

Neutrony w badaniach materii skondensowanej

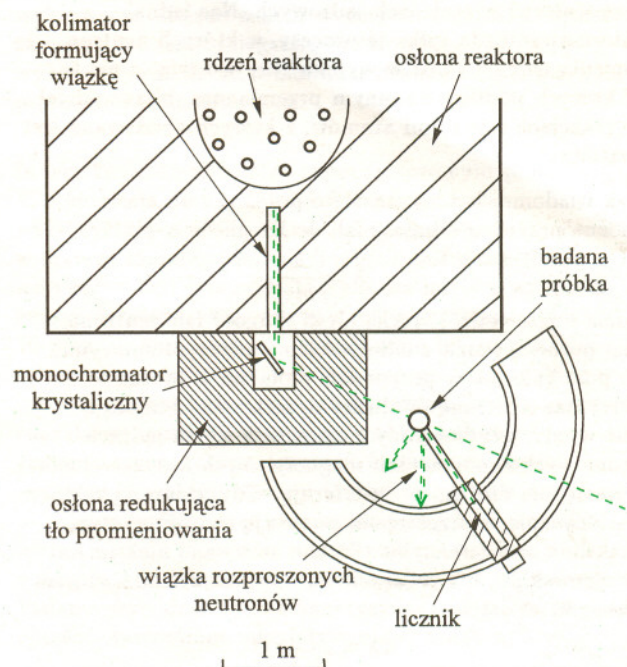
Izabela SOSNOWSKA

Do badania wewnętrznej struktury materii stosuje się wiele różnych rodzajów promieniowania. Poddany testowi materiał „oświetlany” jest promieniowaniem o określonej energii (długości fali), a następnie badana jest absorpcja np. z wykorzystaniem efektu Mössbauera (rezonansowe pochłanianie promieni γ pochodzących z jąder atomów znajdujących się w sieci krystalicznej) lub rozpraszanie promieniowania (na przykład promieni X lub elektronów). Informację o budowie i oddziaływaniach międzyatomowych czerpiemy z pomiaru rozkładu kąтового rozproszonego promieniowania i jego energii.

Za początek nowoczesnych badań strukturalnych uważa się rok 1914, w którym Max von Laue otrzymał Nagrodę Nobla za zastosowanie dyfrakcji promieni X do badania atomowej struktury kryształów. Promienie X oddziałują z elektronami atomów i z tego powodu informacja zawarta w kątowych rozkładach rozproszonego promieniowania X dotyczy rozkładu gęstości elektronów w materii. Innym rodzajem promieniowania przydatnym do badania struktury materii okazały się neutrony powolne (tzn. neutrony o energiach 1–250 meV). Neutrony oddziałują z jądrami i momentami magnetycznymi atomów. W 1994 roku, a więc w 80 lat po Maxie von Laue, Nagrodę Nobla za pionierski wkład w rozwój metody rozpraszania neutronów oraz jej zastosowanie w badaniach materii skondensowanej otrzymali: Bertram N. Brockhouse z Uniwersytetu McMaster w Hamilton (Kanada) i Clifford G. Shull z Massachusetts Institute of Technology w Cambridge (USA).

Neutrony i protony są składnikami jąder atomowych. Swobodny neutron jest cząstką nietrwałą, której czas życia wynosi 925 ± 11 s. Aby neutrony mogły zostać użyte w badaniach fazy skondensowanej jako promieniowanie sondujące, konieczne jest istnienie źródeł neutronów: reaktorów jądrowych lub akceleratorów. Pierwszy reaktor został zbudowany w 1942 roku w USA pod kierunkiem Enrico Fermiego, obecnie na świecie pracuje ich bardzo wiele. W Polsce aktualnie działa jeden reaktor MARIA w Świerku pod Warszawą; drugi reaktor EWA (działający od 1959 roku) w minionym roku został zamknięty. Neutrony szybkie, powstające w wyniku rozszczepienia jąder uranu, są spowalniane w moderatorze, a następnie wyprowadzane z reaktora specjalnymi kanałami, kierującymi je do urządzeń pomiarowych. Spowalniczami najczęściej są: woda, ciężka woda, parafina lub grafit. Urządzenia, za pomocą których bada się rozkład kątowy rozproszonych neutronów, nazywane są **dyfraktometrami neutronów**.

