

UNIVERZITET U NOVOM SADU PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET DEPARTMAN ZA FIZIKU



Medić Žarko

Simulacija svojstava neutronskog reflektometra

-Master rad-

Novi Sad, Decembar 2014

Sadržaj

Uvod	5
1. Osobine neutrona	7
2. Izvori neutrona	8
2.1. Reaktor kao izvor	8
2.2. Spalacioni izvor1	0
2.3. Termalizacija neutrona i moderatori1	2
2.3.1. Termalizacija1	2
2.3.2. Efekti moderacije1	4
2.4. Tipovi moderatora1	5
3. Teorija rasejavanja neutorna na kondenzovanom sistemu1	7
3.1. Diferencijalni efikasni presek1	7
3.2. Nuklearno rasejavanje1	8
3.2.1. Rasejanje neutrona na jednom atomskom jezgru1	8
3.2.2. Koherentno i inkoherentno rasejanje1	9
3.2.3. Elastično rasejavanje snopa neutrona na kondenzovanom sistemu2	0
3.3. Magnetno rasejavanje2	3
4. Unutrašnja struktura kondenzovanog sistema2	7
5. Reflektometar	0
5.1. Teorijske osnove refleksija na nemagnetim materijalima	0
5.1.1. Oblik talasne funkcije u homogenoj materijalnoj sredini	0
5.1.2. Fresnelove formule	1
5.1.3. Totalna refleksija3	3
5.1.4. Refleksija snopa neutrona sa slojevitog materijala	4
5.1.5. Površinske neravnine i interdifuzija3	5
5.2. Tipovi reflektometara3	7
6. Rezolucija reflektometarskog uređaja	9
6.1. Osnovne postavke3	9
6.2. Realizacija rezolucionih modova posredstvom čopera	9
7. Simulacije neutronskih instrumenata baziranih na Monte Karlo metodu4	1
7.1. Monte Karlo metod primenjen na neutron ray-tracing tehniku4	1
7.1.1. Opis modula i neutronskog instrumenta u programu4	1
7.1.2. Virtuelni eksperiment4	1
7.2. Monte Karlo neutron ray-tracing tehnika4	2
7.2.1. Reprezentacija neutrona u simulacijama4	2
7.2.2. Neutronski težišni faktor4	2
7.2.3. Rasejanje neutrona na uzorku4	3
8. Eksperimentalni deo4	5

8.1. Opis koncepta instrumenta45
8.2. Delovi instrumenta45
8.2.1. Neutronski vodič46
8.2.2. Sistem čopera49
8.2.2.1. Selekcioni čoperi49
8.2.2.2. Rezolucioni čoperi53
8.2.2.3. Kinetički modovi57
8.2.2.3.1. Jedan preskočen puls mod58
8.2.2.3.2. Dva i više preskočen puls modovi
8.2.2.4. GISANS fokusna opcija60
8.3. Virtuelni eksperiment61
8.3.1. Virtuelni eksperimenti sa uzorkom preporučenim od STAP komiteta61
8.3.2. Virtuelni eksperimenti sa uzorkom preporučenim od strane Radne Grupe63
Zaključak68
Literatura
Kratka biografija71
Ključna dokumentacijska informacija72
Key words documentation74

Na pvom mestu želim da se zahvalim dr Alexandar Ioffe-u koji mi je omogućio da 9 meseci provedem u stanici JCNS (Julich Centar for Neuron Science) u Minhenu i odradim eksperimentalni deo rada pod njegovim ko-mentorstvom. Pored toga bih mu zahvalio na velikom broju korisnih saveta i duskusija tokom izrade rada koji su mi pomogle u boljem razumevanju procesa vezanih za rasejavanje neutorna na kondenzovanim sistemima, kao i boljem razumevanju fizike uopšte.

Dr Stefanu Mattauch-u na velikom broju diskusija i saveta vezanih za samu temu eksperimentalnog rada koji su mi pomogle u boljem razumevanju procesa vezanih za rasejavanje neutorna na kondenzovanim sistemima, kao i za veliku pomoć pri svakodnevnoj realizaciji zadataka vezanih za eksperimentalni rad.

Mom mentoru profesoru dr Miodragu Krmaru, svim profesorima i asistentima sa katedre za nuklearnu fiziku Departmana za fiziku koji su imali dosta razumevanja tokom mojih studija, a vezano za moje odsustovanje sa fakulteta. Posebno zahvaljujem profesoru Krmaru na korisnim savetima, sugestijama i pomoći tokom pisanja rada.

Mojim najbližima na velikoj podršci tokom pisanja rada.

Hvala Vam puno svima!

Metodom neutronske relfektometrije moguće je doći do informacija o unutrašnjoj strukturi nekih od značajnijih klasa kompleksnih materijala: magnetnih i nemagnetnih nanočestica, biosenzora kao i hibridnih struktura koje se sastoje od slojeva magnetnih i nemagnetih komponenata razdvojenih kontaktnim površinama.

Tokom rasejavanja dolazi se do informacija o mikroskopskoj strukturi uzoraka na nedestruktivni način, što znači da nakon ozračivanja snopom neutrona ne dolazi do drastičnog narušavanja sastava i strukture uzorka. Ovo predstvalja glavni razlog zbog koga se metode rasejavanja x zraka i neutorna jako popularne u ispitivanju materijala. Neutroni za razliku od x zračenja imaju i dodatne prednosti koje proističu iz samih osobina istih. Moguće je izvršiti izotropsku analizu samog uzorka što je veoma korisno u slučaju ispitivanja mekih materijala. Zbog postojanja spina moguće je doći do informacija o unutrašnjoj magnetnoj strukturi materijala, a uz korišćenje i polarizacione analize moguće je sondirati unutrašnju strukturu većine kompleksnih magnetnih materijala, helikoidne i nekolinearne magnetne strukture.

Velika penetraciona dubina neutrona u materijalima, izuzev materijala koji u sebi sadrže izotope visoke vrednosti efikasnog preseka, omogućava dubinsko sondiranje uzorka kompleksnih materijala koji su postavljeni u specijalne držače radi ostvarenja ekstremnih uslova, npr. povišen pritisak, za razliku od x zračenja i elektrona čija je penetraciona dubina manja.

Jedan od najvećih problema sa kojim se susreću naučnici u tankim filmovima čvrstih materijala predstvalja analiza osobina kontaktne površine između dva sloja u heterogenoj slojevitoj strukturi. Feromagnetizam između dva antiferomagnetna ili paramagnetna sloja, superprovodnost kontaktne površine, magnetno optički efekti kao i Hall efekat. U navedenim primerima potrebno je razumeti strukturnu i magnetnu organizaciju kontakne površine na namometarskoj skali. Posredstvom ove metode je moguće doći do potrebnih informacija.

Neutroni su se pokazali kao veoma značajna tehnika u slučaju izučavanja strukture i osobina novih magnetnih faza, MnSi i Mn baziranih materijala, čije razumevanje bi dovelo do kreiranja novih spinotronik uređaja.

Jedna od mogućih primena je analiza topologije faza, topologijski izolator (TI), u kojima nova elektronska faza je provodna na površini, a u unutrašnjosti pokazuje osobine izolatora. Pored toga provodni elektroni su razdvojeni po spinskim stanjima posredsvom čega postoji mogućnost realizacije praktičnih spinotronika. Na ovom polju postoji još dosta nejasnoća vezanih za same električne i magnetne osobine materijala, koji u narednom periodu treba da budu razjašnjenje.

Trend u narednom periodu je i minimizacija magnetnih elemenata, magnetne nanočestice i nanotube, na skale reda nm. Kako na tako maloj skali uticaj okoline na sam magnet postaje veoma bitan, razumevanje ovih procesa dovelo bi do kreiranja novih tipova memorijskih uređaja kao i senzora. Pored toga utrlo bi put ka razvoju novih materijala.

U slučajevima hibridnih materijala razumevanje osobina same kontakne površine, nastale pri spajanju dva sloja različitog hemijskog sastava. Ovo pre svega je veoma značajno u slučajevima biloških nauka, biosenzora i transplantacionoj medicini (mehanički uređaji). Oni predstavljaju spoj biološkog i metalnog ili poluprovodničkog materijala. Transplataciona medicina sa druge strane ima interes u boljem razumevanju procesa koji bi doveli do boljeg prihvatanja mehaničkih instrumenata (veštačkih organi) od strane ljudskog.

U molekularnoj biologiji nalazi mesto u ispitivanju takozvanih blid spot površina. Boljim razumevanjem strukture i međusobne interakcije biomembrana i proteina omogućilo bi pronalaženje leka za mnoge bolesti (npr.Pakinsonova bolest).

Primena u naukama o životnoj sredini dovela bi do boljeg razumevanja procesa koji se odvijau između nanočestica i okolne atmosfere, kao i tretmana vode.

Doprinelo bi razumevanju hemijskih procesa lubrikanata ili aditiva na metalnoj podlozi, vetrogeneratora, u građevinarstvu razumevanju površinskih reakcija kompleksnih silikona,

keramičko/metalnih slojeva, presvalačenja podloga tečnim metalima, medicinskim veštačkim implantima i tansportu lekova.

Pored svega gore navedenog jedna od najznačajnijih primena je u slučaju energetskih materijala, baterija. U toku narednih decenija trend u svetu će biti smanjenje efekta staklene bašte što će podrazumevati smanjenje upotrebe fosilnih goriva i povećanje upotrebe zelenih tehnologija, obnovljivih izvora enegije. Proizvodnja energije iz ovakvih izvora zavisi od uslova spoljašnje sredine, s toga postoji potreba da u momentima kada ovakvi izvori ne generišu energiju, taj manjak se nadomesti iz skladišta, koje je sačinjeno od velikog broja baterija.

Razmatrajući trenutne i buduće potrebe naučnika koji se bave mekim materijalima zaključeno je da potreba za niskoj vrednosti šuma pri što većem intenzitetu zračenja je ključni faktor koji obezbeđuje povećavanje Q opsega reflekcione krive i omogućava ekstrakciju mnogo tačnijih i detaljnijih podataka o ispitivanom sistemu. Visoka vrednost fluksa neutrona omogućava realizaciju merenja u kraćem vremenskom intervalu kao i praćenje hemijskih i bioloških reakcija na kraćoj vremenskoj skali. Za ove svrhe dugopulsni izvor, ESS (evropski spalacioni izvor), proizvodi sasvim veliki lambda opseg što obogućava veliki Q spektar i u isto vreme omogućava snimanje u jednom pulsnom modu reflekscione krive. Potreba snimanja malih uzorka u skorije vreme postavlja zadatak za naučnu zajednicu, kako kreirati instrumente čiji snopovi neutrona su fokusirani na 1x1 cm². Razlog upotrebe malih uzoraka je mogućnost realizacije veoma čistih, homogenih uzoraka tako da informacije koje se dobijaju nakon eksperimenta su preciznije nego one koje se dobijaju analizom većih uzoraka, bulk uzoraka.

Zbog sve veće potrebe snimanja uzorka u sredinama određenih parametara, povišene ili redukovane temperature u odnosu na sobnu kao i povećanom ili redukovanom pritisku u odnosu na atmosferski, potrebno je da kontejner nosača uzorka ima mogućnost nameštanja ovakvih parametara. U ovom uređaju to je omogućeno.

1. Osobine neutrona

Neutron je prvi put detektovan 1932. godine u eksperimentu ozračivanja belirijuma snopom alfa čestica od strane James Chadwick

$${}^{4}_{2}\alpha + {}^{9}_{4}Be \rightarrow {}^{12}_{6}C + {}^{1}_{0}n \tag{1.1}$$

fluks neutrona dobijen posredstvom ove nuklearne rekacije iznosio tek 10 n cm⁻² s⁻¹. Ovako nizak intenzite snopa nije bio pogodan za rasejavanja neutrona na kondenzovanim sistemima, tek 1942. godine prvi izvori, reaktori u Čikagu i Oak Ridge su otpočeli sa radom i od tada ova tehnika počinje da dobija na važnosti. Konstrukcijom difraktometra od stane Shull 1945. i rešavanje magnetne strukture MnO₂ zvanično je otpočela masovno korišćenje neutrona u ispitivanju materijala. Shull-u je 1994. godine uručena Nobelova nagrada za doprinos afirmaciji tehnike rasejavanja neutrona u ispitivanju sistema kondenzovane materije. Zbog kratkog perioda poluraspada od oko 900 s njih je potrebno konstantno generisati za potrebe eksperimenata. Raspad neutrona, beta raspad, dat je posredstvom sledeće relacije

$$n \rightarrow p^+ + e^- + \overline{v} \qquad (+0.77 \, MeV) \tag{1.2}$$

Veoma veliki značaj neutrona u ispitivanju kondenzovane materije je posledica osobina samog neutrona.

Zbog električne neutralnosti neutronima je moguće izvršiti dubinsku penetraciju u kondenzovanom sistemu i dobiti informacije o unutrašnjoj strukturi, za razliku od elektrona i masivnih naelaktrisanih jezgara (alfa čestice), gde se dobijaju informacije o površinskoj strukturi. Čak i x-zraci koji se kao i neutroni smatraju bulk tehnikom, vrednost dubine penetracije u materijal im je ograničena na nekoliko stotina nm.

Kako neutron interaguje putem nuklearne interakcije, moguće je vršiti izotopsku analizu sastava kondenzovanog sistema, što je putem ostalih metoda veoma teško izvesti. Posebno je od koristi ova analiza u slučajevima kada uzorak sadrži atome vodonika, ugljenika i kiseonika,koji su veoma blizu teških atoma.

S obzirom da poseduje magnetni moment, posredstvom neutrona je moguće ispitivati magnetne osobine samih uzoraka. Analizom pravca rasejavanja moguće je dobiti informacije o magnetnoj strukturi, orijentaciji magnetnih domena (analizom orijentacije spina nakon rasejavanja).

Termalnim neutronima (energije 0.025 eV, talasne dužine 1.8 A, Slika 1.1) je moguće izvršiti merenja i doći do podataka o dinamičkim parametrima uzorka, energiji oscilovanja kristalne rešetke kao i o magnonima (spinskim talasima).



Slika 1.1. Prikaz opsega energija neutrona od interesa za ispitivanje kondenzovanih sistema

2. Izvori neutrona

Slobodni neutroni su nestabilne čestice koje se raspadaju sa periodom poluraspada od 15 min, zbog čega ih je potrebno konstantno generisati. Oni se generišu najčešće posredstvom nuklearnih reakcija indukovane, spontane fisije i spalacije. Koja će od datih nuklearnih reakcija biti iskorišćena zavisi od nekolino činioca u čije razmatranje se ovde neće ulaziti, tek uzimanjem svih u obzir, moguće je odlučiti koji od datih izvora je najsvrsishodniji.

Pored gore navedenih u budućnosti se planira da fuzioni reaktori preuzmu glavnu ulogu kako u energetici tako i generisanju neutrona za naučna istraživanja i ostale potrebe. Trenutno se u svetu dosta radi na pronalaženju rešenja kao uspeti održati fuziju dovoljni vremenski period, a sa druge strane da zadovoljava ekonomski i bezbedni faktor.

2.1. Reaktor kao izvor

Nuklearna reakcija indukovane fisije je našla veliku primenu u energetici i vojnoj primeni. Prvi reaktor je pušten u rad 1942. godine u Čikagu od strane Enrico Fermija a prava atomska bomba napravljena je 1945. godine.

U procesu indukovane fisije dolazi do interakcije jednog teškog jezgra (mete) sa upadnom česticom (projektilom) pri čemu dolazi do apsorbcije upadne čestice od strane teškog jezgra i njegovog prelaza u novo radioaktivno jezgro koje se raspada na dva lakša uz emisiju nekoliko neutrona i gama fotona.

Kao primer za reakciju idukovane fisije uzeta je meta sačinjena od atomskih jezgra uranijuma-235 pri interakciji atomskog jezgra sa termalnim neutron kao produkti reakcije dobijaju se atomska jezgra ${}^{92}Kr$ i ${}^{141}Ba$ uz emisiju tri neutrona.



Slika 2.1. Prikaz indukovane fisije atomskog jezgra uranijuma-235, izvor wikipedia

Na ovom mestu važno je naglasiti da produkti reakcije nisu uvek isti, nego pored ovog kanala reakcije postoji još kanala po kojima je moguće da se reakcija odvija. Broj neutrona emitovanih varira u zavisnosti od kanala do kanala, zbog čega je nakon usrednjavanja dobija se vrednost od 2.4 neutrona koji bivaju emitovani po jednoj indukovanoj fisiji uranijuma-235. Pod ovim se podrazumeva da se maksimum distribucije broja neutrona nalazi na 2.46.

Posredstvom jedne indukovane fisije produkuje se samo 2.4 neutrona, kako je za odvijanje indukovane reakcije potreban jedan neutron, na kraju posredstvom indukovane fisije proizvede se 1.4 neutrona koji potom ulaze u nove reakcije indukovane fisije. Da bi se ova reakcija mogla koristiti za generisanje neutrona u reaktorima potrebno je da se broj neutrona drži pod kontrolom, tj. da se višak neutrona iz reaktora uklanja. Posredstvom apsorbcionih šipki (bora, kadmijuma ili gadolijuma), čija vrednost efikasnog preseka za zahvat termalnih neutrona je veoma velika i koje usled interakcije atomskog jezgra sa neutronom ne stavaraju nove.

Pored toga fluks neutrona je limitiran količinom energije koju je moguće odvesti iz reaktora, zbog potrebe stabilnosti samog reaktora. Prilikom jedne indukovane fisije pored emisije neutrona i produkata dolazi i do osobađanja određene količine energije, u slučaju uranijuma-235 oslobodi se oko 200 MeV. Primera radi, za reaktor od oko 58 MW fluks neutrona iznosi oko 10¹⁵ n/s.

Prednost reaktora u odnosu na druge izvore neutrona je u tome što reaktor kontinualno emituje dati fluks neutronskog zračenja, dok je mana kontinualnog režima potreba za čestim menjanje delova oko reaktora, vršenje remonta, zbog stalnog oštećivanja materijala od strane zračenja.

Ovaj problem je moguće rešiti postavljanjem reaktora u pulsni rezim rada. Prvi put ovakva realizacija ostavrena je na IBR (trenutno IBR-2M) reaktoru u Dubni. Ideja je da se određeni period reaktor nalazi u subkritičnom rezimu rada, koji odgovara vremenu trajanja pulsa. Ovo je realizovano posredstvom rotacionog reflektora neutrona, Slika 2.2.



Slika 2.2. Prikaz IBR-2 reaktora u Dubni, flnp.jinr.ru

Za održavanje indukovane fisije potrebno je držati vrednost fluksa neutrona konstatnim unutar gorivnih elemenata, što se realizuje posredstvom neutronskih reflektora. U ovom slučaju jedan deo reflektroskog sistema je konstruisan posredstvom čopera, na taj način kada je reflektorski sistem zatovoren dolazi do kreiranja pulsa neutrona čija dužina odgovara vremenu boravka reaktora u subrkitičnom stanju, nakon ponovnog otvaranja reflektorskog sistema reaktor napušta to stanje, i ulazi u normalni režim rada pri otvorenom reflektorskom sistemu. U ovom slučaju broj kreiranih neutrona posredstvom indukovane fisije je dovoljan samo za održavanje iste. Samo u subkritičnom režimu dolazi do kreiranja viška neutrona koji napuštaju reaktor i vode se posredstom neutronskih vodiča do instrumenata. Na ovaj način postignuto je smanjenje oštećenja prouzrokovanih radijacijom i produžen period eksplatacije gorivnih elemenata, na svakih 15-20 godina je potrebno vršiti zamenu. Snaga reaktora iznosi 2 MW , pri čemu je fluks neutrona u pulsu i integralni srednji fluks, reda veličine kao kod postojećih spalacioh izvora. Vreme trajanja pulsa u slučaju termalnih neutrona oko 240 µs dok u slučaju hladnih iznosi 340 µs. Ovaj sistem predstavlja međukorak između reaktorskih i spalacionih neutronskih izvora, pošto se kao izvor neutrona koristi nuklearna reakcija indukovane fisije, a radi u pulsnom režimu rada što je svojstveno spalacionim izvorima.

2.2. Spalacioni izvori

Pod pojmom spalacija podrazumevaju se nuklearne reakcije u kojima dolazi do interakcije visoko energetske čestice (projektil) sa atomskim jezgrom (obično teškim, meta) pri čemu dolazi do stvaranja od nekoliko do 30 neutrona po jednoj reakciji. Koliko će biti neutrona produkovano usko je povezano sa energijom upadne čestice i osobinama same mete, tako da se izborom mete i kinetičke energije upadne čestice može kontrolisati fluks neutrona.

Spalacioni izvori se nazivaju izvorima budućnosti iz razloga što je moguće u nekoj meri postići rezim rada reaktora. Moguće je spalacioni izvor postaviti u neku vrstu kontinualnog rezima. Primer je SINQ u Švajcarskoj. Bezbedniji su od reaktora tako da u slučaju akcidenta uticaj na životnu sredinu ne bi postojao, a pored toga paljenje i gašenje ovakvih izvora bilo bi jednostavnije. Svi novije izgrađeni ili planirani istraživački izvori su spalacionog tipa (SNS u Oak Ridgu, J-PARC u Japanu i trenutno u izgradnji ESS u Švedskoj).

