

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

Научная сессия Отделения общей физики и астрономии Российской академии наук

(25 декабря 1996 г.)

25 декабря 1996 г. в Институте физических проблем им. П.Л. Капицы РАН состоялась научная сессия Отделения общей физики и астрономии Российской академии наук. На сессии были заслушаны доклады:

1. **Озеров Р.П.** (Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва). *История нейтронографии и тенденции ее развития.*

2. **Аксенов В.Л.** (Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл.). *Современные методы структурной нейтронографии.*

3. **Изюмов Ю.А.** (Институт физики металлов, Екатеринбург). *Физические основы магнитной нейтронографии.*

4. **Румянцев А.Ю.** (РНЦ "Курчатовский институт", Москва). *Нейтронные исследования в РНЦ "Курчатовский институт".*

5. **Малеев С.В.** (Петербургский институт ядерной физики, Гатчина, С.-Петербург). *Нейтронное рассеяние и исследования по физике твердого тела в ПИЯФ.*

Содержания четырех докладов публикуются ниже.

PACS numbers: 01.65.+g, 61.12.-q

История нейтронографии и тенденции ее развития

Р.П. Озеров

Нейtron был открыт Дж. Чедвиком в 1932 г. Это открытие оказало огромное влияние на весь ход развития человеческого общества. В частности, использование рассеяния нейтронов как метода исследования, особенно в физике твердого тела, во многом определило известные успехи современной науки и техники.

Всего два года после того, как Луи де Бройль (1924 г.) предложил формулу, связывающую корпускулярные представления о движении частиц с волновыми, были осуществлены эксперименты по дифракции электронов (1927 г.), подтвердившие эту идею. Естественно, после открытия нейтрона стали проводиться эксперименты, которые должны демонстрировать справедливость корпускулярно-волнового дуализма, на этой "массивной" частице. Сразу три работы были опубликованы в 1936 г. (т.е. примерно три-четыре года спустя после открытия нейтрона). В первой из них [1] теоретически исследовался процесс прохождения нейтронов через поликристаллические образцы и отмечался эффект некоторого увеличения пропускания при длине волн нейтронов более двух наибольших межплос-

костных расстояний кристаллического образца. Во второй работе [2] этот эффект в некотором роде подтверждался экспериментально. Наиболее убедительной выглядит третья работа Митчелл и Пауэрса [3], в которой брэгговское рассеяние подтверждалось в современном его представлении.

Очень малая интенсивность Ra – Be-источников послужила причиной того, что эксперименты по дифракции нейтронов были отнесены до поры более интенсивных источников. Но в это время активно развивалась теория взаимодействия нейтронов с ядрами и атомами. Так, Блох [4, 5] рассмотрел магнитное рассеяние нейтронов магнитно-упорядоченными кристаллами, преимущественно ферромагнетиками, а Хальперн и Джонсон [6] показали, что магнитное рассеяние может проявляться более явно в парамагнитных кристаллах. Брэйт и Вигнер [7] создали теорию взаимодействия нейтронов с ядрами (рассеяние и поглощение) в предположении наличия у ядра только одного возбужденного уровня. Впоследствии эта теория позволила успешно классифицировать закономерности измеренных в экспериментах нейтронных сечений.

Эксперименты в новом, близком к современному варианте проводились уже на атомных реакторах (вначале они назывались "котлы"). Первый реактор был запущен в Чикаго в конце 1942 г. коллективом ученых под руководством Э. Ферми. На евро-азиатском континенте первый реактор был запущен 50 лет назад (1946 г.) в Москве. Работа по созданию этого реактора осуществлялась под руководством И.В. Курчатова. Первые реакторы не были приспособлены для экспериментов на нейтронных пучках. Специальный реактор, допускающий такие эксперименты, был сооружен в США, в Ок-Ридже, в конце 1943 г. К годам, последовавшим за этим, относятся все пионерские работы по рассеянию нейтронов, которые и определили нейтронографию как метод исследования физики твердого тела.

