ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
НИЦ КИ (ГАТЧИНА, РОССИЯ)

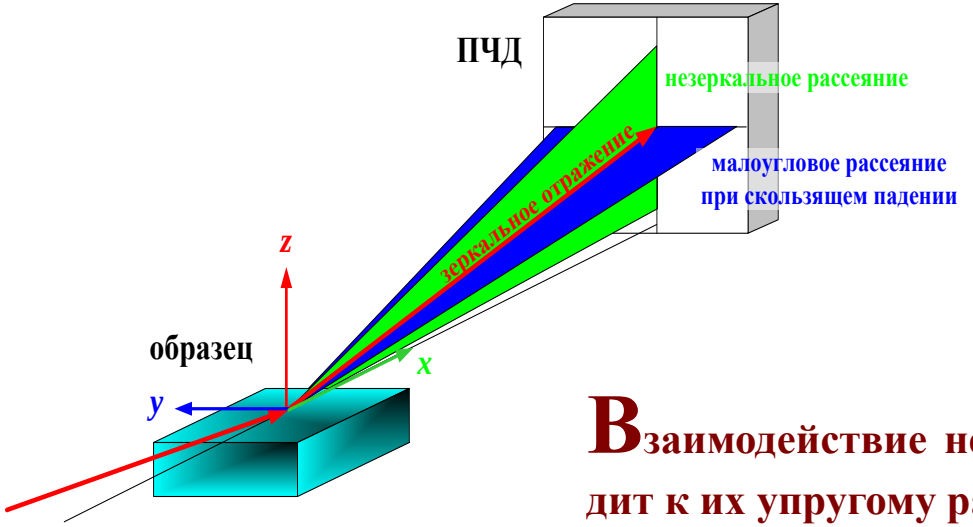
Рабочее совещание по малоугловому рассеянию нейтронов
«МУРомец-2015»
23-25 сентября 2015, Гатчина, Россия

Нейтронные рефлектометры: особенности оптимизации, новые перспективы

Н.К. Плешанов

Нейтронная рефлектометрия: специфика

Специфика теоретических и методических подходов позволяет выделить рефлектометрию из малоуглового рассеяния, которое традиционно подразумевает преимущественное рассеяние нейтронов в объеме образца, а не его поверхностью или материалом в приповерхностной области.



(Чтобы упростить рисунок, показано рассеяние только в соответствующих центральных плоскостях)

Взаимодействие нейтронов с поверхностью образца приводит к их упругому рассеянию по 3 основным каналам:

- ***зеркальное отражение (specular reflection)*, угол отражения равен углу скольжения, плоскость зеркального отражения включает нормаль к поверхности;**
- ***незеркальное рассеяние (off-specular/diffuse scattering)* в плоскости зеркального отражения, но под другими углами;**
- ***малоугловое рассеяние нейтронов при скользящем падении = МУРНСП = GISANS (grazing incidence small angle neutron scattering)*, дополнительное к зеркальному и незеркальному рассеянию.**

Нейтронная рефлектометрия: пространственное разрешение

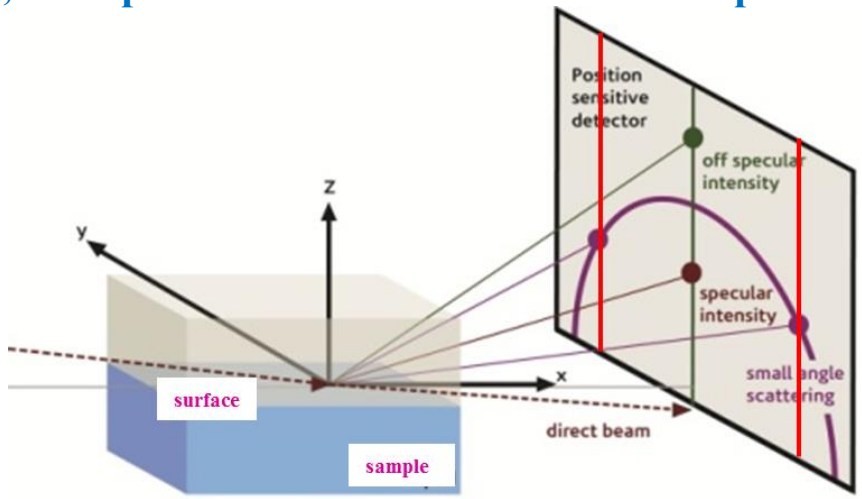
2 фактора:

♦ **область фазового пространства с измеренными сечениями рассеяния: ограничения связаны с быстрым спадом сечений рассеяния до уровня фона при росте *q***

⇒ увеличение светосилы прибора ⇒ выбор источника нейтронов, эффективная транспортировка пучка, фокусировка пучка на образце, выбор статистически оптимального режима измерений

♦ **приборное разрешение (Δq): особенности поведения (в общем случае спин-зависимой) функции рассеяния в обратном пространстве существенны для восстановления деталей структуры; с другой стороны, при улучшении разрешения уменьшается интенсивность пучка и область доступного для измерений фазового пространства**

⇒ выбор угловой расходимости, выбор степени монохроматичности пучка или время-пролетного разрешения, выбор статистически оптимального режима измерений



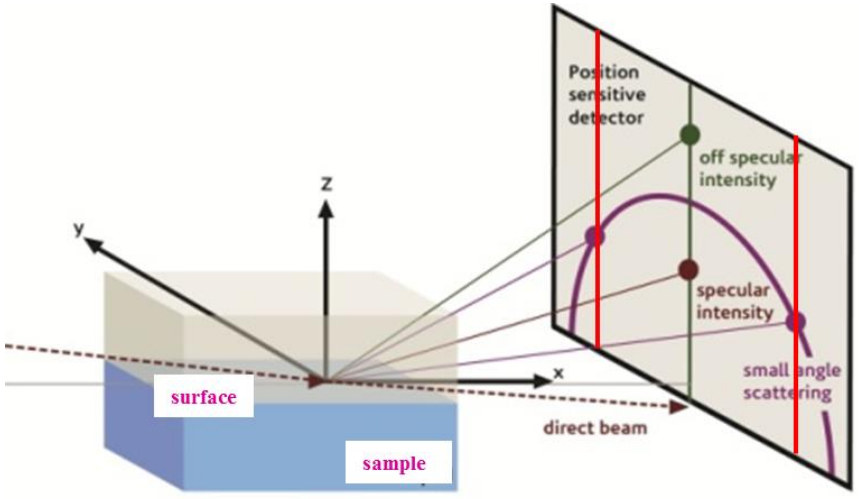
Нейтронная рефлектометрия: приборное разрешение

