Л.А. БУЛАВІН, Ю.Ф. ЗАБАШТА

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет
(Вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601; e-mail: bulavin221@gmail.com)

УДК 539.171.4

АНОМАЛЬНА МАЛОКУТОВА АСИМПТОТИКА ІНТЕНСИВНОСТІ РОЗСІЯННЯ НЕЙТРОНІВ

Стаття присвячена розгляду асимптотичної залежності інтенсивності малокутового розсіяння нейтронів $I(\mathbf{Q})$ при $\mathbf{Q} \to 0$. Розглядається аномальна асимптотика інтенсивності розсіяння, коли $I(\mathbf{Q})$ різко зростає при $\mathbf{Q} \to 0$. Показано, що така поведінка інтенсивності зумовлена присутністю випадкового поля розсіюючої густини з характерним лінійним розміром, який значно перевищує обернене значення модуля $\mathbf{Q}$. Встановлено, що в розглянутому випадку шукана асимптотична залежність має вигляд $I(\mathbf{Q}) \sim Q^{-3}$.

Ключові слова: малокутове розсіяння нейтронів, класична асимптотика, аномальна асимптотика.

1. Вступ

Згідно з класичною теорією розсіяння [1] при $\mathbf{Q} \to 0$ повинна мати місце залежність

$$I_{\mathrm{clas}}(\mathbf{Q}) \sim 1 - Q^2 b^2, \tag{1}$$

де b – характерний лінійний розмір досліджуваної системи, який за порядком величини збігається з радіусом кореляції (розміром неоднорідності). Будемо називати поведінку інтенсивності, що описується формулою (1), класичною асимптотикою.

У деяких експериментах [2–5] спостерігається відхилення від класичної залежності (1) (див. рис. 1, де пунктиром зображено графік кривої, що визначається формулою (1), а суцільною лінією – експериментальна залежність). Поведінку інтенсивності, визначеної на рисунку суцільною лінією, будемо називати аномальною асимптотикою малокутового розсіяння нейтронів. Стаття присвячена обговоренню можливого фізичного механізму її виникнення.

2. Аномальна асимптотика інтенсивності розсіяння нейтронів

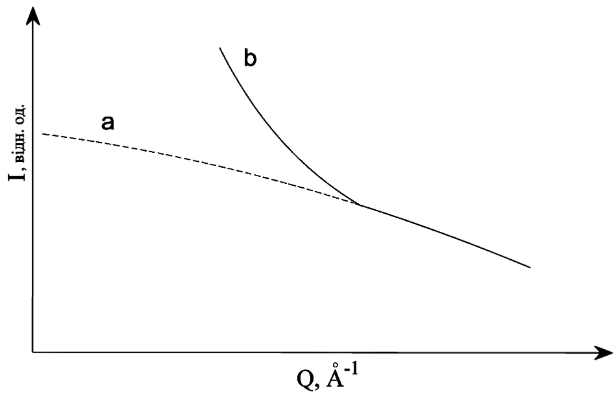
Як відомо [2], однією з моделей, що застосовується для опису розсіяння нейтронів фізичною системою, є континуальна модель, згідно з якою система розглядається як статистично однорідне поле $\varphi(\mathbf{x})$ випадкової величини φ, яка називається розсіюючою густиною.

Це поле, як і будь-яке інше випадкове однорідне поле, характеризується коефіцієнтом кореляції:

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \frac{\langle \varphi(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}') \rangle}{\sigma^2}, \tag{2}$$

де $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$, $\mathbf{x}$ – радіус-вектор точки простору, зайнятого системою, $\langle ... \rangle$ – оператор усереднення по полю, σ^2 – дисперсія випадкової величини φ.