Сразу после пуска этих реакторов были заложены основы конструкции нейтронографических установок, т.е. установок для изучения строения (главным образом) кристаллических объектов на основе рассеяния ими нейтронов. Я имею в виду установки, которые содержали в своем составе узлы монохроматизации нейтронов либо путем механического прерывания непрерывного полихроматического пучка нейтронов из реактора (так называемые "чоперы", первый из которых был сконструирован Э. Ферми), либо путем отражения от монохрустиков. В частности, первый одноосный кристаллический спектрометр, сконструированный У. Цином [8], в основном служил для измерения поперечных сечений ядерных реакций с участием нейтронов. На этом спектрометре получены первые так называемые "кривые качания", а также прове-

дены первые нейтронографические работы, позволившие в короткий срок заложить основы нового мощного метода структурного анализа и, вообще, исследования твердого тела. Наиболее важной в этом отношении была статья Э. Ферми и Л. Маршалла [9], в которой были определены возможности нейтронной дифракции в изучении физики и химии кристаллов и измерены амплитуды (длины) рассеяния для более чем 20 ядер, в том числе и для тех, у которых они оказались отрицательными.

Дальнейшему развитию нейтронографии как метода мы обязаны, главным образом, двум физикам: Эрнесту Воллану и Клиффорду Шаллу. Э.О. Воллан (1902–1984 гг.) к этому времени был уже сложившимся физиком, имевшим опыт работы с рентгеновскими лучами, который смог использовать свой опыт при работе с нейтронами. К. Шалл (род. в 1915 г.) закончил Технологический институт Карнеги в 1937 г., защитил "кандидатскую" диссертацию по проблемам ядерной физики в 1941 г. в Нью-Йоркском университете. В 1946 г. он пришел в Ок-Риджскую национальную лабораторию и принял самое активное участие в создании нейтронографических установок и в проведении соответствующих экспериментов. В последующие годы (1946–1969 гг.) он активно участвовал также в совместных работах в различных лабораториях, что обусловило наличие у него большого числа учеников. Даже краткого, далеко не полного перечисления работ К. Шалла достаточно, чтобы представить себе его роль в становлении и развитии нейтронографии. Ему принадлежит разработка методов измерения сечений рассеяния нейтронов (когерентных и некогерентных), в том числе вызванного изотопической и спиновой некогерентностью, монохроматоров — галогенидов, затем монокристаллов металлов, систем радиационной защиты монохроматоров, фотографирования картин нейтронной дифракции (возрожденной сейчас Г. Смитом в компании Neutronics), нейтронных дифрактометров — двух- и трехосных, в том числе и на поляризованных нейтронах, и многое другое. К пионерским работам К. Шалла можно отнести определение положения атомов протия и дейтерия в гидриде натрия, положение протия в структуре льда, исследование упорядочения в сплавах металлов с близкими атомными номерами, определение магнитных моментов атомов в сплавах, измерение форм-факторов магнитного рассеяния атомов многих элементов, в том числе элементов разных групп в Периодической системе Д.И. Менделеева, и другие. Первые обобщения были опубликованы в 1948 г. [10]. Следует отметить и просто гениальные эксперименты: открытие антиферромагнитного упорядочения и, вообще, введение в науку термина "магнитная структура кристаллов", исследование распределения намагниченности в железе, подтверждение существования "спаривания" электронов (куперовских пар) в сверхпроводниках, исследование динамических эффектов при рассеянии нейтронов идеальными кристаллами, обнаружение предложенного ранее особого, "швингеровского", типа рассеяния нейтронов и др. Схемы, результаты, картины из оригинальных работ К. Шалла широко используются всюду в обзорах и книгах.

Примерно в то же время начались исследования по нейтронной спектроскопии, среди которых надо отметить работы Б.Н. Брокхауза (род. в 1918 г.), проведенные в лаборатории Чок-Ривера (Канада), куда он поступил после окончания им университетов Британской Колумбии и Торонто. В 1952 г. под его руководством был запущен первый трехосный нейтронный спектрометр и проведены первые измерения упругого некогерентного рассеяния (ванадий), заложившие основу нейтронной спектроскопии.

