

НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ  
НЕЙТРОНОВ  
В ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЯХ

Д. Балли

ИНСТИТУТ АТОМНОЙ ФИЗИКИ, РУМЫНИЯ

## А Н Н О Т А Ц И Я

В работе обсуждаются вопросы, связанные с рассеянием нейтронов в простых жидкостях. Рассматриваются упругое, квазиупругое и неупругое рассеяния в таких жидкостях с целью выявить те направления, которые представляют наибольший интерес для исследования. Дана оценка требуемых значений оптических параметров экспериментальных установок и указаны области  $(\hbar\omega - Q)$ -пространства, исследование которых кажется особенно интересным.

## A B S T R A C T

The problems connected with neutron scattering in simple liquids are discussed. Elastic, quasielastic and inelastic scattering in such liquids are considered with the aim to find out those directions which are of most interest for further investigations. The optical parameters required for experimental installations are given and the regions of  $(\hbar\omega - Q)$  space which seem especially interesting to study are pointed out.

## ВВЕДЕНИЕ

Жидкости, которые изучались с помощью рассеяния нейтронов, выбирались наиболее простые. Примером могут служить жидкие металлы и благородные газы в жидком состоянии. Это объясняется тем, что в таких жидкостях нет молекул, следовательно отсутствует внутримолекулярное движение, и это упрощает наблюдение характерной для жидкостей микродинамики. Анализ спектра неупруго рассеянных нейтронов в простых жидкостях позволяет получить информацию относительно коллективных движений и механизма диффузии в жидкостях. Обсуждению экспериментальных результатов посвящено несколько обзоров, опубликованных за последние годы (см., например, [1, 2]). Однако некоторые вопросы, вытекающие из анализа существующих результатов, следует обсудить еще раз. Желательно обсудить вопрос о возможности расширения этой информации, в частности о ее однозначности. Именно этим вопросам и посвящена настоящая работа.

### 1. УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

При исследовании физических свойств простых жидкостей, и в частности жидких металлов, особое значение имеет определение их структур. Структура изучается как методом дифракции рентгеновских лучей, так и методом дифракции нейтронов. Экспериментальный метод относительно прост: монохроматический пучок излучения направляется на исследуемый образец и измеряется угловая зависимость интенсивности когерентно и упруго рассеянного излучения. Как правило, для проведения таких измерений используется двухосный спектрометр.

При рассеянии нейтронов измеряемая интенсивность пропорциональна дифференциальному эффективному сечению, которое, в свою очередь, определяется упругими и неупругими процессами когерентного и некогерентного рассеяния, зависящими от вектора  $\mathbf{Q}$  ( $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ ,  $\mathbf{k}_0$ ,  $\mathbf{k}$  — волновые векторы первичных и рассеянных нейтронов). Во многих экспериментах неупругое рассеяние мало, а некогерентное — изотропно, поэтому, измеряя его под углом  $Q = 0$  и вычитая из интенсивности рассеяния под заданным углом, можно выделить когерентную часть в чистом виде. Такое разделение представляет собой относительно простую операцию, хотя практически осуществить ее с достаточно хорошей точностью возможно не всегда. Примером подобного рода исследования структуры простых

жидкостей может служить недавно опубликованная работа по дифракции нейтронов на жидкой меди [3]. В ней было показано, что изменение температуры образца от значения, близкого к точке плавления ( $1086^\circ\text{C}$ ) до  $1492^\circ\text{C}$ , не приводит к качественному изменению дифракционной картины: положение максимумов не меняется с ростом температуры, причем положение первого максимума соответствует значению  $Q = 3 \text{ \AA}^{-1}$  и совпадает с положением первого (111) максимума дифракционной картины кристаллической меди. Повышение температуры приводит только к изменению интенсивности максимумов. Эти результаты качественно согласуются с результатами, полученными при исследовании других жидких металлов [4, 5]. У свинца при изменении температуры от  $340$  до  $1100^\circ\text{C}$  положение первого и второго максимумов остается тем же самым, и только третий максимум смещается с повышением температуры, но это смещение близко к экспериментальной погрешности.

В случае свинца это качественное согласие имеет особое значение, ибо эксперимент анализировался особенно тщательно. Кроме экспериментальных эффектов (многократное рассеяние, поглощение нейтронов в мишени и т. д.) Норс, Эндерби и Игельстафф [5] учли тот факт, что в двухосном эксперименте детектор регистрирует как упруго, так и неупруго рассеянные нейтроны. Для извлечения реального значения структурного фактора из экспериментальных данных они пользовались результатами Плачека [6]. Были сделаны предположения, что значения передач энергии при неупругом рассеянии намного меньше энергии исходных нейтронов и что эффективность детектора подчиняется закону  $1/v$ . Точность определения структурного фактора этим методом была оценена в работе [5]. Учтя все экспериментальные факторы, Нор, Эндерби и Игельстафф пришли к выводу, что в случае свинца отклонение от реальных значений не превышает 3%. Однако Аскарелли и Кальоти [7] при исследовании жидкого галлия показали, что вклад неупругого рассеяния более значителен, чем это вытекает из той аппроксимации теории Плачека, которая была ими использована. Поэтому указанная погрешность, по-видимому, была недооценена.