Iako je integralni fluks novih pulsnih spalacionih izvora u nivou fluksa sadašnjih kontinualnih izvora, prednost se oslikava u nivou iskorišćenja datog fluksa neutrona, od strane korisnika. Najveću dobit u intenzitetu imaće time of flight instrumenti, iz razloga što oni rade u pulsnom režimu rada tako da trenutno iskorišćavaju samo mali deo generisanih neutrona, dok većina generisanih neutrona od strane kontinualnog izvora, reaktora, biva neiskorišćenja. Dok kod drugih instrumenata ova dobit neće postojati pošto oni rade u kontinualnom režimu.

Prvi spalacioni izvor koji je postao dostupan širokoj naučnoj zajednici je IPNS koji se nalazio u Aragonu, SAD, otpočeo je sa radom 1981. a zatvoren je 2008. Trenutno veliki broj spalacionih izvora postoji u svetu (ISIS (UK), J-PARC (Japan), SNS (SAD), SINQ (Švajcarska) i LANSCE (SAD)) i u planu je izgradnja novih ESS (Švedska) i CSNS (Kina).



Slika 1.2. Izgled ESS, izvor europeanspallationsource.se

Glavna razlika ESS-a (Europen Spallation Source) u odnosu na ostale izvore predstavlja režim rada. U odnosu na trajanje pulsa spalacioni izvori se mogu podeliti u dve grupe, na kratko pulsne i dugo pulsne izvore. Dok ostali izvori generišu puls trajanja nekoliko desetina mikrosekundi u normalnom režimu rada, kod nekih je moguće vreme trajanja pulsa povećati do jedne milisekunde, ESS će imati trajanje pulsa od skoro tri milisekunde, Slika 1.3. On je predstavnik dugopulsnih izvora.



Slika 1.3. Prikaz pulsa najznačajnih postojećih spalacionih izvora i ESS izvor <u>europeanspallationsource.se</u>

Glavna razlika između izvora je u načinu generisanja samog snopa neutrona. Kod kratkopulsnih izvora nakon ubrzavanja u linearnom akceleratoru protoni se upućuju u prsten čija je uloga da skladišti protone. Skladištenje se vrši na način: kada se izvrši jedna evolucija snopa protona u prstenu, u tom momentu se ubacuje sledeći snop, potom se čeka da novonastali snop izvrši jednu evoluciju nakon čega se ubacuje novi. Ovaj postupak se primenjuje dok se ne dostigne željeni fluks protona nakon čega se snop iz prstena upućuje na metu. Interakcijom visoko energetskih protona sa metom dolazi do procesa spalacije nakon čega dolazi do kreacije neutrona. Vreme trajanja pulsa neutrona određeno je bliskošću energija protona i vrstom moderatora koji se koristi. Kod dugopulsnih izvora koriste se mnogo kompleksiji akceleratori koji rade u kontinulnom režimu određeni period, a koje odgovara vremu trajanja pulsa, nakon čega nastupa pauza radi hlađenja mete.

ESS akcelerator sačinjen je od klasičnog (od LEBT do DTL) i superprovodnog (Spokes, Medium β , High dela β) akceleratora. Posle ovog dela dolazi (HEBT) deo, čija će u početku namena biti transport visoko energetskih protona do mete, dok se u budućnosti planira ugradnja dodatnih akceletorskih elemenata radi postizanja viših energija protona što bi za posledicu imalo povećanje fluksa neutrona emitovanih sa mete.

Parametar	Jedinica	Vrednost
Energija	GeV	2.5
Jačina struje protonskog snopa	mA	50
Dužina pulsa	ms	2.86
Frekvencija emitovanja pulseva	Hz	14
Srednja snaga izvora	MW	5
Snaga tokom jednog pulsa	MW	125

Tabela 1.1. Parametri ESS akceleratora

Protoni čija je kinetička energija bliska brzini svetlosti se direktno vode na metu koja je sačinjena od volframa. Proces generisana neutrona na meti sastoji se od interakcije visoko energetskih protona koji posredstvom spalacije sa atomskim jezgrima volframa kreiraju visoko energetske neutrone, energija reda MeV, koji se dalje vode na pre moderator i moderator gde dolazi do moderacije.

Sistem moderacije neutrona je dvostepen. Pre moderator u ovom slučaju ima ulogu termalnog moderatora, dok moderator koji je sačinjen od tečnog vodonika ima ulogu hladnog moderatora. Na ovaj način u posredstvom istog neutronskog vodiča transportuju se i hladni i termalni neutroni. Ovakva realizacija pokazala je se uspešnom u slučaju HZB (Helmholz Zentrum Berlin).

Zbog visoke energije samih protona kao i energije produkata nuklearnih reakcija protona sa atomskim jezgrom pri procesu spalacije meta se veoma zagreva, zbog čega je potrebno hladiti. Problem je rešen na taj način što je meta postavljena na rotirajući nosač. Procenjeno je da životni vek mete je u rasponu od 6 meseci do nekih 5 godina u zavisnosti od načina uopotrebe.

Intenzitet fluksa neutrona biće 30 puta veći od onog koji je moguće dobiti na SNS i ISIS. Pored toga vrednost srednjeg fluksa neutrona imaće vrednost kao u slučaju ILL, stim što će vrednost inteniziteta u piku biti oko 30 puta veća, Slika 1.3.

2.3 Termalizacija neutrona i moderatori

Termalizacija neutrona predstavlja proces u kome dolazi do smanjivanja brzine (energije), neutrona sa nekoliko MeV na 0.025 eV. Ovo smanjenje energije može biti realizovano u jednoj interakciji, ali obično se desi više interakcija neutrona sa atomskim jezgrima materijala kroz koji se neutron prostire.

Materijali koji imaju osobinu usporavanja neutrona nazivaju se moderatori. Postoji više vrsta moderatora, u zavisnosti od temperature samog moderatora, mogu se podeliti na tople, termalne i hladne. Fizički gledano, proces usporenja je isti za sve tri vrste moderatora, jedina razlika je u energiji koju neutron ima nakon napuštanja moderatora. U ovom delu predstavljeni će biti procesi koji se odvijaju u termalnim moderatorima.

2.3.1. Termalizacija

U početku procesa termalizacije, ako je energija upadnog neutrona dovoljna za pobudu atomskog jezgra, postoji određena verovatnoća da neutron interaguje u prvih par sudara sa atomskim jezgrom posredstvom neelastičnog rasejanja, ali nakon par sudara interakcija se odvija isključivo elastičnim rasejanjem. Pored rasejavanja neutrona moguće su i reakcije apsorbcije neutrona. O značaju apsorpcije neutrona u procesu moderacije biće više reči u nastavku.

Pod elastičnim rasejanjem smatra se rasejanje pri kome totalna kinetička energije sistema neutron-atomsko jezgro ostaje nepromenjena, dok pod neelastičnim rasejanjem to nije slučaj pošto se deo totalne kinetičke energije konvertuje u unutrašnju energiju atomskog jezgra. Pored toga razlika između elastičnog i neelastičnog rasejanja je i u tome što u slučaju elastičnog rasejanja ne postoji prag reakcije dok kod neelastičnog postoji. Energija koju je potrebno da poseduje neutron da bi došlo do neelastičnog rasejanja data je sledećom formulom

$$E_{praga} = \frac{A+1}{A}Q \tag{3.1}$$

pri čemu je A - maseni broj i Q - najniža eksitaciona energija atomskog jezgra. Zbog toga što samo u prvih par interakcija neutrona sa atomskim jezgrom se može očekivati da se desiti interakcija posredstvom neelastičnog rasejanja, obično se u celom procesu termalizacije (usporavajućem domenu) uzima da se interakcija vrši posredstvom elastičnog rasejanja.

Pri elastičnom rasejanju tokom interakcije, deo kinetičke energije neutrona prelazi na jezgro. Za neutron kinetičke energije E koji interaguje sa atomskim jezegrima masenog broja A, srednji gubitak energiji po jednom sudaru dat je relacijom:

$$\Delta E = \frac{2EA}{\left(A+1\right)^2} \tag{3.2}$$

Koristeći ovu relaciju možemo pratiti gubitak energije po putu i naći koliki je najmanji broj elastičnih sudara potreban, da bi energiju sa neke vrednosti doveli na neku drugu. Na primer, ako se posmatraju atomska jezgra vodonika (A=1), srednji energetski gubitak ima vrednost od E/2. Ako se posmatra neutron početne kinetičke energije E = 2MeV, posle prvog sudara sa atomskim jezgrom njegova energija biće E = 1MeV, nakon drugog E = 0.5MeV i itd. Da bi se izvršila termalizacija brzog neutrona kinetičke energije E = 2MeV potrebno je 27 elastičnih sudara. Neutron kinetičke energije E = 0.025eV naziva se termalnim, pošto se nalazi u termodinamičkoj ravnoteži sa okolnim sredinom. Koriseteći relaciju:

$$E = kT \tag{3.3}$$

Gde je k - Bolcmanova konstanta a T - temperatura izažena u kelvinima.

Može se izračunati da energija od E = 0.025 eV odgovara sobnoj temperaturi T = 293K. Uopšteno nakon n elastičnih sudara, energija neutrona se menja od početne vrednosti E_0 do vrednosti E_n koja je data relacijom:

$$E_n = E_0 \left[\frac{A^2 + 1}{(A+1)^2}\right]^n \tag{3.4}$$

A ako želimo da znamo koliko je elastičnih sudara potrebno da bi vrednost energije neutrona sa E_0 doveli na E_n koristimo sledeću relaciju:

$$n = \frac{Log[\frac{E_n}{E_0}]}{Log[\frac{A^2 + 1}{(A+1)^2}]}$$
(3.5)

U Tabeli 2 dat je broj elastičnih sudara koji je potreban da se desi, da bi se energija neutrona od E = 2MeV spustila na termalnu u nekoj materijalnoj sredini.

Tabela 1.2: Srednji broj elasti	čnih sudara	koji je potreba	n da se desi	, da bi se ene	ergija neutrona sa
2 <i>MeV</i> spustila na 0.025 <i>e</i> V	V				

Element	Atomska masa	Broj elastičnih sudara
Vodonik	1	27
Deutrijum	2	31
Helijum	4	48
Berilijum	9	92
Ugljenik	12	119
Uranijum	238	2175

Posle određenog broja interakcija neutrona sa atomskim jezgrima, kinetička energija neutrona odgovara energiji energetskog nivoa atomskog jezgra (rezonanti pikovi) usled čega verovatnoća da će doći do apsorbcije raste. Sa druge strane nakon što se neutron u potpunosti termalizuje on i dalje učestvuje u interakcijama sa ostalim atomskim jezgrima usled čega određeni broj neutrona mogu preuzeti energiju od strane atomskog jezgra moderatora i povisiti svoju energiju i na taj način se dobija da određenom broju neutrona prosečna kinetička energija je povišena u odnosu na termalnu. Radi toga je potrebno razlikovati slučaj kada dolazi do potpune termalizacije neutrona (idealan slučaj) od realnog asimtotskog slučaja gde neutroni nisu u potpunosti termalizovani.

2.3.2. Efekti moderacije

Moderatori su materijali koji imaju visoki efikasni presek za elastično rasejanje sa neutronima. Usled interakcije neutrona sa atomskim jezgrima moderatora, dolazi do redukcije brzine neutrona tako da se sa neke početne vrednosti brzina neutrona redukuje do termalne vrednosti.

Standardna mera za upoređivanje moderatorskih osobina različitih elemenata je moderatorska moć. Ako jedan materijal ima veću moderatorsku moć nego drugi, onda je manje tog materijala potrebno utrošiti da bi se dobio isti efekat moderacije, a gledano sa ekonomske strane jako je koristno poznavati moć moderacije elemenata. Dva faktora su jako značajna pri određivanju moći moderacije

- Verovatnoća interakcije neutrona sa atomskim jezgrima materijalne sredine preko procesa rasejanja, obično elastičnog.
- Poznavanje srednje promene energije neutrona interakcije rasejanja

Da bi moderator imao veliku moć moderacije, tj. da bude efikasan moderator, potrebno je da verovatnoća interakcije bude što veća i da srednja promena energije usled rasejanja bude što veća. Moderatorska moć se definiše kao $\xi \sum_{s}$, gde Σ_{s} sa označen makroskopski efikasni presek za rasejanja i sa ξ označen srednji logaritamski energetski dekrement rasejanja. Ovaj dekrement jednak je $\ln(E_{pre}) - \ln(E_{posle})$. Kada je dominanti tip interakcije neutrona sa elementom atomske težine A rasejanje elastičnog tipa onda se derement računa po sledećoj relaciji:

$$\xi = 1 - \frac{(A-1)^2}{2A} \ln \frac{(A+1)}{(A-1)}$$
(3.6)

Moderatorska moć smeše elemenata se može izračunati relacijom:

$$\xi \sum_{s} = \frac{\rho N_{a}}{M} (n_{1} \sigma_{1} \xi_{1} + n_{2} \sigma_{2} \xi_{2} + ...)$$
(3.7)

Gde je P- gustina smeše elemenata , M- molarna masa, N_a - Avogadrov broj, n_i - broj atoma određenog elementa u molekulu, σ_i -mikroskopski efikasni presek za rasejanje za element i, i \leq predstavlja logaritamski energetski dekrement za element i.

Iako neki materijali imaju veliku moć moderacije oni se ipak ne koriste u praksi zbog toga što imaju visok efikasni presek za apsorbciju. Takvi moderatori bi efikasno redukovali brzinu upadnih neutrona, ali posle redukcije samo mali deo snopa upadnih neutrona uspe da napusti sredinu moderatora sa redukovanom brzinom na nivo termalne, dok ostatak snopa biva apsorbovan od strane sredine moderatora. Zbog toga se uvodi nova mera kvaliteta moderatora koja se naziva moderatorski količnik na sledeći način $\xi \Sigma_s / \Sigma_a$, pri čemu Σ_a predstavlja makroskopski efikasni presek za apsorbciju . Visoka vrednost moderacionog količnika je jako poželjna iz razloga što to znači da dati moderatorski materijal ima visoku moć moderacije, a pored toga ima jako mali kojeficijent apsorbcije za termalne neutrone. Za smeše elemenata, moderatorski količnik se može izračunati kada u relaciju (1.16) umesto svakog σ_i ubaci σ_s / σ_a za element i.

U Tabeli 1.3 date su moderatorske moći kao i moderatorski količnici za neke često korišćene moderatore pri energijama neutrona u intervalu od 1eV do 100keV. Obična voda ima veću moć moderacije nego teška voda zbog toga što je atomska težina vodonika dvaputa manja od atomske težine deuterijuma. Sa druge strane, jezgra vodonika imaju veći efikasni presek za apsorbciju neutrona nego jezgro deuterijuma. Zbog razlike u apsorbcionom efikasnom preseku teška voda ima bolji količnik moderacije nego obična voda. Sa druge strane obična voda je veoma dostupnija i jeftinija od teške vode, te se samim tim, ona češće koristi. Čvrsti moderatori koji su dati u Tabeli 1.3

imaju veći moderatorski količnik od obične vode. Polietilen je čest moderator van reaktora, zbog visoke moderatorske moći i moderatorskog količnika, dok je grafit, teška voda i voda čest moderator u reaktorima.

IIIatei Ijaia		
Moderator	Moderatorska moć (od 1eV do 100keV)	Moderatorski količnik (od 1 <i>eV</i> do 100 <i>keV</i>)
Voda	1.28	58
Teška Voda	0.18	21 000
Belirijum	0.16	130
Grafit	0.064	200
Polietilen	3.26	122

Tabela 1.3. U tabeli je data moderatorska moć i količnik često korišćenih moderatorskih materijala

2.4. Tipovi moderatora

Postoje više tipova moderatora, koji se mogu klasifikovati po temperaturi (tj. Prema energiji izlaznog neutrona) na tople (1500 K), termalne (300 K) i hladne (30 K), Slika 1.4.



Slika 1.4. Distribucija neutrona po brzinama u zavisnosti od tipa moderatora

Pod termalnim moderatorima podrazumevaju se standarni moderatori koji se nalaze na sobnoj temperaturi od 293 K. To su moderatori koji se nalaze između gorivni šipki posredstvom kojih se neutroni usporavaju i na taj način se povećava verovatnoća interakcije neutrona sa atomskim jezgrom što dalje povlači da je potrebno manje nuklearnog goriva za održavanje kontrolisane fisije. U primeru reaktora FRMII u Minhenu, gorivna šipka potopljna u moderator koji je ispunjen teškom vodom, dok se za hlađenje koristi obična nejonizovana voda koja protiče po sredini paralelno sa

gorivnom šipkom.

Pod toplim moderatorima podrazumevaju se modeteratori čija je temperatura viša od sobne temperature obično se radi o temperaturama reda veličine 1000 K. Moderatori se obično drže na određenoj povišenoj temperaturi posredstvom fluksa gama fotona iz reaktora. Obično se nalaze oko samog centra jezgra reaktora na nekoj udaljenosti, uronjen u termalni moderator. Oblik dimenzije i ostale karakteristike toplih moderatora se modeluju po zahtevima. U reaktoru FRMII u Minhenu topli moderator napravljen je od grafita.

Hladni moderatori se postavljaju na određenu udaljenost od centra jezgra reaktora iz razloga što je za razliku od toplog moderatora ovde zračenje gama foton, stvara probleme vezane za održavanje temperature samog moderatora, a sa druge strane važno je da budu što bliže da pokupe što više neutronskog fluksa. Obično se u ovom slučaju se pravi kompromis između fluksa neutrona i radne temperature, dok u slučaju toplih nije bilo potrebe pošto se topli moderatori mogu postavljati odmah uz jezgro reaktora. Kao i topli moderator i ovaj moderator je uronjen u termalni moderator. Obično radne temperature ovakvih moderatora se kreću u ntervalu od par do nekoliko desetina K.

3. Teorija rasejavanja neutorna na kondenzovanom sistemu

3.1. Diferencijalni efikasni pesek

Diferencijalni efikasni presek za neelastično rasejanje je definisan posredstvom relacije (3.1)

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{C}{\eta \Phi N \Delta \Omega \Delta E}$$
(3.1)

gde je Φ - fluks upadnog snopa neutrona, *C* - broj detektovanih neutorna u energetskom intervalu ΔE i prostornom uglu $\Delta \Omega$, η - efikasnost detekcije i *N* - broj identičnih atoma na kojima se vrši rasejavanje neutrona.



Slika 3.1.Diferencijani efikasni presek

U nekim slučajevima od interesa, kada energetska analiza nije potrebna ili u slučajevima slabe energetske rezolucije detektora, posmatra se samo ugaona distribucija neutrona, $d\Omega$, u pravcu θ , ϕ , Slika 3.1., tako da je diferencijalni efikasni presek za elastično rasejanje definisan posredstvom relacije (3.2)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{C}{\eta \Phi N \Delta \Omega}$$
(3.2)

Vrednost verovantoće sa kojom će doći do interakcije neutrona i atomskog jezgra, bez razmatranja energije i ugla rasejanja, opisana je posredstvom relacije (3.3)

$$\sigma_{tot} = \frac{C}{\eta \Phi N} \tag{3.3}$$

Predhodne relacije povezane su na sledeći način

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_{0}^{\infty} \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right) dE'$$
(3.4)

$$\sigma_{tot} = \int_{po \ svim \ pravcima} \frac{d \sigma}{d\Omega} d\Omega$$
(3.5)

Rasejavanje neutrona na materijalu moguće je opisati diferencijalnim efikasnim presekom, pri čemu su talasni vektor i spin neutrona pre (k_0 i σ_0) i nakon rasejanja (k_1 i σ_1). U eksperimentu jedini podatak koji se dobija iz detektrora je broj detektovanih neutrona C, u prostornom uglu $d\Omega$, pri efikasnosti detekcije η .

$$C = N \Phi d\Omega \eta \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{k_0, \sigma_0 \to k_1, \sigma_1}$$
(3.6)

3.2. Nuklearno rasejanje

3.2.1. Rasejanje neutrona na jednom atomskom jezgru

Rasejavanje neutrona na atomskom jezgru vrši se posredstvom nuklearne sile. Kako je domet nuklearne sile reda fm, a talasna dužina termalnog neutrona reda 0.1 nm, rasejavanje neutrona na atomskom jezgru se može smatrati kao rasejavanje neutrona na tačkastom potencijalu. Uzimajući da je pravac kretanja neutrona po x -osi, vrednost talasnog vektora k i početak kooridnatnog sistema uzorka, umesto uzorka postavljeno je samo jedno atomsko jezgro, Slika 3.1., uz pretpostavku da se rasejavanje vrši posredstvom elastičnog rasejanja iz razloga energija neutrona koja nije dovolja na izazove ekscitaciju atomskog jezgra, dolazi se do talasne funkcije kojom se opisuje upadni talas

$$\Psi(r) = e^{ikx} \tag{3.17}$$

rasejani talas na rastojanju *r* opisan je talasnom funkcijom sledećeg oblika

$$\Psi(r) = -\frac{b}{r} e^{ikr} \tag{3.18}$$

gde je *b* - konstanta koja je nezavisna od θ , ϕ . Negativan znak odgovara pozitivnoj vrednosti *b* za odbojni potencijal. Ova konstanta se naziva dužina rasejanja. U opštem slučaju ona može da ima kompleksu prirodu

$$b = b_0 + b' + i b'' \tag{3.19}$$

gde je b_0 - karakteriše potencijalno rasejanje, dok su b' i ib'' realan i imaginaran deo rezonantnog rasejanja, usled formiranja složenog jezgra. Imaginarni deo predstavlja apsorbciju neutrona od strane atomskog jezgra i ovaj član je važan samo u slučaju nekoliko atomskih jezgara (¹⁰³ Rh, ¹¹³ Cd, ¹⁵⁷ Gd, ¹⁷⁶ Lu). Dužina rasejanja u slučaju takvih atomskih jezgara jako zavisi od energije upadnog neutrona. Kako u slučaju velikog broja atomskih jezgara, izuzev gore pomenutih, imaginarni deo može se zanemariti i uzeti da je vrednost dužine rasejanja realna.

