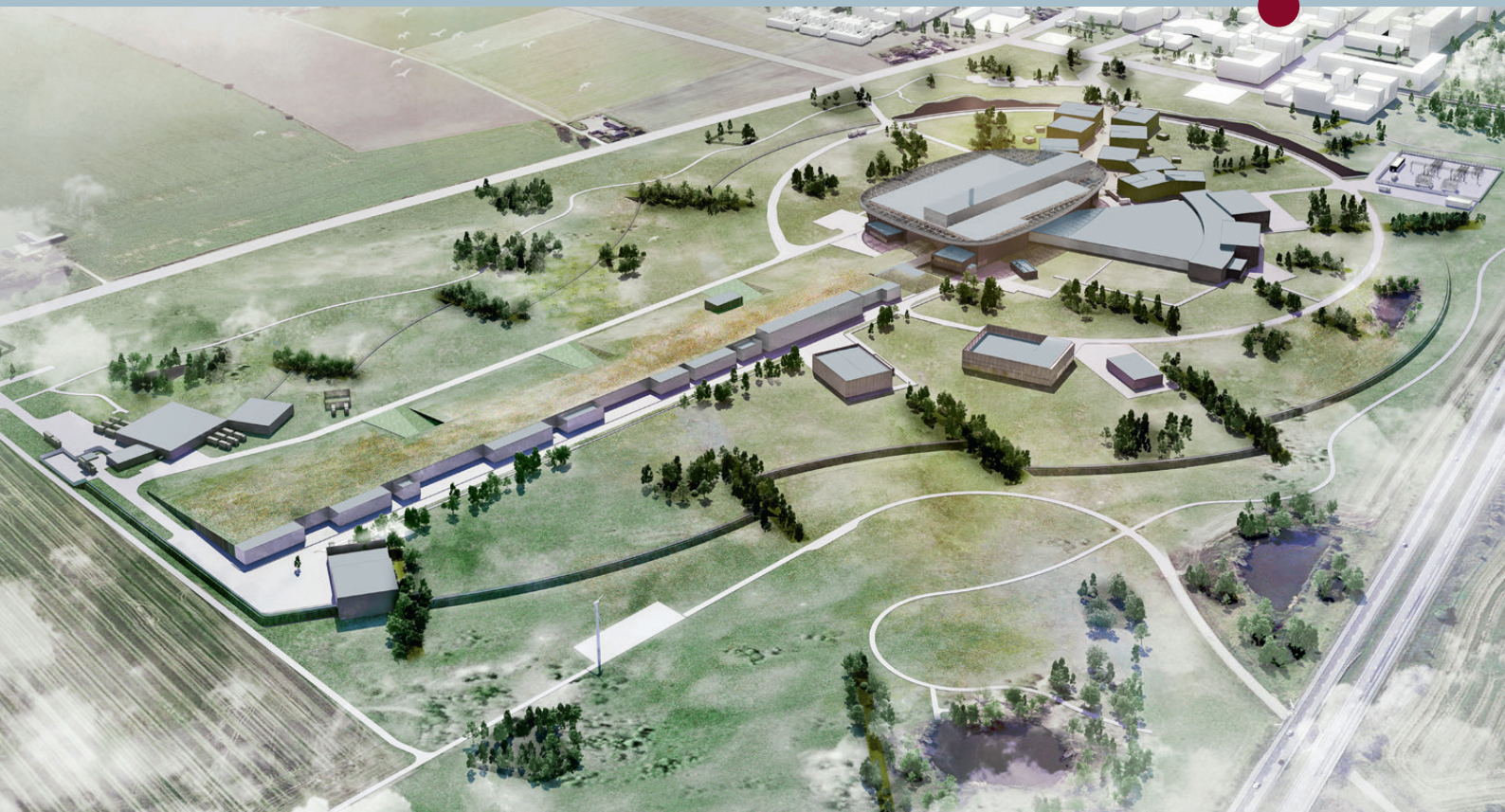




Temahæfte 2016



ESS European Spallation Source

Fremstilling og anvendelse
af neutroner 



INDLEDNING

Selvom verden har oplevet en fantastisk teknologisk udvikling gennem de seneste par hundrede år, er der stadig store samfundsmæssige udfordringer inden for områder som sundhed, fødevarer, energi, transport, klima og miljø.

En vigtig ingrediens i løsningen af samfundsproblemerne er udvikling af nye "intelligente" materialer. Som eksempler kan nævnes lettere byggematerialer, billigere solceller og bedre medicin. Disse typer materialer udvikles ofte på baggrund af en detaljeret forståelse af materialets sammensætning på molekylært og atomart niveau. Det er derfor vigtigt at have udstyr, der sætter forskerne i stand til at undersøge placering og bevægelse af atomer i materialer.

To beslægtede metoder til at foretage disse materialeundersøgelser er retningændring (også kaldet spredning) af neutron- og røntgenstråling. Ved brug af disse metoder – ofte i kombination med hinanden – er man i stand

til at undersøge mange forskellige materialer. Derved kan man besvare vigtige videnskabelige spørgsmål, der relaterer sig til de store samfundsudfordringer nævnt ovenfor. Fagligt dækker neutron- og røntgenmetoderne mange områder, fx fysik, kemi, biokemi, farmaci, biologi, geologi, arkæologi og ingeniørvidenskaberne.

Inden for få år kommer vi til at have to af verdens absolut førende anlæg af denne type inden for neutron- og røntgenstråling placeret i vores del af Europa – i Lund i Sverige. Anlægget MAX IV vil fra 2016 producere og måle røntgenstråling, og anlægget European Spallation Source (ESS) vil fra 2019 gøre det samme for neutronstråling (se faktabokse). Disse to anlæg vil uden tvivl få stor betydning for både forskning og samfund inden for de kommende årtier.

| | |
|---------------------------------------|----|
| EUROPEAN SPALLATION SOURCE – ESS..... | 4 |
| MAX IV-SYNKROTRONEN..... | 5 |
| NEUTRONEN..... | 8 |
| OPBYGNING AF ESS..... | 14 |
| MATERIALEFORSKNING MED NEUTRONER..... | 18 |

EUROPEAN SPALLATION SOURCE – ESS

ESS bliver verdens kraftigste facilitet til produktion af neutroner til forskningsformål. ESS er under opførelse i Lund i Sverige, mens det tilknyttede datacenter bliver placeret i København.

Neutronerne på ESS bliver frigjort ved spallation. Man bombarderer grundstoffet wolfram med protoner, der har hastigheder tæt på lysets. Herved udsendes hurtige neutroner, der derefter nedbremses til hastigheder på ca. 2000 m/s. Neutronerne udsendes i korte pulser, og man kan ved flyvetidsanalyse beregne hver enkel neutrons præcise hastighed.

Neutroner anvendes til at undersøge materialer af forskellige typer, fra krystaller og metal til bjergarter, plastic og proteiner. Neutronerne skydes ind i materialet, og man studerer de neutroner, der bliver spredt i nye retninger. Ud fra spredningsvinklen og neutronens hastighed før og efter spredningen kan man få værdifuld information om atomernes placering og bevægelse i materialet.

Når neutronerne bliver produceret, vil de bevæge sig i alle retninger. Det er derfor muligt at benytte adskillige opstillinger samtidig til at måle materialets egenskaber. Der er planlagt 22 forskellige opstillinger (kaldet instrumenter) på ESS. Tilsammen vil instrumenterne være i stand til at kunne udforske stort set alle typer materialer. Ved udgangen af 2015 var de første 16 instrumenter udvalgt ud fra forslag stillet af internationale forskere. Danske universiteter var kraftigt involveret i tre af de udvalgte instrumenter, og et fjerde dansk forslag blev slået sammen med et allerede accepteret instrument.

Efter planen vil ESS være i stand til at producere neutroner i slutningen af 2019. I 2023 åbnes faciliteten for forskerne, og fra 2028 skal ESS være helt klar til drift. Her vil der blive foretaget undersøgelser af materialer af forskellige forskergrupper fra europæiske universiteter og virksomheder.

Adgang til faciliteten vil foregå efter ansøgning, hvor forskningsprojektet kort beskrives. De bedste projekter udvælges og vil få tildelt måletid, varende fra få timer til adskillige dage. Eksperimenterne foretages af de brugergrupper, der har foreslået projektet, og som derfor må rejse til ESS for at udføre målingerne.

Alt data taget på ESS opbevares på datacentret i København. Analysen af data foretages med programmer leveret af datacentret og kan enten foregå i Lund, i København eller hjemme hos brugergrupperne. Man regner med, at alt ESS-data vil blive offentligt tilgængelig efter en periode på ca. et år. Virksomheders brug af ESS kan dog være omfattet af andre aftaler.

ESS koster 1,843 mia. euro i opførelse og vil have 140 mio. euro i årlige driftsomkostninger. Faciliteten bygges og drives af et konsortium af 17 europæiske lande. Danmark og Sverige er som værter hovedpartnere og betaler sammen med Norge 50 % af udgifterne til opførelsen. Derudover er de største bidragsydere Tyskland, Storbritannien og Frankrig med tilsammen 29 %. De andre partnere er Spanien, Italien, Schweiz, Polen, Tjekkiet, Ungarn, Estland og Litauen.

MAX IV-SYNKROTRONEN

MAX IV-synkrotronen er ved at blive færdiggjort i Lund lige ved siden af stedet, hvor ESS opføres. Denne facilitet bliver verdens kraftigste kilde til røntgenstråling.

Røntgenstrålingen på MAX IV produceres i en lagring, hvor elektroner med hastigheder nær lysets bliver styret af kraftige magneter. Strålingen skabes ved afbøjningen af elektronernes baner i magnetfeltene.

