S, Palevsky H, Hughes D J Inelastic Scattering of Slow Neutrons by Lattice Vibrations in Aluminum *Phys. Rev.* **106** 1168 (1957)
47. Larsson K -E, Dahlborg U, Holmryd S A study of some temperature effects on the phonons in aluminium by use of cold neutrons *Ark. Fys.* **17** 369 (1960)
48. Eisenhauer C M, Pelan I, Hughes D J, Palevsky H, Measurement of Lattice Vibrations in Vanadium by Neutron Scattering *Phys. Rev.* **109** 1046 (1958)
49. Stewart A T, Brockhouse B N Vibration Spectra of Vanadium and a Mn-Co Alloy by Neutron Spectrometry *Rev. Mod. Phys.* **30** 250 (1958)
50. Brockhouse B N Structural Dynamics of Water by Neutron Spectrometry *Acta Cryst.* **10** 827 (1957), *Suppl. Nuovo Cimento* **9** 45 (1958). Diffusive Motions in Liquids and Neutron Scattering *Phys. Rev. Lett.* **2** 287 (1959). Sakamoto M, Brockhouse B N, Johnson R G, Pope N K Neutron Inelastic Scattering Study of Water. [5] Suppl. B-II p. 370
51. Brockhouse B N, Pope N K Time-dependent Pair Correlations in Liquid Lead *Phys. Rev. Lett.* **3** 259 (1959)
52. Cohen M, Feyman R P Theory of Inelastic Scattering of Cold Neutrons from Liquid Helium *Phys. Rev.* **107** 13 (1957)
53. Palevsky H, Otnes K, Larsson K E Excitation of Rotons in He II by Cold Neutrons *Phys. Rev.* **108** 1346 (1958), *Phys. Rev.* **112** 11 (1959)
54. Yarnell J L, Arnold G P, Bendt P J, Kerr E C Energy vs Momentum Relations for Excitations in Liquid Helium *Phys. Rev. Lett.* **1** 9 (1958). Excitations in Liquid Helium: Neutron Scattering Measurements *Phys. Rev.* **113** 1379 (1959)
55. Henshaw D G Energy-Momentum Relation in Liquid Helium by Inelastic Scattering of Slow Neutrons *Phys. Rev. Lett.* **1** 127 (1958). Henshaw D G, Woods A D B Modes of Atomic Motions in Liquid Helium by Inelastic Scattering of Neutrons *Phys. Rev.* **121** 1266 (1961)
56. Brockhouse B N Scattering of Neutrons by Spin Waves in Magnetite *Phys. Rev.* **106** 859 (1957). Field Dependence of Neutron Scattering by Spin Waves *Phys. Rev.* **111** 1273 (1958)
57. Watanabe H, Brockhouse B N Observation of Optical and Acoustical Magnons in Magnetite *Phys. Lett.* **1** 189 (1962). Exchange Field Splitting in Ytterbium Iron Garnet *Phys. Rev.* **128** 67 (1962)
58. Sinclair R N, Brockhouse B N Dispersion Relation for Spin Waves in a foo Cobalt Alloy *Phys. Rev.* **120** 1638 (1960)
59. Brockhouse B N, Becka L N, Rao K R, Sinclair R N, Woods A D B Crystal Field Spectra in Rare Earth Oxides. [5] Suppl. B-III p. 63
60. Brockhouse B N Methods for Neutron Spectrometry. [3] p. 113
61. Svensson E C, Brockhouse B N, Rowe J M "In-Band" modes of vibration of a dilute disordered alloy – Cu (Au) *Solid State Comm.* **3** 245 (1965)
62. Brockhouse B N, Iyengar P K Normal Vibrations of Germanium by Neutron Spectrometry *Phys. Rev.* **108** 894 (1957). Normal Modes of Germanium by Neutron Spectrometry *Phys. Rev.* **111** 747 (1958)
63. Brockhouse B N Lattice Vibrations in Semiconductors by Neutron Spectrometry *J. Phys. Chem. Solids* **8** 400 (1959). Lattice Vibrations in Silicon and Germanium *Phys. Rev. Lett.* **2** 256 (1959)
64. Brockhouse B N, Dasannacharya B A Temperature Effects on Lattice Vibrations in Germanium *Solid State Comm.* **1** 205 (1963)
65. Yarnell J L, Warren J L, Wenzel R G Lattice Vibrations in Diamond *Phys. Rev. Lett.* **13** 13 (1964)
66. Woods A D B, Cochran W, Brockhouse B N Lattice Dynamics of Alkali Halide Crystals *Phys. Rev.* **119** 980 (1957)
67. Woods A D B, Brockhouse B N, Cowley R A, Cochran W Lattice Dynamics of Alkali Halide Crystals. II. Experimental Studied of KBr NaI. *Phys. Rev.* **131** 1025 (1963). Cowley R A, Cochran W, Brockhouse B N, Woods A D B III. Theoretical *Phys. Rev.* **131** 1030 (1963)
68. Brockhouse B N, Arase T, Caglioti G, Rao K R, Woods A D B Crystal Dynamics of Lead. I. Dispersion Curves at 100 K *Phys. Rev.* **128** 1099 (1962)
69. Kohn W Image of the Fermi Surface in the Vibration Spectrum of a Metal *Phys. Rev. Lett.* **2** 393 (1959)
70. Brockhouse B N, Rao K R, Woods A D B Image of the Fermi Surface in the Lattice Vibrations of Lead *Phys. Rev. Lett.* **7** 93 (1961)
71. Woods A D B, Brockhouse B N, March R H, Stewart A T, Bowers R Crystal Dynamics of Sodium at 90 K *Phys. Rev.* **128** 1112 (1962)
72. Dixon A E, Woods A D B, Brockhouse B N Frequency Distribution of the Lattice Vibrations in Sodium *Proc. Phys. Soc.* **81** 973 (1963)
73. Gilat G, Dolling G Normal Vibrations of  $\beta$  Brass *Phys. Rev.* **138** A1053 (1963)
74. Stedman R, Nilsson S Phonons in Aluminium at 80 K. [4] Vol. I, p. 211 (1965)
75. Shull C G, Wollan E O Applications of Neutron Diffraction to Solid State Problems. [8] Vol. 2, p. 138 (1956)
76. Kothari L S, Singwi K S, Interaction of Thermal Neutrons with Solids. [8] Vol. 8, p. 110 (1959)
77. Brockhouse B N Crystal and Liquid Dynamics from Neutron Energy Distributions. [7], p. 129 Phonons and Neutron Scattering. [9], p. 221. Neutron Scattering by Phonons. [10], p. 110
78. Brockhouse B N, Hautecler S, Stiller H Inelastic Scattering of Slow Neutrons [6], p. 580
79. Dolling G, Woods A D B Thermal Vibrations of Crystal Lattices. [11], p. 193
80. Lomer W M, Low G G Introductory Theory. [11] p. 1 (Other articles by R M Brugger, P K Iyengar, S J Cocking and F J Webb, G Dolling and A D B Woods, B Jacrot and T Riste, A Sjolander, K E Larsson, J A Janik and A Kowalska provide rather complete reports on the state of the field by 1965)