2 замечания:

♦ **не существует универсальной приборной функции разрешения, оптимальной с точки зрения баланса между разрешением и светосилой для всех экспериментальных задач**

♦ **в рассеянии по разным каналам участвуют нейтроны из одного и того же падающего пучка, который во многом задает приборное разрешение. Это ограничивает возможности устанавливать свое разрешение для разных областей обратного пространства**

⇒ нужны теоретические подходы к оптимизации функции приборной разрешения для определенных классов задач, с рассмотрением возможностей экспериментальной реализации



Оптимизация съемок зеркального отражения

2 ограничения:

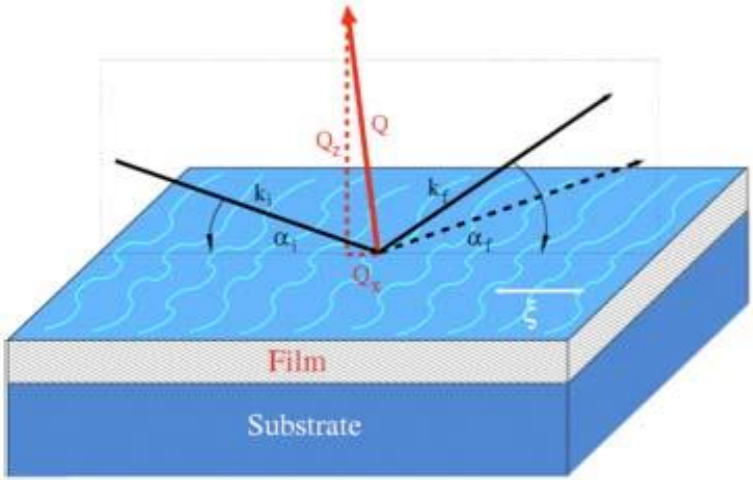
♦ **оптимизация съемок зеркального отражения**

(!) принципиальная возможность устанавливать свое разрешение Δq для каждого значения

$$q = \frac{4\pi \sin\theta}{\lambda} \cong \frac{4\pi\theta}{\lambda}$$

♦ **щелевая геометрия съемок**
(разрешение Δq не ухудшается, интенсивность увеличивается)

(!) оптимизация съемок зеркального отражения и незеркального рассеяния тесно связаны (щелевая геометрия)



Оптимизация съемок зеркального отражения

2 приближения:

- **гауссовское распределение по углам и длинам волн в падающем на образец пучке**

$$\Delta q / q = \sqrt{(\Delta\theta / \theta)^2 + (\Delta\lambda / \lambda)^2}$$

- **интенсивность падающего на образец пучка**

$$I_0 = A(\lambda) \cdot \Delta\theta \cdot \Delta\lambda$$

без явной зависимости $A(\lambda)$ от $\Delta\theta$ и $\Delta\lambda$

$A(\lambda)$:

- **яркость источника**
- **спектральная плотность излучения (температура источника)**
- **пропускание нейтронов от источника до образца (λ-зависимое пропускание нейтроноводов и фокусирующей оптики, ширина линии монохроматоров, пропускание коллимационной системы, …, размеры образца)**

Оптимизация съемок зеркального отражения

2 приближения:

- **гауссовское распределение по углам и длинам волн в падающем на образец пучке**

$$\Delta q / q = \sqrt{(\Delta\theta/\theta)^2 + (\Delta\lambda/\lambda)^2}$$

- **интенсивность падающего на образец пучка**

$$I_0 = A(\lambda)\cdot\Delta\theta\cdot\Delta\lambda$$

Объединив формулы

$$I_0 = A(\lambda)\cdot\theta\cdot\Delta\lambda\sqrt{(\Delta q/q)^2 - (\Delta\lambda/\lambda)^2}$$

$$\partial I_0 / \partial(\Delta\lambda) = 0 \quad \Rightarrow$$

условие максимума интенсивности при заданных *q* и разрешении Δ*q*

$$(\Delta\lambda/\lambda)^2 = \frac{1}{2}(\Delta q/q)^2$$

$$\Delta\theta/\theta = \Delta\lambda/\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Delta q/q)$$

максимум интенсивности

$$I_{0,\max} = A(\lambda)\cdot\theta\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\Delta q}{q}\cdot\lambda\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\Delta q}{q} = \frac{A(\lambda)}{8\pi}\frac{(\Delta q)^2}{q}\cdot\lambda^2$$

$$\theta = \frac{q\lambda}{4\pi}$$

Оптимизация съемок зеркального отражения

При <u>статистически оптимальных съемках</u> на заданных q при разрешении Δq интенсивность падающего на образец пучка

$$I_{0,\max} = \frac{A(\lambda)}{8\pi}\frac{(\Delta q)^2}{q}\cdot\lambda^2$$

Вывод: **рабочую длину волны следует выбирать не по максимуму спектральной зависимости $A(\lambda)$, а по максимуму величины $A(\lambda)\lambda^2$.**

Дополнительный фактор λ^2 связан с $\Delta\theta$ и $\Delta\lambda$, которые на данном q должны быть пропорциональны λ для сохранения

- **разрешения Δq**
- **условия статистически оптимальных съемок**

$$\Delta\theta/\theta = \Delta\lambda/\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Delta q/q)$$

