

**Национальный исследовательский центр «Курчатовский  
институт»  
Федеральное государственное бюджетное учреждение  
Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова**

Дубовский И.М., Лебедев В.Т., Серебров А.П.



# **Спин-эхо спектроскопия на очень холодных нейтронах**

Гатчина  
2016

# Сравнение характеристик NSE-спектрометров на холодных и очень холодных нейтронах

**CN:**

$$\Delta E \sim 1/\lambda^3 \sim 10^{-9} \text{ eV}$$

$$\lambda = 0.3\text{-}2 \text{ nm}$$

$$t \sim \hbar/\Delta E \geq 10^{-7} \text{ s}$$

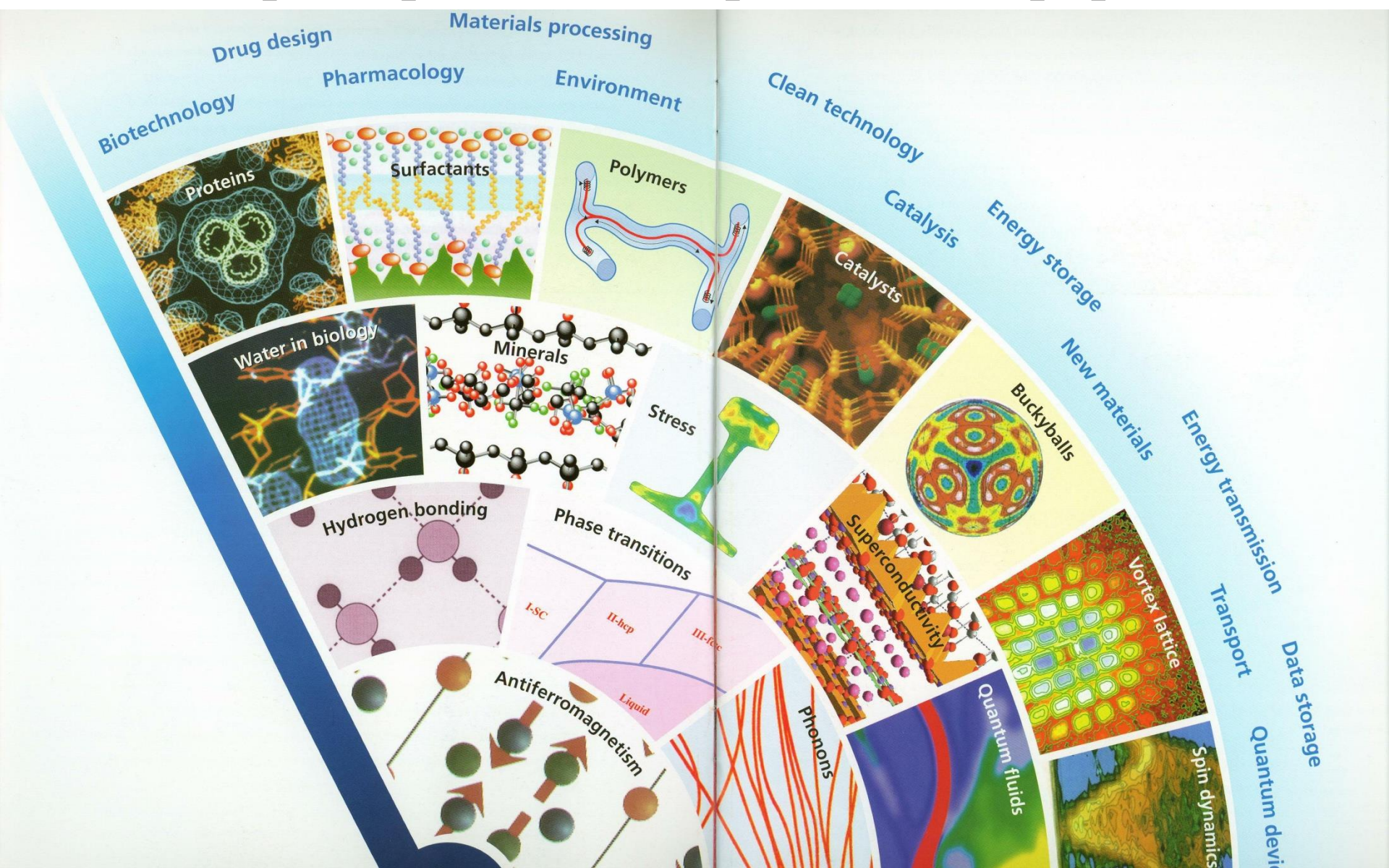
**VCN:**

$$\Delta E \sim 10^{-13} \text{ eV}$$

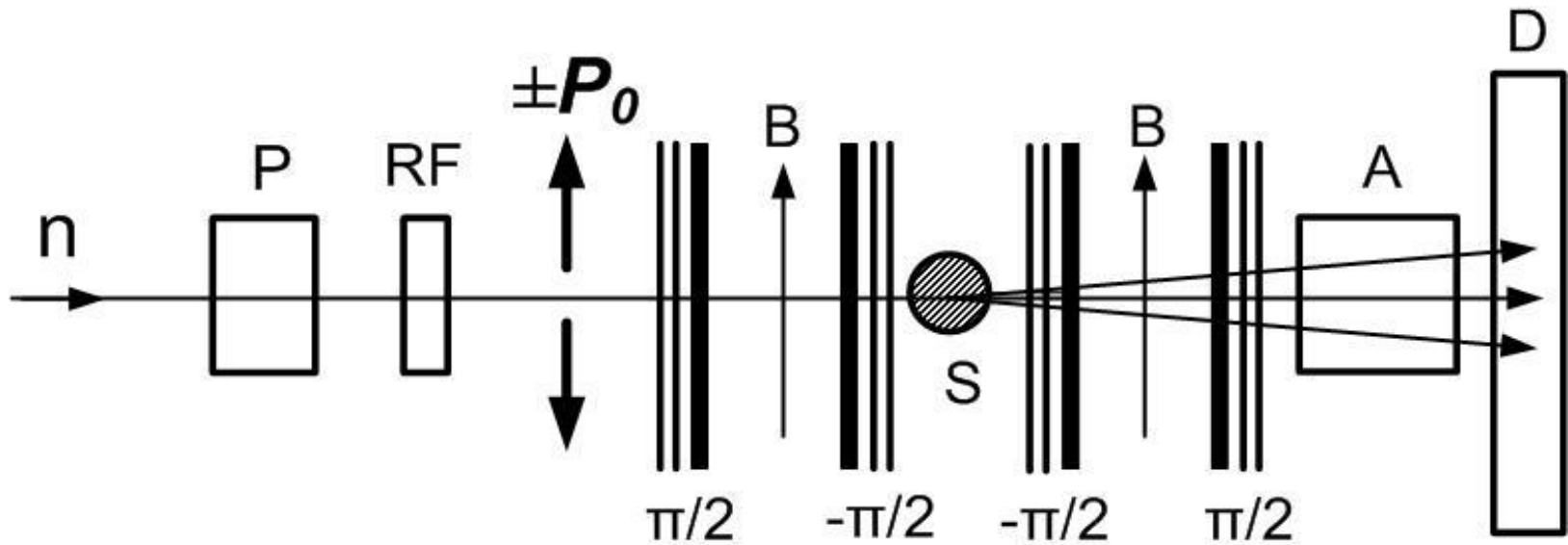
$$\lambda = 10\text{-}30 \text{ nm}$$

$$t \sim 10^{-3} \text{ s}$$

# Проблемы исследования структуры и динамики наноразмерных систем различной природы

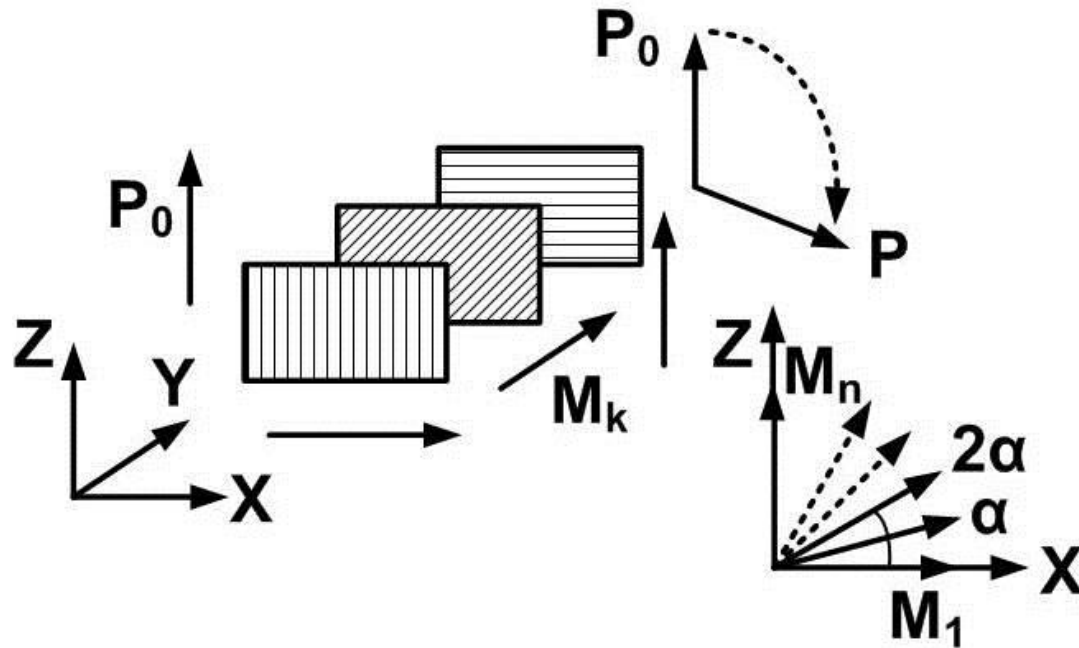


# Схема широкополосного NSE-спектрометра с использованием ОХН

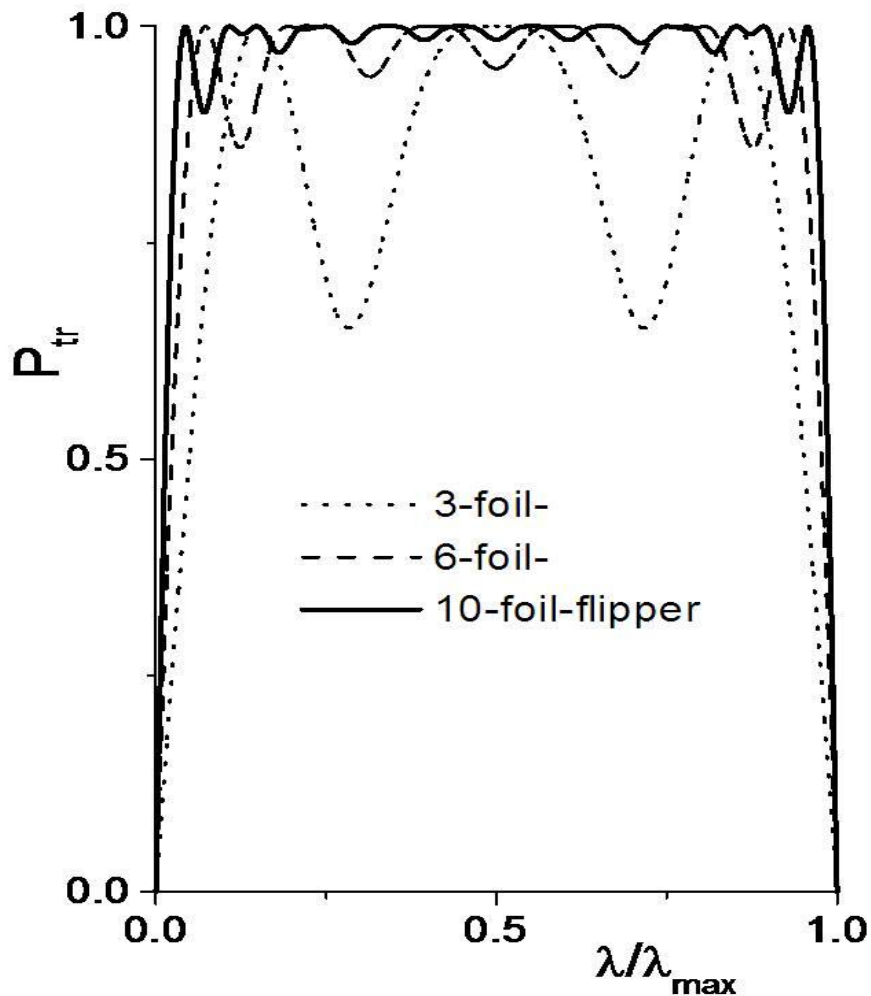