Ще однією характеристикою вказаного поля є величина $s(\mathbf{q})$, яка називається нормованою спектральною густиною або нормованим спектром. (Далі відносно цієї величини буде застосовуватися термін "спектр"). Вказана величина пов'язана з



Класична (a) та аномальна (b) асимптотика інтенсивності розсіяння нейтронів

коефіцієнтом кореляції фур'є-перетвореннями

$$s(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{rq})\, d\mathbf{r} \qquad (3)$$

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} s(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{rq})\, d\mathbf{q}. \qquad (4)$$

Згідно з класичною теорією розсіяння [1] інтенсивність розсіяння пропорційна спектру випадкового поля. Цей результат теорії використовується для встановлення спектра із даних експерименту: реалізуючи в експерименті різні значення вектора розсіяння $\mathbf{Q}$ та вимірюючи відповідну інтенсивність розсіювання $I(\mathbf{Q})$, використовуючи згадану залежність, розраховують по отриманих даних експериментальний спектр $s_{\exp}(\mathbf{Q})$:

$$I(\mathbf{Q}) \sim s_{\exp}(\mathbf{Q}). \qquad (5)$$

Очевидною є рівність

$$s_{\exp}(\mathbf{Q}) = s(\mathbf{q} = \mathbf{Q}). \qquad (6)$$

Ми вважаємо, що виникнення аномальної асимптотики інтенсивності малокутового розсіяння нейтронів пов'язано з існуванням випадкового поля, для якого виконується умова

$$b \gg Q^{-1}. \qquad (7)$$

Зберігаючи умову (7), розглянемо граничний перехід, який визначається такими залежностями:

$$Q^{-1} \to \infty, \qquad (8)$$

$$b \to \infty. \qquad (9)$$

Оскільки у цьому випадку $b \to \infty$, то для коефіцієнта кореляції має місце співвідношення

$$\Gamma(\mathbf{r}) \to 1, \qquad (10)$$

підставляючи яке в рівність (3), отримуємо

$$s(\mathbf{q}) \to \delta(\mathbf{q}). \qquad (11)$$

Надамо залежності (8) вигляд

$$\mathbf{Q} \to 0. \qquad (12)$$

Записуючи останню, ми, природно, маємо на увазі деяку чисельну послідовність

$$\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \mathbf{Q}_3, ..., 0, \qquad (13)$$

яка прямує до нуля, а, записуючи співвідношення (11) – функціональну послідовність

$$s(\mathbf{q})_1, s(\mathbf{q})_2, s(\mathbf{q})_3, ..., \delta(\mathbf{q}), \qquad (14)$$

що сходиться до дельта-функції у просторі узагальнених функцій [6]. Зіставляючи співвідношення (13) і (14), бачимо, що кожному значенню вектора розсіювання $\mathbf{Q}_J$ відповідає "свій" член $s_J(\mathbf{q})$ послідовності (14).

Таку послідовність називають [6] дельта-послідовністю. Вважають [6], що оскільки вказана послідовність сходиться до дельта-функції, будь-який член послідовності, в принципі, можна розглядати як наближену дельта-функцію. Для цього необхідно, аби згаданий член мав властивості дельта-функції. Виходячи з останньої умови, визначимо аналітичний вигляд функції $s_J(\mathbf{q})$ – j-го члена дельта-послідовності.

У фізичній літературі [7] прийнято розглядати дельта-функцію як функцію, що має такі властивості:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{q})\, d\mathbf{q} = 1, \qquad (15)$$

$$\delta(\mathbf{q}) = 0 \ (\mathbf{q} \neq 0), \qquad (16)$$

$$\delta(\mathbf{q}) = \infty \ (\mathbf{q} = 0). \qquad (17)$$

Наближена дельта-функція (член $s_J(\mathbf{q})$ дельта-послідовності) повинна мати аналогічні властивості.

Властивість (15) дельта-функції для вказаного члена $s_J(\mathbf{q})$ дельта-послідовності залишається незмінною:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} s_J(\mathbf{q})\,d\mathbf{q} = 1. \tag{18}$$

Що ж стосується властивостей (16), (17) дельта-функції, то їх формулювання для наближеної дельта-функції – члена $s_J(\mathbf{q})$ дельта-послідовності – необхідно дещо скорегувати.