Efikasni presek za rasejanje neutrona na jednom fiksnom atomskom jezgru može se izračunati na sledeći način. Ako je sa v data brzina neutrona pre i posle interakcije, onda je broj neutrona koji pada na određenu površinu dS u jedinici vremena

$$v dS |\Psi_{ras}|^2 = v dS \frac{b^2}{r^2} = v b^2 d\Omega$$
 (3.20)

dok je fluks upadnih neutrona dat relacijom

$$\Phi = v \left| \Psi_{upad} \right|^2 = v \tag{3.21}$$

korišćenjem relacije (3.20) i (3.21) dobija se

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{v b^2 d\Omega}{\Phi d\Omega} = b^2$$
(3.22)

integraljenjem po svim uglovima dolazi se do jednačine za totalni efikasni presek u slučaju rasejanje neutrona na fiksnom atomskom jezgru

$$\sigma_{tot} = 4 \pi b^2 \tag{3.23}$$

Vrednost dužine rasejavanja atomskog jezgra zavisi od spin stanja kompleksnog sistema atomskog jezgra-neutrona. Za atomsko jezgro spina *I* spin sistema atomsko jezgro - neutron može biti $I + \frac{1}{2}$ ili $I - \frac{1}{2}$. Svakom spinskom stanju pripisana je odgovarajuća dužina rasejavanja *b* , spinskom stanju $I + \frac{1}{2}$ pripisana je b^+ dok $I - \frac{1}{2}$ pripisana b^- . Ako je spin atomskog jezgra jednak nuli, spin sistema neutron-atomsko jezgro ima samo jednu vrednost spina $\frac{1}{2}$, kojoj odgovara jedna vrednost dužine rasejavanja. Iako ne postoji teorijski mehanizam za proračun dužine rasejavanja, na sreću, eksperimentalno je izmerena za veliki broj elemenata i njihovih izotopa sa velikom preciznošću. U slučaju rasejanja neutrona na atomskom jezgru nije primećena zakonitost po kojoj se menja vrednost dužine rasejavanja, kao u slučaju interakcije x zraka sa atomom. Razlog ovoj pojavi leži u činjenici da se dužine rasejavanja dobija superpozicijom rezonantnog i potencijalog dela, koji pokazuje blagi trend povećanja vrednosti sa povećanjem atomske mase elementa. Iako ovo na prvi pogled može da predstavlja problem, zahvaljujući ovom ponašanju vrednosti dužine rasejavanja na krivi efikasnog preseka u mogućnosti smo da indentifikujemo o kome se lakom atomu radi, za razliku od x zračenja gde bi posao indentifikacije bio mnogostruko komplikovaniji. Pored toga posredstvom neutrona moguće je indentifikovati o kom se izotopu radi i indentifikovati elemente bliskog rednog broja, dok je u slučaju x zraka to neizvodljivo. Zbog gore navedenih osobina metoda rasejavanja neutrona na atomskom jezgru predstavlja jednu od najpotpunijih metoda za analizu strukture kondenzovane materije.

3.2.2. Koherentno i inkoherentno rasejanje

Vrednost dužine rasejavanja ne zavisi samo od vrste elementa, nego i od vrste izotopa i kvantnog broja ugaonog momenta $I \mp 1/2$ sistema neutron-atomsko jezgro. Rasejani neutroni, reprezentovani preko odgovarajućeg talasa talasne dužine, koja odgovara De-Broljevoj, od strane različitih atomskih jezgara imaće različite faze i amplitude, zbog čega će samo određeni broj talasa postići međusobnu interfenciju. Kako je stepen postignute interferencije proporcionalan sa koherencijom upadnog snopa neutrona, potrebno je ustanoviti uslove koherencije samog snopa. Potrebno je na ovom mestu reći da postoje dva tipa koherencije longitudinala i transverzalna, Slika 3.2.

Longitudinalana koherencija reprezentuje dužinu na kojoj će dve komponente snopa sa

najvećom razlikom u talasnim dužinama (λ i $\lambda + \Delta \lambda$) biti u kontra fazi. Uslov za lontigudinalnu koherenciju, Slika 3.2. (a), dat je sledećom relacijom

$$l_{II} = \frac{\lambda^2}{2\,\Delta\,\lambda} \tag{3.24}$$

pri čemu je λ - talasna dužina neutrona u snopu koji je rasejan od strane uzorka i $\Delta\lambda$ - razlika u talasnoj dužini između neutrona date talasne dužine i nekog od ostalih neutrona u snopu. Uzimajući da je talasna dužina neutrona 5 A , i da drugi neutron ima talasnu dužinu 6A (

 $\Delta\lambda = 6A - 5A = 1A$) dolazi se do rezultata da na dužini od 8.33 A ove dve komponente će biti u fazi. Ovaj tip koherencije u eksperimentima sa rasejavanjem neutrona postaje tek znatan u slučaju rasejavanja hladnih neutrona (energije manje od 25 meV).

Transferzalna koherencija daje uslov vezano za osobine izvora. U slučaju izvora velikih dimenzija i velike divergenicije, dolazi do gubitka koherencije snopa. Uslov za transferzalnu koherenciju se izvodi iz Bragovog zakona u slučaju prvog minimuma ($\lambda/2 = d \cdot \sin \theta \approx d \cdot \theta$, slučaj malih uglova). Transferzalna koherencija je data sledećom relacijom

$$l_{\perp} = \frac{\lambda}{2\,\Delta\,\theta} \tag{3.25}$$

pri čemu je λ - talasna dužina neutrona i $\Delta \theta$ - divergencija snopa. Ona se može razlikovati u odnosu na koju dimneziju izvora koji se posmatra. U slučaju instumenata za neutronsko rasejanje transferzalna koherencija se kreira putem kolimacije tako da se vertikalna i transferzalna koherencija obično razlikuju, a time i osobine samog snopa. Zajedno, longitudinalana i transferzalna koherencija definišu koherentnu zapreminu. Ona predstavlja zapreminu u kojoj svi talasi kojima su reprezentovani neutroni međusobno interferiraju. Dimenzije ove zapremine su veoma male u poređenju sa dimenzijama uzorka, i kreću se reda nekoliko stotina angstrema u slučaju rasejavanja neutrona, do nekoliko mikrometara, u slučaju x-zraka. Rasejani talasi kojima su reprezentovani neutroni od strane dve koherentne zapremine ne nalaze se više u fazi tako da nema interferencije između ovih talasa, ne dolazi do sabiranja amplituda rasejanih talasa nego do sabiranja intenziteta, kaze se da se talasi od strane dve koherentne zapremine zapremine rasejavaju inkoherentno.



Slika 3.2. Tipovi koherencije neutronskog snopa

Uvođenjem pojma koherentnog i inkoherentog rasejavanja neutrona moguće je okarakterisati rasejavanje snopa neutrona na kondenzovanom sistemu putem nuklearne sile. Ono može biti koherentno i inkoherentno (izotopski i spinski).

3.2.3. Elastično rasejavanje snopa neutrona na kondenzovanom sistemu

Posmatrajmo elastično rasejavanje neutrona na 2D kristalu, Slika 3.3., koji je sastavljen od

atoma dva izotopa istog elementa, sa vrednošću scattering length za dva različita izotopa b_i koja se nalaze na fiksnom rastojanju R_i u kristalnoj rešetci. Interkacioni potencijal između neutrona i atoma, atomskoj jezgra, u kristalnoj rešetci dat je posredstvom Fermijevog pseudo potencijala

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m_n} \sum_i b_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$$
(3.26)

Amplituda rasejanja neutrona dobija iz predhodnog izraza korišćenjem Furije transforma

$$A(\boldsymbol{Q}) = \sum_{i} b_{i} e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{R}_{i}}$$
(3.27)

Kako pre merenja nije poznat raspored atoma u kristalnoj rešetci, za računaje efikasnog preseka rasejanja potrebno je uzeti da su različiti izotopi raspršeni u kristalnoj rešetci nasumično (radnom distribucija), zbog čega je potrebno uraditi usrednjavanje po distribuciji dužina rasejanja u uzorku

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \sim |A(\mathbf{Q})|^2 = \langle \sum_i b_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} \cdot \sum_j b_j^* e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i} \rangle$$
(3.28)

Kako su izotopi istog elementa hemijski istovetno ponašaju, distribucija izotopa (okarakterisani odogvarajućim b_i i b_j) je u potpunosti slučajna, nekorelisana. Posledica ovoga u slučaju $i \neq j$ očekivana vrednost proizvoda jednaka je proizvodu očekivanih vrednosti, samo u slučaju

i=j postoji korelacija između izotopa, zbog čega se pojavljuje dodatni član koji opisuje srednje kvadratno odsupanje od srednje vrednosti.

$$\langle b_i b_j \rangle = \{ \langle b \rangle \langle b \rangle = \langle b \rangle^2 \quad i \neq j \\ \langle b^2 \rangle = \langle b \rangle^2 + \langle (b - \langle b \rangle)^2 \rangle i = j \}$$
(3.29)

koristeći relacije (3.28) i (3.29) dolazi se do sledeće relacije za efikasni presek u obliku

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{Q}) = \langle b \rangle^2 |\sum_i b_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i}|^2 + N \langle (\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2) \rangle$$
(3.30)

prvi član u relaciji (3.30) opisuje koherentno rasejanje dok drugi član inkoherento. Prvi član sadrži fazni faktor e^{iQR_i} , koji je posledica koherente superpozicije talasa rasejanih od strane dva atoma (atomska jezgra). Drugi član u sebi ne sadrži informacije o fazi i proporcionalan je broju atoma. Ovaj član je nastao usled rasejanja neutrona na jednom atomu, i=j, nakon čega se intenziteti rasejanih talasa, a ne sabiraju amplitude.



Slika 3.3. Rasejavanje neutrona na 2D kristalnoj rešeci

U slučaju kada atomsko jezgro ima spin različit od 0, potrebno je relaciju efikasnog preseka korigovati dopisivanjem spinskog člana u izraz (3.30). Radi jednostavnosti pretpostavlja se da se rasejavanje neutrona vrši na hemijski čistom uzorku i da je orijentacija spinova neutrona i atomskih jezgara haotično distribuirana. Tokom procesa rasejavanja, spinsko stanje J sistema neutron-atomsko jezgro potrebno je razmotriti.

Atomsko jezgro spina *I* i neutron spina 1/2 mogu da grade samo dva spinska stanja, $J=J_+=I+1/2$ ili $J=J_-=I-1/2$. U prvom slučaju, spinovi neutrona i atomskoj jezgra su paralelni dok u drugom su antiparalelni. Broj projekcija spinskog stanja dat je relacijom 2J+1, tako da broj projekcija spinskog stanja J_+ iznosi 2I+2 dok J_- iznosi 2I. Ukupan broj mogućnosti iznosi 4I+2. Uz pretpostavku da je verovatnoća pojavljivanja ista dolazi se do sledećih izraza, koji nam daju verovatnoću p_+ i p_- realizacije spinskih stanja J_+ i J_- , respektivno.

$$p_{+} = \frac{I+1}{2I+1} , \quad p_{+} = \frac{I}{2I+1}$$
 (3.31)

Predhodna dva spinska stanja moguće je razlikovati iz razloga što su efikasni preseci, dužine rasejanja, za rasejavanje neutrona i atomskoj jezgra različitih spinskih stanja složenog sistema različiti. Koristeći predhodno gore navedeno dužina rasejanja iz relacije 3.29 moguće je predstaviti posredstvom sledećih izraza u slučaju kada spin atomskog jezgra ima vrednost različitu od 0

$$\langle b \rangle = p_+ b_+ + p_- b_- = \frac{(I+1)b_+ + Ib_-}{2I+1} = A$$
, $\langle b^2 \rangle = \sum_i p_i b_i^2 = p_+ b_+^2 + p_- b_-^2$ (3.32)

Rasejavanje od strane asambla čestica, čak i slučaju kada je uzorak hemijski čist, ali vrednost nuklearnog spina je različita od nule, spin-zavisno rasejavanje neutrona treba da se uzme u obzir. Diferencijalni efikasni presek za spin-zavisno rasejavanje neutrona na atomskom jezgru opisan je relacijom

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{spin-inkoh}} = N \frac{I(I+1)(b_{+}-b_{-})^{2}}{2(I+1)^{2}} = N B^{2} I(I+1)$$
(3.33)

pri čemu je

$$B = \frac{(b_{+} - b_{-})}{(2I+1)}$$
(3.34)

na kraju totalni diferencijalni efikasni presek za rasejanje neutrona na uzorku posredstvom nuklearne sile dat je relacijom

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{total}} = \frac{d\sigma}{d\Omega_{koh}} + \frac{d\sigma}{d\Omega_{inkoh}} + \frac{d\sigma}{d\Omega_{spin-inkoh}}$$
(3.35)

koristeći relacije (3.30), (3.33) i (3.35) dobija se relacija koja opisuje totalni diferencijalni efikasni presek za rasejavanje neutrona na atomskom jezgru posredstvom nuklearne interakcije

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{Q}) = \langle b \rangle^2 |\sum_i b_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i}|^2 + N \langle (\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2) \rangle + N B^2 I (I+1)$$
(3.36)

Iz koherentnog rasejavanja neutrona na atomskom jezgru u mogućnosti smo da dobijemo informacije o unutrašnjoj strukturi kondenzovanog sistema pošto sadrži fazni član, form faktor ili strukturni faktor, prvi član u relaciji 3.36, dok iz drugog i treće člana moguće je dobiti informacije o osobinama jednog atoma, auto-korelaciona funkcija. Ako je samo moguće dobiti informacije o pojedinačnim atomima postavlja se pitanje, zašto je potrebno praviti razliku između izotopski inkoherentnog rasejavanja (drugi član) i spin-zavisno inkoherentnog rasejavanja (treći član). Razlog je u tome što promenom odnosa izotopa u kondenzovanom sistemu moguće je smanjivati ili povećavati intenzitet neutrona rasejanih posredstvom izotopsko inkoherentnog rasejavanja, dok u slučaju spin-zavisnog inkoherentnog ovo nije slučaj (jedino u slučaju primene spoljašnjeg magnetnog polja i spuštanjem temperature kondenzovanog sistema , može se pokušati orientacija nuklearnih spinova, što nije čest slučaj u eksperimentima rasejavanja neutrona na kondenzovanim sistemima). Druga razlika je u tome što izotopsko inkoherentno rasejavanje ne utiče na promenu orijenacije spina neutrona nakon rasejanja, dok pri spin-zavisnom inkoherentnom rasejavanju dolazi do promene orijentacije spina u prostoru nakon rasejavanja. Pri koherentnom rasejavanju ne dolazi do promene spina neutrona nakon rasejavanja, tako da usled nuklearnog rasejavanja promenu u spinu neutrona u snopu uzrokovana je spin-zavisnim inkoherentnim rasejavanjem neutrona na kondenzovanom sistemu.

Sa stanovišta klasičnog ekperimenta u kome pokušavamo da saznamo unutrašnju strukturu kondenzovanog sistema, spin-zavisno inkoherentno rasejavanje predstavlja problem iz prostog razloga što u nekim slučajevima odnos intenziteta inkoherentnog prema koherentnom reda veličine 100 tako da je u tim slučajevima potrebno biti veoma obazriv u ekstrakciji podataka. Inkoherento zračenje može se u nekoj meri oslabiti na primer korišćenjem izotopski čistijih uzoraka, atomskih jezgara čiji je spin 0 ili povećavanjem stepena koherentnosti samog snopa zračenja.

3.3. Magnetno rasejavanje

Magnetno rasejavnje nastaje usled interakcije magnetnog dipolnog momenta neutrona sa magnetnim poljem neuparenog elektorna u atomu i predstvalja dipol-dipol interakciju, Slika 3.4 (a). Magnetno polje nesparenog elektorna sačinjeno je od spinske i orbitalne komponente.



Slika 3.4. Šematski prikaz interakcije neutona sa nesparenim elektornom u atomu

U ovom delu akcenat je na elastičnom magnetnom rasejanju. Polazeći od sledeće situacije , Slika 3.4 (b)., gde dolazi do interakcije jednog neutrona nuklearnog magnetnog momenta μ_N na udaljenosti **R** sa nesparenim elektronom okarakterisanim spinom **S** i brzinom evolucije oko atomskoj jezgra v_e .

Interakcioni potencijal kojim je opisana magentna interakcija neutrona sa elektronom dat je u obliku

$$V_m = -\mu_n \cdot \boldsymbol{B} \tag{3.37}$$

pri čemu *B* - magnetno polje koje generiše jedan elektron i μ_n - nuklearni magnetni moment neutrona koji je dat sledećom relacijom

$$\boldsymbol{\mu} = -\boldsymbol{\gamma}_n \boldsymbol{\mu}_N \boldsymbol{\sigma} \tag{3.38}$$

gde je μ_N - nuklearni magnetron, γ_N - žiromagnetni faktor neutrona koji iznosi -1.913 i σ -spinski operator neutrona koji je reprezentovan posredstvom Pauli spin matrica. Magnetno polje elektrona **B** potiče od spinske **B**_s i orbitalne **B**_L komponente elektrona. Spinska komponenta dipolnog polja data je relacijom

$$\boldsymbol{B}_{s} = \boldsymbol{\nabla} \times (\frac{\boldsymbol{\mu}_{e} \times \boldsymbol{R}}{\boldsymbol{R}^{3}})$$
(3.39)

gde je R - vektor položaja neutrona u odnosu na elektron i μ_e - magnetni moment elektrona dat relacijom

$$\boldsymbol{\mu}_{e} = -2\boldsymbol{\mu}_{B}\boldsymbol{S} \tag{3.40}$$

pri čemu je μ_B - Borov magnetron i S - vrednost spina elektrona. Orbitalna komponenta magnetnog polja je posledica rotacije elektrona oko atomskoj jezgra predstavljena je posredstvom Biot-Savart-ovog zakona

$$\boldsymbol{B}_{L} = \frac{-e}{c} \frac{\boldsymbol{v}_{e} \times \boldsymbol{R}}{\boldsymbol{R}^{3}}$$
(3.41)

gde je e - elementarno naelektrisanje elektorna, c - brzina svetlosti, v_e - brzina

elektorna i R - vektor položaja neutrona u odnosu na elektron. Koristeći relacije (3.37), (3.39) i (3.41) dolazi se do konačnog oblika za interakcioni potencijala

$$V_{M} = -\mu \cdot (\boldsymbol{B}_{s} + \boldsymbol{B}_{L}) = -\mu \cdot [\boldsymbol{\nabla} \times (\frac{\boldsymbol{\mu}_{e} \times \boldsymbol{R}}{R^{3}}) - \frac{e}{c} \frac{\boldsymbol{v}_{e} \times \boldsymbol{R}}{R^{3}}]$$
(3.42)

diferencijalni efikasni presek u prvoj Bornovoj aproksimaciji ima oblik

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m_n}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle \mathbf{k}' \sigma_z' | V_m | \mathbf{k} \sigma_z \rangle|^2$$
(3.43)

koristeći relacije od (3.37) do (3.43) dolazi se do izraza za diferencijalni efikasni presek

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (\gamma_n r_0)^2 \left| -\frac{1}{2\mu_B} \langle \sigma_z' | \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{M}_{\perp}(\boldsymbol{Q}) | \sigma_z \rangle \right|^2$$
(3.44)

faktor ispred zagrade $\gamma_n r_0$ ima vrednost od - 5.39 fm, dok je $M_{\perp}(Q)$ - komponenta magnetizacije kondenzovanog sistema koja je normalna na Q, vektor rasejanja, koja je reprezentovana posredstvom relacije

$$\boldsymbol{M}_{\perp}(\boldsymbol{Q}) = \hat{\boldsymbol{Q}} \times \boldsymbol{M}(\boldsymbol{Q}) \times \hat{\boldsymbol{Q}}$$
(3.45)

pri čemu magnetizacija u impulsnom prostoru data

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{Q}) = \int \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) e^{i\boldsymbol{Q}\boldsymbol{r}} d^{3}\boldsymbol{r}$$
(3.46)

totalna magnetizacija kondenzovanog sistema data je relacijom

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{M}_{\boldsymbol{s}}(\boldsymbol{r}) + \boldsymbol{M}_{\boldsymbol{L}}(\boldsymbol{r})$$
(3.47)

$$\boldsymbol{M}_{s}(\boldsymbol{r}) = -2\boldsymbol{\mu}_{B} \cdot \boldsymbol{S}(\boldsymbol{r}) = -2\boldsymbol{\mu}_{B} \sum_{i} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_{i}) \boldsymbol{S}_{i}$$
(3.48)

Posredstvom ove metode moguće je dobiti informacije o magnetizmu na mikroskopskim dužinama što nam daje mnogo više informacije nego konvencionalne makroskopske metode merenja magnetizacije.

