

ФКС-2009

12 - 18 марта 2009 Репино, Санкт-Петербург, Россия

Неупругое рассеяние нейтронов: обзор установок

П.А. Алексеев

РНЦ «Курчатовский институт»

Немного истории



Джеймс Чедвик

Открытие нейтрона – цепочка событий на рубеже 20х-30х г.г., заканчивающаяся работой Дж. Чедвика

Джеймс Чедвик

В 1920 экспериментально подтвердил равенство заряда ядра порядковому номеру элемента.

Изучал искусственное превращение элементов под действием альфа-частиц (совместно с Резерфордом).

Большой заслугой Чедвика является открытие им в 1932 году нейтрона при облучении бериллиевой мишени потоком альфа-частиц (Нобелевская премия, 1935 г.).

В 1943—1945 возглавлял группу английских учёных, работавших в Лос-Аламосской лаборатории над проектом атомной бомбы.

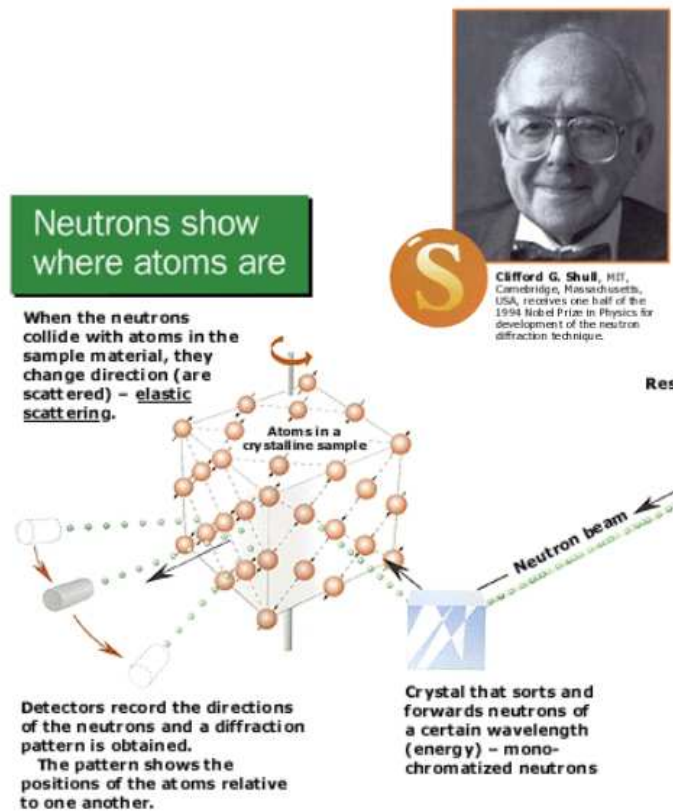
In the 1940's Wollan and Shull applied the ideas of x-ray diffraction to neutrons (Oak Ridge Graphite Reactor)



Нейтронное рассеяние. Исторические вехи.

1994 – Нобелевская премия по физике присуждена за: *«Пионерский вклад в развитие методики нейтронного рассеяния в физике конденсированных сред»*

1994 Nobel Prize in Physics



S

Neutrons show where atoms are

When the neutrons collide with atoms in the sample material, they change direction (are scattered) – elastic scattering.

Atoms in a crystalline sample

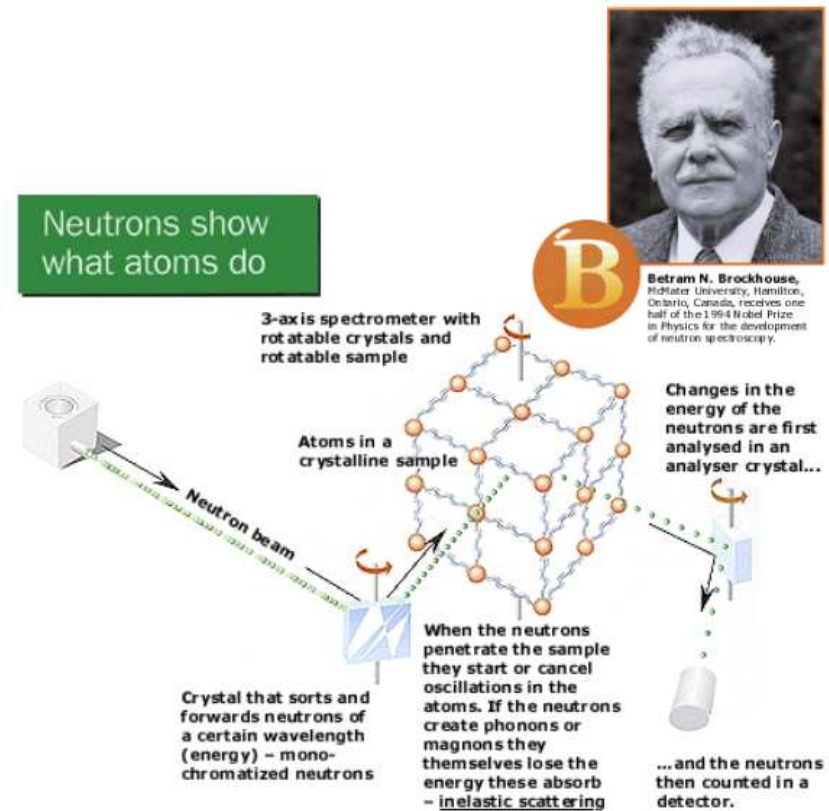
Neutron beam

Crystal that sorts and forwards neutrons of a certain wavelength (energy) – monochromatized neutrons

Res

Detectors record the directions of the neutrons and a diffraction pattern is obtained. The pattern shows the positions of the atoms relative to one another.

Clifford G. Shull, MIT, Cambridge, Massachusetts, USA, receives one half of the 1994 Nobel Prize in Physics for development of the neutron diffraction technique.



B

Neutrons show what atoms do

3-axis spectrometer with rotatable crystals and rotatable sample

Atoms in a crystalline sample

Neutron beam

Crystal that sorts and forwards neutrons of a certain wavelength (energy) – monochromatized neutrons

When the neutrons penetrate the sample they start or cancel oscillations in the atoms. If the neutrons create phonons or magnons they themselves lose the energy these absorb – inelastic scattering

Changes in the energy of the neutrons are first analysed in an analyser crystal...

...and the neutrons then counted in a detector.

Bertram N. Brockhouse, McMaster University, Hamilton, Ontario, Canada, receives one half of the 1994 Nobel Prize in Physics for the development of neutron spectroscopy.

1932 – Открытие нейтрона, мизерные нейтронные потоки

1952 – Рождение метода, появление интенсивных нейтронных пучков

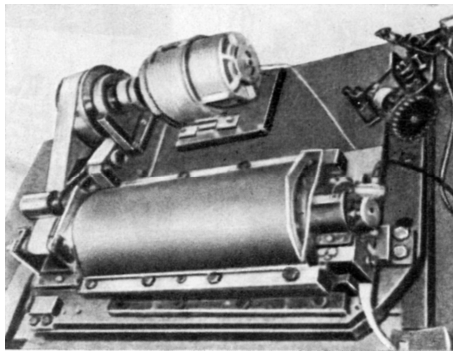
1970 – Нейтронная спектроскопия становится продуктивным экспериментальным методом



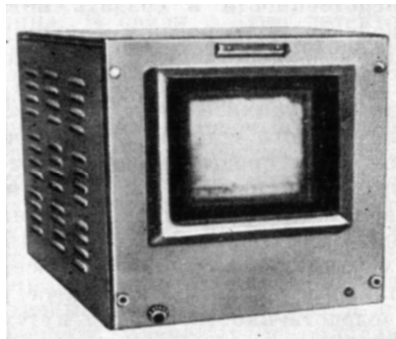
Развитие и совершенствование методики использования нейтронов в физике твердого тела и физике ядра.

Начало физических исследований на реакторе ИРТ-1000...ИР-8 Спектроскопия

Первые спектрометры по времени пролета на реакторах МР и ИРТ (ИАЭ), ВВР-М в ИЯИ Ан УССР «НУРМЕН»(Киев). Коллективы: РФТ – ИРТ М.Г.Землянов, Н.А.Черноплеков; ВВР-М И.П.Садиков, А.А.Чернышов, И.П.Еремеев.



Механический монохроматор нейтронов

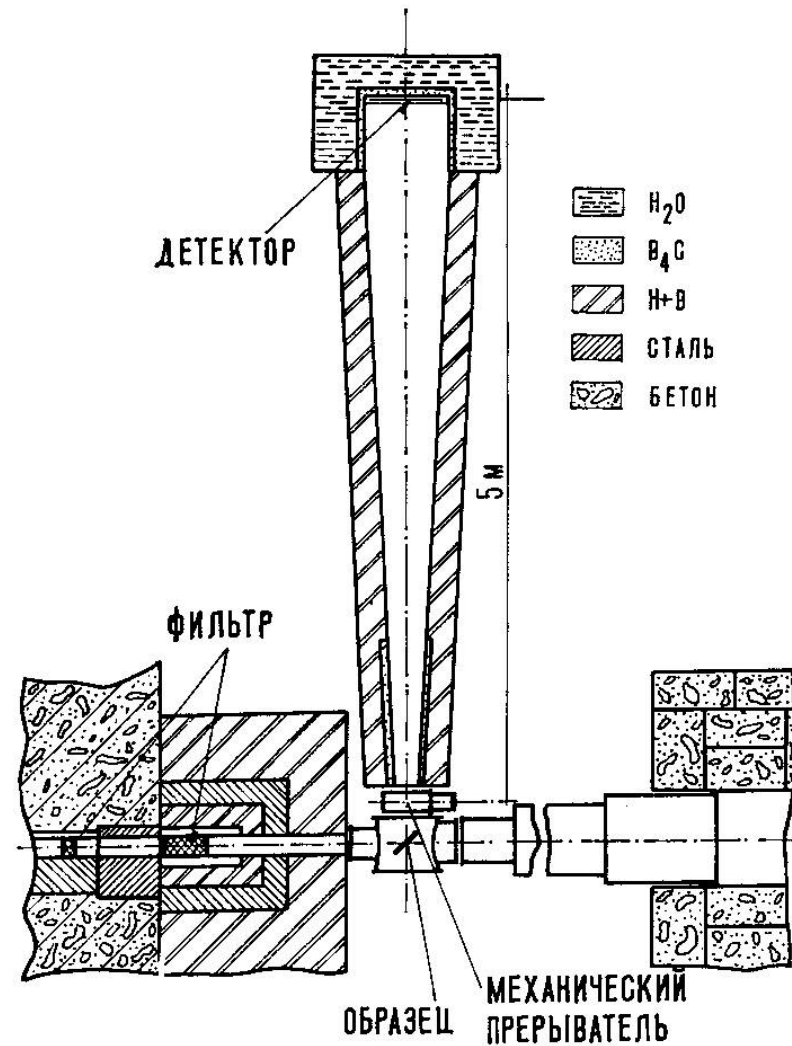


Многоканальный амплитудный анализатор с памятью на электронно-лучевой трубке

- Установлен механический монохроматор нейтронов (в ~ 100 раз более светосильный, чем кристаллический монохроматор). После монохроматора нейтроны падают на образец и γ -лучи захвата анализируются многоканальным амплитудным анализатором.
- Начинаются исследования по физике твердого тела с помощью рассеяния нейтронов:
 - упругого когерентного рассеяния как дополнения к рентгеноструктурному анализу;
 - неупругого рассеяния как принципиально нового метода исследования спектров возбуждения конденсированного состояния вещества.



Первый отечественный спектрометр по времени пролета Реактор ИРТ-1000



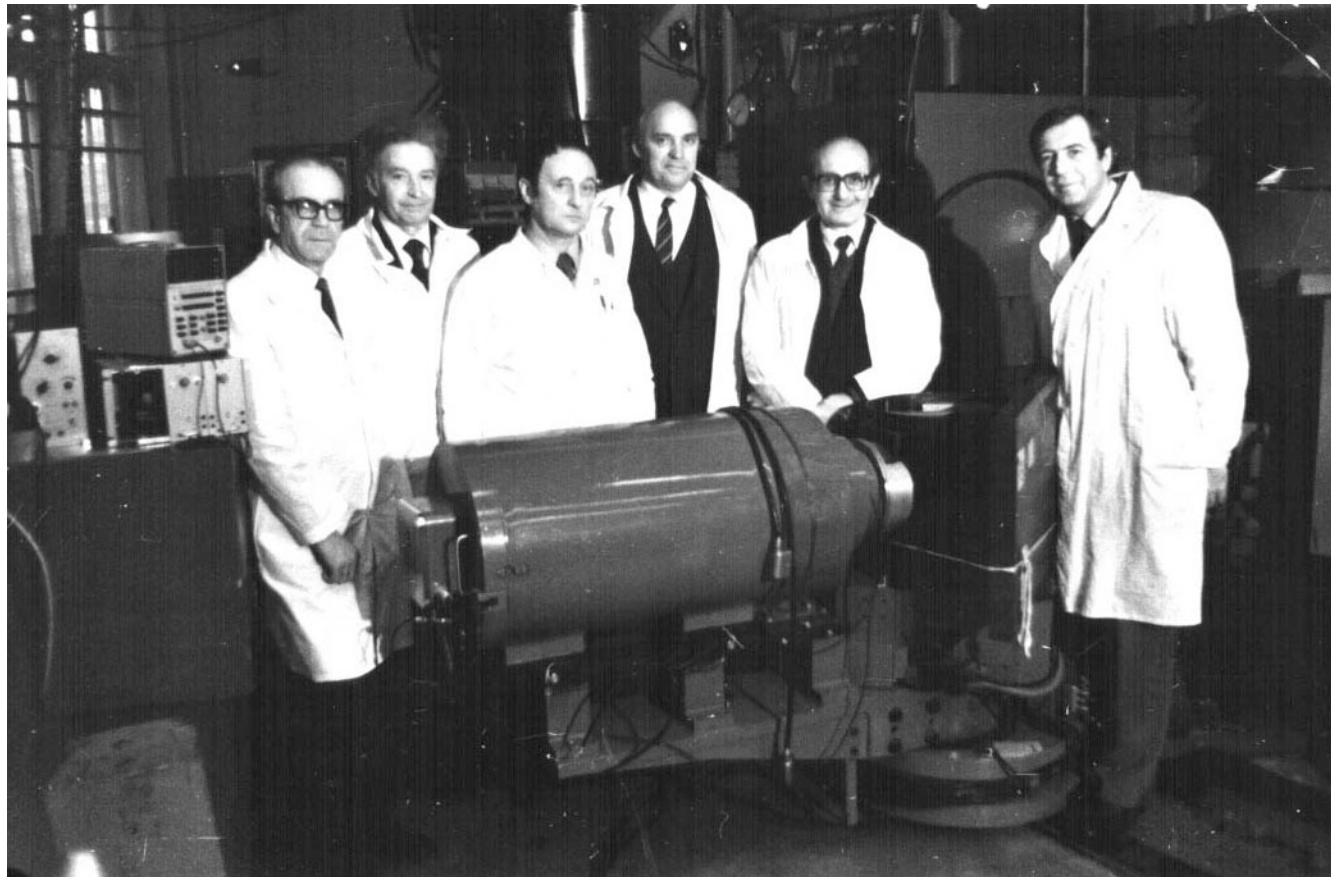
М.Г.Землянов, Н.А.Черноплеков,
Proceedings of f simposium "Pile neutron research in physics", Vienne, 1960



Разработка и создание трехосного кристаллического спектрометра «АТОС»(ГЭК 5).

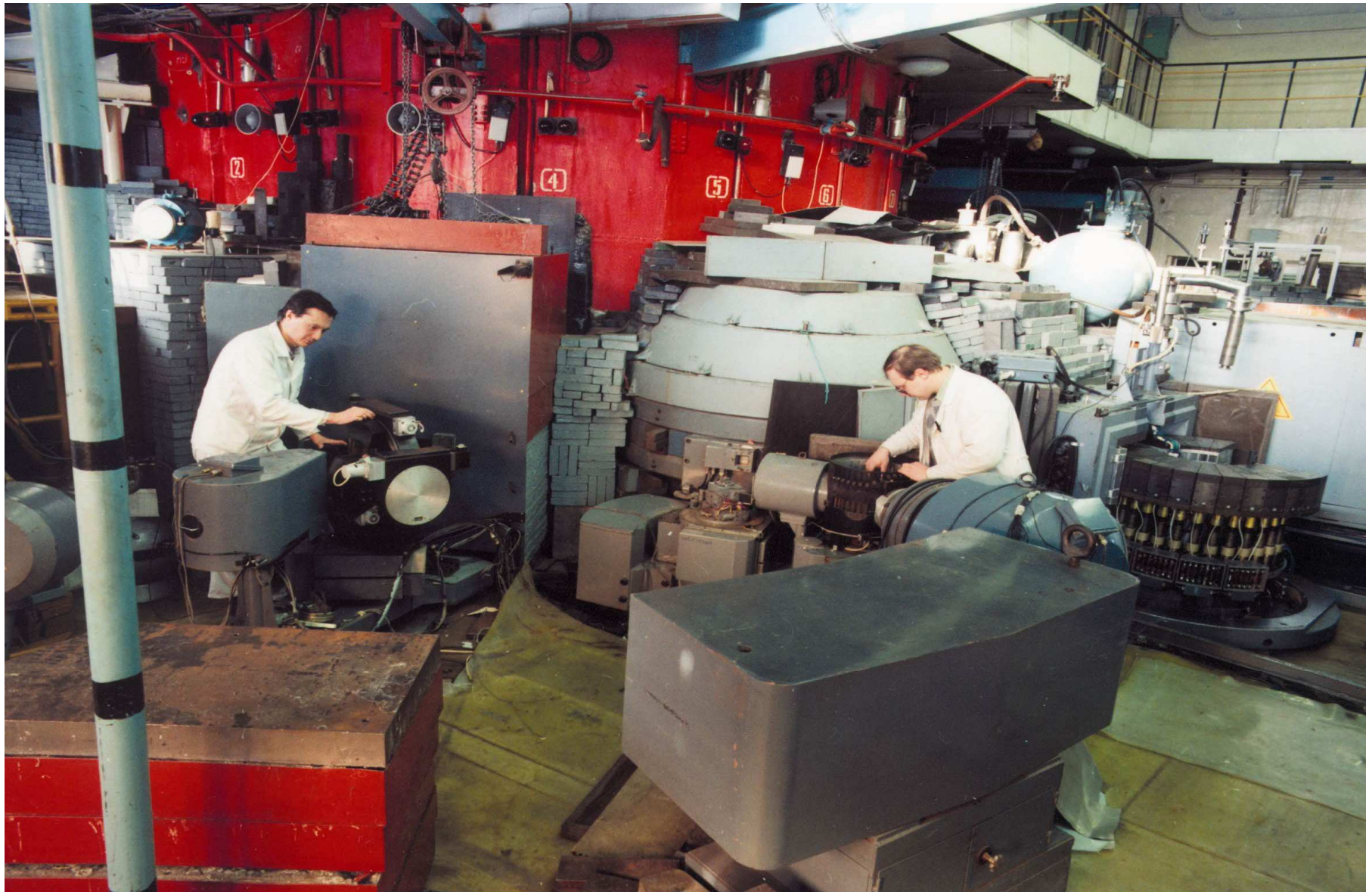
Предназначен для исследования дисперсионных кривых коллективных возбуждений в кристаллических веществах.

Коллектив: М.Г.Землянов, И.В.Наумов, А.Е.Головин, В.А.Соменков, Н.А.Черноплеков, П.П.Паршин, А.Ю.Румянцев 1968 – 1975г.г.





в 60-е годы заложены основы развития нейтронной спектроскопии по времени пролета на стационарных источниках нейтронов (реакторах) и импульсных источниках (на базе ускорителей электронов) в ОФТТ.

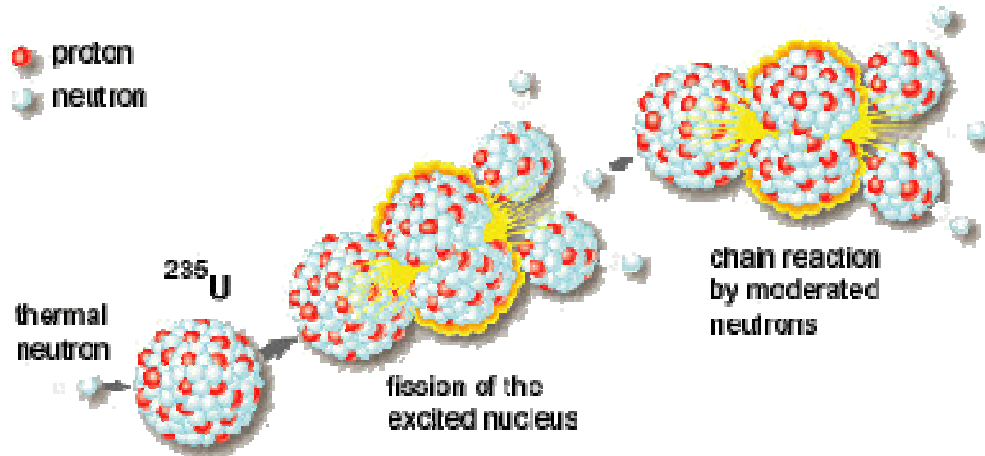


О чем пойдет речь

1. Особенности нейтронного излучения, определяющие его «нишу» среди других методов ФКС
2. Основные задачи и принципы нейтронной спектроскопии
3. Основные методы нейтронной спектроскопии:
 - TAS (трехосный кристаллический спектрометр)
 - TOF (техника времени пролета)
 - SES (спин-эхо спектроскопия)
- 3.1. Принципы действия различных типов спектрометров
- 3.2. Выбор спектрометра для проведения исследования:
 - приборы ведущих нейтронных центров
 - примеры из практики

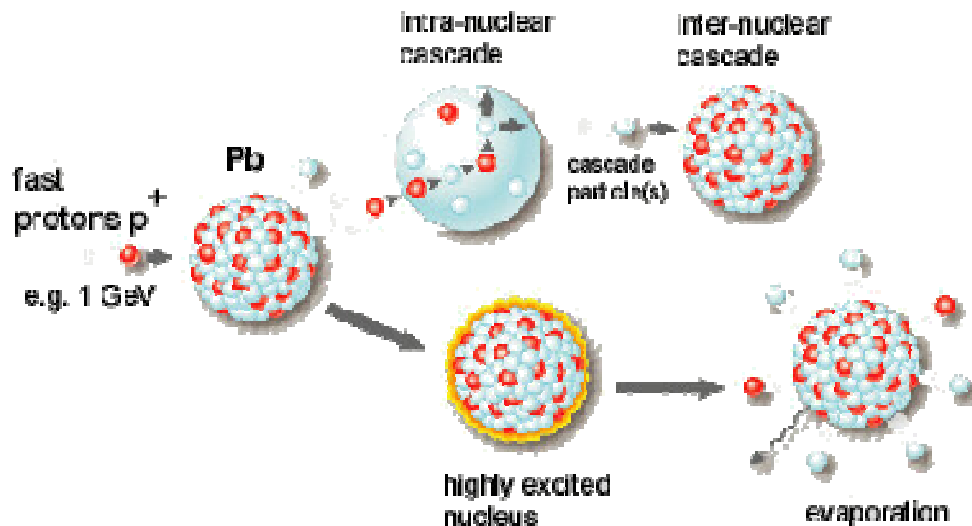
**Особенности нейтронного излучения,
определяющие его «нишу» среди других
методов ФКС**

How do we produce neutrons?



Fission

- chain reaction
- continuous flow
- 1 excess neutron/fission
- 180 MeV/neutron



Spallation

- no chain reaction
- pulsed operation
- 40 neutrons/proton
- 30 MeV/neutron

Параметры, характеризующие корпускулярные и волновые свойства нейтрона

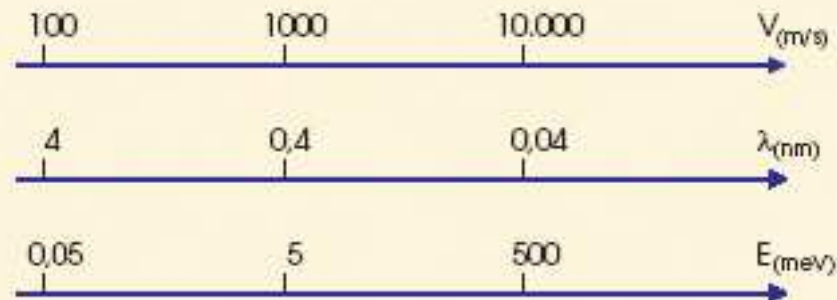


Частица



Волна

| | | | |
|--------------|-------------------------------------|-------------|--|
| Заряд | 0 | | |
| Масса | $m = 1,67 \cdot 10^{-24} \text{ г}$ | | |
| Размер | $r_0 = 6 \cdot 10^{-16} \text{ м}$ | Длина волны | $\lambda = \frac{h}{m v}$ |
| Спин | 1/2 | Волн. число | $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ |
| Магн. момент | $\mu = -1,9\mu_N$ | | |
| Импульс | $\vec{p} = m \vec{v}$ | Импульс | $\vec{p} = \frac{h \vec{k}}{2\pi} = \hbar \vec{k}$ |
| Энергия | $E = \frac{1}{2} m v^2$ | Энергия | $E = \frac{h^2 k^2}{2m\lambda^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ |

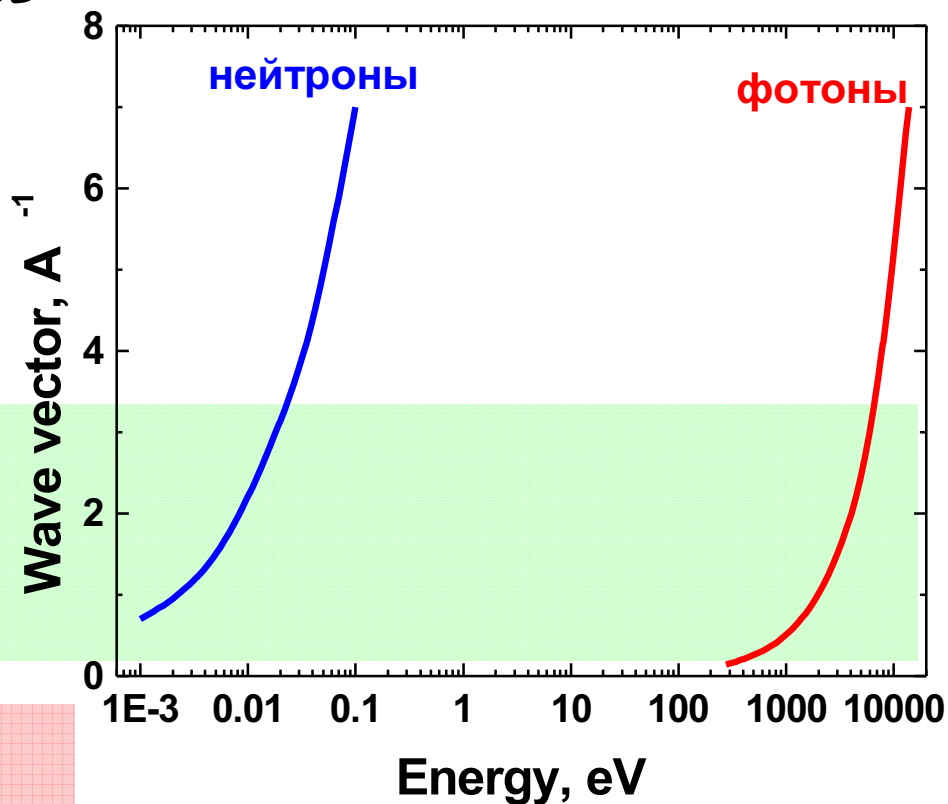


Что мы узнаём с помощью нейтронного рассеяния:

Дифракция - как устроено вещество?

Спектроскопия - почему оно так устроено?

**Возможности фотонов
и нейтронов**



Область волновых
векторов возбуждений в
конденсированных
средах

Область характерных
энергий возбуждений в
конденсированных средах

Характерные особенности тепловых нейтронов, существенные для ФКС

Легко проникает в объем вещества, так как электрически нейтрален

Нейтрон взаимодействует как с ядрами, так и с магнитными моментами

Энергия и длина волны - масштаба величин, характерных для возбуждений в конденсированных средах

Комплиментарность нейтронных методов исследования вещества с другими ядерно-физическими методами

Нейтронная техника

Спектроскопия использует дуализм нейтрона:
это квантово-механический объект – волна и
частица.

Спектрометры кристаллические (трехосные)
 $(2d \sin \vartheta = \lambda)$,

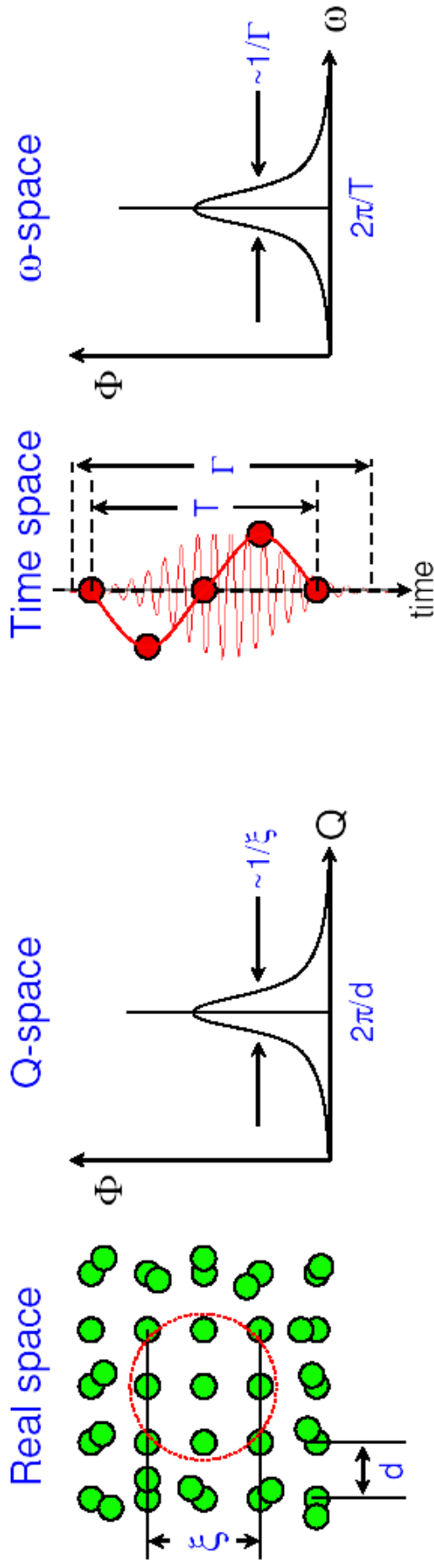
и спектрометры по времени пролета (прямой и
обратной геометрии) $(E = mV^2/2)$

$$\lambda = 4\text{Å} \sim E = 5\text{мэВ} \sim V = 1000 \text{ м/сек } (\sim 3M)$$

Задачи и основные принципы нейтронной спектроскопии

The scattered neutron flux $\Phi(\vec{Q}, \hbar\omega)$ is proportional to the space (\vec{r}) and time (t) Fourier transform of the probability $G(\vec{r}, t)$ of finding one or two atoms separated by a particular distance at a particular time.

$$\Phi \propto \frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial \omega} \propto \iint e^{i(\vec{Q}\cdot\vec{r} - \omega t)} G(\vec{r}, t) d^3 \vec{r} dt$$



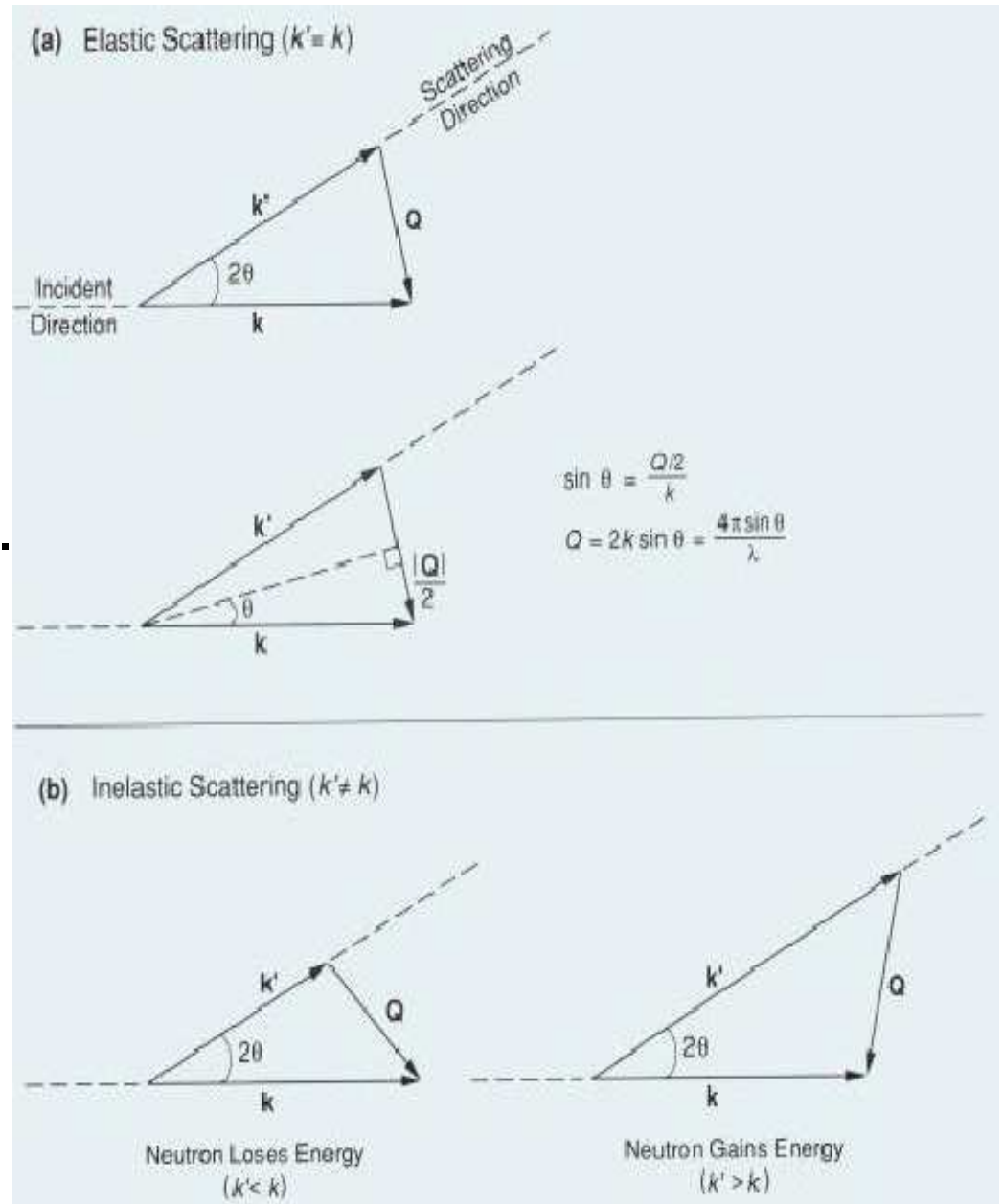
Параметры, характеризующие рассеяние нейтронов

Elastic Neutron Scattering

- No loss of energy
- Examines the change in momentum of the neutrons.

Inelastic Neutron Scattering

- Examines both momentum and energy dependencies.



The Scattering Cross Section

Scattering Cross Sections

Total
$$\sigma_{tot} = \frac{\text{Number of scattered neutrons per sec}}{\text{Incident neutron flux}} = \left[\frac{\text{time}^{-1}}{\text{time}^{-1} \text{area}^{-1}} = \text{area} \right]$$

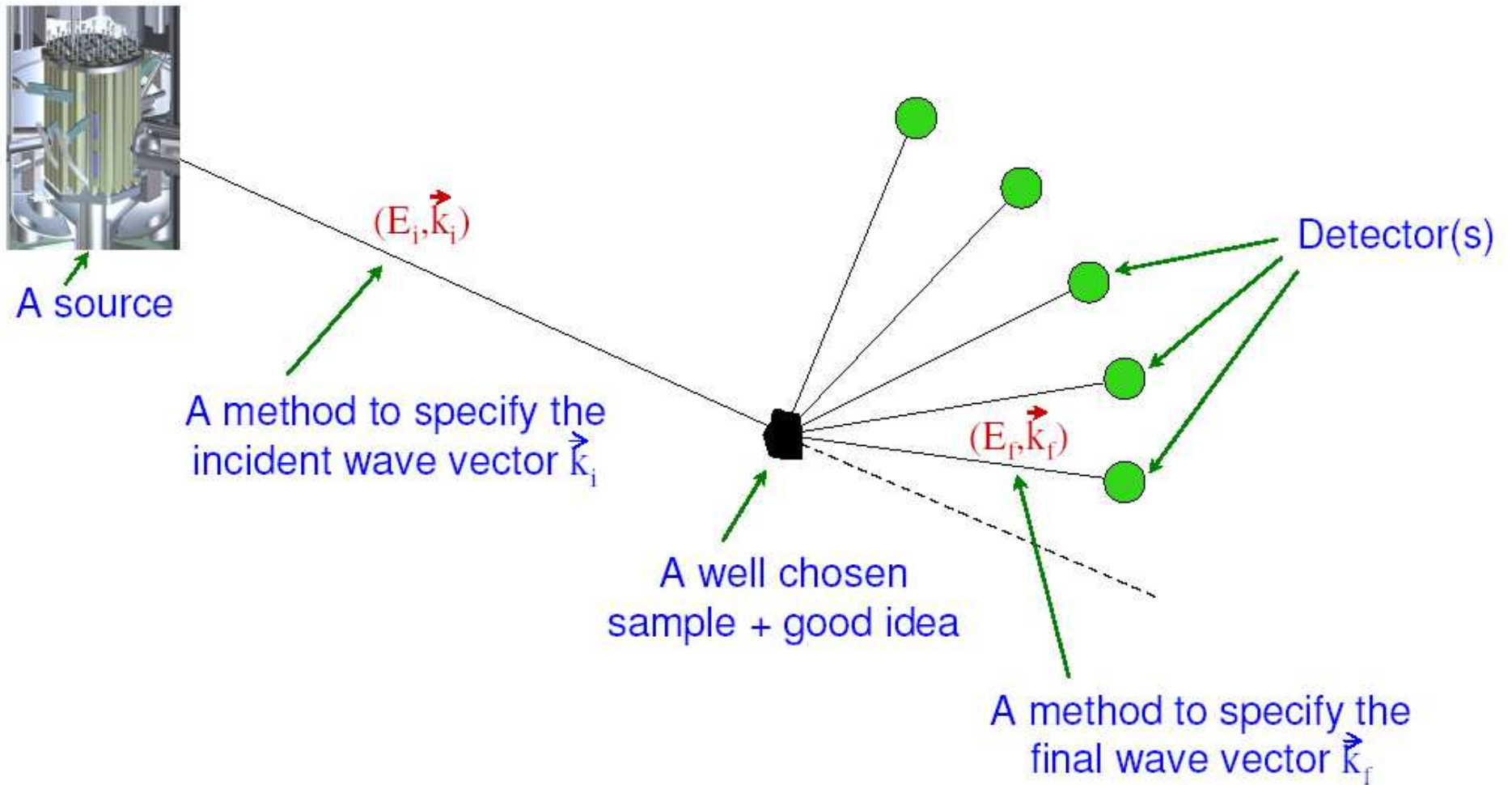
Differential
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Number of scattered neutrons per sec into angle element } d\Omega}{\text{Incident neutron flux} \cdot d\Omega}$$

Double Differential
$$\frac{d\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{\text{Number of ... and with energies between } E' \text{ and } E'+dE'}{\text{Incident neutron flux} \cdot dE' d\Omega}$$

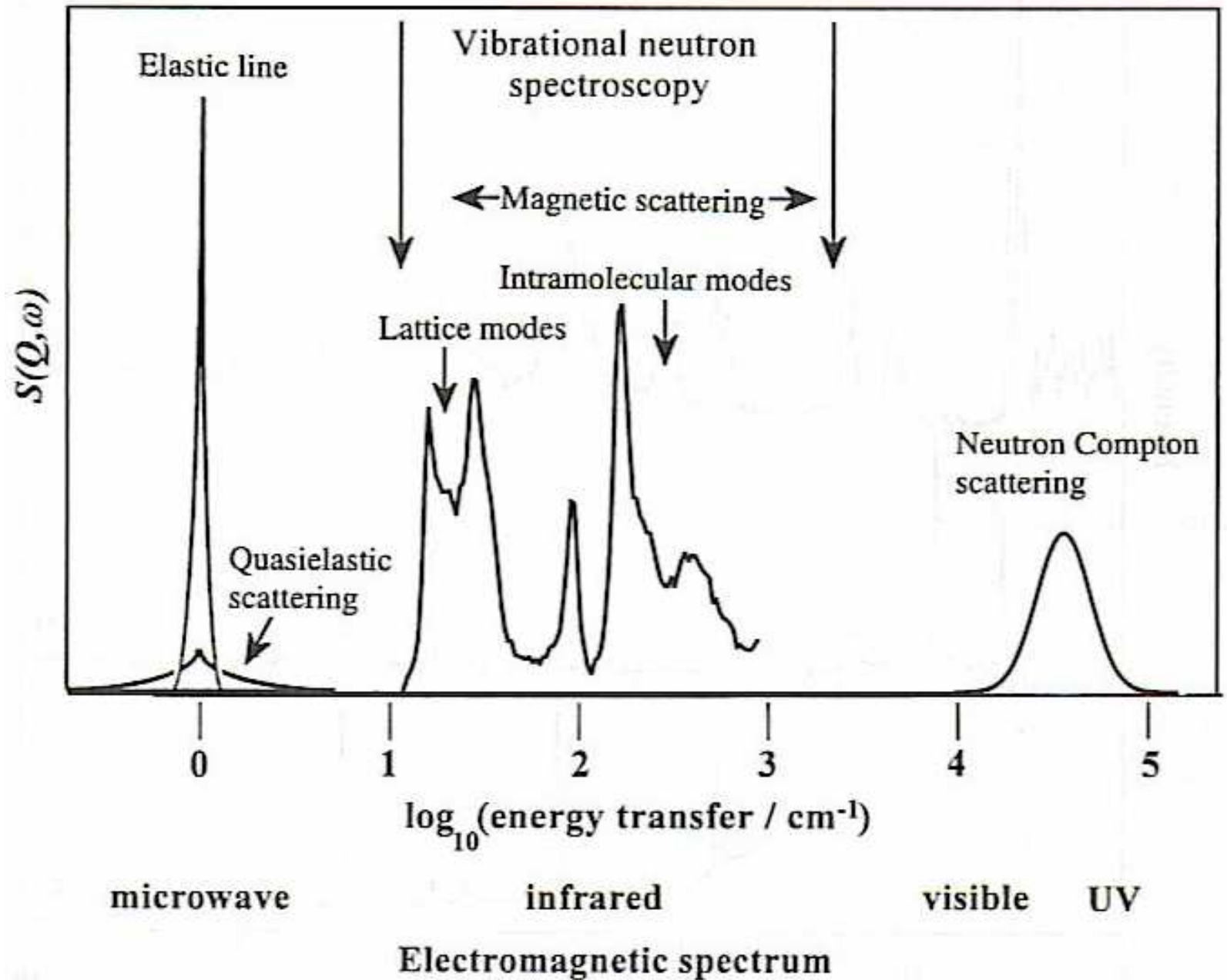
Scattering Law
$$\frac{d\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} S(\mathbf{Q}, \omega) \quad \text{S Scattering function}$$

Units: 1 barn = 10^{-28} m² (ca. Nuclear radius²)

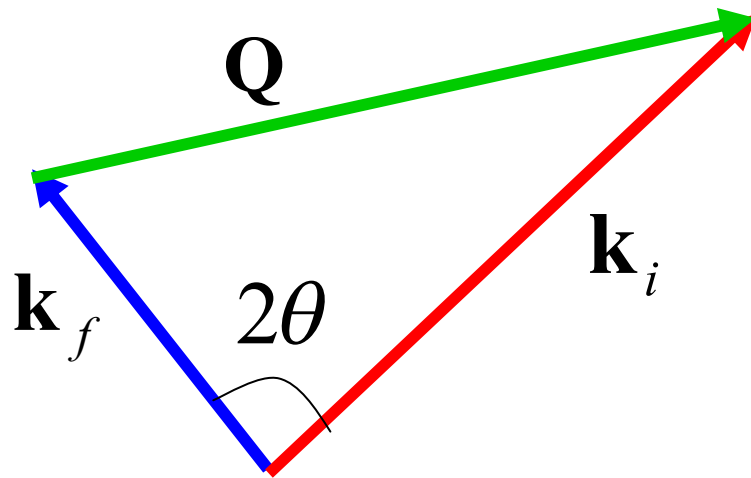
Принципиальная схема нейтронной спектроскопии



Inelastic Neutron Scattering



Неупругое рассеяние нейтронов



$$\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$$

$$\omega = E_i - E_f$$

Nuclear scattering

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi\omega} \int dt e^{-i\omega t} \frac{1}{N} \langle \rho_{\mathbf{Q}}(0) \rho_{-\mathbf{Q}}(t) \rangle$$

Magnetic scattering

$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi\omega} \int dt e^{-i\omega t} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{R}-\mathbf{R}')} \langle S_{\mathbf{R}}^{\alpha}(0) S_{\mathbf{R}'}^{\beta}(t) \rangle$$

Некоторые основные формулы для неупругого рассеяния нейтронов

В общем случае:
$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega d\omega} \propto \frac{k_f}{k_0} S(\vec{Q}, \omega)$$

Нейтроны и колебания решетки

Неупругое рассеяние на ядрах (фононы): j-ветвь

$$S_j(\vec{Q}, \omega) = \left| P_j(\vec{Q}, \vec{q}) \right|^2 \frac{\omega}{1 - e^{-\omega/T}} \frac{\delta(\omega \pm \omega_j(\vec{q}))}{\omega^2}$$

неупругий структурный фактор

$$P_j = \sum_{\text{un. cell}} \frac{b_d}{\sqrt{M_d}} \left[\vec{Q} \cdot \vec{e}_d(\vec{q}) \right] e^{i\vec{Q} \cdot \vec{d}} e^{-W_d(\vec{Q})}$$

$S(\vec{Q}, E)$ по всем \vec{q} ZB дает плотность фоновых состояний $\langle |\xi_{RE}(E)|^2 \rangle +$

$$S(\vec{Q}, E) \propto \frac{\sigma_{scatt}^{RE} e^{-2W_{RE}} \langle |\xi_{RE}(E)|^2 \rangle}{M_{RE} (1 - \exp(-E/k_B T))} + 12 * \frac{\sigma_{scatt}^i e^{-2W_i} \langle |\xi_i(E)|^2 \rangle * DOS(E)}{M_B (1 - \exp(-E/k_B T))}$$

$$DOS \propto \sum_s \int_{ZB} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \delta(E - E_{q,s}), \quad \int DOS(E) dE = 1$$

MAGNETIC NEUTRON SCATTERING FORMALISM

$$\frac{d^2\sigma}{d\omega d\Omega} = \frac{k_f}{k_0} \cdot S(\omega, Q, T) \quad \text{here S is -} \quad S(\omega, Q, T) = \left[\frac{1.91r_0^2}{\mu_B} \right]^2 \cdot F^2(Q, T) \cdot \frac{1}{1 - e^{-\omega/kT}} \cdot \chi''(\omega, Q, T)$$

defined from measurements
0.29 b/sr μ_B^2
dipole magn. f.-f.
dynamical magnetic susceptibility

$$\chi''(\omega, Q, T) = \pi \cdot \chi'(\omega, Q, T) \cdot \omega \cdot P(\omega, Q, T) \rightarrow \text{spectral function} \quad \int_{-\infty}^{\infty} P(\omega) d\omega = 1$$

static magnetic susceptibility – $\chi_{st}(T)$

What Could Be Extracted ?

$$\chi'(\omega, 0, T) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''(\omega', 0, T)}{\omega - \omega'} d(\omega')$$

$\chi_{st}(T), \sigma_m$ – are related to n_f – popul. of f-shell
 N – degeneracy f-shell

$$\sigma_m = 2 \cdot \left[\frac{1.91r_0^2}{\mu_B} \right]^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi''(\omega, Q, T)}{1 - e^{-\omega/kT}} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega, Q, T) d\omega$$

magnetic cross-section

To get $\chi_{st}(T)$ – measurements in large T-range
 To get σ_m – measurements in large ω -range

thermal relaxation of magnetic moment

Karringa : $\Gamma_i \sim \alpha T (\alpha \sim 10^{-2} - 10^{-3}) + \text{CEF-effects}$

$$S(\omega, Q, T) \rightarrow F^2(Q) \cdot \sum_{n,m} \rho_n \left| \langle \mathbf{m} | \mathbf{J}_\perp | \mathbf{n} \rangle \right|^2 \cdot \delta(\omega - \Delta_{nm})$$

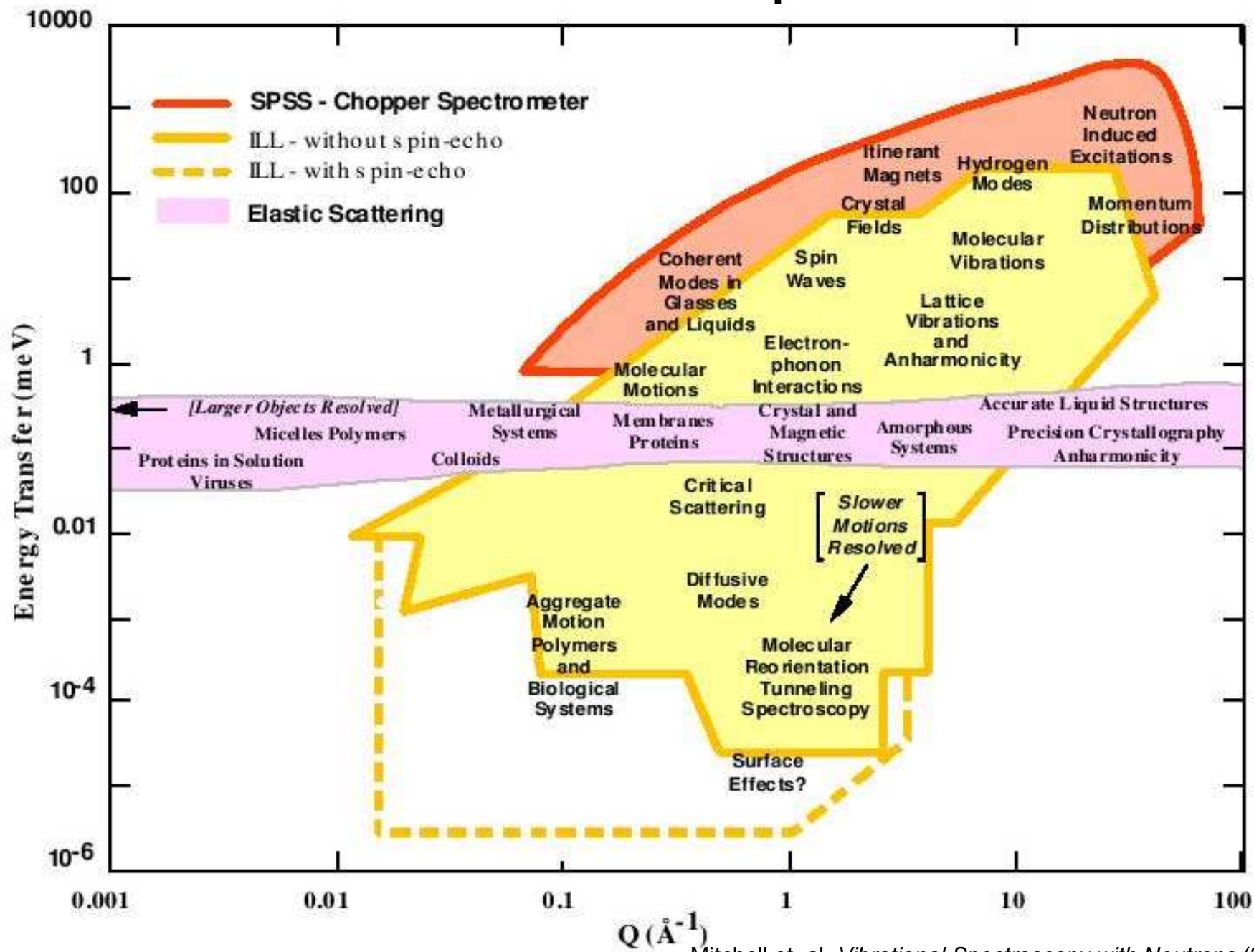
peak intensity (wave function)
level's energy

spin-fluctuations in MV systems

limiting case : $\Gamma \gg \text{CEF}$ $M \sim M_0 \exp(-t/\tau_f)$
 splitting

$$S(\omega, Q, T) \rightarrow \frac{\omega}{1 - e^{-\omega/kT}} \cdot \frac{(\Gamma/2)}{\omega^2 + (\Gamma/2)^2} \quad \frac{\Gamma_{qe}}{2} = \frac{\omega}{\tau_f}$$

Чем полезны нейтроны?