Оптимизация съемок зеркального отражения

То же разрешение Δq на данном q:

$$\Delta q / q = \sqrt{(\Delta\theta/\theta)^2 + (\Delta\lambda/\lambda)^2}$$

можно получить при съемках с неоптимальными $\Delta\lambda$ и $\Delta\theta$

Интенсивность такого пучка

$$I_0 = A(\lambda)\Delta\theta\Delta\lambda = \frac{A(\lambda)}{4\pi}\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\frac{\Delta\theta}{\theta}q\lambda^2 = \frac{A(\lambda)}{4\pi}\sqrt{\left(\frac{\Delta q}{q}\right)^2 - \left(\frac{\Delta\lambda}{\lambda}\right)^2}\frac{\Delta\lambda}{\lambda}q\lambda^2$$

! **Вывод:** **при заданном отношении $\Delta\lambda/\lambda$ рабочую длину волны следует выбирать не по максимуму спектральной зависимости $A(\lambda)$, а по максимуму величины $A(\lambda)\lambda^2$.**

Дополнительный фактор λ^2 связан с тем, что

- **$\Delta\lambda$ пропорционально λ по условию сохранения величины $\Delta\lambda/\lambda$**
- **θ пропорционален λ для сохранения величины q, а $\Delta\theta$ пропорциональна θ для сохранения величины Δq**

Мера неоптимальности съемок - отношение интенсивностей для тех же q и Δq:

$$\varepsilon = \frac{I_0}{I_{0,\max}} = \frac{2\cdot\Delta\theta/\theta\cdot\Delta\lambda/\lambda}{(\Delta q/q)^2} = \frac{2\cdot\Delta\theta/\theta\cdot\Delta\lambda/\lambda}{(\Delta\theta/\theta)^2 + (\Delta\lambda/\lambda)^2} = \frac{2}{\dfrac{\Delta\theta/\theta}{\Delta\lambda/\lambda} + \dfrac{\Delta\lambda/\lambda}{\Delta\theta/\theta}} \le 1$$

Оптимизация съемок зеркального отражения: термализованные нейтроны

$A(\lambda)$:

- **яркость источника**
- **спектральная плотность излучения (температура источника)**
- ~~**пропускание нейтронов от источника до образца (λ-зависимое пропускание нейтроноводов и фокусирующей оптики, ширина линии монохроматоров, пропускание коллимационной системы, …, размеры образца)**~~

Термализованные нейтроны

максвелловское распределение $\cdot f(v)$ нейтронов по скоростям v
плотность потока нейтронов в пучке ~ $v \cdot f(v)$
$A(\lambda)$ = спектральная плотность потока нейтронов в пучке

$$A(\lambda) \propto T^{-2}\lambda^{-5} \cdot \exp(-h^2 / 2mkT\lambda^2)$$

Max[$A(\lambda)$]

$$\lambda_{\max} = \sqrt{h^2 / 5mkT}$$

Max[$A(\lambda)\lambda^2$]

$$\lambda_{\text{opt}} = \sqrt{h^2 / 3mkT}$$

$$\lambda_{\text{opt}} / \lambda_{\max} = \sqrt{5/3} \cong 1.29$$

Выигрыш интенсивности

$$g = \frac{A(\lambda_{\text{opt}})}{A(\lambda_{\max})}\left(\frac{\lambda_{\text{opt}}}{\lambda_{\max}}\right)^2 = e \cdot \left(\frac{3}{5}\right)^{3/2} \cong 1.26$$

Оптимизация съемок зеркального отражения: сравнение теплового и холодного источников

$$I_0(\lambda) = A(\lambda)\cdot\Delta\lambda\cdot\Delta\theta \propto T^{-2}\lambda^{-5}\cdot\exp(-h^2/2mkT\lambda^2)\cdot\Delta\lambda\cdot\Delta\theta$$
$$\propto (T\lambda^2)^{-2}\cdot\exp(-h^2/2mkT\lambda^2)\cdot(\Delta\lambda/\lambda)\cdot\Delta\theta$$

⇒ при одном и том же отношении $\Delta\lambda/\lambda$, для источников одинаковой светимости с температурами T_1 и T_2 интенсивности <u>монохроматических пучков</u> одинаковой расходимости $\Delta\theta$ одинаковы для длин волн, соответственно, λ_1 и λ_2 таких, что

$$T_2\lambda_2^2 = T_1\lambda_1^2$$

В частности,

$$T_2\lambda_{\max,2}^2 = T_1\lambda_{\max,1}^2 \qquad T_2\lambda_{\mathrm{opt},2}^2 = T_1\lambda_{\mathrm{opt},1}^2$$

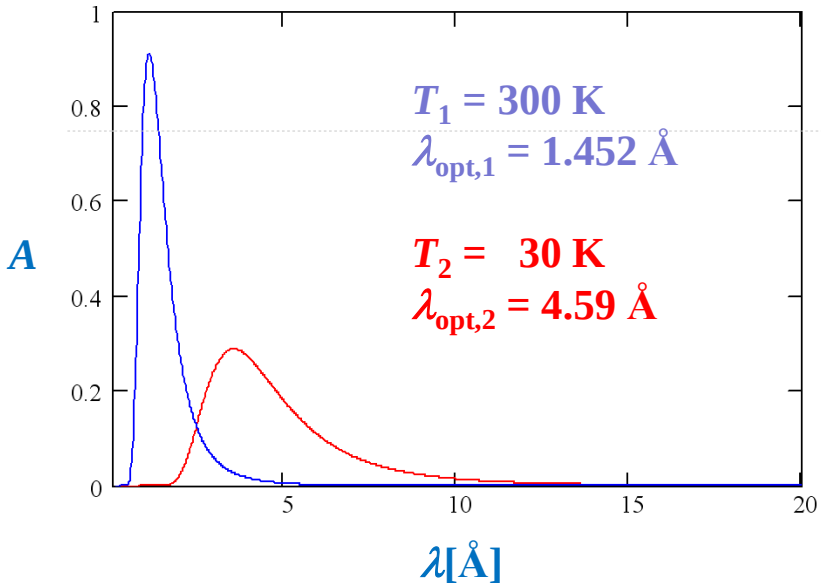
На пучках от разных источников с длинами волн λ_1 и λ_2 при $\Delta\lambda_1/\lambda_1 = \Delta\lambda_2/\lambda_2$ разрешение Δq для $q = \theta_2/\lambda_2 = \theta_1/\lambda_1$ будет одинаковым, если

$$\Delta\theta_2/\Delta\theta_1 = \theta_2/\theta_1 = \lambda_2/\lambda_1 = \sqrt{T_1/T_2}$$