Сравнение данных, представленных в работах [3 и 5], указывает на то, что учет неупругих процессов в случае свинца недостаточно точен для выявления ожидаемого искажения дифракционной картины, обусловленного повышением температуры. Это обстоятельство требует снова обратить внимание на точность определения структурного фактора методом рассеяния нейтронов.

Игельстафф [4] указал на то, что сравнением дифференциальных сечений когерентного упругого рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей можно определить рентгеновский форм-фактор  $F(Q)$ . На рис. 1 сопоставлены экспериментальные значения  $S(Q)$ , полученные методами рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей [5]. Если оценка погрешности правильная, тогда между двумя группами экспериментальных данных имеется явное расхождение в области  $2\text{ \AA}^{-1} < Q < 4\text{ \AA}^{-1}$ . Это расхождение, если оно не обусловлено

экспериментальными погрешностями, свидетельствует о зависимости форм-фактора от метода определения. Совершенствование эксперимента, понимая под этим не только методику, но и обработку полученных данных, поможет разобраться в этом вопросе и уточнить наши знания относительно физических свойств исследуемого рассеивателя.

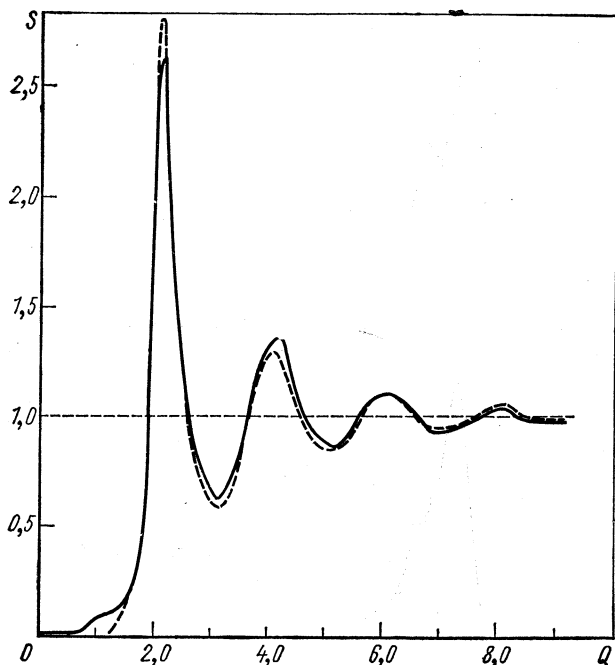


Рис. 1. Структурный фактор свинца [4] при рассеянии:  
 — нейтронов; — — — рентгеновских  
 лучей.

При постановке задачи об улучшении условий накопления экспериментальных данных по когерентному упругому рассеянию одним из наиболее выгодных решений является, по-видимому, использование метода упругой дифракции, который обсуждался несколько лет тому назад Кальоти [8]. Успех этого метода объясняется возможностью работы со спектрометрическими установками очень хорошей разрешающей способности, или, точнее, с оптимальным разрешением для данной области ( $\hbar\omega - Q$ ) - пространства и для данного рассеивателя. Результаты, полученные Аскарелли и Кальоти [7] при исследовании жидкого галлия конвенциональным методом и методом упругой дифракции, представлены на рис. 2. Этот рисунок только качественно показывает преимущества последнего метода. Ибо они

частично скрадываются величиной разрешения (порядка 5%) и методом введения поправок на разрешение.

Что касается функции разрешения, то метод, предложенный Купером и Натансом [9] и развитый в других работах, позволяет, с одной стороны, определить ее экспериментально, а с другой — найти