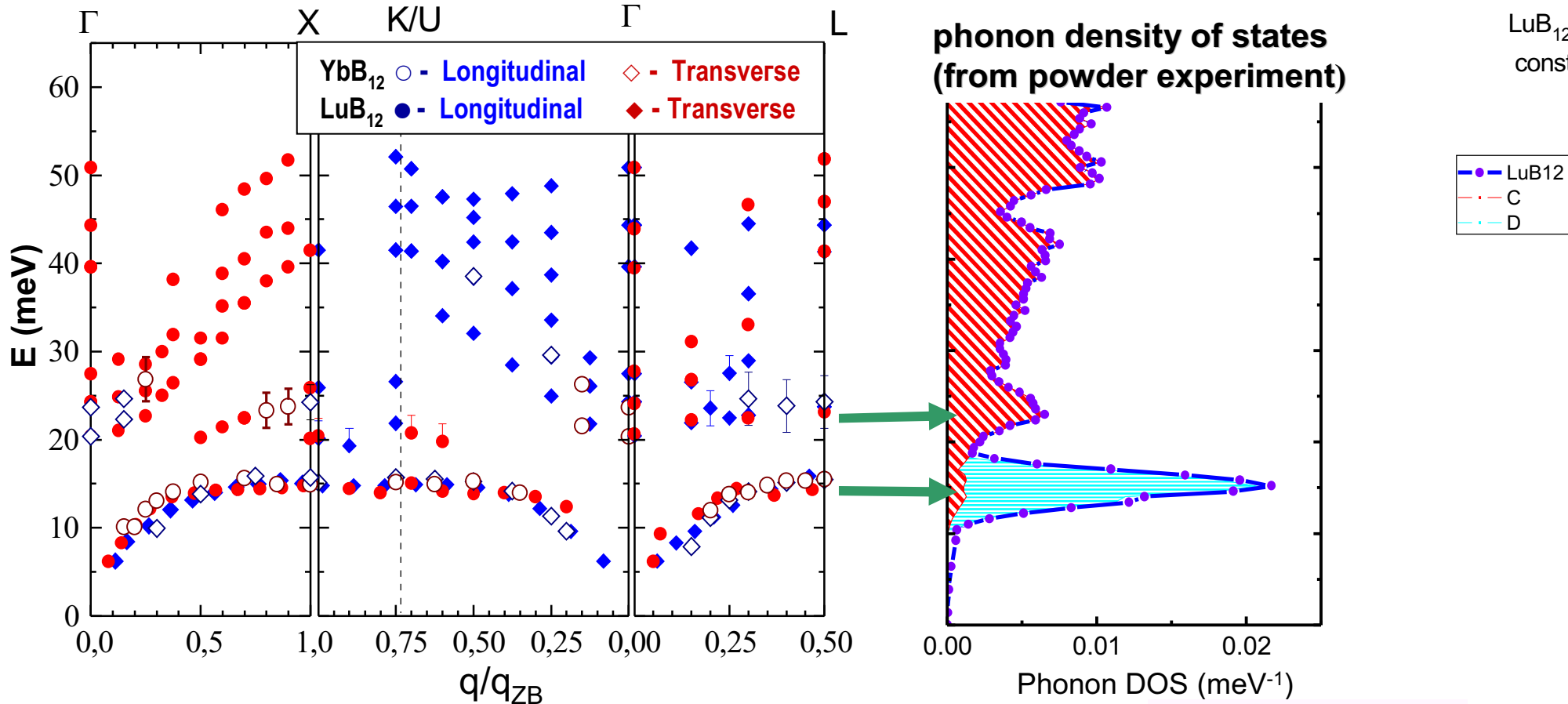
Основные задачи, решаемые нейтронной спектроскопией

Природа связи атомов и устойчивость структур, структурные фазовые переходы - динамика атомов в кристаллических и некристаллических материалах (аморфных, квазикристаллических, наноструктурных): *плотность (парциальная) колебательных состояний, дисперсия фононов для многокомпонентных, наноструктурированных систем, гидридов, оксидов, молекулярных кристаллов, гелия.*

Магнитные фазовые переходы и магнитная динамика в упорядоченных магнитных структурах и для локальных магнитных моментов - спиновые волны, локальные и коллективные возбуждения в f-, d- электронных системах, в сочетании с эффектами кристаллического поля и спиновыми флуктуациями вследствие электронной неустойчивости: *локальные и зонные магнетики, системы с сильными электронными корреляциями и валентной неустойчивостью.*

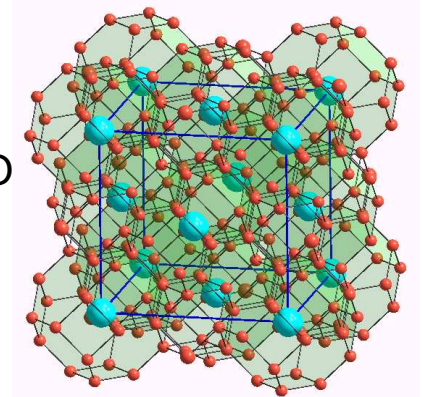
Диффузия в твердых телах (водород), критические явления, молекулярная динамика

Experimental phonon dispersion curves in YbB_{12} and LuB_{12}

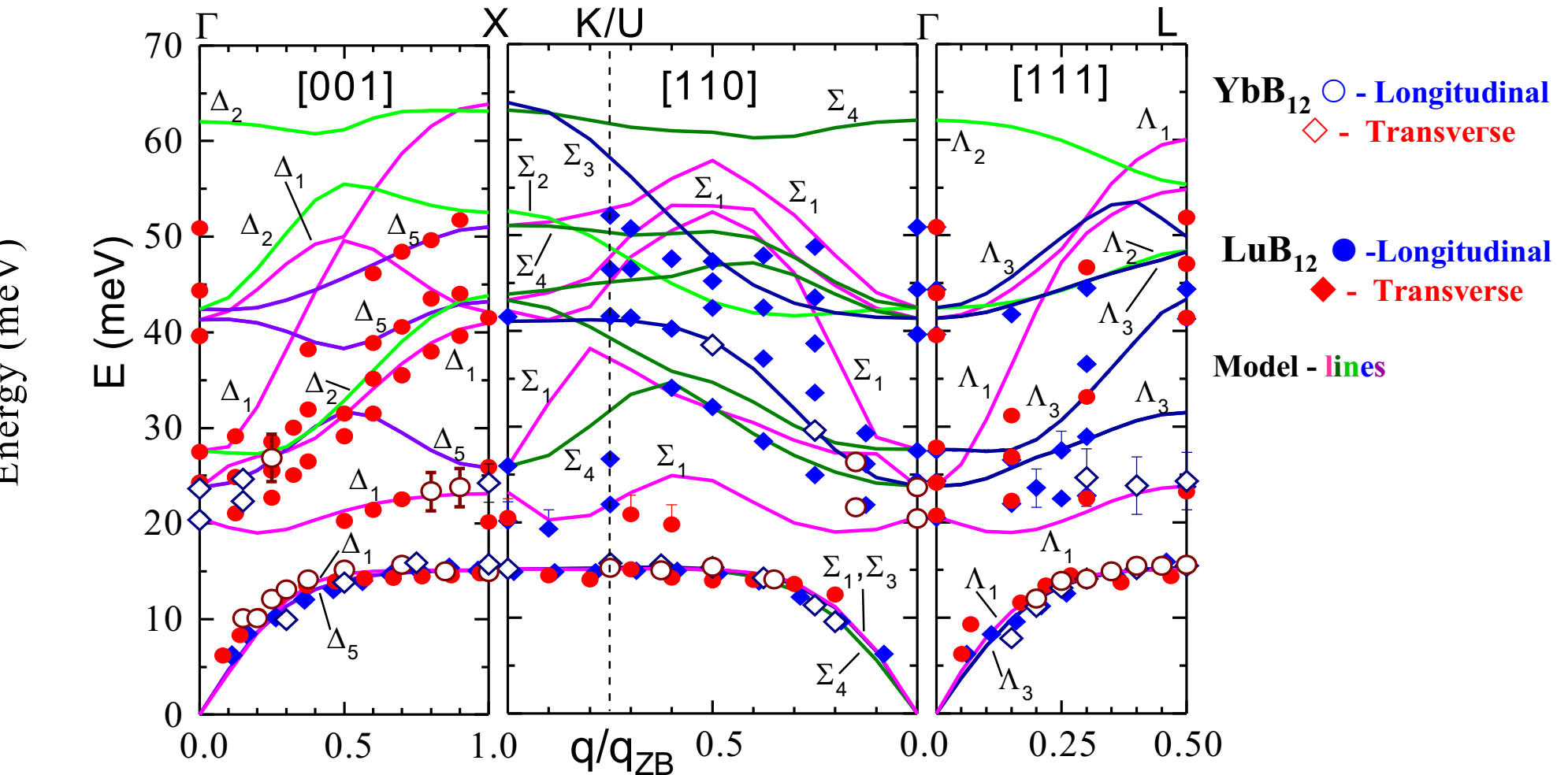


- ✓ phonon energies in YbB_{12} and LuB_{12} coincide
- ✓ large energy-independent region in acoustic branches
- ✓ energy gap ~ 5 meV between acoustic and optic branches
- ✓ weak-dispersive optic mode near the gap-edge ($E \sim 20$ meV)

a
Phonon DO



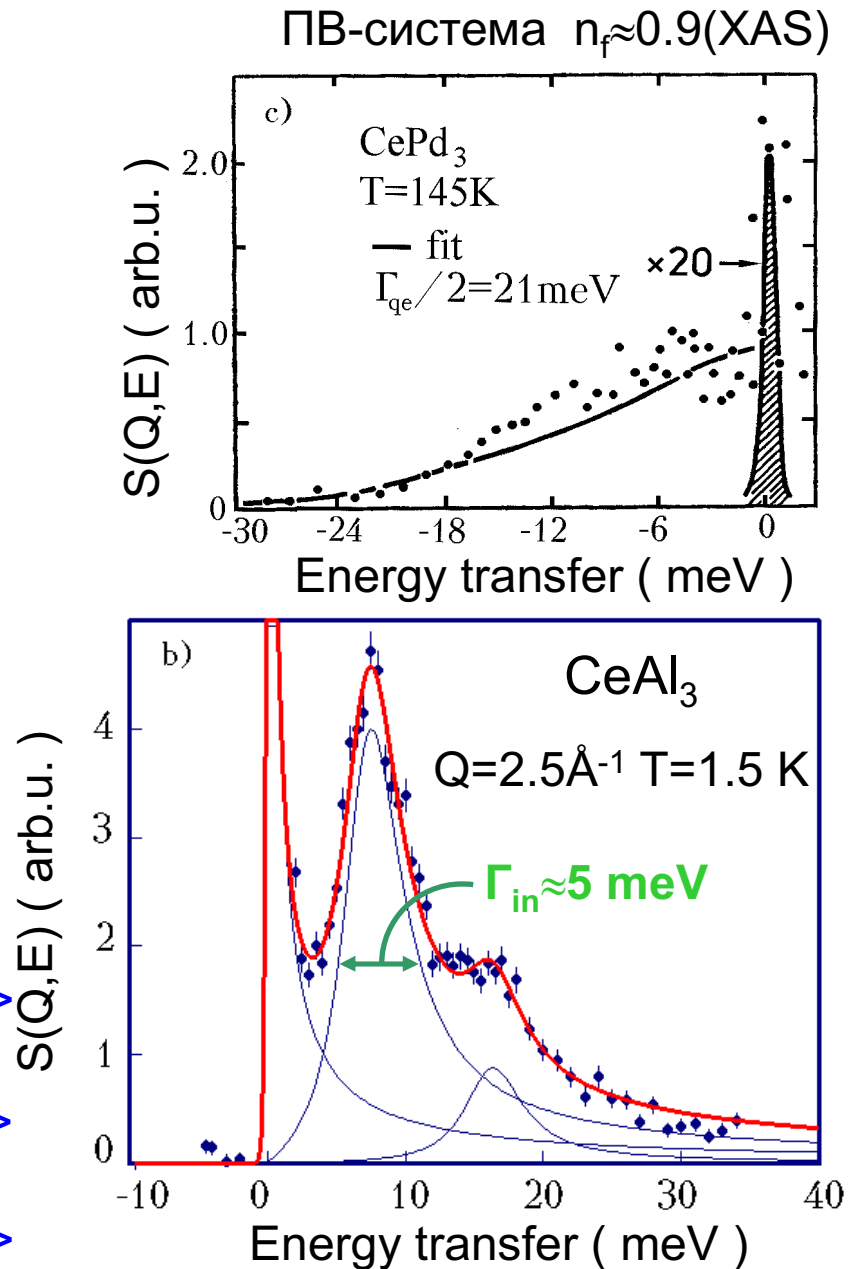
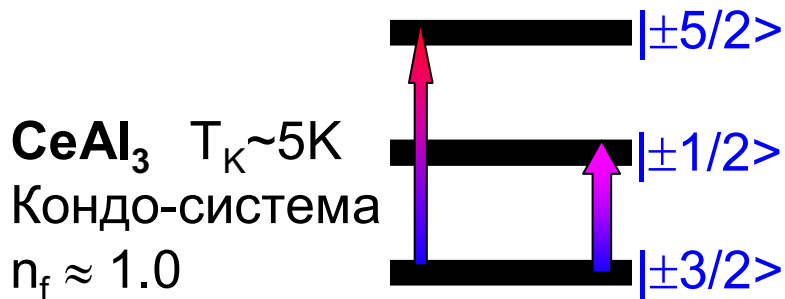
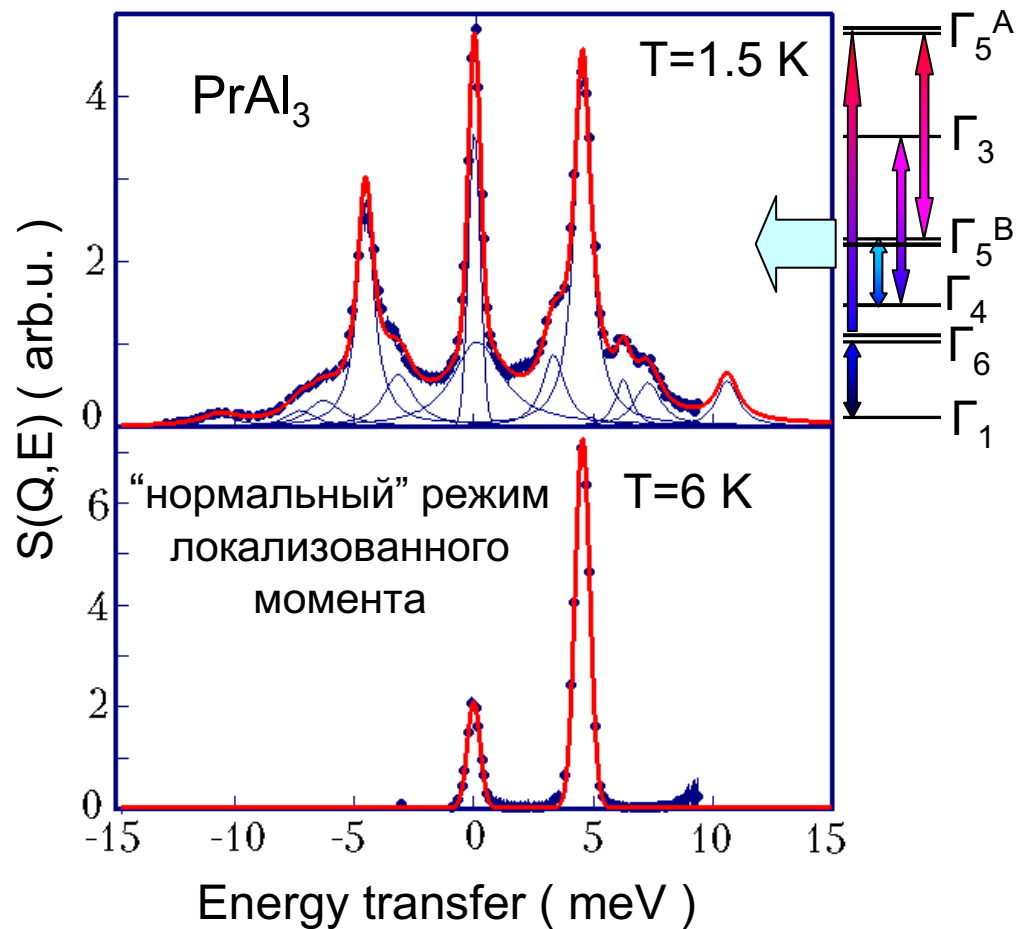
Model calculation of lattice dynamics in $\text{Yb}(\text{Lu})\text{B}_{12}$: comparison with experiment (dispersion curves)



✓ quantitative description of dispersion curves for low-energy phonons

✓ qualitative agreement with experimental structure factors

Нейтронные спектры СКЭС



Heavy fermion antiferromagnetic superconductor UPd_2Al_3

UPd_2Al_3 – magnetic excitation spectra

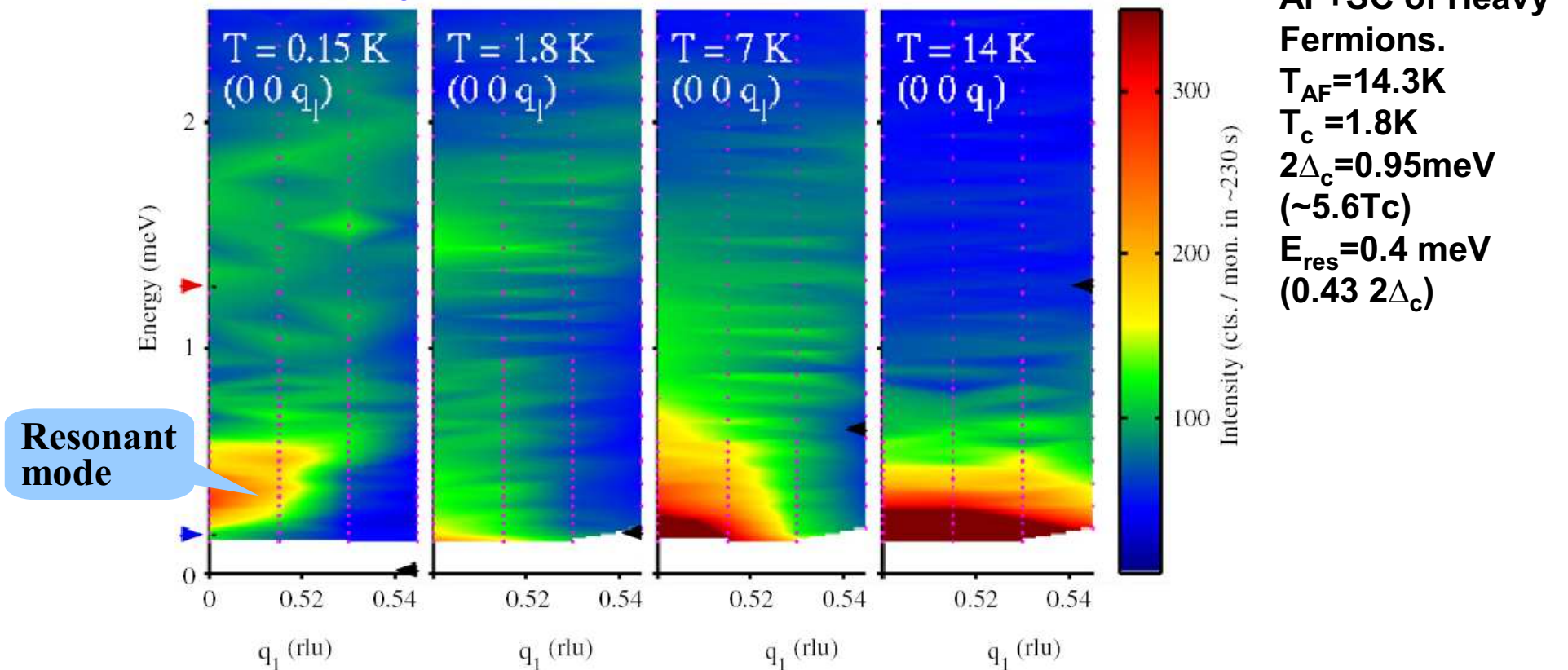
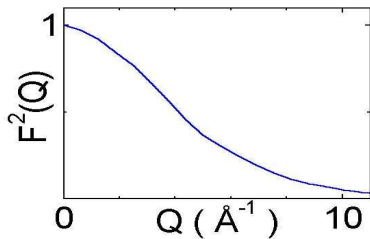


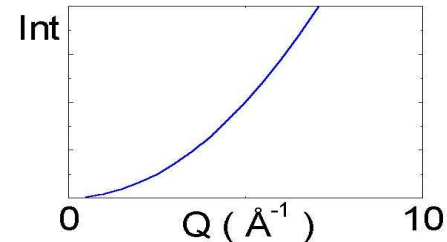
Figure 4. Contour plots of the intensity at four temperatures (marked) as a function of $\mathbf{q} = (0\ 0\ q_{\parallel})$ and energy transfer. On the energy scale, dark arrows (red and blue) on the left-hand side, mark the energies corresponding to the antiferromagnetic, T_{N} , and the superconducting, T_{sc} , transitions with the sample temperature, T , indicated by dark (black) arrows on the right-hand side on each panel. Data taken at ILL on IN14 with $k_f = 1.15\ \text{\AA}^{-1}$. The figure has been published previously [27].

Разделение фононной и магнитной составляющих в спектрах неупругого рассеяния нейтронов

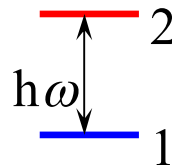
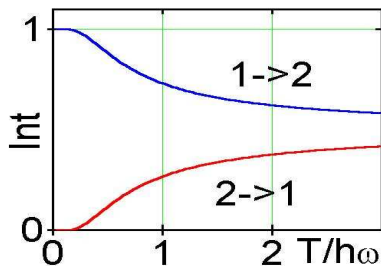
1) $I_{\text{рас}} \sim F^2(Q)_{\text{магн.}}$



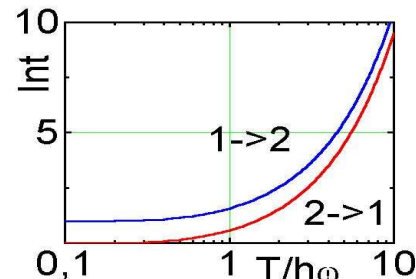
$I \sim |Q|^2_{\text{ядерное (фононы)}}$



2) $I_{\text{рас}} \sim [(e^{-h\omega/T})/Z]$



$I \sim [n(\omega)+1], n(\omega)$

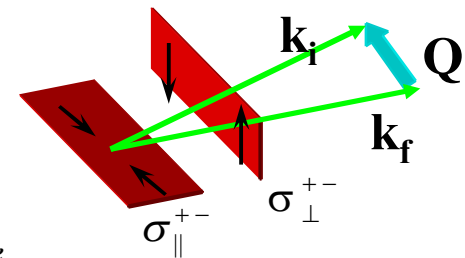


$n(\omega) = [\exp(h\omega/T) - 1]^{-1}$

3) Сопоставление спектров магнитной системы и системы без f-электронов: (La, Y, Sc, Lu).

4) Использование поляризованных нейтронов.

$$\left(\frac{d^2\sigma^{+-}}{d\Omega d\omega} \right)_{\parallel} - \left(\frac{d^2\sigma^{+-}}{d\Omega d\omega} \right)_{\perp} = \frac{1}{3} \cdot \frac{k_f}{k_0} \cdot (g_N \cdot r_e)^2 \cdot \frac{V}{V_c} \cdot Sm(Q, \omega, T) \cdot N_e$$



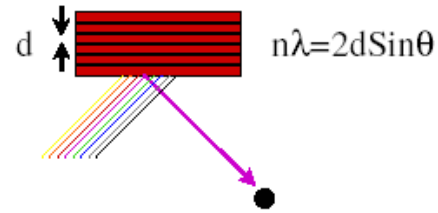
Основные методы нейтронной спектроскопии:

- TAS (трехосный кристаллический спектрометр)**
- TOF (техника времени пролета)**
- SE (спин-эхо спектроскопия)**

Методы монохроматизации нейтронов

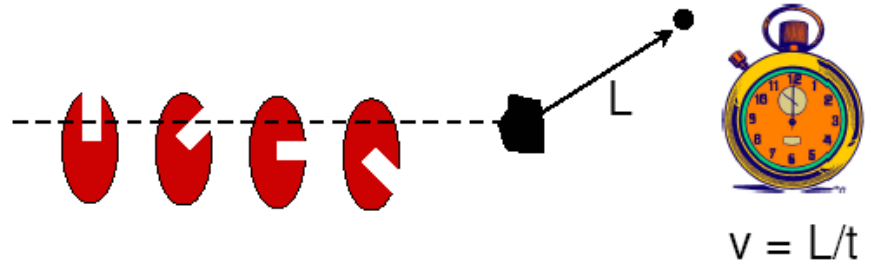
1. Bragg Diffraction

TAS , Backscattering



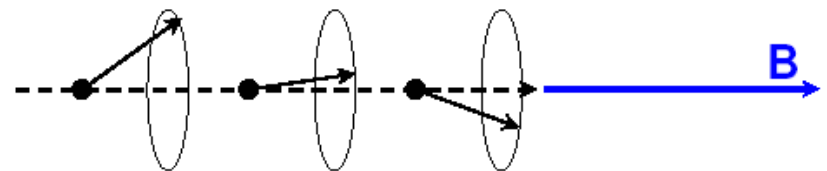
2. Time-of-Flight (TOF)

DCS, Backscattering (?)

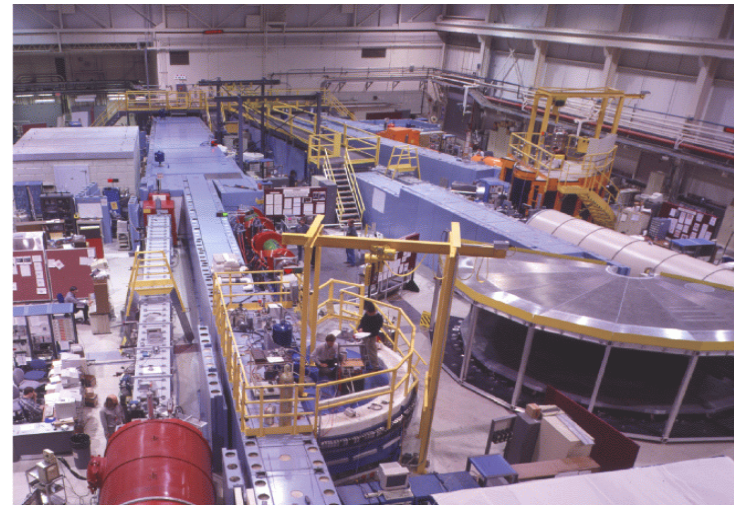
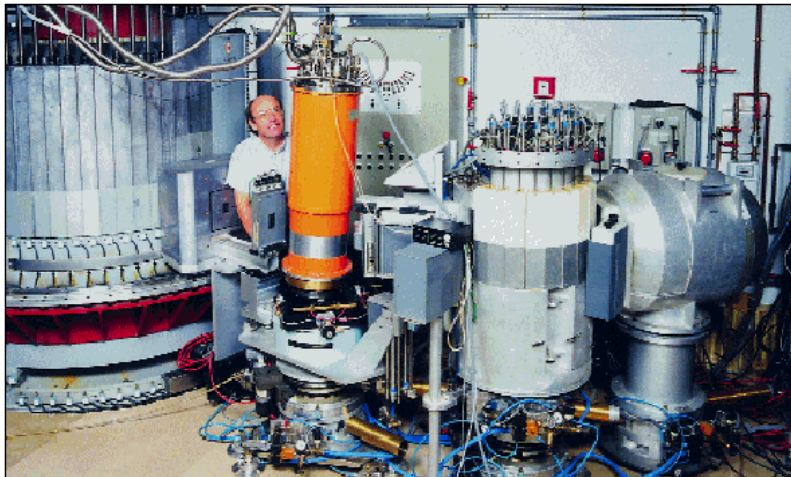
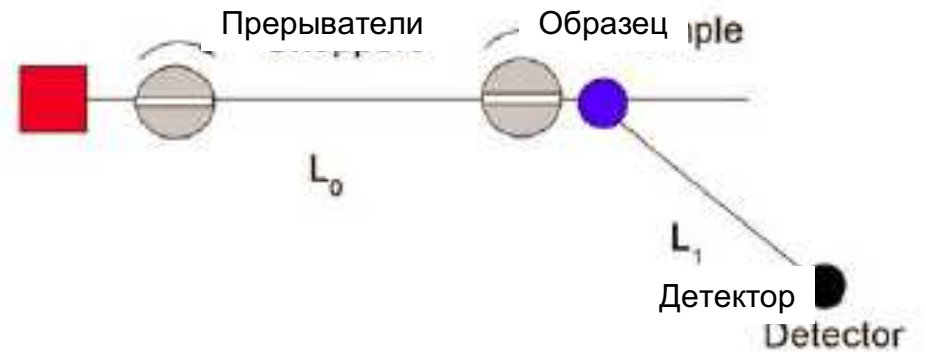
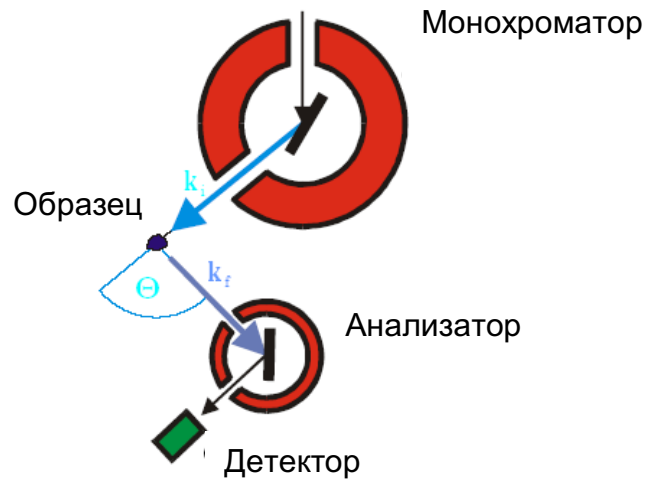


3. Larmor Precession

Spin Echo

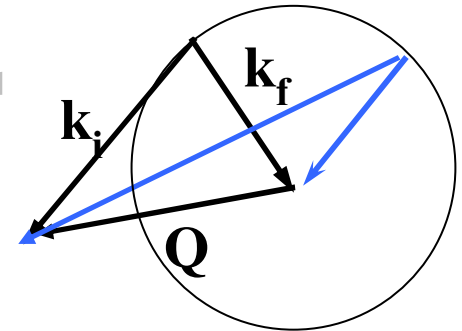
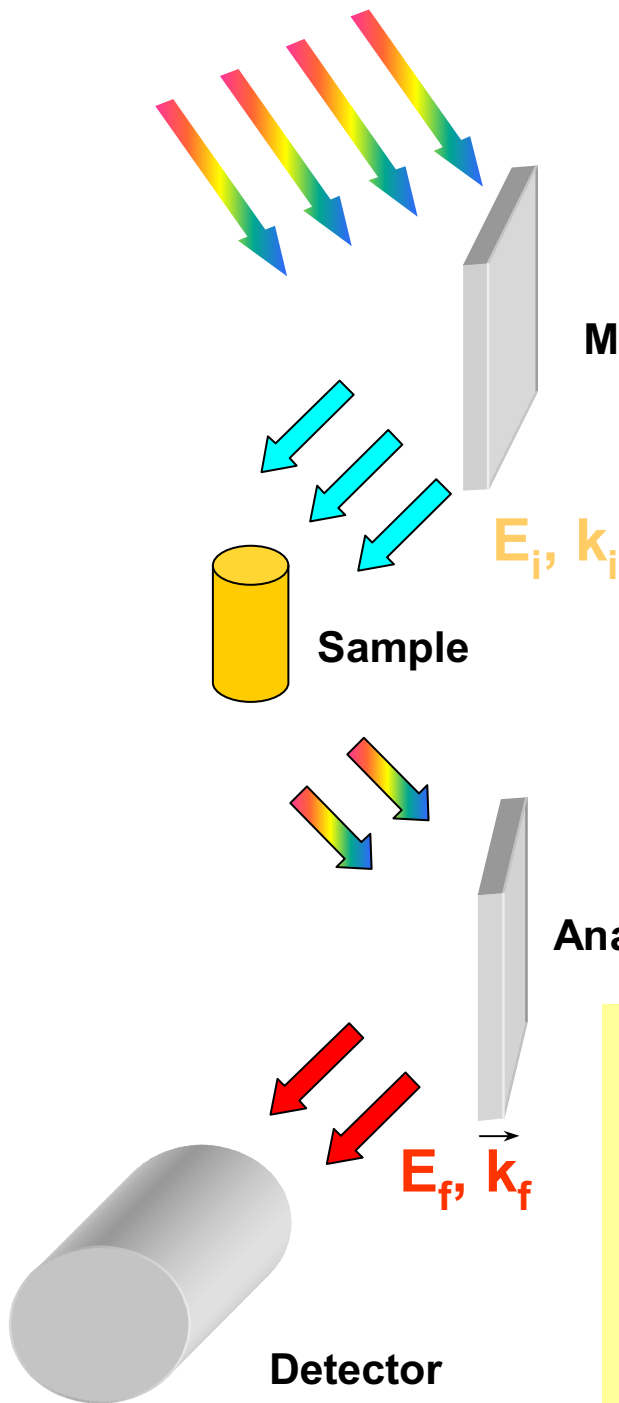


Нейтронные спектрометры: кристаллические и времяпролетные

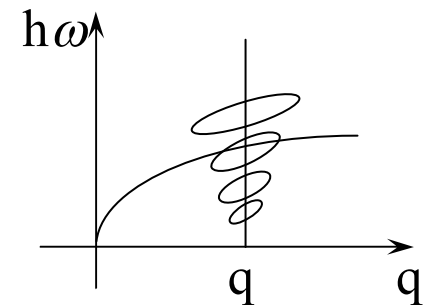
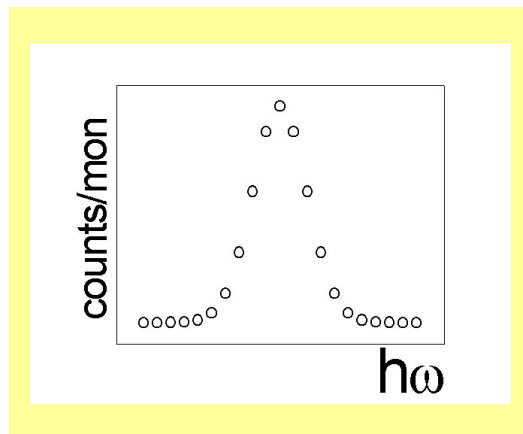
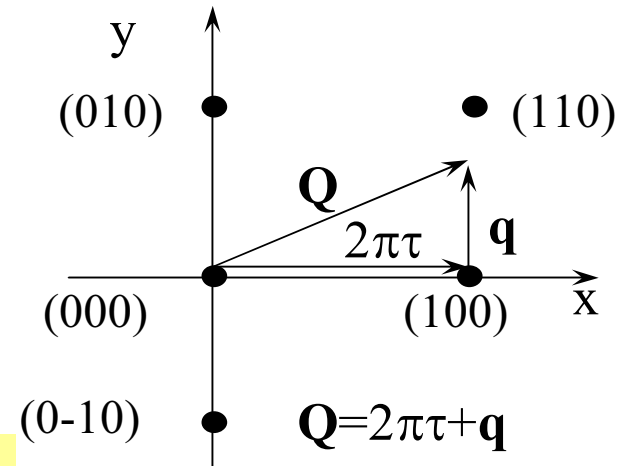


Принципы действия различных типов спектрометров

Three-axis spectrometer

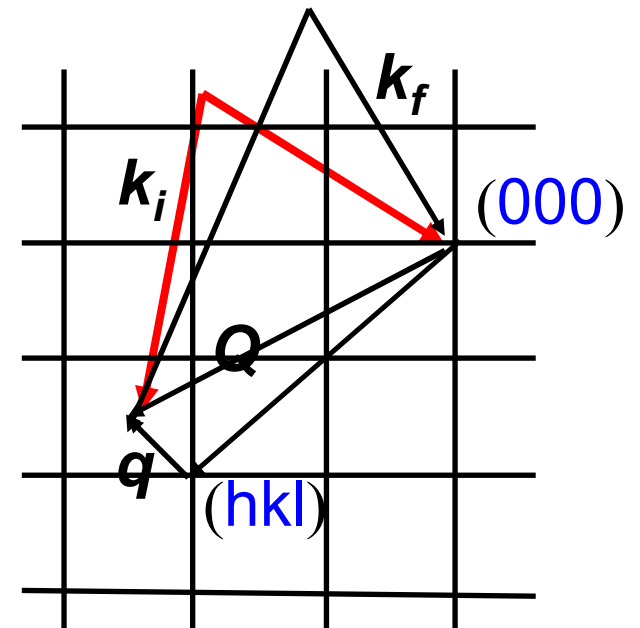
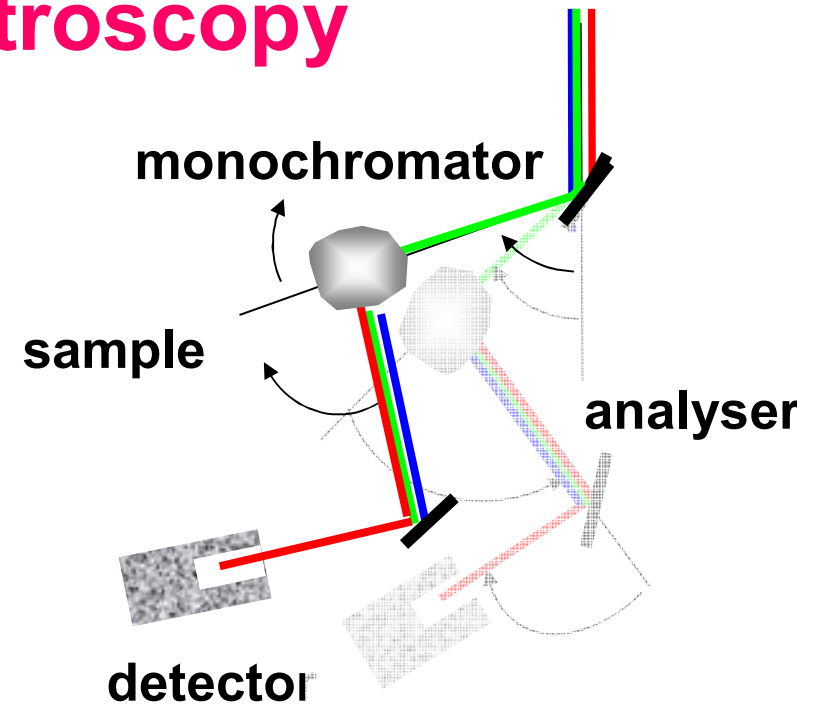
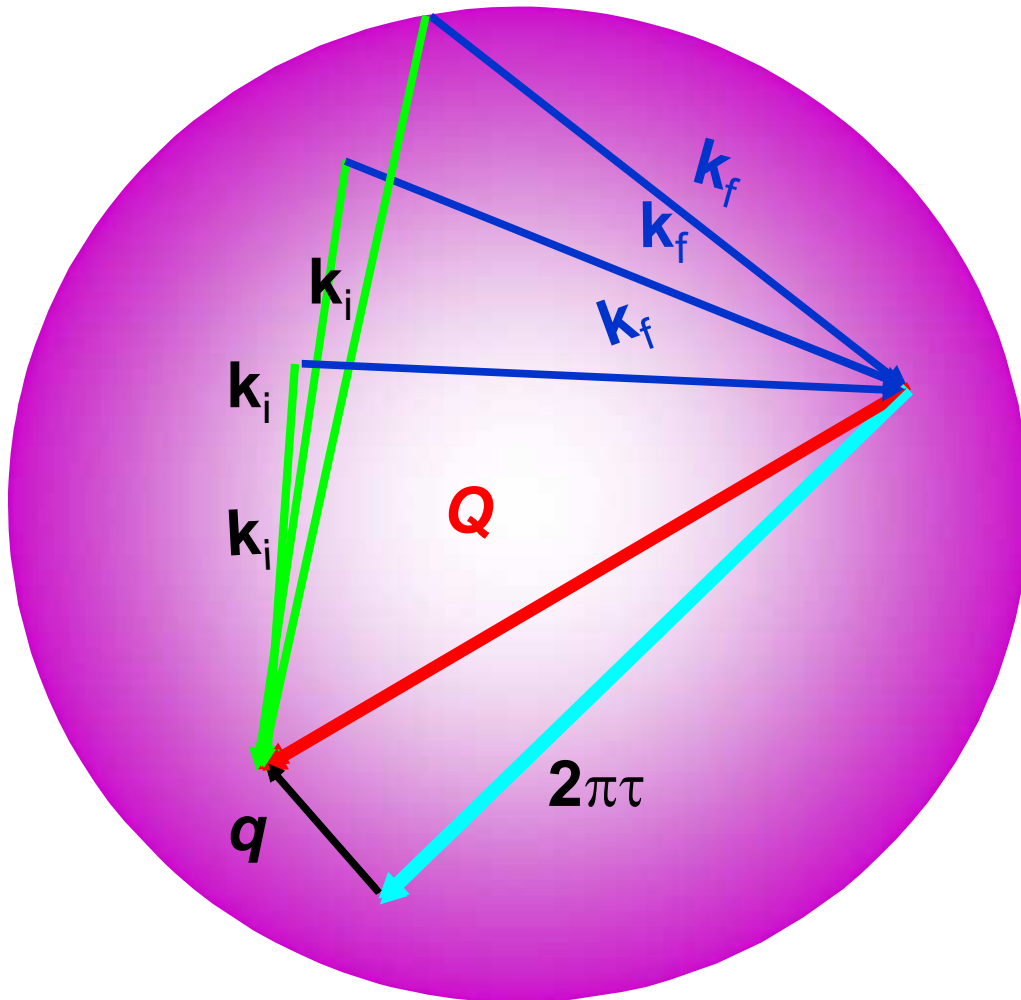


$Q = \text{const}$
 $E_f = \text{const}$

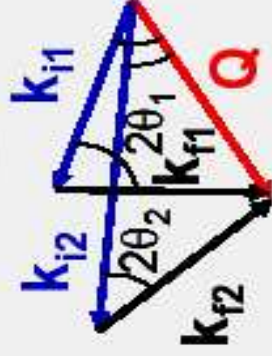
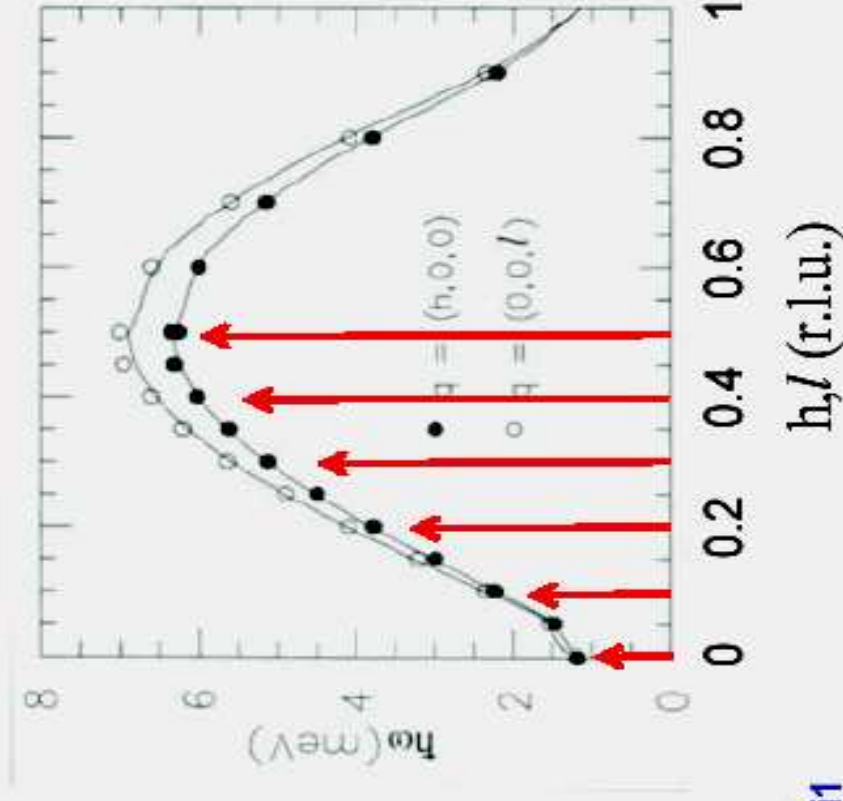
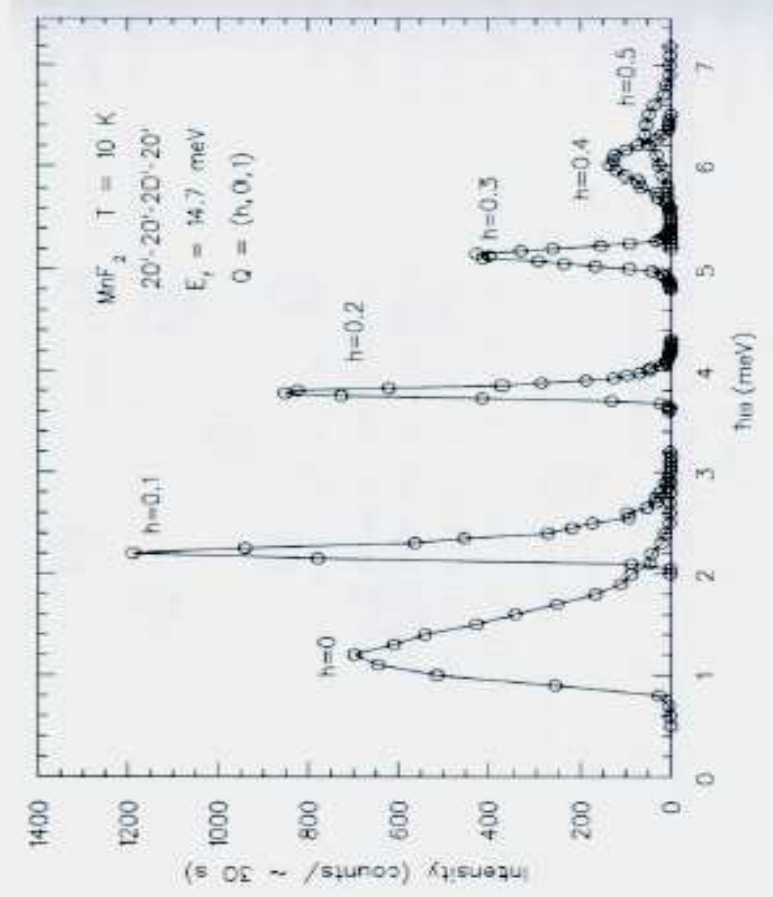