Urządzenia pozwalające badać nie tylko rozkład kątowy, ale także energię rozproszonych neutronów, noszą nazwę **spektrometrów neutronów**. Energetyczny rozkład neutronów wychodzących z kanałów reaktora i używanych do badań zależy głównie od rodzaju spowalnicza.



Rys. 1. Schemat dyfraktometru neutronów. Wiązka neutronów wychodząca z reaktora pada na kryształ (tzw. monochromator), na którym następuje „odbicie” neutronów o długości fali λ zgodnie ze wzorem Braggów (zobacz str. 6). Następnie monochromatyczna wiązka neutronów pada na badaną próbkę. Rozproszone na próbce neutrony są rejestrowane przez detektor obracający się wokół osi przechodzącej przez środek próbki. Można uzyskać tak zwane neutrony gorące o energiach rzędu 0,5 eV, termiczne o energiach około 40 meV lub zimne o energii rzędu 5 meV. Rodzaj neutronów użytych do badań zależy od badanego procesu.

Średnia energia wzbudzeń sieci krystalicznej jest rzędu 1–100 meV, dlatego właśnie neutrony, których energie są tego samego rzędu, są szczególnie przydatne do badań tych wzbudzeń. Oprócz reaktorów stacjonarnych istnieją również impulsowe źródła neutronów. Do takich źródeł należy reaktor impulsowy w Dubnej oraz źródła spallacyjne w Wielkiej Brytanii, USA i Japonii. W źródłach spallacyjnych neutrony powstają podczas zderzeń wysokoenergetycznych protonów (o energii około 1 GeV) z jądrami pierwiastków ciężkich, takich jak wolfram lub uran.

Neutrony powolne rozpraszają się na jądram atomów (jonów), z których zbudowana jest materia; dlatego ten typ rozpraszania nosi nazwę rozpraszania jądrowego.

W tabeli przytoczono amplitudy rozpraszania neutronów powolnych dla kilku jąder atomowych.

Atom	Amplituda rozpraszania neutronów $b[10^{-12} \text{ cm}]$
^1H	-0,38
$^2\text{H} = ^2\text{D}$	0,67
^{16}O	0,58

Jak widać mogą one być zarówno dodatnie, jak i ujemne. Izotopy tego samego pierwiastka (np. wodór i deuter) mają różne amplitudy rozpraszania neutronów.

Szczególną cechą rozpraszania neutronów jest niezależność amplitudy od kąta rozpraszania. W odróżnieniu od promieni X w przypadku neutronów amplituda rozpraszania nie rośnie monotonicznie wraz z liczbą porządkową pierwiastka. Neutrony mogą również uczestniczyć w reakcjach jądrowych. Nas jednak interesować będą tylko te procesy, w których neutron zmienia energię i pęd w wyniku rozpraszania, a nie te, w których podlega on innym przemianom, biorąc udział w reakcjach z jądrami atomów, z których zbudowana jest materia.

Jak wiadomo, każdej cząstce o prędkości v i masie m można przypisać długość fali de Broglie'a

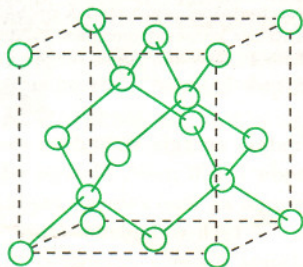
$$\lambda = \frac{h}{mv},$$

gdzie h jest stałą Plancka. Jeśli długość fali neutronu jest porównywalna z odległościami międzyatomowymi, to podobnie jak w przypadku promieni X można otrzymać neutronowe obrazy dyfrakcyjne. Powstają one wtedy, gdy neutrony rozpraszają się na jądrach atomowych i momentach magnetycznych atomów (jonów), a następnie fale ugięte interferują. Gdy atomy są rozłożone periodycznie w przestrzeni, powstają charakterystyczne maksima interferencyjne. Są one nazywane maksimami braggowskimi; ich położenie kątowe jest opisane wzorem Braggowa

$$n\lambda = 2d \sin \Theta,$$

gdzie 2Θ jest kątem rozpraszania, d – odległością międzyplaszczynową płaszczyzn krystalicznych, a n – rzędem odbicia. Badanie tego rozpraszania pozwala na określenie przestrzennego uporządkowania jąder atomów, z których zbudowana jest badana próbka, czyli na określenie struktury atomowej.

