# **Chapter 4**

# Il neutrone, nella ricerca ed industria

Il neutrone non avendo carica elettrica puo' facilmente penetrare la barrriera coulombiana e quindi interagire direttamente col nucleo di un atomo, scattering nucleare, o con con il momento magnetico dell'atomo, scattering magnetico. I neutroni, come le particelle ionizzanti, trovano largo impiego in moltissimi settori dell'industria, della ricerca e delle attivita' umane. Il neutrone e' caratterizzato per avere

- . Massa:  $m_n = 1.675 \times 10^{-27} \text{ Kg}$
- . Carica = 0; Spin = 1/2
- . Momento magnetico di dipolo:  $\mu_n = 1.913 \mu_N$
- . Magnetone nucleare:  $\mu_N = eh/4\pi m_p = 5.051 \times 10^{-27} JT^{-1}$
- . Energia cinetica =  $m_n v^2/2 = k_B T = (\hbar k)^2/2m_n$ ;  $k = 2\pi/\lambda = m_n v/(\hbar)$

Le lunghezze d'onda e lo spettro dei neutroni di bassa energia, termici, si accordano bene con le distanze atomiche ed allo stesso tempo allo spettro di energie della materia condensata, per cui il neutrone e' una sonda potente per studiare la struttura molecolare, atomica e nucleare della materia.

<sup>1</sup> 

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Ad es. neutroni con E = 0.025 eV hanno lunghezza d'onda di de Broglie  $\lambda = 2\pi/\sqrt{2m_nE} \sim 1.8 \times 10^{-10}$ m ed una velocita'  $v \simeq 2.200$  m/s.



Figure 4.1: Energie neutroni

# 4.1 Generatori di neutroni

La vita media di un neutrone libero, essendo instabile via decadimento  $\beta$ , e' di circa 10.6 min. I neutroni sono prodotti attraverso reazioni nucleari e non potendo essere accelerati, si possono solo **decelerare**, a partire dall' energia iniziale, fino a raggiungere l'energia voluta per mezzo di collisioni con atomi di materiali opportuni. Questo processo di slowing down e' detto moderazione dei neutroni, in questo modo si ottengono neutroni che hanno le energie volute, anche molto basse, che si classificano come:

- Cold E < 0.010 eV

- Thermal  $E \le 0.100 \text{ eV}$
- Epithermal  $E \le 1 \text{ eV}$
- Slow  $E \le 1 \text{ KeV}$
- Fast  $E \le 10 \text{ MeV}$

# 4.1.1 Sorgenti di neutroni

Per applicazioni industriali e ricerca sono tre le sorgenti primarie di neutroni: radioisotopi, acceleratori e reattori nucleari.

Le sorgenti a radioisotopi sono le piu' comuni, sono usate sia nell'industria che nella ricerca. I neutroni sono prodotti quando particelle  $\alpha$  scatterando con isotopi di basso peso atomico, quali berillio, carbonioe ossigeno, innescano una reazione nucleare con emissione di neutroni. La sorgente di neutroni e' costruita mescolando un radioisotopo che decade  $\alpha$ , come il Radio e il Polonio, con il materiale a basso peso atomico, usualmente in forma di miscela di polveri dei due

materiali. La rate della sorgente non e' molto alta, confrontata con la rete da reattori, ma adatta in generale agli specifici scopi industriali e di ricerca. Il flusso di neutroni, su tutto l'angolo solido, varia da  $10^6$  a  $10^8$  neutroni/s. Le combinazioni di materiali e' generalmente AmBe, PuBe o AmLi. Queste sorgenti, sono per lo piu' utilizzate in installazioni fisse, che necessitano di un flusso continuo.

Gli acceleratori sono una grossa fonte di sorgenti di neutroni, sopratutto in forma di neutroni impulsati, e quindi di grande versatilita' per gli impieghi industriali sopratutto. Le reazioni con cui sono prodotti i neutroni sono reazione di spallazione, fotoproduzione e fusione. Gli acceleratori variano in grandezza e dimensioni. Si va dalle grandi installazioni come lo Spallation Neutron Sourge , a Oak Ridge N.L., a sorgenti di fotoneutroni con acceleratori lineari, ad acceleratori di ioni leggeri compatti, costruiti come tubi ermetici, portatili, che usano reazioni di fusione D-D o D-T per produrre i neutroni. Questi Compact neutron Source sono molto diffusi, essi trovano impiego nei piu' diaparati settori, dalla difesa all'archeologia.

I reattori nucleari, a fissione, sono chiaramente la sorgente piu' grande e prolifica di neutroni, tuttavia la loro dimensione, complessita' e costo limitano il loro impiego industriale sopratutto alla produzione di energia elettrica. Molti centri di ricerca hanno un reattore nucleare, dimensionato opportunamente, utilizzato come sorgente continua di neutroni. In un reattore nucleare, ad esempio, i neutroni hanno energia che varia da  $10^{-3}$  eV (1meV) a  $10^7$  eV (10 MeV), che significa un range di 10 ordini di grandezza.

**Sorgente**  $\alpha$ -**Berillio** L'isotopo stabile del Berillio, <sup>9</sup>Be, ha un neutrone poco legato ( energia di legame 1.7 MeV ), se una particella  $\alpha$  da un decadimento radiattivo, (5-6 MeV), scattera un nucleo di <sup>9</sup>Be, siccome la xsect di assorbimento e' grande, viene rilasciato un neutrone con formazione di <sup>12</sup>C

 ${}^{4}\text{He} + {}^{9}\text{Be} \rightarrow {}^{12}\text{C} + n$ 

Il *Q-value* della reazione e' 5.7 MeV. Se si mettono insieme un materiale emettente particelle  $\alpha$  a vita media lunga, come il <sup>226</sup>Ra e il <sup>9</sup>Be, si ottiene una produzione di neutroni a rate costante. Dalla catena di decadimento del <sup>226</sup>Ra e figli, come il <sup>222</sup>Rn, si hanno  $\alpha$  emesse con un'energia di circa 5-8 MeV; in questo modo si ha produzione di neutroni con uno spettro di energia fino a 13 MeV.

I neutroni non sono monoenergetici per diversi motivi: (1) provengono da diversi processi di decadimento  $\alpha$ , (2) il rallentamento dovuto a collisioni con materiale, (3) le varie direzioni di emissione che i neutroni possono assumere dato le  $\alpha$  incidenti casualmente, e (4) la possibilita' che il <sup>12</sup>C sia lasciato in uno stato eccitato. La energia piu' probabile per il neutrone e' ~ 5 MeV e la produzione di neutroni e' di ~ 10<sup>7</sup> neutroni per secondo per ogni Curie, (Ci), di attivita'. Da ricordare che 1 Ci =  $3.7 \times 10^{10}$  decays/s. Un tipico spettro di neutroni e' mostrato in figura 1.2. A causa della elevata emissione di raggi  $\gamma$  del <sup>226</sup>Ra e figli, si usa ultimamente come sorgente il <sup>210</sup>Po(138 d), <sup>238</sup>Pu (86 y) e l'Americio <sup>241</sup>Am (458 y). Queste sorgenti producono ~ 2-3 × 10<sup>6</sup> neutroni per secondo per un'attivita'  $\alpha$  di 1 Ci.



Figure 4.2: Spettro energia dei N da sorgente Ra-Be

Figure 4.3: Energia dei N in reazione  ${}^{3}H(d,n)^{4}He$ 

**Sorgenti fotoneutroniche** In un processo simile a quello delle sorgenti  $(\alpha, n)$ , si puo' usare la reazione  $(\gamma, n)$  per produrre neutroni. Il vantaggio della produzione fotoneutronica e' che il neutrone e' quasi monoenergetico, sopratutto se il fotone e' quasi monoenergetico. Per esempio, il sodio <sup>24</sup>Na emette un  $\gamma$  di 2.76 MeV; l'assorbimento di tale energia da parte del <sup>9</sup>Be, fa si' che si supera l'energia di legame dei neutroni, *last neutron*, per cui si ha l'emissione di un neutrone:

$$\gamma + {}^{9}\text{Be} \rightarrow {}^{8}\text{Be} + n$$

La resa o "yield" e' buona,  $(2 \times 10^6$  neutroni/s per Ci di <sup>24</sup>Na), ma la **vita media** e' breve, (15 h). L'energia del neutrone e' di circa 0.8 MeV. Una sorgente di  $\gamma$  puo' essere l'isotopo a vita media lunga <sup>124</sup>Sb (60 d) che emette un  $\gamma$  energetico che supera proprio la energia di legame neutronica del <sup>9</sup>Be; i neutroni emessi hanno una energia molto minore, circa 24 KeV. Altre reazioni con fotoni prodotti da radiazione  $\gamma$  sono ad es.  $\gamma(1.70 \text{MeV}) + {}^9\text{Be} \rightarrow 2{}^4\text{He} + n$  oppure  $\gamma(2.26 \text{ MeV}) + {}^2\text{H} \rightarrow {}^1\text{H} + n$ 

**Fissione spontanea** Una sorgente naturale di neutroni e' il processo di fissione spontanea di isoptopi quale <sup>252</sup>Cf (2.65 y). I neutroni sono prodotti direttamente nella fissione ad una rate di circa 4 neutroni per fissione. La fissione avviene solo nel 3% dei decadimenti, ( il resto essendo decadimento  $\alpha$ ) e la rate di produzione e' di circa  $2.3 \times 10^{12}$  neutroni/s per grammo di <sup>252</sup>Cf o equivalentemente  $4.3 \times 10^9$  n/s per Ci di <sup>252</sup>Cf. Le energie dei neutroni sono quelle caratteristiche della fissione, hanno una distribuzione continua con una energia media di 1-3 MeV.

**Reazioni Nucleari** Ci sono naturalmente molte reazioni nucleari che producono neutroni. Queste richiedono un acceleratore per produrre un fascio di particelle per iniziare la reazione, per cui non sono molto convenienti come sorgenti di neutroni, come quelle precedenti. Tuttavia scegliendo accuratamente l'energia incidente e l'angolo a cui si osserva il neutrone emesso si puo' ottenere un fascio ragionevolmente monenergetico di energia prefissata. Tra le reazioni che si possono usare sono:

$^{3}\text{H} + d \rightarrow ^{4}\text{He} + n$	Q = +17.6  MeV
${}^{9}\text{Be} + {}^{4}\text{He} \rightarrow {}^{12}\text{C} + n$	Q = +5.7 MeV
$^{7}\text{Li} + p \rightarrow ^{7}\text{Be} + n$	Q = -1.6 MeV
$^{2}\text{H} + \text{d} \rightarrow ^{3}\text{He} + \text{n}$	Q = +3.3  MeV

La figura 1.3 mostra la dipendenza dell'energia del neutrone nella prima reazione in funzione dell'energia incidente e dell'angolo di emissione.

