

реакторе ИБР-2. С учетом опыта, полученного в предыдущие годы в Хельсинки и в Гатчине, удалось успешно завершить проект в середине 1992 г. — 11 июня были получены первые спектры. В сентябре этого же года в Дубне прошел Международный семинар по структурным исследованиям, посвященный запуску ФДВР.

В настоящее время ФДВР — один из четырех лучших в мире нейтронных дифрактометров, которые обладают наиболее высоким разрешением и потоком нейтронов на образце. ФДВР открывает широкие перспективы для структурных исследований в физике, химии, биологии, материаловедении. Особенно ярко возможности ФДВР проявляются при исследовании структурных особенностей сложных соединений [6, 7].

4. Заключение

Итак, в настоящее время при структурных исследованиях вещества с помощью нейтронов используются три принципиально разных метода. Два из них впервые были реализованы в России.

Особое значение имеет развитие фурье-дифрактометрии и создание ФДВР. ФДВР — прибор нового типа для импульсных источников нейтронов. Он открыл совершенно новые возможности для реактора ИБР-2 и фактически вывел его в число лучших источников нейтронов в мире. В нескольких нейтронных центрах открыты проекты создания дифрактометров такого типа. Появился серьезный дополнительный аргумент в пользу источников нейтронов с длинным импульсом (типа ИБР-2). Это направление в настоящее время активно развивается.

Список литературы

1. Аксенов В Л *Природа* **2** (3) 966 (1996)
2. Аксенов В Л Балагуров А М *УФН* **166** 955 (1996)
3. Akkenov V L et al. *High Press. Res.* **14** 181 (1995)
4. Rõuру H, Hiismäki P, Virjo A *Nucl. Instr. Meth.* **126** 421 (1975)
5. Трунов В А и др. Препринт ЛИЯФ N 1277 (Л.: ЛИЯФ, 1987)
6. Балагуров А М и др. *Письма в ЖЭТФ* **64** 254 (1996)
7. Аксенов В Л и др., Препринт ОИЯИ Р-14-96-266 (Дубна: ОИЯИ, 1996); *Phys. Rev. B* (in press)

PACS number: 61.12.Bt

Физические основы магнитной нейтронографии

Ю.А. Изюмов

В основе магнитной нейтронографии лежит формула для матричного элемента V_{pp_0} рассеяния нейтрона на атоме с изменением его волнового вектора $\mathbf{p}_0 \rightarrow \mathbf{p}$ [1]:

$$V_{pp_0} = r_0 \gamma F(\vec{s}) (\mathbf{s}_n - (\mathbf{e} \mathbf{s}_n) \mathbf{e}, \mathbf{S}). \quad (1)$$

Здесь \mathbf{s}_n — спин нейтрона, \mathbf{e} — единичный вектор рассеяния, $\vec{s} = \mathbf{p} - \mathbf{p}_0$, \mathbf{S} — спин атома, $F(\vec{s})$ — его магнитный формфактор, γ — магнитный момент нейтрона в ядерных магнетонах, а r_0 — электромагнитный радиус электрона. Матричный элемент рассеяния на кристалле получается суммированием выражения (1) по всем магнитным атомам, расположенным в узлах решетки с соответствующим фазовым фактором $\exp(i\vec{s} \mathbf{R}_i)$. Сечение упругого магнитного рассеяния неполяризованных нейтронов получается усреднением квадрата матричного элемента V_{pp_0} по ориентациям спина нейтрона в пучке и для магнитной структуры (МС) с

волновым вектором \mathbf{k} имеет вид [2, 3]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (r_0 \gamma)^2 (\mathbf{M}_{\vec{s}}^* \mathbf{M}_{\vec{s}}) \sum_{\mathbf{b}} \delta_{\vec{s}, \mathbf{b} + \mathbf{k}}. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{b} — произвольный вектор обратной решетки кристалла, а $\mathbf{M}_{\vec{s}}$ — фундаментальный вектор магнитного рассеяния, определяемый соотношениями

$$\mathbf{M}_{\vec{s}} = \mathbf{f}_{\vec{s}} - (\mathbf{f}_{\vec{s}} \mathbf{e}) \mathbf{e}, \quad (3)$$

$$\mathbf{f}_{\vec{s}} = \sum_i \exp(-i\vec{s} \mathbf{R}_i) F_i(\vec{s}) \mathbf{S}_{0i}. \quad (4)$$

Вектор $\mathbf{f}_{\vec{s}}$ представляет структурный магнитный фактор, поскольку он составляется из магнитных моментов \mathbf{S}_{0i} атомов, принадлежащих примитивной ячейке кристалла.