Вывод: то же разрешение обеспечивается при большей в $(T_1/T_2)^{1/2}$ раз расходимостью, поэтому при переходе к более холодному источнику ($T_2 < T_1$) той же светимости и от длины волны λ_1 к λ_2 интенсивность увеличится в $(T_1/T_2)^{1/2}$ раз. В частности,

$$I(\lambda_{\mathrm{opt},2})/I(\lambda_{\mathrm{opt},1}) = I(\lambda_{\max,2})/I(\lambda_{\max,1}) = \sqrt{T_1/T_2}$$

Оптимизация съемок зеркального отражения: сравнение теплового и холодного источников



Спектральные плотности потока для источников нейтронов разных температур и одинаковой светимости

Вывод: то же разрешение обеспечивается с большей в $(T_1/T_2)^{1/2}$ раз расходимостью, поэтому при переходе к более холодному источнику ($T_2 < T_1$) той же светимости интенсивность увеличится в $(T_1/T_2)^{1/2}$ раз. В частности,

Например, при переходе от T_1 = 300 K к T_2 = 30 K выигрыш интенсивности

$$I(\lambda_{\mathrm{opt},2})/I(\lambda_{\mathrm{opt},1}) = \sqrt{10} \cong 3.16$$

Оптимизация съемок зеркального отражения: сравнение теплового и холодного источников

<u>Времяпролетные</u> измерения с одинаковыми $\Delta\lambda/\lambda$ = const (технически обеспечивается двухдисковыми чопперами) на пучках от источников одинаковой светимости с разными температурами T_1 и T_2

$$I_0(\lambda) \propto (T\lambda^2)^{-2} \cdot \exp(-h^2 / 2mkT\lambda^2) \cdot (\Delta\lambda / \lambda) \cdot \Delta\theta$$

$$\lambda = 4\pi\theta / q$$

$$I_0(q) \propto (q^2 / 4\pi\theta^2 T)^2 \cdot \exp(-h^2 q^2 / 8\pi mk\theta^2 T) \cdot (\Delta\lambda / \lambda) \cdot \Delta\theta$$

При $\Delta\lambda_1/\lambda_1 = \Delta\lambda_2/\lambda_2$ и

$$\Delta\theta_2 / \Delta\theta_1 = \theta_2 / \theta_1 = \lambda_2 / \lambda_1 = \sqrt{T_1 / T_2}$$

разрешение Δq будет одинаковым, а интенсивности на тех же q

$$I_{T2}(q) / I_{T1}(q) = \Delta\theta_2 / \Delta\theta_1 = \sqrt{T_1 / T_2}$$

$\Rightarrow$ интегральные интенсивности пучков будут соотносится также!!!

<u>Времяпролетные</u> измерения в режиме $\Delta\lambda$ = const (однодисковые чопперы) с время-пролетными разрешениями $\Delta\lambda_2 / \Delta\lambda_1 = \sqrt{T_1 / T_2}$ при одинаковых q и Δq вновь приводят к

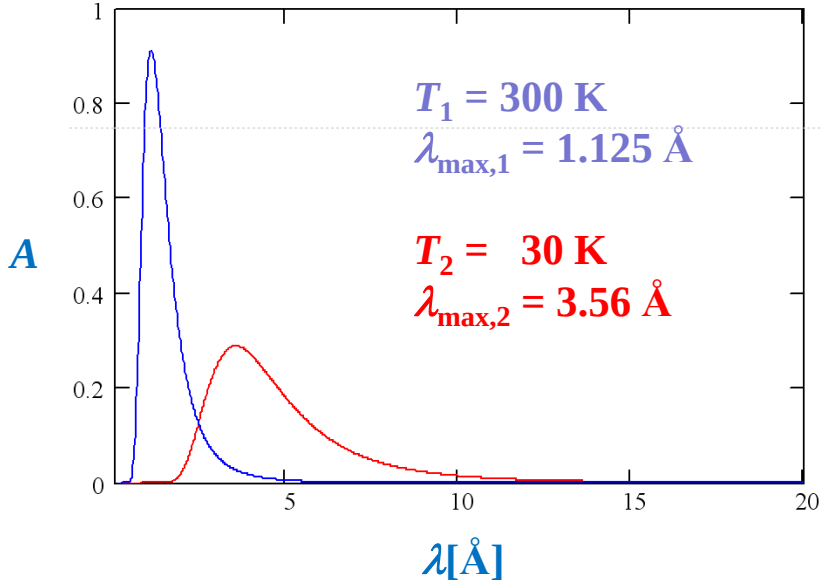
$$I_{T2}(q) / I_{T1}(q) = \Delta\theta_2 / \Delta\theta_1 = \sqrt{T_1 / T_2}$$

$\Rightarrow$ интегральные интенсивности пучков будут соотносится также!!!

Оптимизация съемок зеркального отражения: сравнение теплового и холодного источников

Вывод: при переходе к холодному источнику ($T_2 < T_1$) той же светимости и при равных условиях транспортировки нейтронов к образцу светосила рефлектометра увеличивается в $(T_1/T_2)^{1/2}$ раз

Критерием, учитывающим фактор $(T_1/T_2)^{1/2}$ при сравнении источников нейтронов в т.ч. разной светимости, может служить произведение $A(\lambda_{max})\lambda^2_{max}$.



Спектральные плотности потока для источников нейтронов разных температур и одинаковой светимости

Транспортировка к образцу более эффективна для нейтронов с большими длинами волн и приведет к дополнительному увеличению светосилы.

Оптимизация съемок зеркального отражения: монохроматические пучки

Кристалл-монохроматор

$$2d\sin\theta_{\mathrm{M}} = \lambda$$

Позволяет отклонять первоначальный пучок на значительный угол, до 90° и более.