**Sorgenti da reattore** Il flusso neutronico vicino al nucleo centrale di un reattore a fissione nucleare e' abbastanza alto, tipicamente  $10^{14}$  neutroni/cm<sup>2</sup>/s. Lo spettro energetico si estende fino a 5-7 MeV con un picco a 1-2 MeV. Questi neutroni sono generalmente rallentati ad energie termiche all'interno del reattore, ma ci sono anche neutroni veloci presenti nel core, (nocciolo), del reattore. Un piccolo oblo' nella struttura di schermatura del contenitore del reattore permette di estrarre un fascio di neutroni per esperimenti di laboratorio. Gli alti flussi di neutroni da reattore sono utilizzati anche per la produzione di radioisotopi, attraverso cattura neutronica, come pure per l'attivazione neutronica o nucleosintesi.

**Spallazione** Una particolare reazione nucleare e' quella indicata come "spallation", che si ha quando una particella molto energetica, come un protone di alta energia, (1 Gev), va a collidere con un nucleo atomico pesante. In questo caso nel nucleo si genera una violenta reazione e si ha l'emissione di varie specie e numero di particelle leggere e frammenti e si lascia indietro un prodotto della reazione che e' generalmente radioattivo. alcuni neutroni sono "spalled", espulsi dal nucleo; in media per ogni protone sono espulsi circa 20-30 neutroni. I protoni, prima di essere sparati contro il nucleo sono accumulati a formare un bunch, pacchetto, in un anello di accumulazione e quindi sparati in forma di bunch contro una targhetta di alto numero atomico, ad es. mercurio o tungsteno, generando in questo modo impulsi di neutroni. Questi impulsi di neutroni sono poi rallentati in un moderatore e guidati attraverso *beam guides* alle aree sperimentali, vedi FIG. 1.5. Il modello teorico per la reazione di spallazione assume che la reazione avvenga in due tempi: una collisione con i nucleoni con eccitazione del nucleo seguita da un processo di evaporazione in cui il nucleo eccitato intermedio si diseccita mediante evaporazione, espulsione, di particelle come protoni, neutroni, deuteroni e particelle alfa e l'emissione di raggi gamma fino a che l'energia di eccitazione sia stata azzerata.

La reazione di spallazione si puo' descrivere come

$$q + {}^{A_i} Z_i = {}^{A_f} Z_f + n_p p + n_n n + n_d d + n_\alpha \alpha + \dots$$
(4.1)

in cui q e' la particella scatterante sul nucleo<sup> $A_i$ </sup> $Z_i$  e  ${}^{A_f}Z_f$  il nucleo finale accompagnato da protoni, neutroni e altre particelle.



Figure 4.4: Neutron Spallation process

Figure 4.5: Neutron Spallation setup

Il vantaggio dei neutroni impulsati e' che si ha una maggiore intensita' di neutroni, 50-100 volte maggiore, rispetto ai neutroni da reattore. Altro vantaggio sta nel fatto che con neutroni impulsati si puo' utilizzare il time-of-flight per l'analisi. I neutroni, in ciascun impulso, coprono un range di energia e un range di lunghezze d'onda, i neutroni ad energie piu' alte avranno una lunghezza d'onda piu' piccola. Poiche' i neutroni termici si muovono abbastanza lentamente si possono fare misure accurate di tempo su distanze anche brevi. I neutroni di un bunch, avendo energie diverse, possono essere separati anche dopo un cammino di pochi metri. I neutroni veloci raggiungeranno il bersaglio per primi e man mano arriveranno i neutroni piu' lenti, permettendo cosi' di distinguere i neutroni singolarmente, dal loro tempo di volo. Si ha cosi' uno spettro di misure per ogni impulso per ogni bersaglio, Fig. 1.6.

# 4.2 Assorbimento e rallentamento dei neutroni

L'intensita' di un fascio di neutroni, man mano che attraversa del materiale, diminuira' per via delle reazioni nucleari innescate dai neutroni del fascio. Per i neutroni veloci, sono possibili molte reazioni quali (n,p), (n. $\alpha$ ), o (n,2p), mentre per quelli termici o lenti la causa primaria della loro diminuzione e' la cattura, in forma di reazione (n, $\gamma$ ). Spesso le sezioni d'urto per queste reazioni



Figure 4.6: Energie neutroni da spallation

di cattura sono dominate da una o piu' risonanze, dove la sezione d'urto diventa molto grande. Al di fuori della risonanza la sezione d'urto decresce al crescere della velocita' come 1/v; cosi' man mano che i neutroni rallentano, ( slow down ), diventando moderati per processi di urti elastici e inelastici, la probabilita' di assorbimento aumenta. I neutroni con energia iniziale di 1 MeV subiranno molti urti prima che le loro energie si riducano a circa 1 eV, e a questo punto con molta probabilita' avverra' un processo di assorbimento risonante o non risonante. Se  $\sigma_t$  e' la sezione d'urto totale, la diminuzione di intensita' di un fascio che impatti su un materiale di spessore dx e incontri n dx atomi per unita' di area sara' data da  $dI = -I\sigma_t n dx$  e l'intensita' decresce come

$$I = I_0 e^{-\sigma_t nx} \tag{4.2}$$

Essendo  $I_0$  l'intensita' iniziale a x=0. Questa relazione naturalmente si adatta solo a neutroni monoenergetici e non tiene conto dei possibili incrementi dovuti alla creazione di neutroni di energia piu' bassa che hanno sezioni d'urto diverse. Quindi la relazione non puo' essere usata per calcolare la diminuzione del numero totale di neutroni, ma solo per calcolare la variazione di intensita' di quelli con una data energia iniziale.

Si consideri un urto elastico tra un neutrone, (A=1), di energia iniziale E e velocita' v con un atomo della targhetta di massa A inizialmente a riposo. Per la legge di conservazione di energia e momento si ricava facilmente la relazione tra l'energia dopo l'urto E' e quella prima dell'urto E

$$\frac{E'}{E} = \frac{A^2 + 1 + 2A\cos\theta}{(A+1)^2}$$
(4.3)

essendo  $\theta$  l'angolo di scattering nel sistema del Centro di Massa, ma con E' e E misurate nel sistema del Laboratorio. Per  $\theta = 0$  non si ha scattering e quindi E' = E, come deve essere; la massima perdita di energia avviene per collisioni centrali, head on, ( $\theta = 180^{\circ}$ ) per cui

$$\frac{E'(min)}{E} = \frac{(A-1)^2}{(A+1)^2} = \alpha$$
(4.4)

Nel caso che l'atomo sia idrogeno ,(A=1), il neutrone cede tutta la sua energia al protone scatterato.



Figure 4.7: Spettro di neutroni monoenergetici dopo una e piu' collisioni

Per neutroni con energia fino a 10 Mev, lo scattering e' principalmente in onda s e quindi, nel sistema CM, isotropico per cui e' indipendente da  $\theta$ . Dalla equazione 1.3 si vede che c'e' una relazione univoca tra E' e l'angolo  $\theta$  del C.M. per cui

$$p(\theta)d\theta = \frac{2\pi \sin\theta d\theta}{4\pi} = \frac{1}{2}\sin\theta d\theta = -P(E')dE'$$
(4.5)

il segno meno tiene conto che all'aumentare dell'angolo si ha una diminuzione dell'energia del neutrone scatterato. Derivando la eq. 1.3 si ottiene

$$\frac{dE'}{d\theta} = -\frac{2AE\sin\theta}{(A+1)^2} \tag{4.6}$$

da cui si ricava l'espressione della distribuzione dell'energia dopo uno scattering elastico

$$P(E')dE' = \frac{(A+1)^2}{4AE}dE' = \frac{dE'}{(1-\alpha)E}$$
(4.7)

I valori di E'/E sono uniformemente distribuiti tra  $E'(\min) = \alpha E$  ed E. La quantita'  $(1-\alpha)E$  e' il range di tutte le energie dopo una collisione, il valor medio dell'energia dopo la collisione e'  $\overline{E}' = \frac{1}{2}(1+\alpha)E$  e il valor medio dell'energia persa dopo una collisione  $\overline{E}' = 1/2(1-\alpha)E$ . E' importante notare che la perdita media frazionaria per collisione e' indipendente dall'energia, ad esempio dopo la seconda collisione il neutrone perde la stessa frazione di energia persa nella prima collisione e cosi' via per le altre. I neutroni nello slowing down scattereranno frequentemente e quindi gia' dopo il secondo urto il fascio non sara' piu' monocromatico, ma avra' una distribuzione allargata, Figura 1.7. Si puo' approssimare questo effetto considerando ciascun intervallo di larghezza  $\Delta E$  essere una nuova generazione di neutroni approssimativamente monoenergetici, cosi' per ogni generazione si puo' calcolare la distribuzione aspettata in quella successiva, con l'ipotesi che dopo ogni urto ci sia una variazione  $-\Delta E$  di energia ad ogni generazione, ed ottenere la distribuzione della energia. Importante notare che la perdita frazionartia media di energia per collisione e' indipendente dall'energia. Dopo n collisioni l'energia media diventa

$$\overline{E}_n = E \times (\frac{\overline{E}}{E})^n \tag{4.8}$$

Una quantita' adatta a rappresentare la distribuzione dell'energia persa e' il *decremento* logaritmico dell'energia,  $\xi$ , definito come il valor medio di  $\log(E/E')$  dopo ogni singola collisione,

$$\xi = <\log\frac{E}{E'}> \tag{4.9}$$

$$=\frac{\int \log[\frac{(A+1)^2}{A^2+1+2A\cos\theta}]d\Omega}{\int d\Omega}$$
(4.10)

essendo  $d\Omega$  l'angolo solido di scattering.