Przykładowo na rys. 2 przedstawiono model struktury krzemu Si. Dzięki temu, że neutron ma moment magnetyczny, który oddziałuje z momentami magnetycznymi atomów (jonów) materii, możemy użyć neutronów do badania struktury magnetycznej.

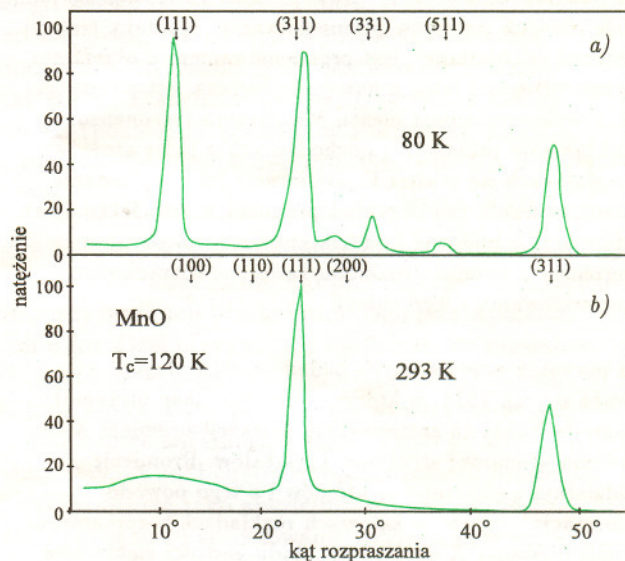


Rys. 2.

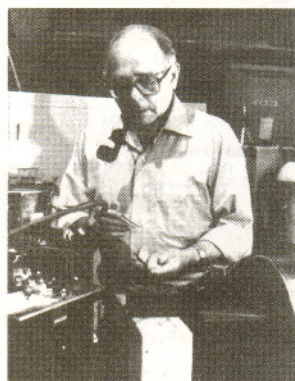
Określenie tej struktury polega na wyznaczeniu wielkości, kierunków i zwrotów momentów magnetycznych wszystkich jonów tworzących kryształ. Na przykład tlenek manganu MnO jest antyferromagnetykiem; oznacza to, że istnieją w nim dwie podsieci o przeciwnych magnetyzacjach. Jonem magnetycznym jest jon manganu. Na rysunku 5 przedstawiono uporządkowanie momentów magnetycznych jonów manganu w MnO. C.G. Schull w jednej ze swoich prac określił strukturę MnO, dzięki czemu po raz pierwszy doświadczalnie wyznaczył strukturę antyferromagnetyka, potwierdzając teorię Néela, przewidującą jego istnienie.

Na rysunku 3a przedstawiony jest neutronogram polikrystalicznego tlenku manganu, widać na nim maksima interferencyjne. Badając ich położenie i natężenie możemy określić zarówno rozmieszczenie jąder atomów w kryształach, jak też ich średnie odchylenia od położenia równowagi (w wyniku drgań termicznych). Otrzymując neutronogramy substancji w różnych warunkach fizycznych, można śledzić

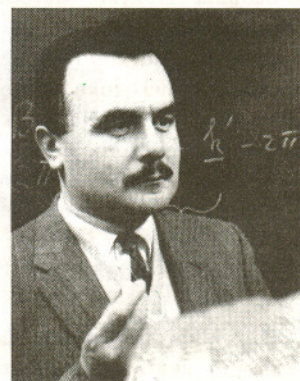
zmiany wywołane działaniem czynników zewnętrznych, takich jak temperatura, pole magnetyczne czy elektryczne. Rysunek 3b pokazuje neutronogram polikrystalicznego tlenku manganu powyżej temperatury przejścia fazowego, w którym następuje zanik uporządkowania momentów magnetycznych atomów.



Rys. 3.