Кристалл точно ориентируют по отношению к направлению падающего пучка

⇒ расходимость отраженного пучка определяется произведением гауссовых распределений

$$\frac{1}{\Delta\theta_{\mathrm{out}}^2} = \frac{1}{\Delta\theta_{\mathrm{in}}^2} + \frac{1}{\eta^2}$$

$\Delta\theta_{\mathrm{in}}$ - расходимость падающего пучка

η - мозаичность кристалла

Т.о.

$$\Delta\lambda = 2d\cos\theta_{\mathrm{M}} \cdot \Delta\theta_{\mathrm{out}}$$

$$\Delta\lambda / \lambda = \cot\theta_{\mathrm{M}} \cdot \Delta\theta_{\mathrm{out}}$$

- **если падающий на кристалл пучок сформирован нейтроноводом, то $\Delta\theta_{\mathrm{in}}(\lambda) \sim m\lambda\theta_{\mathrm{Ni}}$, где m – угловая приемная способность покрытия стенок нейтроновода в единицах критического угла никеля θ_{Ni} (около 0.1°)**
- **использование кристаллов с $\eta > \Delta\theta_{\mathrm{in}}$ нецелесообразно.**

Пример: λ = 0.5 нм → $\Delta\theta_{\mathrm{in}}$ = 0.5° при m = 1 и $\Delta\theta_{\mathrm{in}}$ = 1° при m = 2.

Оптимизация съемок зеркального отражения: монохроматические пучки

Кристалл-монохроматор

$$2d\sin\theta_{\text{M}} = \lambda$$

После выбора и установки кристалла с определенной мозаичностью на определенный угол θ_{M} величины λ и $\Delta\lambda$ имеют фиксированные значения (изменение λ требует вращения на большой угол всего рефлектометра вокруг оси кристалла-монохроматора + означало бы существенный уход с оптимальной длины волны)

Разрешение $\Delta q/q$ не может быть лучше, чем $\Delta\lambda/\lambda$, и в общем случае достигается при статистически неоптимальных съемках интенсивности. Коэффициент оптимальности

$$\varepsilon = 2\frac{\Delta\lambda/\lambda}{\Delta q/q}\sqrt{1-\left(\frac{\Delta\lambda/\lambda}{\Delta q/q}\right)^2}$$

Пример: $\Delta\lambda/\lambda = 0.01$, $\Delta q/q = 0.05 \rightarrow \varepsilon \cong 0.4$ (при том же разрешении интенсивность могла бы быть в 2.5 раза больше!)

Оптимизация съемок зеркального отражения: монохроматические пучки

Нейтронно-оптический монохроматор

$$2d_{\mathrm{ML}}\sin\theta_{\mathrm{B}} = \lambda$$

Позволяет отклонять первоначальный пучок на несколько градусов или, наоборот, сохранять первоначальное направление (два последовательных отражения) .

Монохроматор точно устанавливается по отношению к направлению падающего пучка

⇒ расходимость отраженного пучка определяется произведением гауссовых распределений

$$\Delta\theta_{\mathrm{B}} = \Delta\lambda_{\mathrm{B}} / 2d_{\mathrm{ML}}$$

$$\frac{1}{\Delta\theta_{\mathrm{out}}^2} = \frac{1}{\Delta\theta_{\mathrm{in}}^2} + \frac{1}{\Delta\theta_{\mathrm{B}}^2}$$

$\Delta\theta_{\mathrm{in}}$ - расходимость падающего пучка

$\Delta\lambda_{\mathrm{B}}$ - ширина брэгговского пика

$$\frac{1}{\Delta\theta_{\mathrm{out}}^2} = \frac{1}{\Delta\theta_{\mathrm{in}}^2} + \frac{2}{\Delta\theta_{\mathrm{B}}^2}$$

- при двойном отражении

Т.о.

$$\Delta\lambda = 2d_{\mathrm{ML}} \cdot \Delta\theta_{\mathrm{out}}$$

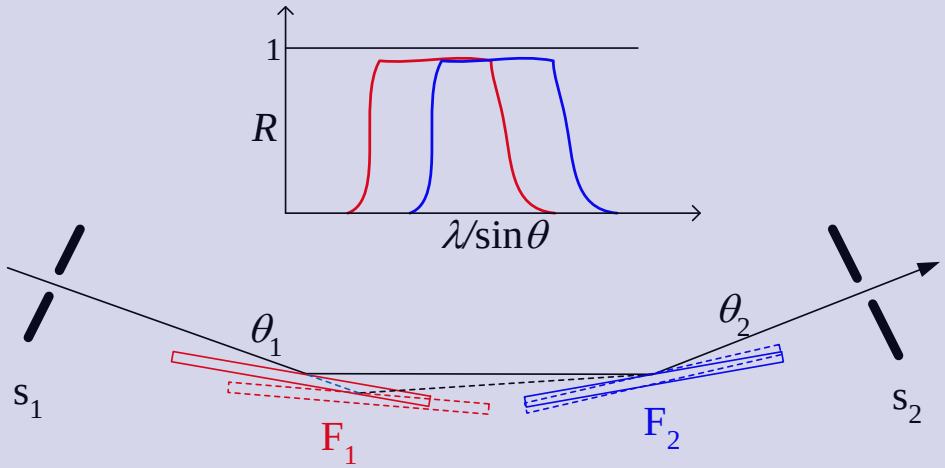
$$\Delta\lambda / \lambda = \Delta\theta_{\mathrm{out}} / \theta_{\mathrm{B}}$$

Набор монохроматоров с разными d_{ML}, в принципе, позволяет работать с набором $\Delta\lambda$ и проводить съемки, близкие к статистически оптимальным.

Оптимизация съемок зеркального отражения: монохроматические пучки

Нейтронно-оптический монохроматор

$$2d_{\mathrm{ML}}\sin\theta_{\mathrm{B}} = \lambda$$



Монохроматор с последовательным отражением от двух широкополосных ($\Delta\lambda/\lambda$ до 10%) фильтров на основе многослойных апериодических покрытий (часть суперзеркальной последовательности) позволит менять $\Delta\lambda$ в широком диапазоне и проводить статистически оптимальные съемки $\Rightarrow$ для каждого значения q можно устанавливать свое разрешение Δq.