Nucleo	$\alpha$	ξ	N. urti per termalizzare
$^{1}H$	0	1.000	18
$^{2}H$	0.111	0.725	25
$^{4}He$	0.360	0.425	43
$^{12}C$	0.716	0.158	115
$^{238}U$	0.983	0.0084	2200

Si intende che l'urto e' isotropico nel sistema CM. Integrando si ottiene:

$$\xi = 1 + \frac{(A-1)^2}{2A} \ln \frac{A-1}{A+1} = \frac{\alpha}{1-\alpha} \ln \alpha$$
(4.11)

Dalla 1.11 si vede che il decremento logaritmico dell'energia  $\xi = \ln E - \overline{\ln E'}$  e' indipendente dall'energia iniziale E. Il valor medio di  $\ln E'$  decresce dopo ogni collisione di una quantita'  $\xi$  e dopo *n* collisioni quindi sara'

$$\overline{lnE_n'} = \ln E - n\xi \tag{4.12}$$

In termini del numero di massa A la  $\xi$  si scrive come

$$\xi = 1 + \frac{(A-1)^2}{2A} \ln(\frac{A-1}{A+1})$$
(4.13)

che espansa in potenze di 1/A diventa semplicemente

$$\xi = \frac{2}{A} - \frac{4}{3A^2} \tag{4.14}$$



Figure 4.8: Distribuzione maxwelliana dell'energia

che e' piu' accurata dell' 1% per A>6.

Dall'equazione 1.12 si puo' ricavare il numero n di collisioni necessarie per rallentare i neutroni dalla loro energia iniziale E alla loro energia media E', infatti poiche'  $\ln E'_n = \overline{\ln E_n}$  si ottiene

$$n = \frac{1}{\xi} \log \frac{E}{E'} \tag{4.15}$$

La tabella mostra i valori di  $\xi$  per alcuni moderatori; ad esempio se si vuole ridurrel'energia media di un neutrone emesso in un processo di fissione, ( $E \sim 2 \text{ MeV}$ ), fino ad un valore tipico del moto termico, ( $E' \sim 0.025 \text{ eV}$ ), usando <sup>4</sup>He sono necessarie 43 collisioni in media, mentre con l'<sup>238</sup>U sono necessarie 2200 collisioni perche'  $\xi$  e' una piccola frazione.

I valori medi calcolati precedentemente sono stati ricavati assumendo che l'atomo scatterato fosse a riposo; questa e' una buona approssimazione per neutroni di qualche MeV, ma non lo e' piu' man mano che l'energia si avvicina a quella termica e questa diventa comparabile con il moto termico degli atomi del moderatore. A questo punto lo scattering e' piu' correttamente analizzabile con la meccanica statistica e si puo' semplicemente assumere che dopo un certo numero di urti i neutroni raggiungeranno l'equilibrio termico con il moderatore a temperatura T; i neutroni avranno quindi una distribuzione di velocita' descritta dalla distribuzione di Maxwell

$$f(v)dv = 4\pi n \left(\frac{m}{4\pi kT}\right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2kT} dv$$
(4.16)

dove f(v)dv indica la frazione di neutroni con velocita' tra  $v \in v + dv$ ;  $m \in a$  la massa del neutrone e  $n \in a$  il numero di neutroni per unita' di volume. In termini di energia l'equazione diventa:

$$f(E)dE = \frac{2\pi n}{(\pi kT)^{3/2}} E^{1/2} e^{-E/kT} dE$$
(4.17)

che ha la forma come in Fig. 1.8 che e' la forma cui tende la distribuzione della Fig. 1.7 che mostra come la termalizzazione si manifesti chiaramente gia' dopo pochi urti.

# 4.3 Rivelatori per neutroni

I neutroni non producono ionizzazione diretta per cui la loro rivelazione e' basata sui prodotti ionizzanti delle reazioni nucleari indotte, come (n,p),(n, $\alpha$ ), (n, $\gamma$ ) o (n, fissione) oppure dallo



Figure 4.9: Setup tipico di un rivelatore di neutroni a gas

scattering elastico nucleare su nuclei leggeri .

Rivelatori che impiegano il meccanismo del rinculo o della reazione possono usare per la rivelazione solidi ( semiconduttori), liquidi ( scintillatori) o gas. Sebbene la scelta delle reazioni utilizzabili sia limitata, i mezzi per la rivelazione sono abbastanza vari: contatori proporzionali a gas, scintillatori, camere a fissione, camere attivate con B-10. Va sottolineato che l'informazione sull'energia che si ottiene con i sistemi di rivelazione neutronici elencati e' molto povera, perche' la energia del neutrone non e' quasi mai totalmente depositata nel rivelatore, nemmeno con la tecnica del recoil, in quanto il contatore misura l'energia del primo scattering. Quindi in generale i rivelatori di neutroni danno una informazione sul numero di neutroni rivelati e non sulla loro energia; e' possibile ricavare informazioni sul range dal tipo di rivelatore e dal materiale circostante, mentre per l'energia c'e' bisogno di un sistema di rivelazione piu' complicato. I rivelatori, a gas, sono stati i primi ad essere usati sia per la rivelazione di neutroni lenti, via reazione nucleare, sia neutroni veloci col metodo del rinculo. Un tipocho schema di rivelatore a gas e' il seguente, Figura 1.9

La quasi totalita' dei rivelatori di neutroni e' sensibile in una certa misura anche ai raggi  $\gamma$  e quindi e' importante la *gamma-ray sensitivity* del rivelatore di neutroni.

Per neutroni lenti o termici, si usano rivelatori basati sulle reazioni (n,p) o (n, $\alpha$ ) che forniscono un mezzo diretto per osservare i neutroni dal segnale lasciato dal protone o  $\alpha$  risultanti dalle reazione. L'isotopo <sup>10</sup>B viene comunemente usato, o in una camera a ionizzazione riempita di gas BF<sub>3</sub> o in un contatore proporzionale fatto di boro metallico o composto di boro. La reazione e'

(Da ricordare che il boro nativo consiste di circa il 20% dell'isotopo <sup>10</sup>B, cosi in generale si preferisce arricchire il materiale in <sup>10</sup>B di modo da aumentare l'efficienza del rivelatore).



Figure 4.10: Dipendenza da 1/v delle sezioni d'urto neutroniche

Altra reazione usata per la rivelazione dei neutroni e' la

$$^{3}\text{He} + n \rightarrow ^{3}\text{H} + p + 0.76 \text{ MeV}$$

La reazione

$${}^{6}\text{Li} + n \rightarrow ({}^{7}\text{Li}) \rightarrow {}^{3}\text{He} + {}^{4}\text{He} + 4.8 \text{ MeV}$$

Questa reazione e' l'unica reazione neutrone nucleo senza generazione di un fotone  $\gamma$  e, poiche' la  $\alpha$  puo' essere schermata piu' facilmente che il  $\gamma$  questa reazione e' usata per schermare dai neutroni quando non si puo' utilizzare una piu' massiccia schermatura dai gamma. La rivelazione della  $\alpha$  e' fatta con uno scintillatore nel quale la  $\alpha$  produce un flash di luce rivelata da un PM.

Per i neutroni termici la sezione d'urto vale  $\sim 3840$  b, molto grande, e segue la legge 1/v fino a circa 100KeV, cosi' la dipendenza della sezione d'urto dalla energia incidente e' regolare ( non ci sono risonanze) e predicibile con buona approssimazione.Figura 1.10

#### 4.3.1 Rivelatori a gas

#### Rivelatori a gas per neutroni termici

Sfruttano le reazioni nucleari (n, p) e  $(n, \alpha)$ . Il gas usato e' <sup>3</sup>He o BF<sub>3</sub>, quest'ultimo arricchito di <sup>10</sup>B. Queste reazioni sono esotermiche e rilascano particelle cariche energetiche nel gas, che ionizzano ed attivano un processo di moltiplicazione. la carica prodotta viene raccolta dal contatore, che opera in questo modo in modo proporzionale.

#### Rivelatori per neutroni veloci

Rivelatori di neutroni veloci con <sup>4</sup>He e  $CH_4$  sfruttano il rinculo del nucleo leggero per la ionizzazione del gas. La reazione e' uno scattering elastico, se il nucleo leggero e' un nucleo di H, cioe' un protone, la massima possibile energia trasferita al nucleo sara' la energia cinetica totale E del neutrone, per nucley piu' pesanti l'energia trasferita e' sempre minore. Per un nucleo di peso atomico A sara'

$$E_{max} = \frac{4AE}{(A+1)^2}$$
(4.18)

Come si vede il nucleo targetta deve avere peso atomico basso per ricevere un ammontare significativo di energia dal neutrone. I due gas, Elio e metano sono ricchi di protoni e hanno basso peso atomico. Bisogna tener conto pero' che le xsect di scattering elastico sono di 2 ordini di grandezza inferiori a quella di cattura per i neutroni termici, questo comporta che l'efficienza intriseca di rivelazione di neutroni fast di circa 1% per singolo contatore.

#### **Camere a fissione**

Le camere a fissione sono una variante dei contatori a gas, esse sono predisposte per rivelare neutroni che inducono fissioni nel materiale che ricopre la superficie intterna della camera; esternamente sono simili alle altre o piu' piccole. Il materiale fissile e' normalmente <sup>235</sup>U. Uno strato molto sottile, circa da 0.02 a 2 mg/cm2, e' depositato sulla superficie interna. I neutroni interagendo con il materiale fissile producono la fissione del <sup>235</sup>U e i due frammenti sono emessi in direzione opposta. La ionizzazione causata dai frammenti che entrano nel gas e' sentita dal rivelatore. I due frammenti hanno un range molto piccolo, per una Energia cinetica minore di 100 MeV, il range e' inferiore a 10  $\mu$ m, per questo motivo e' necessario che lo strato di Uranio sia molto sottile, perche' i frammenti possano raggiungere il ga. L'efficienza e' relativamente bassa, tra l'0.5-1.0 %. Un vantaggio di questo tipo di camera e' che hanno una bassa sensibilita' ai raggi gamma, dovuto al fatto che l'energia dei frammenti e'molto alta e quindi si puo' mettere una soglia alta, inoltre e' l'unico rivelatore che puo' essere impiegato in un ambiente di scorie radioattive da reattore, dove l'intensita' e' molto alta e quindi compensa la bassa efficienza.