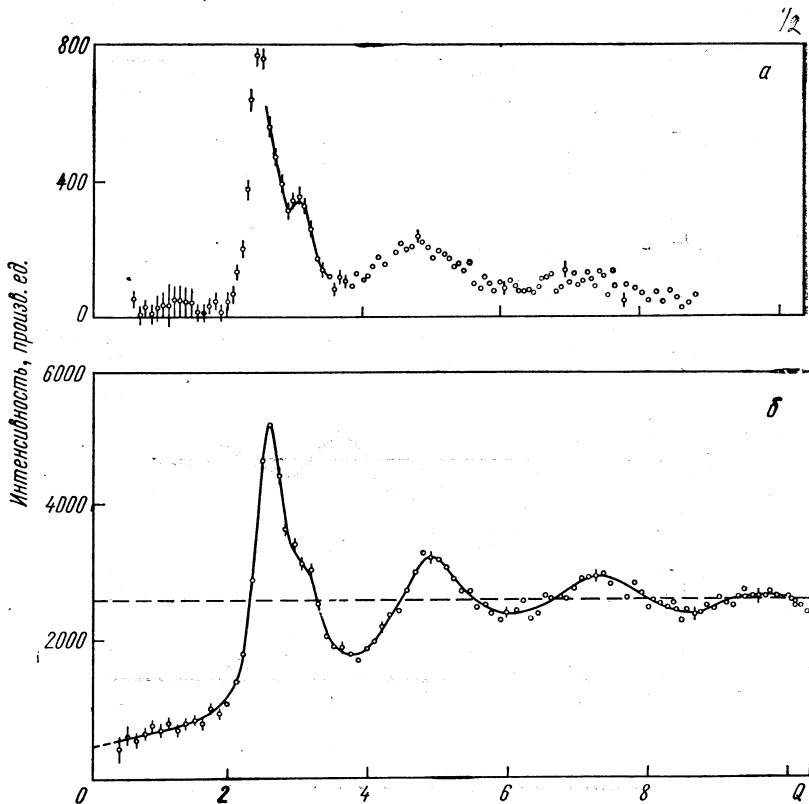


Рис. 2. Рассеяние нейтронов в жидком галлии, измеренное методом упругой дифракции (а) и конвенционным методом (б) [8].

более или менее оптимальные условия проведения эксперимента. На основе этих результатов можно надеяться, что принципиальные преимущества метода упругой дифракции для исследования структуры жидкостей смогут быть в дальнейшем использованы в полной мере.

## 2. КВАЗИУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

Квазиупругое рассеяние нейтронов в целом ряде простых жидкостей позволяет исследовать механизм диффузионного движения. С этой целью из экспериментальных данных определяется зависимость полуширины квазиупругого пика от  $Q^2$ . На основе анализа

множества опубликованных данных по этому вопросу возможно прийти к выводу о неоднозначности информации, полученной при исследовании  $\Delta E(Q^2)$ . Это обстоятельство обусловлено, по-видимому, как несовершенством теоретических подходов к трактовке диффузионного движения, так и постановкой экспериментов. Для обоснования этого утверждения ограничимся обсуждением только результатов, полученных при исследовании квазиупругого некогерентного рассеяния. На примере всего лишь одной жидкости, который, однако, кажется достаточно убедительным, можно прийти к некоторым выводам относительно требований, налагаемых на будущие эксперименты.

Среди жидких металлов особенно тщательно был исследован натрий. Первые результаты относительно атомных движений в этой жидкости получены Кокингом [10]. Эксперимент был поставлен таким образом (энергия первичных нейтронов — 4,1 мэв, угол рассеяния — в интервале  $0-90^\circ$ ), что охватывает область малых значений  $Q$  ( $0 < Q < 2\text{Å}^{-1}$ ). При этом спектральная ширина первичного пучка равнялась примерно  $3 \cdot 10^{-4}$  эв. В области  $0 < Q < 1,5 \text{Å}^{-1}$  структурный фактор жидкого натрия возрастает от нуля до значения, равного примерно 0,2. Эффективное сечение когерентного рассеяния равно 1,55 барн, а сечение некогерентного рассеяния — 1,85 барн. Эти два обстоятельства привели Кокинга к выводу о том, что наблюдаемый при малых углах рассеяния квазиупругий пик обусловлен главным образом некогерентным рассеянием. Когерентное рассеяние существует только при больших значениях угла рассеяния, т. е. вблизи верхнего предела исследованной области  $Q$ . В области чисто некогерентного рассеяния экспериментальные данные были сопоставлены с расчетными, вытекающими из модели Игельстаффа и Скофилда [11]. Было установлено, что время взаимодействия  $s$  — характерный для этой модели параметр — возрастает с увеличением температуры. На основе температурной зависимости параметра  $s$  был сделан вывод, что характерным процессом для жидкого натрия является свободная диффузия.

Дополнительные данные относительно квазиупругого рассеяния нейтронов в жидком натрии были получены в работах [12, 13]. На рис. 3 представлены результаты Кокинга (полученные при температуре образца  $388^\circ \text{K}$  [12]) и результаты Рандольфа (полученные при температуре образца  $375^\circ \text{K}$  [13]) вместе с теоретическими кривыми, рассчитанными на основе четырех моделей для механизма диффузионного движения: модель непрерывной диффузии [14], скачкообразной диффузии [15]; скачкообразной диффузии с учетом движения центра динамического равновесия [16] и модели Игельстаффа и Скофилда [11]. В экспериментальной работе [12] спектральная ширина первичного пучка  $\Delta E_0$  лежит в интервале  $6 \cdot 10^{-5} - 2 \cdot 10^{-4}$  эв, а в работе [13] — в интервале  $(1,25 - 2,4) \cdot 10^{-3}$  эв. Так как в обеих работах охватывалась область малых значений  $Q$ , то при сравнении экспериментальных данных с теоретическими неопределенность в значениях  $\Delta Q$  имела большое значе-

ние. В работе Рандольфа [13] эта неопределенность  $\Delta Q$  составляла  $0,06 \text{ \AA}^{-1}$ .