Three axes spectroscopy

$$\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f \quad \hbar\omega = E_i - E_f$$



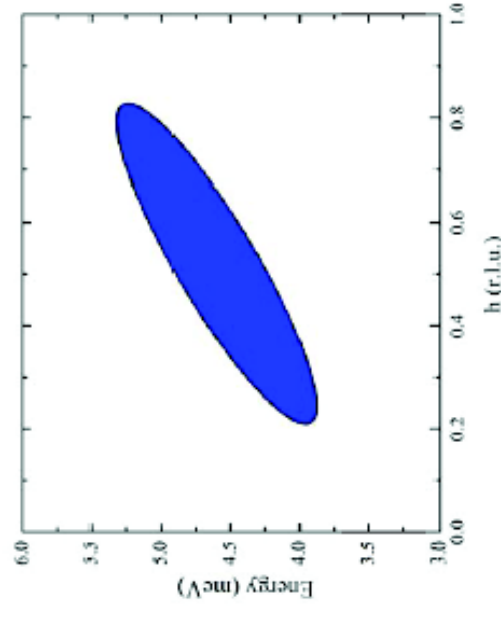
Constant-Q scan – concept developed by Brockhouse



The resolution of the TAS is dependent on:

1. Monochromator/analyzer d-spacing
2. Monochromator/analyzer mosaic spreads
3. Sample mosaic spread
4. Collimations (S-M; M-S; S-A; A-D)
5. Distances (not in simplest approximation)

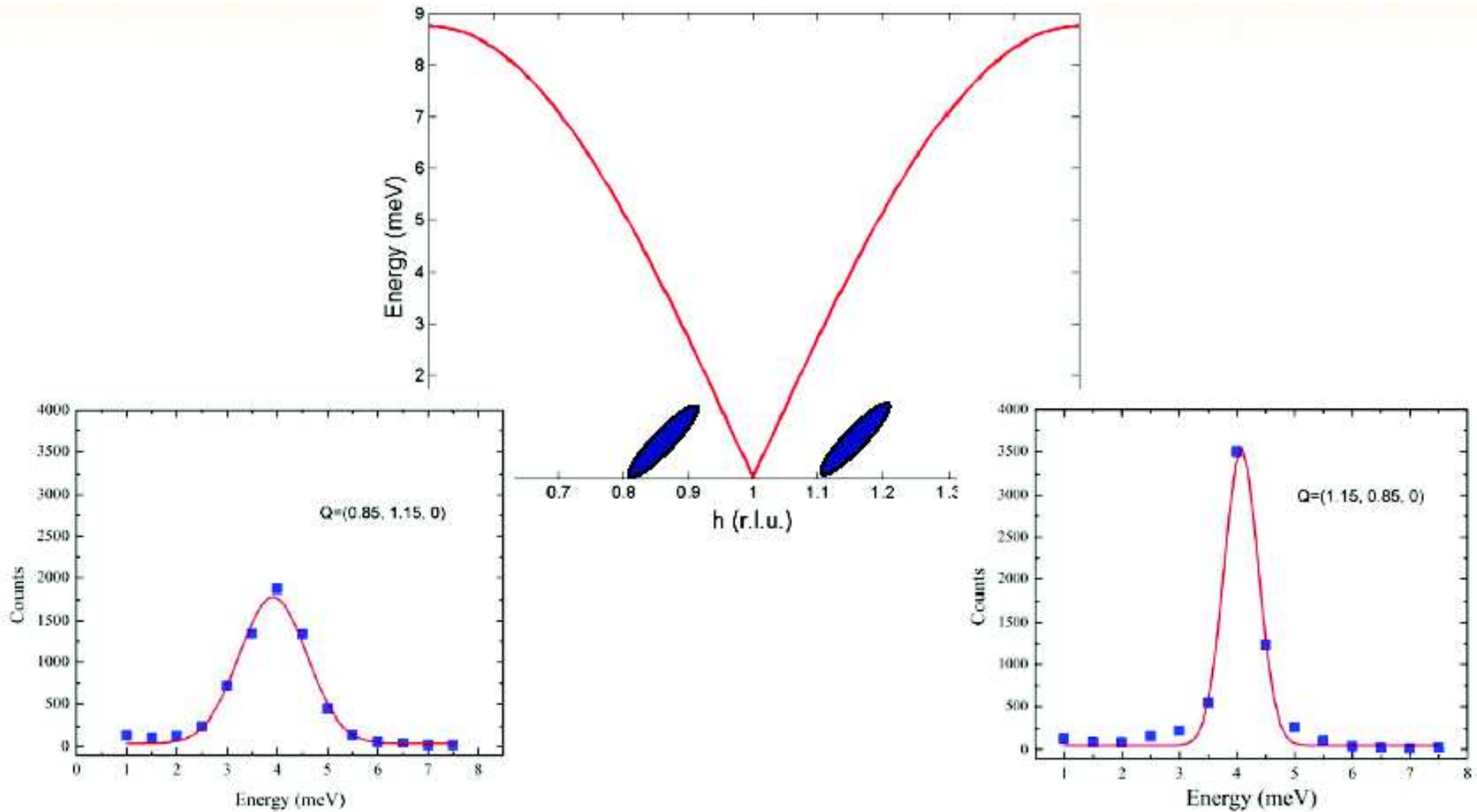
Shape: cigar-like ellipsoid



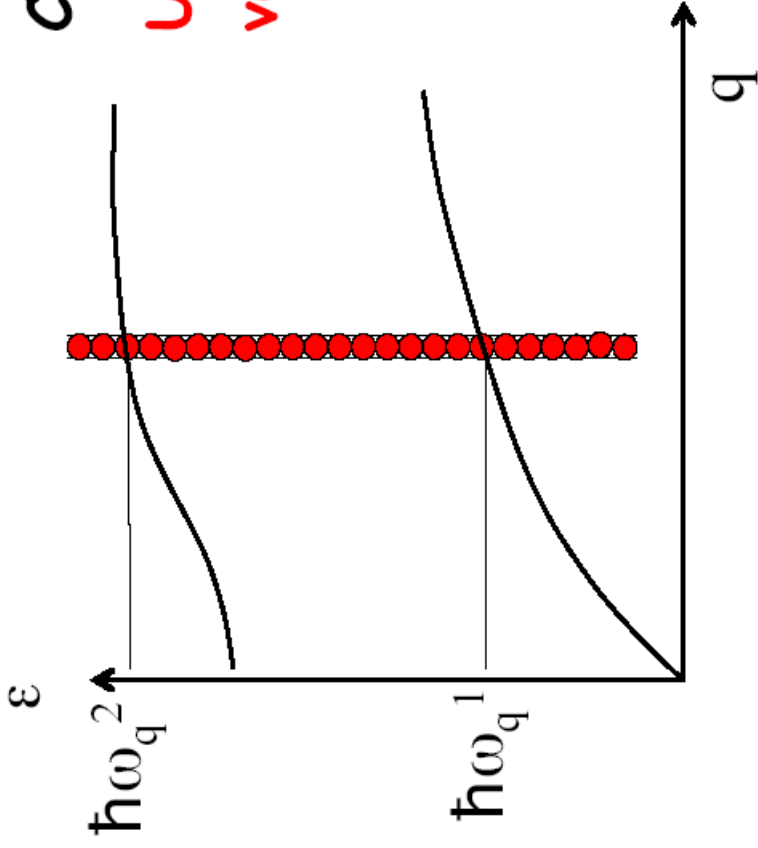
What we measure:

$$I(\vec{Q}_0, \omega_0) \propto \iint R(\vec{Q} - \vec{Q}_0, \omega - \omega_0) S(\vec{Q}, \omega) d\vec{Q} d\omega$$

Влияние разрешения на результаты эксперимента...

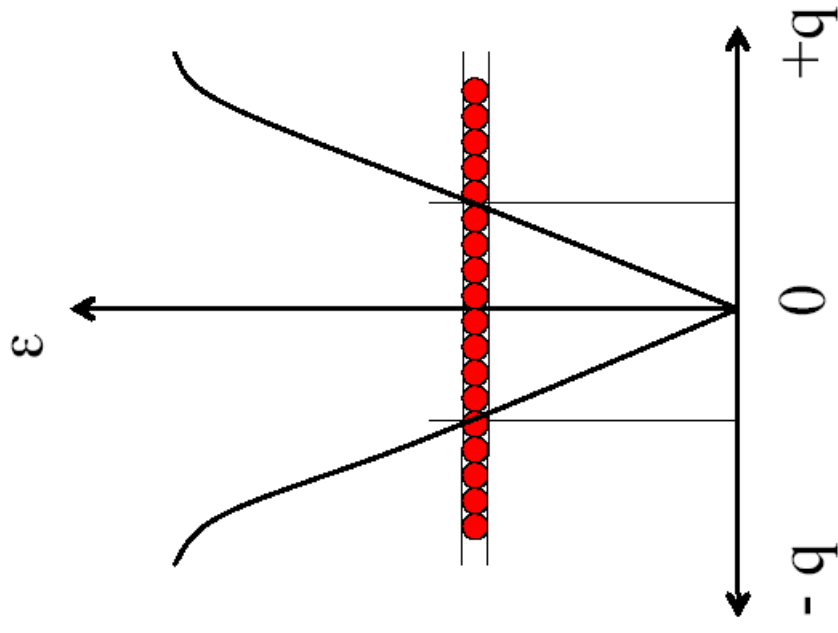


Constant Q and Constant ϵ Scans



Constant Q scan

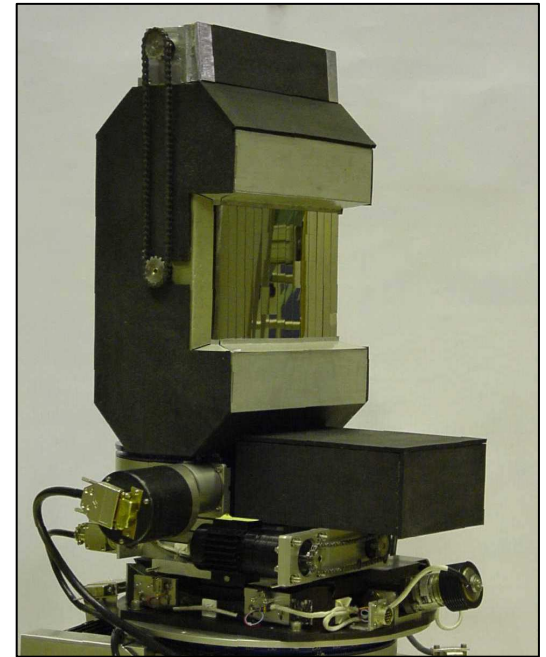
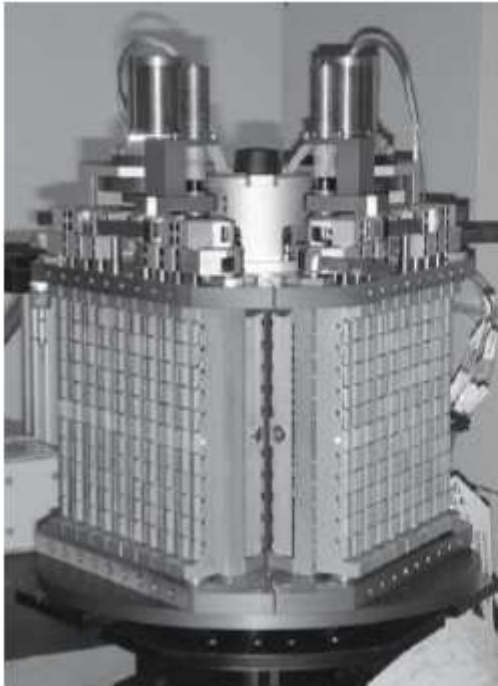
Used to measure slowly varying dispersion relations.



Constant ϵ scan

Used to measure steep Dispersion relations.

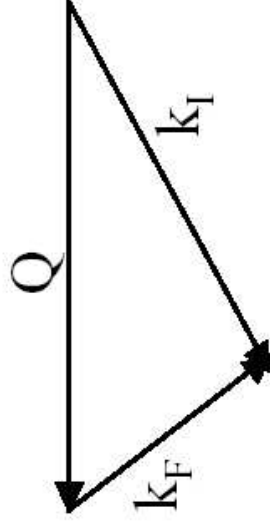
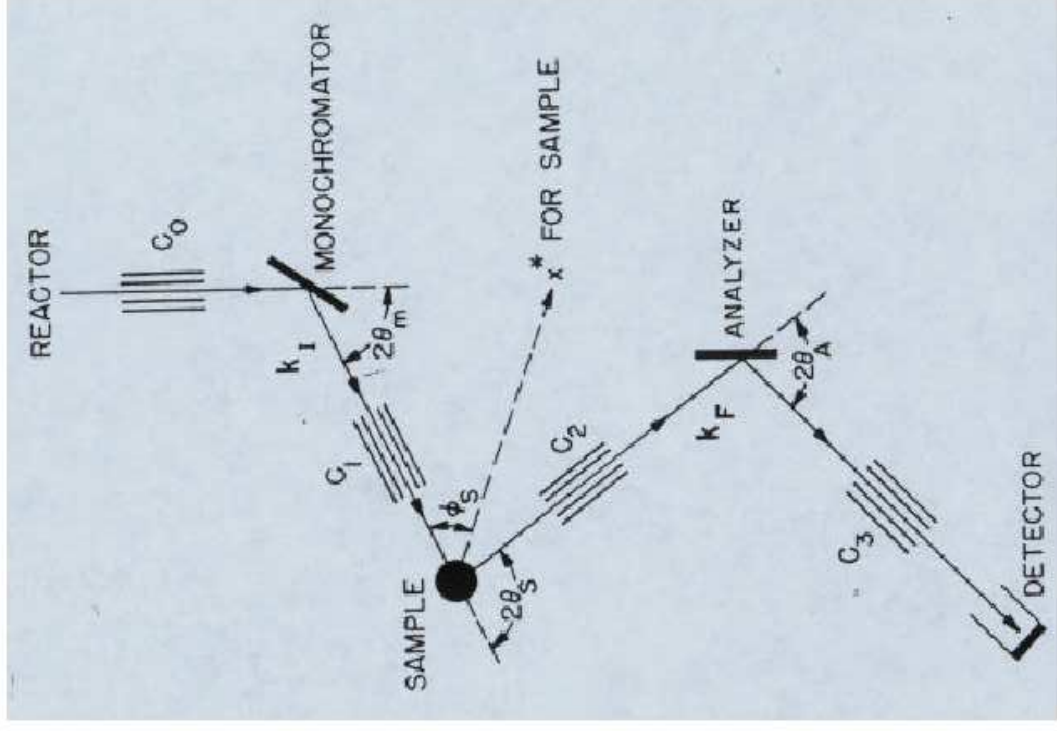
Сменные фокусирующие монокроматоры и анализаторы



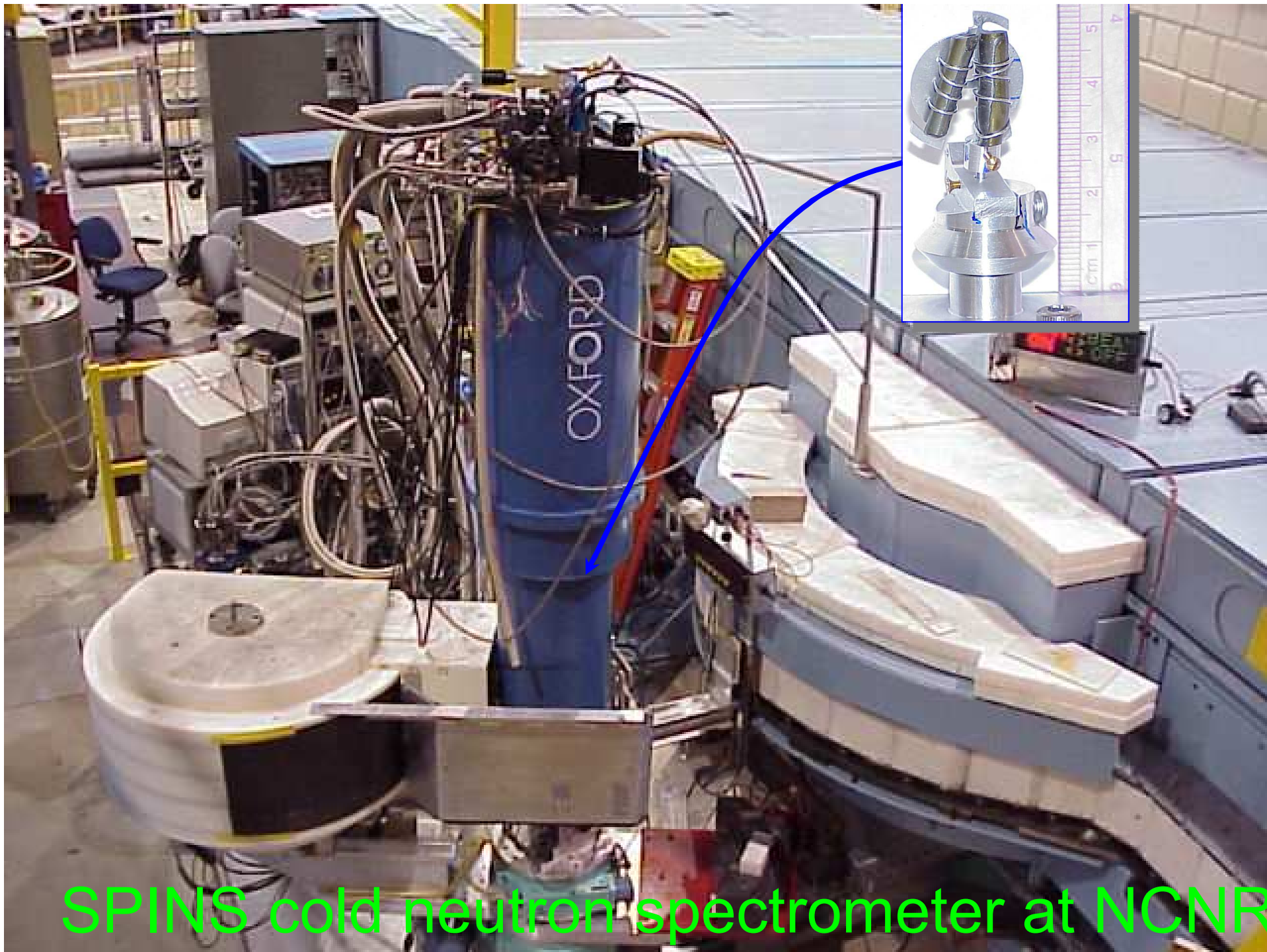
Наиболее распространенные – Cu (111), PG(002), Si(111)

Для работы с поляризованными нейтронами
– Heusler alloy (Cu₂MnAl (111)), $d=3.437\text{\AA}$

The Workhorse of Inelastic Scattering Instrumentation at Reactors Is the Three-axis Spectrometer



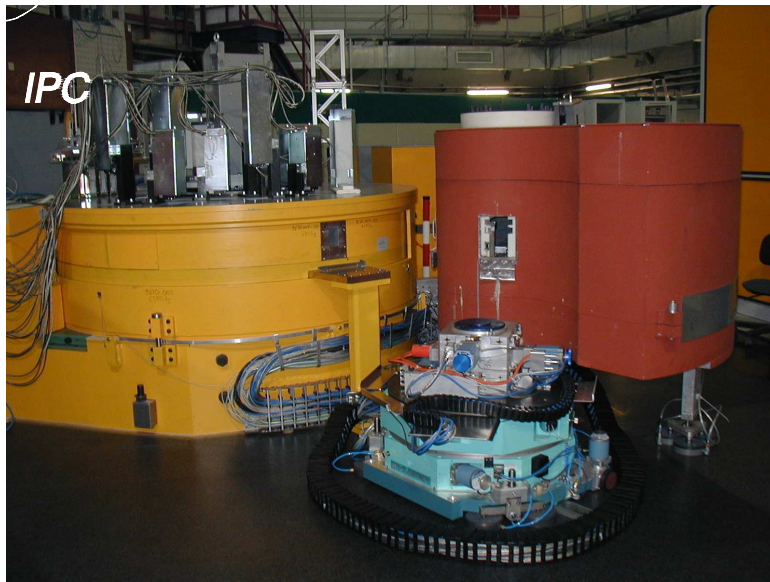
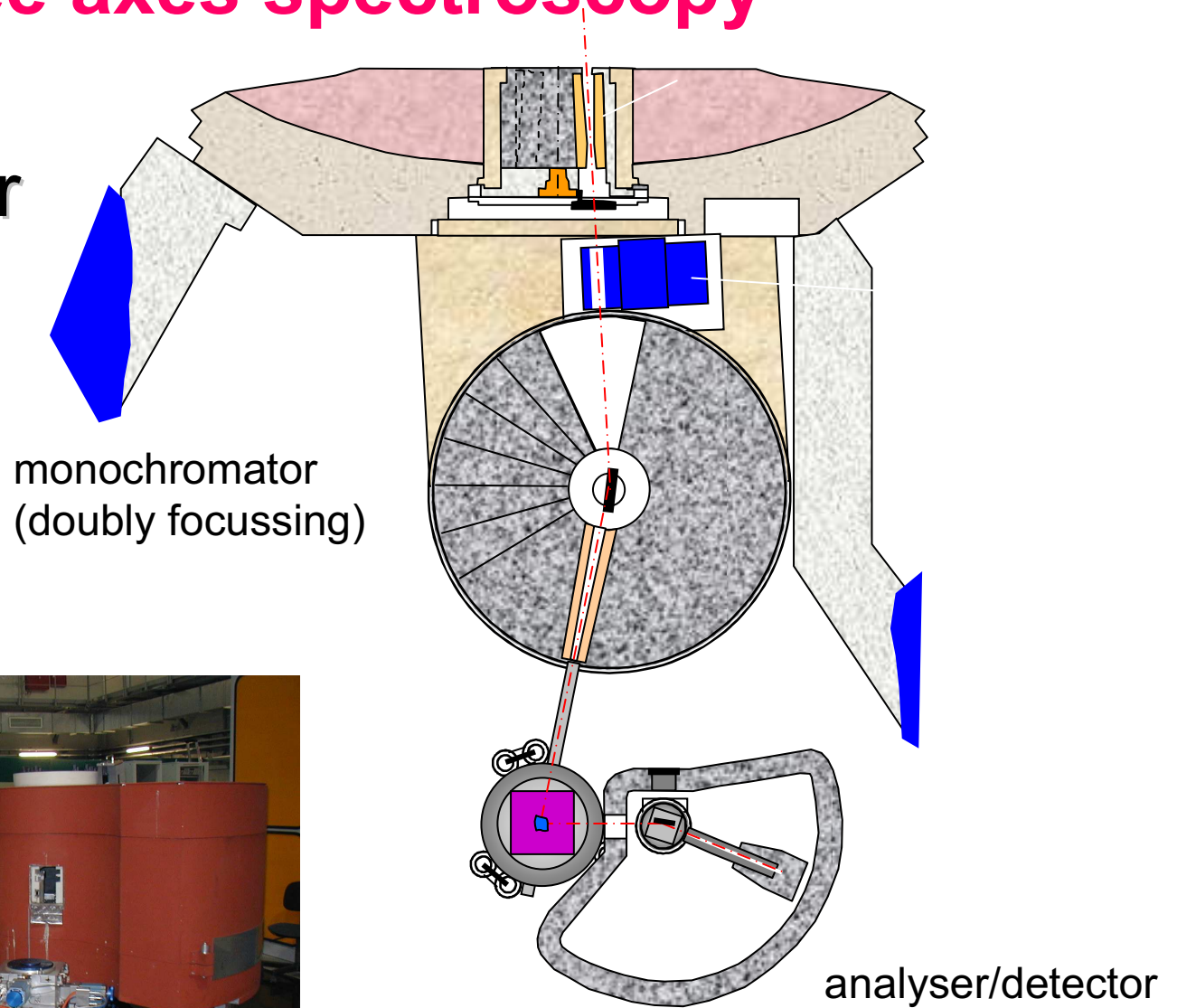
“scattering triangle”



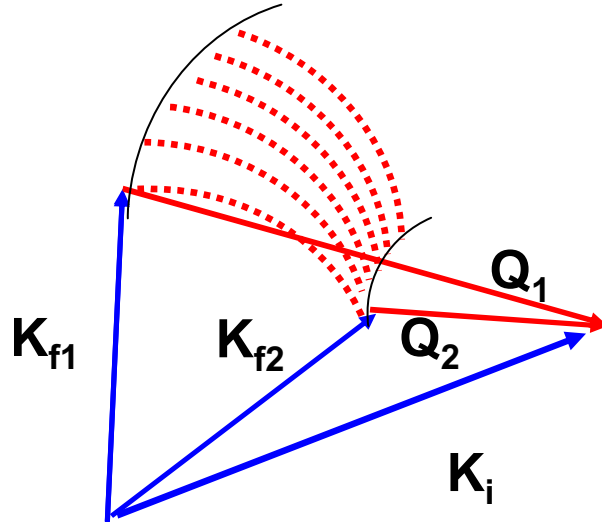
SPINS cold neutron spectrometer at NCNR

Three axes spectroscopy

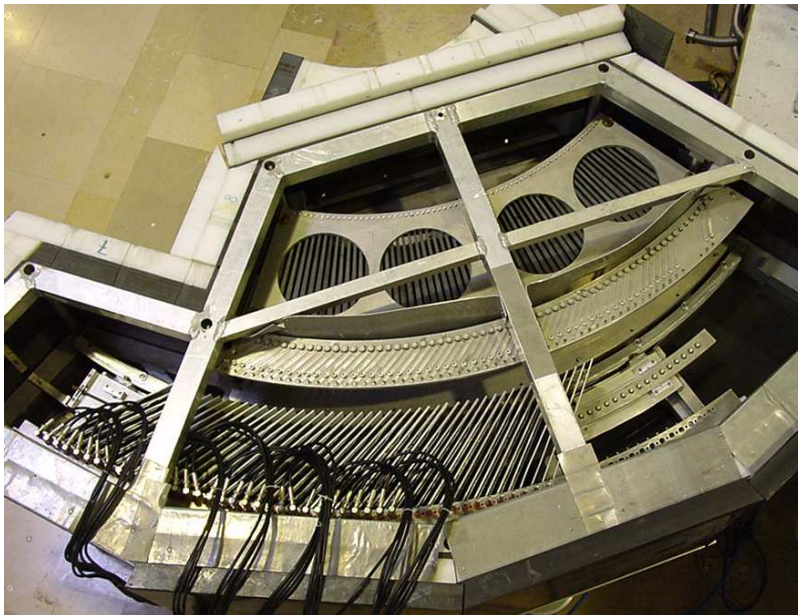
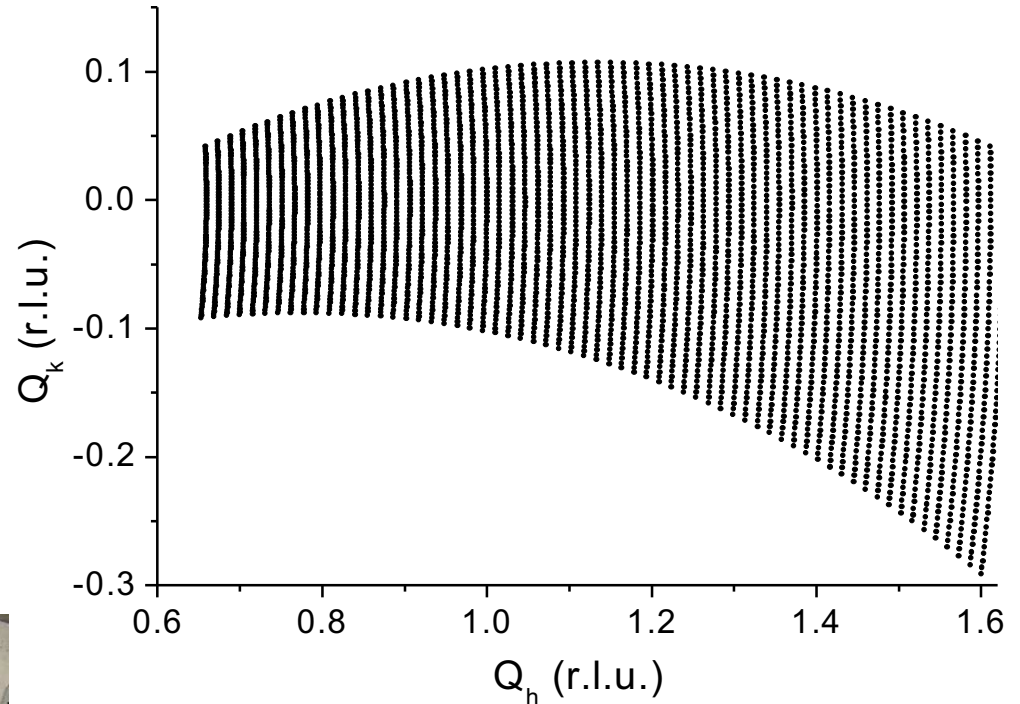
Three axes
spectrometer
PUMA
at FRM-II



Перспективы совершенствования...



Вторичный спектрометр: 64 анализатора и детектора, шаг 1 градус
 $E_f = \text{Const} = 31 \text{ meV}$ $\delta E \sim 1.2 \text{ meV}$

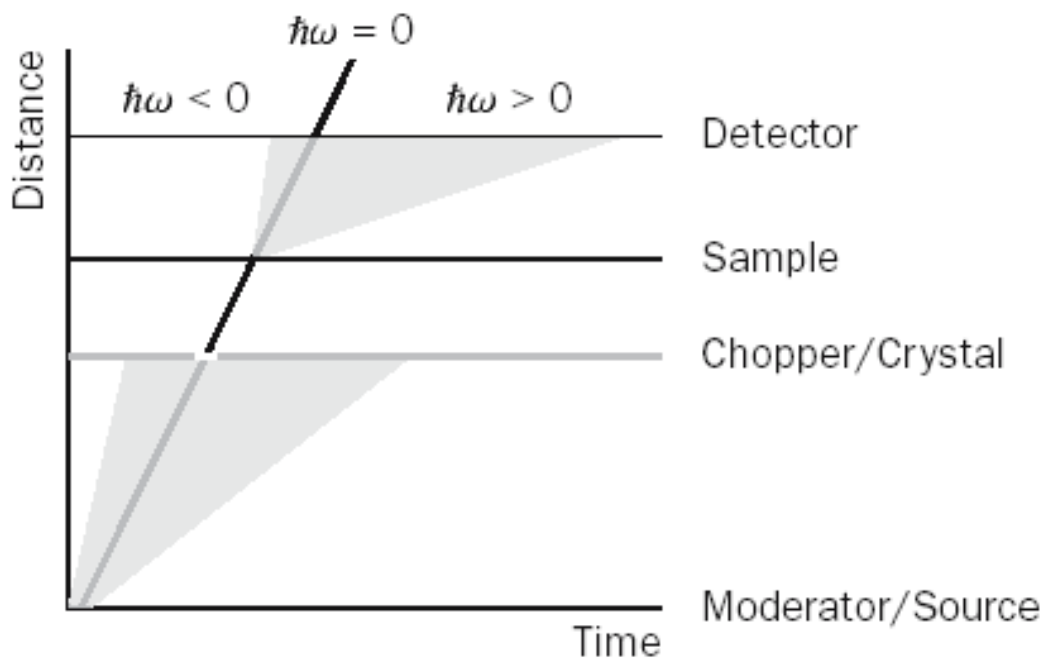


Метод сканирования:

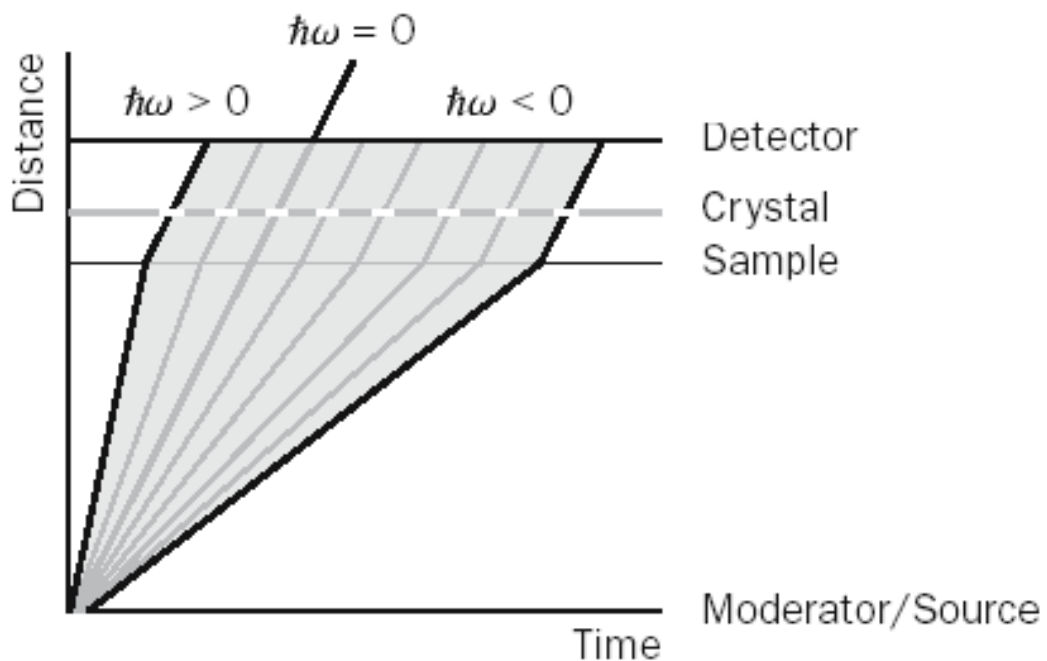
- блок анализаторов не двигается (!!)
относительно образца
- образец вращается (скан вдоль Q_k)
- 3 из 6 углов трехосного спектрометра
заблокированы

Спектрометры по времени пролета

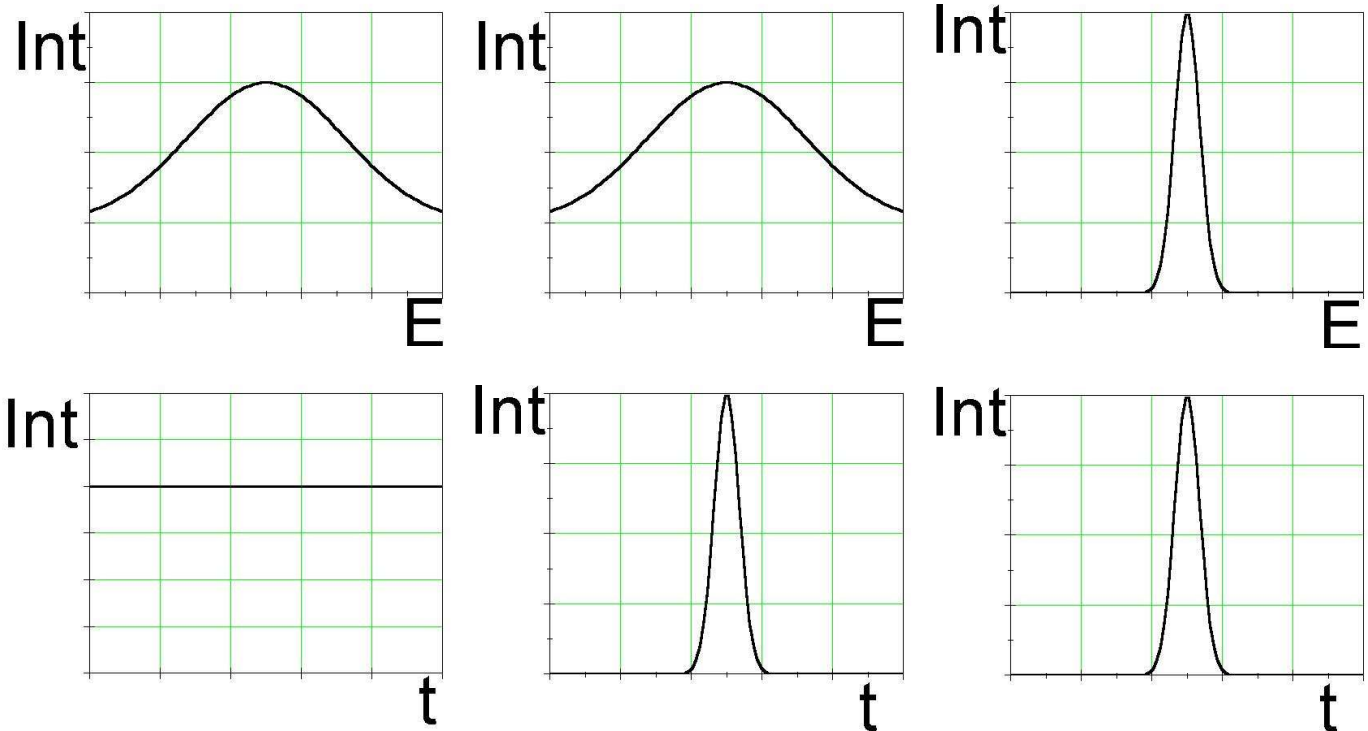
Принципы спектроскопии по времени пролета



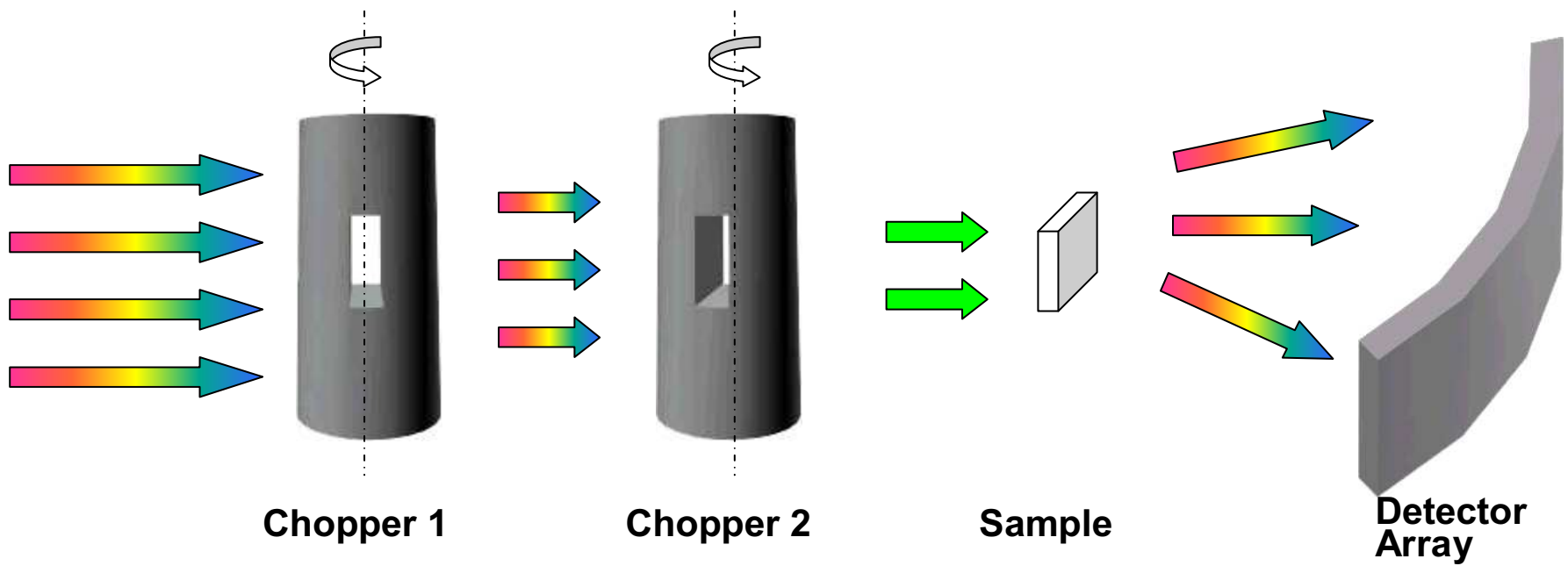
Прямая геометрия



Обратная геометрия

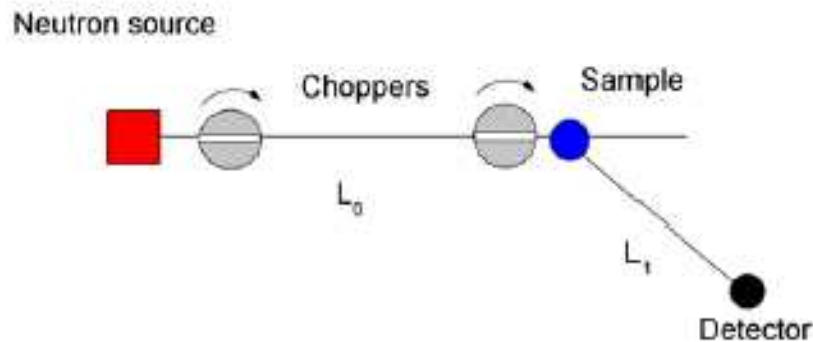


**FOR
ROTORS**



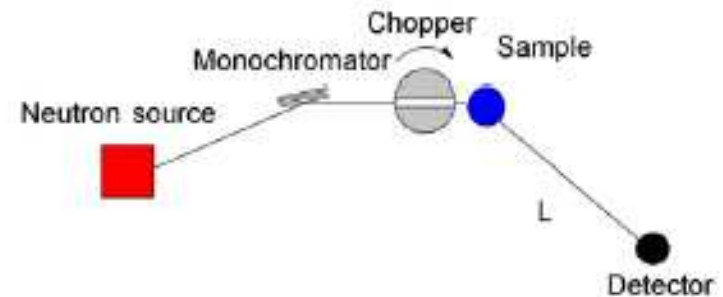
Основные типы спектрометров по времени пролета

Spectrometers of direct geometry



TOF-TOF

Two synchronised choppers define the incident neutron energy - E_i
Energy of scattered neutrons - E_f
defined by arrival time in counter

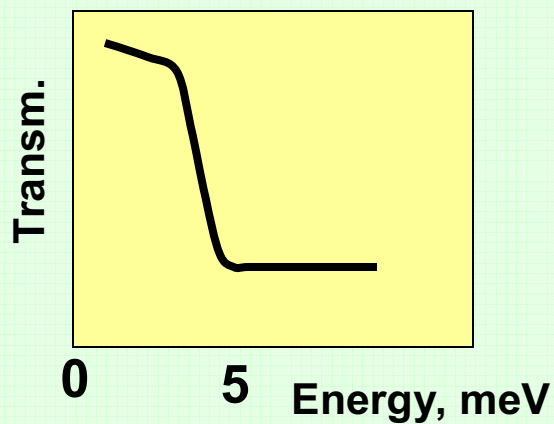
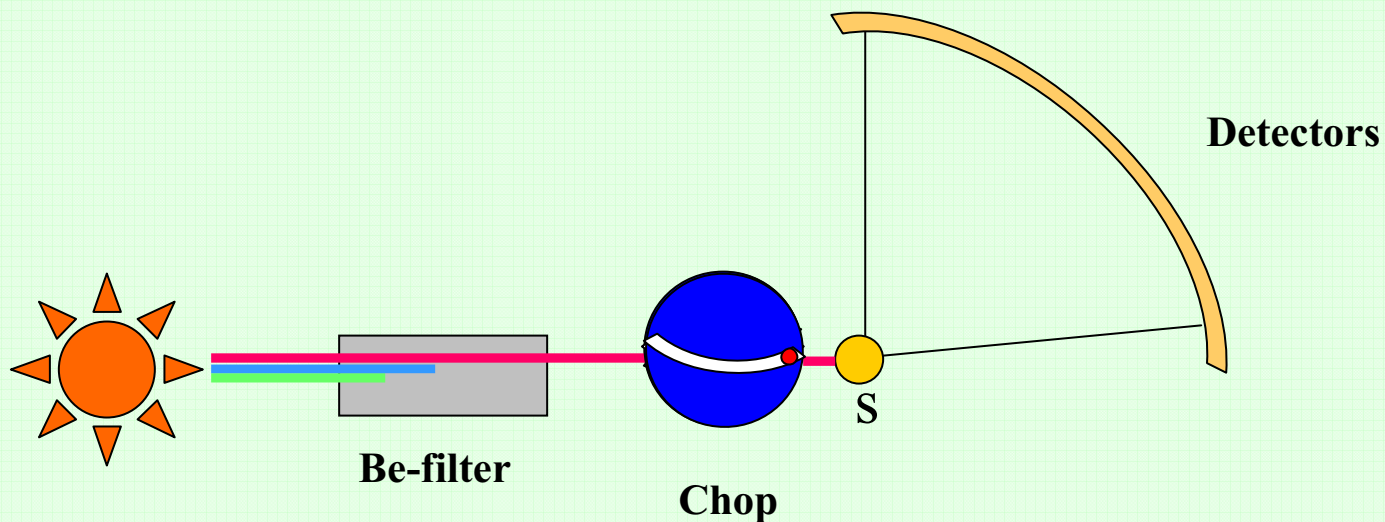


Crystal -TOF

Crystal monochromator defines the incident neutron energy - E_i
Energy of scattered neutrons - E_f
defined by arrival time in counter

Комбинированный тип спектрометра по времени пролета

Курчатовский Институт, ИР-8, 70...80-е годы

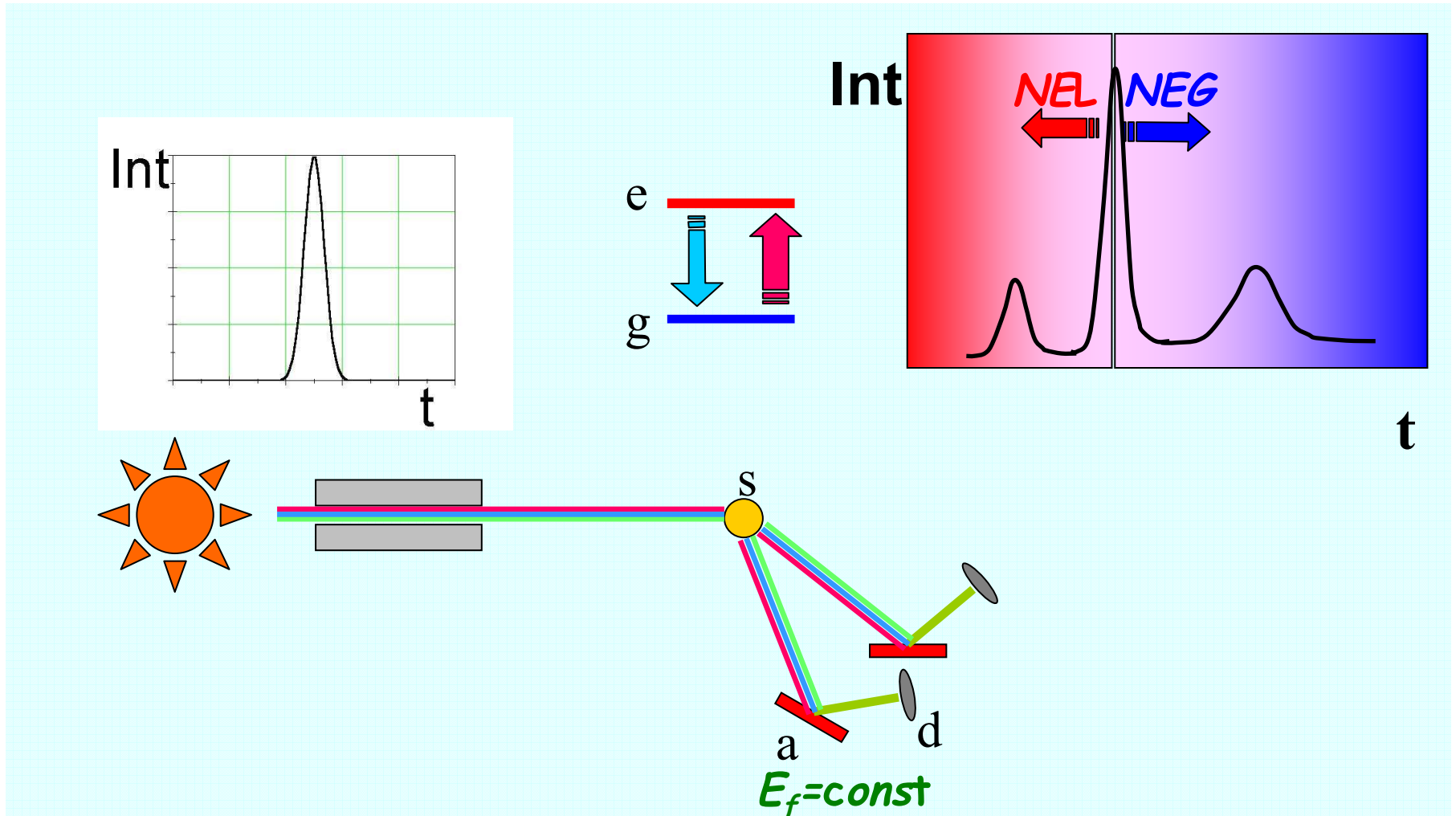


Современные конструкции:
-кристалл-монокроматор;
-двумерный пиксельный
детектор
(работа с монокристаллами)

Спектрометр обратной геометрии

Техника времени пролета на импульсном нейтронном источнике

КДСОГ - ИБР-2, ОИЯИ. «Геркулес» - Факел, Курчатовский Институт



На таких приборах может быть получено достаточно высокое разрешение и светосила за счет компактной детектирующей системы

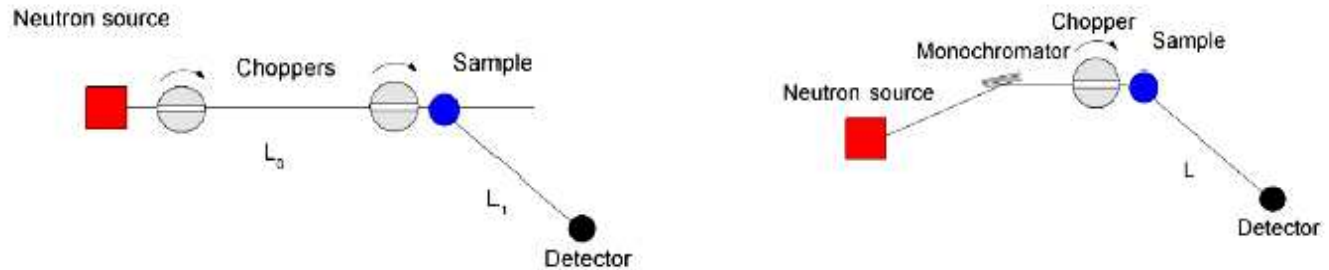
Факторы, определяющие разрешение TOF спектрометров

Прямая геометрия

-Расстояние между прерывателями (TOF-TOF) или мозаичность кристалла-монокроматора (TOF-Cryst).