К 1946 г. относится также начало работы Дж.Е. Бэкона в Харуелле (Англия). По его техническому заданию кристаллический спектрометр был изготовлен фирмой "Джон Карран" и затем установлен на исследовательском реакторе ВЕРО. В 1948 г. (вместе с Р. Лаудом) он опубликовал результаты исследования отражательной способности монокристаллов, которые перекидывали мостик между тем, что было известно о взаимодействии рентгеновских лучей с кристаллами и рассеянием нейтронов. Его вклад в нашу науку определялся первыми работами по исследованию роли атомов водорода и водородной связи в физических свойствах кристаллов; его работа по структуре KH_2PO_4 и ее зависимости от температуры, во многом повлиявшая на развитие науки о сегнетоэлектричестве, может быть причислена к основополагающим. Хорошо известны также его работы по магнетизму металлов и сплавов. Профессор Бэкон известен также как автор книги "Дифракция нейтронов", вышедшей в Англии в 1954 г. и выдержавшей три издания (последнее — в 1975 г. [11]); первое издание было переведено на русский язык и издано у нас в 1957 г. [12].

Первые реакторы в СССР в условиях гонки вооружений создавались именно для военных целей и не были приспособлены к пучковым экспериментам. К этому времени относится большая подготовительная работа по изучению литературных публикаций. Воодушевленные большой важностью задачи, как нам казалось в ту пору, и, по-видимому, так оно и было, мы, студенты Московского инженерно-физического института (МИФИ), проявляли огромную активность в созданном нами научно-студенческом обществе. Я был рад работать (в качестве заместителя) с Николаем Геннадиевичем Басовым, в котором уже тогда были видны задатки большого ученого. Мой учитель, профессор Герман Степанович Жданов, заведующий кафедрой рентгенографии МИФИ, вместе с доцентом этой кафедры Борисом Михайловичем Левитским впервые обратили мое внимание на только что опубликованные, приведенные выше работы, в которых дифракция нейтронов использовалась для изучения строения кристаллов. Вскоре я подготовил обзор, в котором обобщил немногочисленный к тому времени материал. По инициативе Э.В. Шпольского, который был в то время главным редактором журнала "Успехи физических наук", обзор был опубликован в этом журнале. Впоследствии результаты всех новых работ в этой области также приводились и анализировались в этом журнале [13].

В 1957 г. как сотрудник Физико-химического института им. Л.Я. Карпова я был прикомандирован к Институту атомной энергии (ИАЭ) им. И.В. Курчатова для работы на реакторе ИРТ.

Как и всем остальным, нам приходилось начинать все с "нуля": в стране не было ни счетчиков нейтронов, ни подходящих кристаллов-монохроматоров, ни криостатов и нагревателей, наконец, не было опыта производства нейтронных спектрометров (да и желания промышленности их производить). Мы использовали ту аппаратуру, которая обеспечивалась промышленностью, выпускающей универсальные рентгеновские дифрактометры для структурных исследований (УРС). Для уменьшения влияния от фоновых нейтронов зала реактора была сооружена массивная защита, закрывающая весь дифрактометр целиком. Вся эта работа проводилась моей группой, в которой активно работали И.Д. Датт и уже ушедшие от нас Н.В. Раннев, С.В. Киселев, В.П. Смирнов; к нам присоединились А.А. Лошманов и В.И. Гоманьков.

Работы по нейтронографии проводились в то время в разных институтах страны, либо научными коллективами,

которые располагали своими реакторами, либо на основе кооперации заинтересованных людей с "владельцами" нейтронов. В Институте кристаллографии АН СССР этой тематикой занимался И.И. Ямзин и его аспирант Ю.З. Нозик; они работали на реакторе Института экспериментальной и теоретической физики (ИТЭФ) вместе с сотрудником этого института Ю.Г. Абовым. Научное направление определялось интересом к физическим свойствам ферритов. Ю.З. Нозик занимался исследованием оксидов со структурой шпинели. И.И. Ямзин с группой других аспирантов исследовали (несколько позже) магнитную структуру длиннопериодических гексагональных ферритов.