MAX IV skal benyttes til undersøgelser af materialer af næsten enhver type, nogenlunde som på ESS. De to faciliteter kommer til at supplere hinanden glimrende, idet røntgenstråling fx er bedst til at observere tunge grundstoffer, mens neutroner er bedre til de lette grundstoffer.

Som på ESS foregår målingerne på MAX IV ved ca. 20 opstillinger, der er placeret hele vejen rundt om lagringen. Også på MAX IV vil adgang til instrumenterne blive afgjort gennem projektansøgninger.

MAX IV kommer til at koste ca. 600 mio. euro og er et svensk projekt. Danmark bidrager til MAX IV gennem design og bygning af et af instrumenterne.

FORSKNING MED NEUTRON- OG RØNTGENSTRÅLING

I dette hæfte sætter vi fokus på den ene af de to teknikker – neutronstråling fra ESS. Lad os imidlertid først forklare forskelle og ligheder mellem røntgen- og neutronstråling til brug i materialeforskning.

Både røntgen- og neutronstråler kan beskrives som bølger, og bølglængden er af størrelsesordenen 0,1-1 nm, hvilket svarer til afstanden mellem atomer og molekyler i et materiale. Det kan derfor lade sig gøre for begge typer stråling at bestemme atomernes positioner. Hvordan dette sker, kommer vi ind på senere.

Røntgenstråling kan laves langt mere intens end neutronstråling. Man kan derfor hurtigere opnå meget præcise data, og man behøver kun at anvende meget små materialeprøver. Typiske prøvediametre til røntgen er i mikrometerområdet, hvor neutronstrålingens lavere intensitet kræver større prøver i millimeterområdet. Faktisk er det muligt at fokusere røntgenstråler ned

© CEA



til størrelser i nanometerområdet, så man enten kan studere materialer på nanoskala eller lave forskellige former for mikroskopi af større stykker materialer.

Røntgenstråling er god til at undersøge de tunge grundstoffer, hvorimod neutroner er nogenlunde lige gode til alle grundstoffer. I tilgift kan neutroner

kende forskel på forskellige isotoper af samme grundstof. Man benytter derfor ofte neutroner, når der er lette grundstoffer involveret – og især når der er tale om hydrogen. Det kan i mange tilfælde være en fordel at variere forholdet mellem almindelig hydrogen og "tung" hydrogen – deuterium – til at "afmærke" dele af organiske molekyler eller proteiner.



En måling af neutronens energi før og efter vekselvirkning med prøven kan give information om atomers og molekylers bevægelse, fordi energien går til at skabe gittervibrationer. Neutroner er meget bedre til dette formål end røntgen, fordi det kun kræver en lille energioverførsel at skabe gittervibrationer og neutronens kinetiske energi er meget mindre end røntgenstrålingens energikvanter - fotonerne.

Endvidere har neutronen ingen ladning og vekselvirker ikke elektromagnetisk som røntgenstråling gør. Neutroner kan derfor lettere gennemtrænge materialer, fx vakuumbeholdere, vægge til trykceller, ovne, elektromagneter, kryostater (beholdere, hvor man kan holde en meget lav temperatur) osv. Så man kan derved lave eksperimenter ved meget høje og lave temperaturer, høje tryk og kraftige magnetfelter. Man kan også lave gennemlysningseksperimenter (imaging) på prøver, der er mere end 10 cm tykke, fx dele af fly eller lastbiler.

Selvom neutronen ikke har nogen ladning, har den alligevel et magnetisk moment. Neutronen er derfor i stand til

at vekselvirke med de indre magnetiske felter fra materialet – typisk fra momenterne fra ioner af overgangsmetaller (fx V, Fe eller Cu). Via vekselvirkningen kan man bestemme de indre magnetiske egenskaber af materialer.

NEUTRONER KAN UNDERSØGE ET MATERIALE

En måde at undersøge et materiale på er altså at beskyde det med partikler. Problemet med fx alfakerner og protoner er, at de er elektrisk ladede, og de vil blive frastødt voldsomt, når de rammer ind i materialet. Ud over at neutroner som nævnt har let ved at trænge ind i et materiale, er deres vigtigste egenskab, at de kan støde ind i materialer uden at påvirke dem, hvis hastigheden er lav nok. Dette kaldes også elastisk spredning. Langsomme neutroner kan også foretage uelastisk spredning. Den energi, der er til rådighed, er dog så lav, at den ikke kan beskadige materialet, men nøjes med at frembringe vibrationer i det.

Generelt giver neutroners elastiske og uelastiske spredning, gennemtrængning og refleksion fra et materiale

værdifuld information om materialets struktur og indre bevægelse.

EKSEMPLER PÅ FORSKNING MED NEUTRONER

Atompositioner i krystaller. Den første undersøgelse, der foretages på ethvert nyt krystallinsk materiale, nyfødt fra kemilaboratoriet, er bestemmelse af atomernes placering i krystallen. Dette foretages altid først med røntgenstråling, men for yderligere detaljer kræves der ofte også neutronstråling. Hvis materialet indeholder hydrogen, er undersøgelser med neutroner essentielle, eksempelvis i forbindelse med materialer som $Mg(BH_4)_2$, der kan opbevare frit hydrogen til energilagring.

Bevægelse af atomer. Egenskaberne af mange materialer, fx varmeledningsevnen, er bestemt af, hvordan atomerne bevæger sig. Termoelektriske materialer kan omforme en temperaturforskel til elektrisk energi, men for at få god udnyttelse skal materialets varmeledningsevne være lav. Med neutroner kan man undersøge, hvad der skal til, for at dette bliver opfyldt. Glasser er en



form for yderst tykflydende væsker, som ikke størkner til en krystallinsk form. Dette medfører ret usædvanlige bevægelser af atomerne, som neutroner hjælper til at forstå.

Magnetiske materialer. Mange materialer indeholder ioner, der er magnetiske. Magnetiske materialer, der har en kraftig og permanent magnetisering, er en vital komponent i generatorer, fx til vindmøller. Råstofferne til generatormagneter produceres kun få steder i verden, så råvareforsyningen er sårbar. Derfor forskes der i nye typer magnetmaterialer, der kan fremstilles af andre billigere og mere tilgængelige grundstoffer.

I computerne harddiske anvendes der specielle magnetiske materialer i læse-skrive-hovedet. Det er de såkaldte "Giant Magnetoresistance"-materialer, der ændrer modstand, når de udsættes for et magnetfelt.

Superledere, hvorigennem meget kraftige elektriske strømme kan løbe helt uden modstand, bruges til at lave meget stærke elektromagneter, der

virker ved lave temperaturer. Superledere kan potentielt bruges i energiforsyningen, hvis man kan få dem til at virke ved stuetemperatur. Den superledende egenskab er koblet til ionernes magnetisme på en måde, man endnu ikke forstår. Det er formentlig nødvendigt at forstå, hvor superledningen kommer fra, for at kunne forbedre materialernes egenskaber.

I alle disse magnetiske materialer er neutroner helt afgørende for at kunne studere ionernes magnetisme.

Metaller og konstruktionsmaterialer. Metaller består af små krystalkorn, som grænser op til hinanden. Når metallet udsættes for ydre kræfter, som på en bærende flyvinge, kan kornene deformeres. Ved metaltræthed udvikler der sig sprækker mellem kornene, som vokser, indtil metallet går i stykker. Neutroner kan bruges til at studere deformationen af krystalkorne og til at se sprækker vokse, så man bedre kan forstå mekanismer bag metaltræthed. Neutroner kan også bruges til undersøgelser af defekter og andre strukturer i materialer, fx cement og be-

ton. En større forståelse af defekter kan forøge sikkerheden i forbindelse med konstruktioner og minimere materialeforbruget.

Bløde materialer. Adskillige organiske materialer består af samlinger af lange molekyler (fx polymerer), som er flettet sammen på en kompliceret og delvist tilfældig måde. Et typisk eksempel på dette er plastik, som kan have mange forskellige egenskaber, afhængigt af hvilken type polymer der anvendes, og hvordan polymerkæderne er organiseret. Med neutroner kan man studere, hvordan de enkelte polymermolekyler ser ud, og hvordan de er organiseret i forhold til de andre molekyler.

Biologiske strukturer. Molekylers og proteiners funktion hænger meget stærkt sammen med deres form og indre struktur. Det er derfor vigtigt at kunne bestemme, hvor de enkelte atomer og funktionelle grupper af atomer er placeret. En bedre forståelse af dette kan føre til, at man kan fremstille nye typer medicin, som er baseret på proteiner i stedet for små molekyler – hvilket vil føre til større effekt af medicinen og færre bivirkninger. Et eksempel på proteinbaseret medicin er insulin. Neutroner bruges (i kombination med røntgenstråling) til at finde ud af, hvordan de enkelte atomer i proteinkrystaller er organiseret. Man kan også undersøge, hvordan proteiner opfører sig i opløsning, og hvordan strukturen er i biologiske overflader såsom membraner.

Alle eksempler ovenfor er hentet fra forskergrupper på danske universiteter. Danmark står generelt stærkt i den internationale med forskningneutron- og røntgenstråling.

I de følgende afsnit vil vi gå mere i detaljer med, hvordan ESS virker, og hvordan man undersøger materialer med neutroner.

NEUTRONEN

NEUTRONENS FYSISKE EGENSKABER

Neutronen har en masse på $1,6749 \cdot 10^{-27}$ kg og en udstrækning på 10^{-16} m. Den er 1,0014 gange tungere end protonen. Neutronen består af tre kvarker, to down- og én up-kvark, med en samlet neutral ladning. Neutronens spin er $1/2$, ligesom for protonen.

Vi kender bedst neutronen fra atomkernerne. Alle atomkerner består af et vist antal protoner og neutroner, der er bundet sammen af de stærke kernekrafter.