Турс	LD.	Mig <sup>a</sup>	Light Output (% of anthracene)	Decay Const (ns)	Wavelength of Max. Emission (nm)	H/C Atomic Ratio	Comments
Plastic	NEI02A	-1	65	2.4	423	1.104	general use
	NE104	1	68	1.9	406	1.100	fast timing
	NEIIIA	1.2	55	. 1.6	370	1.103	ultrafast timing
	Pilot B	1	68	1.8	408	1.100	general use
	Pilot U	1	67	1.4	391	1.100	ultrafast timing
Liquid	NE211	1	78	2.6	425	1.248	general use
	NE213	1	78	3.7	425	1.213	fast n (P.S.D)
	· BC501	2	78	3.7	425	1.213	fast n (P.S.D)
	NE228	1	45		385	2.11	high H/C ratio
	NE311	-1	65	3.8	425	1.701	boron-loaded
	NE323	1	60	3.8	425	1.377	gadolinium-loade

Table 13-4. Some repr	esentative plastic and	liquid scintillators	for neutron detection
sever as it boundarys	contrast of pression states	and many services in the local of the	TOL DOUD ON DEBECH

#### **Rivelatori**<sup>10</sup>**B-Lined**

Differentemente dai precedenti tipo camera a fissione, questi rivelatori hanno la superficie interna del rivelatore rivestita di un sottile strato di Boro,( circa 0.2 mg/cm2) con per attivare una reazione nucleare (n, $\alpha$ ) con i neutroni. Il range delle alpha e' di circa 1mg/cm2 in Boro, per questo motivo lo strato deve essere sottile. L'efficienza e' circa 10% volte minore di quella dei contatori a gas con Elio e metano, ma hanno una alta INsensibilta' per i gamma.

# 4.3.2 Scintillatori liquidi e plastici

Rivelatori di scintillatori, plastici o liquidi, sono usati principalmente per i neutroni fast, in quanto la loro risposta e' veloce ( ordine del nanosecondo) e possono essere usati in coincidenza per discriminare eventi o misure di ToF.// Lo svantaggio degli scintillatori organici e', purtroppo, la loro alta sensibilita' ai raggi *gamma* e tenuto conto che l'altezza di impulso a parita' di energia e' quasi indistinguibile, questo significa che l'elettronica deve distinguere sul pulse-shape del segnale per separare neutroni da gamma. Un buon materiale scintillatore per la rivelazione di neutroni ha una alta efficienza di conversione dell'energia cinetica del protone di rinculo in radiazione di fluorescenza, buona trasparenza alla propria radiazione ed un buon accordo tra lo spettro della luce di fluorescenza con la risposta del fotomoltiplicatore associato.

Sebbene il meccanismo per cui il neutrone trasferisce la sua energia cinetica ai protoni e' il medesimo nei contatori a scintillazione ed in quelli a gas, la differenza risiede nel processo di rivelazione che e' diverso perche diverse sono le densita' del mezzo. In pratica si puo' calcolare per i contatori a gas una densita' di 0.001g/cm3 mentre quelli a scintiilazione e' di circa 1g/cm3,

questo significa una piu' alta probabilita' di interazione per unita' di range ed inoltre poiche' il range negli scintillatori e' minore una maggiore raccolta di carica e quindi una migliore determinazione dell'energia.

#### 4.3.3 Misura di flusso neutronico

C'e' un altro vantaggio nella dipendenza 1/v della sezione d'urto; si supponga di osservare un fascio collimato o un flusso isotropico ( ad es. vicino al core di un reattore) che abbia una distribuzione delle velocita' di n(v) dv neutroni per unita' di volume con velocita' compresa tra v e v+dv. Il flusso che passa attraverso il rivelatore sara' n(v) v dv e se il rivelatore contiene N nuclei di boro, ciascuno con una sezione d'urto  $\sigma$ , la probabilita' per secondo di avere un'interazione ( o la rate di conteggio se si e' in grado di rivelare e contare ogni interazione ) e' quindi

$$dR = N\sigma n(v)vdv \tag{4.19}$$

per neutroni di velocita' compresa tra v e v+dv. Per neutroni di tutte le velocita', il counting rate totale sara'

$$R = \int N\sigma n(v)vdv = NC \int n(v)dv$$
(4.20)

dove C indica la costante che tiene conto della dipendenza di  $\sigma \propto 1/v$ , per cui C  $\propto \sigma v$ ; l'integrale fornisce il numero totale n di neutroni per unita' di volume, e la rate di conteggi sara' quindi

$$R = NCn \tag{4.21}$$

La semplice relazione mostra come R e' **direttamente proporzionale alla densita' di neutroni** per *ogni distribuzione di velocita'*, finche' si puo' trascurare il contributo al flusso di neutroni fuori dalla regione 1/v della sezione d'urto.

Il Q - value della reazione che porta allo stato eccitato del <sup>7</sup>Li vale 2.31 MeV; se il neutrone incidente ha un'energia cinetica piu' piccola di quel valore, allora la conservazione del momento richiede che che ci sia una ripartizione di energia tra il <sup>7</sup>Li e la particella  $\alpha$  cosicche' la energia cinetica dell' $\alpha$  sara' di 1.47 MeV e praticamente questa e' l'energia assunta dalla  $\alpha$  per tutto il range di energie del neutrone tra eV - KeV. Il <sup>7</sup>Li, se contemporaneamente sara' rivelato, lascera' nel contatore la sua energia, T=0.84 MeV, per cui il neutrone lascera' la sua segnatura come una energia totale misurata del contatore di 2.31 MeV. Va rilevato che i contatori proporzionali non sono adatti a misurare energie cosi' basse con precisione di eV o KeV. Altri rivelatori similari usano <sup>6</sup>Li (n, $\alpha$ ), con Q=4.70 MeV e  $\sigma$  = 940 b per neutroni termici, oppure <sup>3</sup>He (n,p) con Q=0.765 MeV e  $\sigma$  = 5330 b. Nella figura 1.10 e' mostrato il confronto fra le sezioni d'urto dei neutroni per le citate reazioni.

Altro modo, per misurare l'intensita' di un fascio di neutroni, e' di esporlo ad un materiale che diventa radiattivo per cattura neutronica e di cui si conosce bene la szione d'urto per cattura di neutroni di una determinata energia. Se si toglie il materiale dal flusso neutronico e si misura la radioattivita del materiale, ad es. con un rivelatore di  $\gamma$ , si puo' misurare il flusso incidente a cui e' stato sottoposto il materiale.



Figure 4.11: Selettore di velocita' di neutroni

# 4.3.4 Misura della velocita'

Per misure la velocita' dei neutroni ci sono diverse tecniche. Tra queste una tecnica, usata fin dall'inizio, fa uso di un dispositivo meccanico, un selettore di velocita', realizzato con materiale che assorbe molto i neutroni termici. Regolando la velocita' del selettore si riesce a determinare la velocita' dei neutroni per quelli che emergono dal selettore, Figura 1.11.

#### Tempo di volo

Una tecnica molto usata e' una tecnica che usa il tempo di volo, time-of-flight. Va ricordato che i neutroni termici hanno una velocita' di v = 2200 m/s, cosi' il tempo da misurare su alcuni metri e' dell'ordine di  $10^{-3}$  s facilmente misurabile. Per energie maggiori si fara' ricorso a cammini di volo piu' lunghi, anche di 100 m.

# 4.3.5 Misura di energia

Misure di energia molto precise **nella regione termica** si ottengono utilizzando la diffrazione con cristalli. I neutroni termici hanno una lunghezza d'onda di de Broglie di circa 0.1 nm, circa la



Figure 4.12: Spettro monoenergetico di neutroni da 14 MeV in scintillatore organico

stessa della spaziatura tra gli atomi del lattice cristallino. Se un fascio di neutroni termici incide su un cristallo, si produrranno dei massimi di interferenza che che capiteranno ad angoli determinati dalla legge di Bragg

$$n\lambda = 2dsin\theta \tag{4.22}$$

essendo d la spaziatura del lattice cristallino e n l'ordine dei massimi di interferenza e  $\theta$  l'angolo di incidenza e riflessione che il fascio neutronico fa con la superfice del cristallo. Questa tecnica, che e' usata estesamente per studiare le proprieta' cristalline o le distanze interatomiche dei materiali, sara' discussa estesamente in un prossimo capitolo.

Per misure di energia di neutroni veloci si usa solitamente il metodo del *recoil* che segue lo scattering elastico tra il neutrone ed una targhetta leggera (H, <sup>2</sup>H,<sup>3</sup>He,<sup>4</sup>He, ···). Discutendo il rallentamento dei neutroni si era visto che i neutroni scatterati avevano un range continuo di energia compreso tra E'=E fino al valore minimo possible. Il nucleo colpito ha corrispondentemente una energia di rinculo

$$E_R = E - E' \tag{4.23}$$

che varia da un minimo che e' zero fino ad un massimo

$$(E_R)_{max} = E - (E')_{min} = E \frac{4A}{(A+1)^2}$$
(4.24)

Per l'idrogeno,  $(E_R)_{max} = E$ , mentre per <sup>3</sup>He,  $(E_R)_{max} = 0.75E$ . La risposta di un rivelatore ideale del protone *recoil*, per un fascio di neutroni mononergetici, dovrebbe essere uno spettro uniforme lungo tutto il range, ma viene modificato nella parte bassa dalla non linearita' dello scintillatore e nella parte alta dello spettro dalla risoluzione.

Il protone di rinculo e' normalmente osservato con con materiale scintillante che e' ricco di idrogeno, lo scintillatore puo' essere plastico o liquido. Lo scintillatore serve sia come targhetta

di protoni per i neutroni che come rivelatore del protone di rinculo. Tenendo conto della risoluzione in energia dello scintillatore e l'accettanza geometrica, lo spettro di energia osservato per neutroni monoenergetici ha una distribuzione di tipo continua come quella della Figura 1.12. Se invece ci sono diverse componenti di velocita' la separazione degli spettri di rinculo diventa piuttosto difficile. Da ricordare che l'efficienza dei rivelatori a scintillazione per i protoni di rinculo per neutroni veloci, regione del MeV, e' dell'ordine del 50 %.

**Misura dello spettro energetico di neutroni** L'analisi passiva dei neutroni e' basata principalmente sul conteggio trascurandone lo spettro, ma quando e' necessario misurare anche lo spettro energetico allora la tecnica deve esere piu' sofisticata. Lo spettrometro per neutroni si basa su diverse tecniche associate, quali ad es. *proton recoil* e misure di ToF e debbono presentare una buona capacita' di discriminare tra raggi gamma e neutroni ed una buona efficienza di rivelazione quasi indipendente dall'energia.