Б.Г. Лященко, Д.Ф. Литвин со своими коллегами, будучи сотрудниками Института черной металлургии, прикомандированными к ИТЭФ, исследовали с помощью нейтронов неоднородности в сплавах.

Одну из наиболее значительных работ в то время сделали на реакторе Первой атомной электростанции в Обнинске (теперь это Физико-энергетический институт (ФЭИ)) В.Н. Быков с сотрудниками, руководимые Н.В. Агеевым; одновременно с Дж. Хастингсом и Л. Корлиссом (Брукхейвенская национальная лаборатория, США) они обнаружили сателлиты основных магнитных отражений у металлического хрома. Эти эксперименты стимулировали многочисленные работы других авторов, в которых предпринимались попытки объяснить их результаты на основе геликоидальной магнитной структуры. Эта "детективная" история с гонками, обсуждением приоритетов, усложнением моделей, достижениями и разочарованиями хорошо изложена в книге Дж.Е. Бэкона [11].

Со всеми этими людьми, ставшими вскоре моими близкими друзьями, мне пришлось столкнуться и впоследствии работать в тесном контакте.

В связи с расширением работ по нейтронографии увеличивался численно и наш коллектив. Особенно возрос приток новых кадров после поездки И.В. Курчатова в Англию, где на него произвели очень сильное впечатление нейтронографические исследования в Харуелле. Среди вновь поступивших в первую очередь следует отметить Н.А. Черноплекова и М.Г. Землянова, которые еще раньше на соседних пучках развернули работы по неупругому рассеянию нейтронов. От их работ того времени в мировой научной литературе остались фононный спектр ванадия, спектры некогерентного рассеяния протонов в гидриде лития, использование нуль-матриц в исследовании некогерентных эффектов примесей и др. Вскорости (в 1964 г.) к ним присоединились В.А. Соменков и С.Ш. Шильштейн. Этим ученым принадлежат великолепные нестареющиеся работы по физике взаимодействия нейтронов с кристаллами, динамическим эффектам, по структуре и динамике гидридов и многие другие. Сформированный в те далекие годы научный коллектив и сейчас продолжает исследования, находящиеся на мировом уровне.

В 1964 г. был пущен реактор ВВРЦ в филиале НИФХИ в Обнинске. Вместе с моими коллегами мы переместили всю нашу аппаратуру туда. Хорошим вкладом явилась закупка в Англии (с помощью Дж. Бэкона) нейтронного порошкового дифрактометра фирмы "Джон Карран", который работает до сих пор. Старый наш рентгеновский дифрактометр мы приспособили для монокристальных исследований и провели первые у нас в стране структурные работы по молекулярным кристаллам с водородными связями. Этот прибор тоже работает по сию пору.

В то же время под руководством Г.М. Драбкина были начаты исследования по рассеянию нейтронов в Ленинградском институте ядерной физики (ЛИЯФ). Главным направ-

лением этих работ была физика магнитного рассеяния нейтронов. Там тоже был создан плодотворно работающий и поныне коллектив, в составе которого можно отметить С.В. Малеева, В.П. Плахтия, А.И. Окорокова, В.К. Трунова и других.

Основной нейтронографический центр Урала находится в Екатеринбурге (Свердловске). За многие годы работы в Институте физики металлов (ИФМ) С.В. Вонсовский создал известную во всем мире школу по изучению магнетизма. Поэтому вполне естественно, что под Свердловском была организована нейтронографическая лаборатория на базе реактора ИВВ-2М под руководством С.К. Сидорова (затем Б.Н. Гощицкого) при участии А.В. Дорошенко. Задачей лаборатории является исследование структуры и динамики неупорядоченных кристаллов, в том числе подвергнутых радиационному воздействию, разупорядоченных сверхпроводников, магнетиков, конструкционных материалов.