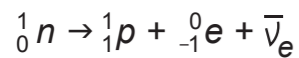


En He-4 kerne består af to neutroner og to protoner. Generelt angiver man kerner som

Antal nukleoner
Antal protoner (Grundstofsymbol) eller med symboler ${}^A_Z X$

En egenskab ved neutronen, som er rigtig vigtig i sammenhæng med materialeforskning, er, at neutronen har et magnetisk moment ($-9,66 \cdot 10^{-27}$ J/T). Med andre ord: Neutronen er i sig selv en lille magnet, der kan påvirkes af andre magnetfelter.

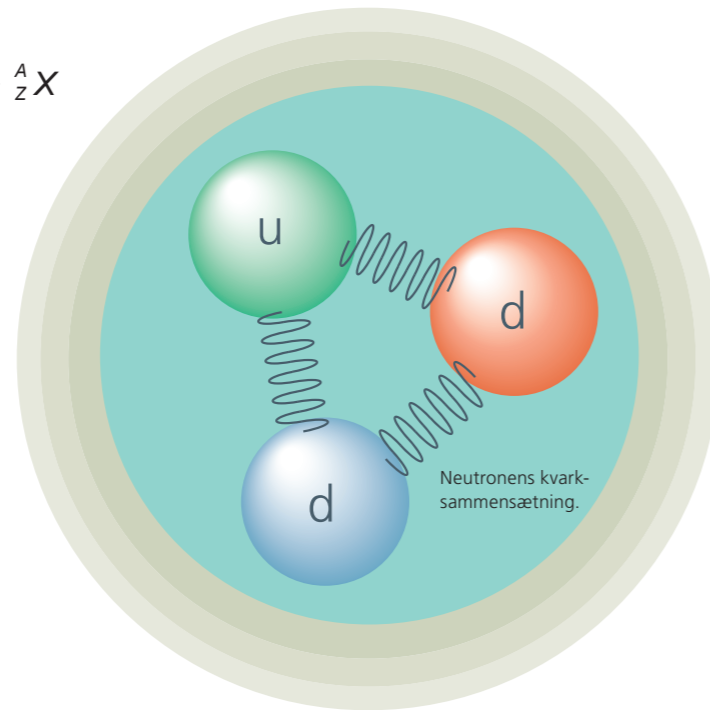
En fri neutron er en ustabil radioaktiv partikel med en halveringstid på 14,7 min. I henfaldsprocessen omdannes neutronen til en proton, en elektron og en antineutrino.



Den svage kernekraft er ansvarlig for dette henfald.



Linda Udby (længst th.) og studerende fra Københavns Universitet udfører neutroneksperimenter på Paul Scherrer Institut i Schweiz.



EN KORT HISTORIE OM NEUTRONENS OPDAGELSE

Første skridt på vej mod opdagelsen af neutronen var opdagelsen af atomets struktur. Elektronen blev opdaget i 1896 via forsøg med katodestråling. Fysikeren Ernest Rutherford (1871-1937) udførte efterfølgende forsøg med beskydning af guldfolie med heliumkerner (alfapartikler fra radioaktive henfald). Han observerede, at nogle He-kerner blev reflekteret fra guldfoliet på en sådan måde, at man kunne konkludere, at atomets kerne var meget kompakt, positivt ladet og havde en meget lille udstrækning (10^{-15} m).

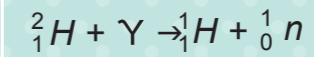
I slutningen af 1910'erne blev der udført en række eksperimenter, som førte til erkendelsen af, at atomets kerne består af protoner.

Vejen til opdagelsen af neutronen forløb over mange år via forskellige eksperimenter og teoretiske overvejelser. Eksistensen af neutronen blev endeligt fastlagt i 1932 – altså nogen tid efter kvantefysikkens opdagelse, hvor Niels Bohr (1885-1962) kom med sin teori om atomet i 1913. Allerede tidligt vidste man, at heliumkernen samlet set havde to positive elementarladninger, og at den havde en masse svarende til fire protoner. Dette forklarede man ved, at kernen bestod af fire protoner og to elektroner, altså at der befandt sig elektroner inde i kernen. I dag ved vi, at heliumkernen består af to protoner og to neutroner, men til at starte med troede man altså, at neutronen blot var et tæt forbundet elektron-proton-par. Teorien var dog ikke helt god og harmonerede ikke med forskellige andre resultater inden for den dengang nye kvantefysik.

Eksempelvis vidste man ud fra eksperimenter, at nitrogenkernen ${}^{14}_7 N$ havde et heltalligt spin, men eftersom elektroner og protoner havde et halvtalligt spin, burde denne kerne også have et halvtalligt spin, hvis den bestod af 14 protoner og 7 elektroner. Bohrs model af hydrogenatomet var også veletableret og kunne ikke bringes til at passe ind i rammerne af den nye måde at koble elektroner og protonen sammen i en neutron.

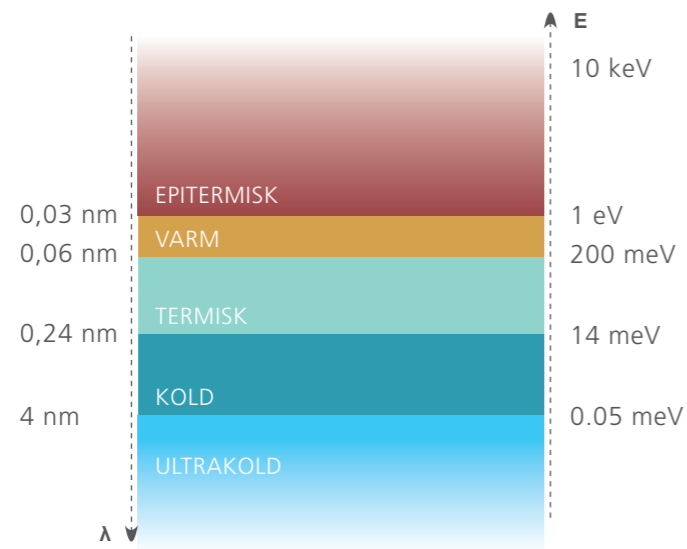
Et af de eksperimenter, som var med til at fastslå neutronens eksistens, var studiet af alfastråling på beryllium. Her konstaterede man, at der blev udsendt ikke ladet stråling, der let kunne trænge gennem materialer. Først antog man, at der var tale om gammastråling. Men da man sendte den ukendte stråling ind mod paraffin (med et højt indhold af hydrogen), konstaterede man, at der blev udsendt protoner med en energi på 5,3 MeV. Hvis gammastrålingen var ansvarlig for dette, skulle den ifølge teorien have en urimeligt høj energi. Igen kunne man her konstatere, at en partikel med en neutral ladning og en masse på størrelse med protonens måtte være i spil. Men stadig havde man opfattelsen af, at partiklen var en proton og en elektron bundet til hinanden.

Den endelige erkendelse af, at neutronen var en elementarpartikel, kom, da man undersøgte processen:



Her blev gammastråling fra radioaktive henfald sendt ind i en deuteriumgas. Man fandt her, at gammastråling med energien i området 1,8-2,6 MeV gav anledning til produktion af neutroner. Ud fra masserne af deuterium og protonen, og den involverede kinetiske energi, kunne man fastslå neutronens masse m_n til at være større end 1,0077 u og mindre end 1,0086 u. Neutronens masse var altså større end protonens ($m_p = 1,0073$ u), og den var også større end den bedst estimerede værdi for massen af det tænkte proton-elektron-par. Ud fra disse betragtninger fastslog man så, at neutronen var en elementarpartikel. Den engelske eksperimentalfysiker James Chadwick (1891-1974) tilskrives opdagelsen af neutronen i 1932, hvilket senere blev belønnet med Nobelprisen i fysik.

Kilde: *The Neutron and the Bomb*, Andrew Brown, Oxford University Press, 1997.



Figuren viser sammenhængen mellem neutronernes bølglængde og deres energi sammen med en sproglig benævnelse (1 eV = 1,602·10⁻¹⁹ J).

NEUTRONEN SOM BØLGE

Ligesom alle andre atomare partikler har neutronen en bølgenatur. Sammenhængen mellem neutronens bølglængde (også kaldet de Broglie-bølglængden) og dens fart er givet ved:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_n \cdot v}$$

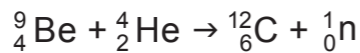
Her er h Plancks konstant, 6,626069·10⁻³⁴ J·s, m_n er neutronens masse, v er farten i m/s, og p er neutronens bevægelsesmængde.

| Bølglængde nm | Fart m/s | Neutronens kinetiske energi eV |
|---------------|----------|--------------------------------|
| 0,01 | 39600 | 8,19 |
| 0,1 | 3960 | 0,0819 |
| 1 | 396 | 0,000819 |

HVORDAN LAVER MAN NEUTRONER?

Det er ikke muligt at opbevare neutroner med hastigheder passende til materialeforskning, bl.a. fordi de er elektrisk neutrale, så de har en tendens til at vandre gennem materialer. Herudover forsvinder de relativt hurtigt som følge af neutronens naturlige henfald. Da man ikke kan opbevare neutroner, bliver man nødt til løbende at kunne producere dem.

En klassisk måde at producere neutroner på er via processen:



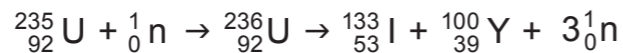
Her skydes heliumkerner ind på beryllium, hvorved der dannes kulstof samt en neutron.

Heliumkernerne kommer fra henfald af et radioaktivt stof (fx Ra-222 eller Po-210).

Denne proces udnytter man i undervisningsneutronkilder. Po-210 med en blanding af beryllium blev også brugt som en neutronstarter i Hiroshima-bomben.¹

NEUTRONER VIA FISSION

Kernereaktorer producerer neutroner. Dette sker ved fission, hvor man via beskydning af U-235 med en neutron gør kernen ustabil med efterfølgende henfald til to-tre neutroner. Eksempel:



I eksemplet spaltes uran til jod og yttrium. Det er blot et af mange reaktionsprodukter.