-Длительность «вспышки» на прерывателе (частота, щели) и расстояние до образца.

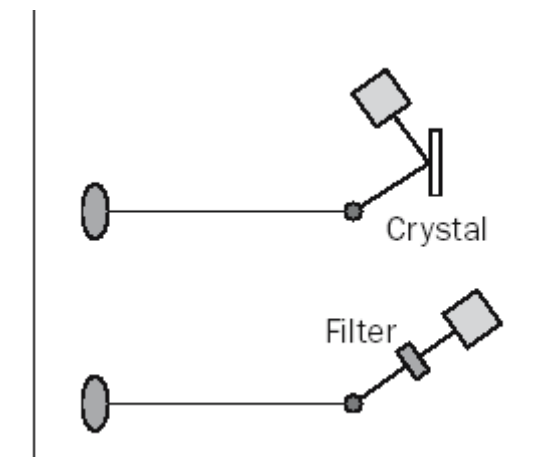
-Масштаб пролетной базы вторичного спектрометра и ее неопределенность (размеры образца, элемента детектора).



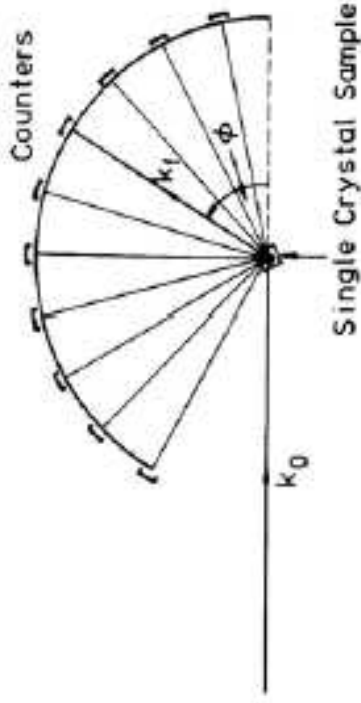
Обратная геометрия

-Соотношение между длительностью вспышки источника и первой пролетной базой.

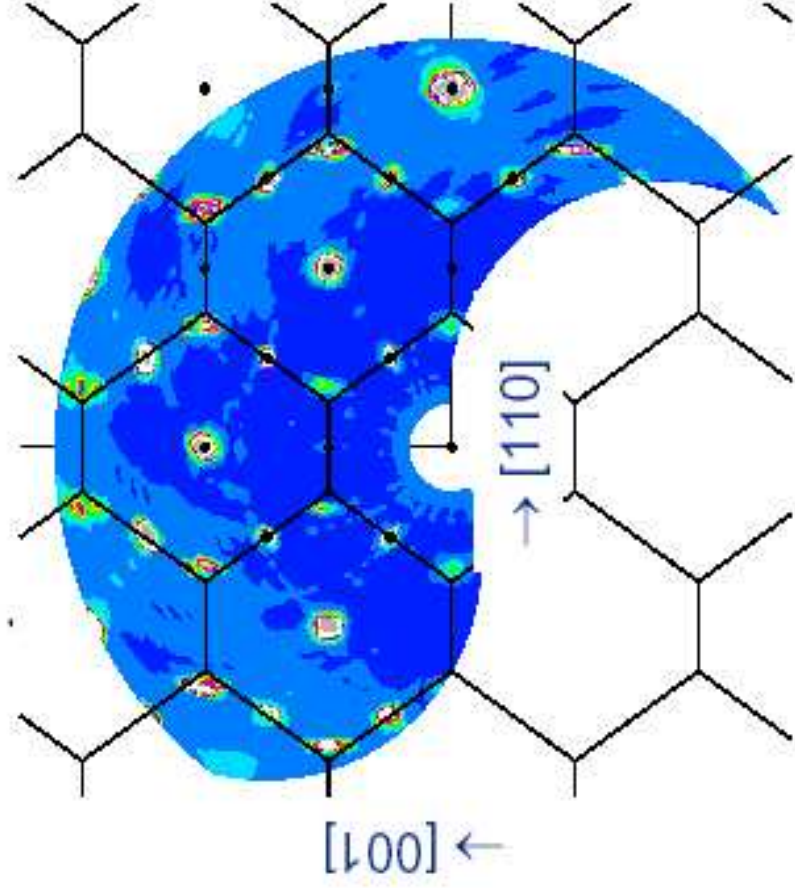
-Угловой размер системы детектор-образец по отношению к мозаичности анализатора.



Direct Geometry Multidetector Spectrometer - Single Crystals



Large regions of energy-momentum space are explored by step-wise rotating the crystal for the TOF measurements

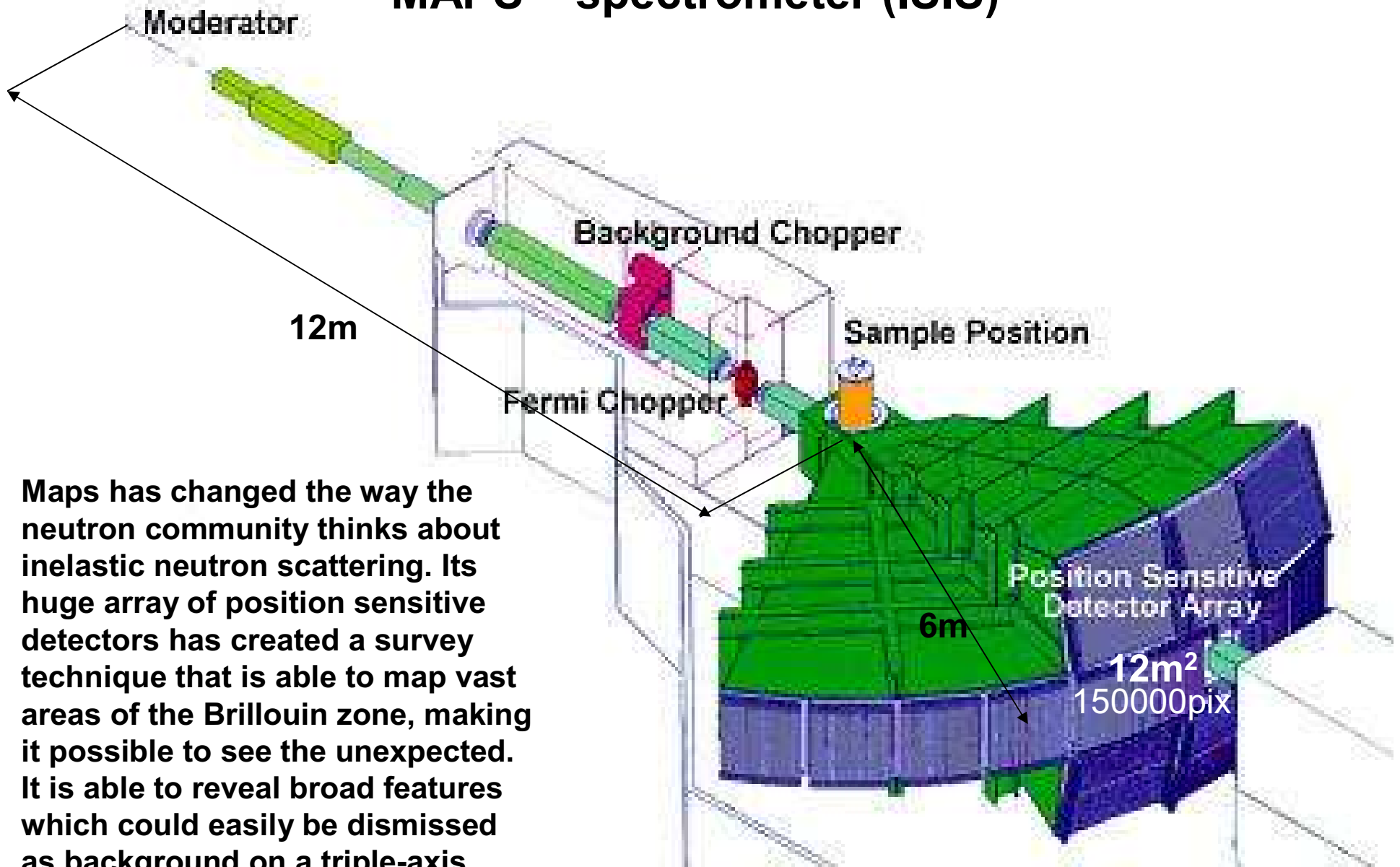


Elastic scattering cut, $\Delta E \approx 0$

TOF spectrometer DNS, FZ Jülich
 α -Cu_{1.85}Se single crystal

Intensity contours in (1-10) plane

MAPS – spectrometer (ISIS)



Maps has changed the way the neutron community thinks about inelastic neutron scattering. Its huge array of position sensitive detectors has created a survey technique that is able to map vast areas of the Brillouin zone, making it possible to see the unexpected. It is able to reveal broad features which could easily be dismissed as background on a triple-axis machine.

Специфические методические возможности

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \propto \frac{k_f}{k_0} S(\vec{Q}, \omega) \quad h\omega = 2.07 (k_i)^2 - (k_f)^2$$
$$Q = k_i - k_f$$

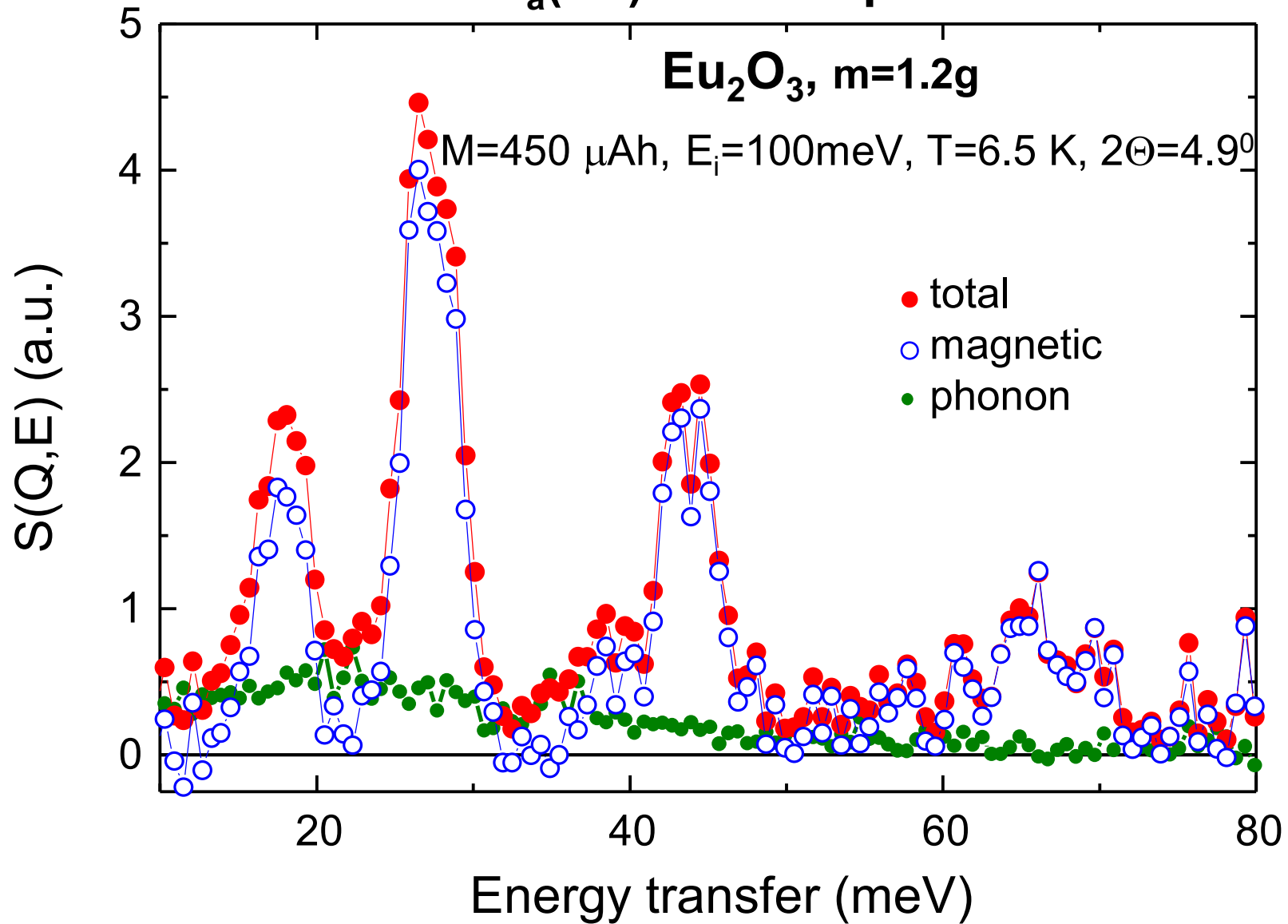
- Удобство измерений с большой передачей энергии и импульса в сочетании с высокой светосилой (2D-детекторы)
- Возможность оптимизации переданного импульса для магнитных возбуждений
- Легкость абсолютизации (в отличие от кристаллических спектрометров)

В частности:

- большая начальная энергия позволяет работать с сильно-поглощающими материалами;
- Можно количественно разделять магнитные и фононные составляющие в спектре

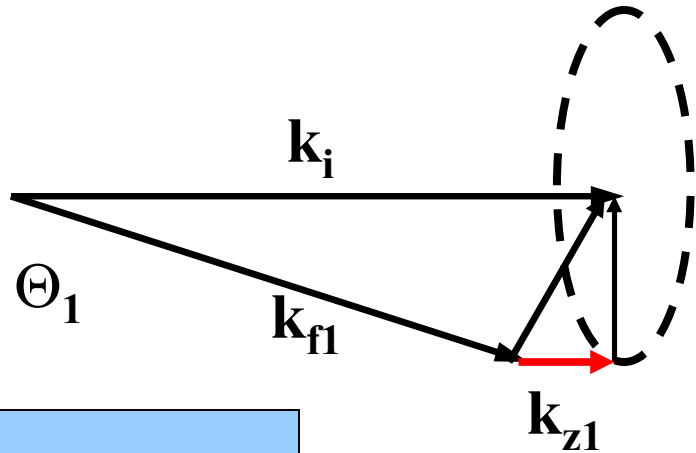
Измерения сильнопоглощающих образцов (HET, ISIS)

$\sigma_a(\text{Eu})=4500$ барн



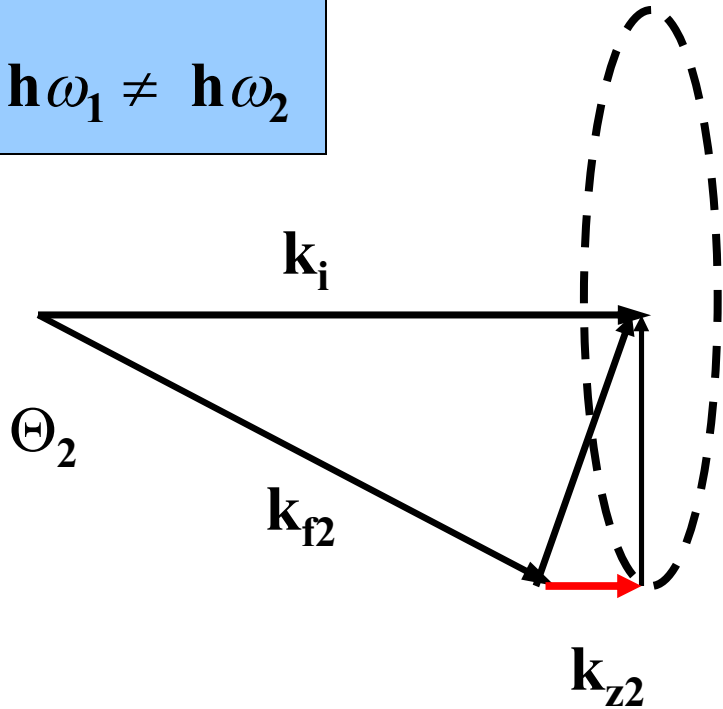
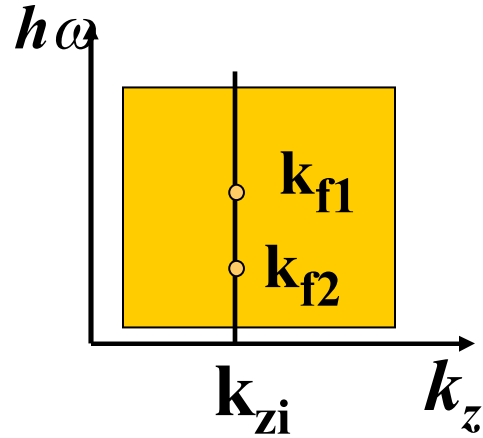
Возможность работы с монокристаллами

Спектрометр с мультипиксельной структурой детекторов (неск (>10) кв. м)



Монокристалл:
Квазиодномерная структура с осью квантования // z // k_i

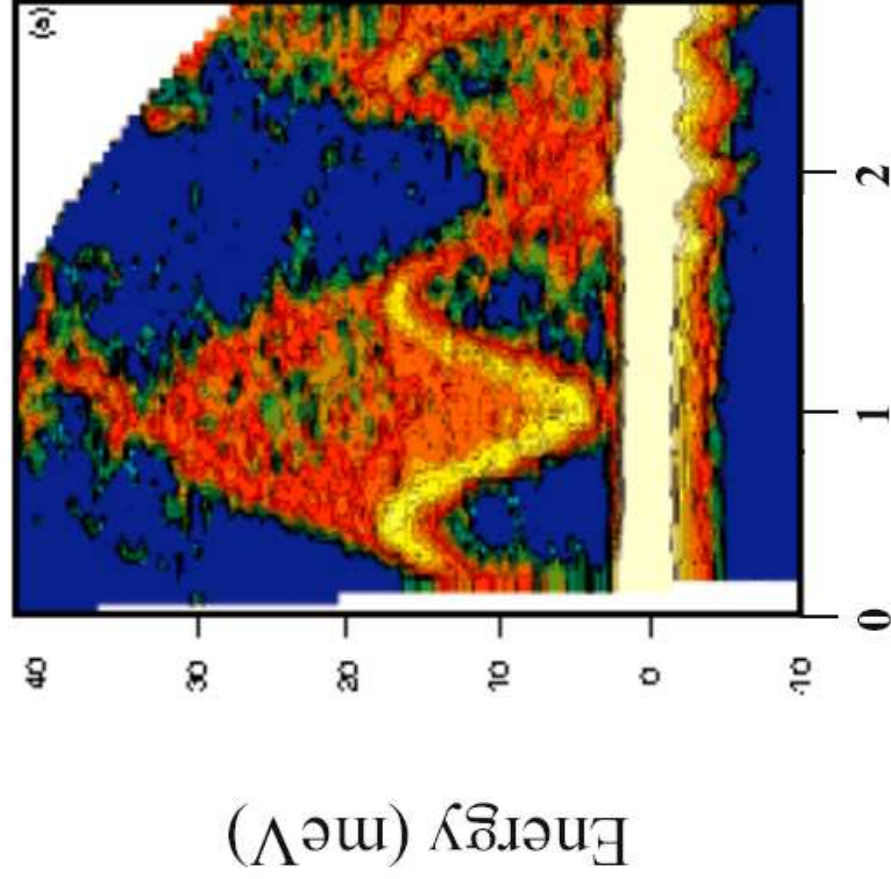
$k_{z1} = k_{z2}$
 $\hbar\omega_1 \neq \hbar\omega_2$



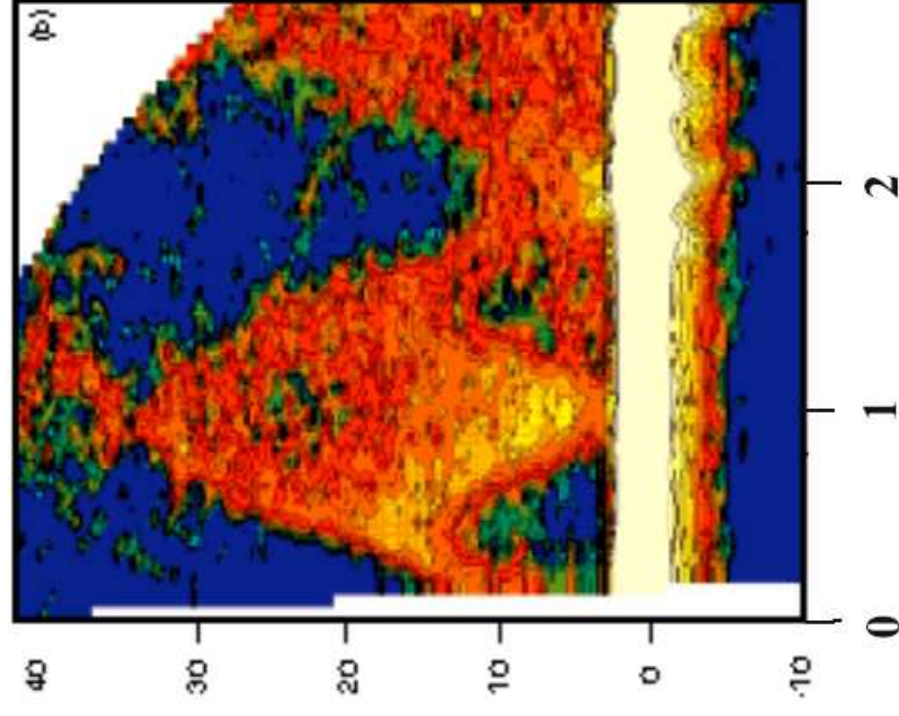
Аналогично может быть решена задача для двумерных систем

CuGeO₃ 1D Spin-Peierls Compound

10K

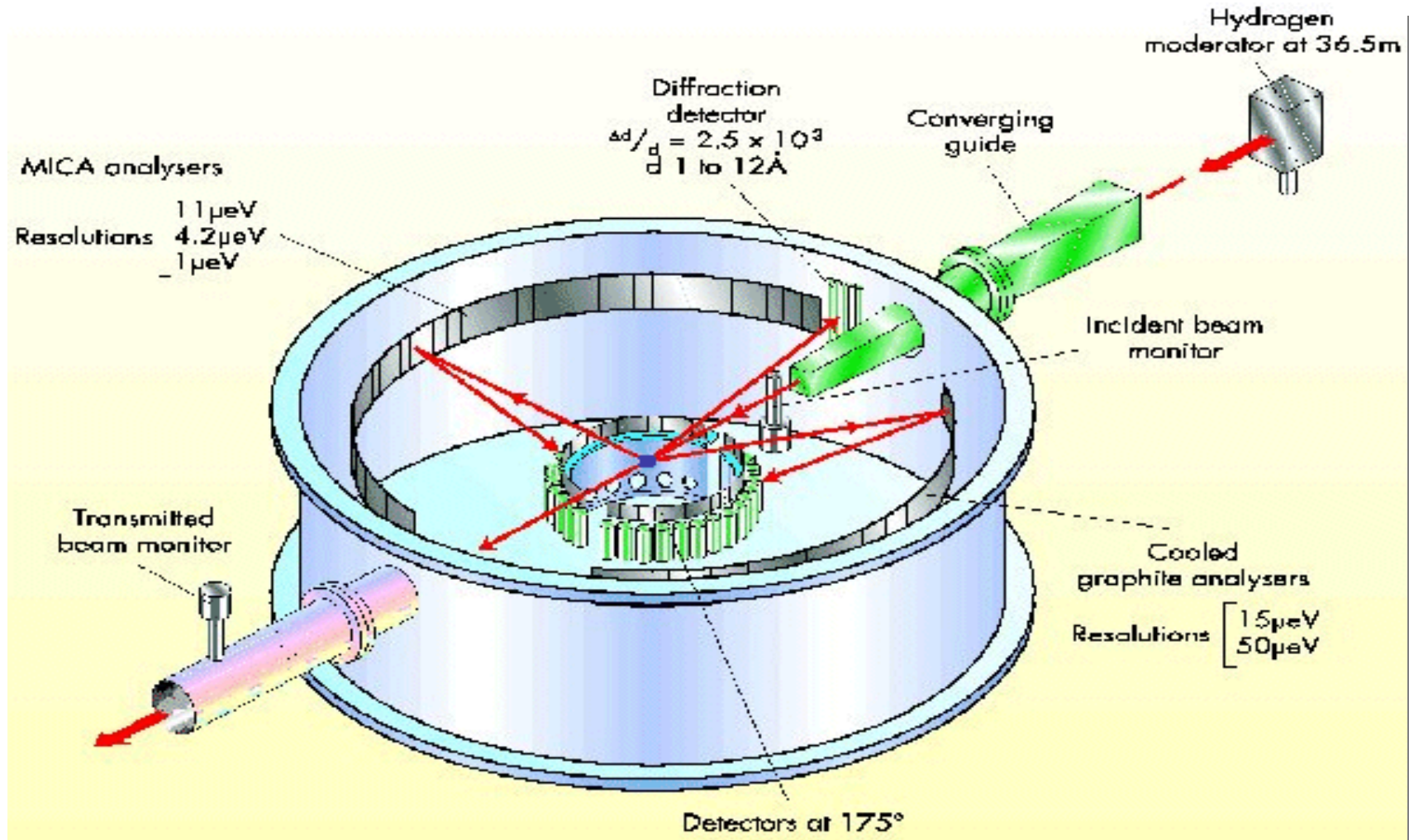


50K



M.Arai et al., Phys. Rev. Lett 77 3649 (1996)

IRIS cold neutron TOF backscattering



| Material | Plane | E [meV] | ΔE [meV] |
|--------------------|-------|-----------|------------------|
| Pyrolytic graphite | 002 | 1.828 | 0.009 |
| | 004 | 7.333 | 0.027 |
| Silicon | 111 | 2.074 | 0.0007 |

Спин-эхо нейтронный спектрометр

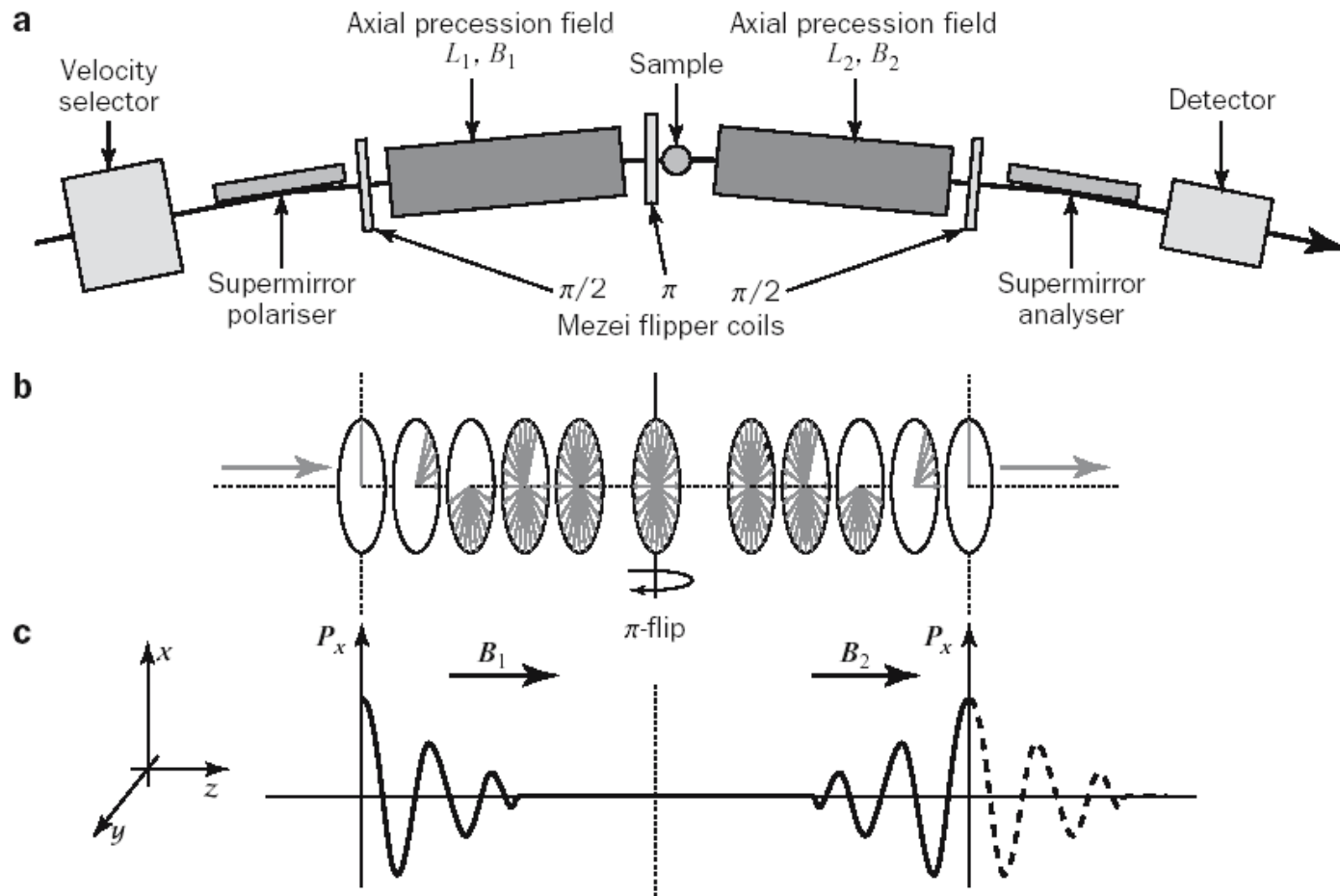


Figure 3 - (a) The layout of a generic neutron spin echo spectrometer showing the principal components and (b) a schematic representation of the dephasing of the precessing neutron spins along the first arm of the spectrometer, followed by a π -spin flip and subsequent rephasing along the second arm, with (c) the corresponding x -component of the net neutron polarization.

Техника спин-эхо

Existing Spectrometers

- [IN11 \(Institut Laue-Langevin, ILL, Grenoble, France\)](#)
- [IN15 \(Institut Laue-Langevin, ILL, Grenoble, France\)](#)
- J-NSE ([Juelich Centre for Neutron Science JCNS](#), Juelich, Germany, hosted by [FRMII](#), Munich (Garching), Germany)
- NG5-NSE ([NIST CNRF](#), Gaithersburg, USA)
- V5/SPAN ([Hahn-Meitner Institut](#), Berlin, Germany)
- C2-2 ([ISSP](#), Tokai, Japan)

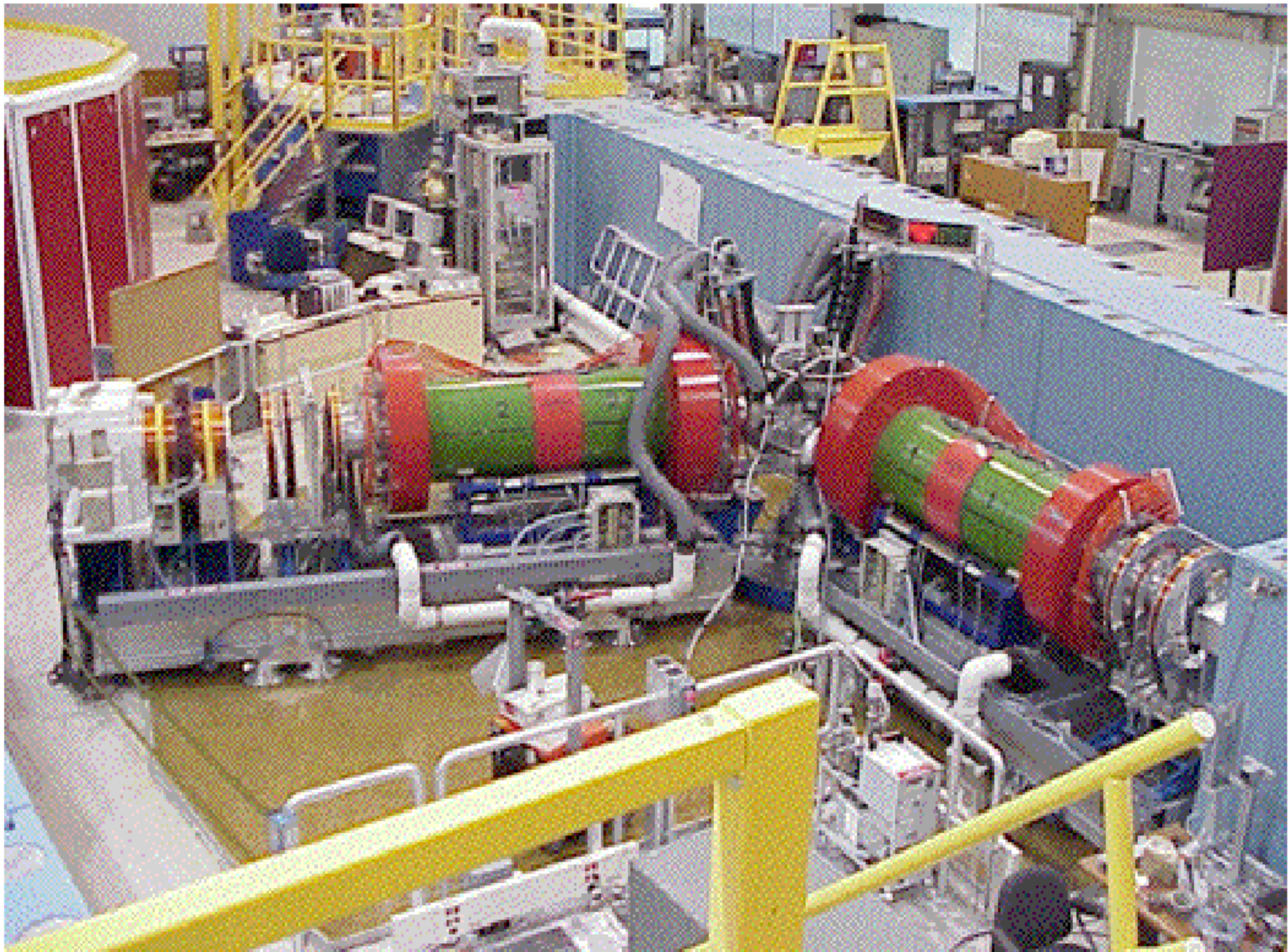
Относительное разрешение прибора может составлять до 10^{-5} !!!

При этом, в НСЭ разорвана жесткая связь между степенью монохроматизации и разрешением прибора!!! Это основная специфика, достигаемая при вовлечении спина в спектроскопию

Особенности техники спин-эхо:

- 11) Реально трудно изменить направление поля, так как неизбежна область с нулевым полем, а это означает деполяризацию пучка и потерю эффекта. Поэтому, обычно используется горизонтальное поле, создаваемое соленоидом, а направление поляризации изменяется за счет $\Pi/2$ и Π флипперов в пучке.
- 22) Широкий динамически диапазон измерений, до 100- 1000 может достигать отношение t_{max}/t_{min} , т.е. эта техника по разрешению перекрывается с не только с backscattering, но и с обычным TOF достигая величин порядка 100 мкэВ. Возникает вопрос, какой тип оборудования выбирать для конкретной задачи. Некоторое соображение на этот счет состоит в следующем: различие между этими методиками в том, что НСЭ работает в реальном времени, а традиционная спектроскопия – в энергетическом пространстве. Это – ключ к логике выбора. Действительно: если, например, 95% рассеяния в образце – упругое, и лишь 5% - неупругое, в НСЭ эксперименте это проявится как 5% модуляция сильного сигнала (порядка 95 % от полной интенсивности. А в обычном TOF спектрометре хорошо определенный пик с интенсивностью 1/20 от упругой линии наблюдается без проблем! Если же рассеяние в основном квазиупругое, то будет обнаружено существенная температурная зависимость.
- 33) Нехороши для спин-эхо техники и некогерентные рассеиватели.

Спин-эхо спектрометр в NIST



Выбор спектрометра для проведения исследования

Основные направления исследований на времяпролетных спектрометрах

- 1) Физика СКЭС (в основном магнитные возбуждения), включая:
 - тяжелые фермионы (необычная сверхпроводимость),
 - ВТСП, ГМС (измерения в магнитных полях),
 - магнетизм малых магнитных моментов,
 - Кондо-изоляторы (системы с переходом металл-диэлектрик и магнетик-немагнетик)

- 2) Динамика решетки сложных многокомпонентных систем (анализ энергий и интенсивностей в большом числе зон Бриллюэна)

- 3) Явления, требующие высокого разрешения как по энергии, так и по импульсу:
 - модельные магнитные материалы;
 - низкоразмерный магнетизм (органические молекулы с магнитными цепочками)

- 4) Возбуждения в разупорядоченных и других некристаллических материалах

- 5) Водород в сплавах, интерметаллидах, различных композитах и

Основные задачи исследований на трехосных кристаллических спектрометрах

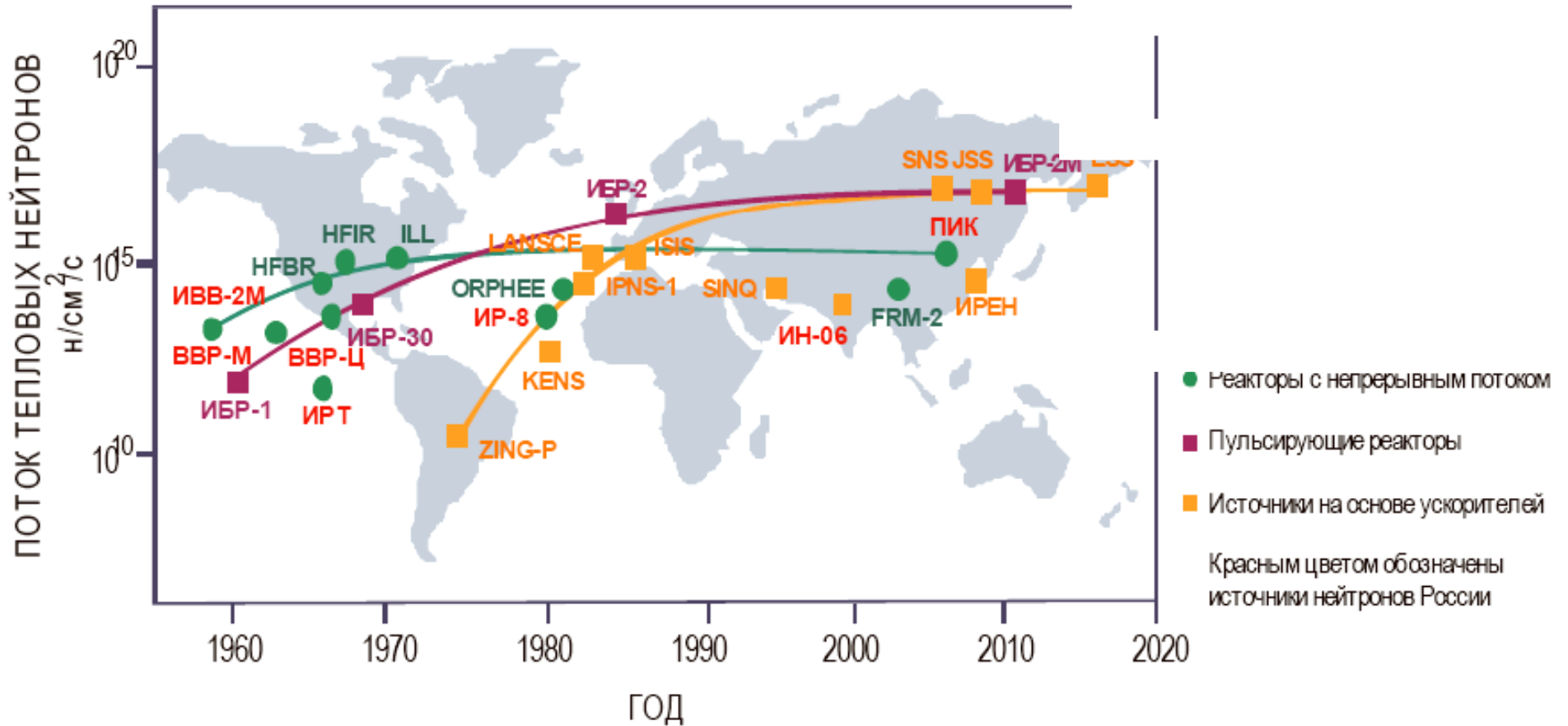
Детальные исследования дисперсии элементарных возбуждений (фононы, магнитные возбуждения: спиновые волны, локальные магнитные моменты) для понимания природы необычных физических свойств и движущих сил фазовых переходов и других превращений, связанных с изменением взаимодействий, в твердых телах.

Особенности электрон-фононного, магнито-вибрационного, электрон-электронного взаимодействий.

Нейтронный эксперимент. Источники нейтронов.

Два типа интенсивных нейтронных источников:

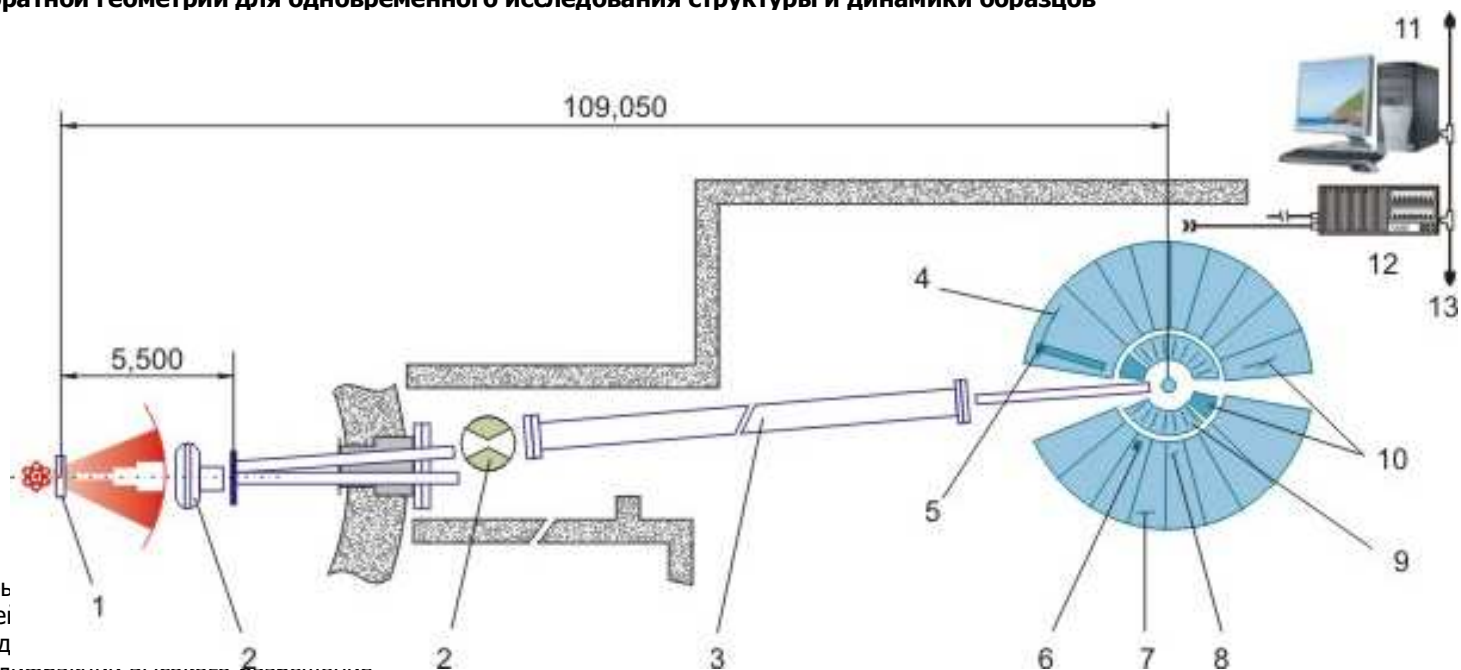
- 1) Реакторы основанные на делении урана или плутония.
- 2) Испарительные источники (на протонных пучках)



Приборы ОИЯИ (НЕРА, ДИН)

Спектрометр обратной геометрии HEPA

Спектрометр обратной геометрии для одновременного исследования структуры и динамики образцов

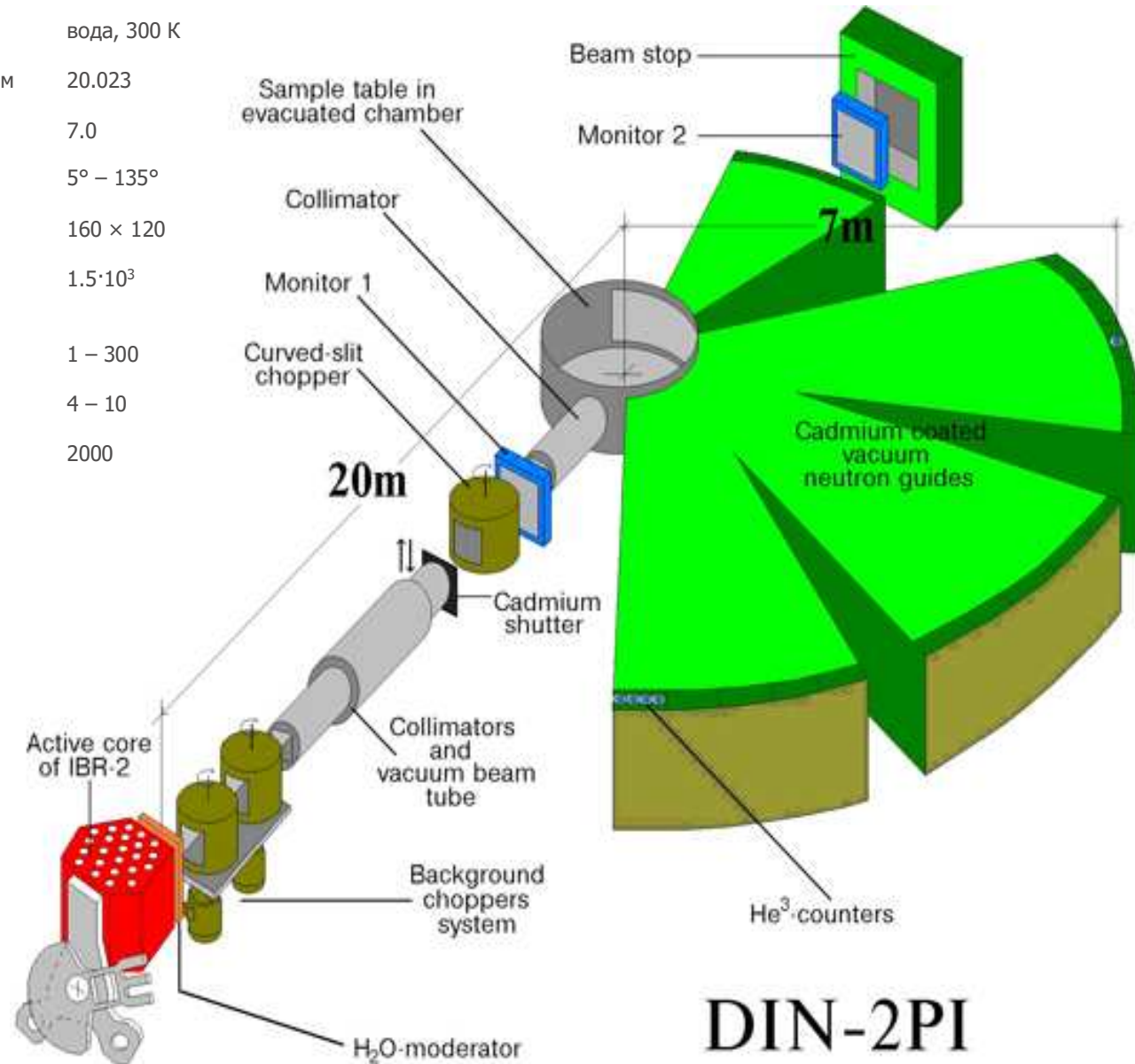


- 1 - Замедлитель
- 2 - Фоновые прервь
- 3 - Зеркальный неи
- 4 - Детектор для д
- 5 - Детектор для дифракции высокого разрешения
- 6 - He³-детекторы для регистрации неупругого и квазиупругого рассеяния
- 7 - Монокристалл-анализатор для квазиупругого рассеяния
- 8 - Анализатор из пиролитического графита для неупругого рассеяния
- 9 - Бериллиевые фильтры
- 10 - Коллиматоры
- 11 - 13 - Накопление и обработка информации

Состав группы

Спектрометр прямой геометрии ДИН-2ПИ

| | |
|--|------------------|
| Замедлитель | вода, 300 К |
| Расстояние от замедлителя до образца, м | 20.023 |
| Расстояние от образца до детектора, м | 7.0 |
| Углы рассеяния | 5° – 135° |
| Размеры пучка на образце, мм ² | 160 × 120 |
| Поток нейтронов на образце для $E_0 = 10$ мэВ, см ⁻² с ⁻¹ | $1.5 \cdot 10^3$ |
| Диапазон начальной энергии, мэВ | 1 – 300 |
| Энергетическое разрешение $\Delta E_0/E_0$, % | 4 – 10 |
| Отношение эффект/фон в упругом пике для стандартного ванадиевого образца, $E_0 = 50$ мэВ | 2000 |