Za razliku od nuklearnog rasejavanja, magnetno rasejavanje pokazuje zavisnost rasejavanja neutrona od međusobnog položaja vektora magnetizacije i vektora rasejanja u prostoru. Neutroni se samo rasejavaju posredstvom magnetne interakcije u slučaju kada je ugao između vektor rasejavanja i vektora magnetizacije 90 stepeni, Slika 3.5.



Slika 3.5. Uzajamni položaj vektora rasejavanja i vektora magnetizacije

To se može razumeti iz činjenice da je neutron rasejan na dipolnom polju elektrona, Slika 3.6.Kada je vektor magnetizacije paralelan sa vektorom rasejavanja, ravni koje seku dipolno

magnetno polje na način prikazan, Slika 3.6., zbog simetrije polje usrednjeno po ravnima isčezava, dok kada su ova dva vektora pod uglom od 90 stepeni polje postoji. Posredstvom ove zavisnosti u mogućnosti smo da odredimo orijentaciju vektora magnetizacije.



Slika 3.6. Prikaz direkcione zavisnosti dipolnog polja

Druga razlika između magnetnog i nuklearnog rasejavanja je u postojanju form faktora. Posredstvom ovoga faktora opisano je ponašanje amplitude rasejanja u odnosu na vrednost transfera momenta. Ovo je posledica činjenice da talasna dužina termalnog neutrona ima dumenzije slične sa dimenzijama elektronskog oblaka atoma. Analizom distribucije magnetnog polja nastalog od strane spina i usled kretanja neutrona oko atoma, Slika 3.7., primećuje se različita Q zavisnost za odgovarajući form faktor.



Slika 3.7. Distribucija magnetnog polja u zavisnosti od načina generisanja, levo usled evolucije elektorna oko atomskog jezgra i desno usled spina

Kako je amplituda rasejanja proporcionalna Furije transformu gustini stanja u direktnom prostoru, njena vrednost opada brže sa porastom vrednosti tranfera impulsa između neutrona i uzorka. Kako su nespareni elektroni lokalizovani u predelu elektronskog oblaka koji je najviše udaljen od atomskoj jezgra, magnetni form faktor u slučaju neutrona imaće trend brzeg opadanja vrednosti nego li u slučaju x zraka. U slučaju nuklearnog rasejavanja dimenzije jezgra su mnogo manje od dimenzija talasne dužine neutrona tako da neutron vidi jezgro kao tačkasti objekat te zbog toga amplituda rasejanja je nezavisna od transfera impulsa u slučaju rasejavanja neutrona na atomskom jezgru posredstvom nuklearne sile. Naravno, važno je napomenuti da magnetni form faktor može biti u opštem slučaju anizotropan, ako je distribucija gustine magnetih izvora anizotropna.

4. Unutrašnja struktura kondenzovanog sistema

U ovom paragrafu predstavljen je način na koji je moguće povezati diferencijalni efikasni presek sa unutrašnjom strukturom kondenzovanog sistema u slučaju nuklearnog i magnetnog rasejavanja neutrona.

Polazeći od homogene monoatomske tečnosti koju gradi *N* atoma koji se nalaze u zapremini *V*, verovatnoća nalaženja određenog atoma u elementu zapremine d^3r na poziciji *r* data je posredstvom $P(\mathbf{r})d^3r$ i zbog homogenosti $P(\mathbf{r})$ ima konstantu vrednost:

$$P(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \tag{4.1}$$

Gustina atoma u datom elementu na rastojanju r data je relacijom

$$\rho(\mathbf{r}) = NP(\mathbf{r}) = \frac{N}{V} \equiv \rho_0 \tag{4.2}$$

Gustina verovatnoća pronalaženja određenog atoma na poziciji r_1 i drugog na poziciji r_2 predstavljena je preko $P(r_1, r_2)$. Glavne osobine ove funkcije su sledeće

$$P(r_1, r_2) = P(r_2, r_1)$$
 (4.3)

$$\int_{V} d^{3}r_{2}P(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) = P(\mathbf{r}_{1})$$
(4.4)

U slučaju nepostojanja interakcije između atoma gustina verovatnoće $P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ se može napisati u obliku

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = P(\boldsymbol{r}_1) P(\boldsymbol{r}_2) \tag{4.5}$$

U realnim tečnostima interakcija između atoma postoji i ona zavisi od rastojanja između atoma $r_{1,2}=r_2-r_1$. Devijacija vrednosti izraza sa desne strane u odnosu na levu stranu relacije (4.5) predstavljena je preko statičke korelacione funkcije

$$g(\mathbf{r}_{12}) \equiv \frac{P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{P(\mathbf{r}_1)P(\mathbf{r}_2)}$$
(4.6)

korišćenjem distribucione funkcije koja opisuje gustinu verovatnoće nalaženja jednog para atoma na poziciji r_1 i r_2 koja je data relacijom

$$n(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2}) = N(N-1)P(\mathbf{r}_{1},\mathbf{r}_{2})$$
(4.7)

dolazi se do konačnog izraza za statičku korelacionu funkciju u slučaju velikog broja atoma ${\it N}$

$$g(\mathbf{r}_{12}) = \frac{n(\mathbf{r}_{1}, \mathbf{r}_{2})}{\rho_{0}^{2}}$$
(4.8)

Osobine statičke korelacione funkcije prikazane su na Slici 4.1. U slučaju kada $r \rightarrow 0$ ona ima vrednost nula pošto dva atoma ne mogu da budu na istom mestu. Ovo razmatranje je moguće uopštiti i reći da predhodna tvrdnja važi dok god je zadovoljen uslov $r < r_0$, pri čemu je r_0 radius atoma. Kada $r \rightarrow \infty$ statička korelaciona funkcija ima vrednost jedan, iz razloga što sa povećavanjem rastojanja između atoma intenzitet međusobne interakcije opada, tako da na beskonačnoj udaljenosti između dva atoma se može smatrati da oni više ne interaguju. Na rastojanjima koja su između ove dve vrednosti dolazi do pojavljivanja pikova , čije pozicije odgovaraju minimumu interatomskog potencijala.



Slika 4.1. Prikaz interakcionog potencijala V(r) , pair korelacione funkcije g(r) i strukturnog faktora S(Q) za monoatomsku tečnost

Da bi se bolje razumela statička korelaciona funkcija na primeru je pokazan način na koji se ona primenjuje i način na koji su povezani diferencijalni efikasni presek i strukturni faktor. Koristeći relaciju (3.36) diferencijalni efikasni presek za koherentno rasejavanje neutorna na monoatomskoj (monoizotopskoj) tečnosti se može napisati u sledećem obliku

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{coh} = \langle b \rangle^2 \langle \sum_{i,j=1}^N e^{(iQ\cdot(r_i - r_j))} \rangle$$
(4.9)

koristeći statičku pair korelacionu funkciju predhodna relacija se transformiše

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{coh} = \langle b \rangle^2 \left(\langle 1 + \sum_{i \neq j}^N e^{(iQ \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j))} \rangle \right)$$
(4.10)

potom relaciju (4.10) transformišemo na sledeći način

$$= \langle b \rangle^{2} (N + \int_{V} d^{3}r_{1} \int_{V} d^{3}r_{2} n(\mathbf{r_{1}, r_{2}}) e^{(i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r_{1}-r_{2}}))})$$

= $\langle b \rangle^{2} (N + \rho_{0}^{2}V \int_{V} d^{3}r_{12} g(\mathbf{r_{12}}) e^{(i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r_{12}}))})$

$$= \langle b \rangle^2 N \left(1 + \rho_0 \int_V d^3 r_{12} g(\mathbf{r}_{12}) e^{(i \mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r}_{12}))} \right)$$
(4.11)

Iz predhodne relacije se vidi da se diferencijalni efikasni presek se može dobiti kao Furije transform statičke korelacione funkcije. Pretpostavljajući izotropnost tečnosti korelaciona funkcija $g(\mathbf{r}_{12})$ može se zameniti radijalnom korelacijonom funkcijom g(r)

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{coh} = \langle b \rangle^2 N \left(1 + 4\pi\rho_0 \int_0^\infty r^2 d^3 r g(r) \frac{sinQR}{Qr}\right)$$
(4.12)

član u zagradi relacije (4.7) i (4.10) predstavlja strukturni faktor koji jednoznačno definiše unutrašnju strukturu uzorka i ne zavisi od osobina zračenja kojim se ispituje uzorak (x zraci ili neutroni)

$$S(Q) \equiv 1 + \rho_0 \int_V d^3 r_{12} g(\mathbf{r}_{12}) e^{(i Q \cdot \mathbf{r}_{12})}$$
(4.13)

Kada $Q \rightarrow \infty$, $e^{(i Q \cdot r_{12})}$ funkcija naglo menja vrednosti , osciluje, usled čega vrednost integrala uzima vrednost 0

$$\lim_{Q \to \infty} S(Q) = 1 \tag{4.14}$$

dok u slučaju $Q \rightarrow 0$, S(Q) daje informacije samo o fluktuaciji broja čestica

$$\lim_{Q \to 0} S(Q) = V^2 \langle \delta \rho^2 \rangle = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \rho_0 k_B T k_T$$
(4.15)

gde je k_B - Bolcmanova konstanta, T - temperatura i k_T - izotermalna komperesija. U slučaju međuslučaju, primećuje se odrećeni broj širokih pikova, ostataka Bragovih pikova u čvrstom kristalnom stanju.

5. Reflektometar

Neutron reflektometrija je tehnika posredstvom koje je moguće dobiti informacije o povšininskom uređenju materijala u oblasti kontakta između dva različita materijala. Posredstvom ove tehnike moguće je ispitivati polimere i magnetne tanke filmove. Relativno je nova tehnika, tek sredinom 1980. godine je uvedena u upotrebu.

5.1. Teorijske osnove refleksija na nemagnetim materijalima

Monohromatično upadno neutronsko zračenje pada na površinu uzorka pod veoma malim uglom θ ($\theta \ll 5^{\circ}$), pri čemu može doći do refleksije pod istim uglom (spekularna refleksija, $\theta_u = \theta_i$ pri $\phi = 0$) ili pod različitim (nespekularna refleksija, $\theta_u = \theta_i + \phi$ pri $\phi \neq 0$). U ovom razmatranju težište će biti stavljeno na spekularnu refleksiju.



Slika 5.1. Šematski prikaz refleksije snopa neutrona

5.1.1. Oblik talasne funkcije u homogenoj materijalnoj sredini

Snop neutrona koji pada na površinu uzorka biće jednim delom reflektovan, a drugim transmitovan kroz uzorak, Slika 5.2. Proces refleksije na veoma homogenom kondenzovanom sistemu moguće je opisati posredstvom klasične optike, uz korišćenje indeksa prelamanja sredine n.



Slika 5.2. Prikaz procesa refleksije i prelamanje snopa (refrakcije) neutrona, (a) na slobodnoj površini i (b) na jednom sloju koji se nalazi na površini nosača uzorka

U slučaju kada se refleksija događa na jednom sloju koji se nalazi na nosaču mernog instrumenta refleksija i refrakcija (prelamanje) se dešavaju kako na površini tako i na graničnoj površini između sloja i nosača.

Kvantno mehanički moguće je doći do izraza za refleksiju i refrakciju snopa u sličaju perfektno ravnih površina na koji ma se dešava proces refleksije.

Šredingerova jednačina za talasnu funkciju neutrona ima oblik

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$
(5.1)

gde je E - kinetička energija neutrona.

Zbog malih uglova refleksije, a samim tim i malih vrednosti vektora rasejanja Q, vektora transfera impulsa, posredstvom reflektometra nije moguće ispitivati atomsku strukturu kondenzovanog sistema. Zbog toga je moguće predstaviti interakcioni potencijal posredstvom relacije

$$V_a = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\rho \tag{5.2}$$

gde je ρ - gustina dužine rasejanja predstavljena relacijom

$$\rho = \sum_{j} N_{j} b_{j} \tag{5.3}$$

pri čemu je N_j - broj atoma po jedinici zapremine i b_j - koherentna scattering length atomskoj jezgra j. Koristeći relaciju (5.1) i (5.2) dobija se

$$[\Delta + (k^2 - 4\pi\rho)]\Psi(\mathbf{r}) = [\Delta + k^2(1 - \frac{\lambda^2}{\pi}\rho)]\Psi(\mathbf{r}) = [\Delta + k_1^2]\Psi(\mathbf{r}) = 0$$
(5.4)

gde je $k_{\rm 1}$ - talasni vektor neutrona u materijalnoj sredini. Indeks prelamanja opisan je relacijom

$$n = \frac{k_1}{k} \quad \text{ili} \quad n \simeq 1 - \frac{\lambda^2}{2\pi} \rho \tag{5.5}$$

U slučaju termalnih i hladnih neutrona vrednost indeksa prelamanja je veoma bliska 1. Vrednost izraza 1-n je veoma mala 10^6-10^5 , a kako za većinu materijala je pozitivna (posledica pozitivne vrednosti koherentne scattering length za većinu izotopa), dolazi se do zaključka da je vrednost indeksa prelamanja u većini slučajeva manja od 1.

5.1.2. Fresnel-ove formule

Posmatrajmo sada slučaj kontaktne površine između vazduha i kvazi - beskonačnog medijuma, pri čemu je sama površina perfektno ravna. Uz pretpostavku da se položaj površine uzorka nalazi na z=0 (dekartov koordinatni sistem), potencijal interakcije se može napisati u obliku

$$V(z) = \{ \begin{array}{c} O \ za \ z > 0 \\ V_1 \ za \ z \le 0 \end{array} \}$$
(5.6)

Kako je potencijal V nezavisan od koordinata na samoj površini x i y, rešenje

Šredingerove jednačine (5.4) dato je relacijom

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i(k_x x + k_y y)} \Psi_z(z)$$
(5.7)

gde su komponente k_x i k_y talasnog vektora **k** nezavisne od *z*. Zbog ovoga je moguće Šredingerovu jednačinu svesti na jednodimenzionu

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + k_z^2(z)\Psi_z(z) = 0$$
(5.8)

gde $k_z(z)$ zavisi od materijalne sredine. Opšte rešenje ove jednačine dato je u obliku

$$\Psi_{zl}(z) = t_l e^{ik_{zl}z} + r_i^{-ik_{zl}z}$$
(5.9)

gde posredstvom indeksa l predstavljena je sredina kroz koju se prostire neutron, vakum (l=0) i l=1 materijalna sredina. Jedinstveno rešenje prethodne jednačine dobija se nakon upotrebe graničnih uslova. Upadni talas u vakumu pre interakcije sa uzorkom je predstavljen posredstvom upadnog talasa čija je norma 1. U polu-beskonačnoj materijalnoj sredini, ne dolazi do refleksije, $r_1=0$. Talasna funkcija i prvi izvod moraju biti kontinualne funkcije na datoj površini. Iz svega gore navedenog dobijeni su sledeći granični uslovi

$$t_{0}=1, r_{1}=0$$

$$\Psi_{z0}(z=0)=\Psi_{z1}(z=0)$$

$$\frac{d\Psi_{z0}}{dz}(z=0)=\frac{d\Psi_{z1}}{dz}(z=0)$$
(5.10)

koristeći (5.9) i (5.10) dolazi se do

$$1 + r_0 = t_1 \quad ; \quad k_{z0}(1 - r_0) = k_{z1}t_1 \tag{5.11}$$

gde je t_1 - amplituda transmitovanog talasa i r_1 - amplituda reflektovanog talasa. Refleksija *R* je definisana kao moduo kvadrata količnika amplituda rasejanog i upadnog talasa., dok je transmisija definisana kao moduo kvadrata količnika amplitude transmitovanog i upadnog talasa, relacija dato

$$R = |r_0|^2 \quad ; \quad T = |t_1|^2 \tag{5.12}$$

Na kraju dolazi se do Fresnel-ovih formula za refleksiju i prelamanje datih u obliku

$$R = \left| \frac{k_{z0} - k_{z1}}{k_{z0} + k_{z1}} \right|^2 \tag{5.13}$$

$$T = \left| \frac{2k_{z0}}{k_{z0} + k_{z1}} \right| \tag{5.14}$$

5.1.3. Totalna refleksija

Shell-ov zakona za refrakciju dat je u obliku

$$\frac{\cos\theta}{\cos\theta_1} = \frac{k_1}{k_0} = n_1 \tag{5.15}$$

Zbog činjenice da je vrednost indeksa prelamanja manja od 1, to dalje povlači činjenicu da je propušteni deo snopa refraktovan kroz površinu materijala. U slučaju kada je ugao između snopa neutrona i materijala manji od kritičnog ugla θ_c neće doći do refrakcije nego totalne refleksije upadnog snopa neutrona

$$n_1 = \cos \theta_c$$
; $\theta_c \simeq \lambda \sqrt{\left(\frac{\rho}{\pi}\right)}$ (5.16)

Proces totalne refleksije podrazumeva da celokupan snop neutrona biva reflektovan, tako da na prvobitnom pravcu prostiranja snopa na z osi nema više neutrona. Kada je ugao između pravca upadnog snopa neutrona i površine uzorka veći od kritičnog samo deo snopa biva reflektovan.

Koristeći relaciju (5.4) i (5.16) moguće je povezati normalne komponente talasnog vektora upadnog sa komponentama refraktovanog snopa

$$k_{z1}^2 = k_{z0}^2 + k_{z0,c}^2 \tag{5.17}$$

gde je

$$k_{z0,c} = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta_c = \sqrt{(4\pi\rho)}$$
 (5.18)

analizom relacija (5.17) i (5.18) dolazi se do zaključka da u slučaju kada je ugao između pravca upadnog snopa i površine uzorka, θ , veći od kritičnog ugla θ_c vrednost k_{z1} je imaginarna, što znači da se takav talas ne može detektovati i da po tom pravcu nema prostiranja talasa.

Posredstvom prethodne dve relacije u moguće je Fresnelov kojeficijent za refleksiju napisati u sledećem obliku

$$R = \left| \frac{Q - \sqrt{Q^2 - Q_c^2}}{Q + \sqrt{Q^2 - Q_c^2}} \right|$$
(5.19)

u opštem slučaju u eksperimentima vrednost refleksije je obično predstavlja funkciju upadnog ugla ili $Q = 2k_{z0}$. U slučaju $Q \gg Q_c$, relacija (5.19) ima oblik

$$R \simeq \frac{1}{16} \frac{Q_c^4}{Q^4}$$
(5.20)

Prethodna relacija za koeficijent refleksije predstavlja izraz koji se dobija u prvoj Bornovoj aproksimaciji. Iz ove relacije se može se videti da vrednost koeficijenta refleksije opada veoma brzo u slučaju uglova koji su veći od kritičnog.



Slika 5.3. Grafički prikaz vrednosti kojeficijenta refleksije i refrakcije u zavisnoti od upadnog ugla

Vraćajući se na talasnu funkciju koja opisuje stanja unutar površine na kojoj se dešava refleksija, uz korišćenje relacija (5.17) i (5.18), kada je $\theta < \theta_c$ dobija se sledeća relacija

$$\Psi_{z1}(z) = t_1 e^{i(k_{z0}^2 - k_{z0,c}^2)^{1/2}} = t_1 e^{-\frac{1}{2}(Q_c^2 - Q^2)^{1/2}}$$
(5.21)

Ova relacija je veoma važna, pošto pokazuje da u slučaju kada je energija čestice, a čiji pravac propagacije normalan na površinu, manja od vrednosti potencijalne barijere, talas ipak može da penetrira do određene dubine date izrazom $2/\sqrt{(Q_c^2 - Q^2)}$. Iako dolazi do prodora unutar samog materijala ipak na kraju dolazi do refleksije unutar materijala, što znači da intenzitet transmitovanog neutronskog snopa ima vrednost 0.

