

Diffrazione di neutroni

Con “misure di diffrazione” si intendono esperimenti in cui:

- l'intensità dello scattering viene registrata, in generale, al variare di Q_{el} . Sui diffrattometri tipici, posti su sorgente stazionaria, ciò significa misurare l'intensità al variare dell'angolo di scattering θ
- i neutroni diffusi non vengono discriminati in base all'energia scambiata con il campione.
- si assume che lo scattering sia prevalentemente elastico (anche se ciò non è a rigore possibile per i liquidi)
- si è interessati alla struttura *statica* del campione



$$I \approx \Phi N \varepsilon \Delta\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

in realtà....

$$I(\theta) = \Phi N \Delta\Omega \varepsilon(k_0) \int_{-\infty}^{\omega_0} d\omega \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \frac{\varepsilon(k_1)}{\varepsilon(k_0)} = C [\tilde{S}(Q) + P(Q)]$$

$\theta = \cos^{-1} \frac{\omega}{\omega_0}$

Misure di diffrazione su fluidi semplici: tipici sistemi/proprietà di interesse oggi

- Fluidi quantici (He, H₂, D₂, Ne)
- Proprietà di interazione in sistemi nobili: potenziali a coppie, interazioni dipolari a grandi distanze, effetti delle interazioni irriducibili a tre corpi in liquidi densi
- Metalli liquidi/soluzioni metalliche: effetti dello screening elettronico, transizioni metallo-non metallo
- Struttura dei fluidi in sistemi confinati
- Fluidi molecolari: proprietà di interazione dal fattore di struttura dei centri di massa, correlazioni orientazionali dalle $g(r)$ parziali
- Miscele di gas nobili: confronto con recenti teorie per le proprietà strutturali di fluidi a due componenti

Vedremo qualche esempio...

Strumentazione per misure di $S(Q)$: concetti base

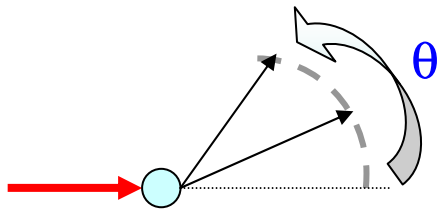
Cercando di semplificare un po', possiamo comunque scrivere "esattamente":

$$I(Q_{el}) = C \tilde{S}(Q_{el}) + C P(Q_{el})$$

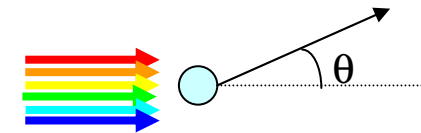
Correzione anelastica
(da valutare in qualche modo indipendente)

Fattore strumentale da determinarsi tramite una misura specifica su un campione di *riferimento*.

Ci sono 2 modi per misurare l'intensità diffratta in funzione di Q_{el} :



$$Q_{el} = 2 k_0 \sin \frac{\theta}{2} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}$$