Пучок нейтронов ( $n$ ), поляризатор ( $P$ ), радиочастотный флиппер ( $RF$ ),  $\pm\pi/2$ -флипперы, ограничивающие области первого и второго полей прецессии ( $B$ ), образец ( $S$ ), анализатор ( $A$ ), детектор ( $D$ )

# Флиппер, комбинирующий адиабатическое и не адиабатическое вращение вектора поляризации

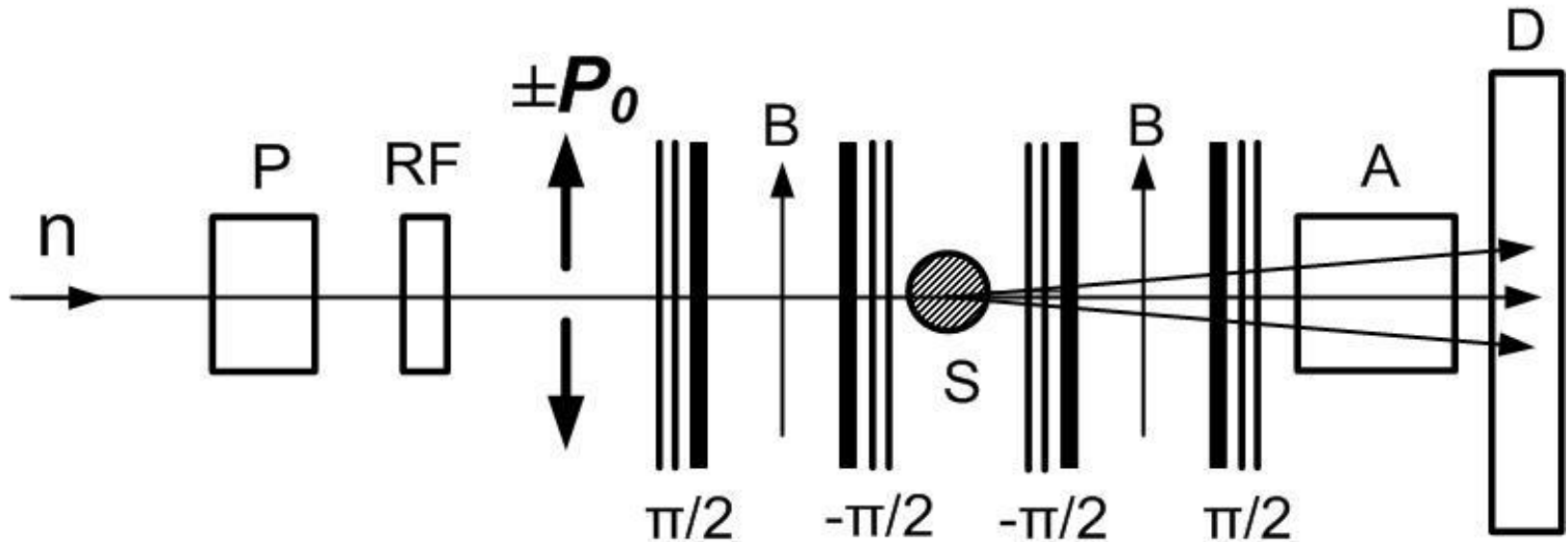


Поперечная компонента поляризации  $P_{tr}$  после флиппера в зависимости от длины волны нейтронов, приведенной к её максимальному значению ( $\lambda / \lambda_{max}$ )



10 фольг, обеспечивают поворот  $0.9 \leq P_{tr} \leq 1$ , в широкой полосе длин,  $\lambda_{max} / \lambda_{min} \sim 10$ . Этого достаточно для работы ОХН ( $\lambda \sim 10 - 30$  нм)

# Схема широкополосного NSE-спектрометра с использованием ОХН



$$\varphi(\lambda) = (\gamma L H m / 2\pi \hbar) \lambda \rightarrow \lambda' \neq \lambda$$