# 4.4 Spettroscopia neutronica

Le proprieta' ondulatorie del neutrone termico lo rendono, insieme ai raggi X, uno strumento fondamentale per studiare la struttura della materia, con differenze sostanziali. I raggi X sono scatterati dagli elettroni delle shell atomiche, questo significa che la probabilita' di scattering e' direttamente proporzionale al numero atomico Z, e quindi atomi con Z piccolo sono quasi "invisibili", ed inoltre a basso momento trasferito ci sono interazioni della radiazione con i momenti di dipolo che sono importanti.

Al contrario i neutroni che interagiscono solo via interazioni nucleari forti e con i momenti magnetici , la probabilita' di scattering e' una quantita' caratteristica di ogni isotopo. Riguardo alle proprieta' ondulatorie i neutroni ed i fotoni mostrano le stesse caratteristiche:

- . Entrambi possono essere polarizzati, con possibile rotazione del piano di polarizazione
- . Entrambi esibiscono birifrangenza
- . Per entrambi esiste un indice di rifrazione

Per la radiazione elettromangnetica l'indice di rifrazione relativo al vuoto e' maggiore dell'unita' e questo permette alla luce di avere rifrazione interna totale, i neutroni, invece, hanno indice di rifrazione minore di uno e quindi non si ha rifrazione totale. L'indice di riflessione ha la seguente espressione ( Squires, 1978):

$$n_N = 1 - \frac{1}{2\pi} \rho \lambda^2 \bar{b}_{coh}.$$
(4.25)

dove  $\rho$  e' il numero di nuclei scatteranti per unita' di volume,  $\lambda$  la lunghezza d'onda del neutrone incidente e  $\bar{b}_{coh}$  e' la lunghezza media di scattering coerente per il dato nucleo. L'indice di rifrazione non dipende dalla struttura del cristallo, ne' esso modifica la fase dell'onda incidente (



Figure 4.13: Profondita' di penetrazione di un fascio di elettroni, raggi X e Neutroni

scattering coerente). Questo perche' il concetto di indice di rifrazione riferisce a scattering in avanti a piccoli angoli, che significa piccolo momento trasferito. La proprieta' dell'indice di rifrazione di essere negativo e' sfruttata nella costruzione di guide di neutroni, come le guide d'onda, realizzabili per il fatto che i neutroni hanno rifrazione "esterna" totale. Le guide sono tubi a vuoto con le pareti interne rivestite di un opportuno materiale ( usualmente nikel). L'interazione neutrone-nucleo risulta principalmente in due tipi di eventi:

- . cattura neutronica o
- . scattering neutronico

Il primo tipo e' alla base della rivelazione dei neutroni, e quindi nella costruzione dei rivelatori, perche' il nucleo composto ed eccitato risultante dalla cattura puo' diseccitarsi attraverso l'emissione di una particella carica o di un raggio  $\gamma$  che sono facilmente rivelabili. Nel secondo tipo di eventi , lo scattering, il neutrone scambia sia energia che momento con il nucleo. Nello studio della materia condensata, si usano neutroni termici che hanno energie cinetiche dello stesso ordine delle energie del moto termico degli atomi.

In un tipico esperimento di scattering da neutroni si illumina il campione con un fascio di neutroni e si misura la distribuzione spaziale di neutroni scatterati o la variazione di energia o la variazione di altre caratteristiche come ad es. l'orientamento dello spin.



Figure 4.14: Fascio di neutroni incidente su singolo centro di scattering

Bisogna notare che ogni distribuzione spaziale dei neutroni scatterati dipende unicamente dalle proprieta' della struttura atomica del campione e dal moto degli atomi nella struttura. Lo scattering dei neutroni termici, in onda s, e' isotropico nello spazio, Fig 1.14. E' stato Van Hove (1954) a ricavare una espressione generale per l'intensita'  $I(\vec{Q}, \epsilon)$ , ( essendo  $\vec{Q}$  il momento trasferito e  $\epsilon$  l'energia trasferita) dei neutroni scatterati da qualsiasi insieme di nuclei. Il suo risultato fa uso dell'osservazione di Fermi che l'interazione fra neutrone e nucleo puo' essere sostituita da un potenziale effettivo molto piu' debole. Questo *pseudo*-potenziale produce lo stesso scattering come quello che genera l'interazione attuale, ma e' abbastanza debole da essere usato in un'espansione perturbativa alla Max Born. L'espansione di Born dice che la probabilita' di un'onda piana incidente di vettore d'onda

$$|\vec{\mathbf{k}}| = 2\pi m v/h$$

scatterata da un potenziale debole V( $\vec{r}$ ), di diventare un'onda uscente piana con un vettore d'onda  $\vec{k'}$  e' proporzionale a

$$\left|\int e^{i\vec{\mathbf{k}}\cdot\vec{\mathbf{r}}}V(\vec{\mathbf{r}})e^{-i\vec{\mathbf{k}}'\cdot\vec{\mathbf{r}}}d^{3}\vec{r}\right|^{2} = \left|\int e^{i\vec{\mathbf{Q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}}V(\vec{\mathbf{r}})d^{3}\vec{r}\right|^{2}$$
(4.26)

dove l'integrazione avviene su tutto il volume di scattering. Bisogna ricordare che se anche lo scattering sul singolo nucleo e' sferico, la  $V(\vec{r})$  rappresenta il potenziale dovuto all'intero campione e il risultato del contributo di tutti gli atomi e' un'onda piana.

Il potenziale da usare e' lo *pseudo*-potenziale di Fermi che, per un singolo nucleo, e' dato da  $b_j \delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}')$ , dove  $b_j$  e' la lunghezza di scattering del nucleo *j* posizionato al punto  $\vec{\mathbf{r}}_j$  e  $\delta$  e' la delta di Dirac. Cosi' per un insieme di nuclei, come un cristallo, il potenziale V( $\vec{\mathbf{r}}$ ) e' la somma delle singole interazioni neutrone-nuclei:

$$V(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{2\pi\hbar}{m} \Sigma_j b_j \delta(\vec{\mathbf{r}} - \vec{\mathbf{r}}_j), \qquad (4.27)$$

dove la somma e fatta su tutti i siti nucleari del lattice cristallino.

Usando le due equazioni, Van Hove ha mostrato che il numero di neutroni scatterati per neutrone incidente puo' essere scritta come

$$I(\vec{\mathbf{Q}},\epsilon) = \frac{1}{h} \frac{k'}{k} \Sigma_{i,j} b_i b_j \int_{-\infty}^{\infty} \langle e^{i\vec{\mathbf{Q}}\cdot\mathbf{r}_j(0)} e^{i\vec{\mathbf{Q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}_i(t)} \rangle \langle e^{-i\epsilon t} dt.$$
(4.28)

Notare che la somma e' fatta su *coppie* di nuclei *i* e *j* e che il nucleo *i* e' nella posizione  $\vec{\mathbf{r}}_i(t)$  al tempo *t*, mentre il nucleo *j* e' nella posizione  $\vec{\mathbf{r}}_j(0)$  al tempo t = 0. La media e' fatta su tutti i possibili tempi iniziali di osservazione del sistema, che e' equivalente ad una media su tutti i possibili stati termodinamici del sistema scatterato.

I vettori di posizione  $\vec{\mathbf{r}}_j$ , in Eq. 1.28 sono operatori quanto-meccanici, ma si puo' con buona approssimazione trattarli in modo classico perche' cosi' appare piu' chiaro il significato fisico dell'equazione. La somma sopra i siti atomici nell'Eq. 1.28 puo' allora essere riscritta come

$$\Sigma_{i,j}b_ib_j < e^{-i\vec{\mathbf{Q}}\cdot[\vec{\mathbf{r}}_i(0)-\vec{\mathbf{r}}_j(t)]} >= \Sigma_{i,j}b_ib_j\int \delta < (\vec{\mathbf{r}}-[\mathbf{r}_i(0)-\vec{\mathbf{r}}_j(t)] > e^{-i\vec{\mathbf{Q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}}d^3\vec{r},$$
(4.29)

dove compare di nuovo la delta di Dirac, ma stavolta in termini di  $\vec{\mathbf{r}}$  ed un vettore differenza tra le posizioni del nucleo *i* e quella del nucleo *j* al tempo t = 0.

Si supponga, per il momento, che le lunghezze di scattering di tutti gli atomi nel campione siano uguali, cioe'  $b_i = b_j = b$ . In questo caso le lunghezze di scattering nell'Eq. 1.29 possono essere rimosse dalla somma e quindi l'espressione alla destra diventa

$$Nb^2 \int_{\infty}^{infty} G(\vec{\mathbf{r}}, t) e^{-i\vec{\mathbf{Q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}} d^3\vec{r}$$
(4.30)

dove

$$G(\vec{\mathbf{r}},t) = \frac{1}{N} \Sigma_{i,j} \vec{\delta(\mathbf{r}} - [\vec{\mathbf{r}}_i(0) - \vec{\mathbf{r}}_j(t)])$$
(4.31)

dove N e' il numero di atomi nel campione. Il termine  $\delta$  in  $G(\vec{\mathbf{r}}, t)$  e' zero eccetto quando la posizione del nucleo *i* al tempo zero e la posizione del nucleo *j* al tempo *t* sono separate di un vettore  $\vec{\mathbf{r}}$ . Poiche' le funzioni  $\delta$  sono sommate su tutte le coppie di nuclei per ottenere  $G(\vec{\mathbf{r}}, t)$ , questa funzione e' uguale alla probabilita' di un nucleo di essere all'origine di un sistema di coordinate al tempo zero e du nucleo di essere alla posizione $\vec{\mathbf{r}}$  al tempo *t*.  $G(\vec{\mathbf{r}}, t)$  e' generalmente indicata come la *funzione di correlazione di coppia dipendente dal tempo* poiche' descrive come la correlazione tra due particelle evolve col tempo.

Introducendo la  $G(\vec{\mathbf{r}}, t)$  la legge dello scattering per neutroni di Van Hove (Eq. 1.28) puo' ora essere scritta come

$$I(\vec{\mathbf{Q}},\epsilon) = \frac{Nb^2}{h} \frac{k'}{k} \int_{\infty}^{\infty} G(\vec{\mathbf{r}},t) e^{-i\vec{\mathbf{Q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}} e^{-i\epsilon t} d^3 \vec{r} dt$$
(4.32)

da cui si vede come la  $I(\vec{\mathbf{Q}}, \epsilon)$  sia proporzionale alla trasformata spazio-tempo di Fourier della funzione di correlazione di coppia time-dependent e questo risultato generale fornisce una descrizione unificata di tutti gli esperimenti di scattering neutronico.