Выражение (2) представляет собой основу магнитной нейтронографии как способа экспериментального определения МС. Сечение определяется фактором $(r_0 \gamma)^2 \times 10^{-24} \text{ см}^2$, так что сечение магнитного рассеяния имеет тот же порядок величины, что и ядерного, хотя обычно оно численно меньше.

Как следует из формулы (2), МС определяется в два этапа. Сначала по системе магнитных брэгговских пиков

$$\vec{s} = \mathbf{b} + \mathbf{k} \quad (5)$$

определяется волновой вектор структуры \mathbf{k} , а затем по интенсивностям магнитных рефлексов — ориентация магнитных атомных моментов в кристалле. На этом этапе варьированию в подгоночной процедуре измеренных и рассчитанных интенсивностей подлежат $3s$ переменных (где s — число магнитных атомов в кристаллической ячейке) — процедура тем более сложная, чем больше s .

Оба этапа магнитной нейтронографии могут получить большую надежность, если использовать теорию симметрии кристалла в форме неприводимых представлений (НП) пространственных групп. Преимущество такого подхода состоит в том, что нет необходимости использовать группы магнитной симметрии такие, как шубниковские группы черно-белой симметрии или их обобщения — цветные группы. Вместо этого достаточно использовать аппарат НП пространственной группы кристалла G , универсальный для любых волновых векторов, как лежащих в симметричных точках зоны Бриллюэна, так и вне их, поэтому соизмеримые и несоизмеримые МС описываются в единой схеме.

Рассмотрим вначале вопрос о волновом векторе МС. При получении соотношения (2) использовалось следующее соотношение, связывающее атомный спин в n -й примитивной ячейке кристалла со спином в нулевой ячейке:

$$\mathbf{S}_{ni} = \exp(i\mathbf{k} \mathbf{t}_n) \mathbf{S}_{0i}, \quad (6)$$

где \mathbf{t}_n — соответствующий вектор трансляции. Следует отметить, что это соотношение, представляющее, по существу, определение волнового вектора МС, справедливо в строгом смысле только для однолучевой звезды волнового вектора \mathbf{k} . В общем случае звезда $\{\mathbf{k}\}$ многолучевая и содержит совокупность лучей \mathbf{k}_L , получающихся из данного луча действием на него операций группы G . Поскольку эти лучи физически эквивалентны, в общем случае соотношение (6) должно быть заменено суперпозицией лучевых вкладов [2]:

$$\mathbf{S}_{ni} = \sum_L C_L \exp(i\mathbf{k} \mathbf{t}_n) \mathbf{S}_{0i}^L. \quad (7)$$

Трансляционные свойства МС целиком определяются совокупностью отличных от нуля коэффициентов смешива-

ния C_L (назовем эту совокупность каналом перехода [2]). Оказывается, что для всех лифшицевских звезд (т.е. для волновых векторов, оканчивающихся в симметричных точках зоны Бриллюэна) четырнадцать решеток Браве и для всех возможных каналов перехода соотношение (7) определяет одну из 36 решеток шубниковской симметрии. Таким образом, для описания соизмеримых МС нет необходимости использовать магнитную симметрию, а достаточно опираться на пространственную группу кристалла и соотношение (7). В [2] приведены таблицы магнитных рефлексов, по которым можно сразу определить канал перехода. Обычно экспериментаторы используют частное (однолучевое) соотношение (6) для определения магнитной решетки даже в случае многолучевой звезды $\{\mathbf{k}\}$, пропуская более общий случай (7), соответствующий мульти- \mathbf{k} -структуре. Следует иметь в виду, однако, что на практике отличить мульти- \mathbf{k} -структуру от $1\mathbf{k}$ -структуры достаточно трудно, поскольку совокупность доменов $1\mathbf{k}$ -структуры дает ту же картину магнитных рефлексов, что и мульти- \mathbf{k} -структура, и для идентификации последней необходимо наблюдать тонкие сопутствующие явления, отличающие мульти- \mathbf{k} - от $1\mathbf{k}$ -структуры. Примером может служить МС CeAl_2 [2].