5.1.4. Refleksija snopa neutrona sa slojevitog materijala

Svaki sloj materijala se može opisati relacijom (5.9). Koeficijenti refleksije r_l i transmisije t_l mogu se dobiti interativnim postupkom primenjenim na talasnu funkciju, pri čemu postupak potrebno ponoviti se za svaku površinu. Uzimajući da materijal je sastavljen od N slojeva i da se uzorak nalazi u vakumu, potrebno je izračunati (2N+2) koeficijenata. Ako je broj površina dat sa N+1 onda broj jednačina koje opisuju stanja površina iznosi 2(N+1). Ostale dve jednačine su izvedene na sledeći način: prva jednačina opisuje transmisiju snopa kroz vakuum, zbog čega kojeficijent transmisije ima vrednost $t_0=1$, dok druga govori da nema refleksije talasa, vrednost kojeficijenta refleksije $r_{N+1}=0$ od strane materijala nosača iz razlogašto se on zajedno sa uzorkom nalazi u vakumu. Postupak kojim se vrše kalkulacije uveden je od strane L.G.Parrat koje je izveo je ovaj postupak za slučaj x zraka. Detalja izvođenja postupka mogu se naći u publikaciji L.G.Parrat-a [11]. Ovde će biti prezentovani samo najvažniji rezultati.

Interferencija između reflektovanih talasa se može pojaviti i u slučaju materijala koji je sačinjen od jednog sloja debljine *d* postavljenog na nosač u vakumu, Slika 5.2. Dolazi do interferencije talasa reflektovanih sa površine vakum-materijal i talasa koju su transmitovani kroz sloj nakon čega se reflektuju na površini materijal-nosač, dok deo talasa biva refraktovan kroz uzorak i nosač. Ovo je moguće samo u slučaju kada nije ostvaren uslov za totalnu refleksiju. Refrakcija na gornjoj površini se može zanemariti u slučaju kada je ugao između pravca prostiranja talasa i uzorka dva puta veći od kritičnog ugla, u tom slučaju vrednost upadnog ugla je $\theta = \theta_1$, Slika 5.2, što predstavlja dobru aproksimaciju. Kako je vrednost indeksa prelamanja snopa neutrona veoma bliska 1, predhodna aproksimacija važi i u slučaju veoma malih upadnih uglova. Razlika u optičkom putu između dva snopa neutrona data je u vidu

$$\Delta = 2 \operatorname{dsin} \theta \tag{5.22}$$

Razdaljina između interferencionih maksimama pri razlici u optičkom putu snopova neutrona perfektno monohromatizovanih koji se razlikuju za jednu talasnu dužinu data je relacijom

$$\delta Q \simeq \frac{2\pi}{d} \tag{5.23}$$

Posredstvom ove relacije dobijaju se informacije koliko interferencionih maksimuma se može opaziti u određenom Q opsegu na rastojanju $\frac{2\pi}{d}$ u impulsnom prostoru, ovakvi interferencioni maksimumi se nazivaju Kiessig prsti, Slika 5.4. U slučaju malih uglova, zbog refrakcije, interferencioni maksimumi su zgusnutiji nego u slučaju većih upadnih uglova. Što je sloj tanji to je širina profila interferencijalnog maksimuma veća.



Slika 5.4. Prikaz krivi relfeksije

5.1.5. Površinske neravnine i interdifuzija

Do sada se razmatralo rasejavanje neutrona na prefektno ravnim površinama, dok u realnim uslovima postoje određene neravnine na samoj površini materijala na atomskom nivou, čiji profil na površini se opisuje posredstvom funkcije z(x, y). Od značaja nije sam oblik profila tih neravnina, nego statistički parametri kojima su okarakterisane fizičke osobine, srednja kvadratna devijacija od idealno ravne površine i lateral korelaciona dužina.

Polazeći od najednostavnijeg modela, 1D, uzimajući da je koordinata vrha te neravnine predstavljena sa *z* dok je koordinata perfektono ravne površine predstavljena sa z_j . Predpostavljajući random distribuciju koordinata vrhova neravnina *z* koja je data posredstvom

$$P(\Delta z) = \frac{1}{\sigma \sqrt{(2\pi)}} e^{-\frac{\Delta z^2}{2\sigma^2}}$$
(5.24)

indeks prelamanja na takvoj površini između sloja j i j+1 dat je sledećom relacijom

$$n(z) = \frac{n_j + n_{j+1}}{2} - \frac{n_j - n_{j+1}}{2} erf(\frac{z - z_j}{\sqrt{2}\sigma_j})$$
(5.25)

pri čemu je

$$erf(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{z} e^{-t^{2}} dt$$
 (5.26)

Refleksija sa takve neravne površine dobija se usrednjavanjem izraza za refleksiju na svakom sloju. Na ovom mestu dat je samo konačan rezultat, dok u radu L.Nevot i P.Croce [12] je moguće pronaći kompletno izvođenje. Po njihovom rezultatu Fresnelov kojeficijent za reflekciju sa idelano ravne površine se monoži sa korekcionim članom, eksponecijalnim faktorom, i na taj način refleksija sa realne površine je opisana relacijom

$$R_{realna} = R_{idelana} e^{-4\sigma_j^2 k_{zj} k_{zj+1}}$$
(5.27)

pri čemu je σ_j - koren srednje kvadratne devijacije od nominalne pozicije perfektno ravne površine.

Efekt koje izazivaju neravnine ogleda se u smanjenju refleksije na velikim vrednostima transfera talasnog vektora Q, pričemu ovaj efekt je moguće videti samo u slučaju kada je vrednost Q veća od $1/\sigma$. Tako da u slučaju merenja veoma finih neravnina, potrebno je izvršiti merenja na veoma velikim uglovima refleksije i na širokom opsegu vrednosti Q. Kada slojevitih materijala neravnijih kontaktne površine vrednost kojeficijenta refleksije brze opada.

Posredstvom spekularne refleksije moguće je doći do podataka o profilu gustine dužine rasejanja normalnog na površinu. To znači da posredstvom ovakvih merenja nije moguće napraviti razliku između neravnina površine i difuzije sloja u sloj. Ali korišćenjem nespekularne (off-specular) metode moguće je doći do podataka i napraviti razliku koji proces se odvija.



Slika 5.5. Neravnine na realnom uzorku, određene preko parametrizacije z(x,y) i zavisnosti indeksa prelamanja z
5.2. Tipovi reflektometara

Neutroni nakon moderacije se transportuju putem neutronskih vodiča, cevi čija je unutrašnjost prekrivena tankim slojem tvrdog feromagnetnog materijala, pri čemu se transport snopa neutrona od izvora do instrumenta vrši posredstvom procesa totalne refleksije. Na ovaj način moguće je izvršiti transport neutronskog snopa do 100 m. Potom se snop neutrona vodi na monohromator. Postoje dva načina kojim je moguće realizovati monohromaciju snopa. Prvi je upotrebnom disk čopera a drugi posredstvom Bragovog rasejavanja neutrona na kristalu.

U zavisnosti od tipa izvora na koji se želi postaviti uređaj, postoji dva načina na koji mogu biti konstruisani reflektometri.

Kako vektor *Q* predstavlja funkciju talasne dužine i ugla, variranjem jednog parametra pri zadržavanju konstante vrednosti drugoga moguće je dobiti različite vrednosti vektora transfera impulsa. Jedna mogućnost je da se meri pri konstantnim vrednostima talasne dužine a da se ugao menja, dok druga da ugao ima konstantnu vrednosta a da se simanje vrši belim snopom.

$$Q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta \tag{5.34}$$

U slučaju reaktora, obično merenja se vrše pri fiksnoj talasnoj dužini λ , menjajući pri tome ugao θ .

Monohromacija se odvija posredstvom kristala. Na primeru reflektometra MARIA, JCNS koji je postavljen na nuklearnom reaktoru FRM II, u Garchingu, biće blize predstavljen ovaj način konstrukcije instrumenta, Slika 5.6.

Neutron se sa hladnog izvora neutrona (1), (hladni moderator) vode posredstvom neutronskih vodiča na disk choper (2) radi monohromacija snopa, pa potom posredstvom fermijevog čopera (3) dalje se može vršiti monohromacija u zavisnosti od potrebnog stepana monohromatičnosti, nakon čega se snop neutrona upućuje na polarizator (4). Tako polarizovani snop neutrona se upućuje na kolimacioni element (5), nakon kolimacije takav snop se upučuje na nosač uzorka (6) na kome se nalazi uzorak. Rasejani neutroni se dalje mogu voditi na analizator (7) ako je potrebno ili direktno na detektor (8). Polarizator je konstruisan korišćenjem magnetnih superogledala, (slojeviti tvrdi feromagnetni materijal) i analizatora helijum-3 ćelije. Posredstvom ovoga uređaja moguće je izvršiti spekularna i nespekularna merenja kako i rasejanje neutrona pod veoma malim uglovima (grazing incidence small angle neutron scattering, GISANS).





U slučaju spalacionih izvora, merenja se vrše pri konstantnom uglu θ dok se vrednost talasne dužine λ menja. U ovim merenjima se koristi snop belog zračenja. Kako nekada zbog dužine samog instrumenta interval talasnih dužina nije dovoljan da pokrije traženi Q opseg obično se merenje vrši pri nekoliko uglova da bi se pokrio traženi interval vrednost Q. Uređaj koji je simuliran ovde je projektovan da radi na spalacionom izvoru, ESS. Detaljnije o splacionim izvorima može se naći u poglavlju 8 gde će biti predstavljen uređaj sa svim svojim karakteristikama.

6. Rezolucija reflektometarskog uređaja

6.1. Osnove postavke

Intenzitet reflektovanog snopa opada veoma brzo za uglove čija je vrednost veća od vrednosti kritičnog ugla totalne refleksije pri povećavanju vrednosti Q ($R=1/Q^4$). Da bi vrednost intenziteta reflektovanog talasa bila dovoljna za procenu osobina materijala, potrebno je smanjiti stepen kolimacije snopa ili uzeti veći interval talasnih dužina, ali na uštrb rezolucije Q. Rezolucija merenja je obrnuto proporcionalna intenzitetu signala. Poboljšavanjem rezolucije smanjuje se intenezitet signala, formulom predstavljeno

$$\delta Q \simeq \sqrt{\left(\frac{4\pi}{\lambda}\frac{\delta\lambda}{\lambda}\theta\right)^2 + \left(\frac{4\pi}{\lambda}\delta\theta\right)^2}$$
(6.1)

pri čemu je $\delta \theta$ - ugaona divergencija snopa i $\delta \lambda$ - interval talasnih dužina. Divergencija upadnog snopa je obično određena kolimacionim pregradama, ako su dimenzije snopa manje od dimenzija samog uzorka, ili posredstvom kolimacionih pregrada i dimenzija uzorka ako je uzorak dovoljno mali da površina poprečnog preseka snopa odgovara površini poprečnog preseka uzorka. Eksperimentalna refleksivnost predstavlja konvulacionu fukciju dobijenu konvulacijom funkcije refleksivnosti i rezolucione funkcije čija širina je data posredstvom δQ . Iskustvo pokazuje da se Gausovom funkcijom može lepo modelovati rezolucioni efekti. Kao što se može videti iz relacije (6.1), povećavanjem vrednosti divergencije snopa gubitak vrednosti rezolucije je nazavisan od θ , dok u slučaju povećavanja intervala talasnih dužina dolazi do smanjenja vrednosti rezolucije sa povećanjem θ , zbog toga je sa velikom pažnjom potrebno pristupiti problemu.

6.2. Realizacija rezolucionih modova posredstvom čopera

Za realizaciju rezolucionih modova na spqlacionom izvoru bele svetlosti se koriste čoperi. Rezolucija instrumenta je određena posredstvom sledeće relacije

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\tau}{T_{TOF}}$$
(6.2)

gde je τ - vrednost trajanja pulsa i T_{TOF} - vreme koje je potrebo neutronu da od izvora pulsa stigne do detektora.

Polazeći od totalne dužine uređaja L_{tot} , posredstvom sledeće relacije je moguće doći do informacija koliki opseg talasnih dužina $\Delta \lambda = \lambda_{max} - \lambda_{min}$ bele svetlosti je moguće prihvatiti posredstvom ovog instrumenta

$$\Delta \lambda = \frac{h}{m_n} \times \frac{\tau}{L_{tot}}$$
(6.3)

pri čemu je h - Plankova konstanta i m_n - masa neutrona. Pri konstrukciji ovo je veoma važno uzeti u razmatranje, koliki dimamički opseg je moguće pokriti posredstvom ovakvog uređaja.

Na ovom mestu potrebno je napraviti razliku između osnovne rezolucije instrumenta i rezolucija generisanih posredstvom čopera. Osnovna rezolucija instrumenta određena je dužinom neutornskog vodiča i dužinom pulsa generisang od strane izvora, dok su ostale više rezolucije generišu uz pomoć korišćenja čopera.

Pored toga rezolucija se obično računa samo za talasnu dužinu kojoj odgovara maksimumu intenziteta na Maksvelovoj raspodeli.

Kako što se može videti iz relacije (6.2) vrednost vremena trajnja pulsa, τ , je jedan od osnovinih parametara, koji figuriše u relacijama, koji je povezan sa parametrima čopera posredstvom sledeće relacije

$$\tau = \frac{1}{f} \cdot \frac{\theta}{360} \tag{6.4}$$

pri čemu je f - frekvencija čopera i θ - ugao koji reprezentuje širinu prozora na čoperu. Iako na prvi pogled izgleda prilično jednostavno izračunati dužinu pulsa, ipak zbog raznih ograničenja i optimizacije sistema ovo je veoma zahtevan posao. U slučaju da je vredost frekvencije prevelika ubacivanjem još jednog prozora istovetnog ugla širine i na poziciju 180 stepeni od pozicije prvog moguće je smanjiti potrebnu frekvenciju za faktor 2. Na ovaj način moguće je do neke mere nadomestiti nemogućnost generisanja visokih frekvencija čopera ali je potrebno biti veoma obazriv.

Ofset čopera se računa na sledeći način

$$\varphi = \frac{360}{t_1 \cdot f} + \theta/2 \tag{6.5}$$

pri čemu je t_1 - vreme koje je potrebno neutronu najniže talasne dužine da pređe put između izvora i rezolucionog čopera.

Vrednost frekvencije rezolucionih čopera treba da bude jednaka celobrojnom umnošku osnovne frekvencije, iz razloga što dolazi do pomeranja položaja subpulsova u svakom od pulseva, što za posledicu ima problem pri snimanju uzoraka, pošto dolazi do preklapanja, gubi se vremenska separacija i rezolucija snimanja više nije poznata.

7. Simulacije neutronskih instrumenata baziranih na Monte Karlo metodu

Analizom nekih problema ustanovljeno je da zbog same kompleksnosti problema kao i nemogućnosti pronalazenja analitičkog rešenja u nekom razumnom vremenskog intervalu potrebno je rešenje potražiti posredstvom neke od aproksimativnih metoda.

Monte Karlo simulacije predstavljaju aproksimativnu metodu posredstvom koje je moguće rešiti multi dimenzione integrale kompleksnih graničnih uslova, korišćenjem nasumičnog uzorkovanja. Ime je izvedeno iz činjenice da se u proračunima koristi nasumičan broj, a jedan od najčuveniji kazino u svetu se nalazio se tada u Monte Karlu.

U ovom razmatranju posmatrana je interakcija čestice sa materijalnom sredinom posredstvom procesa apsorbcije i rasejavanja na svom putu. Ovom tehnikom se vrši praćenja putanje neutrona tokom propagacije (neutron ray-tracing tehnika).

7.1. Monte Karlo metod primenjen na analizu propagacije neutorna u materijalnoj sredini

Razvoj programa kojim je moguće izvršiti analizu interakcije neutrona sa materijalnom sredinom započet je 1970 godina u Los Alomosu (NISP program). Pre ovoga programa veliki broj drugih je napravljen ali svi su bili specifijalno konstruisani za određene potrebe. Tek pojavom ovog programa čiji zadatak je bilo da što generalnije pristupi problemu odpočeta je šira upotreba simulacija pri konstrkciji neutronskih instrumenata. Ovo je ostaje jedini program do 1990 tih godina kada je otpočeto pravljenje novih McStac (Riso (DK) i ILL (F)), RESTRAX(NPI(CZ)) i VITESS-a (HMI(D) 1999) od toga perioda pa do danas VITESS je drastično evoluirao i sada predstavlja jedan od nezaobilaznih programa koji se koriste za konstruisanje instrumenata za rasejanje neutrona. Veći broj predloženih instrumenata za ESS je konstruisan posredstvom ovoga programa, kako i instrument u ovom radu. Razvoj ovog programa finansiran je od strane Evropske Unije.

7.1.1. Opis modula i neutronskog instrumenta u programu

Individualne komponente neutronskih instrumenata predstavljene su preko modula (npr. Guide, source, sample i detektor) koji su parametrizovani i pre programirani. Svaki od programa sadrži veliki broj biblioteka čije su komponente veoma rigorozno testirane a posredstvom kojih je moguće modelovati većinu neutron optičkih komponenti. Dozvoljeno je i da se određene komponente biblioteka mogu modifikovati, unapređivati, radi poboljšanja od strane korisnika.

Neki moduli sadrže kvantno mehanički formalizan, dok programiranju većine komponenata korišćena je klasnična teroija.

Pri simulaciji dolazi do prikupljanja podataka o prvom modulu od koga započinje simulacija do poslednjeg gde se upisuju rezultati simulacije. Izborom modula moguće je kreirati većinu poznatih tipova instrumenta. Moguće je izvršiti vizuelizaciju geometrije instrumenta i po potrebi dobiti putanje neutronskih talasa.

7.1.2. Virtuelni eksperiment

Korišćenjem podataka o instrumentu i kreiranjem realnog modela uzorka, moguće je kreirati kompletni eksperiment rasejavanja neutrona na uzorku posredstvom simulacionog programa, ovaj način je poznat kao virtualni eksperiment. Posredstvom njega moguće je :

1. U dizajn fazi instrumenta doći do informacija o kvalitetu snimanja određenih tipova

uzoraka koje je moguće ispitivati na instrumentu, zbog čega je moguće izvršiti optimizaciju instrumenta u željenom pravcu.

- 2. Pri aplikacijama za vreme za eksperiment na istraživačkim reaktorima moguće je da eksperimentator proceni da li je dati eksperiment moguće izvesti na datom instrumentu, koliki je kvalitet snimanja kao i koliko mu je vremena potrebno za izvođenje istog.
- 3. Eksperiment je moguće doterati tako da se maksimalno iskoriste prednosti instrumenta.
- 4. Analizu rezultata moguće je izvršiti detaljnije uključujući informacije o samom instrumentu pri analizi podataka.
- 5. U edukativne svrhe, radi osposobljavanja novih istraživača u datoj oblasti

7.2. Monte Karlo neutron ray-tracing tehnika

Svi pomenuti programi u svojoj pozaditi imaju sličnu filozofiju na koji se način izvode simulacije i način na koji su predstavljeni neutroni.

7.2.1. Reprezentacija neutrona u simulacijama

Simulirani neutron je reprezentovan semiklasično posredstvom dobro definisanog vektora položaja r, brzine v i spina neutrona s. Formalno ovo krši kvantno mehaničke zakone, Hajzenbergov princip neodređenosti, za date pozicija/impuls koridinate predstavljene

$$\delta x \delta p \ge \frac{\hbar}{2} \tag{7.3}$$

Ali ipak, semiklasična aproksimacija je veoma dobra u opisivanju instrumenta u slučajevima kada brzina propagacije neutrona je reda veličine $10^3 m/s$. Dok u slučajevima kada se radi o veoma sporim neutornima (ultra cold), kvantni efekti postaju dominanti tako da je tretiranje potrebno izvršiti posredstvom kvantno mehaničke teorije.

Neutroni su reprezentovani posredstvom talasa, tako da trajektorija neutrona predstavlja funkciju vremena.

7.2.2. Neutronski težišni faktor

Radi poboljšanja brzine izvršavanja simulacija i uštede u vremenu neutronski talas obično ne sadrži informacije samo o jednom fizičkom neutronu nego o više njih. Zbog toga je uveden neutronski težištni faktor, p, posredstvom koga je izvršena dodatna karakterizacija neutronskog talasa. On je dat u jedinici neutron po sekundi. Nakon kreiranja talasa od stane izvora, parametar

p ima vrednost reda veličine hiljadu pa do milion neutrona po sekundi. Kada neki od fizičkih neutrona biva ostranjen iz snopa, npr. usled apsorpcije ili nemogućnosti refleksije, dolazi do smanjivanja vrednosti težišnog faktora neutronskog talasa. I nakon ovaga neutronski talas učestvuje u simulaciji ali vrednost njegovog težinskog parametra je umanjena. Ovo umanjenje je izvršena radi oslikavanja realne fizičke situacije. U trenutku kada neutronski talas stiže na poziciju detektora težinski parametar može imati vrednost do nekoliko neutrona po sekundi.