В 60-е годы началось интенсивное строительство атомных реакторов во всех союзных республиках. Отдавая должное одному из достоинств этого всесоюзного проекта — значительному росту числа квалифицированных специалистов, нельзя не отметить и то распыление средств, которое этот проект породил, при очень низкой его эффективности. Для координации усилий всех республиканских центров существенную роль сыграли всесоюзные нейтронографические совещания, которые периодически проводились в Москве, Обнинске, Риге и других городах. Они и сейчас периодически проводятся под Екатеринбургом. Инициатором этих совещаний выступает ИФМ.

Неоценимое значение для развития нейтронных методов исследования имело строительство импульсного реактора ИБР в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ) в Дубне. В ту пору (в конце 50-х годов) для правительства СССР чрезвычайно большое значение имело создание объединенных проектов стран Восточной Европы. Одним из таких проектов было создание самого Института, а затем — строительство ИБР. Импульсный характер источника нейтронов создал предпосылки для разработки нового нейтронного метода структурного анализа, основанного на разложении в спектр рассеянных по закону Брэгга — Вульфа ($n\lambda = 2d \sin \theta$) нейтронов не по углу рассеяния θ , а по длине волн λ . Последняя измерялась по времени пролета нейтронов базы определенной длины, и поэтому метод был назван "метод времени пролета" (TOF). Идея такого метода носилась в ту пору в воздухе, в частности, в ИАЭ ее высказывал мой однокашник В. Сафонов. Однако реализован он был Б. Буласом сначала на специально "рвущемся" с помощью прерывателя нейтронном пучке с постоянным потоком, а потом — на более подходящем для этого ИБР. В Дубне эти эксперименты были поставлены под началом Ф.М. Шапиро группой сотрудников в составе В.В. Нитца, И. и Е. Сосновских, Р.П. Озерова.

В последние годы TOF-метод получил чрезвычайно широкое распространение в связи с тем обстоятельством, что для структурного анализа наиболее перспективными с точки зрения интенсивности оказались импульсные источники нейтронов на ускорителях ядерных частиц. Эти ускорители создают нейтронные импульсы чрезвычайно малой длительности, что позволяет реализовать TOF-метод с высоким разрешением в миниатюрных размерах. Вместе с тем, сравнительно редкие относительно широкие импульсы реактора ИБР-2 хоть и сопряжены с необходимостью больших размеров установок, но позволяют проводить измерения при синхронизированном с нейтронными вспышками квазистационарном (т.е. относительно большой длительности) воздействии на образец магнитных,

электрических и других полей большой силы; реализовать их в стационарном варианте практически невозможно. В частности, еще на ИБР-30 были проведены исследования воздействия магнитного поля на монокристаллы гематита, которые, насколько я знаю, до сих пор не превзойдены по величине напряженности магнитного поля.

Необходимо отметить также значительный вклад российских ученых в теорию взаимодействия нейтронов с твердым телом. В далеком 1950 г. вышла в свет книга А.И. Ахиезера и И.Я. Померанчука, которая помогла (мне в том числе) разобраться в новой для того времени теории рассеяния нейтронов ядрами. В научной школе Ю.М. Кагана разрабатывались вопросы физики твердого тела применительно к возможностям рассеяния нейтронов. Предсказанные ею эффекты были подтверждены затем экспериментальными работами уже упомянутого выше коллектива ИАЭ. Так, были разработаны теории поведения примеси тяжелого элемента в легкой матрице, и наоборот, особенностей в кривых дисперсии за счет трехчастичного взаимодействия, детально исследовано прохождение нейтронов через кристаллы в присутствии атомов примеси в определенных местах кристаллической решетки и др. Ю.А. Изюмов в Свердловске много работал в теории как собственно магнетизма, так и рассеяния нейтронов твердым телом. Мне посчастливилось встретиться с Ю.А. Изюмовым в 1961 г. на борту теплохода, на котором проходила конференция по магнетизму. Завязавшаяся дружба продолжается по сию пору. Там же мы договорились о том, что начнем работать над книгой по теории и практике рассеяния нейтронов кристаллами. Эта работа длилась в течение нескольких лет и завершилась нашей первой книгой; вскоре она вышла и в переводе на английский язык. Через несколько лет последовала уже серия книг на русском и английском языках. Можно сказать, что в отношении монографий по рассеянию нейтронов [14] Россия находится едва ли не на первом месте в мире.