!

В частности, можно проводить измерения с Δq = const.

$$\Delta q = \frac{4\pi\theta}{\lambda}\sqrt{(\Delta\theta/\theta)^2 + (\Delta\lambda/\lambda)^2} = \sqrt{(4\pi\Delta\theta/\lambda)^2 + (4\pi\Delta\lambda\theta/\lambda^2)^2}$$

Δq = const $\Rightarrow$ (a) $\Delta\theta = c_\theta\lambda$; (b) $\Delta\lambda = c_\lambda\lambda^2/\theta$

$$\Delta q = \sqrt{c_\theta^2 + c_\lambda^2}$$

$$c_\theta = c_\lambda = \Delta q/\sqrt{2}$$

условие статистически оптимальных съемок

Оптимизация съемок зеркального отражения: белые пучки (TOF)

Однодисковый прерыватель

$\Delta\lambda$ = const

Обеспечивает одинаковое на всех длинах волн время-пролетное разрешение $\Delta\lambda$.

Условие статистически оптимальных съемок может быть выполнено только на одной длине волны $\Delta\theta/\theta = \Delta\lambda/\lambda_0$.

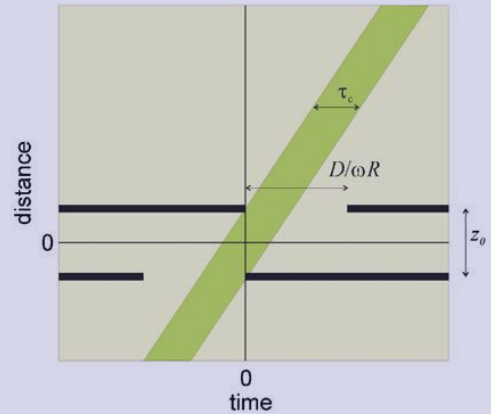
Коэффициент оптимальности съемок

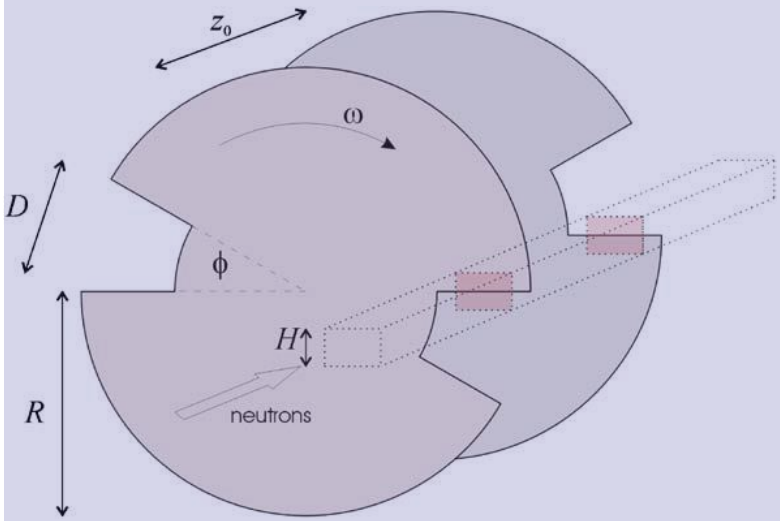
$$\varepsilon = \frac{2}{\lambda/\lambda_0 + \lambda_0/\lambda}$$

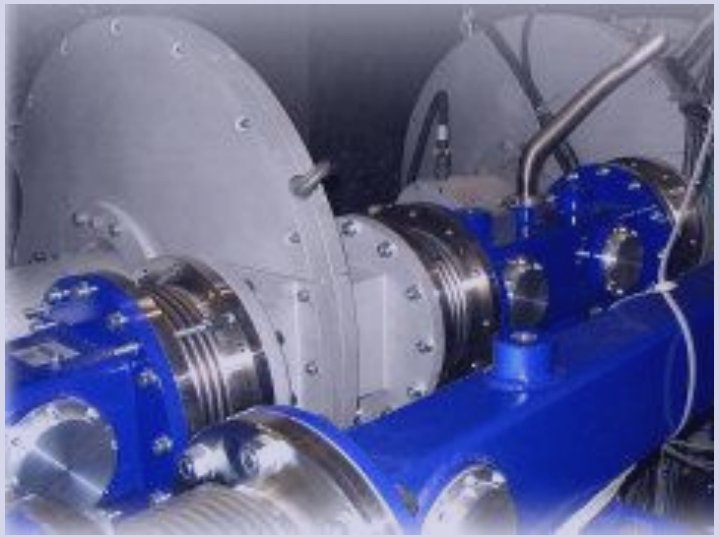
Оптимизация съемок зеркального отражения: белые пучки (TOF)

Двухдисковый прерыватель

$\Delta\lambda/\lambda$ = const







Обеспечивает пропорциональное длине волны время- пролетное разрешение $\Delta\lambda$.

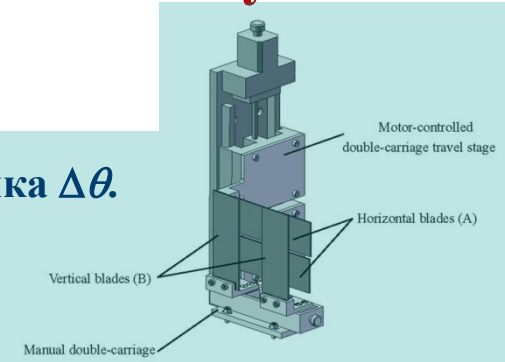
Условие статистически оптимальных съемок может быть выполнено сразу на всех длинах волн при $\Delta\theta/\theta = \Delta\lambda/\lambda$.