Il fatto che  $I(\mathbf{Q}, \epsilon)$  sia la trasformata di Fourier di una funzione che da' la probabilita' di trovare due nuclei, e quindi due atomi, ad una certa distanza e' indice della capacita' di analisi predittiva

dello scattering neutronico. Infatti invertendo la Eq. 1.32, si ricava la  $G(\mathbf{r}, t)$ , e quindi si possono ottenere delle informazioni circa struttura e dinamica della materia ed il modo in cui essa evolve nel tempo.

Scattering coerente ed incoerente Anche in un campione costituito di un singolo tipo di isotopo, le lunghezze di scattering che appaiono in Eq. 1.28 non saranno uguali. Questo perche' la lunghezza di scattering di un nucleo dipende dal suo stato di spin e la maggior parte degli isotopi hanno parecchi stati di spin. Generalmente, tuttavia, non vi e' correlazione tra lo spin di un nucleo e la sua posizione nel campione di materia. Per questo motivo, le lunghezze di scattering che appaiono in  $I(\vec{\mathbf{Q}}, \epsilon)$  possono essere mediate su tutti gli stati di spin nucleari senza per questo incidere sulla media termodinamica.

Entrano pero' in gioco le medie sugli spin: il valore medio di b, < b > e il valor medio di  $b^2$ , per cui la sommatoria nell'Eq.(1.28) si puo' separare in due termini

$$\sum_{i,j} \langle b_i b_j \rangle A_{i,j} = \sum_{i,j} \langle (b) \rangle^2 A_{i,j} + \sum_i (\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2) A_{i,j}$$
(4.33)

Il termine  $A_{I,j}$  rappresenta l'integrale dell'Eq. 1.28, mentre il primo termine e' una somma su tutte le coppie di nuclei nel campione; da notare che  $i \in j$  indicano solo occasionalmente lo stesso nucleo, perche' i nuclei nel campione sono moltissimi. Il primo termine nell'Eq. 1.33 rappresenta il cosidetto **scattering coerente** in cui le onde *neutroniche* scatterate da **differenti** nuclei interferiscono tra di loro. Questo tipo di scattering dipende dalle distanze tra atomi ( integrale  $A_{i,j}$ ) e dal vettore di  $\vec{Q}$ , e quindi fornisce indicazioni circa la struttura di un materiale. m Lo *scattering elastico coerente* fornisce informazioni sulla **struttura di equilibrio** lo **scattering elastico incoerente** (con  $\epsilon \neq 0$ ) fornisce informazioni circa il moto collettivo degli atomi, quali quelli che producono onde vibrazionali o **fononi** in un lattice cristallino.

Il secondo termine nell'Eq. 1.33 rappresenta il contributo dello **scattering incoerente** in cui non c'e' interferenza alcuna tra le onde scatterate dai differenti nuclei, ma le intensita' scatterate da ciascun nucleo si sommano indipendentemente. Lo scattering inelastico puo' a sua volta essere **coerente** o **incoerente**. Lo **scattering incoerente elastico** e' lo stesso in tutte le direzioni e quindi appare come un *background* indesiderato negli esperimenti di scattering neutronico, mentre lo **scattering incoerente inelastico** risulta dall'interazione di un neutrone con lo stesso nucleo in differenti posizioni e tempi, quindi fornisce informazioni sulla diffusione atomica.

In questo modo si possono definire le lunghezze di scattering coerente e incoerente come

$$b_{coh} = \bar{b}$$
  $e$   $b_{inc} = \sqrt{(\bar{b}^2 - (\bar{b})^2)}$  (4.34)

I valori delle lunghezze di scattering coerente ed incoerente per elementi differenti ed isotopi non variano in modo sistematico attraverso la tabella periodica. Per esempio, l'idrogeno ha una grande lunghezza di scattering incoerente (28.18 fm) mentre quella coerente e' piccola (-3.74 fm. Il deuterio, al contrario, ha una piccola lunghezza di scattering incoerente (3.99 fm) ed una relativamente grande lunghezza di scattering coerente (6.67 fm). La differenza tra le lunghezze di scattering coerente tra idrogeno e deuterio e' alla base di una tecnica chiamata *contrast matching* per studiare sistemi biologici o polimerici.

Ricapitolando, l'espressione per la legge dello scattering coerente e' la somma su entrambi i e j e cosi' mostra la correlazione tra la posizione di un atomo i al tempo zero e la posizione di un secondo atomo j al tempo t. Sebbene i e j siano occasionalmente lo stesso atomo, in generale essi sono differenti dato il grande numero N di nuclei nel campione. Si puo' dire quindi che lo scattering coerente essenzialmente descrive l'interferenza tra onde prodotte dallo scattering di un singolo neutrone da tutti i nuclei del campione. L'intensita' per questo tipo di scattering varia fortemente con l'angolo di scattering.

Lo scattering incoerente, d'altra parte, mette in evidenza le correlazioni tra la posizione di un atomo j al tempo zero e la posizione dello **stesso** atomo al tempo t. In questo modo, nello scattering incoerente, le onde scatterate da nuclei differenti non interferiscono una con l'altra, essendo sfasate. Per questa ragione, lo scattering incoerente e' un buon metodo per studiare processi in cui gli atomi diffondono, esempio la dinamica dei fluidi. In molte situazioni, l'intensita dello scattering incoerente e' isotropico, cioe' e' la stessa per ogni angolo di scattering. Questo effetto spesso fa si' che lo scattering incoerente possa essere trascurato quando si osserva scattering coerente poiche' gli effetti incoerenti contribuiscono all'intensita' solo con un fondo uniforme.

**Diffrazione neutronica** La **diffrazione** e' il fenomeno che si osserva principalmente con lo scattering coerente. Come l'onda del neutrone incidente arriva su ciascun atomo, il suo nucleo diventa centro dell'onda sferica scatterata che ha una ben definita fase relativamente alle altre onde scatterate. Cosi' le onde scatterate da una matrice regolare di siti in un cristallo si comporranno a seconda delle direzioni e ci saranno direzioni in cui il contributo si sommera' rafforzando l'intensita' ed altre in cui il contributo si annulla riducendo l'intensita'. In questo modo le direzioni in cui l'intensita' e' maggiore sono strettamente legate alla simmetria e spaziatura dei siti scatterati e quindi si possono usare le direzioni in cui c'e' interferenza costruttiva e l'intensita' relativa per dedurre sia la simmetria sia la costante del lattice di un cristallo.

Partendo dall''Eq. 1.28 di Van Hove si puo' ricavare e' la legge dello scattering per la diffrazione, partendo dal caso semplice di scattering neutronico su cristallo formato da un solo isotopo. Anche se la diffrazione e' predominatemente un processo di scattering elastico ( $\epsilon = 0$ ), i diffrattometri attualmente integrano su tutte le energie dei neutroni scatterati. Cosi' nella formulazione di Van Hove, invece di mettere  $\epsilon = 0$  nella Eq. 1.28, per calcolare l'intensita' diffratta si integra su  $\epsilon$ . Questa procedura assicura che l'effetto delle vibrazioni atomiche sia inclusa nella sezione d'urto di diffrazione. L'integrale della Eq. 1.28 su  $\epsilon$  da' luogo ad un'altra funzione di Dirac, questa volta in termini di tempo  $\delta(t)$ , che indica che la funzione di correlazione di coppia,  $G(\vec{\mathbf{r}}, t)$ , deve essere valutata a t = 0 per la diffrazione. Il risultato, per un cristallo composto di un singolo isotopo, e'

$$I(\vec{\mathbf{Q}}) = b_{coh}^2 \Sigma_{i,j} < e^{i\vec{\mathbf{Q}} \cdot (\vec{\mathbf{r}}_i - \vec{\mathbf{r}}_j)} >$$
(4.35)

dove le posizioni degli atomi *i* e *j* debbono essere calcolate allo stesso istante. Se gli atomi nel cristallo fossero in condizioni stazionarie, la media termodinamica,  $< \dots >$ , si potrebbe togliere dall'Eq. 1.35 in quanto sia  $\vec{r}_i$  che  $\vec{r}_j$  sarebbero costanti. In realta' gli atomi oscillano attorno alle loro posizioni di equilibrio e si trovano in quelle posizioni solo per una frazione del tempo. Quando si tiene conto di di questo fatto, la media termodinamica introduce un altro fattore, detto Debye-Waller factor, e l'Eq. 1.35 diventa

$$I(\vec{\mathbf{Q}}) = b_{coh}^2 \Sigma_{i,j} e^{i\vec{\mathbf{Q}} \cdot (\vec{\mathbf{r}}_i - \vec{\mathbf{r}}_j)} e^{-Q^2 < u^2 > /2} = |\vec{\mathbf{b}}_{coh} \Sigma_i e^{i\vec{\mathbf{Q}} \cdot \vec{\mathbf{r}}_i}|^2 e^{-Q^2 < u^2 > /2} = S(\vec{\mathbf{Q}})$$
(4.36)

dove  $\langle u^2 \rangle$  e' la media del quadrato dello spostamento di un atomo dalla sua posizione di equilibrio nel lattice cristallino; la Eq. 1.36 e' l'intensita diffratta che si misurerebbe in un esperimento di scattering neutronico, e' ora indicata con  $S(\vec{\mathbf{Q}})$  e chiamata **fattore di struttura**. L'equazione e' alla base di ogni analisi cristallografica dei dati di diffrazione neutronica. La  $S(\vec{\mathbf{Q}})$ e' NON zero per qualsiasi valore di  $\vec{\mathbf{Q}}$ , cosa sorprendente se si pensa al numero grandissimo di atomi in un cristallo e ai differenti fattori di fase determinati da ciascun atomo. Dalla Fig. 1.15 si puo' capire come cio' possa avvenire. Si supponga  $\vec{\mathbf{Q}}$  che sia perpendicolare ad un piano atomico, dalla figura ad es. al piano di scattering 1, se il valore di  $\vec{\mathbf{Q}}$  e' un intero multiplo di  $2\pi/d$ , con d la distanza dal piano atomico parallelo vicino al piano 1, nel caso della figura il piano di scattering 2, allora  $\vec{\mathbf{Q}} \cdot (\vec{\mathbf{r}}_i - \vec{\mathbf{r}}_j)$  e' un multiplo di  $2\pi$  e quindi  $S(\vec{\mathbf{Q}})$  e' non zero perche' ciascun esponente nella somma dell'equazione e' unitario.