Clifford G. Shull



Bertram N. Brockhouse

Nagrody Nobla przyznane za badania strukturalne prowadzone metodami dyfrakcji

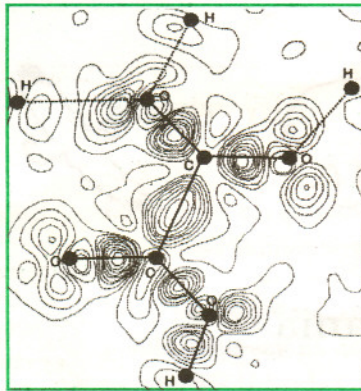
Rok	Laureaci	Za co przyznano nagrodę
1914	M. von Laue	odkrycie dyfrakcji promieni X na kryształach (f)
1915	W.H. Bragg W.L. Bragg	analiza struktury krystalicznej za pomocą promieni X (f)
1937	C.J. Davison G.P. Thomson	eksperymentalne odkrycie dyfrakcji elektronów na kryształach (f)
1962	F.H.C. Crick J.D. Watson M. Wilkins	odkrycie struktury molekularnej DNA (F+M)
1964	D. Crowfoot D.M.C. Hodgkin	wyznaczenie za pomocą techniki promieni X struktur ważnych substancji biologicznych (ch)
1985	H.A. Hauptman J. Karle	rozwój metod bezpośrednich stosowanych przy określaniu struktur krystalicznych (ch)
1994	B.N. Brockhouse C.G. Shull	rozwój metody rozpraszania neutronów i zastosowanie jej w badaniach materii skondensowanej (f)

(f) – nagrody w dziedzinie fizyki, (ch) – w dziedzinie chemii, (F+M) – w dziedzinie fizjologii i medycyny.

Temperatura tego przejścia nosi nazwę temperatury Néela. Różnice w obrazie dyfrakcyjnym na obu rysunkach są bardzo wyraźne.

W neutronograficznych badaniach układów biologicznych wykorzystano fakt, że wodór i deuter są inaczej widziane przez neutrony (patrz tabela). Zastąpienie jonów wodoru jonami deuteru w dużych molekułach organicznych umożliwia badania poszczególnych segmentów tych cząsteczek.

Rys. 4. Promienie X rozpraszane są przez elektrony atomu, natomiast neutrony – przez jądro atomu. Z tego powodu najłatwiej jest obserwować za pomocą promieni X atomy o wielu elektronach. Trudniejszym obiektem badań jest wodór mający jeden elektron. Dla neutronów natomiast wszystkie atomy są dobrze widoczne. Rysunek przedstawia nałożenie dwóch map dyfrakcyjnych: neutronowej – pokazującej położenia jąder, oraz otrzymanej z dyfrakcji promieni X – pokazującej mapę gęstości elektronowej. Widać wzajemne przesunięcie położenia jąder atomowych w stosunku do mapy gęstości elektronowej obrazującej wiązania chemiczne (według plakatu noblowskiego).



Neutrony widzą inaczej niż promienie X

W odróżnieniu od promieni X i elektronów neutrony przez większość substancji są absorbowane tylko w niewielkim stopniu. Z tego powodu absorpcja neutronów stała się metodą diagnostyczną stosowaną do badania dużych obiektów. Prześwietlając je neutronami można wykrywać istniejące w nich wewnętrzne defekty. Technika ta nazywana jest radiografią neutronową. Można ją wykorzystywać do kontrolowania prawidłowości przebiegu procesów technologicznych.

Innym kierunkiem badań, zapoczątkowanym przez Brockhouse'a, jest spektroskopia neutronowa wykorzystująca nieelastyczne rozpraszanie neutronów w materii skondensowanej. Rozpraszaniem nieelastycznym nazywamy taki proces, w którym ma miejsce wymiana energii pomiędzy neutronem a rozpraszającym obiektem. W procesie tym następuje wzbudzenie lub wygaszenie tak zwanego wzbudzenia elementarnego (na przykład fononu). Celem badań spektroskopowych jest wyznaczenie charakterystycznych częstości i pędów wzbudzeń elementarnych; relacje dyspersji fononów są bardzo ważnymi charakterystykami kryształu pozwalającymi na określenie oddziaływań międzyatomowych. Natomiast oddziaływanie momentu magnetycznego neutronu z momentami magnetycznymi atomów (jonów) pozwala na badania wzbudzeń sieci magnetycznej, dzięki czemu można określić wewnętrzne oddziaływania w magnetykach.