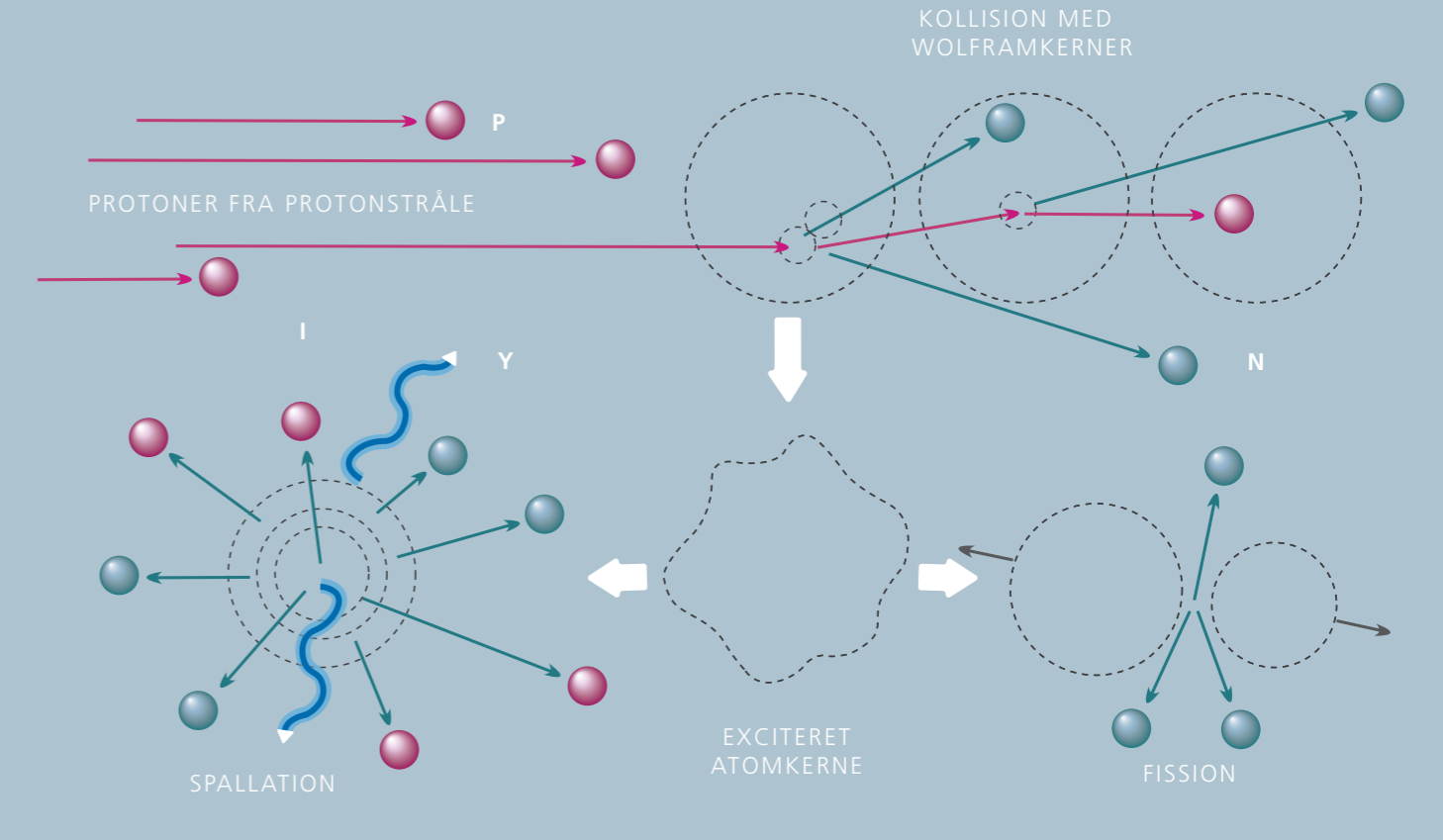
Den ene neutron anvendes til at beskyde en anden U-235-kerne (kædereaktion), mens de overskydende neutroner kan anvendes, som man ønsker, fx til materialeforskning. Ved kernekraftvær-

ker til produktion af elektricitet bliver der ikke lavet materialeforskning, fordi kernereaktorer til de to anvendelser har helt forskellig opbygning.

NEUTRONER VIA PROTON-BESKYDNING

På ESS dannes neutronerne ved protonbeskydning. Protoner accelereres op til en høj energi (2 GeV). Når protonerne med høj energi rammer en "stopklods" – et "target" på engelsk – bliver der produceret en lang række forskellige partikler, lige fra de mere eksotiske myoner og pioner til elektroner, sekundære protoner, fotoner og neutroner. Som følge af sammenstødet efterlades targetmaterialets kerner ydermere i en højt exciteret tilstand. Kernerne sønderdeles efterfølgende til mindre kerner under udsendelse af neutroner. Den sidstnævnte proces kaldes spallation, og det er den, som giver den store produktion af neutroner.

SPALLATIONSPROCESSEN VED ESS



Figuren viser, hvordan protoner (røde partikler) skyder neutroner (mørke partikler) ud af atomkerner. Atomkernen exciteres og henfalder derefter enten via spallation eller via fission.

Der findes en række forskellige materialer, som kan bruges som spallation-target, men det er svært at udvælge det helt rigtige materiale. Man skal overveje, hvordan det kan afkøles, om der i processen skabes problematiske radioaktive isotoper, om materialet kan holde til påvirkningen fra protonstrålen osv.

Typiske materialer er kviksølv, wolfram og bly. Ved ESS er valget faldet på et wolfram-target.

SPALLATIONSPROCESSEN

Spallation er en fællesbetegnelse for de komplicerede processer, der sker, når en energirig (E ≥ 1 GeV) nukleon (proton eller neutron) rammer en kerne. Faktisk er det ikke helt rigtigt at sige, at eksempelvis en proton rammer en wolframkerne, fordi den kun rammer en del af den, og det er netop pointen.

I mange tilfælde er det praktisk at tænke på protonen som en partikel, men kvantefysikken har lært os, at enhver partikel også har en bølgeførløstning (og vice versa). Enhver partikel har således en bølglængde, de Brog-

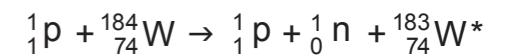
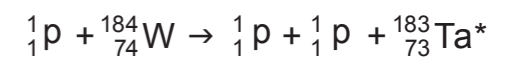
lie-bølglængden, som er et mål for rækkevidden af dens vekselvirkning. De Broglie-bølglængden har den interessante egenskab, at den afhænger af partiklens (eller "bølgens", om man vil) bevægelsesmængde, og dermed dens energi.

For 2-GeV-proton ved ESS betyder dette, at protonens rækkevidde er λ = 6·10⁻¹⁶ m. Kerner er større, og i særdeleshed er wolframkerner større, omkring 10⁻¹⁴ m. En proton, der rammer en wolframkerne, vekselvirker derfor ikke med kernen som et hele, men reelt kun med enkelte nukleoner i kernen. Den første del af spallationsprocessen kaldes den "internukleare kaskade", hvor enkelte nukleoner så sige "sparkes" ud af kernen. Hver enkelt vekselvirkning mellem en indkommende proton og en eller flere nukleoner i kernen er kompliceret at formulere rent matematisk. I praksis anvendes målingsbaserede computermodeller til at forudsige, hvor mange neutroner og protoner der frigives, og med hvilke energier. Modellerne forudsiger, og målinger har bekræftet dette, at eksempelvis

2-GeV-protoner, der rammer wolfram, giver anledning til udsendelse af neutroner og protoner med energier fra 20 MeV og helt op til 2 GeV.

De hyppigst forekomne energier ligger i den lave ende af intervallet, og hver 2-GeV-proton, der rammer et wolfram-target, giver i gennemsnit anledning til, at hele 36 neutroner frigøres – faktisk er det netop det faktum, der sammen med nogle fordelagtige materialegenskaber, er forklaringen på, at man har valgt at bygge ESS' target af wolfram.

Et par eksempler er reaktioner, hvor henholdsvis en proton og en neutron bliver skudt væk fra wolframkernen:



MODERATION

Neutroners kollision med tunge kerner sker ligesom kollision med en væg.

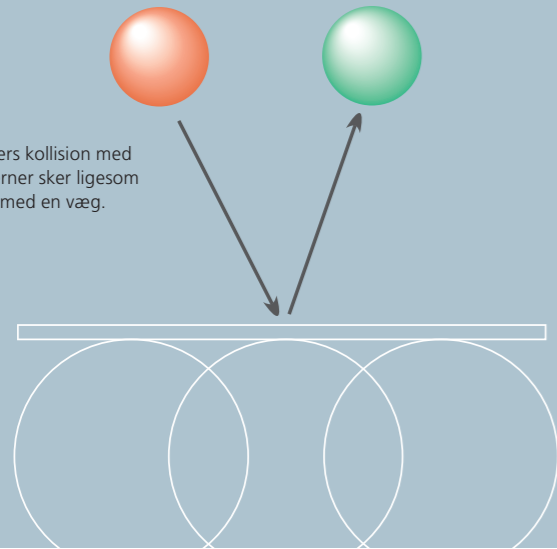


Illustration af moderation, der viser, at neutronens fart bliver dæmpet ved sammenstødet med andre kerner.