Ю.А. Изюмов и его ученики результаты экспериментов по определению магнитной структуры магнетиков увязали с теорией магнитного упорядочения, создав тем самым теоретический базис нейtronографического определения магнитной структуры кристаллов. Отметим, что это касается не только коллинеарных, но и многоосных и несоизмеримых структур.

Стоит для полноты информации отметить и то, что коллективу ученых, в состав которого вошли Г.М. Драбкин, С.В. Малеев, А.И. Окороков, И.В. Наумов, Н.А. Черноплеков, В.А. Семенков, С.Ш. Шильштейн, М.Г. Землянов, А.Ю. Румянцев, Ю.А. Изюмов, Р.П. Озеров, в 1986 г. была присуждена Государственная премия за новые методы исследования твердого тела на основе рассеяния нейтронов стационарных атомных реакторов.

В последнее десятилетие работы в области нейtronографии проходят под воздействием двух основных факторов. Одним из них являются наши внутригосударственные перемены со всеми известными всем обстоятельствами. В результате "естественного отбора" практически прекратили свое существование многие научные коллективы. Другие перешли на более высокий уровень кооперации с зарубежными лабораториями с использованием имеющихся там экспериментальных возможностей. Второй фактор — конкуренция внутри самого структурного метода; я имею в виду сопоставление возможности импульсных и стационарных источников нейтронов, а также конкуренцию со стороны новых, современных методов таких, например, как синхротронное излучение.

Анализируя первый из двух приведенных факторов, следует принять его как реальность. Переходя ко второму,

я хотел бы оставить в стороне возможности ИБР-2 по тем причинам, которые были отмечены выше: этот источник имеет свои собственные задачи, у него есть своя собственная ниша, заполнение которой является актуальной проблемой. Сравнение возможностей реакторов (работающих в режиме постоянной мощности) и импульсных нейтронных источников на основе ускорителей ядерных частиц лучше всего провести в историческом аспекте, отражающем ход научно-инженерной мысли. Анализ кривых зависимости (по годам) мощности источников нейтронов (от Ra—Be-источника до современных стационарных и импульсных реакторов) показывает, что кривая стационарных реакторов вышла на насыщение, обусловленное невозможностью более эффективного отвода тепла от их активной зоны. Кривая же, характеризующая импульсные источники, такого "запределивания" не проявляет. Это позволяет высказать предположение, что стремление увеличить интенсивность источников для удовлетворения естественного желания решить те или иные научные проблемы связано с развитием импульсных источников.

Надо отметить, что последние годы были ознаменованы признанием общественностью заслуг перед наукой мировой нейtronографической школы. Несколько лет назад специально созданный совет при ОИЯИ присудил премию имени академика И.М. Франка профессору МИТ Клиффорду Шаллу. Уже тогда при торжественной церемонии оглашения и обсуждения этого решения было ясно, что этим дело не ограничится. Действительно, годом позже (т.е. в 1995 г.) Нобелевский комитет присудил Нобелевскую премию в области физики К. Шаллу и Б. Брокхаузу. Безусловно заслуженная награда вызывает чувство удовлетворения, так как, в общем, эта награда позволяет считать то, чем мы все занимались всю нашу жизнь (или по крайней мере часть ее), заслуживающим уважения человечества. Мне кажется только, что еще один ученый — профессор Дж.Е. Бэкон по его вкладу в нейtronографию также заслуживает высокого признания.

В заключение следует отметить ту пользу, которую несет в себе организация юбилейной сессии, связанная с возможностью, с одной стороны, оглянуться и понять закономерность развития науки и техники, а с другой — проанализировать перспективы.