Da bi se dobio intenzitet neutronskog snopa na određenoj poziciji u instrumentu potrebno je sumirati po svim neutronskim talasim na datoj poziciji

$$I_{j} = \sum_{i=1}^{N} p_{i,j}$$
(7.4)

gde je *N* - broj simuliranih neutronskih talasa i *j* - indeks date komponente. U slučaju da neutronski talasa ne stigne do pozicije vrednost težišnog faktora je $p_{i,j}=0$. Težištna transformacija na datoj poziciji u simulaciji data je posredstvom

$$p_j = \omega_j p_{j-1} \tag{7.5}$$

pri čemu je indeks neutronskog talasa, i, izostavljen zbog jednostavnosti. Težišni množitelj, ω_i , je dat relacijom

$$f_{MC}\omega_j = P_j \tag{7.6}$$

pri čemu je P - fizička verovatnoća dešavanja događaja i f_{MC} - verovatnoća dešavanja događaja u Monte Karlo simulaciji.

Obično vrednost je $f_{MC}=1$, tako da je $\omega_j=P$. Ovo odgovara apsorpciji neutrona od strane materijalne sredine kroz koju se prostire. Kada je Monte Karlo tačka grananja dostignuta (selekcija između nekoliko događaja) onda vrednost Monte Karlo verovatnoće je manja od 1,

 $(f_{MC})_b < 1$, za svaki ogranak, b. Kako je ukupna verovanoća jednaka jedninici to znači da suma svih branch verovatnoća mora biti jednaka 1, relacijom predstavljeno

$$\sum_{b} (f_{MC})_{b} = 1$$
(7.7)

7.2.3. Rasejvanje neutrona na uzorku

Mesto u Monte Karlo simulaciji gde je najteže doneti odluku o izboru parametra je trenutak kada neutronski talas interaguje sa uzorkom. Potrebno je odlučiti, pod kojim uslovima se smatra da je došlo do rasejavanja neutronskog talasa na uzorku. Kada dođe do rasejanja neutronskog talasa na uzorku, algoritmom je potrebno definisati tačku u kojoj je došlo do rasejavanja, pravac rasejanog talasa kao i energiju istog. Situacija se može komplikovati usled višestrukog rasejavanja.

Radi lakšeg razumevanja izvršena su razmatranja vezana samo za pravac neutronskog talasa nakon rasejavanja. Predpostavlja se da je rasejavanje talasa na uzorku elestično i izotropno u zapremini uzorka, efikasnog preseka za interakciju Σ . Uzimajući da atenuacioni faktor ima vrednost $\mu = \Sigma$, fizička verovatnoća da će doći do rasejanja data je relacijom

$$P_{ras} = 1 - e^{-\Sigma L} \tag{7.8}$$

pri čemu je *L* - dužina putanje neutronskog talasa u uzorku. Naravno nakon rasejanja potrebno je i opisati rasejani talas. Verovatnoća za rasejavanja neutronskog talasa u prostorni ugao $d \Omega$ data je relacijom

$$P(\Omega)d\Omega = P_{ras} \frac{d\Omega}{4\pi}$$
(7.9)

uz predpostavku da svaki neutronski talas biva reflektovan od strane uzorka u određenom pravcu sa uniformnom verovatnoćom, nakon čega se dolazi do sledeće relacije

$$f_{CMfiz} d\Omega = \frac{d\Omega}{4\pi}$$
(7.10)

uz korišćenje relacije (7.6) dobija se

$$\omega_{fiz} = \frac{P(\Omega) d\Omega}{f_{MCfiz} d\Omega} = 1 - e^{-\Sigma L} \approx \Sigma L$$
(7.11)

pri čemu je data aproksimacija validna samo za tanke slojne uzorke, $\Sigma L \ll 1$. Pored toga ovde je ignorisana atenuacija rasejanog neutronskog talasa.

8. Eksperimentalni deo

8.1. Opis koncepta instrumenta

Razvoj predloženog instrumentalnog koncepta mašine fokusiran je na zadovoljavanje što većeg broja zahveta naučne zajednice. Glavni uslov je postizanje što većeg fluksa neutorna uz što manju vrenost šum na poziciji detektora. Posledica činjenice da većina uzoraka se nalazi u obliku tankih filmova, dobijanje informacija o njihovoj strukturi i osobinama kontaktnih površina na namometarskoj skali predstavljaju glavni cilj merenja. U ispitivanjima korišćena će biti spekularna i nespekularna refleksiona metoda sa polarisanim ili nepolarisanim neutronima kao i GISANS opcija posredstvom koje je moguće dobiti informacije o lateralnoj strukturi uzorka.

Analizom simulacije spekularne refleksione metode, slika 8.1., na y osi može se videti da je posredstvom uređaja moguće snimiti dinamički opseg od 8 redova veličine i više. Slučaj za perfektnu Q rezoluciju i perfektno koherentan snop, nula divergencije slika 8.1. a, dok ostali slučajevi sa slike su dati sa određenom vrednosti divergencije od 3 mrada i različitom vrednosti Q rezolucije snimanja. Upoređivanjem prvog slučaja, Slike 8.1 a, sa ostalim primećuje se da je samo prvi inferencioni minimum pokazuje blagu devijaciju, ali rezultati simulacije pokazuju da rezolucija snimanja može biti drastično relaksirana za tanke kontaktne površine bez bilo kakvog gubitka informacija. Sa relaksiranjem rezolucije vrednosti intenziteta snopa neutrona na poziciji uzorka se povećava što za posledicu ima skaraćenje vremena snimanja. Relaksacija do 20 % bi dovela do dodatnog uvećavanja vrednosti intenziteta za duplo ali bi onda uređaj morao da bude duplo kraći što bi proizvelo probleme vezane za fokusiranje snopa na uzorak. Razlog tome je što postoji određeni limit u vrednostima upadnog ugla neutrona na superogledala kojim je presvučen vodič neutrona do koje dolazi do refleksije. Detalnjije o ovoj problematici biće reči u delu 8.3.1



Slika 8.1. Simulacija refleksione krive sloja Fe debljine 1 nm, koji se nalazi na Ag supstratu u slučaju idealne rezolucije i relaksiranog opsega talsnih dužina na 0.45 nm

Korišćenjem nepolarizovanih neutrona moguće je izvršiti dubinska merenja, lateralna-usrednjena hemijska i magnetna snimanja profila kao i korelacije između lateralnih fluktuacija. Korišćenjem polarizovanih neutorna moguće je doći do dodatnih informacija o lateralnoj srednjoj magnetizaciji i o korelacijama između lateralnih fluktuacija.

Rezolucija instrumenta se može povećati posredstvom čoper sistema (detaljnije 8.2.2) u odnosu na osnovnu rezoluciju. Glavni cilj je analiza tankih slojeva kontaktne površine između dva deblja sloja. Debljina te površine može da varira od nekoliko nanometara pa do mikrometarske skale.

8.2. Delovi instrumenta

Šematski prikaz instrumenta dat je na slici 8.2.



Slika 8.2. Šematski prikaz instrumenta

Početak instrumenta je udaljen 2 metra od izvora neutrona (moderatora). Sastoji se iz neutronskog vodiča koji je sastavljen iz segmenata, više čopera, polarizatora, kolimacionog dela, nosača uzorka i detektora.

Kako u ovom radu neće biti obrađivana tema polarizacione analize objašnjenje polarizatora je izostavljeno dok objašnjavanja konstrukcije neutronskog vodiča i konstrukcije čopera je prezentovana. Uzorci koji su korišćenji za analizu kvaliteta predloženog instrumenta su zvanični uzorci koji su dobijeni od strane naučnika koji je zadužen za realizaciju reflektometara u ESS projektu. Detektor i izvor neutrona (moderator hladan ili termalni) su preprogramirani od strane VITESS tima i oni su korišćenji u datom obliku.

8.2.1. Neutronski vodič

Konstrukcija neutronskog vodiča je predstavljala veoma kompleksan proces. Od kvaliteta samog vodiča zavisi vrednost fluksa neutrona na poziciji uzorka.

U procesu konstrukcije dva tipa neutronskih vodiča su uzeta u razmatranje tokom procesa simulacija. Pokazano je da u slučaju eliptičnih neutronskih vodiča transportovani intenzitet je četiri puta veći na poziciji uzorka neko kada se koristi klasični linearni u slučaju 1 % Q rezolucije, Slika 8.3., što je u saglasnosti sa rezultatima ostalih grupa koje su radile na kreiranju vodiča za ESS instrumente.

Razlog ovako drastičnom povećanju u vrednosti intenziteta, eliptičnog u odnosu na linerani vodič, na poziciji uzorka posledica je eliptičnih geometrijskih karakteristika. Uzimajući da se izvor neutrona, aproksimacija tačkasti izvor Slika 8.4 (crvena tačka), nalazi u jednoj fokalnoj tački dok se uzorak, Slika 8.4 (zelena tačka), nalazi u drugoj zbog čega svi reflektovani neutroni bivaju usmereni na uzorka, dok u slučaju lineranog vodiča to nije slučaj dolazi do gubitka intenziteta usled višestrukih refleksija kao i usled geometrijskih činioca na poziciji uzorka, tako da će u nastavku samo biti diskutovane osobine eliptičnog neutronskog vodiča.

Konstrukcija je izvršena uz korišćenje osnovnih zakona optike i jednačine elipse, ulogu sabirnog sočiva u ovom optičkom sistemu preuzimaju superogledala a ulogu svetolosti preuzimaju neutroni u idealnim uslovima.



Slika 8.3. Uporedni prikaz intenziteta u slučaju eliptične i linerane geometrije neutronskog vodiča izvora do uzorka.

Dužina neutronskog vodiča, Slika 8.4., je fiksirana na 36 m radi postizanja zadate osnovne instrumentalne rezolucije od 10 %, dobijene korišćenjem relacije 6.2. Udaljenost neutronskog vodiča od moderatora je fiksirana na 2 m radi iskorišćenja što većeg fluksa neutrona, kao i udaljenost od kraja vodiča do uzorak koja iznosi 0.5 m. Sa druge strane vrednosti širine neutronskog vodiča uzete su tako da dovoljan fluks neutronskog zračenja može biti transportovan a sa druge strane bude očuvano vertikalno fokusiranje. Vrednost visine izabrana je tako da omogući maksimalni transport neutronskog zračenja kroz neutronski vodič. Izbor vrednosti visine direktno utiče na sam ekcentritet elipse neutronskog vodiča. Predpostavljajući da su neutroni iz reaktora izotropno emitovani, variranjem vrednosti visine i širine povećava se ili smanjuje vrednost ulaznog fluksa neutrona na početku neutornskog vodiča. Kako povećanje vrednosti visine utiče na ekscentritet same elipse, to ima posledicu na izbor presvalke vodiča (superogledala) a samim tim i na karakteristike neutornskog vodiča. Povećavanjem ekscentriteta potrebno je kao presvlaku koristiti visoko reflektujuća super ogledala, koja mogu da reflektuju neutrone koji padaju pod većim uglovima. Sa druge strane posledica povećavanja ugla refleksije vodi ka smanjenju refleksivnosti samih ogledala tako da je potrebno pronaći optimalnu vrednosti ovih parametara da bi se omogućilo maksimalno iskorišćenje neutronskog fluksa sa moderatora od strane neutornskog vodiča.

Relacijom 8.1 opisana je vrednost upadnog ugla neutrona iz snopa date talasne dužine koja omogućava da dođe do refleksije neutrona od strane neutronskog vodiča

$$\theta_c = 0.1^O \cdot m \cdot \lambda \tag{8.1}$$

pri čemu je *m* - bezdimenzoni broj koji opisuje koliko puta je refleksivnost datog superogledala veća od refleksivnosti sloja nikla i λ - talasna dužina neutrona zadata u $[\check{A}]$.

Pri proračunima se uzima najmanja talasna dužina neutrona iz snopa radi što boljeg iskorišćenja opsega talasnih dužina.



Slika 8.4. Prikaz eliptičnog neutronskog vodiča

Postupak za proračun polazi od neke vrednosti za ulazne parametre neutornskog vodiča, visine i širine, potom se posredstvom iteracionog procesa uz variranje visine samo na sredini vodiča određuje ekscentritet a samim tim kao posledica dolazi se do vrednosti za reflektivnost presvlake neutronskog vodiča, Slika 8.5. Kako je ovaj faktor limitiran tehničkim mogućnostima proizvodnje, trenutno moguće je proizvesti superogledala sa mogućnosti refleksije neutrona čiji je upadni ugao u odnosu na površinu super ogledala 7 puta veći od ugla refleksije na niklu, m=7, sa vrednosti refleksivnosti od nekih 0.4. . U slučajevima da je za dati neutronski vodič potrebana presvlaka višeg reda nego 7, to znači da u trenutnoj situaciji ti neutroni na tom delu vodiča date talasne dužine biće transitovani kroz neutronski vodič. To ne znači da će svi neutroni koji pogode taj deo biti transmitovani. Do koje talasne dužine će biti transmitovani zavisi pre svega od kritičnog ugla totalne refleksije, relacija 8.1. Pri proračunima potrebno je paziti da talasna dužina koja odgovara maksimumu Maksvelove distribucije intenziteta moderatora bude transportovana na svim delovima neutronskog vodiča jer u slučaju nepoštovanja ovoga doćiće do drastičnog gubitka intenziteta neutronskog zračenja na poziciji uzorka. Variranjem vrednosti visine na sredini neutronskog vodiča, menjanjem vrednosti ekscentriteta, za kostantne ulazne parametre neutronskog vodiča, visine i širine, određuju se optimalane vrednosti presvalke vodiča koja omogućava maksimalni transport snopa neutrona. Potom se postupak ponavlja pri čemu se uzimaju druge vrednosti ulaznih parametara i ponavlja se proces do trenutka pronalazenje optimalnih ulaznih parametara i odgovarajućeg ekscentriteta, vrednosti presvlake, neutronskog vodiča koji omogućavaju maksimalno iskorišćenje fluksa neutrona emitovanog od strane moderatora.



Slika 8.5. Prikaz pronalazenja optimalne geometrije neutronskog vodiča u slučaju fiksne vrednosti ulazne vertikalne dimenzije

Veliki problem pri konstrukciji uređaja predstavljala je potreba obezbeđivanja što većeg fluks

neutrona na poziciji uzorka a pri tome postići što manji šum.

Zakrivljavanjem neutronskog vodiča na početku omogućava eliminaciju visoko energetskih neutorna i gama fotona koji dospevaju u neutronski vodič, tako da više ne postoji optički put kao u slučaju nezakrivljenog kada brzi neutroni i gama fotoni mogu nesmetano da od izvora dospeju na poziciju detektora, pošto na njihovom putu sem čopera ne bi bilo drugih prepreka. Na kraju zakrivljenje je izvršeno radi eliminacije sekundarnog zračenja koje nastaje posredstvom interakcije primarnog zračenja i instrumenta.

Sa stanovišta maksimalne iskoristivosti intenziteta neutrona emitovanih sa moderatora najbolje bi bilo kada bi početak neutronskog vodiča bilo moguće postaviti što bliže moderatoru ali zbog tehničkih problema najbliže moguće rastojanje je 2 m. U tabeli 8.1. prikazane su karakteristike vertikano fokusnog neutronskog vodiča koje predstavljaju optimalne vrednosti koje omogućavaju maksimalni transport intenziteta neutronskog snopa. Dobijene su nakon izvršenog većeg broja simulacija neutronskog vodiča u VITESS-u.

Dužina elementa [m]	Radius krivine [m]	Visina ulaza [mm]	Širina ulaza [mm]	Izlazna visina [mm]	Izlazna širina [mm]	Presvlaka gore	Presvlaka dole	Presvlaka levo	Presvlaka desno
10.0	400	95.8	30.0	194.5	30.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0	m=4.0
1.0	00	194.5	30.0	198.5	30.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0
2.0	00	198.5	30.0	202.7	30.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0
4.0	00	202.7	30.0	202.5	30.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0
6.0	-400	202.5	30.0	180.5	30.0	m=3.0	m=3.0	m=4.0	m=3.0
4.0	-400	180.5	30.0	145.5	30.0	m=3.0	m=3.0	m=4.0	m=3.0
0.5	00	145.5	30.0	140.0	30.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0	m=3.0
4.0	00	140.0	30.0	54.0	30.0	m=3.0	m=3.0	apsorber	apsorber

Tabela 8.1. Prikaz karakteristika vertikalno fokusnog neutronskog vodiča

8.2.2. Sistem čopera

U instrumentu korišćeno je nekoliko vrsta čopera kojim su realizovani rezolucioni modovi, izvršen odabir intervala talasnih dužina u spektru i eliminacija kontaminirajućeg zračenja.

8.2.2.1. Selekcioni čoperi

Selekcioni čoperima moguće je izvršiti samo selekciju opsega talasnih dužina neutorna u snopu. Čoperi rade u optičkom blind modu. Kako je frekvencija pulsnog izvora 14 Hz, potrebno je da selekcioni čoperi imaju istu frekvenciju obrtanja. Na ovom uređaju odabrano je da opseg talasnih dužina instrumenta bude u intervalu od 2 do 10 A.

Korišćenjem relacija 6.4. i 6.5. moguće je izvršiti proračun parametara za ugao i ofset selekcionih čopera, nakon čega se proračunate vrednosti koriste u simulacijama. Nakon određenog broja simulacija pronađene su optimalne vrednosti, Tabela 8.2.

	Pozicija [m]	Frekvencija [Hz]	Radius [cm]	Ugao [deg]	Faza [deg]	Broj diskova
Čoper 1	13	14	40	1 * 134.2	-102.7	2
Čoper 2	15	14	40	1 * 153.3	-117.58	1
Čoper 3	19	14	40	1 * 190.9	-146.83	1
Čoper 4	25	14	40	1 * 246.1	-189.78	2

Tabela 8.2. Prikaz pozicija i karakteristika selekcionih čopera

Pozicije na kojima su postavljeni selekcioni čoperi su odabrane tako da izvrše prevenciju propagacije neutrona koji ne spadaju u zadati opseg.

Kako se radi o dugopulsnom neutronskom izvoru neutron može biti emitovan na početku pulsa

izvora ili na kraju, a kako je vremenski interval trajanja pulsa veoma dugačak, 2.86 ms, na poziciju od 13 m neutron od 2 A koji je emitovan na početku pulsa dospeva za 6.57 ms a onaj sa kraja 9.43 ms, dok u slučaju 10 A to iznosi oko 32.86 ms i 35.72 ms. Kako se talasna dužina neutrona povećava tako uticaj dužine pulsa neutronskog izvora ima sve manji efekat. Čoperi su konstruisani da primaju neutrone 2 A emitovane na početku i od 10 A emitovane sa na kraju samog pulsa.

Povećavanjem rastojanja čopera od moderatora definisanost opsega talasnih dužina raste, tako da sa tog stanovištna najbolji opseg talasnih dužina definiše poslednji čoper, ali u tom slučaju ako bi se koristio samo jedan čoper za selekciju, šum na poziciji detektora bi bio znatno veći. Zbog smanjenja šuma na poziciji detektora od strane sekundarnog zračenja uvedena su prva tri čopera, Slika 8.6. Najveći šum se generiše na poziciji prvog čopera, najviše sekundarnog zračenja biva produkovano, zbog toga što se ovim čoperom odstranjuje najveći broj neutorna čije talasne dužine padaju u van zadatog intervala, dok ostalim čoperima vrši se fina selekcija. Sekundarno zračenja je obično sačinjeno od gama fotona koji su nastali u interakciji neutrona iz snopa sa boronizovanim čoperima. Tako kreirano zračenje se posredstvom zakrivljenog dela na kraju neutornskog vodiča, Slika 8.2, eliminiše i smanjuje se šum na poziciji detektora.



Slika 8.6. Čoperski sistem za definisanje opsega talasnih dužina

Pri proračunu poluprečnika čopera pažnja se obraća na dimenzije čopera tako da kompletan neutronski vodič, na datoj poziciji, je moguće smestiti u prozor čopera, Slika 8.7. Ako to nije slučaj i ako je deo površine poprečnog preseka neutronskog vodiča zaklonjen od strane čopera dolazi do gubitka u vrednosti intenziteta neutronskog zračenja i povećavanja šuma. Procentualno što je veći deo površine poprečnog preseka zaklonjen sa čoperom, to je veći gubitak u vrednosti intenziteta neutronskog zračenja, dok sa druge strane ako kompletan neutronski vodič nije pokriven sa čoperom doćiće do kontaminiranja snopa neutrona sa talasnim dužina van opsega što će imati reperkusije na Q rezoluciju



Slika 8.7. Prikaz proračuna za radius čopera

Kako su dimenzije neutronskog vodiča poznate, h_v i d_v , kao i vrednost ugla kojim je određena širinom opsega talasnih dužina koje dati čoper prihvata, moguće je sledećom relacije odrediti poluprečnik čopera

$$R = a + b \tag{8.2}$$

pri čemu je

$$a = \frac{d}{2\sin\alpha} \tag{8.3}$$

$$b = d_v \cos \alpha \tag{8.4}$$

Kako se povećava udaljenost čopera od izvora vrednost ugla raste, Tabela 8.2, što za posledicu ima da vrednost radiusa čopera opada. Bilo bi veoma nekonvencijalno, tehnički, da vrednosti dimenzije radiusa svakog od selekcionih čopera budu različite, tako da se obično kao vrednost za radius čopera u instrumentu uzima vrednost najvećeg radius čopera. Na kraju ova vrednost je uzeta iz razloga što su čoperi poluprečnika od 40 cm standardni čoperi koji bi trebali da se koriste pri izgradnji instrumenata za ESS, tj. preporučeni su od strane ESS. Iz razloga što su proračunate dimenzije poluprečnika svih čopera u instrumentu manje od 40 cm tako da je ovaj čoper moguće koristiti. Pored ove dimenzije preporučeni su i veći čoperi čiji je poluprečnik 60 cm.