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda \quad \omega = \Delta E / \hbar \quad \Delta E = - (2\pi \hbar)^2 \Delta\lambda / (m \lambda^3)$$

$$\varphi' \neq \varphi \rightarrow \begin{array}{l} \text{неполная} \\ \text{фокусировка} \end{array} \rightarrow (1/2) P_o(\lambda) \cos(\varphi' - \varphi)$$

вертикальная компонента

$$I^{\pm} = (1/2) [\int \Phi(\lambda) S(\omega, q) d\lambda d\omega \pm (1/2) \int \Phi(\lambda) P_o(\lambda) S(\omega, q) \cos(\omega t) d\lambda d\omega]$$

$$\varphi' - \varphi = \omega t$$

$$t(B, \lambda) = \pi \hbar N(B, \lambda) / E_o(\lambda)$$

- $(I^+ + I^-) = \int \Phi(\lambda) S(\omega, q) d\lambda d\omega$
- $(I^+ - I^-) = (1/2) \int \Phi(\lambda) P_o(\lambda) S(\omega, q) \cos(\omega t) d\lambda d\omega$

CN:

$$P_{NSE}(t, q) = \int S(\omega, q) \cos(\omega t) d\omega / \int S(\omega, q) d\omega = \\ (1/2 P_{oA}) (I^+ - I^-) / (I^+ + I^-)$$

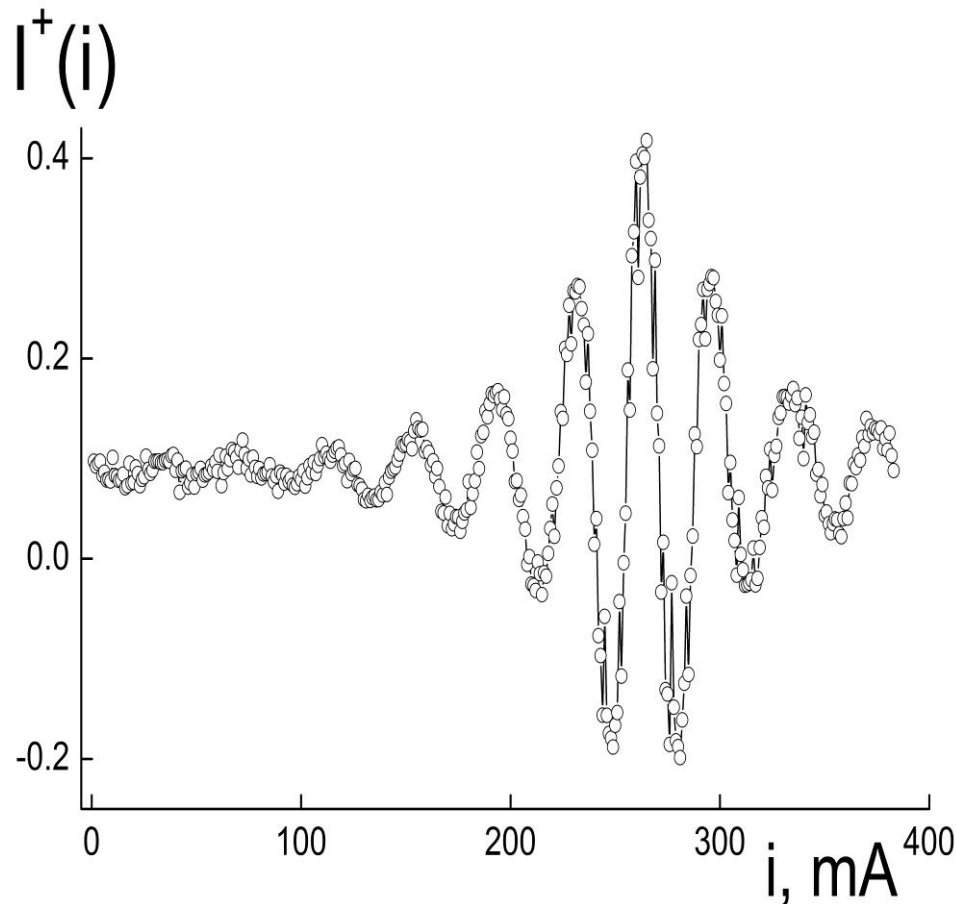
$$P_{oA} = \int \Phi(\lambda) P_o(\lambda) d\lambda / \int \Phi(\lambda) d\lambda - \text{средняя по спектру поляризация}$$