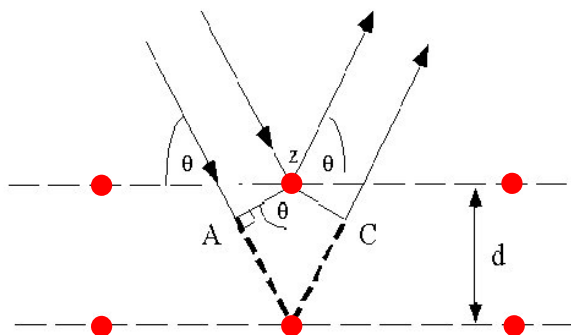


Fissare l'energia incidente (k_0) e fare uno *scan* in θ

Fissare θ e sfruttare la gamma di energie presente in un fascio polienergetico

Diffrattometro a 2 assi

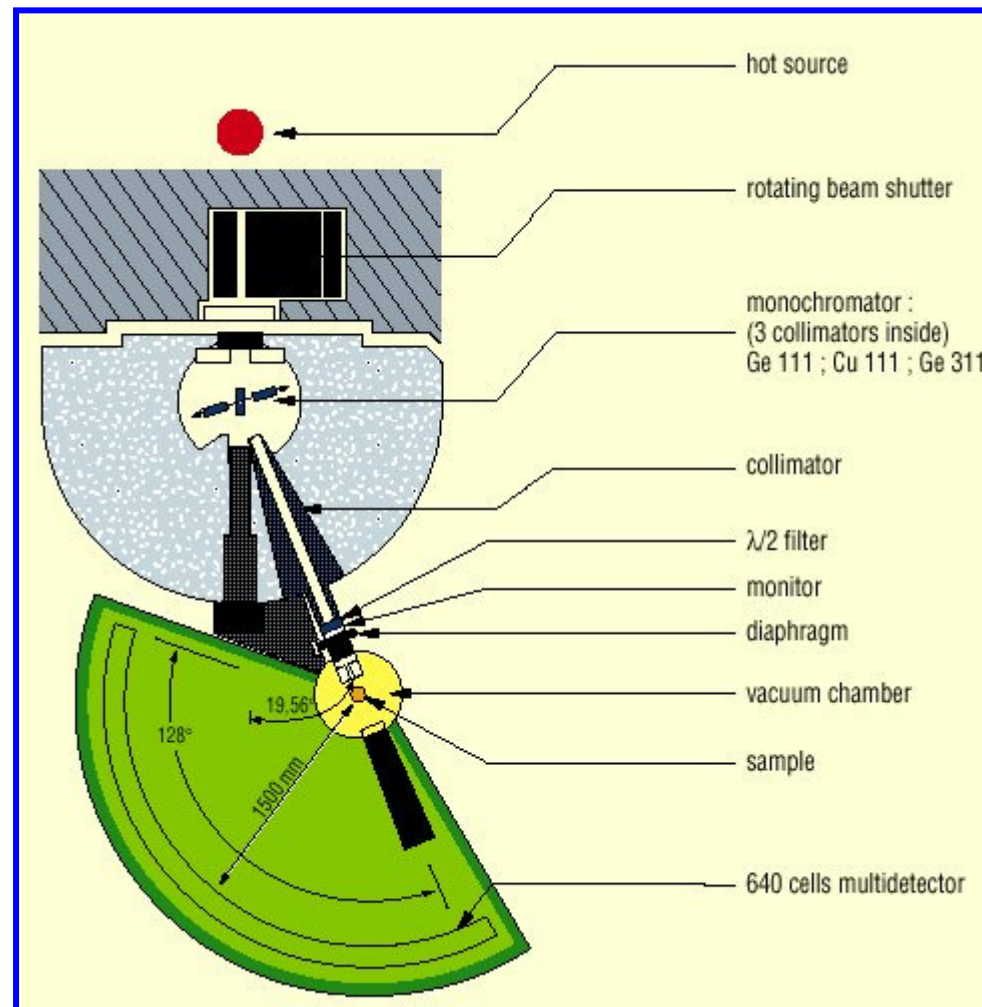
- Posto generalmente su sorgente stazionaria (reattore)
- Sfrutta fascio incidente reso monocromatico tramite riflessione di Bragg da cristalli



$$n\lambda = 2d \sin \theta_M$$

Se θ_M e d sono fissati, vengono selezionate le lunghezze d'onda λ , $\lambda/2$, $\lambda/3$, ... etc.

- Ciò che si misura è l'intensità in funzione dell'angolo di scattering θ : $I(\theta)$.
- Visto che $Q_{el} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}$ e la lunghezza d'onda è fissata, il range coperto in angolo di scattering corrisponde a un range coperto in Q_{el} . Per cui $I(\theta) \Leftrightarrow I(Q_{el})$, legata (a meno di C , P , e delle sezioni d'urto) a $S(Q_{el})$