Приборы ILL и ISIS

Спектрометры ИЛЛ

Time-of-flight (TOF) spectrometers

IN4 thermal neutron TOF spectrometer

IN5 cold neutron multi-chopper TOF spectrometer

IN6 cold neutron time-focussing TOF spectrometer

D7 diffuse scattering spectrometer

BRISP Brillouin Spectrometer (CRG) - *under construction*

High-resolution spectrometers

IN10 backscattering spectrometer

IN11 spin-echo spectrometer

IN13 backscattering spectrometer (CRG)

IN15 spin-echo spectrometer

IN16 backscattering spectrometer

3-axis spectrometers

IN1 hot neutron 3-axis spectrometer

IN3 thermal 3-axis spectrometer *for tests*

IN8 thermal neutron 3-axis spectrometer

IN12 cold neutron 3-axis spectrometer (CRG)

IN14 cold neutron 3-axis spectrometer

IN20 3-axis spectrometer with polarisation analysis

IN22 3-axis spectrometer (CRG)

IN20 на тепловом канале

reactor hall, thermal beam H13

beamtube ϕ

monochromator

| | crystal | d -spacing (\AA) | k_i (\AA^{-1}) | flux ($10^7 \text{n.cm}^{-2}\text{s}^{-1}$) | Conditions |
|-------------|---|----------------------------------|--------------------------------|--|--------------------------|
| polarised | Heusler (111) (230x150m m ²) | 3.437 | 2.66 | 2.3 | hor.+vert. focused, |
| | | | 4.1 | 5.5 | D=40mm, |
| | | | 8.0 | 0.65 | with sapphire filter |
| unpolarised | Si (111) | 3.135 | 5.0 | | hor.+vert. focused |
| | | | 3.5 | | (installation 9/2003) |

collimation

$\alpha_0 = 40'$
 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3 = 20', 30', 40', 60', 120'$, radial α_2
 adjustable by Soller collimators

sample

beam size: 4 x 4 cm²

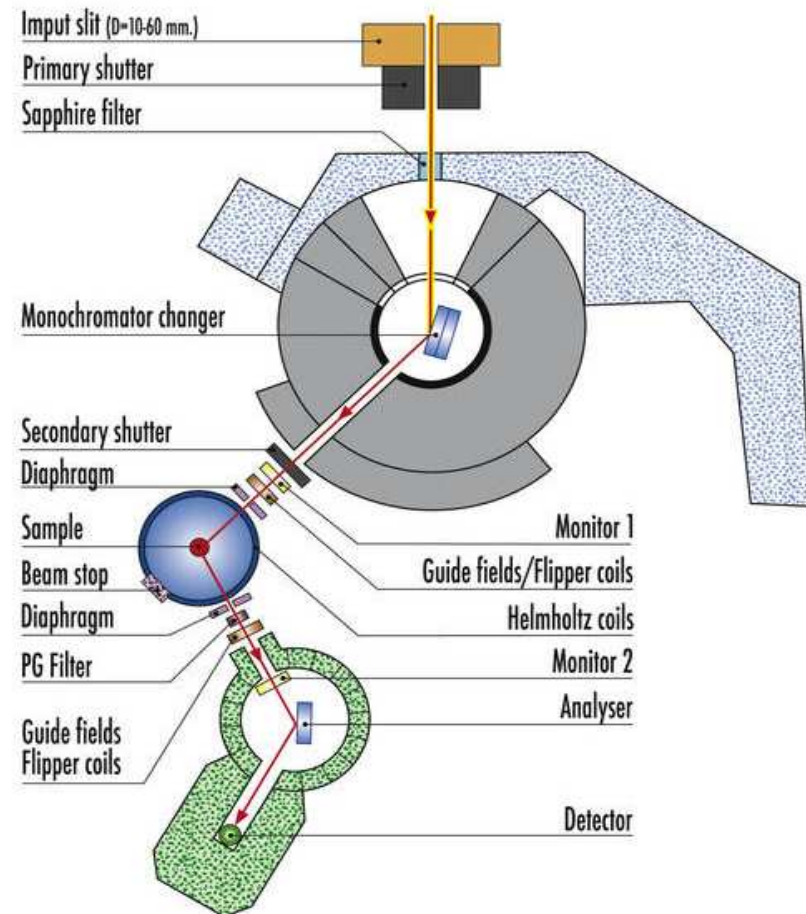
analyser

| | | | | |
|-------------|-------------------------------|-------|--|-----------------------|
| polarised | Heusler (111) | 3.437 | | horizontally focusing |
| | (170x150m m ²) | | | |
| unpolarised | PG (002) | 3.355 | | horizontally focusing |
| | Si (111) | 3.135 | | horizontally focusing |

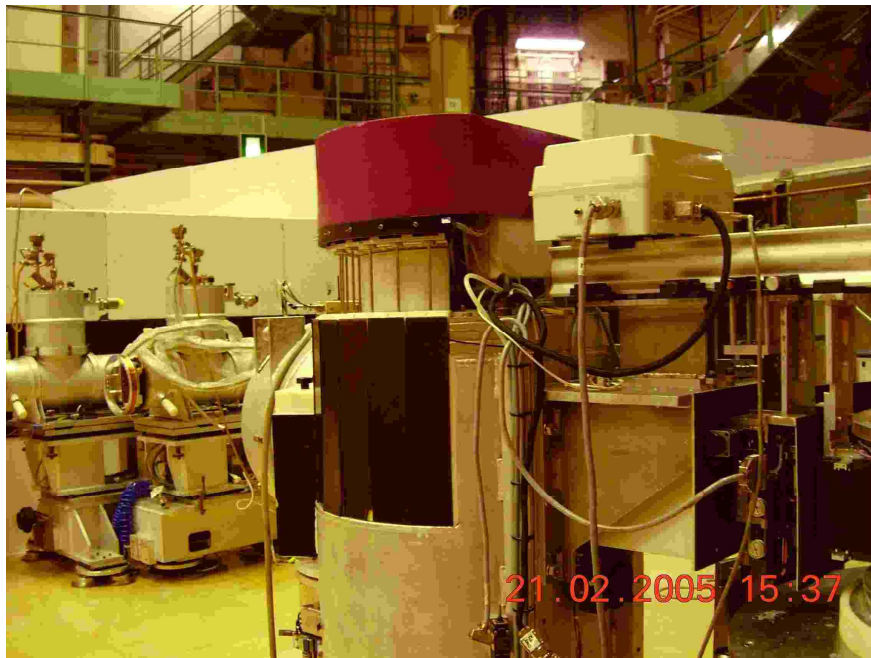
³He detector

4 x 10 cm² (vertical)

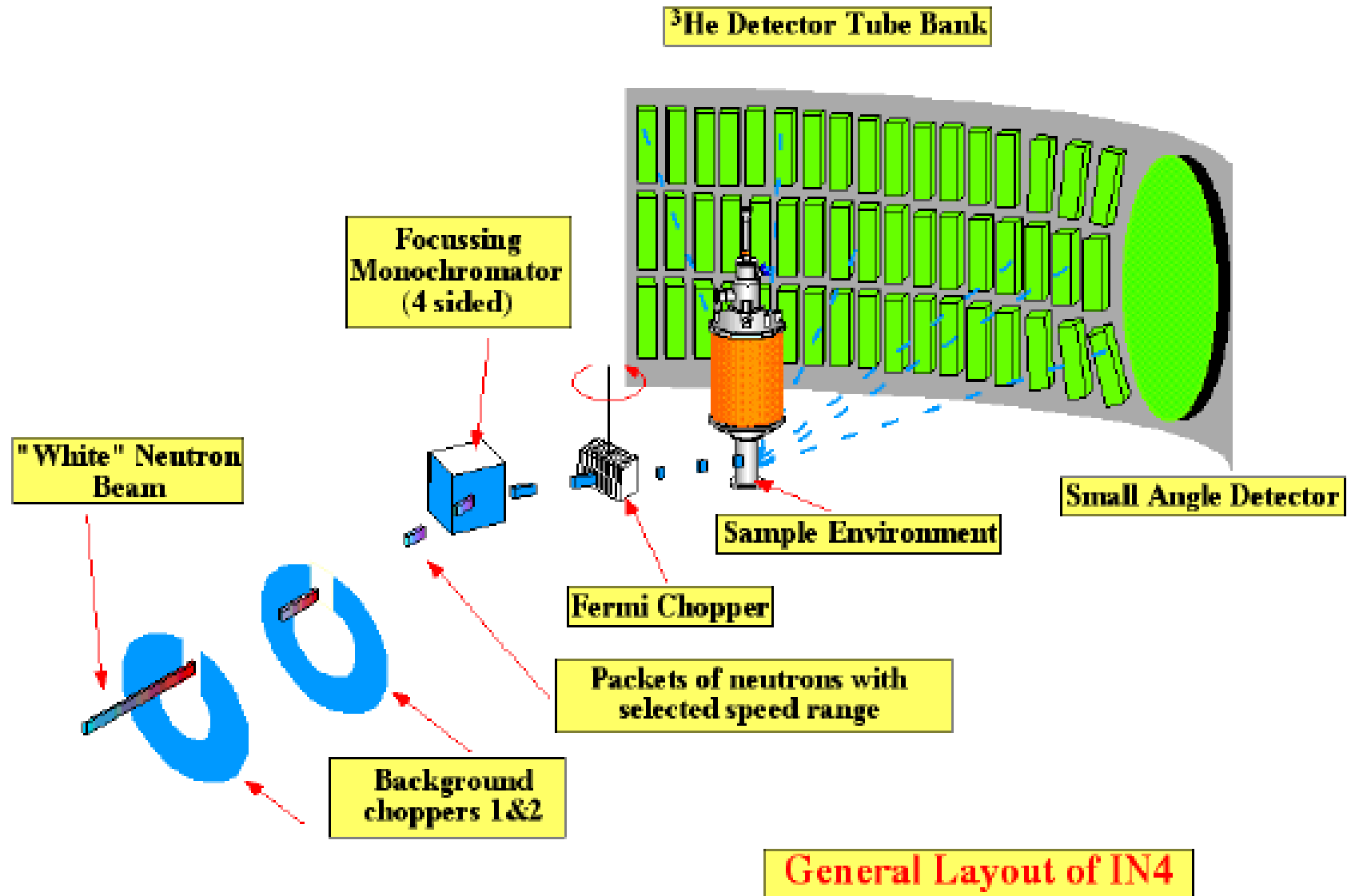
Instrument Description



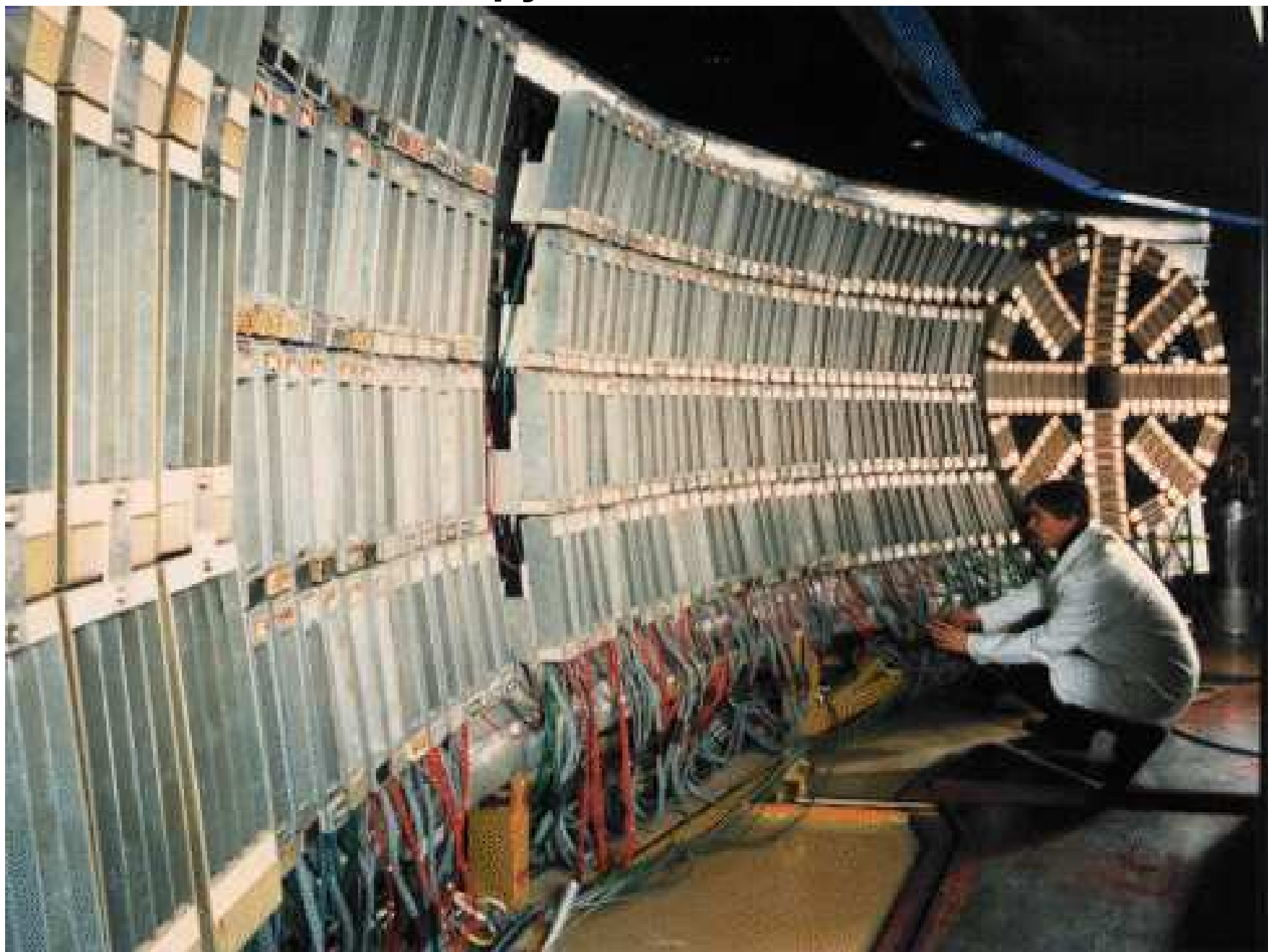
*Трехосный кристаллический спектрометр с
поляризационным анализом IN_2O
(ILL, Grenoble)*



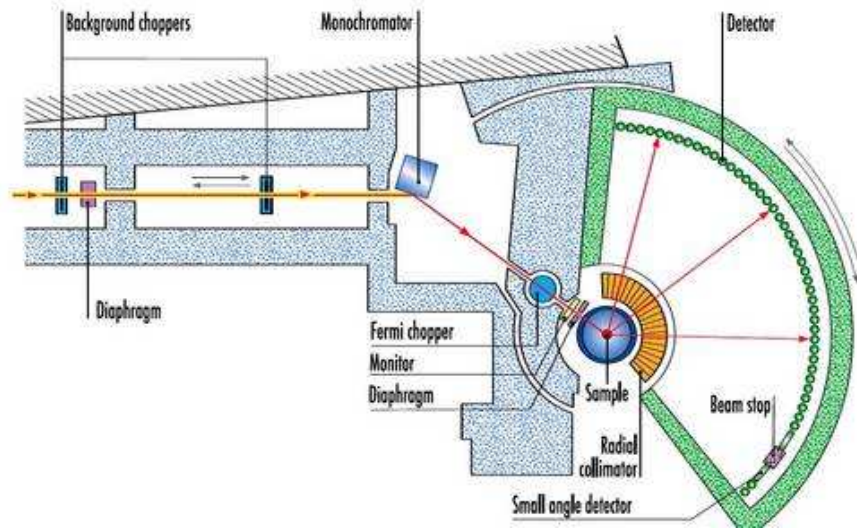
Спектрометр прямой геометрии IN4



Детектирующая система IN4



IN4 на тепловом канале



Applications

- to characterise interaction energies associated with bonding of atoms in solids and liquids;
- to measure the energy level spacing in magnetic ions and of interaction between them;
- to observe the interaction of magnetic moments with their surrounding ions (crystal fields) or with conduction electrons (fluctuating valence, heavy fermions);
- to determine vibrational states in amorphous solids and polycrystals;
- to examine molecular excitations in various materials, also of technological interest (zeolites) and especially in diluted systems (matrix isolation).

Secondary spectrometer

The sample environment is designed to accommodate standard cryostats and furnaces. A radial collimator around the sample position is used to cut the scattering from the sample environment.

The secondary flight-path is in vacuum to avoid parasitic scattering of the transmitted neutrons.

The detector bank covers scattering angles of up to 120° . In addition to the ^3He detector tubes (length 300 mm, width 30 mm, elliptical section, pressure 6 bar) a ^3He filled multidetector (eight sectors with 12 radial cells each; outer diameter ≈ 60 cm) will allow us to observe forward scattering.

The time-of-flight spectra measured at various angles are further treated in order to obtain the scattering function $S(Q, \omega)$ that is characteristic of the properties of the sample. One can extract from it the complete information on the energy and length scale of the dynamical phenomena of isotropic systems such as liquids, disordered materials as well as of non-dispersive (i.e. localised) excitations in molecules and magnetic ions. Otherwise orientationally averaged quantities are obtained, for example the density of vibrational states in polycrystals.

Reactor hall, thermal beam H12

Monochromators

PG 002: 2.20 ... 3.60 Å
 PG 004: 1.10 ... 1.80 Å
 Cu 220: 0.85 ... 1.50 Å
(continued 2007)

| | |
|------------------------------------|--|
| take-off angle $2\theta_M$ | $39^\circ \dots 65^\circ$ |
| resolution $\delta > E_i / E_i$ | 3 ... 6 % |
| flux on sample | $5 \times 10^5 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ |
| background choppers ν | 5 000 rpm |
| Fermi chopper ν_{max} | 32 000 rpm |
| duty cycle | 3×10^{-3} |
| beam size on sample | $2 \times 4 \text{ cm}^2$ |
| primary collimation $\delta\theta$ | 1° |

IN4 is a time-of-flight spectrometer used for the study of excitations in condensed matter. It works in the thermal neutron energy range (10-100 meV).

Primary spectrometer

The main components of the beam conditioning part are the two background choppers, the double curvature mono-chromator with four faces and the Fermi chopper.

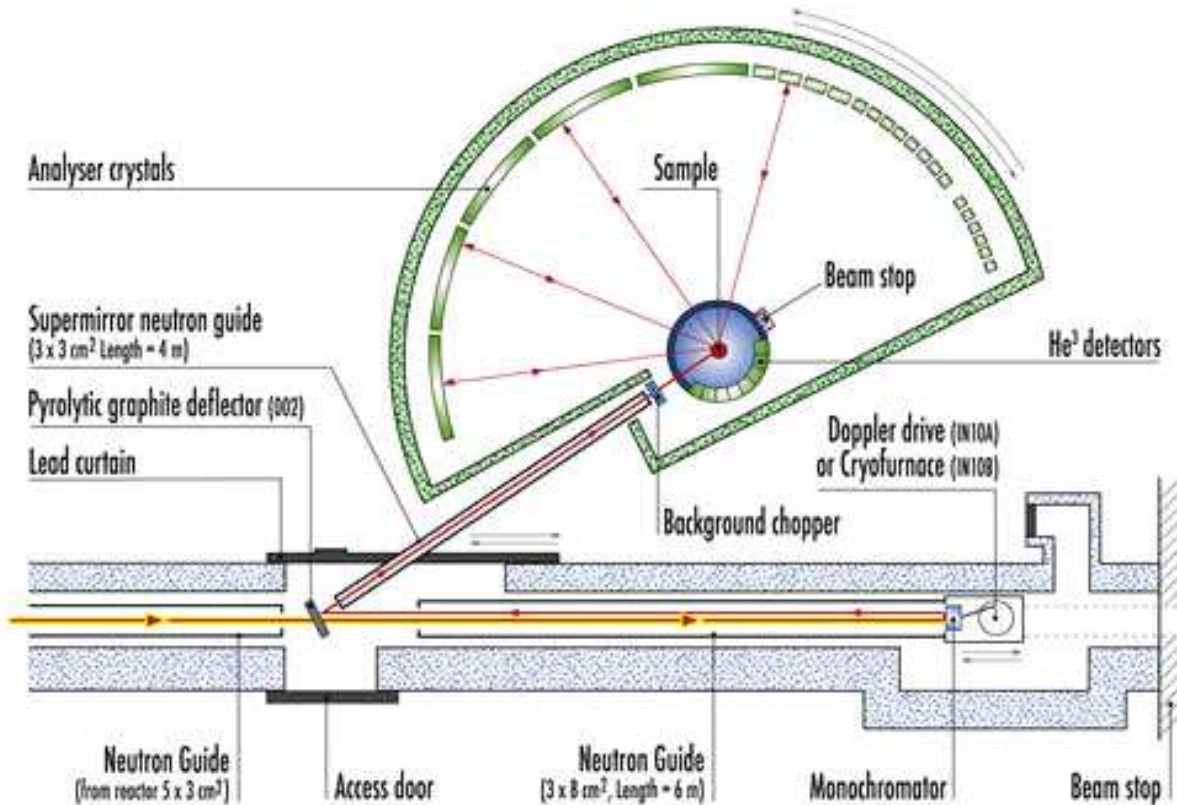
The background choppers are rapidly pulsating beam shutters which act as a low-pass filter. Thus they eliminate from the beam most of the fast neutrons and gamma rays that would give background noise in the spectra. The modular shielding encloses the background choppers in separate compartments in order to cut off these undesired neutrons as early as possible.

A suitable energy is selected from the thermal neutron spectrum with the crystal monochromator. The monochromator, an assembly of 55 crystal pieces, concentrates the divergent incident beam onto a small area at the sample position. The full use of the available solid angle gives a high incident flux. The variable curvature of the monochromator is essential in controlling the time and space focussing conditions for optimal performance (see H. Mutka, Nucl. Instr. and Meth. **A 338** (1994) 144).

The Fermi chopper rotates at speeds of up to 40000 rpm. It transmits short neutron pulses (10 ... 50 μs) to the sample. The time-of-flight of neutrons between the chopper and the sample (1 ... 5 ms) can be measured by using precise electronic circuitry.

Спектрометр обратного рассеяния IN10 на холодном нейтроноводе

Instrument description



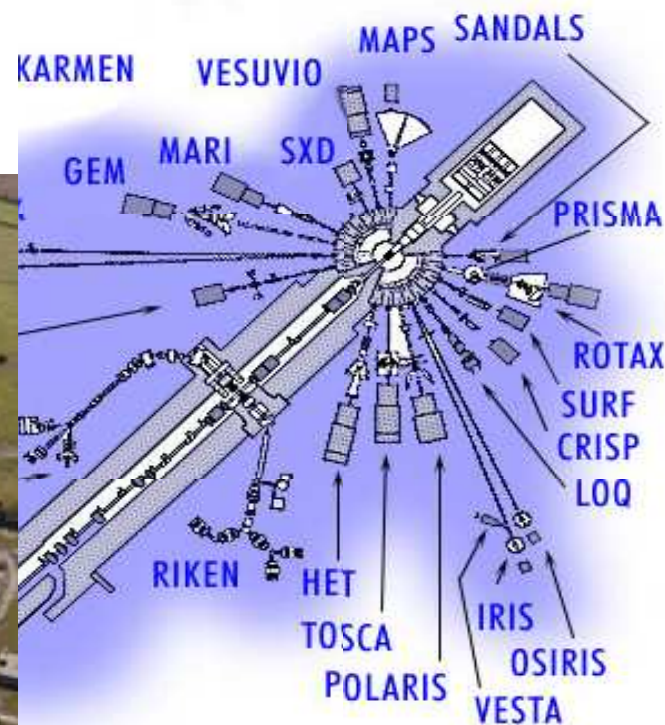
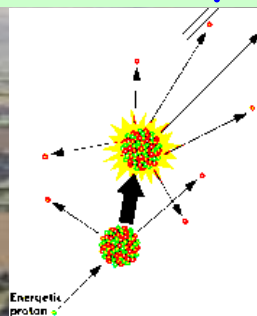
guide hall n° 1, cold neutron guide H15

| | IN10A | | |
|---|------------------------------|---|---------------------|
| monochromator | Si(111) | Si _{0.9} Ge _{0.1} (111) | Ge(111) |
| analyser | Si(111) | Si(111) | Si(111) |
| flux at sample / n cm ⁻² s ⁻¹ | 4x10 ³ (polished) | 3 x 10 ⁴ | 4 x 10 ⁴ |
| incident energy | 2.080 | 2.06 | 1.92 |
| incident wave-length λ/Å | 6.271 | 6.30 | 6.53 |
| energy transfer range ΔE/μeV | -15...15 | -2...27 | 148...178 |
| energy resolution ΔE/μeV (FWHM) | 0.3...1.5 | 1 | 1 |
| elastic Q-range /Å ⁻¹ | 0.07...2.0 | 0.07...2.0 | 0.07...1.9 |

Typical applications of the instrument include studies of:

- Microscopic motions in polymers and biological systems.
- Diffusive processes in supercooled liquids and dynamic correlations near the liquid glass transition, as well as in confined systems.
- Rotational or conformational motions in plastic crystals.
- Solid state diffusion (diffusion of hydrogen in metals, self diffusion in metal and alloys, diffusive processes in intercalated compounds, ...)
- Quantum tunnelling.
- Nuclear hyperfine splitting.
- Magnetism in disordered materials.

ISIS facility (UK), 160 kW spallation pulsed neutron source



Proton beam:

800 MeV

200 μ A

$\tau \sim 1 \mu$ sec

Возбуждения

Спектрометры

HET, MARI, PRISMA, MAPS, ALF

Молекулярная спектроскопия

IRIS, OSIRIS, TOSCA, VESUVIO, VESTA

Некоторые параметры приборов IL и ISIS

| TOF spectrometer | Flux on sample, n cm⁻² s⁻¹ | Resolution | Beam size cm² | Energy range, meV |
|-------------------------|---|--|-------------------------------------|------------------------------|
| IN4 | 5 x 10⁵ | $\Delta E_i / E_i \sim 2 - 5 \%$ | 3 x 8 | 10 - 100 |
| IN5 | 7 x 10⁴ (E = 4.3 Å) | ~ 0.1 meV | 2 x 5 cm² | 0.3 - 25 |
| IN6 | 8.9 x 10⁴ (E = 4.1 Å) | 170 μeV at 4.1 Å 50 μeV at 5.9 Å | 3 x 5 cm² | 2.3 - 5 |
| | | | | |
| HET | 3 x 10³ | 1 – 3 % | 4.5 x 4.5 | 15 - 2000 |
| MAPS | 5 x 10³ | ~ 2 % | 5.5 x 5.5 | 15 - 2000 |
| MARI | 2.1 x 10³ | 1 – 2 % | 5 x 5 | 9 - 1000 |
| PRISMA | 2.1 x 10³ | 4 % | 2 x 4 | 3 - 250 |
| | | | | |

Спектрометр НЕТ на тепловом канале

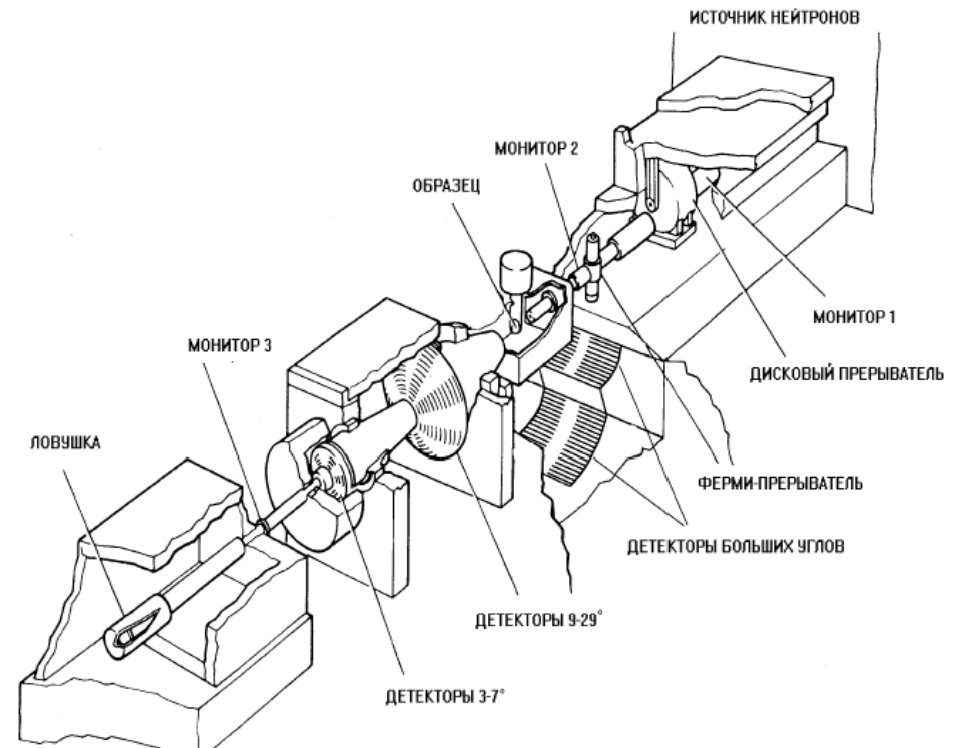
HET Spectrometer

Investigations on Het have broadened from studies of high energy magnetic excitations and the dynamics of hydrogen metal systems into the fields of quantum magnetism and non-Fermi liquids.

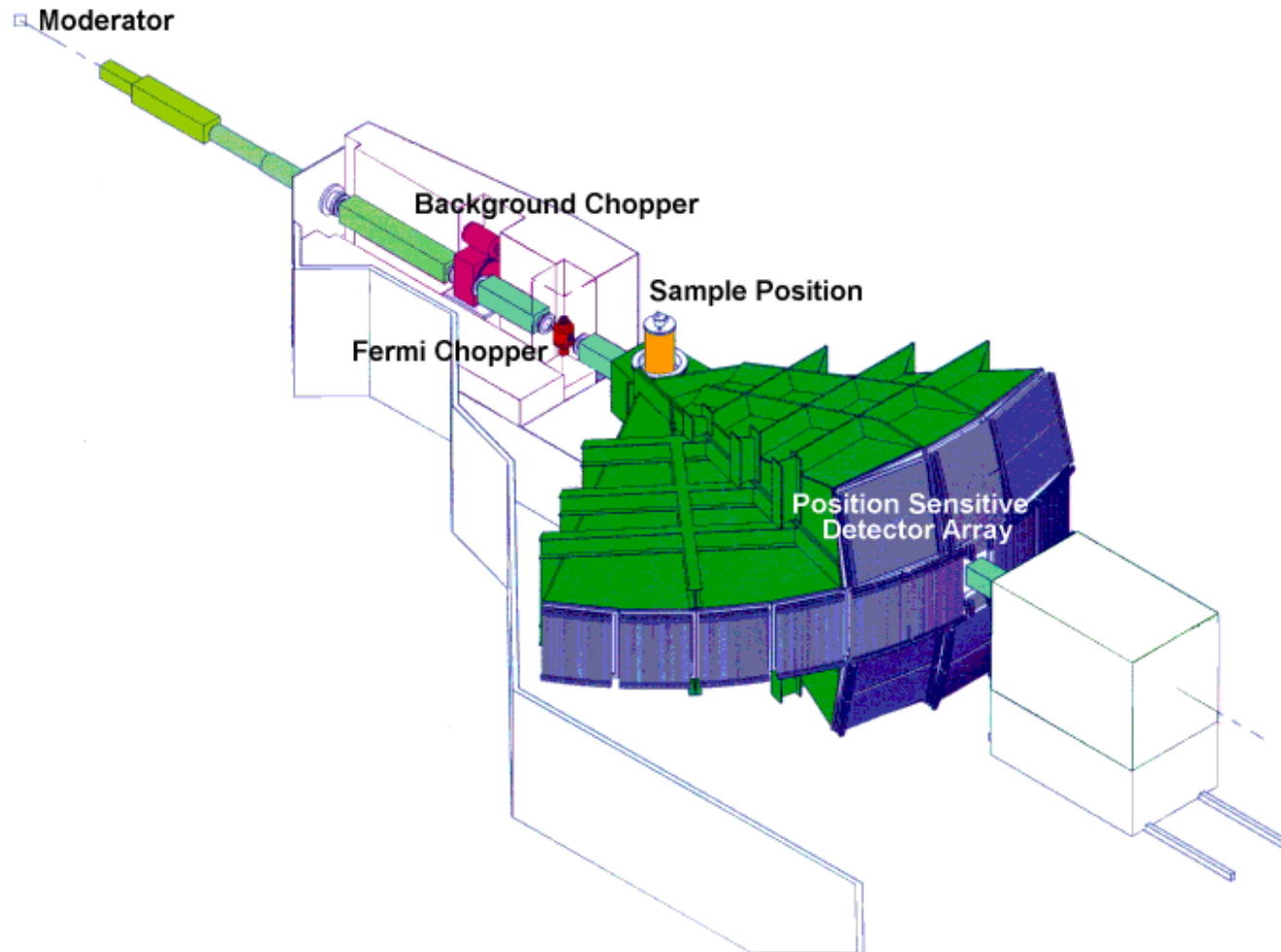
Het is optimised to measure high energy magnetic excitations. Although originally optimised for magnetic studies with most of its detectors positioned at angles below 30° , it is also used for investigations of dynamics in many other materials including disordered and biological systems. It has produced a large number of important results from powders, amorphous materials and single crystals.

Applications

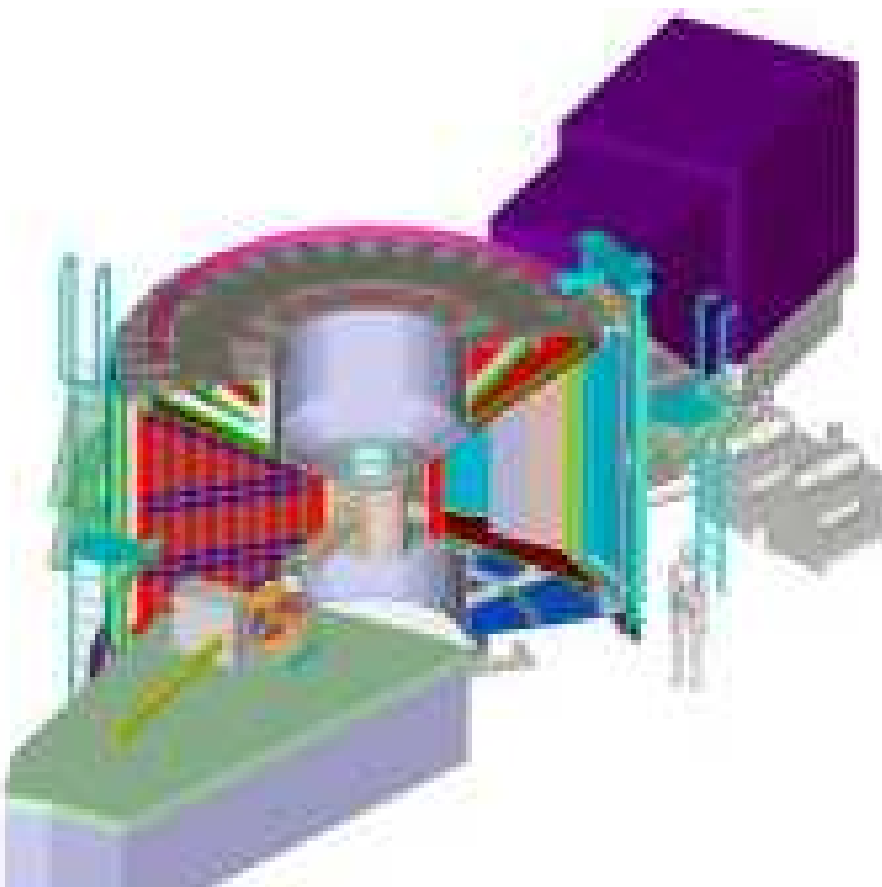
- Magnetic excitations in powders and single crystals
- Brillouin scattering
- High resolution studies of non-dispersive excitations



MAPS Spectrometer



Высокосветосильный спектрометр MERLIN



Merlin is a new high count rate, medium energy resolution, direct geometry chopper spectrometer, due for completion in 2006. It will have a very large solid angle of detectors about eight times that of Het or Mari) with a range of nearly 180° in the horizontal plane and $\pm 30^\circ$ in the vertical plane. Position sensitive detectors will make it ideal for studies of single crystals.

- Rapid data collection rates
- Simultaneous collection of data over a large solid angle
- Highly pixelated detectors
- The capability to use advanced sample environment

**Некоторые аспекты
практического использования
нейтронных спектрометров**

Что важно при выборе объектов исследования?

The most important thing is:

Know as much about your sample as possible
(Beamtime costs ~ \$4000/day!!)

The types of things that you might want to know include:

What's the structure (in a general sense)?

Are there any phase transitions (or a glass transition)?

What isotopes are present?

Supplementary data from other measurements ...

Magnetization vs T

Muon spin relaxation

X-ray data

Specific heat vs T

Raman spectroscopy

Try to avoid isotopes that are strongly absorbing

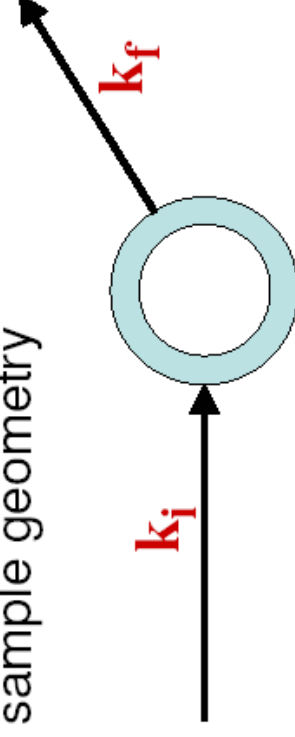


Single Crystals yield the most information

Increase the intensity by increasing the amount of sample

If you have a powder, use a cylindrical container (rather than flat plate)

Annular may be the best sample geometry



Almost all experiments on triple-axis spectrometers involve coherent scattering
→ sample should be deuterated (if it contains H at all)

Increase the intensity by increasing the amount of sample

→ Fill the beam with sample

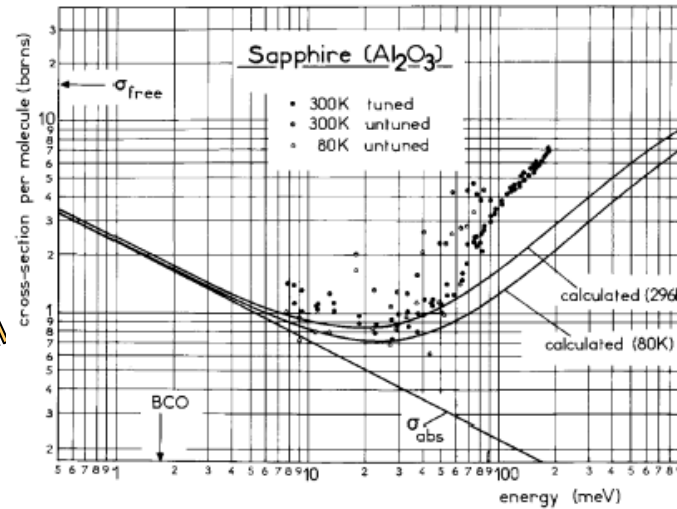
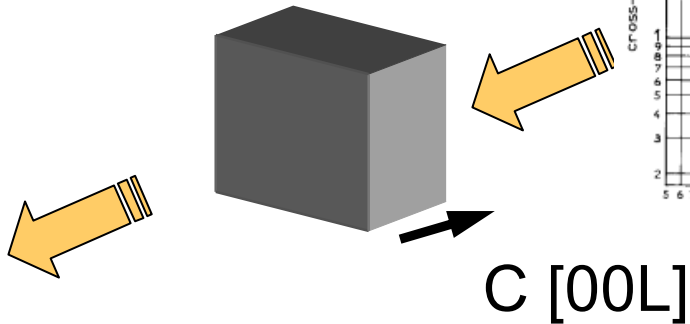
Typically use flat plate samples (at small angles)



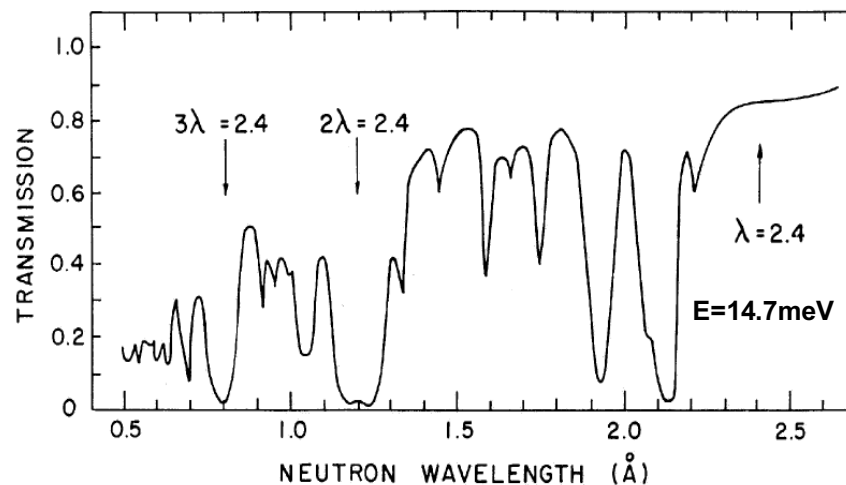
Rule of thumb - the transmission should be $\sim 70\%$

Нейтронные фильтры

Назначение: уменьшение фона быстрых нейтронов или удаление из спектра ненужных компонент



Кварц, сапфир – монокристаллические фильтры первичного пучка (n, γ)

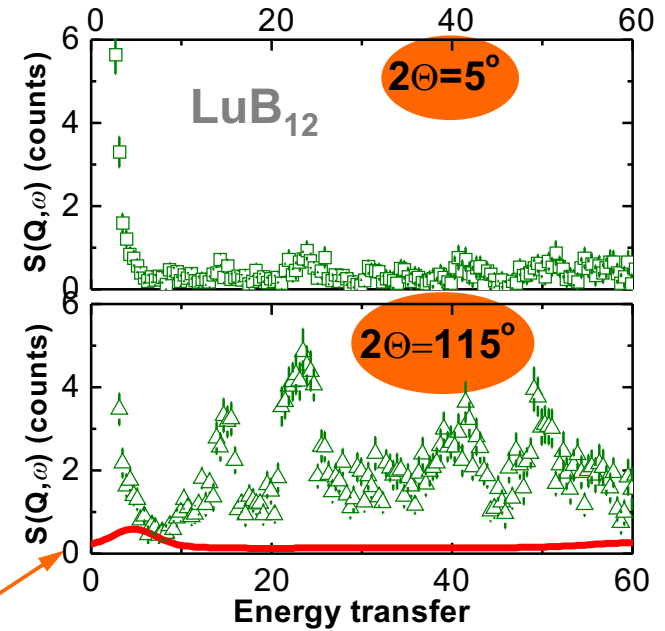
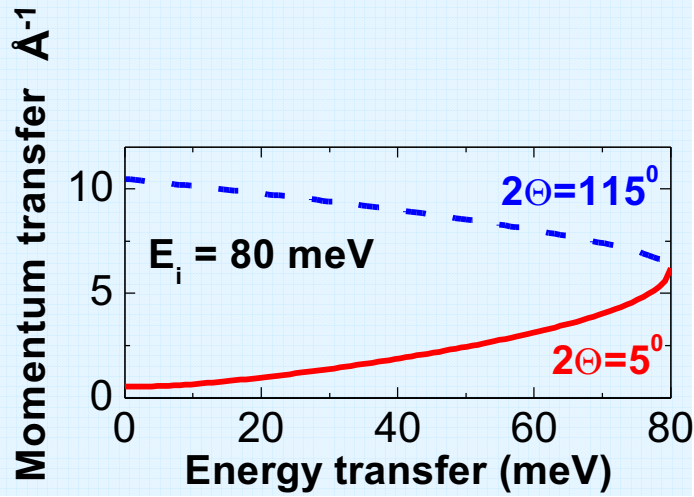
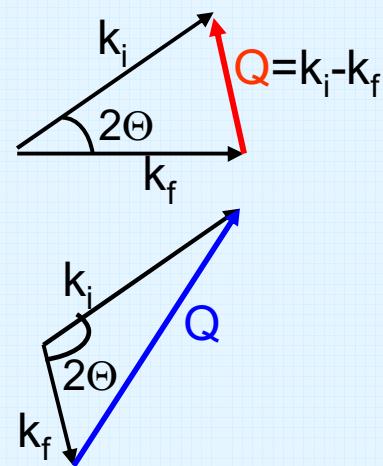


PG фильтр $\lambda/2$: K_i, K_f
 $K=1.97\text{Å}$ ($E=8.05\text{мэВ}$)
 $K=2.66\text{Å}$ ($E=14.7\text{ мэВ}$)
 $K=3.85\text{Å}$ ($E=30.5\text{ мэВ}$)
 $K=4.10\text{Å}$ ($E=34.8\text{ мэВ}$)

Be-фильтр: $E_t < 5\text{мэВ}$

Разделение фононной и магнитной составляющих в измеряемой спектральной функции

Выделение магнитной составляющей из экспериментальных спектров НРН поликристаллического образца (спектрометр по времени пролета)



Фононная составляющая

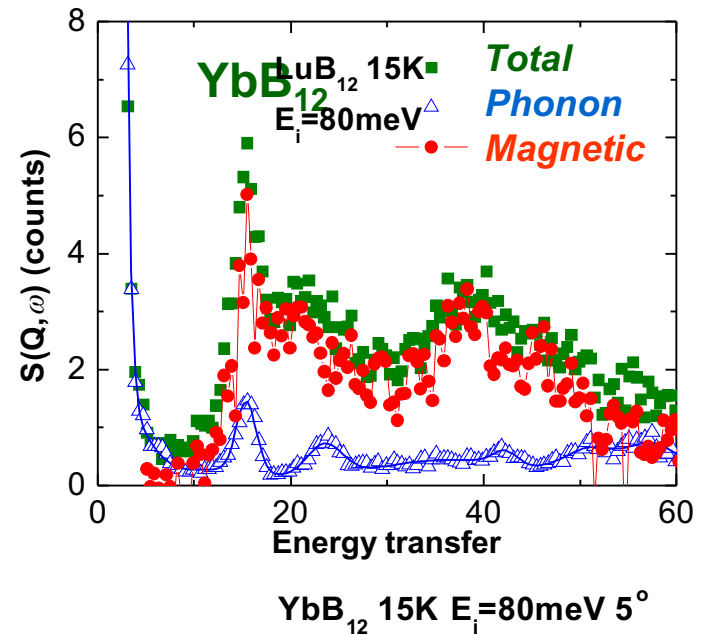
$N+M$ =образец с f -электронами

N =немагнитный аналог ($La, Lu, Y...$)

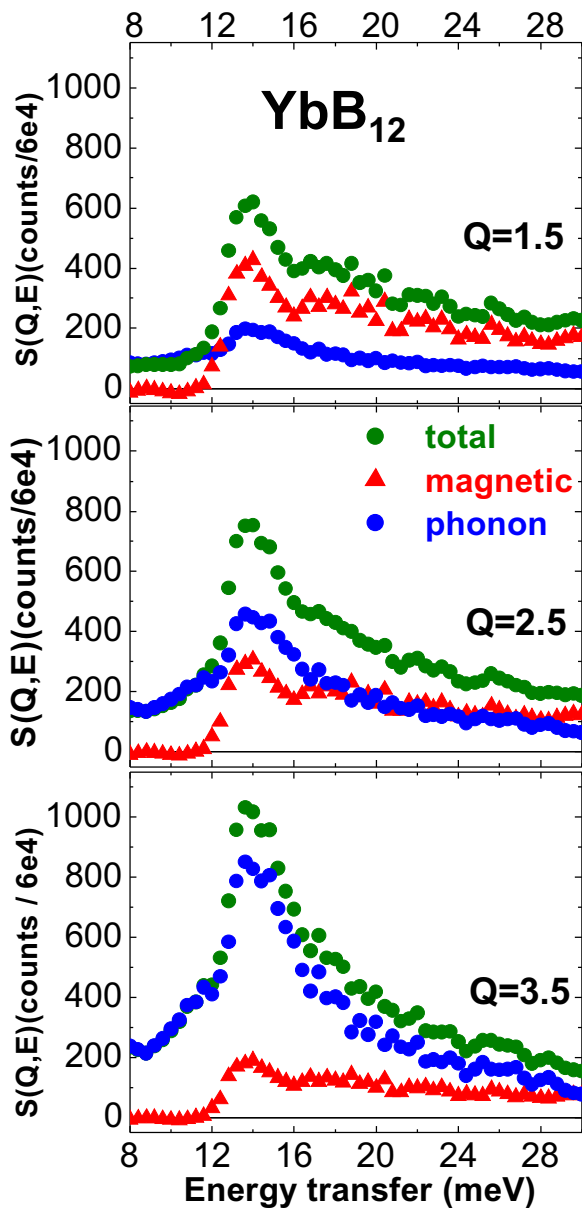
$$\frac{S_{M+N}^{Ph}(\Theta^{Low}, \omega)}{S_{M+N}(\Theta^{High}, \omega)} = \frac{S_N(\Theta^{Low}, \omega)}{S_N(\Theta^{High}, \omega)}$$

Немагнитный аналог

$$S_{M+N}^{phon}(\Theta^{Low}, \omega) = \frac{S_N(\Theta^{Low}, \omega)}{S_N(\Theta^{High}, \omega)} S_{M+N}(\Theta^{High}, \omega)$$