Рассмотрим теперь симметричные аспекты второго этапа магнитной нейтронографии — определения ориентации атомных магнитных моментов \mathbf{S}_{0i} . Предлагается разложить величины \mathbf{S}_{0i} по базисным функциям НП группы волнового вектора $G_{\mathbf{k}}$:

$$\mathbf{S}_{0i} = \sum_{\nu} \sum_{\lambda} C_{\lambda}^{\nu} \mathbf{S}_{\lambda}^{(\mathbf{k}_{\nu})} |i\rangle. \quad (8)$$

Суммирование по ν ведется по всем НП группы $G_{\mathbf{k}}$ и по номерам λ базисных функций ее неоднородных НП. Величины $\mathbf{S}_{\lambda}^{(\mathbf{k}_{\nu})} |i\rangle$ строятся в базисе аксиальных векторов, подобно тому, как атомные смещения разлагаются в кристалле в базисе полярных векторов. Атомные компоненты базисных функций $\mathbf{S}_{\lambda}^{(\mathbf{k}_{\nu})} |i\rangle$ могут быть вычислены для любого кристалла, в котором заданы координаты магнитных атомов в ячейке и волновой вектор МС. Эффективные способы вычисления этих величин (магнитных мод), разработанные нами, детально описаны в книге [2].

В духе теории Ландау фазовых переходов второго рода предполагается, что МС описывается единственным НП группы $G_{\mathbf{k}}$, т.е. имеет место частное соотношение

$$\mathbf{S}_{0i} = \sum_{\lambda} C_{\lambda}^{\nu} \mathbf{S}_{\lambda}^{(\mathbf{k}_{\nu})} |i\rangle. \quad (9)$$

Таким образом, предполагается, что МС может быть задана набором коэффициентов смешивания C_{λ}^{ν} (при фиксированном ν). Поскольку НП пространственных групп имеют чаще всего размерность $l = 1, 2, 3$ (реже 6), гипотеза (9) означает, что МС задается небольшим числом величин C_{λ}^{ν} , которые подлежат варьированию при подгонке экспериментальных и вычисленных интенсивностей. Поскольку ответственное за МС НП заранее неизвестно, необходимо испытывать все возможные НП группы $G_{\mathbf{k}}$ последовательно, однако всякий раз в вариационной процедуре участвует небольшое число параметров. Из полученных результатов следует выбрать тот, который дает наименьший R-фактор. В сокращении числа варьируемых параметров от 3σ до меньшего числа l и состоит смысл описанного симметричного анализа в магнитной нейтронографии.

Как выполняется гипотеза одного НП для МС? Симметричный анализ большого числа МС, приведенных в

справочнике [4] и в последующих дополнениях к нему [5], а также в [2], показывает, что в подавляющем большинстве случаев МС соответствуют единственному НП группы $G_{\mathbf{k}}$. Исключения из этого правила обычно имеют также симметричную природу, и можно указать на три основные причины: высокую симметрию обменного гамильтониана, эффект прафазы и так называемые сопутствующие НП (детали и примеры см. в [2]). Если определяемая МС соответствует нескольким НП, причем этот факт не объясняется перечисленными выше причинами, весьма вероятно ошибка в результатах нейтронографического исследования.

Благодаря соотношению (8) или (9), центр тяжести в определении МС переносится на вычисление базисных функций $\mathbf{S}_{\lambda}^{(\mathbf{k}_{\nu})} |i\rangle$. На основе наших методов, разработанных в [2], краковская группа ученых создала компьютерную программу (450 килобайт) [6] расчета этих функций для заданного кристалла и волнового вектора, позволяющую экспериментатору получать эти функции без знания аппарата теории НП пространственных групп. В настоящее время в той же краковской группе создается электронная база данных [7] по всем МС с результатами симметричного анализа, выполненного по методу [2], а также пакет программ для поиска информации о МС по разным признакам. В ней будет широко использоваться представление о том, что результатом нейтронографического исследования МС должно быть не только (а может быть, и не столько) определение картинки, показывающей ориентацию магнитных моментов, но и ее трансформационные свойства под действием операций симметрии кристалла, т.е. указание НП группы волнового вектора и канала перехода. Эта теоретико-групповая информация и есть истинный паспорт МС и может служить началом дальнейшего ее исследования, в частности особенностей магнитного фазового перехода и поведения МС во внешних полях.