Как видно из рис. 3, при очень малых значениях  $Q$  (меньших  $0,5 \text{ \AA}^{-1}$ ) полученные данные качественно подчиняются закону Фика, согласно которому процесс диффузии можно описать одним параметром: коэффициентом диффузии. Отклонения данных Рандольфа от прямой, соответствующей непрерывной диффузии, можно приписать неточностям эксперимента (относительно большая спектраль-

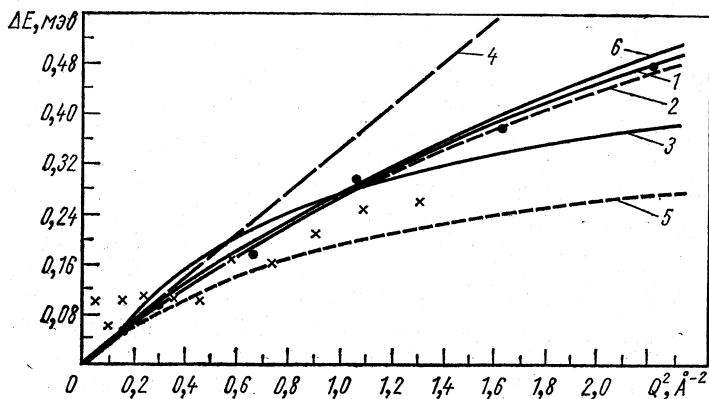


Рис. 3. Зависимость полуширины квазиупругого пика в жидком натрии от  $Q^2$ :

● — измерения Кокинга [12] при  $T=388^\circ \text{ K}$ ; × — измерения Рандольфа [13] при  $T=375^\circ \text{ K}$ ; 1 — модель Оскотского [16]  $\tau_0=1,8 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ ,  $f=0,7$ ; 2 — модель Оскотского —  $\tau_0=4 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ ,  $f=0,6$ ; 3 — модель Сингви и Селандера [15]  $\tau_0=1,5 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ ; 4 — модель Сингви и Селандера;  $\tau_0=2 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ ; 5 — модель Игельстаффа и Скофилда [11]  $c=1,47 \times 10^{-12} \text{ сек}$ ; 6 — модель простой диффузии.

ная ширина первичного пучка, неопределенность  $\Delta Q$ ). Представляет интерес проведение более точных измерений квазиупругого рассеяния в области малых значений  $Q$  ( $Q < 0,5 \text{ \AA}^{-1}$ ). Как показал Кокинг [13], на основе работы Гельфанда [17], при измерении коэффициента диффузии время наблюдения должно быть намного больше интервала времени, в течение которого проявляется корреляция скоростей. Это обстоятельство принципиально ограничивает ту область  $(\hbar\omega - Q)$ -пространства, в которой рассеянием нейтронов можно наблюдать классическую диффузию.

При больших значениях  $Q$ , как видно из рис. 3, различные модели для микроскопической диффузии приводят к одинаковому согласию (качественному) с экспериментальными данными. Дело в том, что функции  $\Delta E(Q^2)$ , вытекающие из всех этих моделей, зависят от нескольких параметров. В работе Сингви и Селандера [15] показано, что при данном  $Q$  величина  $\Delta E$  определяется коэффициентом классической диффузии, фактором Дебая—Валлера, временем