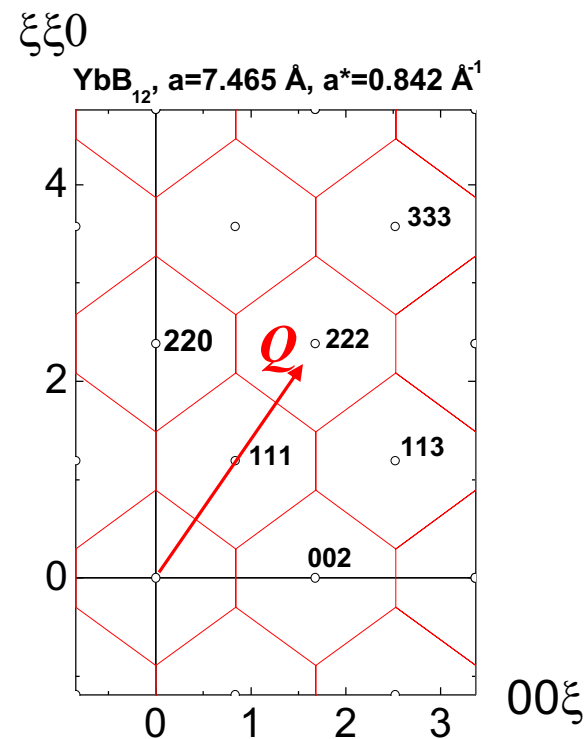
Выделение магнитной составляющей из экспериментальных спектров НРН монокристаллического образца (трехосный спектрометр)



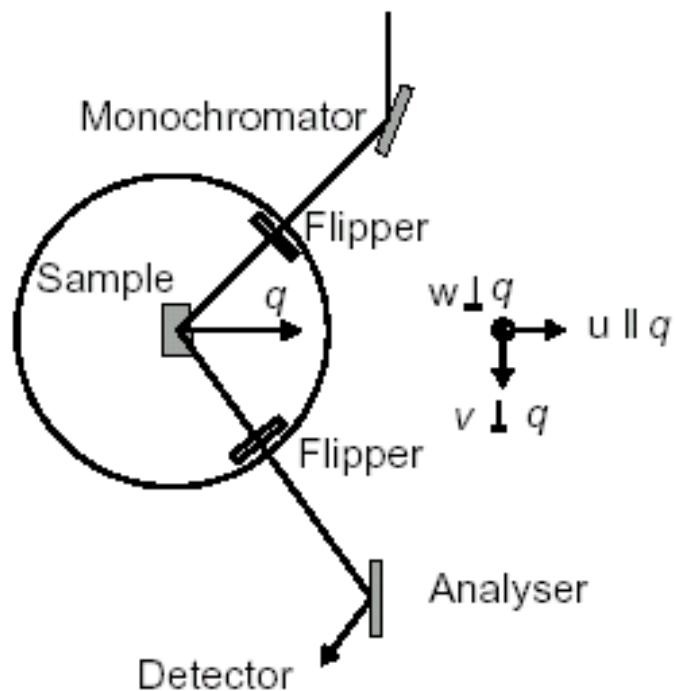
Магнитная составляющая
 $S_{mag} \sim f^2(Q)$

Фононная составляющая
 $S_{ph} \sim Q^2$

Импульсное пространство:
 сечение зоны Бриллюэна
 плоскостью рассеяния



Эксперимент с поляризационным анализом



P || Q:

$$I_u^{SF} = \frac{2}{3} I_{incoh}^{spin} + 0 + 0 + I_{magn}^v + I_{magn}^w$$

$$I_u^{NSF} = \frac{1}{3} I_{incoh}^{spin} + I_{incoh}^{isot} + I_{coh} + 0$$

P ⊥ Q:

$$I_v^{SF} = \frac{2}{3} I_{incoh}^{spin} + 0 + 0 + I_{magn}^w$$

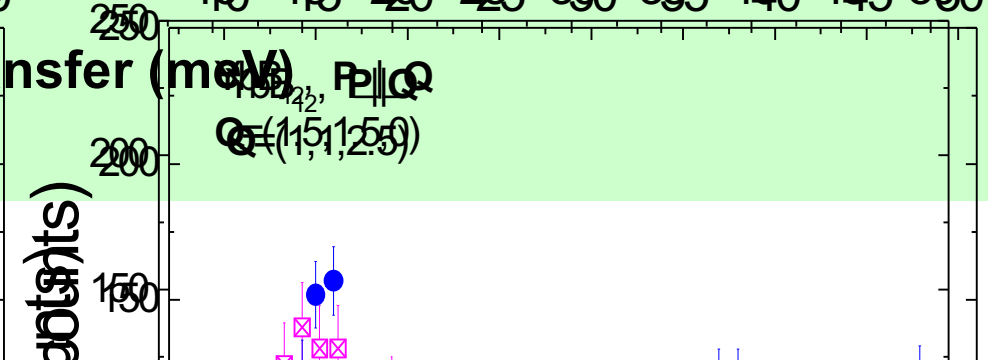
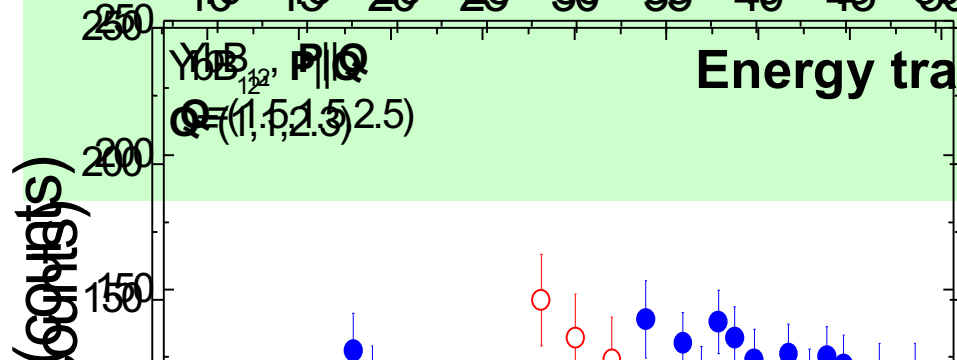
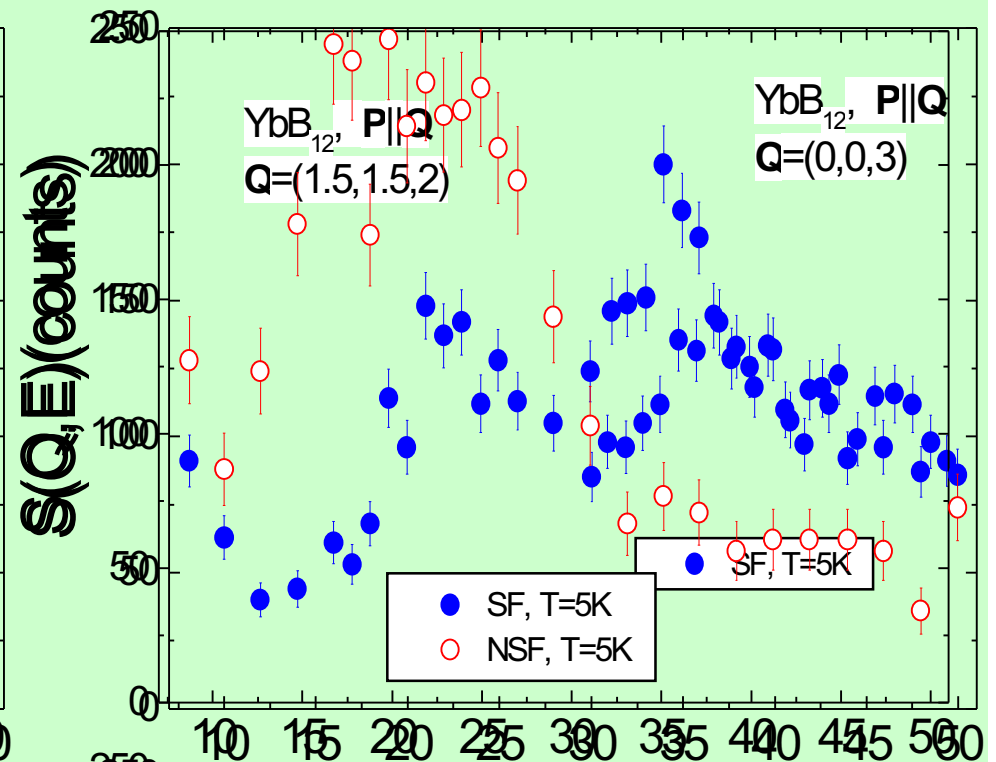
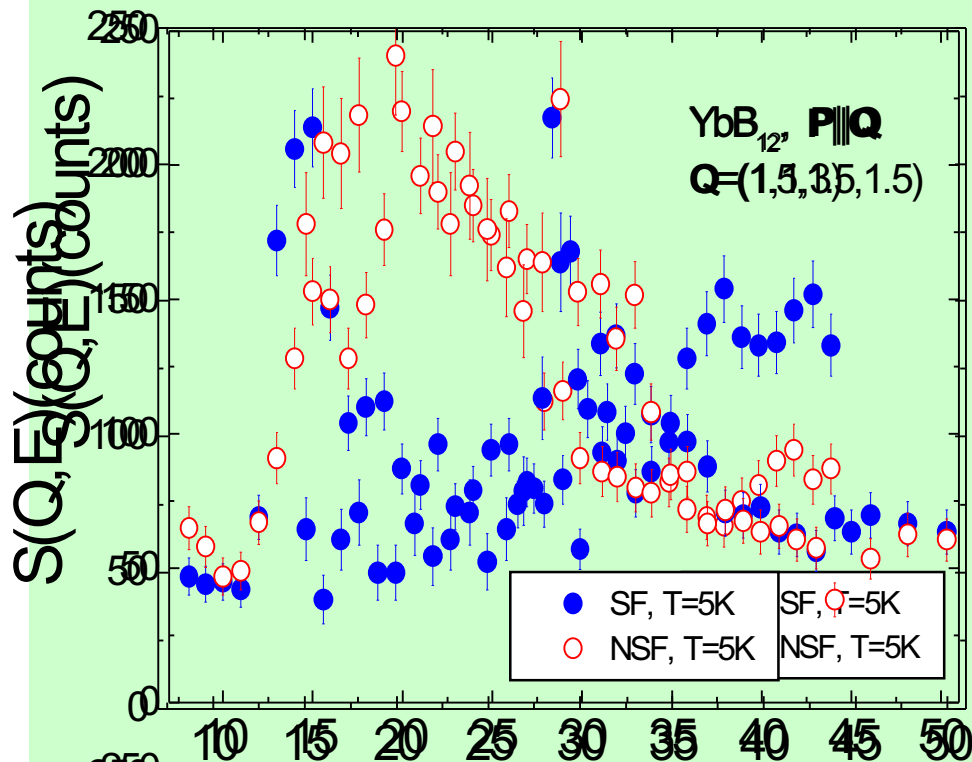
$$I_v^{NSF} = \frac{1}{3} I_{incoh}^{spin} + I_{incoh}^{isot} + I_{coh} + I_{magn}^v$$

$$I_w^{SF} = \frac{2}{3} I_{incoh}^{spin} + 0 + 0 + I_{magn}^v$$

$$I_w^{NSF} = \frac{1}{3} I_{incoh}^{spin} + I_{incoh}^{isot} + I_{coh} + I_{magn}^w$$

Нейтронная спектроскопия с поляризационным анализом на монокристалле YbB_{12}

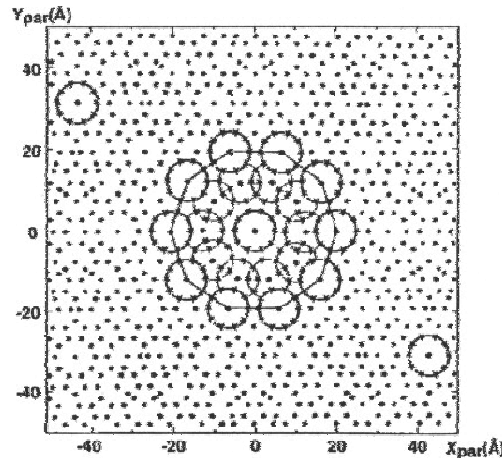
IN20, Grenoble, 2005



Некоторые примеры использования спектрометров

Атомная динамика квазикристалла $i\text{-AlCuFe}$ и кристаллического аппроксиманта $\alpha\text{-Al(Si)CuFe}$

Кластеры Бергмана и Маккея – основные строительные блоки икосаэдрических квазикристаллов, в структуре которых они упакованы квазипериодически.

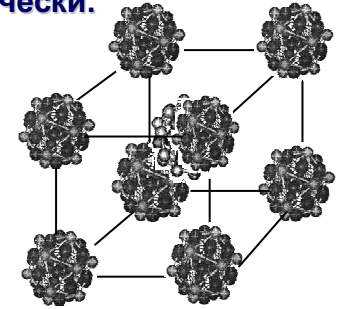


В кристаллическом аппроксиманте те же самые кластеры упакованы периодически.

В системе Al-Cu-Fe возможно получение как икосаэдрического квазикристалла

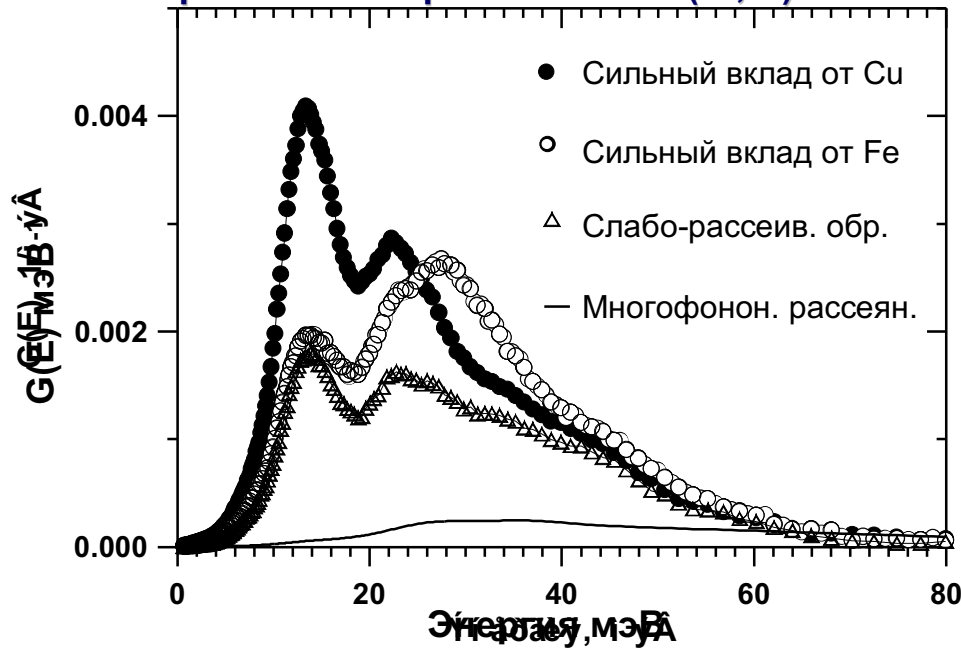


так и кубического аппроксиманта с близким химическим составом

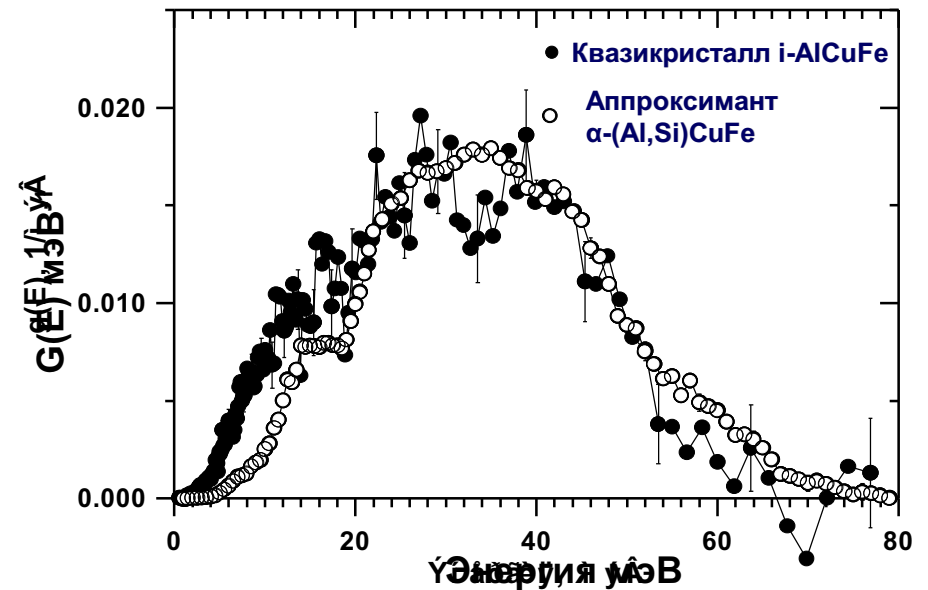


В случае фазы $\alpha\text{-(Al,Si)CuFe}$ кластеры располагаются в узлах кубической решетки (типа CsCl) с параметром $a = 12.3\text{Å}$ и 137 атомами в элементарной ячейке.

Изотопический контраст в неупругом рассеянии нейтронов на аппроксиманте $\alpha\text{-(Al,Si)CuFe}$



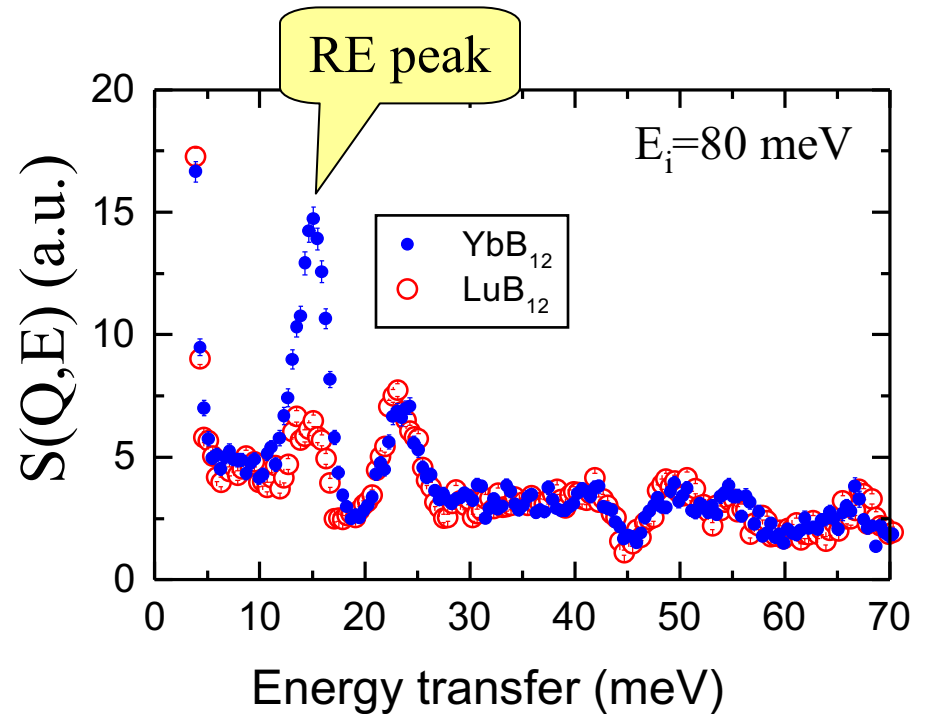
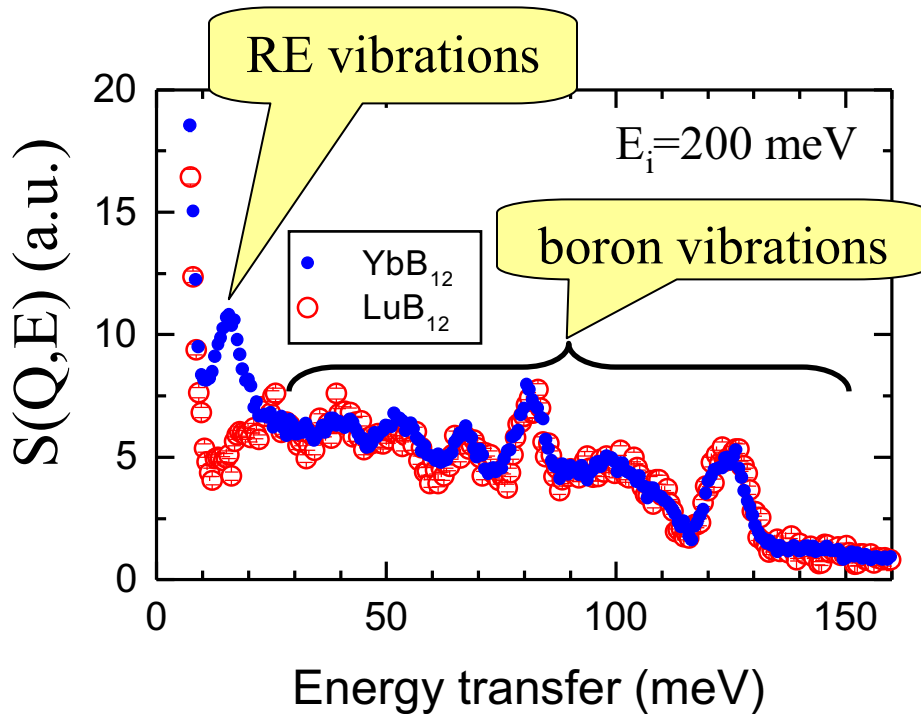
Спектры тепловых колебаний атомов алюминия



Динамика кристаллической решетки

Неупругое рассеяние нейтронов на порошковых образцах YbB_{12} и LuB_{12}

$$S(Q,E) = \alpha_{\text{Yb}} * \sigma_{\text{Yb}} * \text{DOS}_{\text{Yb}} + \alpha_{\text{B}} * \sigma_{\text{B}} * \text{DOS}_{\text{B}} + \text{cross terms}$$



Монокристалл $^{154}\text{Sm}^{11}\text{B}_6$, $V \sim 1 \text{ cm}^3$



ИПМ НАНУ +РНЦ КИ =
уникальная серия
экспериментальных работ
по исследованию
физической природы
промежуточновалентного
состояния Sm: поли- и
монокристаллы, техника
TOF и TAS

Трехосный спектрометр на нейтроноводе IN22

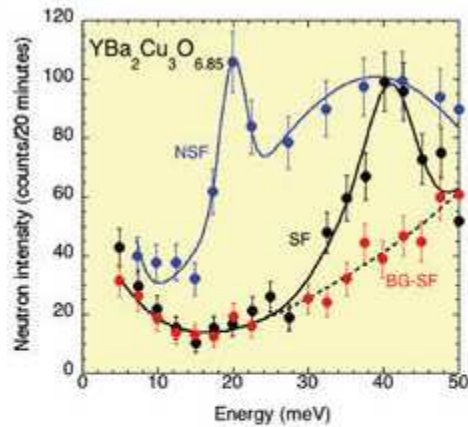


Fig. 1 - Energy scan through the antiferromagnetic zone centre at $Q=(1.5, 0.5, 1.7)$ (black circles: SF; blue circles: NSF) and at a background position $Q=(1.8, 0.6, 1.7)$ (red circles: SF) in the high- T_c superconducting material $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$. The energy dependence of the background is due to the increased counting time at higher incident energies. The shaded area illustrates the magnetic signal peak at the resonance position of 41 meV.

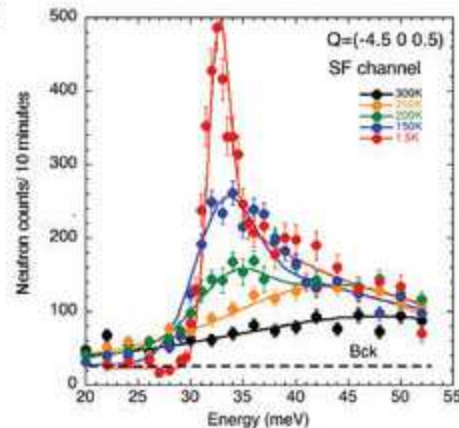
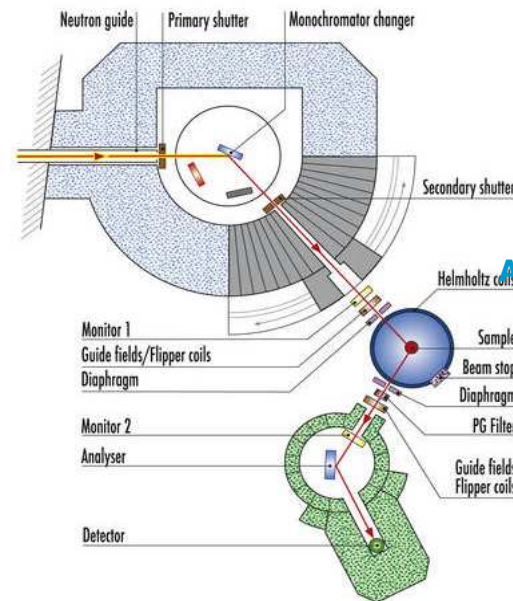


Fig. 2 - Temperature dependence of the spin-gap in the ladders of $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. Between 1.5K and 300K, the purely magnetic response changes from a response characteristic of a well defined gap of 33 meV to a response characteristic of a pseudo-gap at 90 meV.



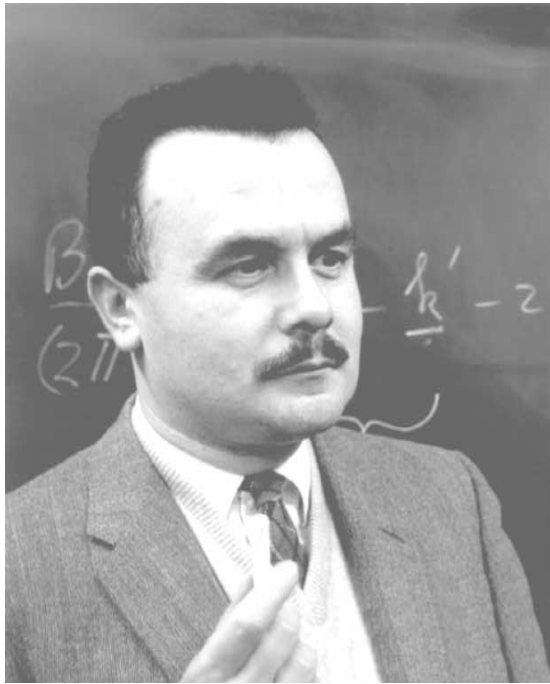
Applications

- Study of magnetic and structural excitation spectra on single crystals with neutrons of incident energies in the range 5-100 meV.
- Longitudinal and spherical polarimetry of inelastic contributions
- Measurements of inelastic nuclear-magnetic interference terms.
- Polarized neutron inelastic scattering under high magnetic field (up to 12 T).
- Measurements of magnetic and structural excitation lifetimes.

Selected examples

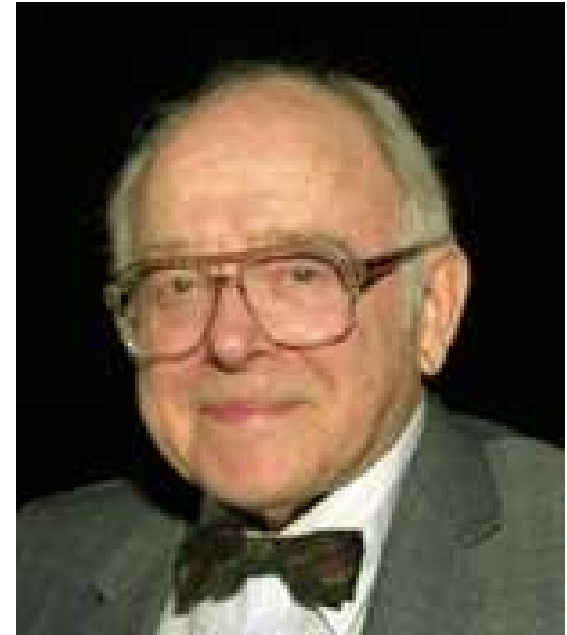
One of the main interests of polarized neutrons and full polarization analysis is to allow a clear separation of magnetic contributions from the nuclear (structural) ones. An example of such a separation is shown in Fig. 1 for the high- T_c superconducting cuprate $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$. The incident polarization is kept parallel to the scattering vector, in such a manner that the magnetic fluctuations contribute only to the spin (SF) channel and the structural excitations to the non-spin-flip (NSF) channel. These results demonstrate unambiguously the magnetic nature of the resonant peak at 41 meV and the existence of a spin gap around 25 meV.

Another example is shown in Fig. 2 for the $S=1/2$ spin ladder system $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. By measuring the contribution in the configuration for which the incident polarization is maintained parallel to the scattering vector, it is possible to determine directly the magnetic response of copper ions as a function of the temperature.



“If the neutron did not exist, it would need to be invented.”

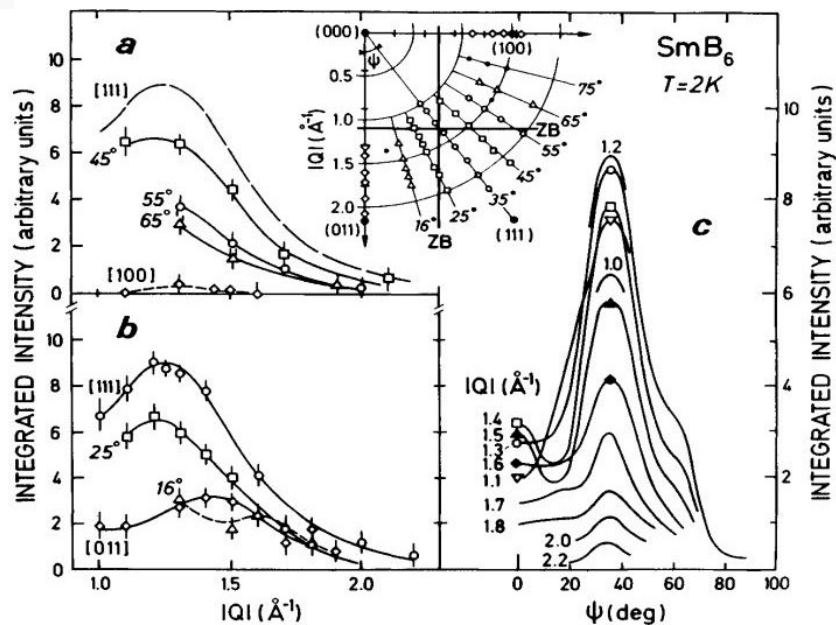
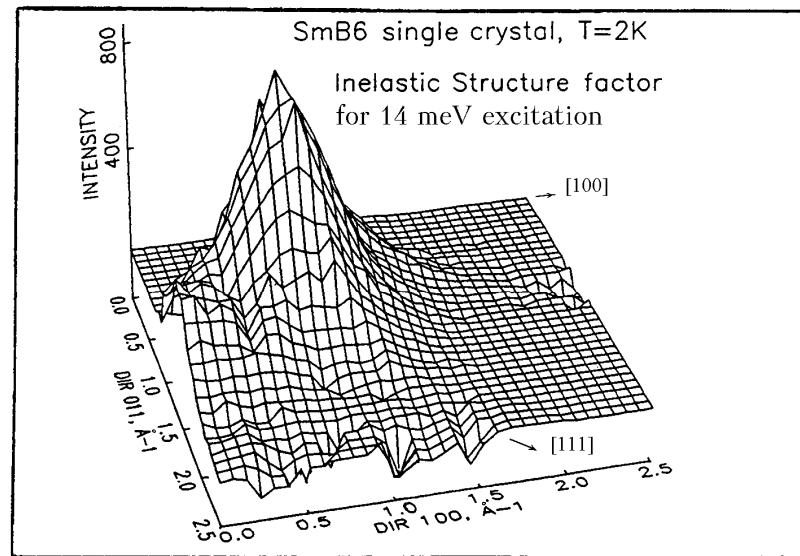
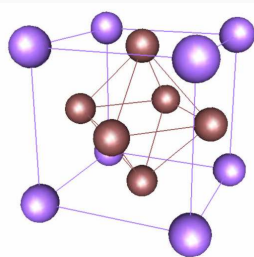
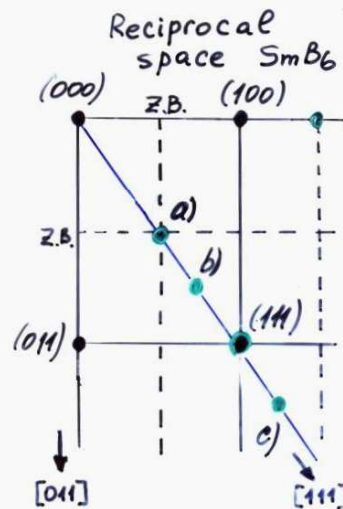
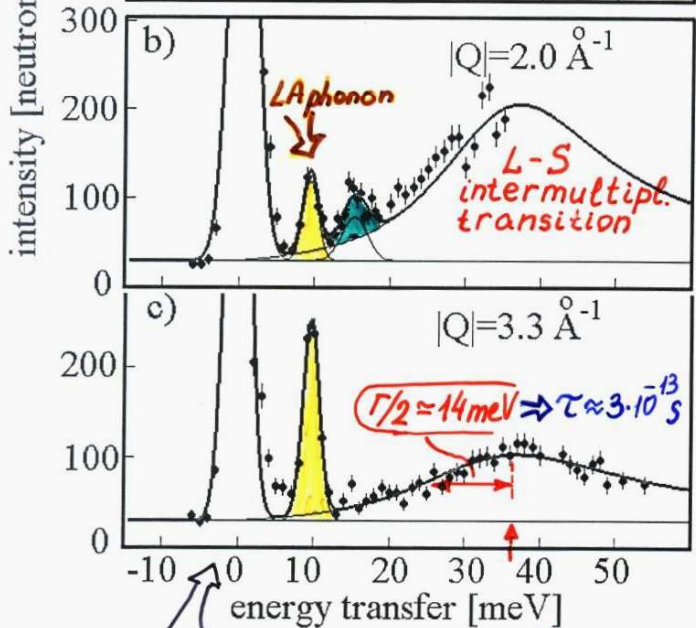
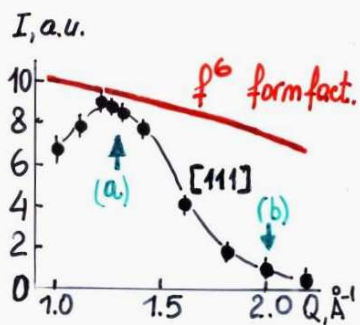
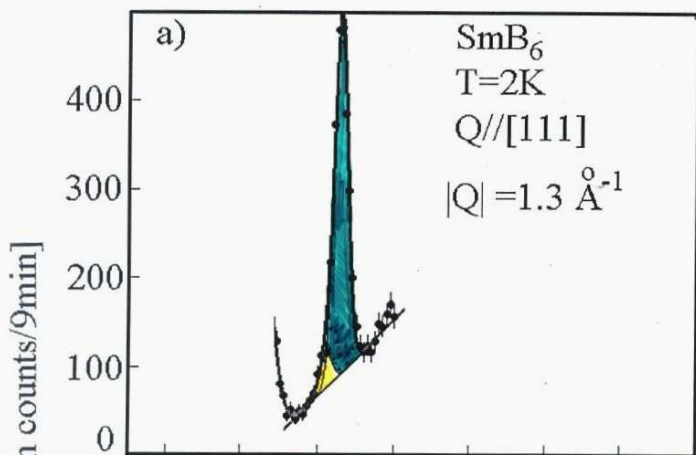
-B. Brockhouse



Благодарю за внимание!

Low energy ("resonant") mode in SmB₆

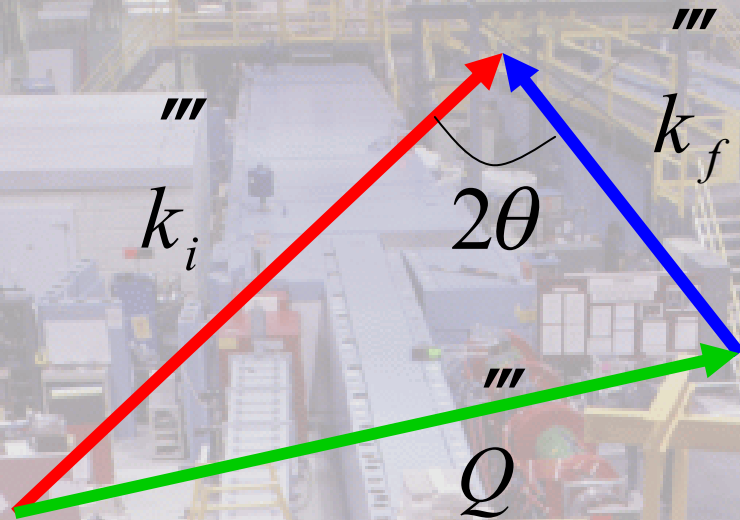
¹⁵⁴Sm B₆ single crystal



elastic nuclear scattering peak

Sm²⁺: J=0 → J=1

Magnetic Neutron Scattering



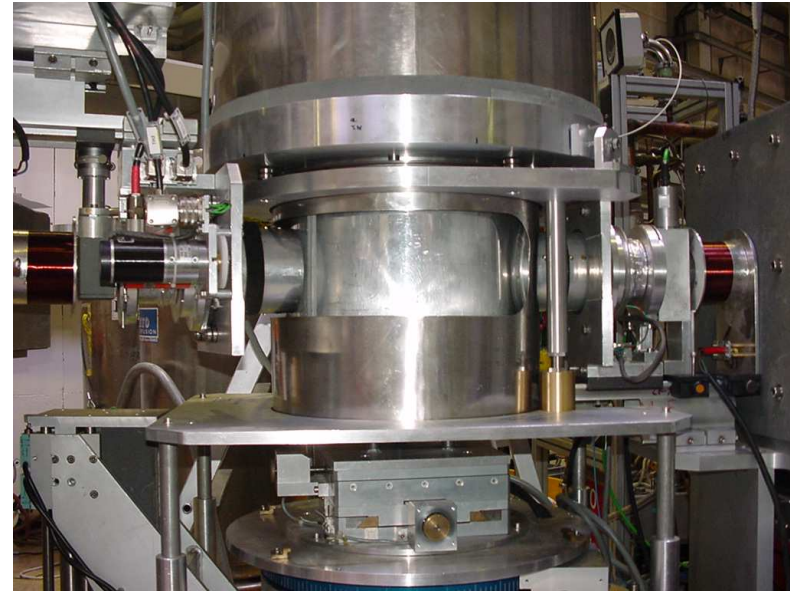
$$Q = k_i - k_f$$

$$\omega = E_i - E_f$$

The scattering cross section is proportional to the **Fourier transformed dynamic spin correlation function**

$$S^{\alpha\beta}(Q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} \frac{1}{N} \sum_{RR'} e^{iQ \cdot (R-R')} \langle S_R^\alpha(t) S_{R'}^\beta(0) \rangle$$

CRYOPAD on TAS IN22



Polarized neutron optics

Exemples: $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, CuGeO_3 , $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2, \dots$



CEA/12-T magnet on IN22 (pol. neutrons)

@ H=15 T:
Vertical force: < 110 kg
Horizontal force: < 30 kg

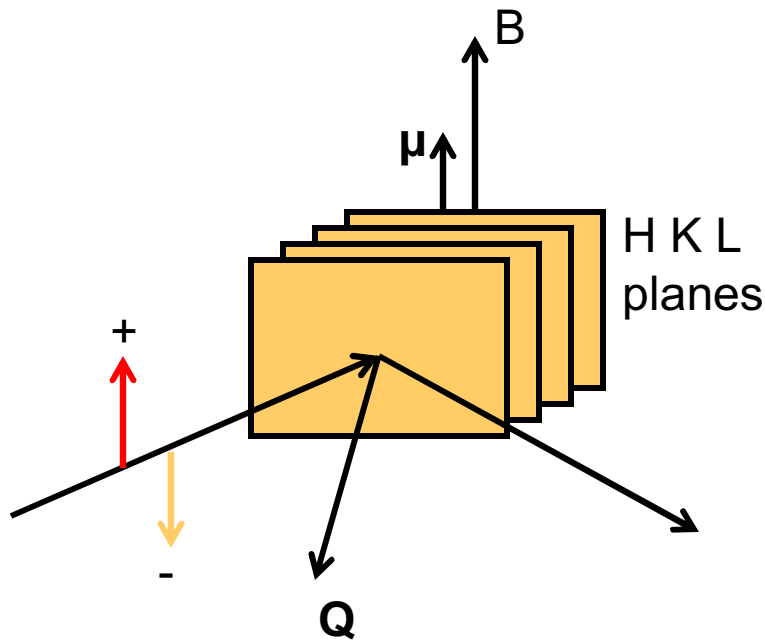


ILL/15-T magnet on IN22 (unpol. Neutrons)

Brightness & Fluxes for Neutron & X-ray Sources

| | <i>Brightness</i> ($s^{-1} m^{-2} ster^{-1}$) | <i>dE/E</i> (%) | <i>Divergence</i> ($mrad^2$) | <i>Flux</i> ($s^{-1} m^{-2}$) |
|-----------------|--|--------------------|-----------------------------------|------------------------------------|
| Neutrons | 10^{15} | 2 | 10 x 10 | 10^{11} |
| Rotating Anode | 10^{16} | 3 | 0.5 x 10 | 5×10^{10} |
| Bending Magnet | 10^{24} | 0.01 | 0.1 x 5 | 5×10^{17} |
| Wiggler | 10^{26} | 0.01 | 0.1 x 1 | 10^{19} |
| Undulator (APS) | 10^{33} | 0.01 | 0.01 x 0.1 | 10^{24} |

Reflected Intensity $I_{\pm}(\mathbf{Q}) = F_N(\mathbf{Q}) \pm 2F_M(\mathbf{Q})F_N(\mathbf{Q}) + F_M(\mathbf{Q})^2 = (F_N(\mathbf{Q}) \pm F_M(\mathbf{Q}))^2$



$\uparrow \uparrow \quad (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\mu}) = 1$
 Intensity $\sim (F_N + F_M)^2$

$\downarrow \uparrow \quad (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\mu}) = -1$
 Intensity $\sim (F_N - F_M)^2$

$$\text{Polarization} = (I_+ - I_-)/(I_+ + I_-) = \pm 2F_N(\mathbf{Q}) \cdot F_M(\mathbf{Q})/[F_N(\mathbf{Q}) - F_M(\mathbf{Q})]^2$$

The Nobel Prize in Physics 1994

Scientists who are as good as dead are still alive

The Royal Swedish Academy of Sciences has awarded the 1994 Nobel Prize in Physics for pioneering contributions to the development of neutron scattering techniques for studies of condensed matter.

Ulf G. Eriksson, Mikko M. Salonen, and Peter D. de Gennes for an experiment of neutron scattering.



S Small crystals of cobalt containing 1% of atoms with a charge different without being strongly ordered.

A diffraction pattern is observed when a beam of neutrons strikes a crystal. From the spacing of light diffraction spots in a detector, the positions of atoms in a crystal can be determined. The pattern also shows how atoms are arranged in a crystal. Neutrons are scattered by magnetic atoms. Small size makes it difficult to determine the structure of a crystal.



Neutrons are used to study the structure of a crystal. The neutrons are scattered by the atoms in the crystal. The pattern of scattered neutrons is used to determine the structure of the crystal.

Neutrons reveal structure and dynamics

Neutrons show where atoms are.

Neutrons show what atoms do.



B Neutrons are used to study the structure of a crystal. The neutrons are scattered by the atoms in the crystal. The pattern of scattered neutrons is used to determine the structure of the crystal.

Neutrons are used to study the structure of a crystal. The neutrons are scattered by the atoms in the crystal. The pattern of scattered neutrons is used to determine the structure of the crystal.

Neutrons are used to study the structure of a crystal. The neutrons are scattered by the atoms in the crystal. The pattern of scattered neutrons is used to determine the structure of the crystal.

Neutrons are used to study the structure of a crystal. The neutrons are scattered by the atoms in the crystal. The pattern of scattered neutrons is used to determine the structure of the crystal.

Neutrons are used to study the structure of a crystal. The neutrons are scattered by the atoms in the crystal. The pattern of scattered neutrons is used to determine the structure of the crystal.

Neutrons are used to study the structure of a crystal. The neutrons are scattered by the atoms in the crystal. The pattern of scattered neutrons is used to determine the structure of the crystal.

Neutrons are used to study the structure of a crystal. The neutrons are scattered by the atoms in the crystal. The pattern of scattered neutrons is used to determine the structure of the crystal.



The Royal Swedish Academy of Sciences has awarded the 1994 Nobel Prize in Physics for pioneering contributions to the development of neutron scattering techniques for studies of condensed matter.

Формулы для разрешения

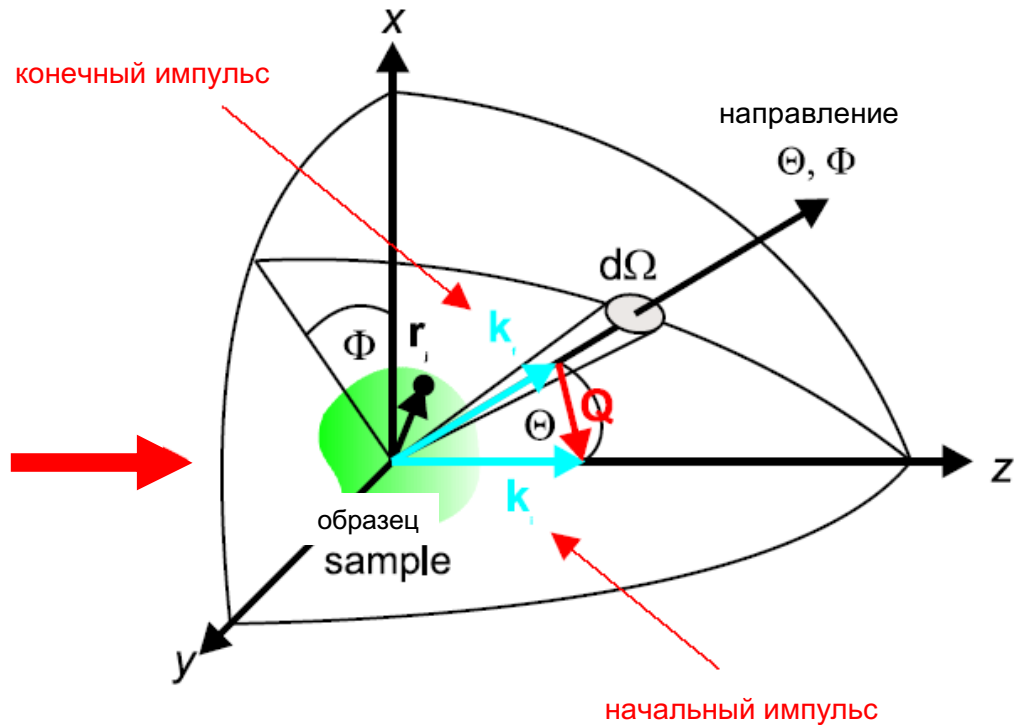
Прямая геометрия

$$\frac{\Delta \hbar \omega}{E_i} = \left[\left\{ \frac{2\Delta t_c}{t_c} \left(1 + \frac{L_1 + L_3}{L_2} \left(1 - \frac{\hbar \omega}{E_i} \right)^{3/2} \right) \right\}^2 + \left\{ 2 \frac{\Delta t_m}{t_c} \left(1 + \frac{L_3}{L_2} \left(1 - \frac{\hbar \omega}{E_i} \right)^{3/2} \right) \right\}^2 \right]^{1/2}$$

Обратная геометрия

$$\frac{\Delta \hbar \omega}{E_f} = 2 \left[\left(\frac{\delta}{L_1} \right)^2 + \left\{ \frac{E_f}{E_i} \cot \theta_A \Delta \theta_A \left(1 + \frac{L_2}{L_1} \left(\frac{E_i}{E_f} \right)^{3/2} \right) \right\}^2 \right]^{1/2}$$

Нейтронное рассеяние. Основные параметры.