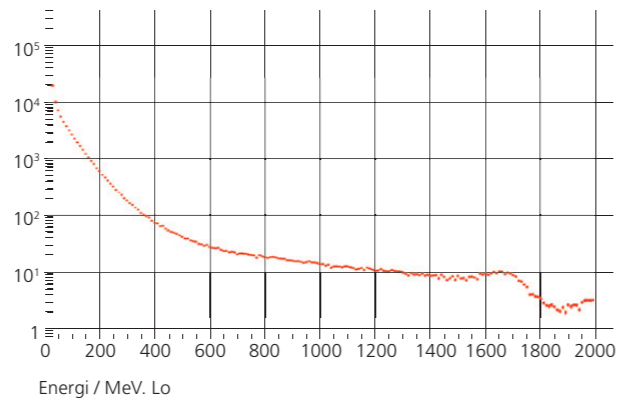
MODERATION

Når neutronerne produceres, har man kun meget lidt kontrol over, hvilke energier neutronerne udsendes med. Typisk vil man have et spektrum af forskellige neutronenergier.

I mange eksperimenter er det vitalt at arbejde med netop én veldefineret neutronenergi. Hvis man skal udforske krystalstrukturer i materialer, har man brug for en bølglængde for neutronen på omkring 0,1 nm. Dette svarer til omkring 0,082 eV. Til andre anvendelser skal man bruge neutroner med endnu lavere energier, ned til 0,001 eV. Neutroner, der udsendes fra fission eller højenergikollisioner, har energier i størrelsesordenen MeV. Man har altså brug for at sænke neutronernes fart voldsomt.

For at bremse neutronerne sendes de gennem en såkaldt moderator. En moderator er velkendt fra kernekraftværker. Her har man også behov for at nedbremse neutronerne fra fission for at øge sandsynligheden for, at neutronerne opfanges og forårsager fission i en ny kerne. En typisk moderator i kernekraftværker er tungt vand, men det kan også være grafit.

Generelt er det sådan, at en neutron hurtigst taber sin energi ved at støde ind i partikler med nogenlunde samme masse. Man kan bruge en mere dagligdags situation til at illustrere dette. Hvis man kaster en bold ind mod noget tungt, fx en væg, vil den tabe lidt af



Energispektrum (simuleret) af neutroner udsendt ved sammenstød i et spallation-target. Enheder på den vandrette akse er neutronenergi/ MeV. Den lodrette akse: intensitet/ arbitrære.

sin energi, men den vil dog blive sendt retur med en fart, der ligner den oprindelige. Hvis bolden derimod støder ind i bolde med nogenlunde samme masse, vil den overføre mere energi til de andre bolde. Derved bliver bolden hurtigere bremset op. Som sidste eksempel kan man forestille sig, at bolden støder ind i nogle meget lette balloner. Her vil ballonerne bare blive skubbet til side, og i denne situation vil bolden blive bremset langsomt op.

På ESS anvendes der hydrogenholdige moderatører. H_2O anvendes til termiske neutroner ($< 0,2$ eV), og flydende H_2 (der kan holdes flydende ved ca. 25 K) anvendes til at moderere neutronerne til det kolde energispektrum.

© ESS

Materialers opbygning som krystaller. Til venstre ses en enkelt enhedscelle, hvor a, b, og c angiver cellens kantlængder. Med rød og blå er angivet forskellige gitterplaner. Til højre ses, hvordan enhedsceller kan stables og danne en krystal.



OPBYGNING AF ESS

ACCELERATOR, TARGET, MODERATOR OG INSTRUMENTER

Den største enkelte komponent på ESS er den lineære protonaccelerator, der er næsten 600 m lang og fylder hele venstre del af figur 1. Acceleratoren er opbygget af en ionkilde og accelerationstrin med forskellige fokuseringsmekanismer til protonstrålen.

I ionkilden produceres der H⁺-ioner (protoner). I de forskellige accelerationstrin er der placeret nogle radiofrekvens-beholdere (såkaldte RF-kaviteter), som kan opbygge et varierende elektrisk felt vha antenner. Antennerne skifter polaritet, sådan at protoner-

nes energi forøges ved hver kavitet. Antennernes frekvens skal indstilles i forhold til typen af partikler, der skal accelereres, og længden af kaviteterne. For protonerne på ESS er frekvenserne henholdsvis 352,21 og 704,42 MHz.

Protonerne opnår hurtigt en hastighed tæt på lysets, og ved udgangen af acceleratoren har de en energi på 2,0 GeV. Ionerne bevæger sig altså med en relativistisk hastighed, hvor sammenhængen mellem masse, hastighed og energi er givet ud fra den specielle relativitetsteori (se boks).

Protonerne sendes af sted i 2,86-ms-klumper (bunches) 14 gange pr. sek. med en strømstyrke på 62,5 mA i de enkelte klumper.

Hele acceleratoren holdes konstant ved et lavt tryk på 0,001 Pa, for at protonerne har uhindret passage undervejs.



Prototype af ESS-kavitet, fremstillet af CEA Saclay.

Basale formler fra den specielle relativitetsteori, som man bruger for hastigheder tæt på lysets hastighed c , men som er gyldige for alle værdier af hastigheden v :

Massen af en partikel i bevægelse:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c}$$

m_0 er hvilemassen af partiklen.

Energien af en partikel i bevægelse:

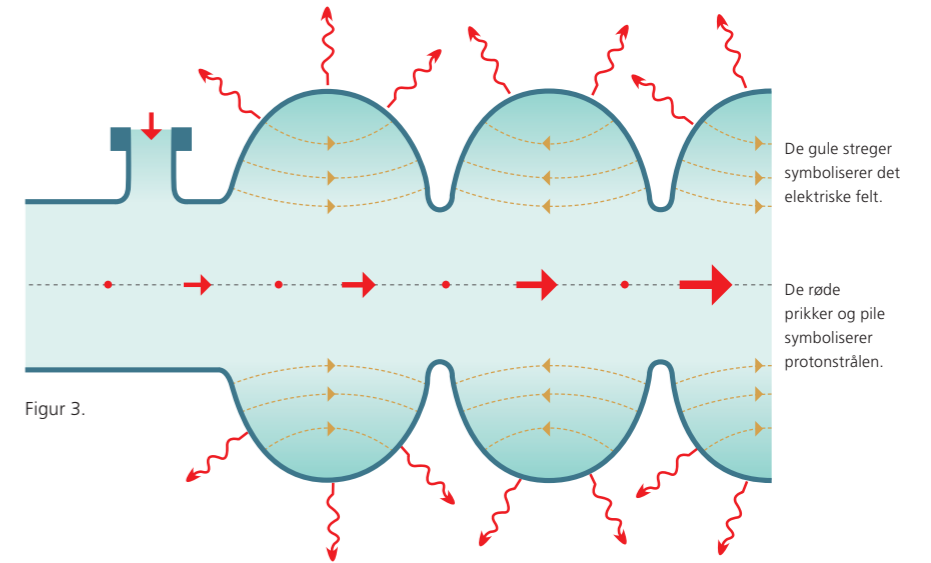
$$E = mc^2$$

Partiklens bevægelsesmængde:

$$p = m \cdot v$$

Sammenhæng mellem energi og bevægelsesmængde:

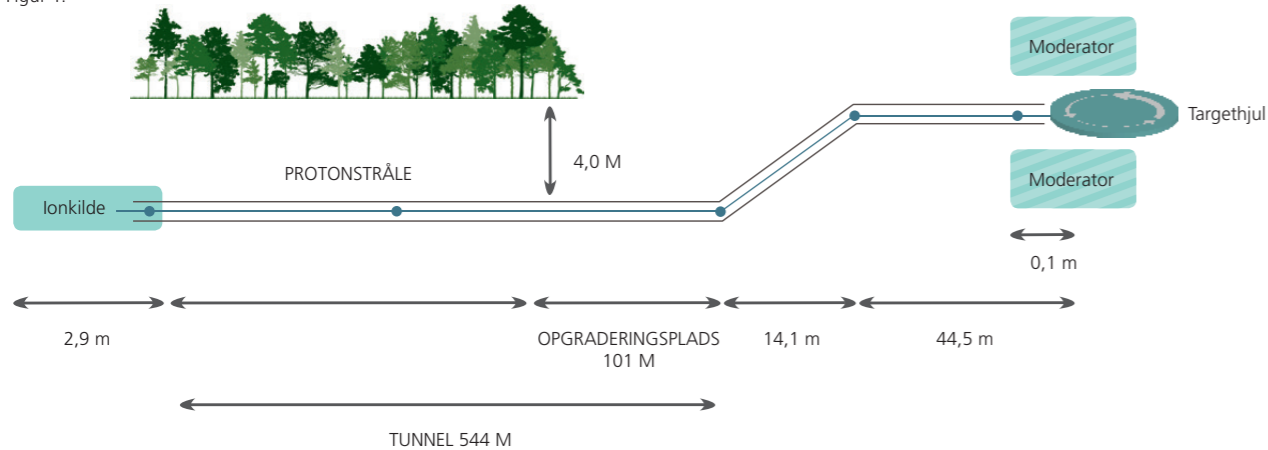
$$m_0 \cdot c^2 = \sqrt{E^2 - p^2 c^2}$$



Figur 3.

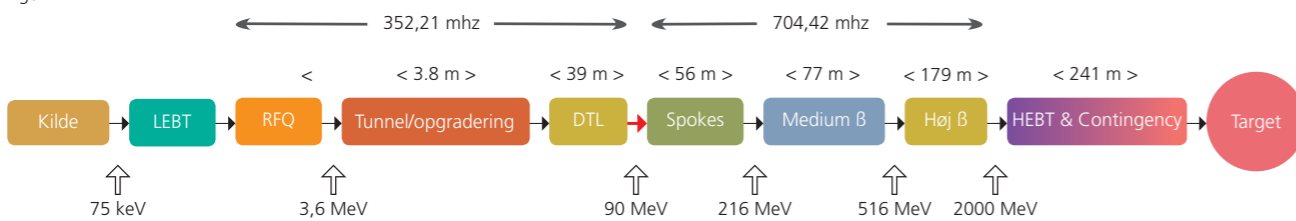
Figuren viser en RF-kavitet, hvor protonerne accelereres i et varierende elektrisk felt.