колебания атома относительно центра равновесия  $\tau_0$  и промежуток времени между скачками этого центра  $\tau_1$ . Фактор Дебая—Валлера определяется интегральной интенсивностью квазиупругого пика. В предположении, что  $\tau_1 \ll \tau_0$  и при заданном  $D$ , величина  $\Delta E$  зависит только от одного параметра  $\tau_0$ , значение которого определяется из условия наилучшего совпадения теоретической кривой с экспериментальными данными. При анализе экспериментальных данных, относящихся к области  $Q^2 < 1,4 \text{ \AA}^{-2}$ , Рандольф [13] получил для коэффициента показателя экспоненты в факторе Дебая—Валлера значение  $a = 0,22 \text{ \AA}^{-2}$  и установил, что  $\tau_0 = 1,5 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ . Это, казалось бы, находится в хорошем согласии с данными Коккина [12] ( $a = 0,202 \text{ \AA}^{-2}$  и  $\tau_0 = 1,48 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ ), однако в последней работе при учете экспериментальных данных, полученных при значениях  $Q^2$  вплоть до  $2,2 \text{ \AA}^{-2}$ , было показано, что более подходящей является модель Оскотского, в которой имеется два коэффициента диффузии:  $D_0$ , определяющий движение атома вместе со своим окружением, и  $D_1$ , характеризующий скачки атома. Они связаны с классическим коэффициентом диффузии соотношением  $D_0\tau_0 + D_1\tau_1 = D(\tau_0 + \tau_1)$ . На основе этой модели при сохранении предположения о том, что  $\tau_1 \ll \tau_0$  для полуширины квазиупругого пика, получается выражение, зависящее от двух параметров [13]:  $\tau_0$  и  $f = (D_1\tau_1/D\tau_0)$ . Наилучшее согласие с экспериментальными данными было получено при  $\tau_0 = 3,94 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$  и  $f = 0,5$ . Как видно из рис. 3, примерно такое же согласие можно получить, исходя из модели Игельстаффа и Скофилда [11], если при расчете полуширины квазиупругого пика параметру  $c$  приписать значение  $1,47 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ .

Стоит отметить, что в различных моделях чувствительность рассчитанной полуширины квазиупругого пика к значению свободного параметра различна. Например, для  $Q = 1,3 \text{ \AA}^{-1}$  в модели Сингви и Селандера значение  $\Delta E$  возрастает примерно в два раза при уменьшении  $\tau_0$  вдвое (от  $2 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$  до  $1 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ ), тогда как при таком же уменьшении параметра  $c$  (от  $1,87 \cdot 10^{-12}$  до  $0,99 \cdot 10^{-12} \text{ сек}$ ) в модели Игельстаффа и Скофилда значение  $\Delta E$  возрастает всего лишь на 10%. Конечно, при заданном значении  $Q$  эти цифры определяются не только выбором модели, но и выбором жидкости. Однако они иллюстрируют те трудности, которые возникают как при установлении применимости различных моделей к описанию экспериментальных данных, так и при определении значений свободных параметров.

Эти трудности можно частично обойти более тщательным накоплением экспериментальных данных. Дело в том, что для выделения чисто квазиупругой составляющей спектра рассеянных нейтронов, наверное, необходимо проводить измерения с лучшим разрешением. Сужением спектральной ширины первичного пика до значений, лежащих в интервале  $10^{-5}$ — $10^{-7} \text{ эв}$ , можно добиться того, чтобы отношение разрешения к ширине квазиупругого пика было всегда меньше нескольких процентов даже в области малых значений  $Q$  (меньших, чем  $0,2 \text{ \AA}^{-1}$ ). Конечно, необходимо также обеспечить хорошее

угловое разрешение, особенно в области малых  $Q$ . Из анализа данных, представленных на рис. 1, видно, что для отношения  $(\Delta Q/Q)$  было бы желательно достичь значений порядка нескольких процентов.

### 3. НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

При анализе неупругой составляющей спектра рассеянных нейтронов в простых жидкостях коллективные движения естественно рассматривать примерно таким же образом, как в кристалле. Одной из первых работ, посвященных систематическому изучению этого вопроса, была работа Ларссона, Дальборга и Йовича по жидкому алюминию [18]. С тех пор накоплено множество экспериментальных данных и достигнуты реальные успехи. Особенно интересны результаты Хаббарда и Биби [19]. Основная идея, лежащая в основе их работы, состоит в том, что при рассмотрении коллективных движений системы атомов вводится понятие функции отклика системы: функция линейного отклика  $K$  описывает изменение плотности системы при воздействии внешнего поля. Она представляет собой обобщенную восприимчивость системы и, как функция частоты внешнего поля, имеет сингулярные точки, соответствующие частотам коллективных колебаний. На основе теории фононов Хаббард и Биби провели расчеты сначала для неупорядоченной стационарной системы атомов, а потом полученные результаты обобщили на динамический случай. Основное соотношение, связывающее функцию отклика системы с функцией рассеяния нейтронов  $S(Q, \omega)$ , имеет вид:

$$S(Q, \omega) = \frac{1}{\pi\sigma} \cdot \frac{\hbar\omega}{1 - e^{-\hbar\omega/kT}} \cdot \frac{K''(Q, \omega)}{\omega}, \quad (1)$$

где  $\sigma$  — число атомов в единице объема;  $K''$  — мнимая часть функции  $K$ ;  $\hbar\omega = E_0 - E$ ;  $k$  — постоянная Больцмана.