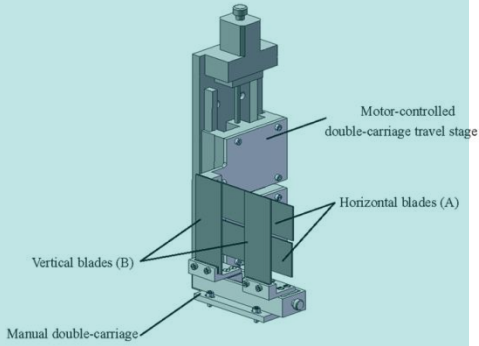
Величину $\Delta\lambda/\lambda$ можно менять, меняя расстояние между дисками или использованием нескольких дисков на разных расстояниях

Но: режим Δq = const практически не реализуем методом TOF

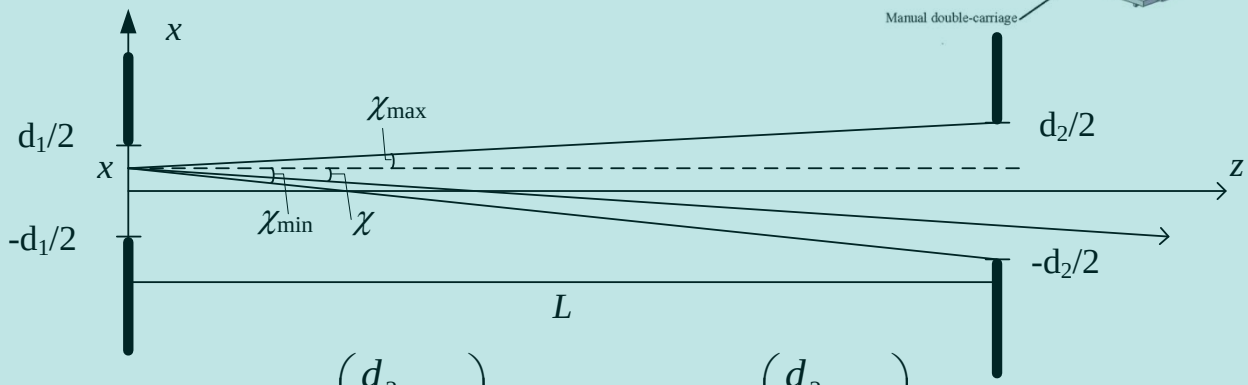
Оптимизация съемок зеркального отражения: коллимация пучка

Двухдиафрагменная система





Обеспечивает требуемую расходимость пучка $\Delta\theta$.



$$\chi_{\min}(x) = -\left(\frac{d_2}{2} + x\right)/L; \qquad \chi_{\max}(x) = \left(\frac{d_2}{2} - x\right)/L$$

Если первая щель - источник с единичной светимостью, полная интенсивность после второй щели при $L \gg d_1, d_2, h_1, h_2$:

$$I = \int_{-h_1/2}^{h_1/2} dy \int_{\eta_{\min}(y)}^{\eta_{\max}(y)} d\eta \int_{-d_1/2}^{d_1/2} dx \int_{\chi_{\min}(x)}^{\chi_{\max}(x)} d\chi = \frac{h_1 h_2}{L}\frac{d_1 d_2}{L}$$

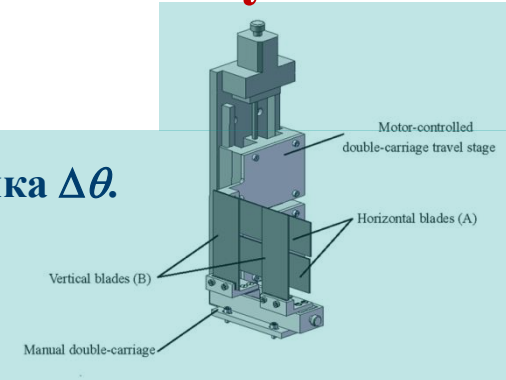
Определим расходимость как угловую полуширину пика на полувысоте:

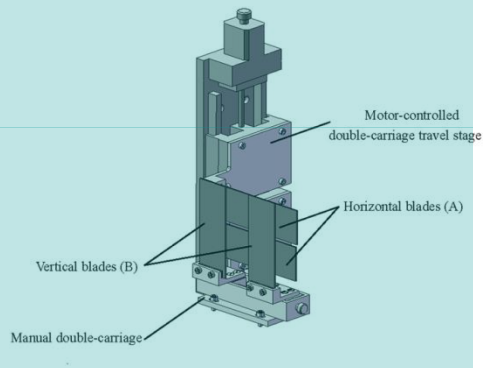
$$\Delta\theta = \frac{d_1 + d_2}{2L}$$

$$\Rightarrow \quad d_2 = 2L\Delta\theta - d_1 \quad \Rightarrow \quad I = h_1 h_2 \frac{d_1(2L\Delta\theta - d_1)}{L^2}$$

Оптимизация съемок зеркального отражения: коллимация пучка

Двухдиафрагменная система





Обеспечивает требуемую расходимость пучка $\Delta\theta$.

Определим расходимость как угловую полуширину пика на полувысоте:

$$\Delta\theta = \frac{d_1 + d_2}{2L}$$

$$\Rightarrow \quad d_2 = 2L\Delta\theta - d_1 \quad \Rightarrow \quad I = h_1 h_2 \frac{d_1(2L\Delta\theta - d_1)}{L^2}$$

$$\frac{\partial I}{\partial d_1} = 0 \quad \text{при} \quad d_1 = d_2 = L\Delta\theta \quad \Rightarrow \quad I = h_1 h_2 (\Delta\theta)^2$$

!!!

Ранее в анализе интенсивность падающего на образец пучка

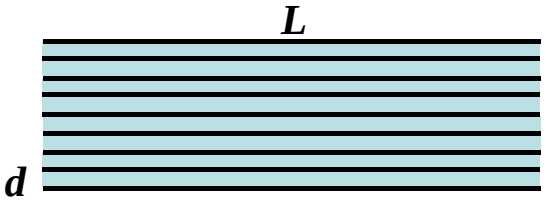
$$I_0 = A(\lambda) \cdot \Delta\theta \cdot \Delta\lambda$$

???