Figur 1.



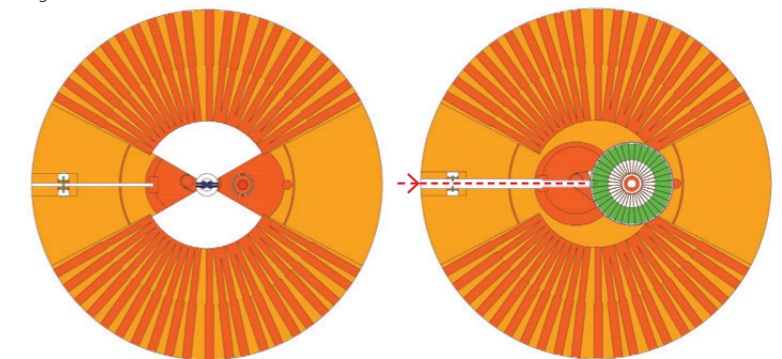
Figuren viser dimensionerne i acceleratoren. Det meste af acceleratortunnelen ligger under jorden. Figuren er ikke i korrekt størrelsesforhold.

Figur 2.



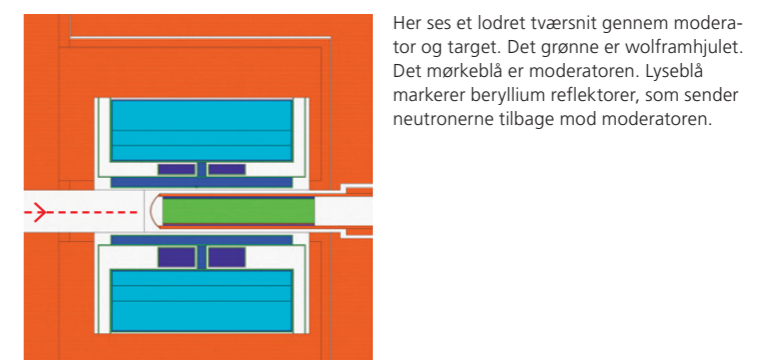
Ionkilden producerer en protonstråle, der transporteres gennem Low Energy Beam Transport (LEBT) til Radio Frequency Quadrupole (RFQ), hvor strålen bundtes og accelereres til 3,6 MeV. I Medium Energy Beam Transport-sektionen (MEBT) diagnosticeres bundterne og optimeres til yderligere acceleration i Drift Tube Linac (DTL). Det første superledende afsnit består af 26 kaviteter (SPK) ($\beta = 0,50$, hvor β er defineret som v/c). Herefter accelereres protonerne til $\beta = 0,67$ af 36 Medium Beta Linac-kaviteter (MBL). Endelig accelereres protonerne til $\beta = 0,86$ af 84 High Beta Linac-kaviteter (HBL). Efter acceleration transporteres protonbundterne til target gennem High Energy Beam Transport-sektionen (HEBT).

Figur 4.



To horisontale tværsnit af kollisionsområdet i ESS, taget i forskellige højder. Til venstre i centrum ses moderatoren (blå). Herfra sendes neutronerne videre i de forskellige kanaler (mørkeorange). Til højre (lavere højde) ses protonstrålerøret (stiplet rød) og targethjulet (grøn).

Figur 5.

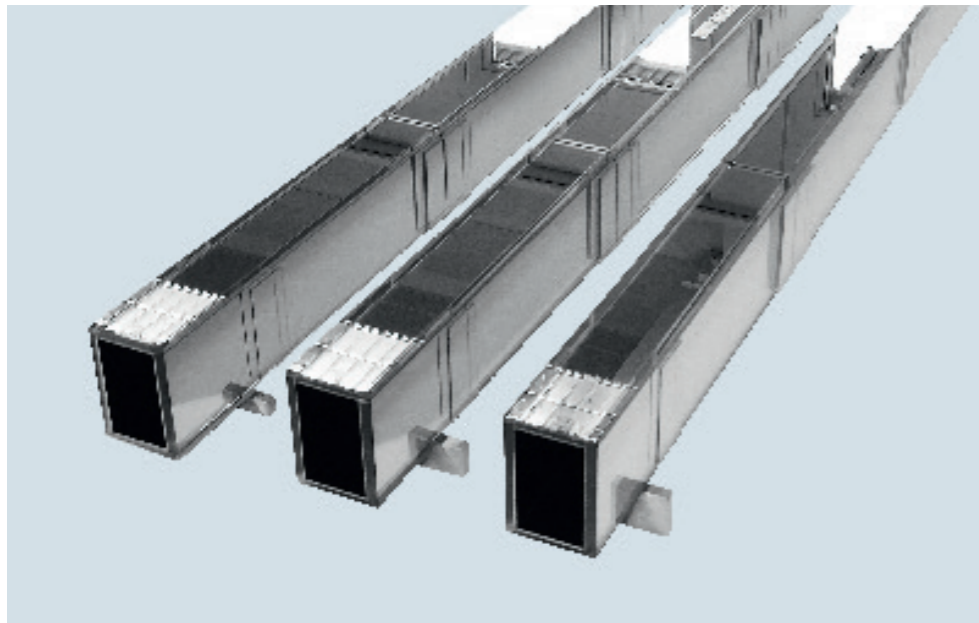


Her ses et lodret tværsnit gennem moderatoren og target. Det grønne er wolframhjulet. Det mørkeblå er moderatoren. Lyseblå markerer beryllium reflekterer, som sender neutronerne tilbage mod moderatoren.

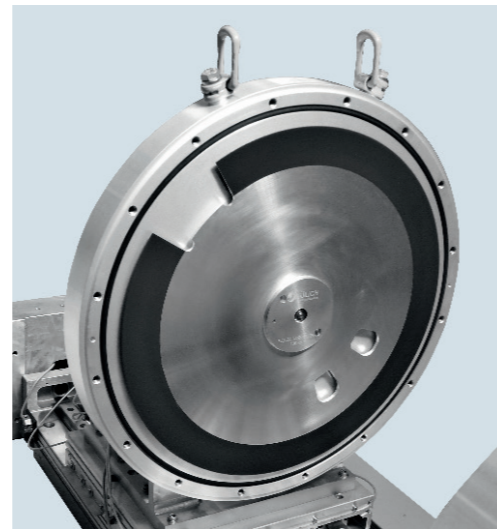
Targetet er et stort hjul på 2,5 m i diameter (se billede s. 13), der er sat sammen af mange små wolframstave. Hjulet drejer rundt 25 gange i minuttet, hvilket sikrer, at varmen fra kollisionerne fordeles bedst muligt. Hele hjulet køles konstant af en heliumgas under højt tryk, der ledes mellem wolframstavene. Protonerne skyder ind i targetet og afsætter energi med en effekt på gennemsnitligt 5 MW, så uden køling ville targetet blive ødelagt hurtigt af varmen.

Bombardementet af targetet er voldsomt belastende for materialet, og det skønnes, at hjulet skal skiftes hvert femte år.

Over og under hjulet sidder der en moderator, og fra moderatorerne sendes neutronerne via lange rør til målestationerne. Se figur 5.



De tynde neutronreflekterende spejle bliver pådampet meget plant glas, som igen monteres på de indre vægge i et rektangulært "rør" af stål. Billedet er fra SwissNeutronics.



Et typisk absorberhjul til en roterende chopper. Hjulet er bygget af et meget neutronabsorberende materiale (den sorte ring), så neutroner kommer kun igennem, når udskæringerne står ud for åbningen af neutronguiden.

NEUTRONTRANSPORT Gennem Neutronguides

For at kunne bestemme neutronernes hastighed tilstrækkeligt præcist er flyvelængden temmelig lang – fra 20 m til 170 m afhængigt af typen af instrument. Dette vender vi tilbage til i afsnittet "Instrumenternes placering på ESS".

Hvis man lod neutroner flyve frit mellem moderator og prøve, ville kun meget få af dem nå frem. Som ved al anden stråling vil intensiteten af neutroner nemlig være proportional med $1/r^2$, hvor r er afstanden fra moderatoren. Dette gør intensiteten meget lille på de store afstande. Af denne grund byggede man op til 1970'erne altid neutroninstrumenterne så tæt på kilden som muligt (højst 10 m væk).

Til transport af neutroner benytter man i dag neutronguides, som er rør af neutronspejle. Mange materialer har et mindre brydningsindeks for neutroner end vacuum har, og man kan derfor få totalrefleksion af neutronerne, hvis indfaldsvinklen i forhold til neutronspejle-nes sider bliver mindre end en vis kritisk vinkel (se også afsnittet om reflektivitet). Det oftest benyttede materiale er nikkel. Her er den kritiske vinkel $0,10^\circ$ for neutroner med bølglængde på 0,1 nm og $1,00^\circ$, hvis bølglængden er 1 nm.

Man benytter Ni-spejle til at lave neutronguides ved at sammenkoble fire

lange spejle. Neutronguides konstrueres af guidesektioner på 0,5-1 m, starter få meter efter moderatoren og slutter ca. 0,5 m før prøven. Således vil neutroner kunne reflekteres mange gange og derved til sidst ende fremme ved prøven, som derfor oplever en langt højere neutronintensitet. Princippet bag neutronguiden minder meget om lysleder-kabler.