Як це випливає з формули (16), значення дельта-функції дорівнює нулю для всіх векторів розсіяння, за винятком вектора $\mathbf{q} = 0$. Зрозуміло, що нульове значення вектора розсіяння неможливо досягнути в реальному експерименті. Ми можемо говорити лише про те, що значення вектора $\mathbf{Q}_J$, яке задається в експерименті, достатньо мале, аби його слід було вважати рівним нулю. При цьому саме значення вектора розсіяння $\mathbf{Q}_J$ відіграє роль похибки, з якою визначається так званий "нуль" в даному експерименті.

Вже згадувалось про те, що члену $s_J(\mathbf{q})$ дельта-послідовності відповідає значення $\mathbf{Q}_J$. Таким чином, якщо ми хочемо розглядати член $s_J(\mathbf{q})$ дельта-послідовності як наближену дельта-функцію, то ми повинні наближено вважати, що маємо справу з "нулем", який займає область $|\mathbf{q}| \le |\mathbf{Q}_J|$. Така наближена дельта-функція $s_J(\mathbf{q})$ виявляється "розмитою" по області, що має форму кулі з радіусом $|\mathbf{Q}_J|$. Зовні цієї області, як це властиво дельта-функції, значення члена $s_J(\mathbf{q})$ дельта-послідовності повинні дорівнювати нулю.

Очевидно, що вказана "розмазаність" не дозволяє приписати члену $s_J(\mathbf{q})$ дельта-послідовності властивість (16) дельта-функції в повному обсязі: "розмазана" по згаданій сфері $|\mathbf{q}| \le |\mathbf{Q}_J|$, наближена дельта-функція не може бути рівною нескінченності, оскільки при цьому порушується рівність (16). Разом з тим, в даному випадку важливо, що в нулі дельта-функція має єдине значення, і саме цю особливість дельта-функції ми зобов'язані зберегти для членів дельта-послідовності. Іншими словами, якщо ми хочемо розглядати член $s_J(\mathbf{q})$ дельта-послідовності як дельта-функцію, то повинні прийняти, що в "нулі", тобто в області $|\mathbf{q}| \le |\mathbf{Q}_J|$, згаданий член має одне і те саме єдине значення, яке надалі будемо позначати через h_J.

У силу згаданих вище міркувань функція $s_J(\mathbf{q})$ має вигляд

$$s_J(\mathbf{q}) = h_J\{H(|\mathbf{q}|) - H(|\mathbf{q}| - |\mathbf{Q}|)\}, \tag{19}$$

де $H(z)$ – функція Хевісайда.

Підставляючи вираз (19) у рівність (18) і виконуючи інтегрування, отримуємо

$$h_J = \frac{3}{4\pi} Q_J^{-3}. \tag{20}$$

Значення експериментально спостережуваного спектра при заданому векторі розсіювання $\mathbf{Q}_J$, за визначенням, дорівнює

$$s_{\exp}(\mathbf{Q}_J) = s_J(\mathbf{q} = \mathbf{Q}_J). \tag{21}$$

Підставляючи в рівність (21) значення $s_J(\mathbf{q} = \mathbf{Q}_J)$, розраховане за формулами (19), (20), отримуємо

$$s_{\exp}(\mathbf{Q}) = \frac{3}{4\pi} Q^{-3}. \tag{22}$$

При цьому, згідно з формулою (5), для аномальної асимптотики інтенсивності малокутового розсіяння нейтронів маємо

$$I_{\text{anom}}(\mathbf{Q}) \sim Q^{-3}\ (\mathbf{Q} \to 0). \tag{23}$$

Як видно з рисунка, відмінною особливістю аномальної асимптотики в порівнянні з її класичним аналогом є різке зростання інтенсивності у випадку, коли вектор розсіяння прямує до нуля. Співвідношення (23) відображає цю особливість. Тому є всі підстави вважати, що розглянутий вище механізм аномальної асимптотики малокутового розсіяння нейтронів може мати місце в реальності. Зрозуміло, що в реальному експерименті умова термодинамічної границі не реалізується, і інтенсивність розсіяння нейтронів у нульовий кут не буде нескінченною [8].