Polažaj čopera u odnosu na osu instrumenta prikazan je na Slici 8.8.

Kao što se primećuje ,Slika 8.8, čoper zakriva skoro kompletnu površinu poprečnog preseka, radi obezbeđivanja da celokupan intenzitet neutronskog snopa određenog opsega talasnih dužina prođe kroz prozor čopera potrebno je izvršiti spuštanje ose rotacije čopera za određenu vrednost d_c . Ova vrednost se dobija korišćenjem relacije

$$d_c = k + h_v / 2 \tag{8.5}$$

gde je

$$k = \frac{d_v}{2 t g \alpha} \tag{8.6}$$



Slika 8.8. Prikaz položaja čopera u odnosu na osu instrumenta

U slučaju prvog i četvrtog selekcionog čopera, Tabela 8.2, korišćena su dva diska za realizaciju čopera. Ovakom konstrukcijom se obezbeđuje dodatna eliminacija kontaminirajućih neutrona čije talasne dužine se nalaze izvan zadatog opsega vrednosti, Slika 8.9.



Slika 8.9. Prikaz karakteristika neutronsog snopa u slučaju 10 % rezolucije pri 3mrad kolimisanom snopu

Pri snimanju je korišćena kolimacija neutronskog snopa od 3 mrada. Intenzitet neutornskog zračenja na poziciji uzorka iznosi 3.4·10⁹ neutrona po sekundi što predstavlja veliko povećanje u vrednosti u odnosu na trenutno operativne instrumente. Moguće je videti dobru definisanost krajeva spektra, slika 8.9, oštri pad u vrednosti intenziteta u oblastima van opsega talasnih dužina.

Horizontalna divergenciona kriva pokazuje talasastu formu, što je posledica segmetiranja neutornskog vodiča pri procesu simulacija karakteristika. Sa desne strane na slici 8.9 prikazana su dva 2D grafika na jednom je pokazana zavisnost intenziteta neutronskog snopa transportovanog kroz neutronski vodič i sa druge vertikalna divergencija istog. Rezultati pokazuju da je neutronski vodič konstruisan veoma dobro kao i da su parametri čopera dobro izabrani, slika 8.9.

Dosadašnja razmatranja vezana za propagaciju neutrona kroz sistem čopera moguće je prikazati posredstvom dijagrama. Ovakav način prikazivanja omogućava veoma jednostavnu analizu svih činioca potrebnih za konstrukciju samog sistema, vremena propagacije neutorna određene talasne dužine do određene pozicije u instrumentu, analizu da li će doći do preklapanja dva pulsa u vremenu na poziciji detektora i itd.



Slika 8.10. Prikaz vremensko-prostornog dijagrama u slučaju osnovne 10 % rezolucije snmanja

Preklapanje spektra dva snopa na poziciji detektora u vremenu je indikator loše konstrukcije sistema čopera, tako da se pri konstrukciji posvećuje veoma velika pažnja ovome. Detektor ne razlikuje neutrone po talasnim dužinama ili bilo kom drugom parametru, sem vremenu detekcije i to samo neki detektori imaju mogućnost, tako da je vremenska separacija izuzetno bitna.

8.2.2.2. Rezolucioni čoperi

Pod rezolucionim čoperima se smatraju svi čoperi čija je vrednost frekvencije rotacije veća u odnosu na vrednost frekvencije izvora. U ovom radu konstruisan je jedan složeni rezolucioni čoper posredstvom kojeg je moguće realizovati tri rezoluciona moda 1 % , 3% i 5% rezolucije snimanja instrumenta. Rezolucioni čoper postavljen posle prvog čopera a predstavljen je zelenom uspravnom linijom, Slika 8.11.

Sastavljen je od dva diska, prvi disk ima četiri prozora od 25 stepeni čiji su centri postavljeni na 0, 90, 180, 270 stepeni. Razlika između prvog i drugog diska je u dodatnim prozorima od 10 stepeni čiji su centri postavljeni na pozicijama 45 stepeni i 225 stepeni, Slika 8.11.

Ovakva konstrukcija je bila neophodna iz razloga realizacije sva tri moda u optimalnom režimu rada, kao i potrebe za fleksibinošću, mogućnosti realizacije i ostalim rezolucionih modova u intervalu od 1-6 %. Za realizaciju 1 % rezolucionog moda, ofset prvog diska u čoperu ostaje nepromenjen dok se ofset drugog diska u čoperu pomera za 45 stepeni u smeru suprotnom od kazaljke na satu. Na taj način dolazi do kreiranja dva prozora od 10 stepeni na pozicijama 0 i 180. Za realizaciju viših modova potrebno je koristiti 4 prozora. Ofset prvog diska se ne menja dok se ofset drugog diska podešava tako da se posredstvom prozora na ova dva diska kreira željeni ugao. Naravno vrednost ugla, ofseta drugog diska rezolucionog čopera, nije ista u slučajeima različitih rezolucija.



Prikaz rezolucionog čoper

Slika 8.11. Prikaz pozicije i izgleda rezolucionog čopera

Korišćenjem relacija 6.2 do 6.5 uz ubacivanje konkretnih podataka dolazi se vrednosti parametara čopera, nakon čega se proračunate vrednosti koriste u simulacijama. Nakon određenog broja simulacija pronađene su optimalne vrednosti, Tabela 8.3.

Tabela 8.3.	Vrednosti	parametara	rezoluc	cionih	čopera
-------------	-----------	------------	---------	--------	--------

	Pozicija [m]	Frekvencija [Hz]	Radius [cm]	Ugao [deg]	Faza [deg]	Broj diskova
		168		2 * 10	133.0 / 153.0	2
Čoper HM	13.2	70	40	4 *12.5	-5.8 / -23.3	2
		70		4 * 20.9	-100.1 / -109.8	2
		118.1		2 * 38	143	
Čoper HMO	19.2	49.2	40	4 * 27.2	76	2
		49.2		4 * 27.2	75	

Analizom relacija od 6.2 do 6.5 dolazi se do zaključka da jedan od parametara (veličina prozora čopera ili frekvencija obrtanja) može biti izabrana proizvoljno. Pri konstrukciji ove mašine izabrano je da je frekvencija taj proizvoljno izabran parametar.

Tokom procesa simulacija primećeno je da u slučajevima kada vrednost frekvencija rotacije rezolucionog čopera nema vrednost celobrojnog umnoška frekvencije izvora dolazi do pojave šetanja subpulseva u pulsu, što je u saglasnosti sa literaturom.

Kada je frekvencija rotacije čopera neznatno veća od celobrojne frekvencije ova pojava se tek primećuje na 10-tom pulsu a kako razlika u vrednosti raste u nekim slučajevima moguće je primetiti već na 4-tom pulsu. Kada se rezolucioni čoper rotira brzinom većom od celobrojnog umnoška frekvencije izvora, vremenski trenutak na kome čoper počinje produkciju subpulseva u narednom pulsu uvek ima drukčiju vrednost samim tim položaji maksimuma subpulseva imaće različitete vrednosti.

Poluprečnici rezolucionih čopera se računaju na isti način kao i u slučaju selekcionih čopera, postupak je analogan.

Veoma značajno je spomenuti da svaki od rezolucionih modova, nema konstantnu rezoluciju $\Delta \lambda / \lambda$, iz razloga što je dužina pulsa iz ESS ili čopera kao izvora konstantna, dok se vrednost talasne dužine menja, Tabela 8.4. Kako je najveći doprinos intenzitetu dolazi od strane neutrona čije se talasne dužine nalaze oko talasne dužine koja odgovara maskimumu intenziteta na Maksvelovoj raspodeli, može se smatrati zbog toga da se snimanja vrše sa datom rezolucijom moda. Sa povećavanjem talasne dužine neutrona rezolucija snimanja se povećava dok sa smanjivanjem talasne duži rezolucija snimanja pogoršava. Ovaj efekt je potrebno uzeti u obzir pri analizi podataka, što se već radi na mnogim instrumentima ovog tipa (SNS, J-PARC i ISIS).

	Δλ / λ pri 2.5 A	Δλ / λ pri 3.1 A	Δλ / λ pri 10 A
Rezolucija 10 % L=36m i τ=2.86 ms	12.60%	10.00%	3.10%
Rezolucija 5 % L=36m i τ=2.86 ms	5.70%	4.60%	1.40%
Rezolucija 3 % L=36m i τ=2.86 ms	3.40%	2.80%	0.90%
Rezolucija 1 % L=36m i τ=2.86 ms	1.10%	0.90%	0.28%

Tabela 8.4. Rezolucija snimanja u zavisnosti od talasne dužine

Zbog relativno velike udaljenosti rezolucionog čopera od detektora na poziciji detektora dolazi do pojave preklapanja subpulseva u vremenu, Slika 8.12, to dovodi do gubljena vremenske separacije subpulseva. Uzročnik ovome su neutorni koji su emitovani iz repa neutronskog pulsa, Slika 8.12. Takvi neutroni bivaju transmitovani kroz prozor HM čopera nakon čega nesmetano dolaze na poziciju detektora.

Problem se rešava uvođenjem novog čopera, HMO na poziciji iza trećeg selekcionog čopera,

8.11, odklanjaju se preklapanja i ponovo se uspostavlja separacija u vremenu subpulseva.

HMO čoper se sastoji od dva diska od koji svaki ima jedan prozor. Posredstvom ta dva diska moguće je kreirati ugaonu veličinu prozora HMO. Njegove karakteristike su u direktnoj veza sa karakteristikama rezolucionog čopera, pri čemu se HM čoper u ovome slučaju posmatra kao virtuelni izvor, pri čemu dužina pulsa ovakvog izvora ima konstantnu vrednost i definisana je posredstvom rezolucije koju je potrebo postići. U navedenom slučaju vreme trajanja pulsa iznosi 0.17 ms.



Slika 8.12. Prikaz problema preklapanja subpulse u high rezolucionom modu na vremensko-prostornom dijagramu



Slika 8.13. Šematski prikaz veze između parametra HMO čopera

Da bi se proračunali parametri HMO čopera potrebno je prvo definisati opseg talasnih dužina koji je potrebno prihvatiti HMO čoperom, Slika 8.13.

Označavajući poziciju rezolucionog čopera, HM, sa L_1 i poziciju HMO čopera sa L_2 , pri

čemu je razlika između pozicija označena sa ΔL uz poznavanje talasnih dužina moguće je proračunati parametre HMO čopera. Neutroni talasne dužine λ_{min} emitovani od strane virtuelnog izvora, HM čopera, prelaze put ΔL za vremske t_1 dato relacijom

$$t_1 = \frac{\Delta L \lambda_{\min}}{3956} \tag{8.7}$$

dok neutronima talasne dužine λ_{max} je potrebno

$$t_2 = \frac{\Delta L \lambda_{max}}{3956} \tag{8.8}$$

pri čemu je

$$\lambda_{max} = \lambda_{min} + \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}}{f_{HM}/f_{izvora}}$$
(8.9)

vremenska razlika data je relacijom

$$\Delta t = t_2 - t_1 = \frac{\Delta L}{3956} \frac{\lambda_{max} - \lambda_{min}}{f_{HM} / f_{izvora}}$$
(8.10)

Vremenska razlika je povezana sa frekvencijom, f , i uglom čopera, θ , posredstvom relacije

$$\Delta t f_{HMO} = \frac{\theta_{HMO}}{360} \tag{8.11}$$

Iz ove relacije može se videti da je jedan od parametra , frekvenciju ili ugao, moguće izabrati proizvoljno. Izbor nije u potpunosti skroz slobodan iz razloga pošto je vrednost ugla na čoperu limitirana ali i sama vrednost za frekvenciju rotacije čopera je limitirana tehničkim mogućnostima realizacije. Uloga ovog čopera je odklanjanje neutorna viših ili nižih talasnih dužina iz snopa, potrebno je njegov rad uskladiti sa rezolucionim čoperom. Nakon odabiranja frekvencije čopera , korišćenjem relacije 8.11 moguće je izračunati vrednost ugla čopera, Tabela 8.3.

Poznavanje frekvencije rotacije čopera i ugla čopera, ofset čopera se može proračunati korišćenjem relacije 6.5 dolazi se do sledeće relacije

$$\varphi_{HMO} = \frac{360}{t_1 \cdot f_{HMO}} + \frac{\theta_{HMO}}{2}$$

pri čemu je t_1 - vreme putovanja neutorna najmanje talasne dužine od virtuelnog izvor do HMO čopera. Minimalna talasna dužina u slučaju ove mašine ima vrednost od 2 A, što predstavlja početak opsega talasnih dužina instrumenta.

8.2.2.3. Kinetički modovi

Kinetička merenja su veoma značajna radi pokrivanja velikog Q opsega posredstvom jednog merenja što bi omogućilo merenje kinetičkih procesa na vremskoj skali od jedne sekunde i manje. Posredsvom instrumenta moguće je izvršiti povećanje Q opsega faktora $Q_{max}/Q_{min}=5$ u osnovnom modu rada instrumenta preskakanjem određenog broja pulseva. Zbog toga potrebno je

uvesti čoper na poziciji od 6.2 m udaljenoj od izvora.

8.2.2.3.1. Jedan preskočen puls mod

U 7 Hz modu svaki drugi puls je preskočen na taj način što je za vrednost frekvencije selekcionih čopera uzeta vrednost 7 Hz. Posredstvom dodatnog čopera na poziciji 6.2 m blokiraju se neutorni koji bivaju emitovani od strane drugog pulsa, Slika 8.14.



Slika 8.14. Vremensko-prostori dijagram jednog preskočenog puls moda

Separacija između dva pulsa u vremenu na poziciji detektora je povećana i iznosi 161 ms što omogućava povećanje vrednosti Q opsega za faktor $Q_{max}/Q_{min}=9$

Parametri čopera za jedan preskočen puls mod dobijaju se analogno kao i u slučaju selekcionih čopera .

	Pozicija [m]	Frekvencija [Hz]	Radius [cm]	Ugao [deg]	Faza [deg]	Broj diskova
Čoper S	6.2	7	40	1 * 104.8	-66.2	1
Čoper 1	13	7	40	1 * 134.2	-84.9	2
Čoper 2	15	7	40	1 * 153.3	-97.1	1
Čoper 3	19	7	40	1 * 190.9	-121.1	1
Čoper 4	25	7	40	1 * 246.1	-156.4	2

Tabela 8.5. Vrednosti parametara jedan preskočen puls mod

Na Slici 8.15, prikazana je vrednost intenziteta snopa neutrona dobijena nakon simulacija na poziciji detektora u slučaju posmatranog jednog pulsa 8.15 (a) i preskočenog pulsa 8.15 (b). Poređenjem vrednosti intenziteta sa slike 8.15. dolazi se do zaključka da je celokupan fluks neutrona prvog pulsa transportovan, dok je celokupni fluks drugog pulsa atenuiran. To znači da tokom snimanja neće dolaći do pojave kontaminacije neutronima emitovanim iz drugog pulsa.

Pojava slabog intenziteta na Slici 8.15 b je posledica emisije neutrona koji su emitovani tokom prvog puls a čije vrednsoti talasnih dužina u intervalu od 30 do 150 A.



Slika 8.15. Prikaz intenziteta na pozicij detektora a) prvog pulsa i b) preskočenog pulsa

8.2.2.3.2. Dva i više preskočenih puls modova

Dizajn čoperskog sistema omogućava veliku fleksibilnost u odabiru broja prečkočenih puls modova. Moguće je realizovati dva preskočeni puls moda čime se vrednost Q opsega povećava za faktor $Q_{max}/Q_{min}=12$ (vrednost frekvencije obrtanja čopera 4.7 Hz) i u slučaju tri preskočeni puls moda $Q_{max}/Q_{min}=16$ (vrednost frekvencije obrtanja čopera 3.5 Hz). U Tabeli 8.6 dati su parametri dva preskočen puls moda i u Tabeli 8.7. parametri tri preskočen pulse moda.

	Pozicija [m]	Frekvencija [Hz]	Radius [cm]	Ugao [deg]	Faza [deg]	Broj diskova
Čoper S	6.2	4.7	40	1 * 70	-40.9	1
Čoper 1	13	4.7	40	1 * 134.2	-79.0	2
Čoper 2	15	4.7	40	1 * 153.3	-90.3	1
Čoper 3	19	4.7	40	1 * 190.9	-112.6	1
Čoper 4	25	4.7	40	1 * 246.1	-145.3	2

Tabela 8.6. Vrednosti parametra čopera u dva preskočen puls modu

	Pozicija [m]	Frekvencija [Hz]	Radius [cm]	Ugao [deg]	Faza [deg]	Broj diskova
Čoper S	6.2	3.5	40	1 * 70	-39.4	1
Čoper 1	13	3.5	40	1 * 134.2	-76.0	2
Čoper 2	15	3.5	40	1 * 153.3	-86.9	1
Čoper 3	19	3.5	40	1 * 190.9	-108.3	1
Čoper 4	25	3.5	40	1 * 246.1	-139.7	2

Tabela 8.7. Vrednosti parametra čopera u tri preskočen puls modu

8.2.2.4. GISANS fokusna opcija

GISANS opcijom moguće je kolimisati snop kako u vertikalnom tako i horizontalnom pravcu. Divergencija snopa kreirana eliptično fokusnim vodiča se posredstvom ove opcije uklanja. Ovo se postiže postavljanjem pregrada S1 i S2. Mogu se pomerati po vertikalnoj osi, dok se prevencija refleksija neutrona u kolimacionom delu vrši upotrebom fiksnih pregrada, koje se nalaze između S1 i S2.

Na Slici 8.16. sa plavim krugom označen je prostor između zida elipse i pregrade, koji je popunjem konektujućim delom, neka vrsta lepka, da ne bi došlo do oštećenja veoma osetljive površine presvlake (superogledala).

Intenzitet ovako kolimisanog snopa kao i divergencija istog je predstavljena na Slici 8.17. Totalni fluks neutorna ima vrednost od $10^8 n/cm^2/s$ pri kolimaciji od 3 mrad (2 mrad u Gausovoj aproksimaciji) po oba pravca je moguće realizovati. Broj pregrada koji je pokazan na Slici 8.16. predstavlja minimalan broj koji je potreban radi eliminacije sporednih satelita i realizaciju čistog divergencijonog profila.



Slika 8.16. Prikaz GISANS moda za vertikalno fokusni neutronski vodič



Slika 8.17. Prikaz intenziteta kolimisanog snopa i divergencije istog posredstvom GISANS opcije

8.3. Virtuelni eksperiment

Svi virtuelni eksperimenti izvedeni su posredstvom softverskog paketa VITESS. U svim virtuelnim simulacija kao rezultat smatran je minimalni intenzitet od 50 detekcija neutrona po kanalu detektora pri 1 % rezoluciji radi dobijanja čistog signala, vrednost intenzitet signala je sigurno veća od vrednosti intenziteta šuma.

8.3.1. Virtuelni eksperimenti sa uzorkom preporučenim od STAP komiteta

Korištenjem preporuka STAP komiteta, ESS-a, koje ocenuje kvalitet instrumenata i odabira koji od instrumenata ulazi u fazu izgradnje, virtuelni eksperiment je izvršen korišćenjem uzorka slojevitog SiO₂ debljine 15 A na Si substratu sa površinskim neravninama od $\sigma=3A$ i uz korištenje veštačkog šuma intenziteta 10^{-7} kojim je opisano inkoherentno rasejavanje neutorna. Šum faktor je korišćen tokom virtualnih simulacija i onda nakon završetka uklonjen, po preporukama STAP komiteta, tako da predstavljeni rezultati krive reflektivnosti su reprezentovani bez doprinosa šuma. Rezultati ovih simulacija prezentovani su u slici 8.18, dok su u tabeli 8.8 prezentovani parametri virtualne simulacije. Za dobijanje krive reflektivnosti potrebno je koristiti pri snimanju tri različita ugla, Slika 8.18. Svakom uglu snimanja odgova po jedna boja na grafiku. Vreme merenja datih krivi refleksivnosti, od $Q_z=0.4 A^{-1}$, varira od 1 min u slučaju low rezolucijonog moda, 10%, pa do 5 min u slučaju high rezolucionog moda, 1%. Vreme snimanja u rezolucionom modu varira u zavisnosti od vrednosti ugla, ω -podešavanja.