Функция отклика системы выражается через функцию  $q(Q, \omega)$  и зависящую от  $Q$  характерную для данной системы частоту  $\omega_Q$ :

$$K(Q, \omega) = -\frac{\sigma Q^2}{m} \cdot \frac{q(Q, \omega)}{1 + \omega_Q^2 q(Q, \omega)}, \quad (2)$$

где  $m$  — масса атома.

Для применения соотношения (2) при исследовании заданной жидкости необходимо определить  $q(Q, \omega)$  и  $\omega_Q$ . Пусть  $v(r)$  — парный потенциал взаимодействия системы  $N$  атомов, образующих исследуемую физическую систему. Если предположить, что реакция системы на малый внешний потенциал определяется в основном продольными движениями, то можно получить [19]

$$\omega_Q^2 = \frac{\sigma}{m} \int \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} g(r) (1 - \cos Qz) dr, \quad (3)$$

где  $\sigma g(r)$  — функция распределения пар атомов [ $g(r)$  стремится к единице при  $r \rightarrow \infty$ ].

Функция  $q(Q, \omega)$  определяется соотношением

$$q(Q, \omega) = \int_0^{\infty} dt \int dr t g_s(r, t) e^{-iQr + i\omega t}, \quad (4)$$

где  $q_s(r, t)$  — функция автокорреляции.

При применении этого метода к описанию неупругого рассеяния нейтронов в простых жидкостях необходимо найти  $g(r)$ , т. е. тща-

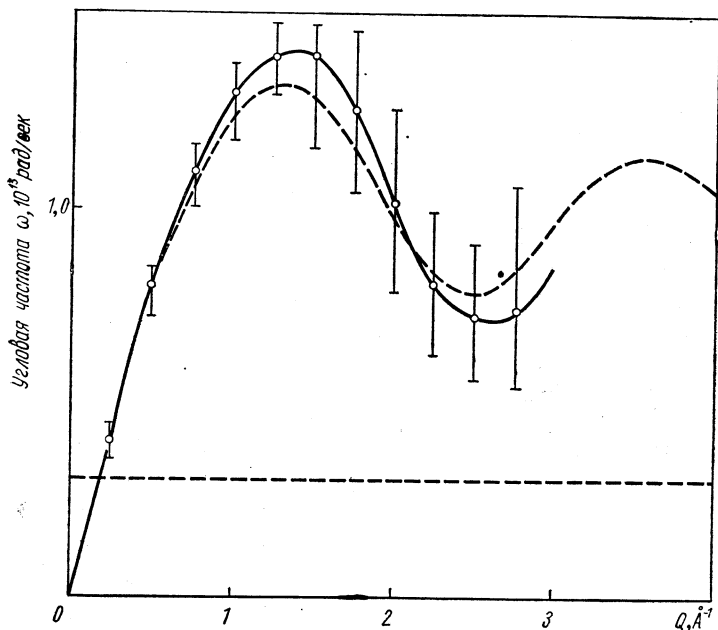


Рис. 4. Кривые  $\omega(Q)$  для жидкого аргона [19]:  
 — расчет по формуле (3); — приближенный расчет.

тельно измерить  $S(Q)$  для упругого когерентного рассеяния, а также функцию  $g_s(r, t)$ . Отсутствие необходимых экспериментальных данных заставило Хаббарда и Биби провести приближенные расчеты для функции  $\omega_Q$  и  $q(Q, \omega)$ . Что касается второй, то оценить точность проведенного приближенного расчета труднее. Для первой функции  $\omega_Q$  полученные результаты более убедительны.

Анализ произведения  $(\partial^2 v / \partial z^2) g(r)$ , где  $v$  — потенциал Ленарда—Джонса, а  $g(r)$  — экспериментально определяемая величина, показал, что произведение имеет резкий максимум на некотором расстоянии  $r_0$ , т. е. оно может быть аппроксимировано функцией  $A\delta(r - r_0)$ . На рис. 4 [19] представлены расчетные кривые  $\omega(Q)$  для жидкого

аргона. Расчеты были проделаны с помощью выражения (3) и с использованием указанной выше аппроксимации. Сравнение рис. 4 с рис. 5 [20], на котором представлены экспериментальные значения  $\omega(Q)$  для ряда жидких металлов, показывает, что теоретические ре-