Описанный подход одинаково применим как к соизмеримым, так и к несоизмеримым (модулированным) МС [8, 9], т.е. является универсальным. Таким образом, описание МС в терминах групп магнитной симметрии становится совершенно не обязательным; аппарат теории представлений пространственных групп наиболее удобен, прост и универсален. Следует отметить, однако, что для исследования спектров элементарных возбуждений (спиновых волн) полезны шубниковские группы, поскольку спиновые волны классифицируются по неприводимым копредставлениям этих групп, подобно тому, как обычные фононы в кристалле классифицируются по НП пространственных групп [9].

Рассмотрим теперь эффекты рассеяния поляризованных нейтронов на МС. Основные аспекты упругого и неупругого рассеяния были исследованы в работах [10, 11], на основе которых разработан поляризационный анализ в магнитной нейтронографии. Имеются два главных эффекта: зависимость сечения рассеяния от ориентации вектора поляризации падающего пучка и изменение поляризации пучка в результате рассеяния. Оба эффекта целиком определяются тем же магнитным вектором $\mathbf{M}_{\vec{x}}$ (3), который определяет сечение и неполяризованных нейтронов. В частности, первоначально неполяризованный пучок, рассеянный в магнитный брэгговский пик от МС с $\mathbf{k} \neq 0$, оказывается спонтанно поляризованным с вектором поляризации [2, 3]

$$\mathbf{p} = -\frac{i[\mathbf{M}_{\vec{x}}^* \times \mathbf{M}_{\vec{x}}]}{(\mathbf{M}_{\vec{x}}^* \mathbf{M}_{\vec{x}})}. \quad (10)$$

Использование гипотезы (9) об одном НП, в принципе, позволяет определить МС по одному магнитному рефлексу, если измерять его при трех взаимно перпендику-

лярных ориентациях вектора поляризации. Соотношение (10) показывает также, что источником поляризованных нейтронов может служить чисто магнитное рассеяние на антиферромагнитной структуре, в отличие от обычного способа получения поляризованного пучка за счет суперпозиции ядерного и магнитного рассеяния на ферромагнитном кристалле. Отметим в заключение, что эффекты неупругого рассеяния нейтронов на спиновых волнах детально рассматриваются в [9], а на нелинейных возбуждениях (солитонах) — в обзоре [12].

Список литературы

1. Halpern O, Johnson M H *Phys. Rev. B* **55** 898 (1939)
2. Изюмов Ю А, Найш В Е, Озеров Р П *Нейтроннография магнетиков* (М.: Атомиздат, 1981)
3. Изюмов Ю А *УФН* **131** (3) 387 (1980)
4. Oles A et al. *Magnetic Structures Determined by Neutron Diffraction* (Warszawa: Panstwowe Wydawn. Naukowe, 1976)
5. Oles A et al. *Magnetic Structures Determined by Neutron Diffraction. Description and Symmetry Analysis* (Krakow, 1984)
6. Сикора В *Пакет программ для вычисления магнитных мод кристаллов для симметричного анализа магнитных структур* (Краков, 1996)
7. Dul M et al. *Computer Data Base of Magnetic Structures-Preliminary Presentation and Panel Discussion in Extended abstracts for Workshop on Application of Symmetry Analysis to Diffraction Investigations* (Krakow, July 6–9, 1996)
8. Изюмов Ю А *УФН* **144** (3) 439 (1984)
9. Изюмов Ю А *Дифракция нейтронов на длиннопериодических структурах* (М.: Энергоатомиздат, 1987)
10. Изюмов Ю А, Черноплеков Н А *Нейтронная спектроскопия* (М.: Энергоатомиздат, 1983)
11. Изюмов Ю А, Малеев С В *ЖЭТФ* **41** 1644 (1961)
12. Изюмов Ю А *УФН* **155** (4) 553 (1988)

PACS number: 61.12.–q

Нейтронное рассеяние и исследования по физике твердого тела в ПИЯФ

С.В. Малеев

1. Введение

После решения о строительстве в Гатчине реактора на базе Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе (ФТИ) возник вопрос о поисках своей области исследования вещества с помощью рассеяния нейтронов. Это было во второй половине 50-х годов и в СССР практически не было соответствующего опыта. Вместе с тем существовал теоретический задел очень высокого уровня. Я имею в виду работы А.И. Ахиезера и И.Я. Померанчука [1]. Кроме того, в ФТИ имелась высококласная теоретическая школа исследования процессов, связанных с рассеянием поляризованных частиц, и по предложению И.М. Шмушкевича автор занялся проблемой рассеяния поляризованных нейтронов в магнетиках. Приблизительно в это же время в ФТИ пришел Г.М. Драбкин. Он выбрал поляризованные нейтроны главным инструментом соответствующих исследований. Этот выбор оказался очень удачным.