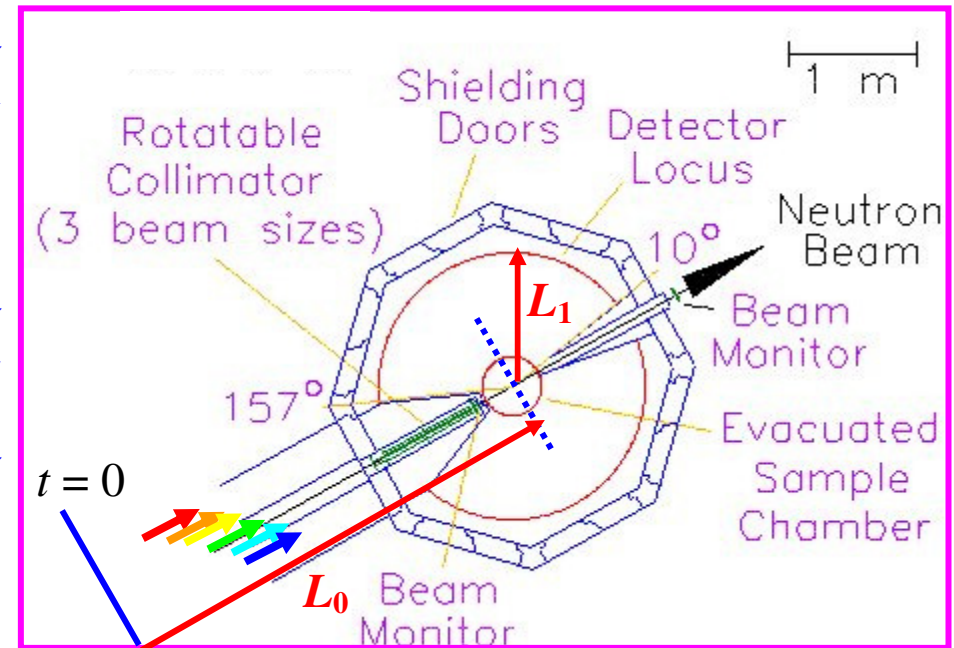
Diffrattometro a tempo di volo (ToF:Time-of-Flight)

- Posto “*naturalmente*” su sorgente pulsata, ma realizzabile anche su reattore tramite l’uso di un chopper per pulsare il fascio neutronico. Sfrutta fascio polienergetico.

- Il tempo totale di volo di un neutrone con una certa energia $\frac{1}{2} mv^2$ [cioè $\lambda = h / (mv)$] è $t_f = \frac{L_0}{v} + \frac{L_1}{v'}$. Se lo scattering è **elastico** allora $v = v'$ e, ad un angolo θ_0 fissato, si avrà:

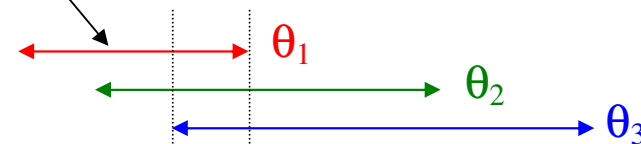
$$t_f = \frac{L_0 + L_1}{v} = \frac{m}{h} (L_0 + L_1) \lambda = \frac{m}{h} (L_0 + L_1) \frac{4\pi}{Q_{el}} \sin \frac{\theta_0}{2}$$

- Ad ogni angolo (fissato) si misura l’intensità in funzione dei tempi di arrivo al detector $I(t_f)$. Siccome (nell’ipotesi di scattering elastico) tempi di volo diversi corrispondono a λ diverse, ciò equivale a misurare $I(\lambda)$, ovvero $I(Q_{el})$



Ad ogni angolo di scattering si ha un intero pattern di diffrazione

Se sono disponibili rivelatori a più di un angolo, si possono misurare interi profili di diffrazione estesi su intervalli diversi di Q_{el} . Nella zona di sovrapposizione la media degli spettri consente di migliorare la statistica.



Vantaggi/svantaggi diffrattometri 2-assi/ToF

2-assi

Vantaggi

- Elevata stabilità e pochi parametri da conoscere con accuratezza
- Avere energia incidente fissata facilita la valutazione delle varie correzioni necessarie (assorbimento, multiplo)
- E' possibile una valutazione, spesso accurata, degli effetti anelastici

Svantaggi

- Tempi di conteggio lunghi per ottenere un profilo intero con buona accuratezza statistica
- Lo scattering anelastico influenza tutto il profilo di diffrazione e aumenta al crescere di θ .

ToF

Vantaggi

- Interi profili di diffrazione ottenibili in tempi brevi
- A piccoli angoli di scattering i profili di diffrazione sono poco affetti da scattering anelastico (può essere spesso trattato come un fondo costante, tranne che a Q molto piccoli)

Svantaggi

- Avere fascio polienergetico complica la valutazione delle varie correzioni (assorbimento, multiplo)
- E' molto complicato eseguire una valutazione accurata degli effetti anelastici. Non esistono metodi totalmente affidabili
- Vari parametri devono essere conosciuti con accuratezza (cammini di volo, tempi di volo)

Un altro esempio: diffrattometro a piccoli angoli