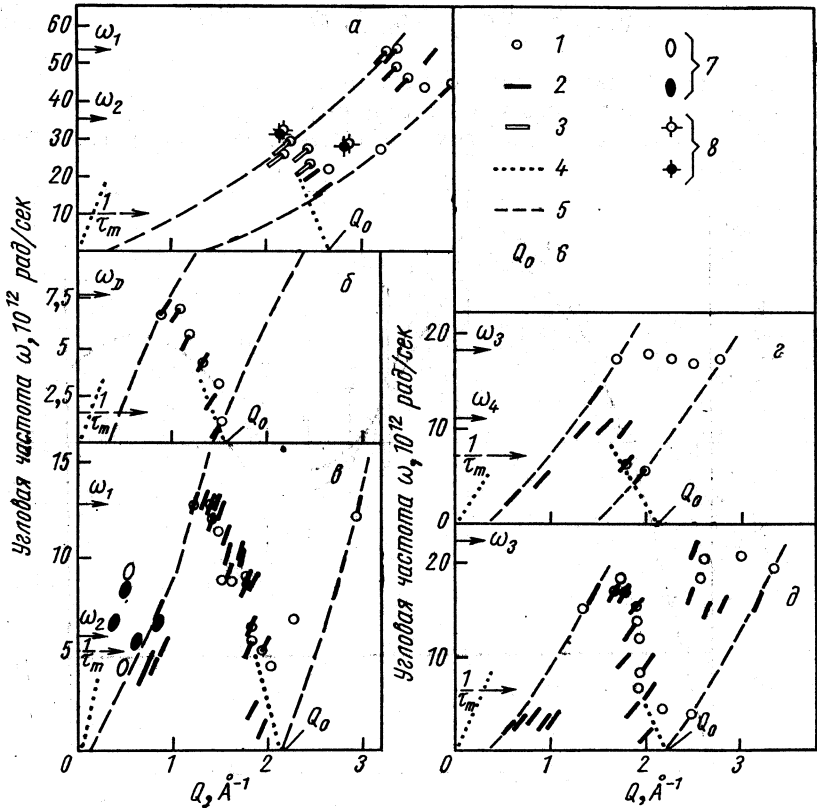


Рис. 5. Экспериментальные данные  $\omega(Q)$  для ряда металлов в твердом (поликристаллическом) и жидком состояниях [20]:

*a*—алюминий, жидкий 710° С и твердый 607° С; *б*—рубидий, жидкий 77° С, твердый 23° С; *в*—свинец; жидкий 360° С, твердый 310° С; *г*—висмут, жидкий 289° С, твердый 250° С; *д*—олово; жидкое 258° С, твердое 220° С; 1—пик в твердом теле; 2—пик в жидкости; 3—неидентифицированный пик в жидкости; 4—скорость звука в жидкости; 5—линии, ограничивающие область наблюдений; 6—главный максимум в структурном факторе; 7—данные Дорнера и др.; 8—данные Ларсона и др.;  $\omega_1$ —пик продольных колебаний;  $\omega_2$ —пик поперечных колебаний;  $\omega_3$ —частота оптических колебаний;  $\omega_4$ —частота акустических колебаний;  $\omega_D$ —частота Дебая.

зультаты Хаббарда и Биби позволяют лучше понять ход дисперсионных кривых простых жидкостей.

Следует отметить, что при исследовании коллективных движений в жидком свинце [21, 22] была сделана попытка объяснить ход дисперсионной кривой распространением гидродинамической теории на область относительно больших частот. Качественное согласие

было получено только в области  $Q < 2 \text{ \AA}^{-1}$ . Конечно, представляло бы интерес сопоставить эти данные с данными, вытекающими из указанных теоретических представлений [19]. В частности, было бы интересно более тщательно исследовать температурную зависимость коллективных движений.

При исследовании жидкого натрия анализ составляющей спектра, обусловленной неупругим некогерентным рассеянием нейтронов, проделан Рандольфом [13] в предположении, что коллективные

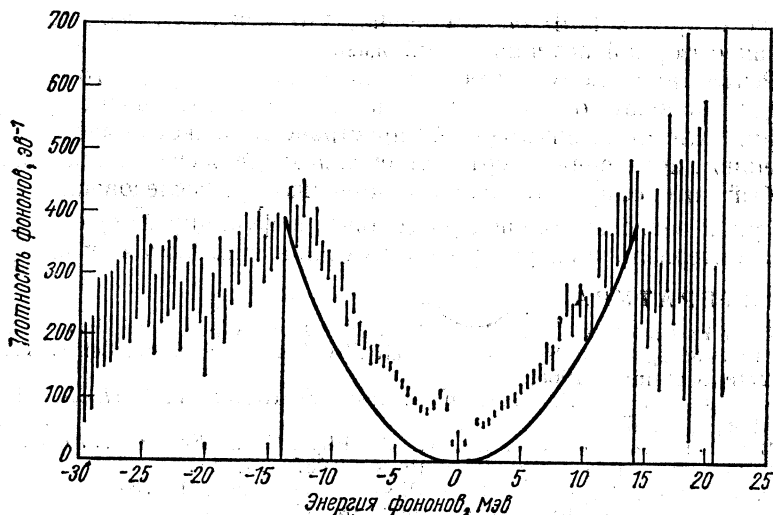


Рис. 6. Фононный спектр жидкого натрия при температуре  $102^\circ \text{C}$ :  
 ————— — дебаевский спектр при  $\theta = 170^\circ$ ,  $E_{\text{макс}} = 14 \text{ мэв}$ .