Oddziaływanie neutronów z jądrami i momentami magnetycznymi atomów

Gdzie znajdują się atomy?

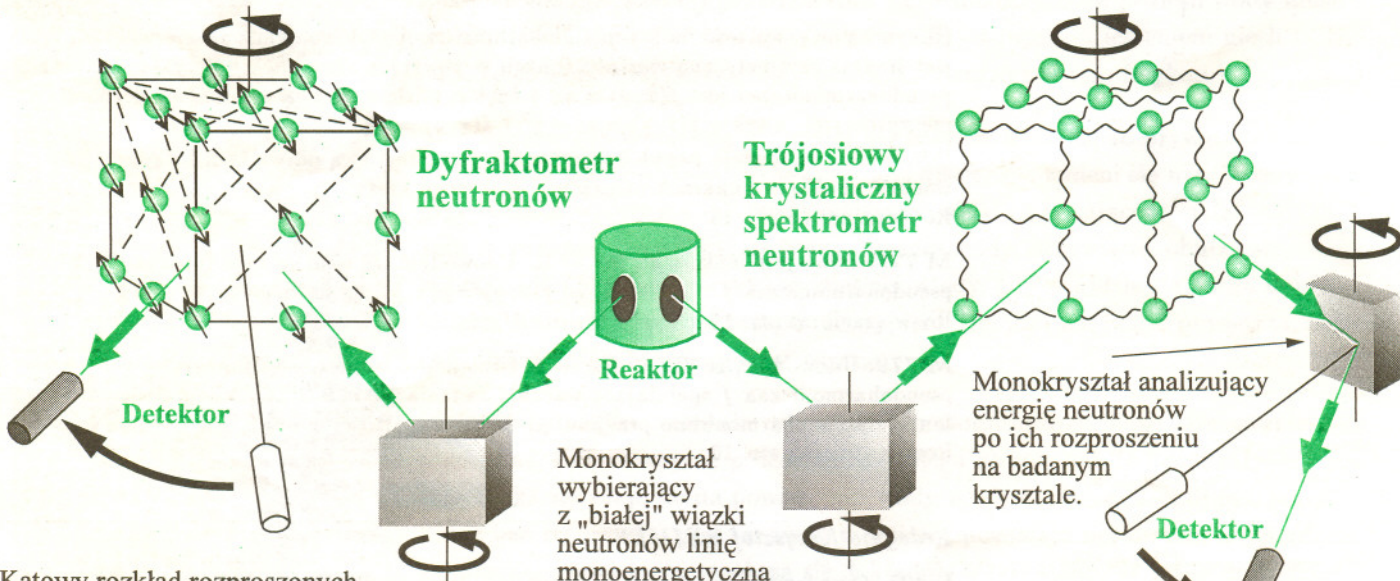
Rozpraszanie elastyczne

Neutrony padające na badany kryształ zmieniają swój kierunek nie zmieniając swojej energii.

Co atomy robią?

Rozpraszanie nieelastyczne

Neutrony padające na badany kryształ zmieniają swój kierunek oraz wymieniają z kryształem energię kreując albo anihilując fonony lub magnony.



Kątowy rozkład rozproszonych elastycznie na próbce neutronów jest rejestrowany przez detektor. Otrzymany w ten sposób neutronogram pozwala określić względne położenia atomów oraz wielkości i kierunki ich momentów magnetycznych.

Trójosiowy spektrometr neutronów pozwala mierzyć energię fononów (drgań atomów) i magnonów (fal spinowych). Można również za jego pomocą badać strukturę i dynamikę atomową cieczy.

Neutronografia i spektroskopia neutronowa znalazły szerokie zastosowania w wielu dziedzinach nauk przyrodniczych, począwszy od określania położenia atomów w prostych sieciach krystalicznych, a skończywszy na badaniach skomplikowanych struktur biologicznych. Równie szerokie jest technologiczne zastosowanie tych metod; od badań defektów w masywnych częściach maszyn, aż po subtelne badania w dziedzinie nadprzewodnictwa. Wszystkie te badania są kontynuacją prac Shulla i Brockhausa, z których pierwszy w swych pracach starał się odpowiedzieć na pytanie „gdzie znajdują się atomy” (tzn. jakie są ich wzajemne położenia), a drugi próbował wyjaśnić „co atomy robią” (tj. jak się poruszają).