Законы сохранения

''' ''' '''

$$Q = k_i - k_f$$

$$\hbar\omega = E_i - E_f$$

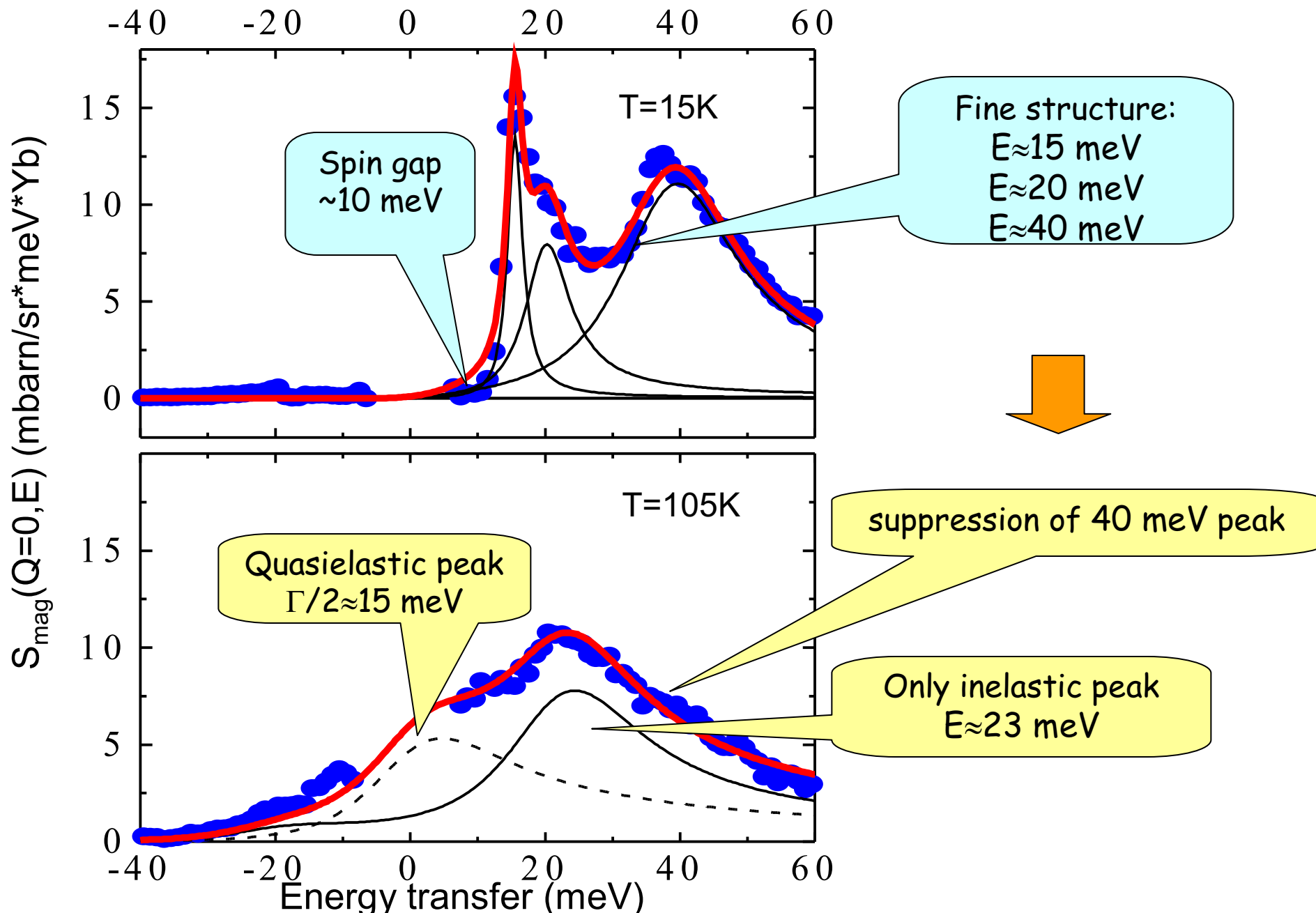
Полное сечение рассеяния

$$\sigma = \int d\Omega \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \int d\Omega \int dE_f \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} \right)$$

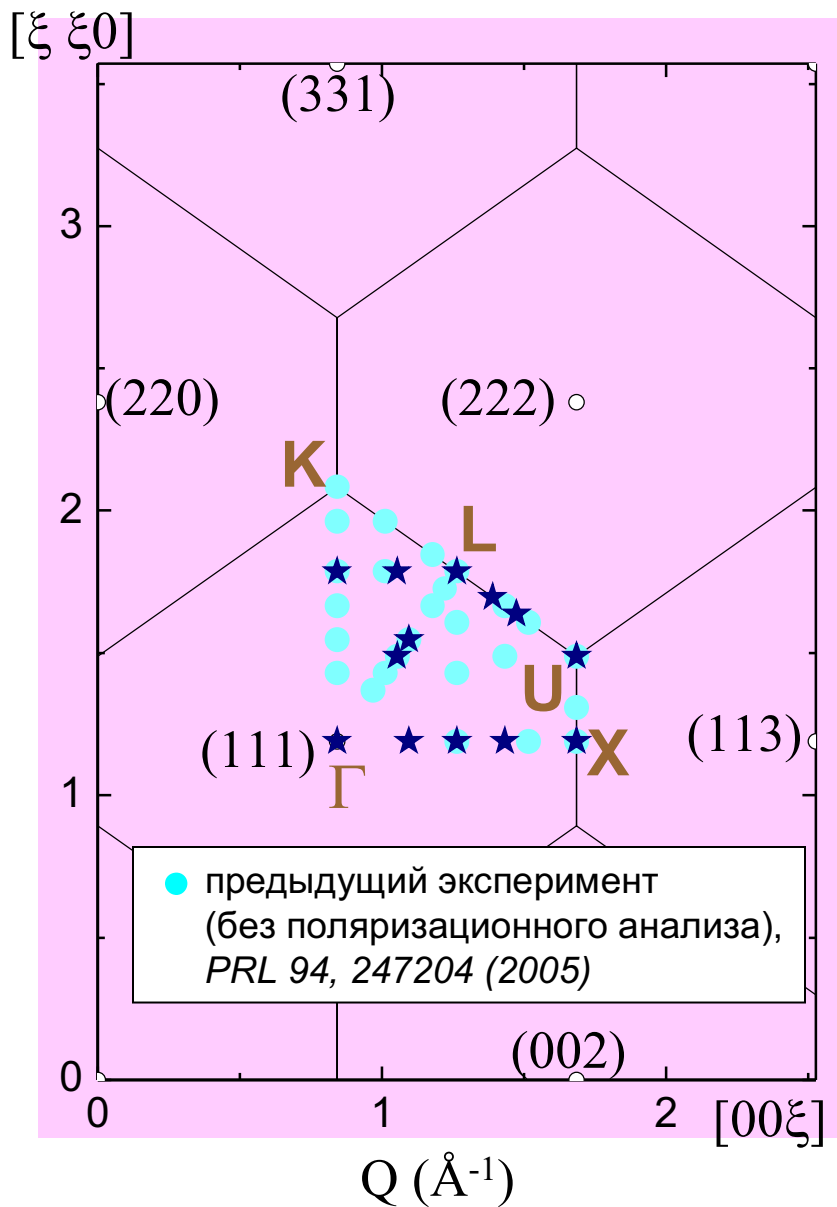
дважды дифференциальное сечение рассеяния

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{k_f}{k_i} \sum_{\lambda_i} p_{\lambda_i} \sum_{\lambda_f} |\langle \mathbf{k}_f, \lambda_f | \check{U} | \mathbf{k}_i, \lambda_i \rangle|^2 \delta(E_{\lambda_i} - E_{\lambda_f} + \hbar\omega)$$

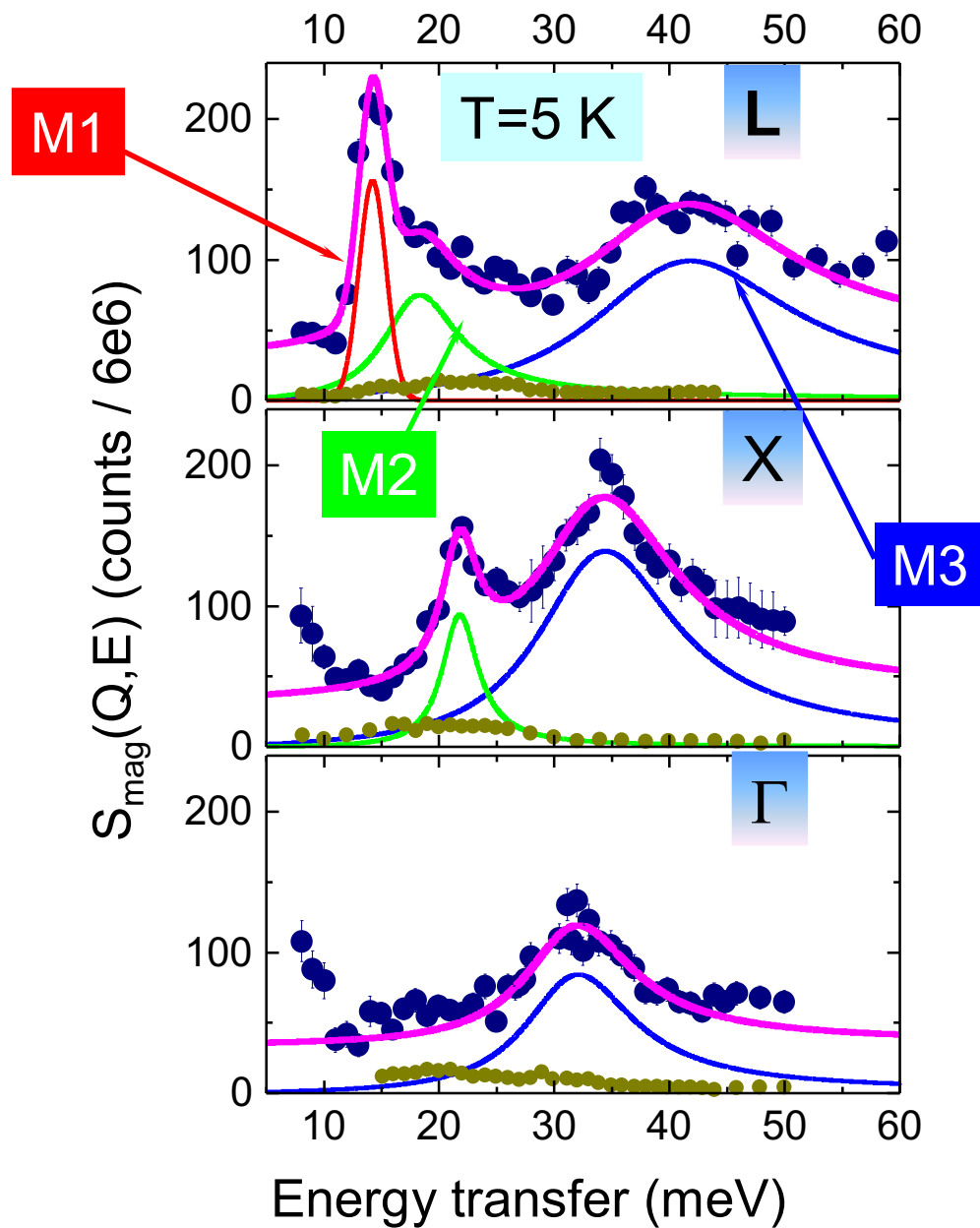
Спектр магнитного рассеяния нейтронов на порошке YbV_{12}



Исследуемая область обратного пространства



Спектры магнитных возбуждений монокристалла YbV_{12}



Заключение

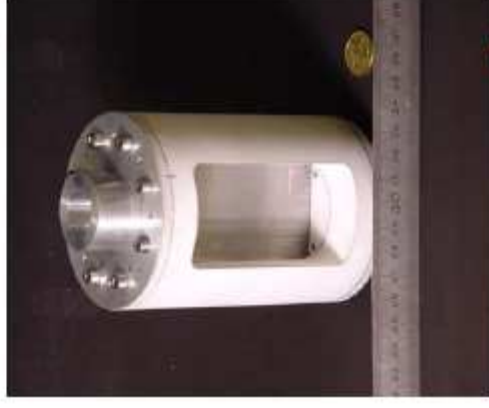
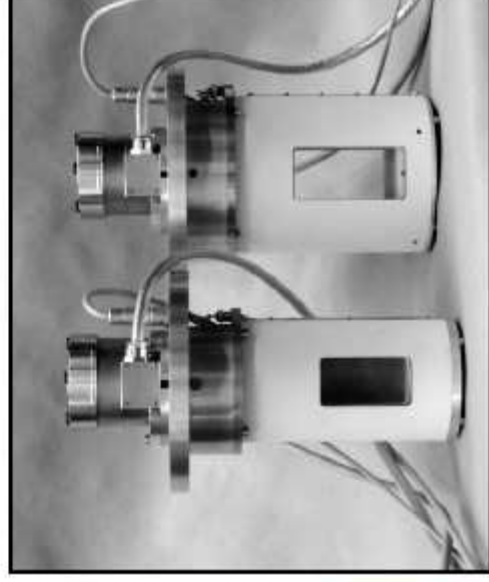
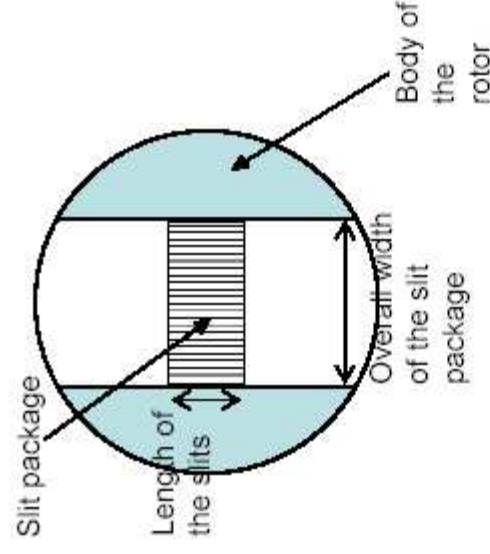
Спектрометры по времени пролета в «прямой геометрии» на импульсном источнике имеют ряд определенных преимуществ по отношению к спектрометрам того же класса на стационарных источниках :

- *более низкий фон при эквивалентной эффективной мощности нейтронного источника («испарительная» природа нейтронов, скважность импульса)*
- *более широкий диапазон начальных энергий нейтронов, более высокое разрешение (особенно, в случае «компрессии» длительности протонного импульса)*
- *конструктивно проще...*

Они имеют свою «нишу» по характеру решаемых физических задач и по отношению к традиционным для импульсных источников спектрометрам «обратной геометрии»

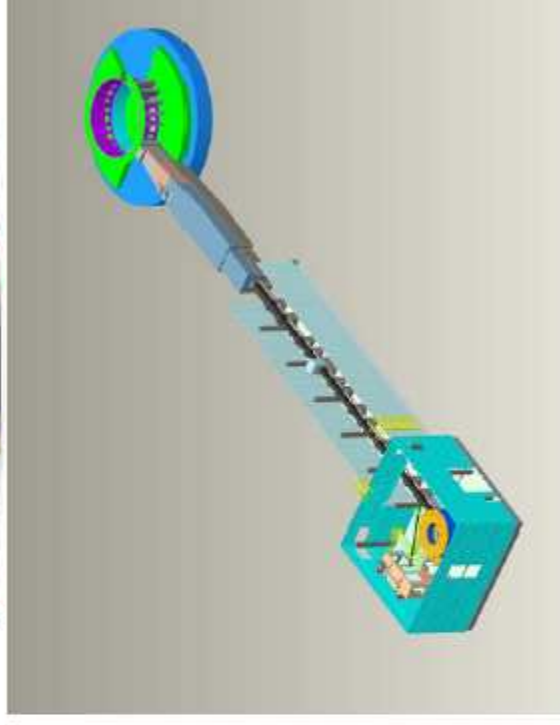
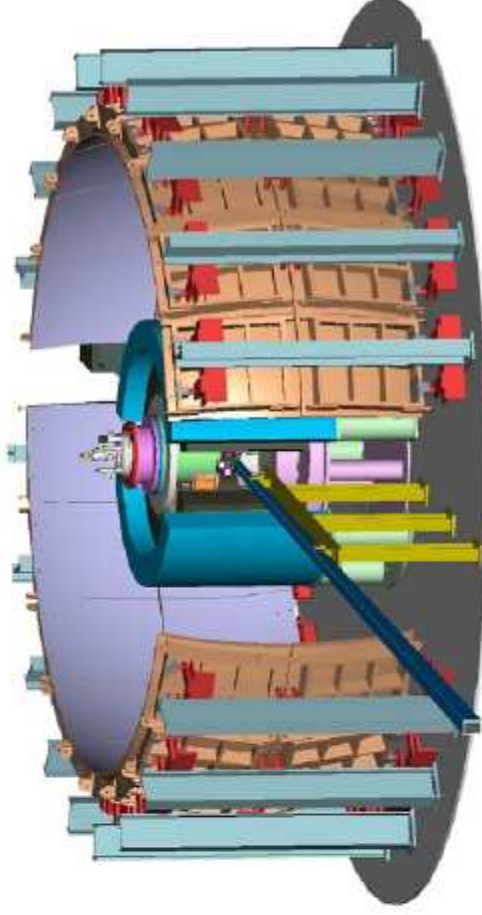
Fermi Choppers – ARCS, SEQUOIA, HYSPEC

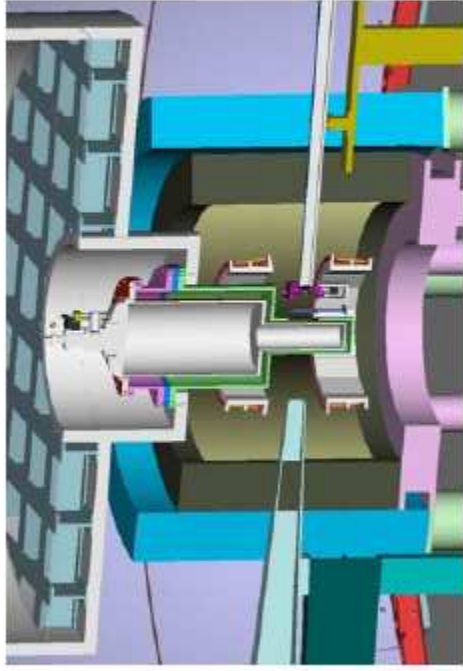
- Rotating cylinders containing “slit” packages.
- Parallel to beam slits are “open” and close as cylinder rotates
- For ARCS/SEQUOIA long curved Al/B slit package
- For HYSPEC short straight Al/Gd slit package
- Open time for slit package is phased to T0
- Frequency 60Hz → 600Hz



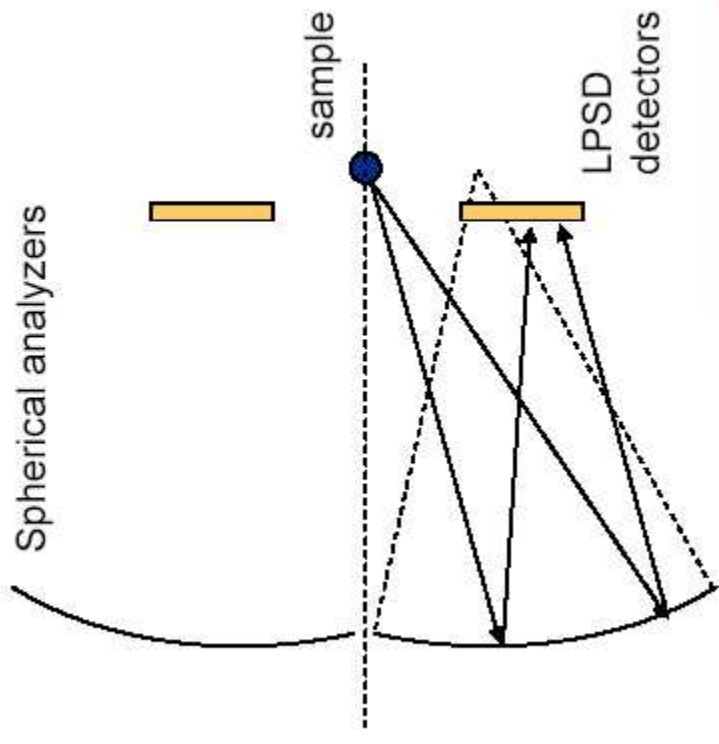
BASIS – backscattering spectrometer

- Source/Moderator
 - Decoupled supercritical Hydrogen, centerline poisoned
- Incident Flight Path - 84 m moderator-sample position
 - Curved Guide: 10 cm wide x 12 cm tall, 1000 m radius of curvature, line-of-sight at 31 m
 - Straight Guide: 10 cm wide x 12 cm tall
 - Converging Funnel exit: 3.25 cm x 3.25 cm, stops 27.5 cm from sample
- Chopper System - 3 bandwidth/frame overlap choppers
- Sample – nominal dimensions 3 x 3 cm²
- Radial Collimator – restricts analyzer view of the sample, Final Flight Path - 2.5 m sample - analyzer, ~ 2 m analyzer – detector
- Detector Choice – ³He LPSD tubes, peak count rate (elastic, 30% scatterer) 4000 counts/cm² /sec
- Analyzer Crystals
Si (111): $\lambda_4 = 6.267 \text{ \AA}$, $\delta d/d \sim 3.5 \times 10^{-4}$, 2.03 ster, 12.5 m², bandwidth 0.785 \AA

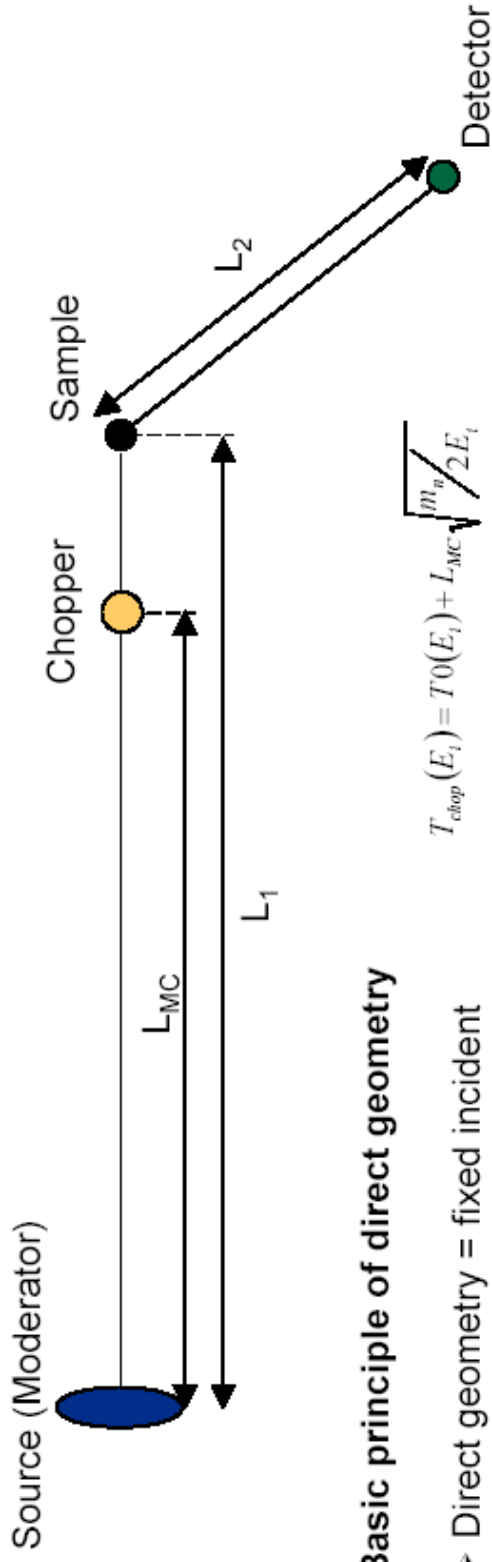




- Neutrons are backscattered from the spherical analyzers into the pixels on the LPSD's
- Because spherical reflection angles (and hence also E_f 's) differ pixel to pixel
- Need to do the indirect geometry ToF to energy transfer on a pixel to pixel basis.



DIRECT GEOMETRY



Basic principle of direct geometry

- Direct geometry = fixed incident energy E_i
- The chopper opens at time T_{chop} to let one energy E_i pass through
- At the sample neutrons with energy E_i transfer energy E to the sample and emerge with final energy E_f
- After scattering neutrons are measured in the detector at time $T_{detector}$.

$$T_{chop}(E_i) = T_0(E_i) + L_{MC} \sqrt{\frac{m_n}{2E_i}}$$

$$T_{detector} = T_0(E_i) + L_1 \sqrt{\frac{m_n}{2E_i}} + L_2 \sqrt{\frac{m_n}{2E_f}}$$

$$E_f = \frac{1}{2} m_n \left(\frac{L_2}{T_{detector} - T_0(E_i) - L_1 \sqrt{\frac{m_n}{2E_i}}} \right)^2$$

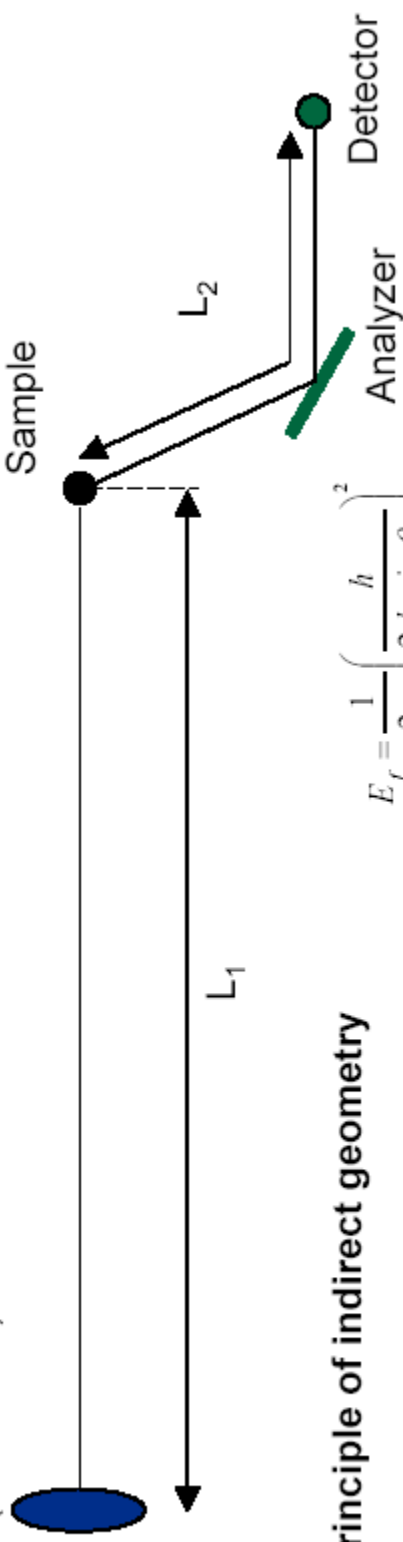
$$E = E_i - E_f$$

$$= E_i - \frac{1}{2} m_n \left(\frac{L_2}{T_{detector} - T_0(E_i) - L_1 \sqrt{\frac{m_n}{2E_i}}} \right)^2$$



INDIRECT GEOMETRY

Source (Moderator)



Basic principle of indirect geometry

- Indirect geometry = fixed final energy E_f
- Analyzer crystal defines the final energy via Bragg's law
- Because detected neutrons have a known energy, calculate and subtract final flight time after sample
- Hence obtain the incident flight time and E_i and consequently $E = E_i - E_f$

$$E_f = \frac{1}{2m_n} \left(\frac{h}{2d_A \sin \theta_A} \right)^2$$

$$T_{\text{detector}} = T_0(E_i) + L_1 \sqrt{\frac{m_n}{2E_i}} + L_2 \sqrt{\frac{m_n}{2E_f}}$$

$$E_i = \frac{1}{2} m_n \left(\frac{L_1}{T_{\text{detector}} - T_0(E_i) - L_2 \sqrt{\frac{m_n}{2E_f}}} \right)^2$$

$$E = E_i - E_f$$

$$= \frac{1}{2} m_n \left(\frac{L_1}{T_{\text{detector}} - T_0(E_i) - L_2 \sqrt{\frac{m_n}{2E_f}}} \right)^2 - E_f$$

Resolution (qualitative – not M.C.)

τ_M – source (moderator) pulse width for E_I

Δt_C – burst time for Fermi chopper

Primary spectrometer

$$\frac{\Delta E_I}{E_I} = 2 \frac{\Delta T_I}{T_I} = 2 \frac{\sqrt{(\tau_M)^2 + (\Delta t_C)^2}}{T_{MC}} = \frac{\sqrt{(\tau_M)^2 + (\Delta t_C)^2}}{1142 L_{MC}} \sqrt{E_I}$$

- > Low E_I – τ_M dominates
- > High E_I – Δt_C dominates

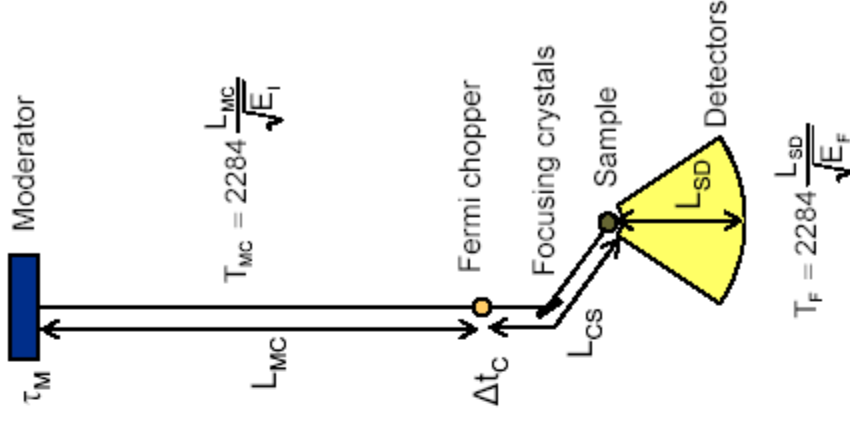
Secondary spectrometer

$$\frac{\Delta E_F}{E_F} = 2 \frac{\Delta T_S}{T_F} = \frac{\Delta t_C}{1142 L_{SD}} \left[1 + \left(\frac{L_{CS}}{L_{MC}} \right)^2 \left(1 + \frac{\tau_M^2}{\Delta t_C^2} \right) \right]^{1/2} \sqrt{E_F}$$

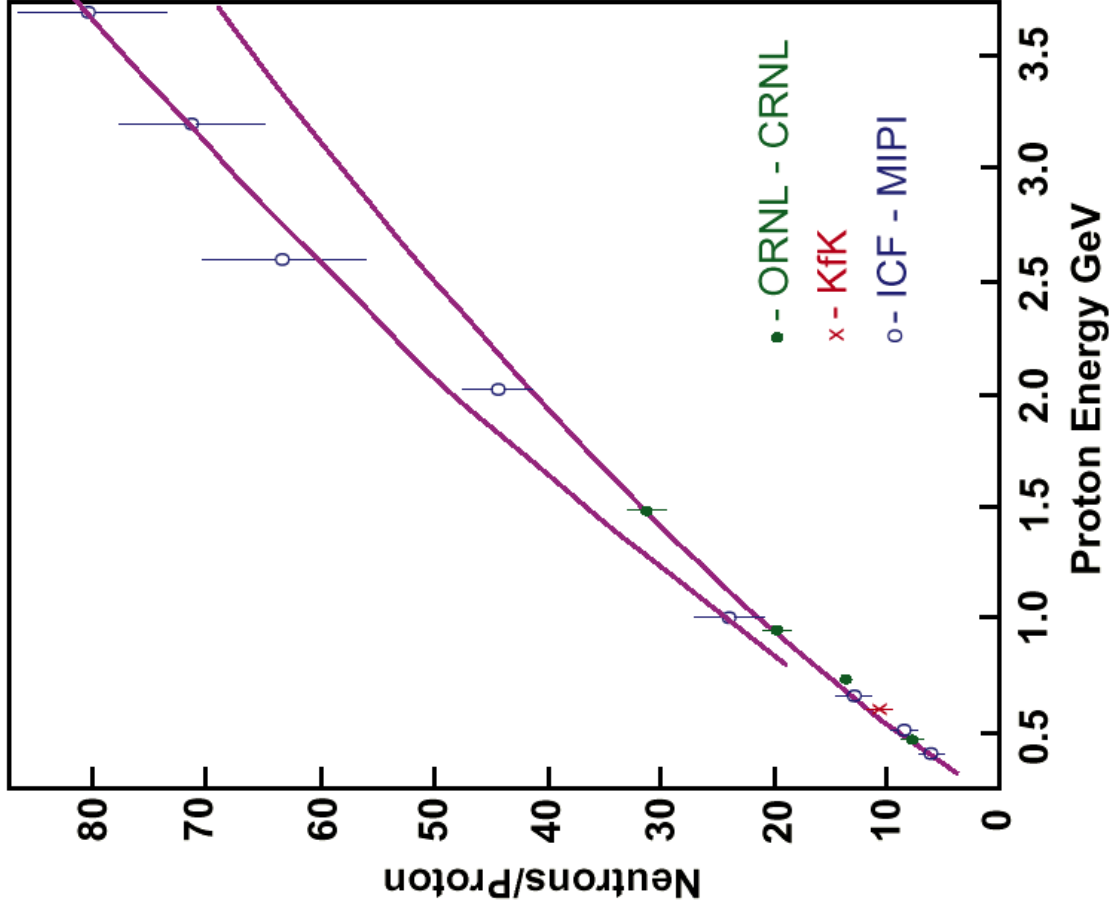


Spreading of pulse from chopper to sample

Secondary resolution governed by ratio of burst time Δt_C to distance L_{SD}



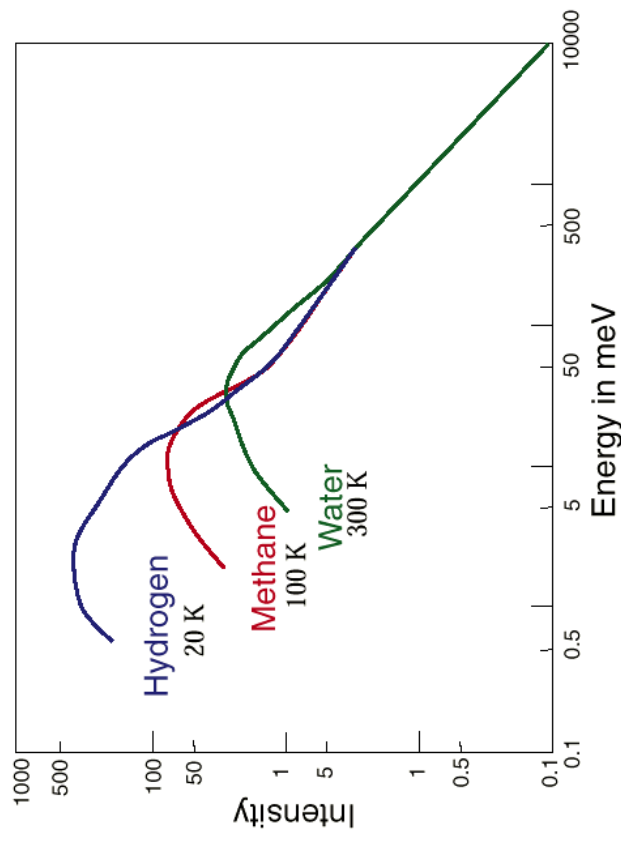
Neutron Production versus Proton Energy

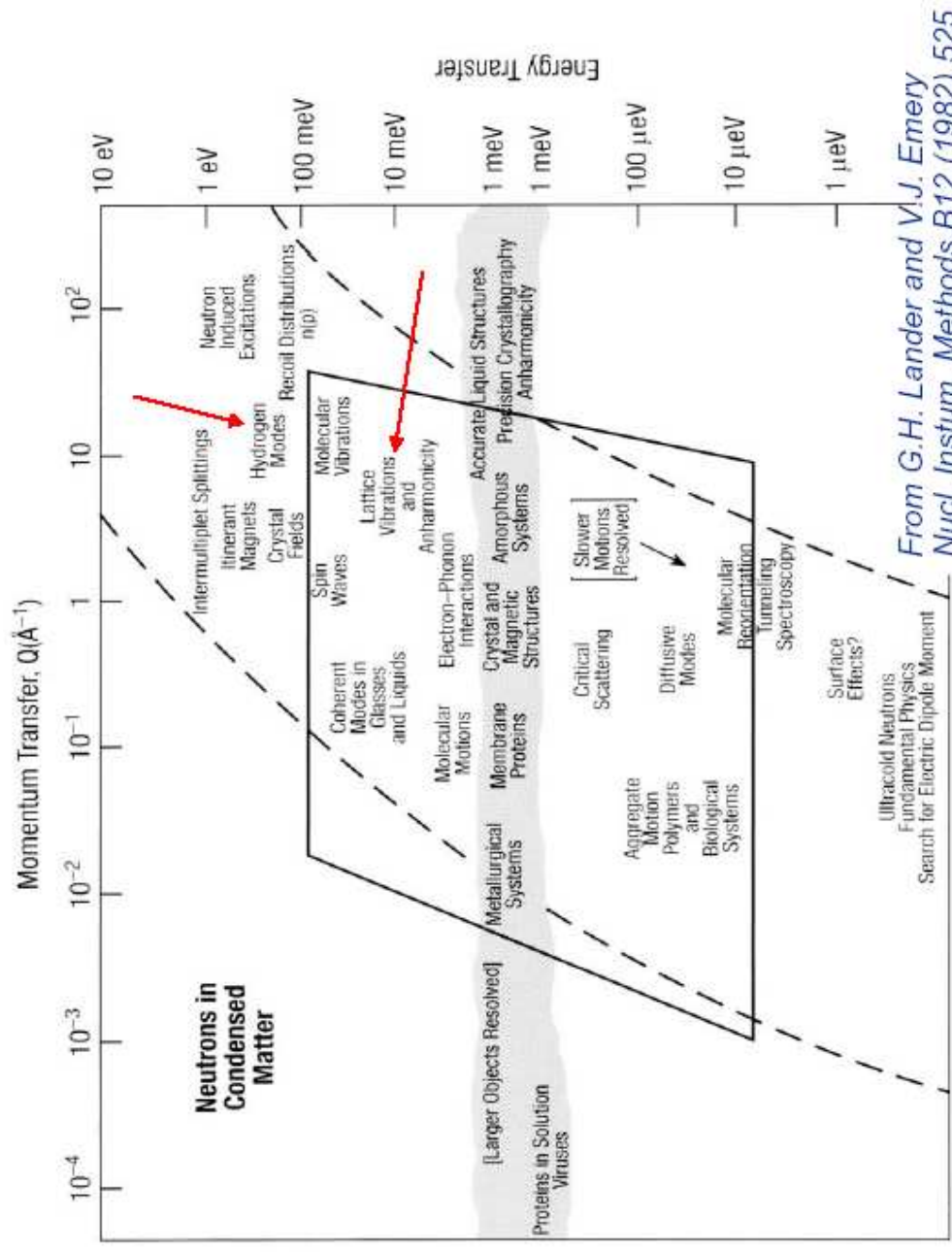


Spectra from different moderators

Maxwellian Distribution

$$P(E) = P_0 E/(kT)^2 \exp(-E/kT)$$





From G.H. Lander and V.J. Emery
Nucl. Instrum. Methods B12 (1982) 525

Некоторые основные формулы для неупругого рассеяния нейтронов

В общем случае:
$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \propto \frac{k_f}{k_0} S(\vec{Q}, \omega)$$

Неупругое рассеяние на ядрах (фононы):
j-ветвь

$$S_j(\vec{Q}, \omega) = \left| P_j(\vec{Q}, \vec{q}) \right|^2 \frac{\omega}{1 - e^{-\omega/T}} \frac{\delta(\omega \pm \omega_j(\vec{q}))}{\omega^2}$$

неупругий структурный фактор

$$P_j = \sum_d^{\text{un. cell}} \frac{\mathbf{b}_d}{\sqrt{M_d}} \left[\vec{Q} \cdot \vec{e}_d^j(\vec{q}) \right] e^{i\vec{Q} \cdot \vec{d}} e^{-W_d(\vec{Q})}$$

Усреднение по всем \vec{q} ZB дает плотность фононных состояний $G(\omega)$

Магнитное рассеяние неполяризованных нейтронов:

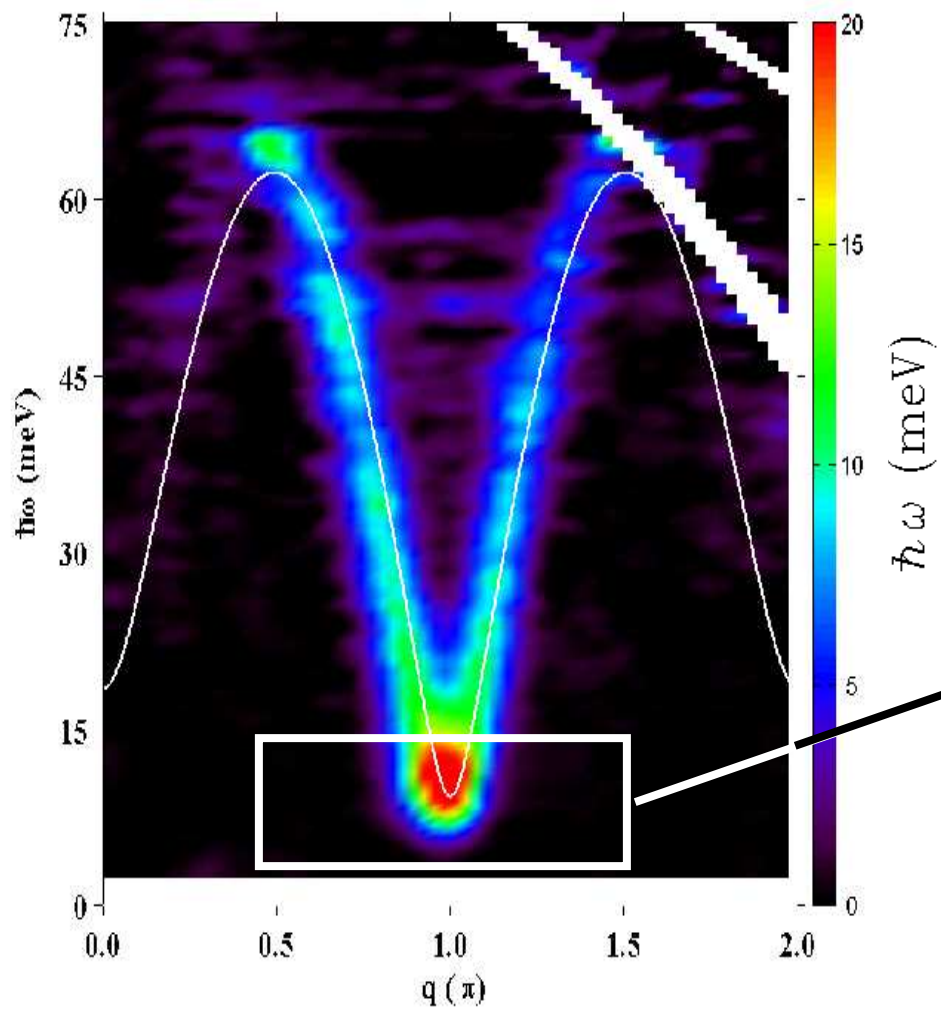
$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \left(\frac{\gamma e^2}{2m_e c^2} \right)^2 g^2 F^2(\vec{Q}) \frac{k_f}{k_0} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{Q}_\alpha \hat{Q}_\beta) S_{\alpha\beta}(\vec{Q}, \omega)$$

$$S_{\alpha\beta} = e^{-W(\vec{Q})} \left(\frac{N^{\alpha\beta}}{\pi} \right) \frac{1}{1 - e^{-\omega/T}} \left[\mathbf{m} \chi_{\alpha\beta}(\vec{Q}, \omega) \right] \quad \text{где} \quad \chi_{\alpha\beta} = J_\alpha / H_b \quad \text{линейный отклик на внешнее магнитное поле}$$

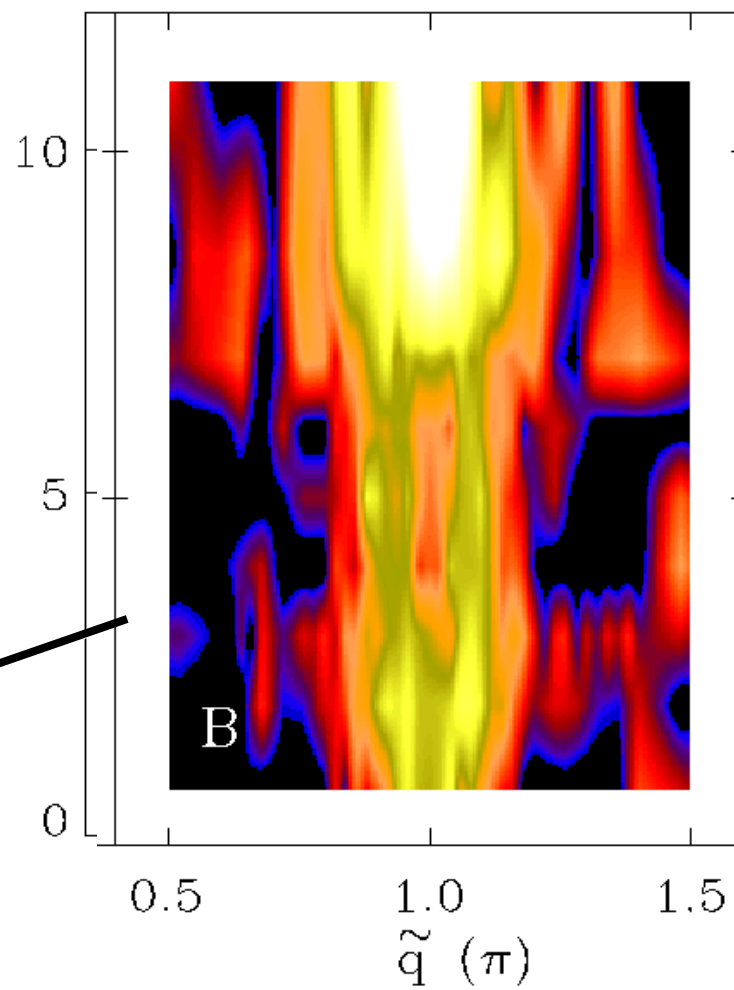
В случае локализованных моментов с эффектами кристаллического поля:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \left(\frac{\gamma e^2}{2m_e c^2} \right)^2 [gF(\vec{Q})]^2 \frac{k_f}{k_0} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{Q}_\alpha \hat{Q}_\beta) \sum_n \frac{g_n e^{-E_n/kT}}{\sum_i g_i e^{-E_i/kT}} \langle \Gamma_n^v | \mathbf{J}_\alpha | \Gamma_m^{v'} \rangle \langle \Gamma_m^{v'} | \mathbf{J}_\beta | \Gamma_n^v \rangle \delta(\omega + E_n - E_m)$$

TOF Data from MAPS/ISIS



TAS Data from NIST



Магнитное рассеяние нейтронов

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_f}\right)_{\text{mag}} = \frac{k_f}{k_i} \left(\gamma r_0 \frac{g}{2} F(\mathbf{Q})\right)^2 \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - \hat{Q}_\alpha \hat{Q}_\beta) S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega)$$

Функция рассеяния

$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \sum_{jj'} \langle S_{j'\alpha}(0) S_{j\beta}(t) \rangle \langle e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_{j'}(0)} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_j(t)} \rangle e^{-i\omega t} dt$$

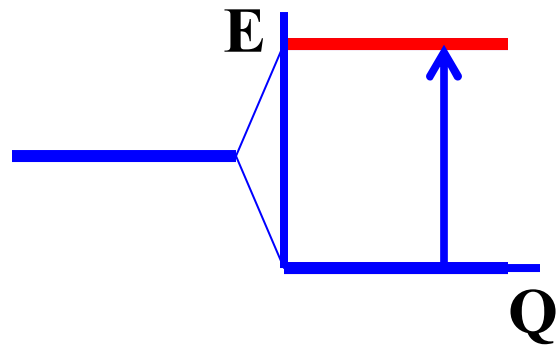
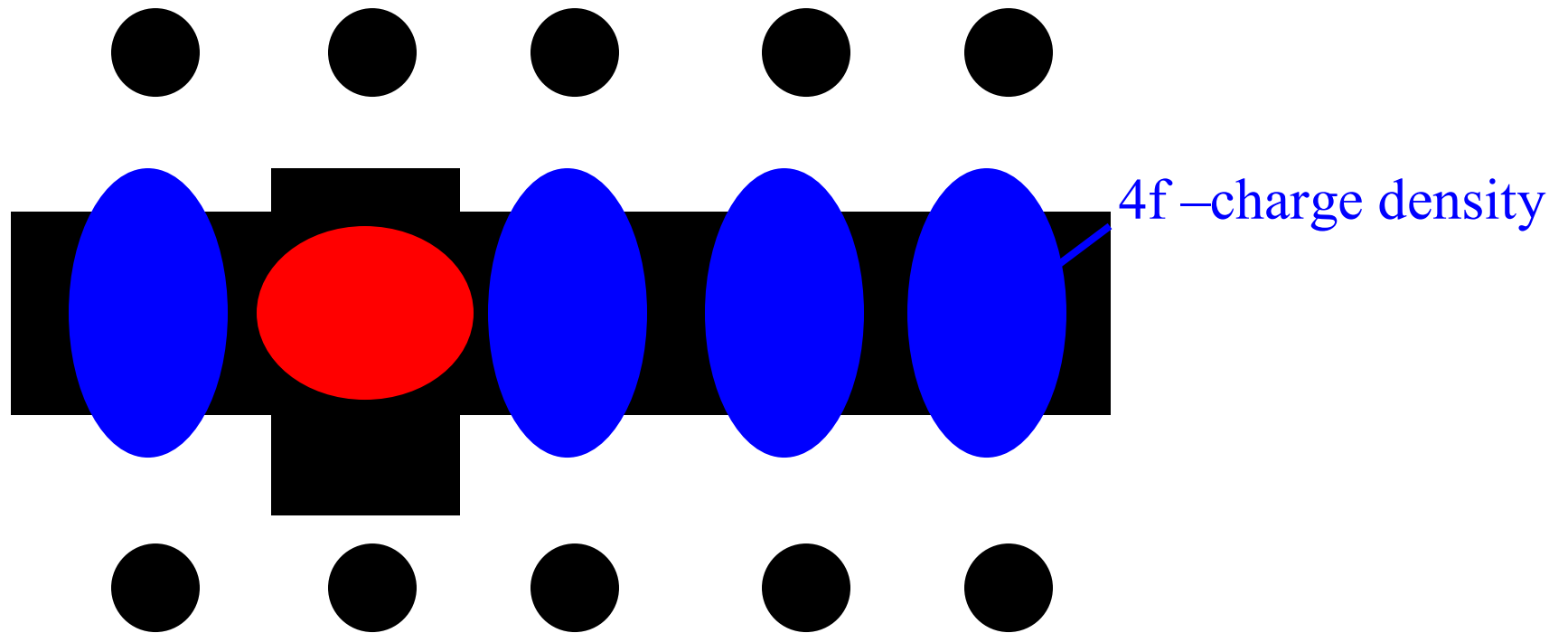
Магнитная парная корреляционная функция

$$\chi_q^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{(g\mu_B)^2}{N} \int dt e^{-i\omega t} \sum_{ll'} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l'})} \langle [S_l^\alpha(t), S_{l'}^\beta(0)] \rangle$$

Следствие флуктуационно-диссипационной теоремы

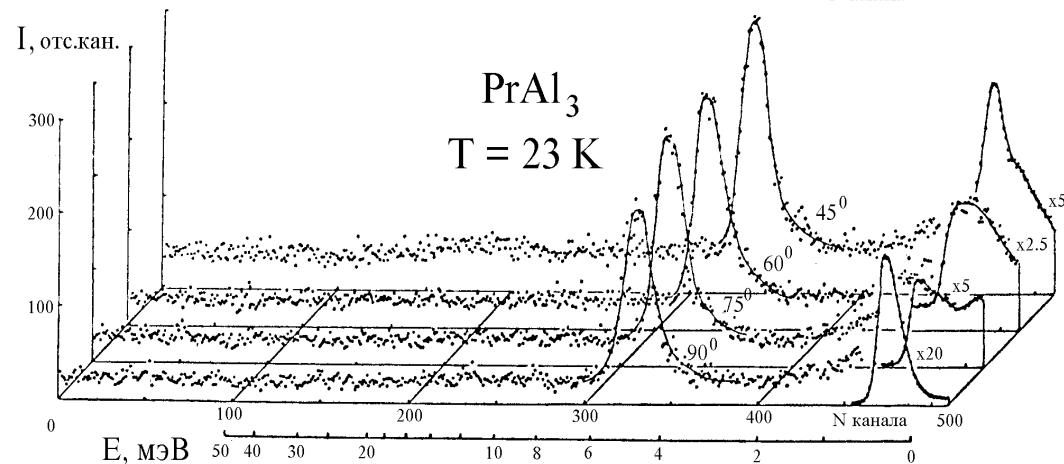
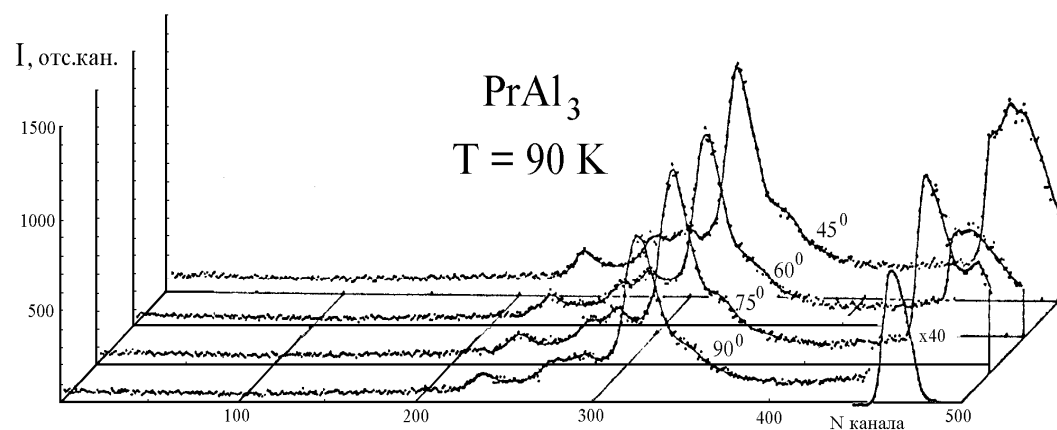
$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{\pi (1 - \exp(-\hbar\omega/k_B T))} \text{Im} \chi(\mathbf{Q}, \omega)$$

Movement of Charges - the Crystal Field Concept



$$\text{Hamiltonian } H_{cf} = \sum_{lm,i} B_l^m O_l^m (\mathbf{J}_i)$$

Кристаллическое поле в редкоземельных интерметаллидах



КЭП в металлах того же масштаба, что и в изоляторах

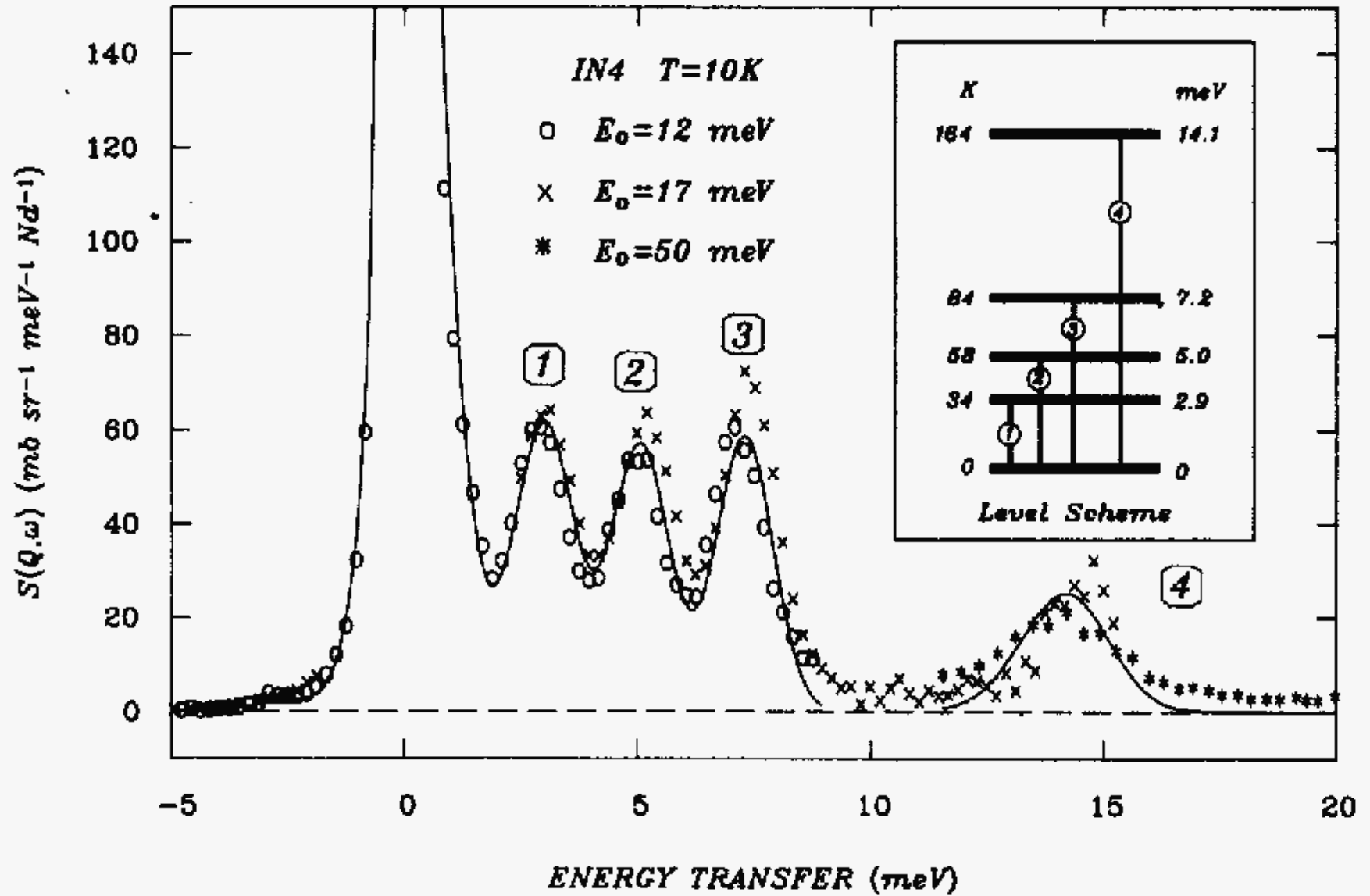
Симметрия КЭП соответствует локальному окружению РЗ иона, КЭП весьма чувствительно к зарядовым и топологическим изменениям в локальном окружении

Кристаллическое окружение и электроны проводимости вносят соизмеримый вклад в потенциал КЭП на РЗ ионе

ИАЭ, ОИЯИ, 70-80-е г.