Список литературы

1. Elsasser W M *Comp. Rend. A.S.* **202** 1029 (1936)
2. von Halban H, Preiswerk P *Comp. Rend. A.S.* **203** 73 (1936)
3. Mitchell D P, Powers P N *Phys. Rev.* **49** 453 (1936)
4. Bloch F *Phys. Rev.* **50** 259 (1936)
5. Bloch F *Phys. Rev.* **51** 994 (1937)
6. Halpern O, Johnson M H *Phys. Rev.* **55** 898 (1939)
7. Breit G, Wigner E *Phys. Rev.* **49** 519 (1936)
8. Zinn W *Phys. Rev.* **71** 752 (1947)
9. Fermi E, Marshal L *Phys. Rev.* **71** 666 (1947)
10. Wollan E O, Shull C G *Nucleonics* **3** 2 (1948)
11. Bacon G E, in *Neutron Diffraction* 3d ed. (Oxford: Clarendon Press, 1975) p. 636
12. Бэкон Дж Е Дифракция нейтронов (М.: ИЛ, 1957)
13. Озеров Р П УФН **38** (3) 413 (1949); **41** (2) 235 (1950); **41** (2) 239 (1950); **42** (1) 159 (1950); **42** (1) 161 (1950); **45** (4) 482 (1951); **47** (3) 445 (1952); **76** (2) 239 (1962)
14. Изюмов Ю А, Озеров Р П *Магнитное рассеяние нейтронов* (М.: Наука, 1966); Izumov Yu A, Ozerov R P *Magnetic Neutron Diffraction* (London: Plenum, 1970)
Нозик Ю З, Озеров Р П, Хенниг К *Нейтроны и твердое тело* (Под общей ред. Р.П. Озерова) Т. 1 *Структурная нейтронография* (М.: Атомиздат, 1980)
Изюмов Ю А, Найш В Е, Озеров Р П *Нейтроны и твердое тело* (Под общей ред. Р.П. Озерова) Т. 2 *Нейтронография магнети-*

ков (М.: Атомиздат, 1981)
 Изюмов Ю А, Черноплеков Н А *Нейтронная спектроскопия*
 (М.: Энергоиздат, 1983)
 Изюмов Ю А *Дифракция длиннопериодических систем* (М.:
 Энергоатомиздат, 1987)

PACS number: 61.12.Gz

Современные методы структурной нейtronографии

В.Л. Аксенов

1. Введение

В соответствии с уравнением Брэгга–Вульфа существуют две возможности получения отражений от отдельной атомной плоскости: при постоянной длине волны $\lambda = \lambda_0$ и изменяющемся угле отражения Θ или при постоянном $\Theta = \Theta_0$ и изменяющейся длине волны. В первом случае (*метод постоянной длины волны*), который реализуется, в основном, на источниках нейтронов с непрерывным потоком, постановка эксперимента такая же, как в рентгеновском дифрактометре. Во втором случае сравнительно небольшая скорость тепловых нейтронов позволяет определять длину волны, измеряя время пролета нейтронов от источника до детектора и используя соотношение де Броиля. Аналогом этого метода (*метода времени пролета*) является спектроскопия γ -квантов в дифракционных экспериментах с рентгеновскими лучами или синхротронном излучении. В нейтронной дифрактометрии метод времени пролета наиболее эффективно используется на импульсных источниках нейтронов. Недавно получил развитие новый метод — *обратный метод времени пролета*. Два последних метода в сочетании с современными высокопоточными источниками нейтронов являются наиболее перспективными для структурной нейtronографии.

2. Метод времени пролета

Первая попытка реализации метода времени пролета в нейтронной дифрактометрии была предпринята в 1963 г. на реакторе в Сверке (Польша), хотя было ясно, что для времязадержки дифрактометрии наиболее адекватными являются импульсные источники. Поэтому в том же 1963 г. польскими и российскими физиками в Дубне в Объединенном институте ядерных исследований были начаты эксперименты на первом в мире пульсирующем реакторе ИБР [1], на котором метод времени пролета использовался с самого начала его работы в 1960 г. Эти эксперименты были, по существу, первыми реальными экспериментами по времязадержке нейтронной дифрактометрии. Вскоре после первых экспериментов в Сверке и в Дубне метод времени пролета стал широко использоваться во многих научных центрах мира. К концу 60-х годов времязадержки дифрактометры были сооружены в ведущих нейтронных центрах Дании, США, Японии, Великобритании.