Оптимизация съемок зеркального отражения: коллимация пучка

Микросоллеровская система

$$\Delta\theta = \frac{d}{L}$$



Должна обеспечить требуемую расходимость пучка $\Delta\theta$

Интенсивность после коллиматора $I \sim \Delta\theta$!!!

Ширина канала $d[\text{мкм}] = L[\text{мм}]\Delta\theta[\text{мрад}]$

Примеры: λ = 5 Å, L= 50 мм, $\Delta\theta$ = 0.1 мрад → d = 5 мкм

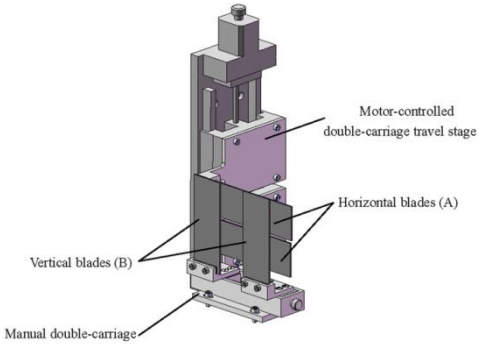
λ = 5 Å, L= 50 мм, $\Delta\theta$ = 0.5 мрад → d = 25 мкм

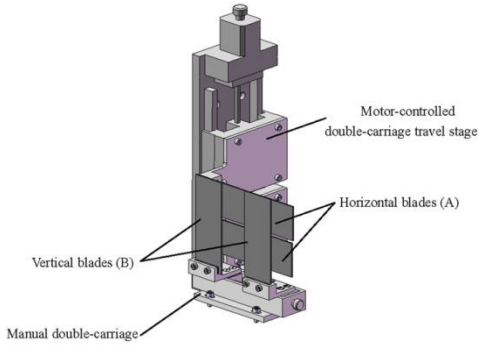
λ = 5 Å, L= 50 мм, $\Delta\theta$ = 1 мрад → d =50 мкм

Отражение: λ = 5 Å, $\Delta\theta$ = 1 мрад → $q_0 = 4\pi\Delta\theta/\lambda$ ⇒ $E_\perp$ = 3. 3 нэВ

Оптимизация съемок зеркального отражения

Двухдиафрагменная система





!!!

$$I_0 = A(\lambda)\cdot(\Delta\theta)^2\cdot\Delta\lambda$$

При заданных *q* и разрешении Δ*q* интенсивность падающего на образец пучка

$$I_0 = A(\lambda)\cdot\theta\cdot\Delta\lambda[(\Delta q/q)^2-(\Delta\lambda/\lambda)^2]$$

$$\partial I_0/\partial(\Delta\lambda)=0 \quad \Rightarrow$$

условие максимума интенсивности

$$(\Delta\lambda/\lambda)^2=\frac{1}{3}(\Delta q/q)^2$$

$$(\Delta\theta/\theta)^2=\frac{2}{3}(\Delta q/q)^2$$

$$\Delta\theta/\theta=\sqrt{2}\Delta\lambda/\lambda$$

!

максимум интенсивности (статистически оптимальные съемки)

$$\theta=\frac{q\lambda}{4\pi}$$

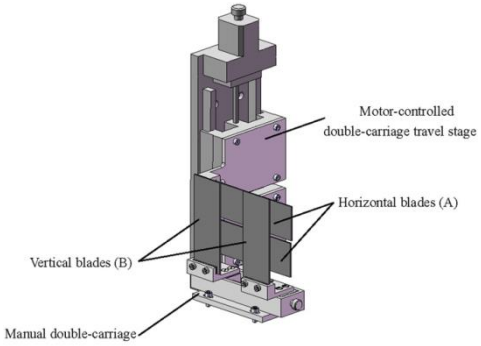
$$I_{0,\max}=A(\lambda)\cdot\left(\theta\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{\Delta q}{q}\right)^2\cdot\lambda\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{\Delta q}{q}=\frac{2}{3\sqrt{3}(4\pi)^2}A(\lambda)\frac{(\Delta q)^3}{q}\cdot\lambda^3$$

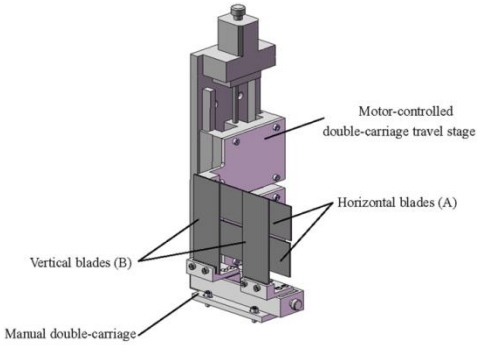
!

Вывод: **рабочую длину волны следует выбирать не по максимуму спектральной зависимости *A*(*λ*), а по максимуму величины *A*(*λ*)*λ*³.**

Оптимизация съемок зеркального отражения

Двухдиафрагменная система





!!!

$$I_0 = A(\lambda)\cdot(\Delta\theta)^2\cdot\Delta\lambda$$

Термализованные нейтроны

$A(\lambda)$ = спектральная плотность потока нейтронов в пучке

$$A(\lambda) \propto T^{-2}\lambda^{-5}\cdot\exp(-h^2/2mkT\lambda^2)$$

Max[$A(\lambda)$]

$$\lambda_{\max} = \sqrt{h^2/5mkT}$$

Max[$A(\lambda)\lambda^3$]

$$\lambda_{\text{opt}} = \sqrt{h^2/2mkT}$$

$$\lambda_{\text{opt}}/\lambda_{\max} = \sqrt{5/2} \cong 1.6$$

Выигрыш интенсивности

$$g = \frac{A(\lambda_{\text{opt}})}{A(\lambda_{\max})}\left(\frac{\lambda_{\text{opt}}}{\lambda_{\max}}\right)^3 = e^{3/2}\cdot\frac{2}{5} \cong 1.79$$

Пример: **T_2 = 30 K, $\lambda_{\max}$ = 3.56 Å, λ_{opt} = 5.63 Å**

ВЫВОД

Оптимизация съемок зеркального отражения имеет важное значение, поскольку может увеличить светосилу нейтронных рефлектометров

Спасибо за внимание!