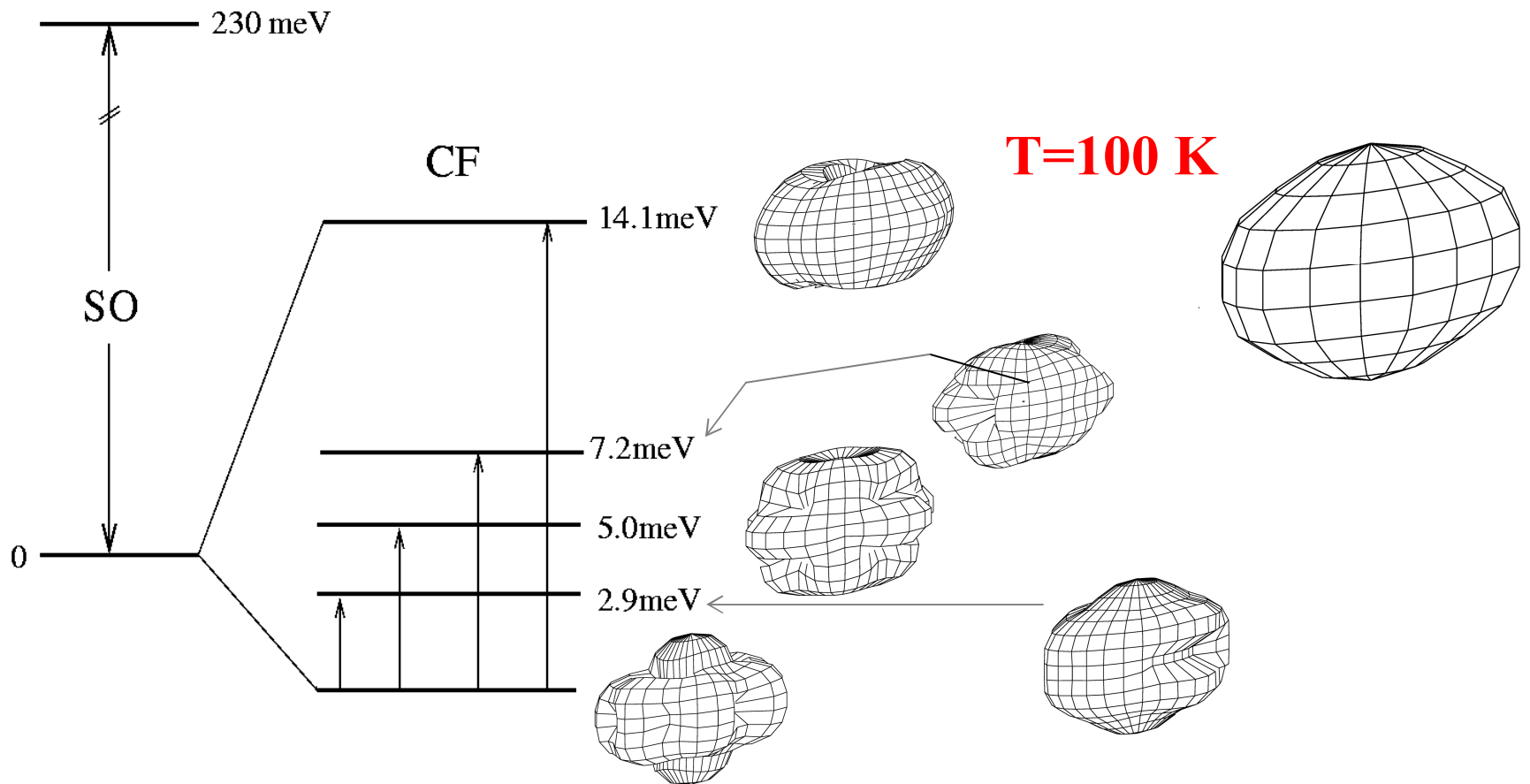
Первые нейтронные спектры по времени пролета, полученные на ИРТ-М (1973...1976 г.г)

NdCu₂ – Crystal Field Excitations



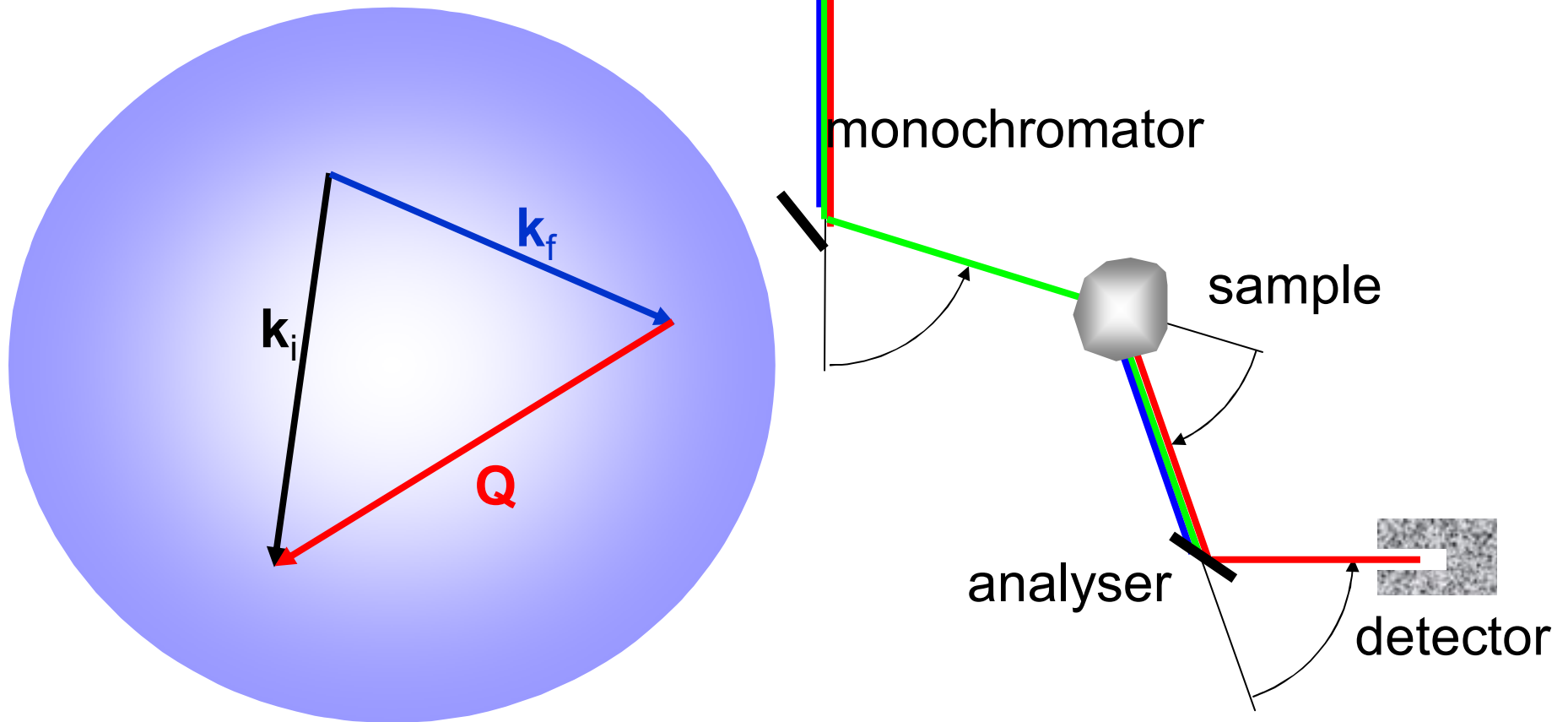
NdCu₂ - 4f Charge Density

$$\langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle = |R_{4f}(r)|^2 \sum_{\substack{n=0,2,4,6 \\ m=0,\dots,n}} ec_{nm} \theta_n \langle O_n^m(\mathbf{J}) \rangle_T Z_{nm}(\Omega)$$



Three axes spectroscopy

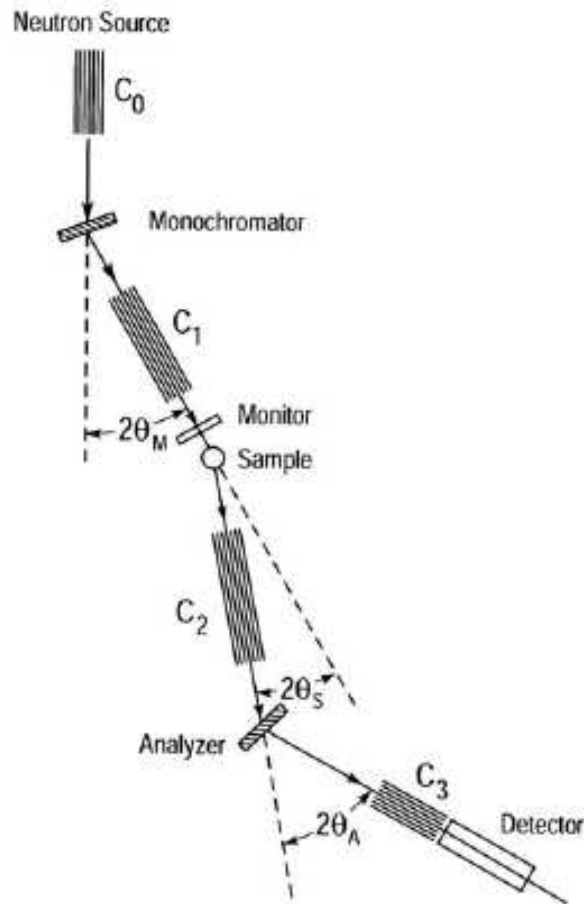
The three axes spectrometer is the direct visualisation of the scattering triangle:



$$\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f \quad \omega = E_i - E_f$$

Исходная идея

Brockhouse (1961)



Variable k_i and k_f :

Θ_M Monochromator scattering angle

Θ_S Sample scattering angle

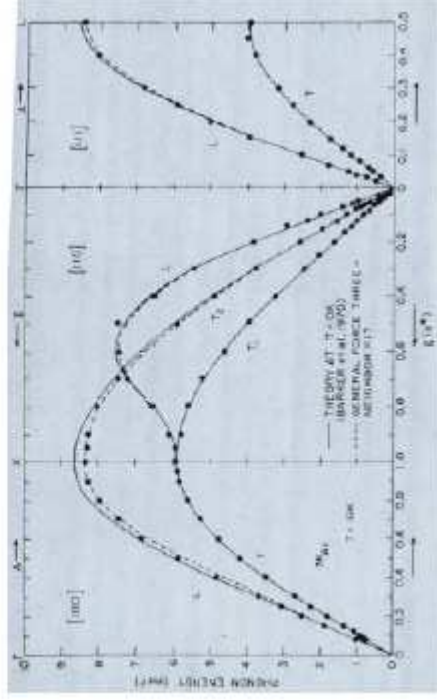
Θ_A Analyser scattering angle

$$E_i = \hbar^2 k_i^2 / 2m \quad k_i = G_M(hkl) / 2 \sin \Theta_M$$

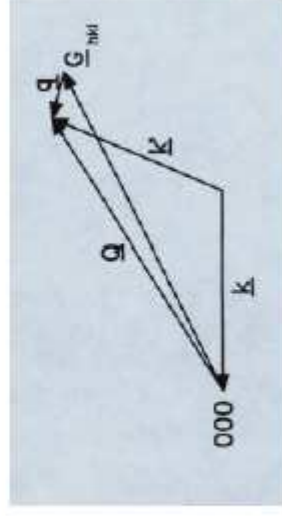
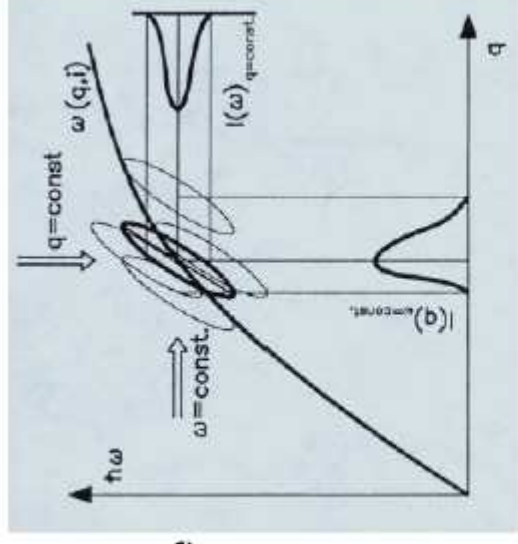
$$E_f = \hbar^2 k_f^2 / 2m \quad k_f = G_A(hkl) / 2 \sin \Theta_A$$

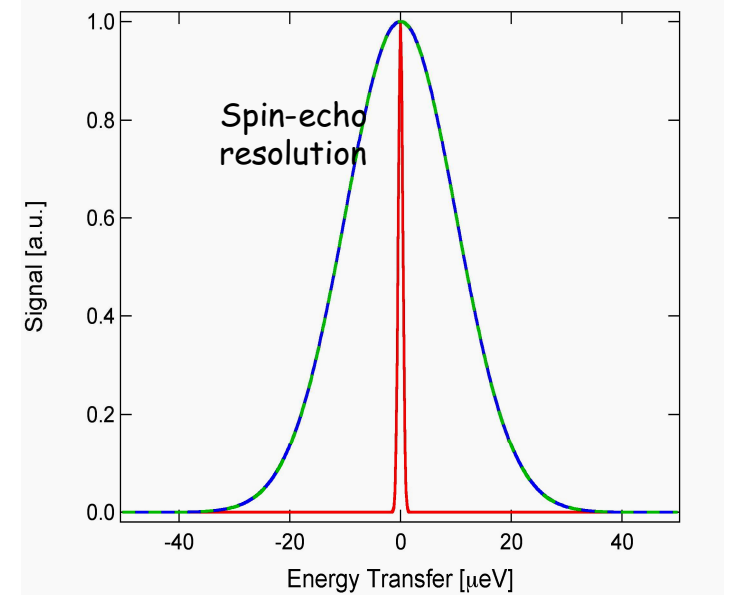
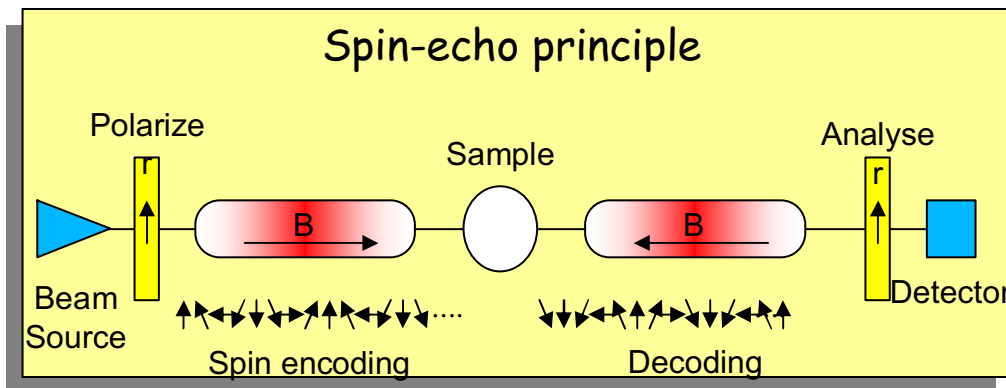
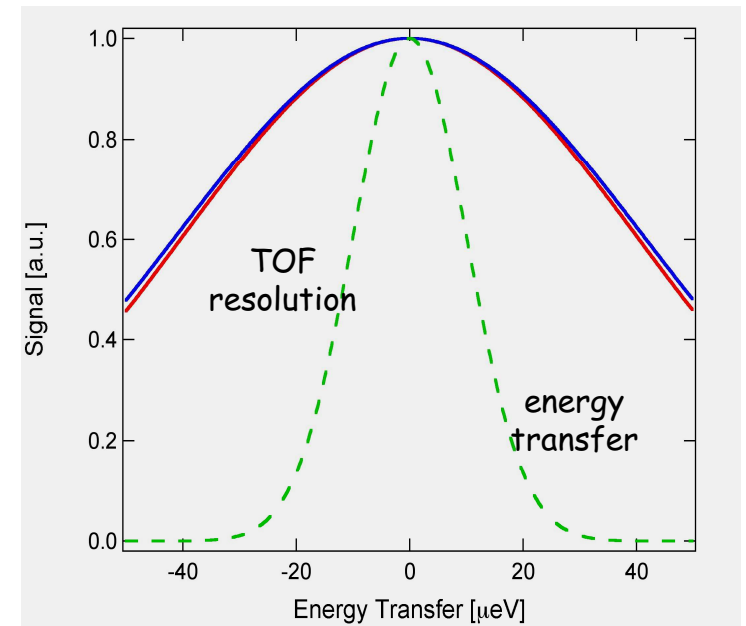
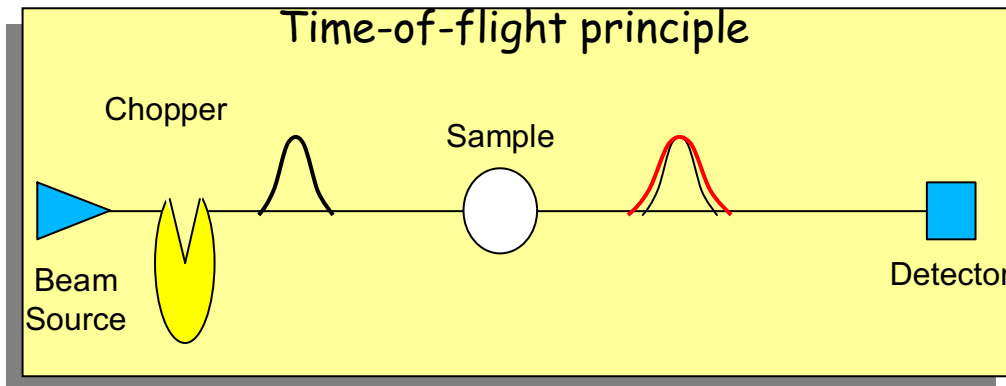
from G. Shirane, S.M. Shapiro, J.M. Tranquada
"Neutron Scattering with Triple-Axis Spectrometer"

- Point by point measurement in (Q, E) space
- Usually keep either k_i or k_F fixed
- Choose Brillouin zone (i.e. G) to maximize scattering cross section for phonons
- Scan usually either at constant- Q (Brockhouse invention) or constant- E



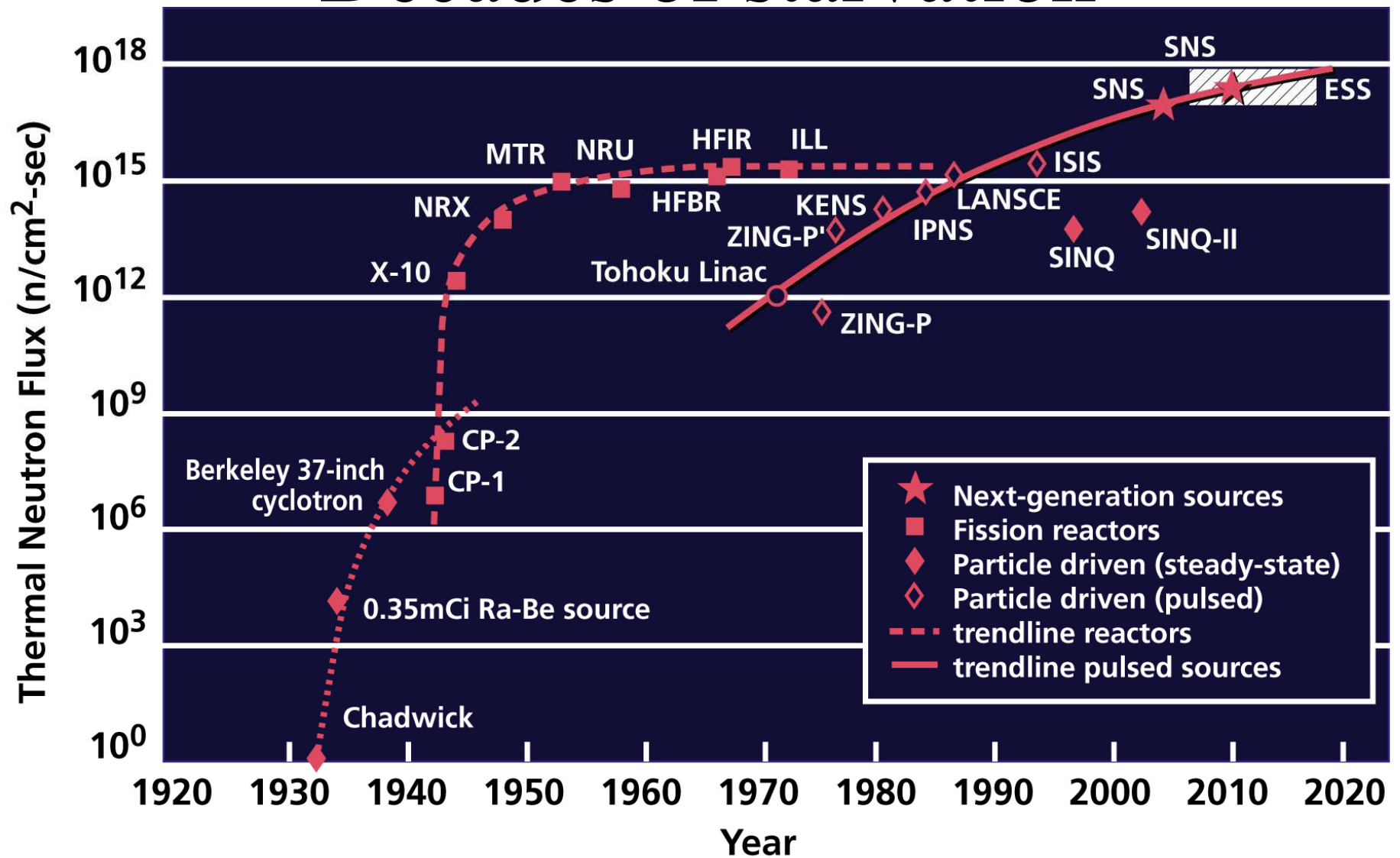
Phonon dispersion of ^{36}Ar



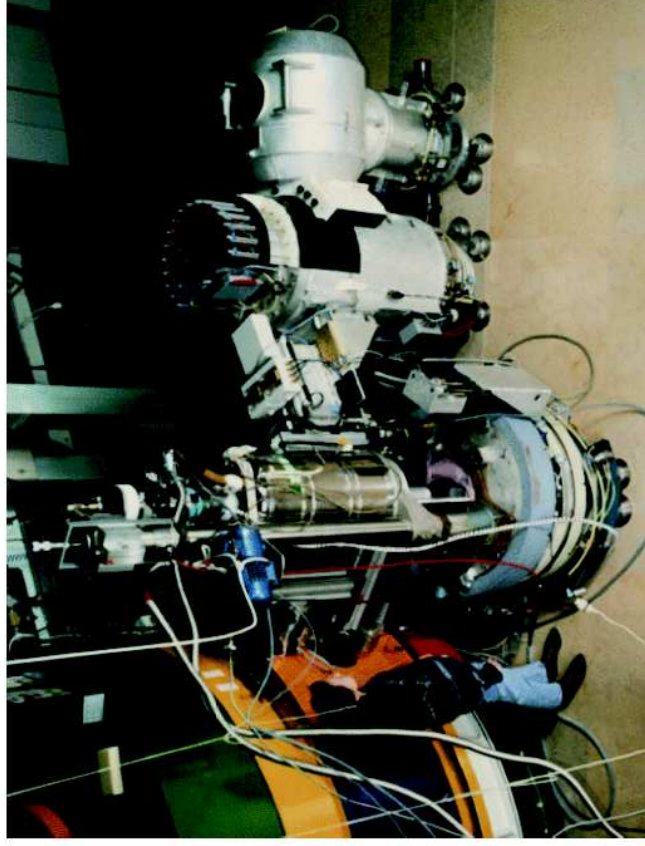


SE resolution
independent
of velocity
distribution!!!

Decades of starvation



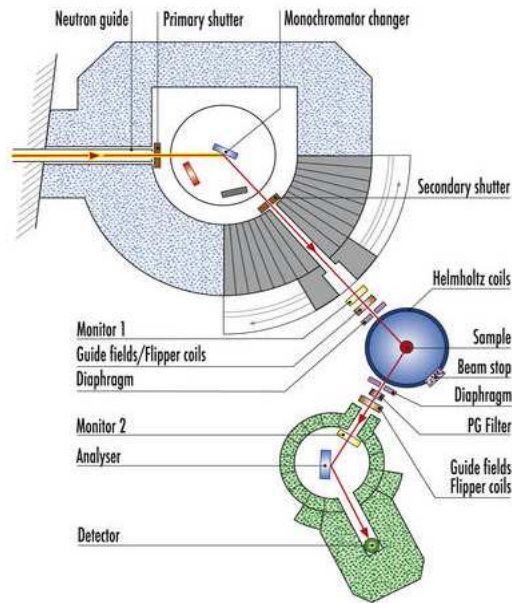
Triple Axis Spectrometer



- Supreme instrument at a reactor to measure excitations for 40 years
- Every research reactor has one or a suite of TAS optimised for different energy ranges
- Design principles essentially unchanged
- Constantly evolves as technology improves

IN20 (ILL)

Трехосный спектрометр на нейтроноводе IN22



Applications

- Study of magnetic and structural excitation spectra on single crystals with neutrons of incident energies in the range 5-100 meV.
- Longitudinal and spherical polarimetry of inelastic contributions
- Measurements of inelastic nuclear-magnetic interference terms.
- Polarized neutron inelastic scattering under high magnetic field (up to 12 T).
- Measurements of magnetic and structural excitation lifetimes.

Selected examples

One of the main interests of polarized neutrons and full polarization analysis is to allow a clear separation of magnetic contributions from the nuclear (structural) ones. An example of such a separation is shown in Fig.1 for the high- T_c superconducting cuprate $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$. The incident polarization is kept parallel to the scattering vector, in such a manner that the magnetic fluctuations contribute only to the spin-flip (SF) channel and the structural excitations to the non-spin-flip (NSF) channel. These results demonstrate unambiguously the magnetic nature of the resonant peak at 41 meV and the existence of a spin gap around 25 meV.

Another example is shown in Fig. 2 for the $S=1/2$ spin ladder system $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. By measuring the SF contribution in the configuration for which the incident polarisation is maintained parallel to the scattering vector, it is possible to determine directly the magnetic response of copper ions as a function of the temperature.

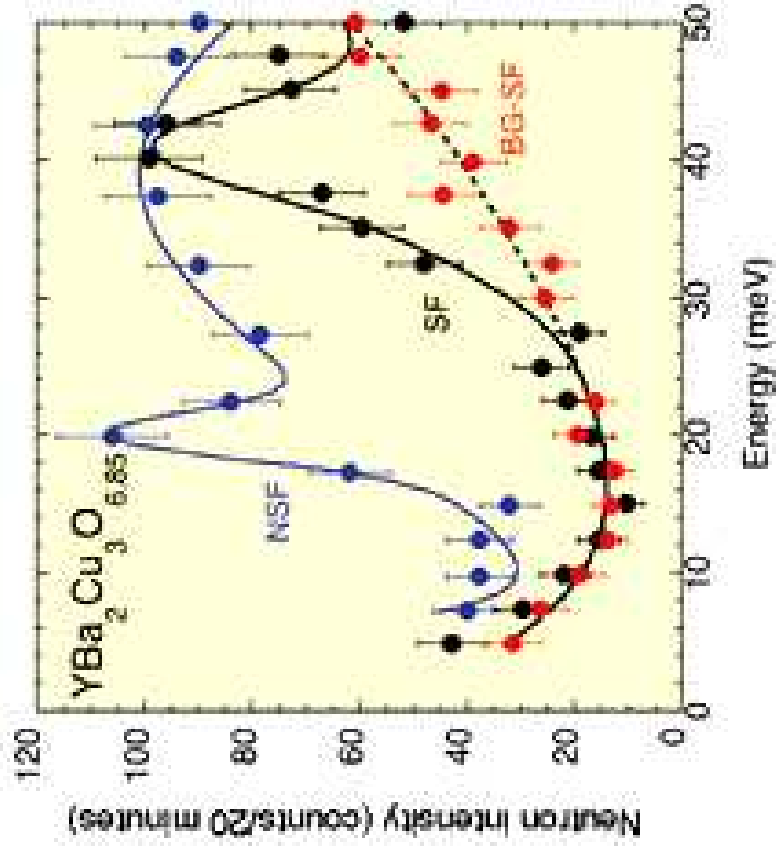


Fig. 1 - Energy scan through the antiferromagnetic zone centre at $Q=(1.5,0.5,1.7)$ (black circles; SF; blue circles; NSF) and at a background position $Q=(1.8,0.6,1.7)$ (red circles; SF) in the high- T_c superconducting material $YBa_2Cu_3O_{4.85}$. The energy dependence of the background is due to the increased counting time at higher incident energies. The shaded area illustrates the magnetic signal peaking at the resonance position of 41 meV.

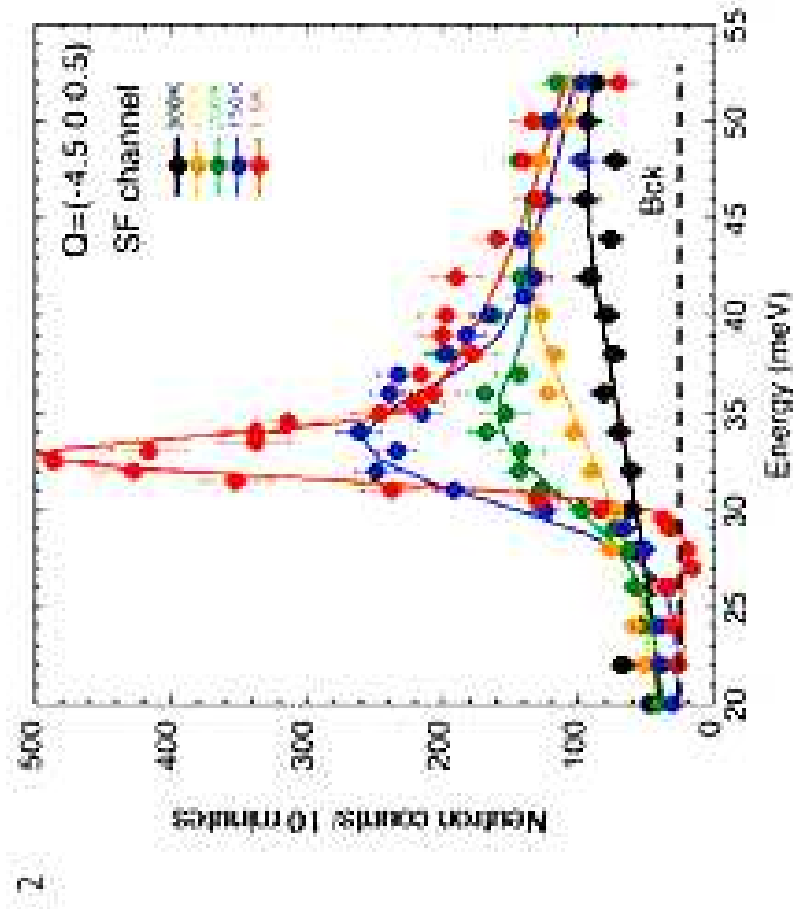


Fig. 2 - Temperature dependence of the spin-gap in the ladders of $Sr_{14}Cu_{24}O_{41}$. Between 1.5K and 300K, the purely magnetic response change from a response characteristic of a well defined gap of 33 meV to a response characteristic of a pseudo-gap at 90 meV.

Applications

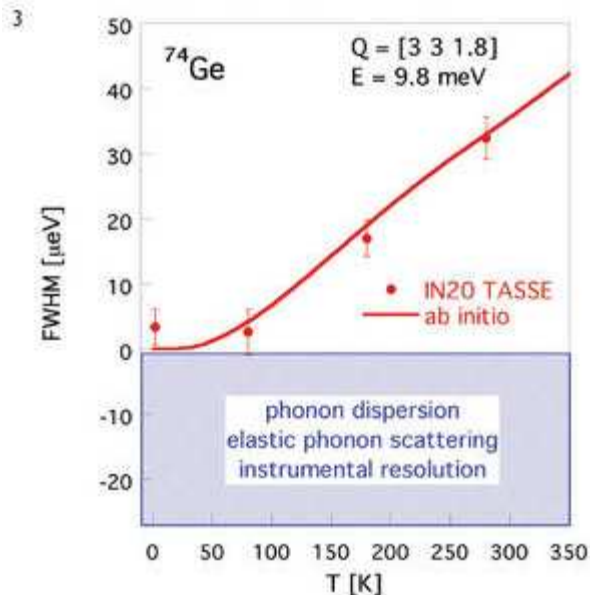
The typical applications of IN20 consist in the use of polarised neutrons to separate magnetic scattering from the nuclear one and, eventually, to obtain a more quantitative picture of its magnitude and anisotropy.

Two basic setups can be used:

- combination of polarised incident beam with a non-polarising analyser (PG, Si), which avoids intensity losses on the analyser side, to study systems whose magnetic cross-section magnitude depends on the incident neutron spin orientation: magnons in ferromagnets (cf. Fig.4), excitations in chiral spin systems
- full polarisation analysis (Heusler monochromator and analyser) to investigate scattering from antiferromagnetic and paramagnetic systems on the basis of spin-flip selection rules (cf. Fig. 5)

Despite the recent upgrade, the unique power of the polarisation analysis mode is paid for by a severe loss of luminosity (an order of magnitude and more) as compared to an equivalent setup with unpolarised beams. Therefore it is a good idea to start studies of a new system by a quick survey of the response in unpolarised mode (IN8C) to identify the ranges of interest so that unnecessary time losses in the IN20 experiments get avoided.

References: R.M. Moon et al. 181 (1969) 920; J. Kulda et al. Appl. Phys. A 74 (2002) S246.

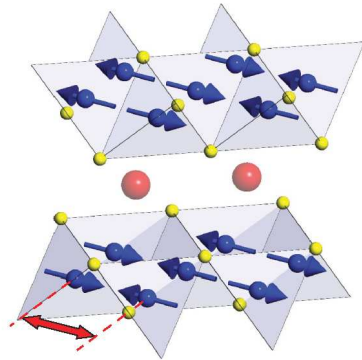


Phonon anharmonicity in Ge

The transverse acoustic phonons at the X point in Si, Ge and some III-V semiconductors (GaAs, InSb ...) exhibit a negative Gruneisen parameter and are responsible for the anomalous negative thermal expansion coefficients at low temperatures.

The IN20 spin-echo (TASSE) measurements on an isotopic crystal of ^{74}Ge have revealed their metastable character (line-width close to zero) below 100 K, confirmed by subsequent ab initio calculations: the phonons required by the only possible difference process of decay are not thermally populated at such low temperatures. This behaviour is qualitatively different from that of optical phonons at the centre of the Brillouin zone, the only ones accessible to line-width measurements by Raman spectroscopy (see figure).

Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂, T_c=38K



BaFe₂As₂ is antiferromagnetically ordered with Q_{AF} = 1.15 Å⁻¹

Figure 1 | The crystal structure of Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂. The unit cell of Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ contains two layers of Fe₂As₂ tetrahedra (Fe, blue spheres; As, yellow spheres), separated by planes of barium or potassium atoms (red spheres). The blue arrows show the ordering of the iron spins observed in the undoped parent compound BaFe₂As₂ (ref. 19). The atomic distance of 2.77 Å that characterizes both the antiferromagnetic modulation and the newly observed resonant excitation is indicated by the red double-headed arrow.

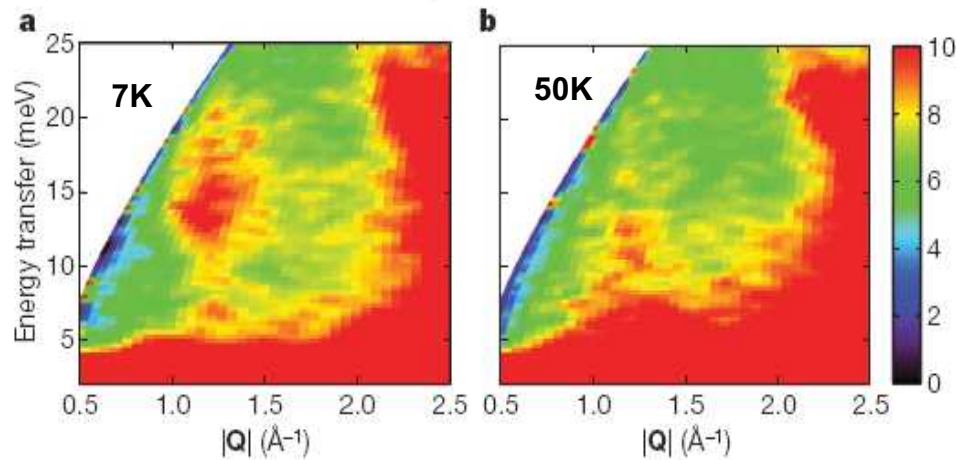


Figure 2 | Resonant spin excitation in Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂. Inelastic neutron scattering, measured using an incident neutron energy of 60 meV at temperatures below (a, 7 K) and above (b, 50 K) T_c, shows the development of a magnetic excitation in the superconducting phase at an energy transfer of 14 meV and a momentum transfer of 1.15 Å⁻¹. The strong scattering at low energy transfers arises from the tail of strong elastic nuclear scattering, and the strong increase in scattering at higher values of Q is due to inelastic phonon scattering. The colour scale indicates scattering intensity in units of millibarns per steradian per millielectronvolt per mole.

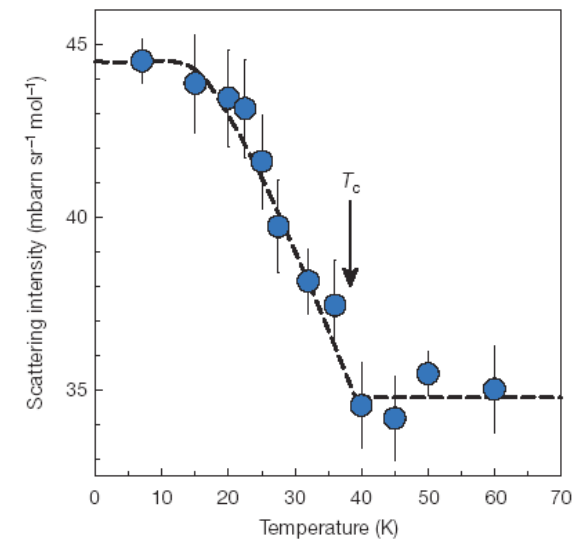
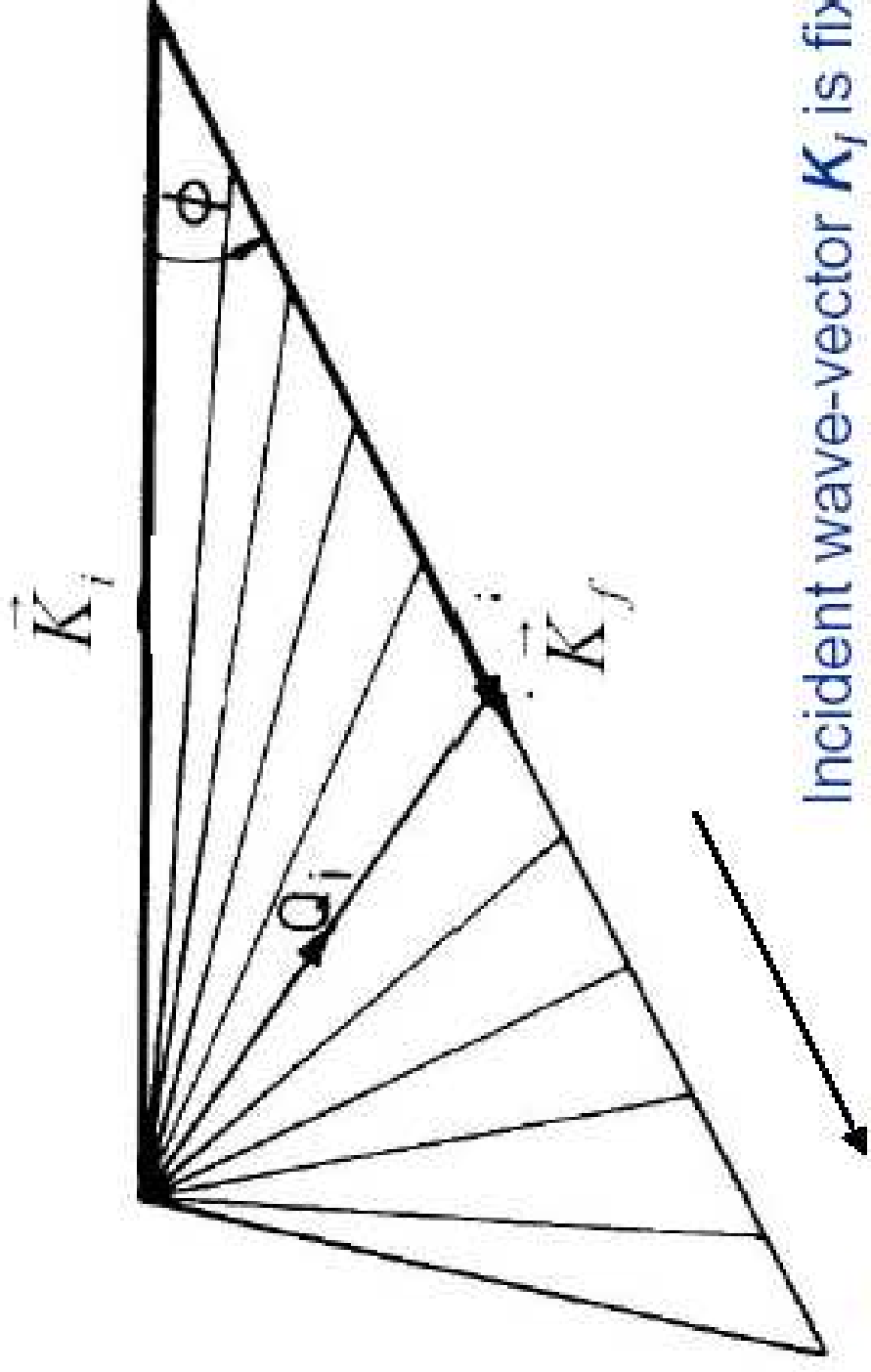


Figure 4 | Temperature dependence of the resonant spin excitation. The inelastic neutron scattering intensity from Ba_{0.6}K_{0.4}Fe₂As₂ integrated over Q in the range 1.0–1.3 Å⁻¹ and over ω in the range 12.5–17.5 meV. The integration range corresponds to the region of maximum intensity of the resonant excitation observed below T_c (Fig. 2). The error bars are derived from the square root of the raw detector counts. The dashed line is a guide to the eye below T_c and shows the average value of the integrals above T_c.

A. D. Christianson¹, E. A. Goremychkin^{2,3}, R. Osborn², S. Rosenkranz², M. D. Lumsden¹, C. D. Malliakas^{2,4}, I. S. Todorov², H. Claus², D. Y. Chung², M. G. Kanatzidis^{2,4}, R. I. Bewley³ & T. Guidi³

Direct Geometry Spectrometer, Vector Diagram



Incident wave-vector \mathbf{K}_i is fixed
 \mathbf{K}_f scanning by timing

Time-of-flight