Ved at lave neutronspejle af skiftende lag af nm-tykt nikkel og titan kan man lave "superspejle", der kan reflektere ved højere vinkler. Den kritiske vinkel er nu $m \cdot \theta_c$, hvor m er et tal imellem 1 og 7, afhængigt af hvor mange Ni-Ti-lag der er anvendt. Den endelige formel for den kritiske vinkel bliver:

$$\theta_c = 1,00^\circ \cdot m \cdot \lambda \text{ [nm]}$$

På neutroninstrumenter vil man typisk ønske at anvende neutroner med en 1 grad bred divergensfordeling. Hvis fordelingen er bredere, bliver det for svært at bestemme spredningsvinklen præcist, og hvis den er mindre vil neutronernes intensitet ofte blive for lille. Formlen ovenfor viser, at neutroner med korte bølglængder (ca. 0.1-0.2 nm) vil kræve mere avancerede guides (store m), mens neutroner med lange bølglængder (ca. 0.5-1.0 nm) ikke behøver særligt avancerede guides.

INSTRUMENTERNES PLACERING PÅ ESS

Instrumenterne på ESS er placeret et

godt stykke fra moderatoren, mellem 20 og 170 m. Dette er ikke tilfældigt, men hænger sammen med, hvor præcist neutronenergien skal være bestemt. Hvorfor det er sådan, forklares i det følgende.

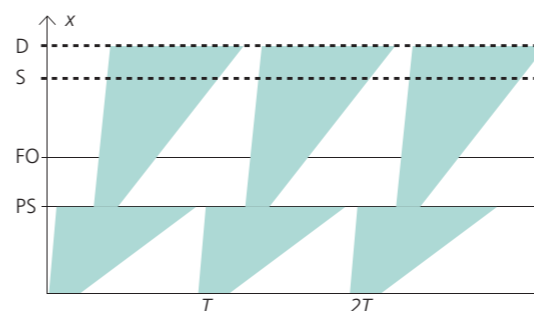
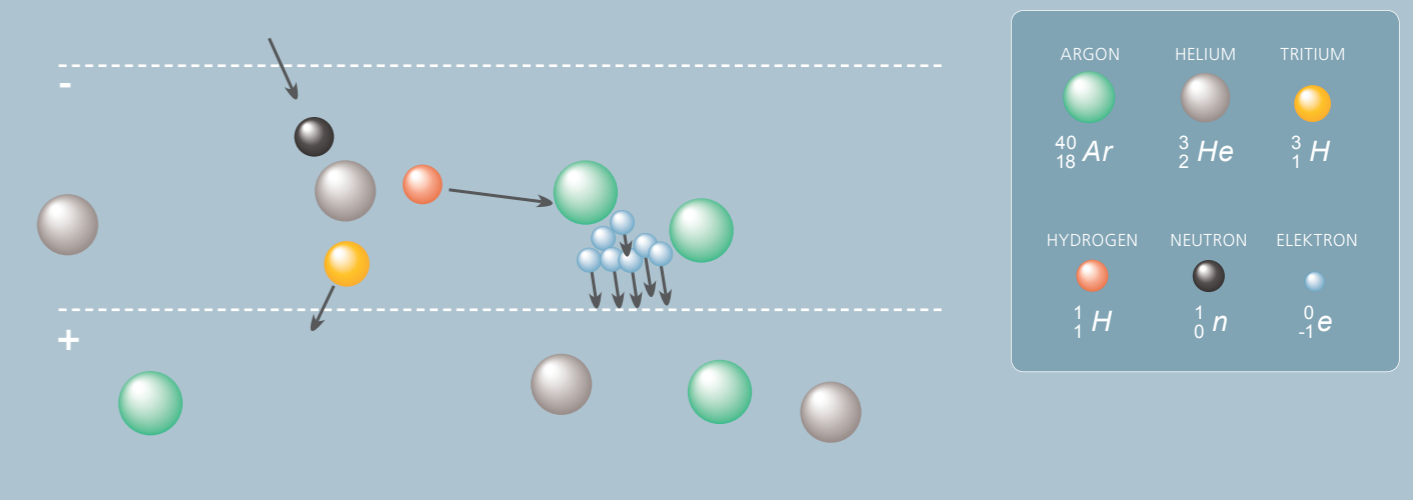
ESS producerer neutroner i pulser af længden $\tau = 2,86$ ms. Da kildens frekvens er bestemt til at være $f = 14$ Hz, er tiden mellem pulserne $T = 71$ ms. Det er muligt at gøre pulsen på det enkelte instrument kortere end τ ved at sætte en roterende skive af et absorberende materiale med et transmissionshul (en chopper) til at fjerne en del af neutronerne.

Neutronens flyvetid fra moderator til prøve er givet ved $t = L/v$, hvor L er flyvelængden mellem moderator og prøve, og v er neutronens hastighed. Når man indsætter formelen for en partikels de Broglie-bølglængde, $m \cdot v = h/\lambda$, fås den brugbare ligning $t = (m/h) \cdot L \cdot \lambda$, hvor (m/h) kan omregnes til 2,5 ms/(m·nm). Med andre ord: En neutron med en bølglængde på 1 nm flyver 1 m på 2,5 ms.

Neutronerne, der rammer instrumentets detektor på et givet tidspunkt, skal alle komme fra samme moderatorpuls. Ellers kan man ikke holde styr på den samlede flyvetid. Chopperne sørger for at fjerne "for hurtige" og "for langsomme" neutroner. Det interval af bølglængder, man kan udnytte i samme eksperiment, kan beregnes ud fra flyvetidsligningen.

DETEKTIONSPROCESSEN

Figur 6. viser detektionsprocessen. Neutronen vekselvirer med $3\text{ }^2\text{He}$ og danner tritium- og brintkerne. Disse udsendes med tilstrækkelig energi til at ionisere Ar gassen, hvorved der frigives elektroner, som detekteres.



Figur 7. Flyvetidsdiagram for neutroninstrumenter. På diagrammet vil hurtige neutroner repræsenteres ved næsten lodrette streger, mens langsomme neutroner vil følge næsten vandrette streger. Her er der så mange neutroner, at de er tegnet som et kontinuum. Der udsendes neutronpulser fra moderatoren med tidsintervallet T ; i alt vises tre pulser. Chopper "PS" laver et ret veldefineret tidspunkt for de neutroner, der kommer igennem, mens chopper "FO" sørger for at eliminere meget langsomme neutroner, der "sniger" sig igennem "PS"-chopperen på forkerte tidspunkter. "S" angiver positionen af den prøve, man vil studere, og "D" symboliserer detektoren.

Man får spredningen af ankomsttider på detektoren givet ved:

$$\Delta t = (m_n/h) \cdot L \cdot \Delta \lambda.$$

Men man må opfylde $\Delta t < T$ for at undgå overlap mellem pulserne.

Man får nu:

$$\Delta \lambda < (h/m_n) \cdot T/L$$

Hvis man vil lave eksperimenter med mange bølglængder samtidig (stor værdi af $\Delta \lambda$), skal instrumentet altså være kort (lav værdi af L) – og omvendt.

Instrumentets længde med tilhørende neutronguides spiller også ind på instrumenternes målepræcision, altså hvor præcist neutronens bølglængde kan bestemmes.

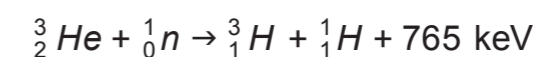
Flyvetiden kan ikke bestemmes mere præcist end neutronpulsens længde, så man har $\delta t = \tau$. Ved igen at se på flyvetidsligningen kommer man frem til:

$$\tau = (m_n/h) \cdot L \cdot \delta \lambda$$

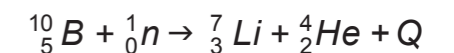
($\delta \lambda$ er det eneste, der er ubestemt, da L kan bestemmes meget nøjagtigt). Til meget præcise målinger skal $\delta \lambda$ derfor være lille, og man vil derfor vælge en lang instrumentlængde. Ofte vil man også lave moderatorpulsene (græsk tau) kortere med en chopper, men det har dog den ulempe at antallet af neutroner formindskes.

DETEKTION

Endestationen for de brugbare neutroner i ESS er altid en neutrontetektor. Neutrontektoren minder meget om et Geiger-Müller-rør (GM-rør). Den mest kendte neutrontetektor indeholder en He-3-gas. Når gassen absorberer en neutron, dannes der en proton og en radioaktiv tritiumkerne (tung brint). Disse kerner støder ind i andre atomer, bl.a. argon, som detektorgassen også indeholder. Der løsrives en kaskade af elektroner, som accelereres mod den positive pol i et elektrisk felt. Pulsen af elektronerne kan efterfølgende måles af en tæller, der er tilkøbt detektionsrøret. Neutronabsorptionsprocessen er:



He-3 er blevet meget dyrt at anskaffe, så man arbejder også med andre typer af neutrontektorer, eksempelvis indeholdende $^{10}\text{B}_4\text{C}$ med følgende kernereaktion:



Også denne proces detekteres på samme måde som før ved, at sammenstød med kernerne udløser en kaskade af elektroner, der efterfølgende kan måles.

Vi er nu færdige med den tekniske gennemgang af ESS og vil fortsætte med at se på, hvordan neutroner kan bruges til at undersøge materialer.

MATERIALEFORSKNING MED NEUTRONER

Som det ses på de foregående sider, er der ekstremt meget spændende fysik bag ved produktionen og behandlingen af neutronerne i ESS. Men vi skal ikke glemme, at det primære formål med ESS er at få produceret neutroner, der skal bruges til forskning og undersøgelse af nye materials egenskaber.