# Сигнал эхо-группы в зависимости от тока корректирующих обмоток магнита прецессии

$$B_2 = B ; B_1 = B + B_E$$

$$B_E \ll B$$



$$\varphi_E = \lambda(\gamma L m / 2\pi \hbar) B_E$$

доп. фаза прецессии

$$\langle \lambda \rangle = 0.65 \text{ nm}$$

$$\Delta \lambda / \langle \lambda \rangle = 30\%$$

$$i \sim B_E$$

$$(I^+ - I^-) =$$

$$\Delta I(b_E) = (1/2) \int \Phi(\lambda) P_o(\lambda) \left[ \int S(\omega, q) \cos(\omega t) d\omega \right] \cos(\lambda b_E) d\lambda$$

$$b_e = \lambda \varphi_E$$

$\Delta I(b_E)$  – Фурье-образ функции

$$\Phi(\lambda) P_o(\lambda) \left[ \int S(\omega, q) \cos(\omega t) d\omega \right]$$

Обратное Фурье-преобразование:

$$(1/2\pi) \int \Delta I(b_E) \cos(\lambda b_E) db_E =$$

$$(1/2) \Phi(\lambda) P_o(\lambda) \left[ \int S(\omega, q) \cos(\omega t) d\omega \right]$$

# Искомый спектр NSE-сигналов

$$P_{NSE} [t(\lambda), q(\lambda)] = (1/2) \int S[\omega, q(\lambda)] \cos[\omega t(\lambda)] d\omega / \int S[\omega, q(\lambda)] d\omega$$

$$P_{\text{NSE}} [t(\lambda), q(\lambda)] = (1/2) \int S[\omega, q(\lambda)] \cos[\omega t(\lambda)] d\omega / \int S[\omega, q(\lambda)] d\omega$$

– искомый спектр NSE-сигналов

$$\text{Т.к. } t(B, \lambda) \sim B\lambda^3$$

$$\text{При } B = B_m \quad t_{k,m} \sim B_m \lambda_k^3, \quad \lambda_{\min} \leq \lambda_k \leq \lambda_{\max}$$

$$k = k_{\max} = (\lambda_{\max} - \lambda_{\min}) / \Lambda \text{ — число измерений}$$

$\Lambda$  — шаг по  $\lambda$ , задающий точность определения  $q$ :

$$\Delta q / q = \Lambda / \lambda$$

$$\text{Cond: } t_{k_{\max}} = B_m \lambda_{\max}^3 = t_{k_{\min}} = B_{m+1} \lambda_{\min}^3$$

$$\Delta \ln(B) = \ln(B_{m+1}) - \ln(B_m) = 3 \ln(\lambda_{\max} / \lambda_{\min})$$

$$\lambda = 10 - 30 \text{ nm} \quad : \quad \Delta \ln(B) \approx 3.6$$

# Возможности экспериментов на ОХН

VCN:

$$\lambda = 10-30 \text{ nm}$$

$$q \sim 0.003 - 1 \text{ nm}^{-1}$$

$$\theta \sim 1^\circ - 180^\circ$$

$$t \sim 10^{-12} - 10^{-3} \text{ s}$$

t на 4 порядка

выше чем на CN!

Возможен анализ структур

с масштабами от

нанометров до микрон:

$$R \sim 2\pi/q \sim 6 - 2000 \text{ nm}$$

# Заключение

- 1) Спин-эхо спектроскопия на ОХН открывает возможности анализа структуры и динамики молекулярных, полимерных, биологических объектов и структур, начиная от времен порядка пикосекунд, характерных для атомных движений, до миллисекундных интервалов времени
- 2) позволит решать задачи изучения динамики, актуальные для физики и химии конденсированного состояния, молекулярной биологии, с рекордно высоким энергетическим разрешением  $\sim 10^{-13}$  эВ, в том числе анализировать механизмы химических реакций и катализа в реальном времени, изучать конформационные превращения в биологических молекулах и т.д.

Спасибо за внимание!