Si avra' **diffrazione** tutte le volte che  $\vec{\mathbf{Q}}$  sara' perpendicolare ai piani reticolari; usando le relazioni tra  $Q, \theta \in \lambda$  si ricava facilmente la **legge di Bragg** della diffrazione.

$$n\lambda = 2dsin\theta \tag{4.37}$$

Per ottenere la diffrazione da un insieme di piani, il cristallo deve essere ruotato in modo da avere i piani perpendicolari a  $\vec{Q}$ , cosa non facile che necessita di strumenti adeguati. Il segnale osservato in un rivelatore di neutroni, al variare dell'orientamento del cristallo, e' il **picco di Bragg**, perche' il segnale appare solo quando il cristallo e' orientato correttamente. La Eq. 1.36 mostra come la l'intensita' dei neutroni scatterati sia proporzionale al quadrato della densita' degli atomi nei piani interessati nello scattering; questo permette dalla osservazione del picco di Bragg di dedurre sia la spaziatura tra i piani che la densita' atomica nei piani. Per misurare picchi di Bragg corrispondenti a piani atomici diversi, si deve scegliere la lunghezza d'onda e l'angolo di scattering che soddisfino la legge di Bragg e ruotare il cristallo opportunamente.

Il problema della diffrazione neutronica si complica quando si passa da un cristallo semplice con un unico tipo di atomo a cristalli composti da atomi differenti. In questo caso non e' semplice dedurre le posizioni degli atomi dalla misura dell'intensita' di diversi picchi di Bragg perche' alcuni fattori esponenziali che contribuiscono alla  $S\vec{Q}$ sono ora complessi e la fase di queste quantita' non si possono ricavare direttamente dalle intensita' misurate. Questa difficolta', chiamata **phase problem** viene risolta dai cristallografi ricorrendo a modelli delle strutture cristalline e individuando quello che riproduce le intensita' misurate.

Piu' complicato e' il problema dell'analisi di strutture policristalline, o polveri policristalline, composte da molti granuli di singoli cristalli orientati a caso, che diffraggono i neutroni in tutte le direzioni indipendentemente dall'orientamento del campione e del fascio incidente, perche' ci



Figure 4.15: Interferenza costruttiva

sara' sempre un granulo orientato correttamente. In piu' ci potranno essere cristalli che hanno strutture simili per cui e' necessario che il rivelatore di neutroni abbia una **alta risoluzione**. La tecnica della **neutro powder diffraction** e' impiegata im molti laboratori appositamente attrezzati, quali il NIST in USA.

# 4.4.1 Scattering neutronico a piccolo angolo, SANS

Nel discutere la diffrazione si e' visto che lo scattering elastico con un vettore di scattering  $Q = (4\pi/\lambda)sin\theta$  e' causato dalla modulazione periodica della lunghezza di scattering per neutroni con periodo  $d = 2\pi/Q$ , per cui si osservano i picchi di Bragg. Nel caso di singolo cristallo d era interpretato come la distanza tra piani atomici. Per misurare strutture con distanze maggiori delle tipiche distanze interatomiche e' necessario o avere Q piccolo, o aumentare la

lunghezza d'onda  $\lambda$  dei neutroni o diminuire l'angolo di scattering. Poiche' e' difficile produrre fasci a bassa energia con flussi discreti allora si ricorre alla diminuzione dell'angolo di scattering per analizzare strutture grandi, quali polimeri, colloidi o virus. Questa tecnica e' chiamata **small angle neutron analysis** o SANS.

Quando l'angolo di scattering e' piccolo, circa 1 grado si ha una importante semplificazione della Eq. 1.28, questo perche' anche il vettore di scattering Q e' piccolo rispetto ad una tipica distanza interatomica e cosi' i fattori esponenziali di fase non variano grandemente da un nucleo all'altro.e la somma su tutti i siti degli atomi puo' essere sostituita da un integrale. Come risultato, la legge di scattering a piccoli angoli per scattering coerente ed elastico da un insieme di "oggetti" puo' essere scritta come

$$I(\vec{\mathbf{Q}}) = |\int \rho(\vec{\mathbf{r}}) e^{-i\vec{\mathbf{Q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}} d^3\vec{r}|^2$$
(4.38)

dove  $\rho(\vec{r})$  e' la **densita' della lunghezza di scattering** e l'integrale si estende su tutto il campione. Per calcolare  $\rho(\vec{r})$  di una molecola grande, ad esempio, si sommano semplicemente le lunghezze di scattering coerente degli atomi nella molecola e si divide per il volume molecolare. Questa equazione e' una forma approssimata della Eq. 1.28 ed e' valida solo quando **Q** e' piccolo. Tuttavia e' lo strumento analitico base della tecnica di analisi a piccoli angoli. In molti casi i campioni misurati con la SANS possono essere pensati come particelle con una densita' di lunghezza di scattering costante ,  $\rho_p$ , che sono dispersi in un mezzo uniforme con densita' di lunghezza di scattering  $\rho_m$ , esempi sono rocce porose, dipersione colloidali, macromolecole biologicge in acqua etc.. Con questa approssimazione l'integrale in Eq. 1.38 puo' essere riscritto con un termine che evidenzia l'integrale uniforme su tutto il campione ed un termine che dipende dalla differenza  $\rho_p - \rho_m$ , una quantita' indicata come **fattore di contrasto**.

$$S(\vec{\mathbf{Q}}) = N_p(\rho_p - \rho_m) |\int_{particella} e^{i\vec{\mathbf{Q}}\cdot\vec{\mathbf{r}}} d\vec{\mathbf{r}}|^2$$
(4.39)

dove l'integrale e' fatto sul volume di una delle prticelle e  $N_p$  e' il numero di particelle nel campione. L'integrale del fattore di fase  $e^{ib\vec{f}Q\cdot\vec{r}}$  su una particella e' chiamato **fattore di forma** della particella. Questo e' relazionato alla forma delle particelle, per molte forme semplici di particelle il fattore di forma puo' essere calcolato analiticamente, mentre per quelle complesse ( es. biomolecole) si calcola numericamente. Normalmente l'intensita' che si vede plottata nella SANS e' normalizzata al volume del campione cosicche' S(Q) e' riportata in unita' di  $cm^{-1}$ , mentre dalla refequ:contrast ha unita'  $cm^2$ .

Il **contrast matching** e' una tecnica molto usata nella SANS e la Eq. 1.38 ci aiuta a capire perche'. L'equazione mostra come lo scattering totale e' proprzionale al quadrato della differenza (*contrasto* tra la lunghezza di scattering del particella e quella del mezzo in cui e' dispersa. Se si ingloba la particella in un mezzo che ha la stessa lunghezza di scattering della particella stessa, quest'ultima non scatterera' piu', sara' quindi invisible. Ad es. si supponga che le particelle da analizzare siano sferoidi con una crosta ed un nucleo con lunghezze di scattering diverse. Facendo un esperimento con le particelle immerse in un mezzo di lunghezza di scattering simile a quella della crosta si determina il fattore di forma del nucleo, viceversa se si immerge in un mezzo di lunghezza di scattering simile a quella del nucleo si valuta il fattore di forma della crosta o guscio.

### 4.4.2 Scattering Inelastico

Il fatto che gli atomi in realta' non sono in posizioni fisse all'interno del cristallo, ma e' soggetto all'energia termica che lo fa muovere ed oscillare all'intorno della sua posizione, fa si' che il fenomeno della diffrazione, che viene esaltato solo quando gli atomi si trovano nella posizione canonica, risulta attenuato. Questo fatto e' tenuto conto nel **Debye-Waller factor**, l'attenuazionme fornisce informazione sul moto atomico . Un altro modo per avere informazioni sul moto atomico e' attraverso lo **scattering inelastico** dei neutroni, in cui i neutroni scambiano energia con gli atomi del materiale.

Quando un neutrone e' scatterato da un solido cristallino, esso puo' assorbire o emettere una quantita' di energia uguale al quanto di energia dei **fononi**,  $h\nu$  del cristallo, che sono le onde del lattice. Si ha cosi' lo **scattering inelastico coerente** in cui l'energia del neutrone prima e dopo lo scattering differisce di una quantita' *E*, vedi Eq. 1.28, uguale all'energia dei fononi. Nella maggior parte dei solidi  $\nu$  e' dell'ordine di qualche terahertz (THz), corrispondente ad energie di fononi di pochi meV, (millielectronvolt), 1THz = 4.18 meV. Poiche' i neutroni termici usati per scattering neutronico hanno energie nel range del meV, lp scattering inelastico con fononi produce una variazione di energia del neutrone apprezzabile, e questo permette di misurare la frequenza dei fononi con una buona risoluzione.

Sperimentalmente la strumentazione per gli esperimenti di scattering neutronico inelastico e' diversa se gli esperimenti sono condotti con sorgente da reattore o da spallazione. Nel caso di sorgenti da reattore si usano i cosidetti **three-axis spectrometers** che permette di fare misure registrando la intensita' neutronica scatterata in funzione di un singolo *wavevector transfer* e singolo trasferimento di energia. Per determinare l'energia di un fonone si fa uno scan in energia a valori costanti di Q. Tecnica inventata da B.N.Brockhoue (Nobel nel '94). Diversamente con sorgenti impulsate di spallazione si usa la **tecnica del ToF** con una grande matrice di rivelatori. L'analisi offline pero' e' molto piu' complessa perche' richiede un'analisi sofisticata dei dati con tagli nello spazio ( $\vec{\mathbf{Q}}, E$ ).