Obecnie około 3000 osób na świecie pracuje stosując rozpraszanie powolnych neutronów w badaniach fazy skondensowanej. Mają one do dyspozycji wybudowane specjalnie w tym celu źródła neutronów. W Instytucie Laue-Langevin (ILL) w Grenoble we Francji pracuje najlepszy w tej dziedzinie reaktor jądrowy. Najlepszym źródłem spallacyjnym dysponuje Laboratorium Rutherford-Appleton w Wielkiej Brytanii. Nowoczesne dyfraktometry i spektrometry neutronów zainstalowane przy tych źródłach są dostępne dla całej naukowej społeczności świata, w tym także i dla polskich uczonych zajmujących się tą dziedziną.



Zadania

Redaguje Krzysztof OLESZKIEWICZ

M 777. Niech N będzie liczbą naturalną. Zbiór wszystkich punktów płaszczyzny o obu współrzędnych całkowitych o wartości bezwzględnej nie większej niż N , oprócz punktów (N, N) , $(-N, N)$, $(N, -N)$, $(-N, -N)$, nazwiemy kratą K_N . O tych punktach kraty, które mają obie współrzędne o wartości bezwzględnej mniejszej niż N , powiemy, że należą do wnętrza kraty W_N . Pozostałe punkty kraty tworzą jej brzeg B_N (patrz rysunek).

Funkcję $f : K_N \rightarrow \mathbf{R}$ nazwiemy pseudoharmoniczną, jeśli dla dowolnego punktu $(x, y) \in W_N$ zachodzi równość

$$f(x, y) = \frac{1}{4} (f(x+1, y) + f(x-1, y) + f(x, y+1) + f(x, y-1)).$$

(Innymi słowy, wartość funkcji pseudoharmonicznej w dowolnym punkcie wnętrza kraty jest średnią arytmetyczną wartości funkcji w punktach sąsiednich.) Przykładem funkcji pseudoharmonicznej jest $f(x, y) = ax + by + c$, gdzie a, b, c są ustalonymi liczbami rzeczywistymi, a także $f(x, y) = x^2 - y^2$ i $f(x, y) = xy$.

Udowodnić, że funkcja pseudoharmoniczna przyjmuje swą największą i najmniejszą wartość na K_N w punktach należących do brzegu kraty.

Rozwiązanie na str. 13

M 778. Dana jest funkcja $g : B_N \rightarrow \mathbf{R}$. Udowodnić, że istnieje taka funkcja pseudoharmoniczna $f : K_N \rightarrow \mathbf{R}$, że $f(x, y) = g(x, y)$ dla każdego $(x, y) \in B_N$.

Rozwiązanie na str. 15

M 779. Udowodnić, że dla $g : B_N \rightarrow \mathbf{R}$ istnieje dokładnie jedna funkcja pseudoharmoniczna f spełniająca warunki zadania M 778. Czy istnieją dwie różne funkcje pseudoharmoniczne przyjmujące te same wartości w punktach wnętrza kraty? Rozwiązanie na str. 16

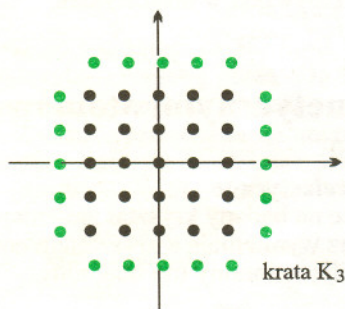
Redaguje Krzysztof REJMER

F 431. Oszacować energię zużytą przez samolot o średniej masie m pokonujący odległość L .

Rozwiązanie na str. 16

F 432. Przewodnik, którego potencjał jest równy zero, ma kształt płaszczyzny z półkolistą wypukłością o promieniu a . Ponad wypukłością w odległości x od płaszczyzny znajduje się ładunek q umieszczony symetrycznie względem przewodnika. Znaleźć siłę przyciągania ładunku i przewodnika.

Rozwiązanie na str. 3



krata K_3