До сих пор рассеяние поляризованных нейтронов остается одним из главных направлений исследовательских работ, проводимых в ПИЯФ РАН. Вместе с тем, за прошедшее время естественным образом возникли другие направления исследования, такие как порошковая дифрактометрия высокого разрешения и магнитная нейтронография. Начинает развиваться нейтронная рефрактометрия. Об уровне нейтронных исследований в институте говорит

тот факт, что на Европейской конференции по нейтронному рассеянию (октябрь 1996 г.) приняло участие 17 сотрудников ПИЯФ и для них было выделено 12 зарубежных грантов. Приятно отметить, что в конференции участвовало 8 молодых сотрудников института. В ПИЯФ также создается разнообразное оборудование для нейтронных исследований (поляризаторы, нейтроноводы, флипперы и др.), которое используется во многих зарубежных нейтронных лабораториях. Ниже приведены примеры использования нейтронов в ПИЯФ для решения проблем физики твердого тела. Ими далеко не исчерпываются полученные за эти годы результаты. Их выбор в какой-то степени является субъективным и связан с краткостью этой статьи.

2. Структурная нейтронография

В лаборатории В.А. Трунова создан оригинальный фурье-дифрактометр высокого разрешения, по своим параметрам сравнимый с приборами, установленными на высокопоточных реакторах и импульсных источниках нейтронов (ILL, Арагон, RAL) [2]. На этой установке выполнено большое количество структурных исследований различных классов веществ, таких как формиаты $(\text{Re}(\text{DCOO}))_3$, где $\text{Re} = \text{Y}, \text{Ce}, \text{Sm}, \text{La}, \text{Tb}, \text{Tm}$) [3], гексабориды Re^{11}B_6 ($\text{Re} = \text{Y}, \text{Ce}, \text{Sm}, \text{La}, \text{Nd}$) [4–6], высокотемпературные сверхпроводники [7, 8], а также изучались эффекты термообработки инструментальной стали. Я проиллюстрирую эти исследования только примером гексаборитов. Для соединения SmB_6 , используя смесь изотопов ^{152}Sm и ^{154}Sm , удалось полностью подавить когерентное рассеяние самария и изучать подсистему бора в чистом виде [4]. В результате была обнаружена большая концентрация вакансий бора ($\sim 4\%$) и измерены его тепловые факторы. Накопленный опыт позволил исследовать весь ряд ReB_6 и определить тепловые факторы как бора, так и металлов [5]. Оказалось, что последние хорошо описываются моделью Эйнштейна.

Магнитные структуры исследуются в лаборатории В.П. Плахтия. Открытие слабого антиферромагнетизма ортоферрита иттрия [9], по-видимому, является наиболее ярким из полученных результатов. Используя то обстоятельство, что магнитное рассеяние нейтронов сопровождается переворотом их спина, авторам удалось выделить компоненту брэгговского рассеяния, связанную со слабым антиферромагнетизмом. Оказалось, что отношение слабой компоненты спина к основной равно $1,93(18) \times 10^{-2}$.

В последнее время во всем мире интенсивно развиваются исследования свойств тонких пленок и многослойных структур. Это связано как с проблемой гигантского магнитосопротивления, так и с перспективами использования таких систем в качестве запоминающих устройств. В связи с этим необходимо изучать реальные структуры многослойных систем. При их приготовлении методом напыления возникают флуктуации рельефа межслойных поверхностей, изучение которых возможно, в основном, только методами отражения и рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей. При этом поляризованные нейтроны позволяют изучать магнитные свойства многослоев. Такие работы были начаты в нашем институте [10]. Изучалось незеркальное отражение нейтронов от системы, состоящей из чередующихся слоев титана и кобальта. Снятая карта интенсивностей показана на рис. 1. Кроме линии зеркального отражения ($\alpha' = \alpha$) с квазибрэгговским пиком при $\alpha = (\lambda/2d) = \alpha_B/2$, где $d = 75 \text{ \AA}$ — период структуры, видно также брэгговское рассеяние вдоль линии $\alpha + \alpha' = \alpha_B$, свидетельствующее о существовании корреляции шероховатостей в направлении, перпендикулярном слоям (конформная шероховатость).