Tabela 8.8. Parametri virtualnih simulaicja u slučaju STAP uzorak slojevitog SiO₂ na Si substratu sa površinskim neravninama od $\sigma=3A$

Ω – podešavanja [stepeni]	Vreme [s]	S1/S2 [mm]	rezolucija
02 09 40	10 50 250	0.2 - 1 - 5	106
0.2 - 0.9 - 4.0	10 - 30 - 230	0.053 - 0.24 - 1.2	190
0.2 0.0 4.0	4 20 100	0.2 - 1 - 5	204
0.2 - 0.9 - 4.0	4 - 20 - 100	0.053 - 0.24 - 1.2	3%0
0.2 0.0 1.0	2 10 7 E	0.3 - 1 - 6	E04
0.2 - 0.9 - 4.0	2 - 10 - 75	0.053 - 0.24 - 1.2	5%0
0.2 0.0 1.0	1 5 50	0.5 - 1 - 10	1004
0.2 - 0.9 - 4.0	<u> </u>	0.09 - 0.24 - 1.7	10%



Slika 8.18. Prikaz krive reflektivnosti za STAP uzorak slojevitog SiO₂ na Si substratu sa površinskim neravninama od σ =3A, simularanih pri 10 % rezolucionom modu (gore) i 1 % rezolucionom modu (dole)

8.3.2. Virtuelni eksperimenti sa uzorkom preporučenim od strane Radne Grupe

Pored virtuelnog eksperimenta sa STAP uzorkom još nekoliko je urađeno sa često korišćenim uzorcima koji su definisani od strane radne grupe za reflektometar.

Uzorak 1: sloj SiO₂ debljine 15 A postavljen na Si substratu (prefektno glatke površine)

- Uzorak 2: sloj Polistiren debljine 200 A postavljen na Si substratu (prefektno glatke površine)
- Uzorak 3: sloj Fe debljine 100 A postavljen na Si substrat
- Uzorak 4: D₂O postavljen na sloj SiO2 debljine 15 A koji je postavljen na Si substrat (sa hrapavošću poršinskog sloja od 3A)
- Uzorak 5: Vazduh dPS (300) SiO₂ (15 A) postavljenog na Si substratu (prefektno glatke površine)

Većina uzoraka ima prefektno ravnu površinu, što je potrebno radi demonstaracije mogućnosti instrumenta pri velikim Q vrednostima.

	σ [A]	ω [stepen]	vreme [s]			S1 [mm]	rezolucija	Max Q [A ⁻¹]	
Uzorak 1	0	0.2	1	0.25	50	900	0.5, 1, 10, <mark>30</mark>	10%	1.8
	0		1	25	5	10	0.5, <mark>1</mark> , 10, <mark>30</mark>	10%	1.2
UZUIAK Z	U	0.9	1	15	1500	2000	0.2, 1, 10, 30	1%	1.2
Uzorak 3	0	4	0.1	2	450	8100	0.5, 1, 10, 30	10%	1.9
Uzorak 4	3		1	0.2	150	900	0.5, 1, 10, 30	10%	0.7
Uzorak 5	0	18	1	1.5	300	9000	0.2, 1, 10, 30	1%	0.7

Tabela 8.9. Prikaz svih uzoraka kao i njihovih parametara pri virtuelnom eksperimentu

Vreme merenja je dato za različite uglove uz uslov da poslednje tačke na krivi reflektivnosti su određene sa najmanje 50 odbroja, Tabela 8.9. Pri snimanju krive reflektivnosti potrebno je da se merenja izvrše sa četiri ugla (različite boje na Slici 8.19-8.23). Prisustvom promtnog pulsa je eliminisano iz simulacija uvođenjem 2 ms prazine. Ova praznina ne pravi probleme u krivi reflektivnosti za ovakve uzorke, jedino u slučajevima kada je potrebno videti osobine krive baš u predelu praznine. U takvom slučaju korigovanjem vrednosti uglova moguće je dobiti informacije o vrednostima krive reflektivnosti u traženom intervalu.

U Tabeli 8.10. prikazani su parametri u slučaju realističnih vremena merenja pri koji se postižu vrednosti na krivi reflektivnosti od 10^{-7} i 10^{-8} . U slučaju uzoraka 1, 3 i 4 ukupno vreme merenja je manje od 210 sekundi što pokazuje veliki potencijal instrumenta u veoma brzim merenjima kriva reflektivnosti pri velikim vrednsotima Q u 10% rezolucijonom modu.

	Max Q[A ⁻¹] pri 10 ⁻⁷	vreme [s]	Max Q[A ⁻¹] pri 10 ⁻⁸	vreme [s]	rezolucija
Uzorak 1 (S1)	0.35	35	0.7	40	10%
Uzorak 2 (S2)	0.3	30	0.65	360	1%
Uzorak 3 (S3)	0.4	120	0.6	210	10%
Uzorak 4 (S4)	0.3	10	0.45	40	10%
Uzorak 5 (S5)	0.2	20	0.35	600	1%

Tabela 8.10. Prikaz parametara u slučaju realističnih vremena merenja pri vrednostima na krivi reflektivnosti od 10^{-7} i 10^{-8}

Virtualne simulacije su izvršene i u slučajevima rezolucionog moda od 1%, u slučaju uzoraka 2 i 5.

Potrebno je naglasiti da u slučaju virtualnih simulacija prezentovanih na Slikama 8.19 do 8.24 uzet u obzir samo homogena vrednost šuma, ali ne i šum koji nastaje rasejavanjem neutorna na uzorku ili nosaču uzorka. Na Graficima sa crvenom strelicom prikazane su pozicije praznina promtnih pulseva. Sa strane svakog od grafika prikazan je paleta boja pri čemu svaka boja označava jednu vrednost ugla, Tabela 8.9. Dok žutim i zelenim linijama na grafiku prikazani su vrednosti reflektivnosti na y-osi od 10^{-7} i 10^{-8} dok na x-osi je prezentovane maksimalne vrednosti Q na datim vrednostima reflektivnosti, Tabela 8.10. Sa velikim slovom S sa brojem opisan je uzorak, tako S1 znači uzorak 1. Virtualni eksperimenti pokazuju izuzetne performanse instrumenta pri merenju tankih filmova u 1 i 10 % rezolucijonom modu. Rezultati eksperimenata su u veoma dobroj saglasnosti sa teorijsko proračunatim vrednostima, crvene linije na dole navedenim slikama, što govori o veoma dobrom kvalitetu realizacije samog eksperimenta.



Slika 8.19 Prikaz krive reflektivnosti za uzorak vazduh-SiO2 (15 A) na Si substratu snimnjenom 10 %-centnim rezolucijonim modom



Slika 8.20 Prikaz krive reflektivnosti za uzorak vazduh- Polistiren (200 A) na Si substratu snimnjenom 10 %-centnim rezolucijonim modom



Slika 8.21 Prikaz krive reflektivnosti za uzorak vazduh - Fe (100 A) na Si substratu snimnjenom 10 %-centnim rezolucijonim modom



Slika 8.22 Prikaz krive reflektivnosti za uzorak vazduh - SiO2 (15 A) na D₂O substratu snimnjenom 10 %-centnim rezolucijonim modom



Slika 8.23 Prikaz krive reflektivnosti za uzorak vazduh – Polistiren (200 A) na Si substratu snimnjenom 1 %-centnim rezolucijonim modom



Slika 8.24 Prikaz krive reflektivnosti za uzorak vazduh – dPS (300 A) – SiO2 (15 A) na Si substratu snimnjenom 1 %-centnim rezolucijonim modom

Zaključak

Metodom neutronske relfektometrije moguće je doći do informacija o unutrašnjoj strukturi nekih od značajnijih klasa kompleksnih materijala: magnetnih i nemagnetnih nanočestica, biosenzora kao i hibridnih struktura koje se sastoje od slojeva magnetnih i nemagnetih komponenata razdvojenih kontaktnim površinama.

Jedan od najvećih problema sa kojim se susreću naučnici u tankim filmovima čvrstih materijala predstvalja analiza osobina kontaktne površine između dva sloja u heterogenoj slojevitoj strukturi. Feromagnetizam između dva antiferomagnetna ili paramagnetna sloja, superprovodnost kontaktne površine, magnetno optički efekti kao i Hall efekat. U navedenim primerima potrebno je razumeti strukturnu i magnetnu organizaciju kontakne površine na namometarskoj skali. Posredstvom ove metode je moguće doći do potrebnih informacija.

Neutroni su se pokazali kao veoma značajna tehnika u slučaju izučavanja strukture i osobina novih magnetnih faza, MnSi i Mn baziranih materijala, čije razumevanje bi dovelo do kreiranja novih spinotronik uređaja.

Jedna od mogućih primena je analiza topologije faza, topologijski izolator (TI), u kojima nova elektronska faza je provodna na površini, a u unutrašnjosti pokazuje osobine izolatora. Pored toga provodni elektroni su razdvojeni po spinskim stanjima posredsvom čega postoji mogućnost realizacije praktičnih spinotronika. Na ovom polju postoji još dosta nejasnoća vezanih za same električne i magnetne osobine materijala, koji u narednom periodu treba da budu razjašnjenje.

Trend u narednom periodu je i minimizacija magnetnih elemenata, magnetne nanočestice i nanotube, na skale reda nm. Kako na tako maloj skali uticaj okoline na sam magnet postaje veoma bitan, razumevanje ovih procesa dovelo bi do kreiranja novih tipova memorijskih uređaja kao i senzora. Pored toga utrlo bi put ka razvoju novih materijala.

U slučajevima hibridnih materijala razumevanje osobina same kontakne površine, nastale pri spajanju dva sloja različitog hemijskog sastava. Ovo pre svega je veoma značajno u slučajevima bioloških nauka, biosenzora i transplantacionoj medicini (mehanički uređaji). Oni predstavljaju spoj biološkog i metalnog ili poluprovodničkog materijala. Transplataciona medicina sa druge strane ima interes u boljem razumevanju procesa koji bi doveli do boljeg prihvatanja mehaničkih instrumenata (veštačkih organa) od strane ljudskog.

U molekularnoj biologiji nalazi mesto u ispitivanju takozvanih blid spot površina. Boljim razumevanjem strukture i međusobne interakcije biomembrana i proteina omogućilo bi pronalaženje leka za mnoge bolesti (npr.Pakinsonova bolest).

Primena u naukama o životnoj sredini dovela bi do boljeg razumevanja procesa koji se odvijaju između nanočestica i okolne atmosfere, kao i tretmana vode.

Doprinelo bi razumevanju hemijskih procesa lubrikanata ili aditiva na metalnoj podlozi, vetrogeneratora, u građevinarstvu razumevanju površinskih reakcija kompleksnih silikona, keramičko/metalnih slojeva, presvalačenja podloga tečnim metalima, medicinskim veštačkim implantima i tansportu lekova.

Pored svega gore navedenog jedna od najznačajnijih primena je u slučaju energetskih materijala, baterija. U toku narednih decenija trend u svetu će biti smanjenje efekta staklene bašte što će podrazumevati smanjenje upotrebe fosilnih goriva i povećanje upotrebe zelenih tehnologija, obnovljivih izvora enegije. Proizvodnja energije iz ovakvih izvora zavisi od uslova spoljašnje sredine, s toga postoji potreba da u momentima kada ovakvi izvori ne generišu energiju, taj manjak se nadomesti iz skladišta, koje je sačinjeno od velikog broja baterija.

Razmatrajući trenutne i buduće potrebe naučnika koji se bave mekim materijalima zaključeno je da potreba za niskom vrednosti šuma pri što većem intenzitetu zračenja je ključni faktor koji obezbeđuje povećavanje Q opsega reflekcione krive i omogućava ekstrakciju mnogo tačnijih i detaljnijih podataka o ispitivanom sistemu. Visoka vrednost fluksa neutrona omogućava realizaciju merenja u kraćem vremenskom intervalu kao i praćenje hemijskih i bioloških reakcija na kraćoj vremenskoj skali. Za ove svrhe dugopulsni izvor, ESS (evropski spalacioni izvor), proizvodi sasvim veliki opseg talasnih dužina što obogućava veliki Q spektar i u isto vreme omogućava snimanje u jednom pulsnom modu refleksione krive.

Cilj ovoga rada je bila konstrukcija instrumenta kojim bismo bili u mogućnosti da snimamo uzorke od interesa za naučnu zajednicu. Nakon nekoliko sastanaka potencijalnih korisnika usaglašeno je mišljenje da je posredstvom ovog instrumenta moguće izvršiti snimanja oko 70% uzoraka od interesa, što predstavlja potvrdu visokog kvaliteta.

Instrument je koncipiran na način da beskompromisno zadovoljava osnovne zahteve, a sa druge strane ponuđen je veliki stepen fleksibilnosti koji omogućava optimizacije pri snimanjima uzoraka, pošto postoji mogućnost finog podešavanja parametara i na taj način dobijanja optimalnih uslova za snimanje različitih uzoraka.

Prilikom konstrukcije instrumenta akcenat je stavljen na mogućnosti tehničke realizacije kao i radnog veka komponenti instrumenta. Principijano pri projektovanju instrumenta korišćene su proverene komponente, koje su instalirane po raznim instrumentima ovog tipa u svetu. Pored toga, instrument poseduje mali deo pokretnih elemenata, pojava kvarova bi trebala da bude veoma retka, što je veoma značajno iz razloga maksimalnog iskorišćenja mogućnosti samog instrumenta.

Analizom rezultata krivih reflektivnosti predstavljenih uzoraka zabeležena su slaganja simuliranih rezultata sa teorijsko proračunatim, što govori da su parametri instrumenta vrlo dobro određeni.

Moguće je izvršiti snimanja slojevitih uzorka od nekoliko do hiljadu angstrema što omogućava visok stepen fleksibilnosti pri analizi uzoraka.

Trend u oblasti kondezovane materije predstavlja smanjivanje dimenzija samih uzoraka, sa bulk uzoraka materijala prelazi se sve više na manje uzorke, tako da je mogućnost snimanja malih uzorka posredstvom instumenta postala veoma bitna karakteristika. Putem predloženog projektovanog instrumenta moguće je izvršiti snimanje uzorka dimenzije od 1x1cm².

Vrednost fluksa snopa neutrona na poziciji uzorka je za 25 puta veći u odnosu na postojeće reflektomentre instalirane u najvećim svetskim neutronskim centrima. To znači kraće vreme snimanja putem ovog instrumenta sa traženom statistikom i mogućnost usluživanja većeg broja korisnika.

Literatura

- 1. Paul Reuss, Neutron Physics, EDP Sciences (2008)
- 2. James Byrne, *Neutrons, Nuclei and Matter: An Exploration of the Physics of Slow Neutrons,* Dover Publications (2011)
- 3. <u>http://www.fas.org/sgp/othergov/doe/lanl/lib-www/la-pubs/00326407.pdf</u> (*P. Rinard*, Neutron Interactions with Matter)
- 4. <u>http://europeanspallationsource.se/accelerator-documents</u>
- 5. <u>http://flnp.jinr.ru</u>
- 6. Thomas Bruckel, Gernot Heger, Dieter Richter, Georg Roth i Reiner Zorn, *Laboratory Course Neutron Scattering Lectures*, FZJ, Julich (2003), (2008), (2013)
- 7. Tapan Chatterji, Neutron Scattering from Magnetic Materials, Elsevir (2005)
- 8. I.A.Zaliznyak i S.-H.Lee. Magnetic Neutron Scattering In *Modern Techniques for Characterizing Magnetic Materials*, edited by Y. Zhu , Heidelberg, Springer (2005)
- 9. Squires, G. L., *Introduction to the theory of thermal neutron scattering*, Cambridge, Cambridge University Press (1978) i New York, Dover Publications (1996)
- 10. Lovesey, S. W., *Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter*, Oxford, Clarendon Press (1984)
- 11. L.G.Parrat, Phys. Rev. 95, 359 (1954)
- 12. L.Nevot, P.Croce, Rev. de Phys. Appl. 15, 761 (1980)
- 13. 38 th IFF Spring School Probing the Nanoworld, FZJ, vol 26 (2005)
- 14. www.helmholtz-berlin.de/forschung/oe/em/transport-phenomena/projekte/vitess/index_en.ht ml/
- 15. Malvin H. Karlos, Paula A. Whitlock, Monte Carlo Methods: Basics, J Wiley & Sons (1986)
- 16. www.fys.ku.dk/~willend/Neutron1_4.pdf
- Stephen M. Sirard, Ravi R. Gupta, Thomas P. Russell, James J. Watkins, Peter F. Green, and Keith P. Johnston, Structure of End-Grafted Polymer Brushes in Liquid and Supercritical Carbon Dioxide: A Neutron Reflectivity Study, Macromolecules 2003, 36, 3365-3373
- Jonathan W. Kiel , Brian J. Kirby, Charles F. Majkrzak, Brian B. Maranville and Michael E. Mackay , Nanoparticle concentration profile in polymer -based solar cells, Soft Matter , 2010, 6, 641-646
- 19. Zarbakhsh A, Campana M, Mills D, Webster JR, Structural studies of aliphatic substituted phthalocyanine-lipid multilayers. Langmuir 26(19):15383-15387 05 Oct 2010

Kratka biografija



Medić Žarko je rođen 03.02.1988. godine u Novom Sadu. Osnovnu školu i gimnaziju " Jovan Jovanović Zmaj ", matematičkog usmerenja završio je u Novom Sadu. Osnovne studuje na Prirodno-matematičkom fakultet u Novom Sadu, na smeru diplomirani fizičar istraživač studirao je od 2007 do 2013 godine. Potom je 2013 godine upisao master studije fizike na Prirodno-matematičkom fakultetu u Novim Sadu.

UNIVERZITET U NOVOM SADU

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:	
RBR	
IDR Tin dokumentacije:	Monografska dokumentacija
TD	wonografska dokumentacija
Tip zapisa:	Tekstualni štampani materijal
TZ	Tenotuunin olumpuni materijai
Vrsta rada:	Master rad
VR	
Autor:	Žarko Medić
AU	
Mentor:	prof.dr Miodrag Krmar
MN	
Naslov rada:	Simulacija svojstava neutronskog reflektometra
NR	
Jezik publikacije:	srpski (latinica)
Jezik izvoaa:	srpski/engleski
JI Zamlia publikovanja:	Dopublika Schija
	Керионка эгогја
Liže geografsko područje:	Voivodina
UGP	vojvouna
Godina:	2014.
GO	
Izdavač:	Autorski reprint
IZ	•
Mesto i adresa:	Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad
MA	
Fizički opis rada:	Broj poglavlja: 8
FO	Broj strana: 77
	Broj lit. citata: 19
	Broj tabela: 13
	Broj slika: 33
	Broj grafika: U
	Broj priloga: U
Naučna oblast:	Fizika
NO	Τιζικά
Naučna disciplina:	Nuklearna fizika
ND	
Predmetna odrednica/ ključne reči:	Rasejavanje neutrona, reflektometar, simulacije osobina
PO	reflektometra posredstvom VITESS programskog paketa
UDK	
Čuva se:	Biblioteka departmana za fiziku, PMF-a u Novom Sadu
ČU	
Važna napomena:	nema
VN	
Izvod:	U ovom master radu opisan je postupak za konstrukciju
IZ	vertikalnog retlektometra. Predstavljne su najznačajnije komponente i objašnjena njihova funkcija u instrumentu.
Datum prihvatanja teme od NN
veća:DPDatum odbrane:DOČlanovi komisije:KOPredsednik:prof.dr Mirco
član:prof.dr Srđa
prof.dr Mirco

prof.dr Miroslav Vesković prof.dr Srđan Rakić prof.dr Miodrag Krmar

UNIVERSITY OF NOVI SAD FACULTY OF SCIENCE AND MATHEMATICS

KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:	
Identification number:	
Document type:	Monograph publication
Document type.	Monographi publication
DI Type of record:	Toytual printed material
	Textual printed material
IR Contont of dec	Einelmener
	Final paper
Author:	Zarko Medic
AU	
Mentor/comentor: MN	professor Miodrag Krmar, PhD
Title:	Simulation features of neutron reflectmeter
TI	
Lanauaae of text:	Serbian (Latin)
LT	
Language of abstract.	English
LA	
Country of publication:	Republic of Serbia
CP	Republic of Serbla
Locality of publication:	Voivodina
	vojvouma
LI Dublication years	2014
Publication year. PY	2014.
Publisher:	Author's reprint
PU	
Publication place:	Faculty of Science and Mathematics, Trg Dositeja Obradovića 4,
PP	Novi Sad
Physical description:	Chapters 8
PĎ	Pages 77
	Literature 19
	Tables 13
	Figures 33
	Granhics 0
	Appendix 0
	Appendix 0
Scientific field:	Physics
SE	1 11/5105
Scientific discipline:	Nuclear physics
scientific discipline.	Nuclear physics
Subject/Venuerder	Neutron contraing reflectometer cimulation of instrument for
Subject/ Key words:	Neutron scattering, reflectometar, simulation of mistrument for
SKW	neutron scattering with VIIESS program
Holding data:	Library of Department of Physics, Trg Dositeja Obradovica 4
HD	
Note:	none
Ν	
Abstract:	In this master thesis is described a process for the construction of
AB	vertical reflectometer.Presented are the most important components, and explains their function in the instrument

Accepted by the Scientific Board: ASB Defended on: DE Thesis defend board: DB President: Member: Member: pr

professor Miroslav Vesković professor Srđan Rakić professor Miodrag Krmar