## 4.4.3 Scattering magnetico

Il neutrone ha momento magnetico e quindi *sente* una forza di origine magnetica quando si trova in presenza di un campo magnetico, come ad es. quello cheato da un atomo che abbia un elettrone spaiato. Questo capita con i materiali ferromagnetici, ad es. ad esempio il ferro, che sono magnetici perche' gli elettroni spaiati creano un campo magnetico per cui questi atomi tendono ad allinearsi con altri formando domini. In condizioni senza campo magnetico esterno la randomizzazione dei domini crea un campo esterno nullo. Ogni atomo con elettroni spaiti e' quindi generatore di un campo magnetico e quindi il neutrone sente questo campo magnetico e si ha il cosidetto **magnetic Bragg scattering** allo stesso modo dello scattering nucleare. Sia lo scattering nucleare che quello magnetico sono dello stesso ordine di grandezza per cui le corrispondenti riflessioni di Bragg sono di intensita' confrontabile, con la differenza che lo scattering magnetico **NON** e' isotropico.

La forza dello scattering mgnetico tra il neutrone ed il nucleo di un atomo con elettroni spaiati ( il

nucleo fa da centro diffusore) dipende dall'orientamento relativo dei momenti magnetici e dalla linea che congiunge i loro centri. L'interazione e' di tipo dipolare, che significa che solo la componente della magnetizzazione del campione che e' perpendicolare al vettore di scattering  $\vec{\mathbf{Q}}$ ha importanza nello scattering. Quindi lo scattering neutronico e' sensibile alla distribuzione spaziale della direzione e grandezza di magnetizzazione degli atomi del materiale. L'anisotropia dello scattering magnetico e' usata per separare i picchi di Bragg magnetici e nucleari nei materiali ferromagnetici, presenti entrambi allo stesso valore di  $\vec{\mathbf{Q}}$ . Se il momento magnetico elettronico puo' essere allineato applicando un campo magnetico esterno, il picco magnetico di Bragg. per cui  $\vec{\mathbf{Q}}$ e' parallelo al campo applicato, svanisce perche' non c'e' forza, lasciando solo la componente nucleare. Se invece  $\vec{\mathbf{Q}}$  e' perpendicolare al campo applicato si ha un picco di Bragg che contiene i due contributi, quello magnetico e quello nucleare, per cui per sottrazione si puo' ricavare quello magnetico.

### 4.4.4 Neutroni polarizzati

I neutroni essendo dotati ndi momento magnetico possono essere polarizzati. Esistono diverse tecniche per polarizzare fasci di neutroni, tra queste: diffrazione di Bragg su particolari cristalli,riflessione da specchi magnetizzati, trasmissione tra polarimetri. Ciascuno di questi metodi seleziona neutroni che hanno il momento magnetico allineato parallelo o antiparallelo ad un campo magnetico applicato e scarta gli altri elettroni dal fascio. La polarizzazione una volta ottenuta puo' essere mantenuta applicando un piccolo campo magnetico variabile (milli-Tesla), **guide field**, parallelo al momento dei neutroni.

La tecnica di analisi conosciuta come **polarisation analysis** e' utile perche' alcuni processi di scattering *flippano* il momento magnetico del neutrone mentre altri no e quindi permette di determinare la direzione dei momenti magnetici in un campione a seconda se si hanno contributi o meno alla intensita' diffratta. I neutroni polarizzati sono uno strumento utile per distinguere diversi tipi di processi, permettendo di separare lo scattering nucleare coerente dallo scattering magnetico e scattering nucleare incoerente.

La polarizzazione dei neutroni puo' essere utilizzata per aumentare la risoluzione degli spettrometri neutronici usando la tecnica conosciuta come —bf neutron spin echo, che permette di ottenere risoluzioni nella variazione di energia di un fascio scatterato dell'ordine di neV (nano eV).

# 4.4.5 Riflettometria

I neutroni sono sensibili alla struttura superficiale dei materiali quando incidono sulla superficie con un angolo sufficientemente piccolo. Per tutte le superfici piane e lisce i netruni sono riflessi ad un angolo di incidenza praticamente uguale,  $\alpha_i$ , definito per i neutroni come l'angolo tra il fascio incidente e la superficie, che e' minore dell'**angolo critico**  $\gamma_c$  e si ha una riflessione speculare. La componente del vettore trasferito  $Q_z$  lungo la normale z alla superficie per avere riflessione sara'

$$Q_z = k_{iz} - r_{rz} = \frac{2\pi}{\lambda} (\sin\alpha_i + \sin\alpha_r) = \frac{4\pi \sin\alpha_i}{\lambda}$$
(4.40)

dove con  $k_{iz}$  e' indicata la componente z del vettore d'onda neutronico incidente e con  $k_{rz}$  quella riflessa. Nella riflessione non c'e' variazione nel vettore d'onda per cui il processo e' elastico. Come un normale raggio di luce e' riflesso e trasmesso attraverso un mezzo di indice di rifrazione n, cosi' anche il fasci neutronico sara' parte riflesso e parte trasmesso attraverso il mezzo con un vettore d'onda dato da  $n \cdot k$ , essendo n l'indice di riflessione. L'energia cinetica del neutrone prima di incidere sulla supeficie e'  $\hbar^2 k^2/2m$  e quella del neutrone trasmesso nel mezzo sara'  $\hbar^2 n^2 k^2/2m$ , cosicche' la differenza e' proprio il potenziale di scattering neutronico mediato sul volume del mezzo.

L'indice di rifrazione si ricava quindi come

$$n = 1 - \rho \lambda^2 / 2\pi \tag{4.41}$$

con  $\rho$  la densita' della lunghezza di scattering. La riflessione esterna critica dei neutroni avviene quando il vettore d'onda diventa zero, in questo caso si puo' esprimere l'angolo critico come  $\gamma_c = sin^{-1}(\lambda\sqrt{\rho}/n)$ . All'aumentare dell'angolo di incidenza sopra l'angolo critico sempre meno neutroni incidenti sono riflessi. Si ha lo stesso comportamento dei raggi di luce riflessi descritto dalla legge di Frsnel e cioe' la riflettivita' diminuisce con la quarta potenza dell'angolo di incidenza.

Tuttavia quando si analizzano superfici costituite da piu' strati sottili si ha una variazione della densita' della lunghezza di scattering vicina alla superficie per cui la riflettivita' neutronica misurata in funzione del'angolo di incidenza ha un andamento piu' complesso semplificato come

$$R(Q_z) = \frac{16\pi^2}{Q_z^4} |\int \frac{d\rho(z)}{dz} e^{iQ_z z} dz|^2$$
(4.42)

dove  $R(Q_z \text{ e'} \text{ la riflettivita' come indicata da Fresnel. L'eq. ?? dice che la riflettivita' dipende dal gradiente della densita' media di lunghezza di scattering perpendicolare alla superficie. Se si hanno piu' strati superficiali di diverso materiale questo gradiente avra' dei valori massimi nei punti di separazione tra uno strato e l'altro e quindi si puo' usare una misura di riflettivita' per dedurre lo spessore, sequenza e densita' di lunghezza di scattering di strati vicini alla superficie. Questo metodo e' chiamato$ **neutron reflectometry**.

## 4.4.6 Interferometri, difrattometri e rifrattometri per neutroni

Nello scattering di nucleoni su nuclei si manifestano fenomeni di diffrazione quando la lunghezza d'onda della particella incidente e' confrontabile con la dimensione del nucleo e questo vale anche con fasci di neutroni. Con un diverso range di lunghezze d'onda tuttavia si possono anche studiare effetti di interferenza come con una o due fessure o film sottile, che sono tipici della radiazione luminosa.



Figure 4.16: Interferometro per neutroni



Figure 4.17: Effetti di interferenza neutronica



Figure 4.18: Condizione di Bragg per interferenza neutronica

Un interferometro a neutroni e' mostrato nella Figura 1.16, esso consiste di tre "beam splitter" identici ciascuno dei quali lascia passare un fascio trasmesso non deviato ed un fascio diffratto deviato di un angolo  $2\theta$ . Per ottenere identica diffrazione i tre beam splitter e per garantire un perfetto allineamento, l'intera struttura fu intagliata in un unico cristallo di silicio di 9 cm di lunghezza e 5 cm di raggio. La funzione del terzo piano e' quella di ricombinare i due fasci interferentesi AB e CD in fasci uscenti che contengono l'intera informazione dell'interferenza come variazione netta del'intensita'. Senza la ricombinazione, l'interferenza avverrebbe solo nel punto D dove i fasci si incrociano; un esempio dell'interferenza osservata con il dispositivo di cui sopra e' mostrato in Figura 1.17.

L'applicazione piu' frequente dell'interferenza neutronica e' nella diffrazione di neutroni da cristalli. La diffrazione puo' essere usata sia per fornire una sorgente o come detector per neutroni monoenergetici e per studiare strutture cristalline di materiali.

Nella Figura 1.18 e' mostrato l'applicazione della legge di Bragg per la diffrazione da un singolo cristallo. Per neutroni di lunghezze d'onda dello steso ordine delle distanze interatomiche d, l'interferenza risulta in una "apparente" riflessione dai piani cristallini del lattice. Tipiche distanze atomiche nei solidi sono dell'ordine di 0.1 nm che e' lo stesso valore della lunghezza d'onda di de Broglie per i neutroni termici.

L'intensita' per ogni particolare riflessione puo' essere una funzione complicata delle proprieta' del cristallo ed ampiezza di scattering del neutrone, con coinvolgimento della somma coerente sui diversi isotopi presenti nel cristallo.

La Fig. 1.19 mostra un esempio di spettro da scattering per neutroni di lunghezza d'onda di 0.114 nm su una polvere consistente di molti microcristalli in modo da osservare tutte le possibili orientazioni.

Un metodo alternativo al fissare la lunghezza d'onda e' quello di avere un fascio di neutroni con uno spread di energia, come qulli ottenuti da reattori. Si fa incidere il fascio su un cristallo, ad un certo angolo e si osservano neutroni monoenergetici che soddisfano alla legge di Bragg ( supposto che la stessa legge di Bragg non sia soddisfatta da diversa lunghezza d'onda e diversa distanza



Figure 4.19: Pattern di diffrazione di polvere di nikel con neutroni di 0.114 nm

reticolare). Se si cambia leggermente l'angolo  $\theta$ , la stessa condizione di Bragg sara' soddisfatta da differente lunghezza d'onda o energia. Si ha cosi' un *monocromatore neutronico*, una sorgente di neutroni di determinata energia con uno spread dell'energia determinato dallo spread angolare del fascio.

I pattern di diffrazione sono utilizzati per studiare le strutture cristalline o anche per studiare sistemi piu' complessi come strutture di liquidi e vetri o ancora piu' complesse come le strutture molecolari biologiche.