движения в этой жидкости аналогичны коллективным движениям в кубическом кристалле. Пользуясь выражением дифференциального эффективного сечения, полученным в однофононном приближении [23], Рандольф определил спектр фононов для жидкого натрия. Полученные данные хорошо согласуются со спектром Дебая при  $\theta = 162^\circ \text{K}$  (это значение выбрано на основе анализа дисперсионных соотношений твердого натрия, см. рис. 6 [13]). Результат носит только качественный характер из-за условий эксперимента (в частности, из-за присутствия многократного рассеяния и вклада когерентного рассеяния).

Более детальное рассмотрение спектра фононов выполнено Кокингом [12], который сопоставил экспериментальные данные с данными, вытекающими как из спектра, характерного для твердого натрия, так и из модели Игельстаффа и Скофилда для жидкого состояния. Тем самым он смог описать характерный для жидкого натрия спектр фононов.

Исходя из тех же экспериментальных данных, можно определить спектральную плотность, соответствующую функции корреляции скоростей [1, 11, 12]:

$$\tilde{Z}(\omega) = \frac{\omega^2 S_s(Q, \omega)}{Q^2} \Big|_{Q \rightarrow 0} \quad (5)$$

Игельстафф обратил внимание на то, что из анализа этой величины можно извлечь информацию о потенциале межатомного взаимодействия. Сравнением функции  $\tilde{Z}(\omega)$  и  $v(r)$  (с учетом осциллирующего потенциала для жидкого натрия [24, 25] и потенциала [6, 12] для жидкого аргона [26]) он установил, что максимум функции  $\tilde{Z}(\omega)$  связан с формой потенциальной ямы.

Результаты, полученные при исследовании жидкого натрия, свидетельствуют о том, что тщательное исследование области вокруг нулевой точки ( $\hbar\omega - Q$ )-пространства может привести к выявлению характерных черт коллективных движений в жидкостях. Особый интерес представляло бы, по-видимому, исследование температурной зависимости спектра фононов и функции  $\tilde{Z}(\omega)$  с охватом всего интервала температур от точки плавления до точки кипения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Egelstaff P. A. Current Problems in Neutron Scattering, p. 51 (Proceeding fo the Symposium held at C.N.E.N., Cassacia Center 24th — 27th September 1968).
2. Larsson K. E. Neutron Inelastic Scattering. V. 1, IAEA, Vienna, 1968, p. 397.
3. Breuil M., Tourand G. J. Phys. Chem. Solids., 1970, 31, 549.
4. Egelstaff P. A. Adv. Phys., 1967, 16, 147.
5. North D. M. e. a. A. J. Phys. Chem., 1968, 1, 784.
6. Plachek G. Phys. Rev., 1952, 86, 377.
7. Ascarelli P., Caglioti G. Nuovo cimento, 1968, 43, 375.
8. Caglioti G. Nuovo cimento Suppl., 1967, 1, 5, 1177.
9. Cooper M., Nathans R. Acta Cryst allogr., 1968, 24, 481.
10. Cocking S. J. Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids. V. I. IAEA, Vienna, 1963, p. 227.
11. Egelstaff P. A., Schofield P. Nucl. Sci. Engng., 1962, 12, 260.
12. Cocking S. J. Report AERE, R/5867, 1968.
13. Randolph P. D. Neutron Inelastic Scattering. V. 1, IAEA, Vienna, 1968, p. 449.
14. Vineyard S. H. Phys. Rev., 1958, 110, 999.
15. Singwi K. S., Sjölander A. Phys. Rev., 1960, 119, 863.
16. Oskotskii V. S. Sov. Phys. Solid. State, 1963, 5, 789.
17. Helfand E. Phys. Rev., 1960, 119, 1.
18. Larsson K. E., Dahlborg U., Jovic D. Inelastic Scattering of Neutrons. V. II, Vienna, IAEA, 1965.
19. Hubbard J., Beeby J. L. J. Phys. Chem., 1969, 2, 556.
20. Cocking S. J. Adv. Phys., 1967, 16, 189.
21. Cocking S. J., Egelstaff P. A. J. Phys. Chem., 1968, 1, 507.
22. Wignall G. D., Egelstaff P. A. J. Phys. Chem., 1968, 1, 519.
23. Турчин В. Ф. В кн. «Медленные нейтроны». Перев. с англ. Гл. 2, М., Госатомиздат, 1963, с. 187.
24. Paskin A., Adv. Phys., 1967, 16, 223.
25. Paskin A., Rahman A. Phys. Rev. Lett., 1966, 16, 300.
26. Rahman A. Phys. Rev., 1964, 136, 405.