3. Висновок

Із наведених вище міркувань випливає, що єдиною причиною виникнення аномальної асимптотики (23) є нерівність (7).

Це означає, що в експерименті ми завжди будемо спостерігати згадану аномальну поведінку інтенсивності малокутового розсіяння нейтронів, якщо в досліджуваній системі існує великомасштабне випадкове поле розсіюючої густини конденсованого середовища з характерним лінійним розміром, який значно перевищує обернене значення модуля векторів розсіювання, що реалізуються в даному експерименті.

Крім того, це означає також, що оскільки при виводі формули (23) ніде не використані мікроскопічні уявлення, вказана формула буде залишатися справедливою для будь-якого поля, яке задовольняє умову (7).

Що це може бути за поле? З одного боку, наявність вказаного поля може свідчити про існування деякої великомасштабної надструктури конденсованого середовища. З іншого боку, не виключена можливість того, що при прямуванні вектора розсіяння до нуля на інтенсивність малокутового розсіювання почне впливати просторова обмеженість досліджуваної системи. Тоді в ролі характерного розміру b буде виступати розмір системи. Відповідь на це питання в подальшому повинні дати заплановані нами експерименти.

1. П. Дебай, *Избранные труды* (Наука, Москва, 1987).
2. Д.И. Свергун, Л.А. Фейгин, *Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние* (Наука, Москва, 1986).
3. Авдеев М.В., Аксьонов В.Л., УФН **180**, 1109 (2010).
4. Рунов В.В., Скоробагатих В.Н., ФТТ **56**, 68 (2014).
5. Хамова Т.В., Шилова О.А., ФТТ **56**, 107 (2014).
6. В. Кеч, П. Теодореску, *Введение в теорию обобщенных функций с приложениями в технике* (Мир, Москва, 1978).
7. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика* (Наука, Москва, 1985).
8. К.О. Чалий, Л.А. Булавін, О.В. Чалий, Журн. фіз. досл. **9**, 66 (2005).

Одержано 08.02.15

Л.А. Булавин, Ю.Ф. Забашта

АНОМАЛЬНАЯ МАЛОУГЛОВАЯ
АСИМПТОТИКА ИНТЕНСИВНОСТИ
РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Р е з ю м е

Статья посвящена рассмотрению асимптотической зависимости интенсивности малоуглового рассеяния нейтронов $I(\mathbf{Q})$ при $\mathbf{Q} \to 0$. Рассматривается аномальная асимптотика интенсивности рассеяния, когда $I(\mathbf{Q})$ резко возрастает при $\mathbf{Q} \to 0$. Показано, что такое поведение интенсивности обусловлено присутствием случайного поля рассеивающей плотности с характерным линейным размером, который значительно превышает обратное значение модуля $\mathbf{Q}$. Установлено, что в рассматриваемом случае искомая асимптотическая зависимость имеет вид $I(\mathbf{Q}) \sim Q^{-3}$.

L.A. Bulavin, Yu.F. Zabashta

ANOMALOUS ASYMPTOTIC
OF SMALL-ANGLE NEUTRON
SCATTERING INTENSITY

Р е з ю м е

An anomalous asymptotic dependence of the small-angle neutron scattering intensity $I(\mathbf{Q})$, when $I(\mathbf{Q})$ increases infinitely as $\mathbf{Q} \to 0$, has been studied. This behavior is shown to be associated with the presence of the random field of a scattering density, whose typical linear size is much larger than the reciprocal magnitude of $\mathbf{Q}$. In the considered case, the sought asymptotic dependence is found to have the form $I(\mathbf{Q}) \sim Q^{-3}$.