Метод времени пролета имеет целый ряд особенностей, дающих ему преимущества перед методом постоянной длины волны [2]. К ним можно отнести фиксированный угол рассеяния, одновременное измерение большого числа рефлексов, большой интервал длин волн нейтронов, импульсный характер облучения, высокий поток нейтронов. Все это позволяет проводить исследования структуры с дополнительными устройствами для создания внешних воздействий: нагрева и охлаждения в широком интервале температур от сверхнизких до сверхвысоких, электриче-

ского и магнитного полей. Весьма эффективными оказались камеры высокого давления для исследования микрообразцов [3].

Однако полностью возможности времязадержки дифрактометрии начали реализовываться в середине 80-х годов, когда появилось новое поколение высокопоточных импульсных источников нейтронов. Создание мощных источников на базе протонных ускорителей в Японии, в США (Аргонн — 1981 г. и Лос-Аламос — 1985 г.), в Великобритании (1985 г.), а также пульсирующего реактора ИБР-2 в Дубне (1984 г.) дало второе рождение времязадержки дифрактометрии. За прошедшее десятилетие на всех этих источниках построено по несколько времязадержек дифрактометров, которые превосходят дифрактометры на стационарных реакторах по целому ряду параметров.

3. Обратный метод времени пролета

Следующий этап развития времязадержки дифрактометрии связан с развитием нового метода в нейтронной дифрактометрии — обратного метода времени пролета в сочетании с прерывателем Фурье (нейтронной фурье-дифрактометрии).

Идеи использования преобразований Фурье в нейтронной дифрактометрии появились в конце 60-х годов в США, в Брукхейвенской национальной лаборатории, как результат поиска путей повышения интенсивности времязадержки дифрактометра на стационарном реакторе. Тогда было предложено использовать вместо обычного прерывателя Ферми с одной прозрачной для нейтронов щелью прерыватель с большим количеством щелей, модулирующий нейтронный пучок, так что при угловой частоте, соответствующей некоторой постоянной скорости вращения прерывателя, входящие и выходящие сигналы будут периодическими функциями угловой частоты (прерыватель Фурье). При таком способе модуляции пучка удается почти полностью сохранить нейтроны, однако при этом возникает эффект рецикличности, приводящий к почти полному перекрытию регистрируемых спектров.

Проблема расшифровки перекрывающихся дифракционных спектров была в принципе решена физиками из Центра технических исследований в Финляндии в середине 70-х годов [4]. Решение выглядело весьма экзотически — предлагалось отказаться от требования точного знания времени пролета каждого зарегистрированного нейтрона и вместо этого рассматривать распределение вероятностей, с которым происходит регистрация нейтронов. Технически проблема сводится к замене регистрации времени прилета нейтрона в детектор на определение вероятности, с которой он мог покинуть источник какое-то время назад, пройти через прерыватель и попасть в детектор. Эта схема получила название обратного метода времени пролета.

Первый фурье-дифрактометр на стационарном реакторе был создан в 1984 г. в ПИЯФ РАН в Гатчине, где была продемонстрирована работоспособность нейтронной фурье-дифрактометрии [5]. Вскоре стало ясно, что наиболее адекватным для эффективной реализации метода является источник нейтронов типа реактора ИБР-2. История как бы повторилась на новом этапе. У нового метода было мало сторонников — память о неудавшихся попытках в конце 60-х годов в известных центрах служила психологическим барьером для распространения этого математически непростого, но потенциально очень эффективного метода.

В 1989 г. Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка совместно с ПИЯФ РАН и Центром технических исследований Финляндии начала создание фурье-дифрактометра высокого разрешения (ФДВР) на