

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)

## АНОМАЛЬНА МАЛОКУТОВА АСИМПТОТИКА ІНТЕНСИВНОСТІ РОЗСІЯННЯ НЕЙТРОНІВ

УДК 539.171.4

*Стаття присвячена розгляду асимптотичної залежності інтенсивності малокутового розсіяння нейтронів  $I(\mathbf{Q})$  при  $\mathbf{Q} \rightarrow 0$ . Розглядається аномальна асимптотика інтенсивності розсіяння, коли  $I(\mathbf{Q})$  різко зростає при  $\mathbf{Q} \rightarrow 0$ . 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  $\mathbf{Q} \rightarrow 0$  повинна мати місце залежність

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

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.

© Л.А. БУЛАВІН, Ю.Ф. ЗАБАШТА, 2015

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2015. Т. 60, № 4

### 2. Аномальна асимптотика інтенсивності розсіяння нейтронів

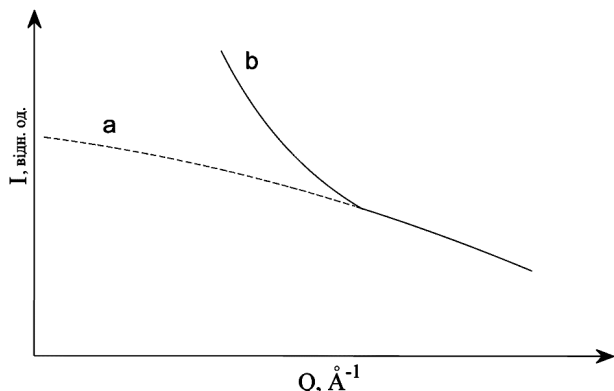
Як відомо [2], однією з моделей, що застосовується для опису розсіяння нейтронів фізичною системою, є континуальна модель, згідно з якою система розглядається як статистично однорідне поле  $\varphi(\mathbf{x})$  випадкової величини  $\varphi$ , яка називається розсіюючою густиною.

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

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

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

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 розсіювання нейтронів

коефіцієнтом кореляції фур'є-перетвореннями

$$s(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{r}\mathbf{q}) d\mathbf{r} \quad (3)$$

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} s(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{r}\mathbf{q}) d\mathbf{q}. \quad (4)$$

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

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

Очевидною є рівність

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

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

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

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

$$Q^{-1} \rightarrow \infty, \quad (8)$$

$$b \rightarrow \infty. \quad (9)$$

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

$$\Gamma(\mathbf{r}) \rightarrow 1, \quad (10)$$

підставляючи яке в рівність (3), отримуємо

$$s(\mathbf{q}) \rightarrow \delta(\mathbf{q}). \quad (11)$$

Надамо залежності (8) вигляд

$$\mathbf{Q} \rightarrow 0. \quad (12)$$

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

$$\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \mathbf{Q}_3, \dots, 0, \quad (13)$$

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

$$s(\mathbf{q})_1, s(\mathbf{q})_2, s(\mathbf{q})_3, \dots, \delta(\mathbf{q}), \quad (14)$$

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:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = 1, \quad (15)$$

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

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

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:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} s_J(\mathbf{q}) d\mathbf{q} = 1. \quad (18)$$

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 впливає 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  $|\mathbf{q}| \leq |\mathbf{Q}_J|$ . 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  $|\mathbf{q}| \leq |\mathbf{Q}_J|$ , 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  $|\mathbf{q}| \leq |\mathbf{Q}_J|$ , 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

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

де  $H(z)$  – функція Хевісайда.

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

$$h_J = \frac{3}{4\pi} Q_J^{-3}. \quad (20)$$

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

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

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

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

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

$$I_{\text{аном}}(\mathbf{Q}) \sim Q^{-3} \quad (\mathbf{Q} \rightarrow 0). \quad (23)$$

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 розсіювання 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., Аксёнов 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 РАССЕЙНИЯ НЕЙТРОНОВ

Резюме

Статья посвящена рассмотрению асимптотической зависимости интенсивности малоуглового рассеяния нейтронов  $I(\mathbf{Q})$  при  $\mathbf{Q} \rightarrow 0$ . Рассматривается аномальная асимптотика интенсивности рассеяния, когда  $I(\mathbf{Q})$  резко возрастает при  $\mathbf{Q} \rightarrow 0$ . 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

Резюме

An anomalous asymptotic dependence of the small-angle neutron scattering intensity  $I(\mathbf{Q})$ , when  $I(\mathbf{Q})$  increases infinitely as  $\mathbf{Q} \rightarrow 0$ , 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  $I(\mathbf{Q}) \sim Q^{-3}$ .