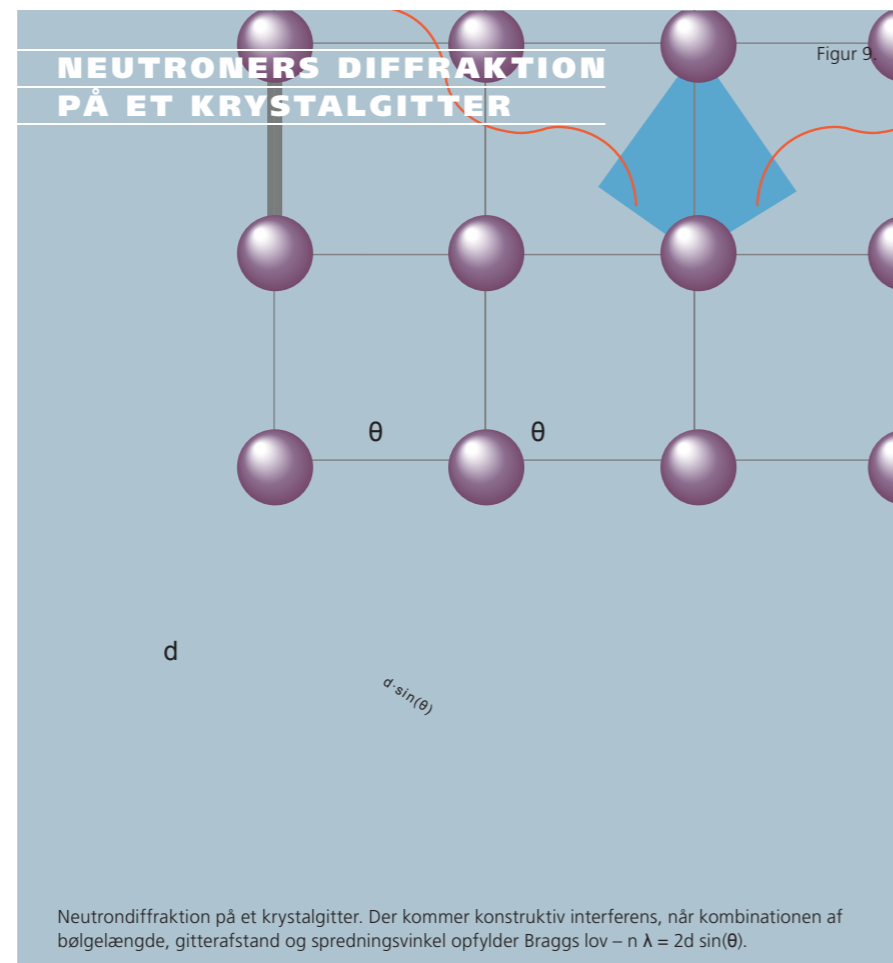
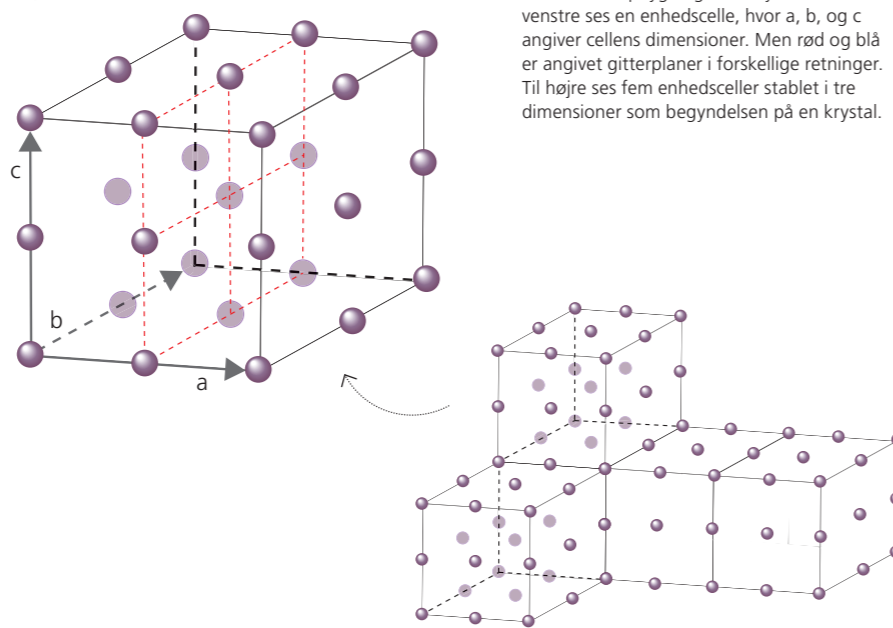
I dette afsnit vil vi gennemgå den grundlæggende fysik, der gør, at vi kan bestemme materials egenskaber med neutroner. Kort fortalt sendes neutroner ind mod et materiale, instrumenterne måler, hvordan neutronerne spredes, og på den måde kan man fastslå materialets egenskaber.

Eksperimenterne fordeler sig på fem forskellige principper eller metoder, som vi vil beskrive nedenfor. Metoderne kaldes diffraktion, småvinkelspredning, refleksivitet, tomografi og spektroskopi.

A. DIFFRAKTION

De fleste faste stoffer er på atomart plan krystallinske. Dette gælder både for metaller, salte og en række molekyler – inklusive proteiner. I krystaller er atomerne ordnet periodisk i et gitter. Man kan forestille sig krystallen som opbygget af milliarder af helt ens byggeklodser, som udfylder hele rummet. Disse klodser kaldes enhedsceller, og de indeholder hver især atomer svarende til en eller flere formelenheder af stofet. I figur 8 kan man se, at lag af ens atomer udgør planer i gitteret – disse kaldes gitterplaner.

Figur 8.



Når neutroner sendes mod en krystal, vil de spredes fra de forskellige atomer i krystallen. Da afstandene mellem atomerne er små, er man nødt til at betragte neutronen som en bølge. Neutroner spredt fra forskellige gitterplaner vil derfor interferere – neutronbølgen kan altså blive forstærket eller udslukket afhængigt af geometrien. Se figur 9.

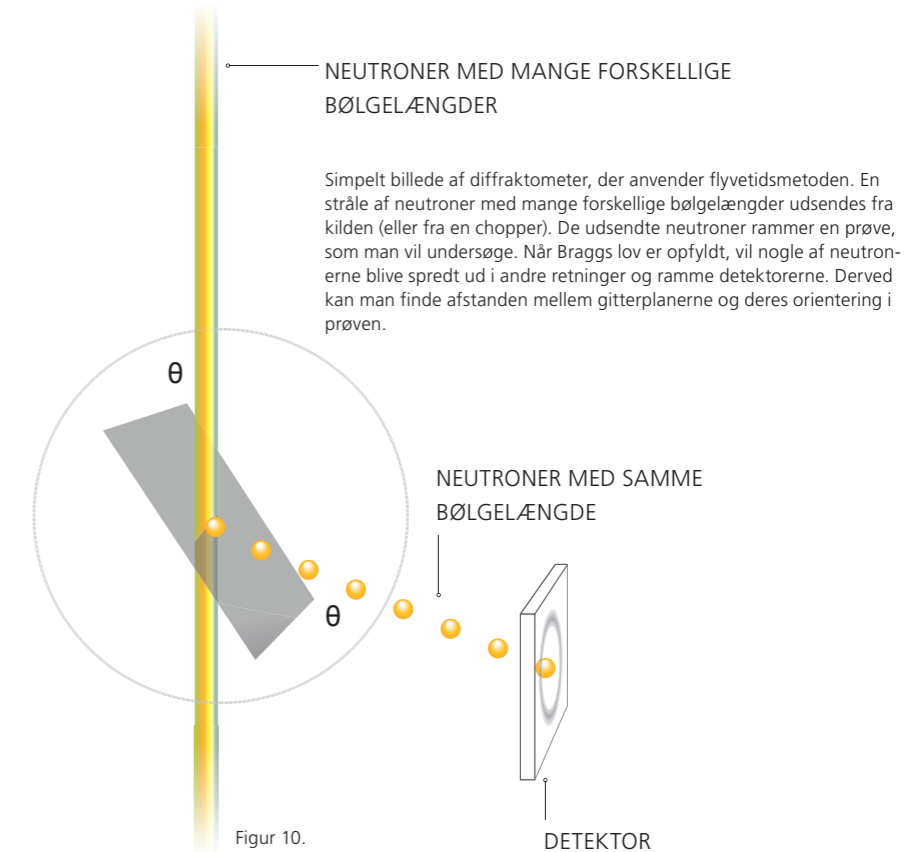
Vi kan i figur 9 se, at for at få konstruktiv interferens skal bølgen spredt fra et lag løbe et helt antal bølgelængder ($n\lambda$) længere end bølgen spredt fra laget ovenover. Der vil så af samme grund være interferens med den bølge, der blev spredt fra laget nedenover osv. Ved at betragte det mørkeblå område i midten af figuren som to retvinklede trekanter kan man se, at bølgen angivet ved et gitterplan løber vejlængden $2d \cdot \sin(\theta)$ længere end bølgen ved gitterplanet ovenover. Sammen med betingelsen for konstruktiv interferens (forskellen i vejlængde skal være et helt antal bølgelængder) finder vi Braggs lov:

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin(\theta)$$

Når Braggs lov er opfyldt, kan der spredes rigtig mange neutroner. Man taler i disse tilfælde om diffraktion. Denne metode bruges meget ofte til at bestemme afstande mellem gitterplanerne i en krystal.

Spredningsvinklerne kan altså bruges til at bestemme størrelse og form af enhedscellerne. På en tilsvarende (men mere matematisk kompliceret) måde kan den relative intensitet af neutroner spredt fra de forskellige planer bruges til at bestemme de enkelte atomers placering i enhedscellen. Man kan derved få et meget præcist billede af, hvor atomerne i krystallen sidder.

For at kunne anvende Braggs lov er man nødt til at kende neutronernes bølgelængde. På ESS gøres dette ved flyvetidsmetoden som forklaret på side 17.



B. SMÅVINKELSPREDNING

Ved undersøgelser af nanopartikler eller store molekyler ønsker man ofte at bestemme genstandens størrelse og ydre form. Dette kan gøres ved at studere de neutroner, der spredes ved små vinkler. Ved spredning i små vinkler kan neutronen ikke længere skelne de enkelte atomkerner fra hinanden. De nærmest flyder ud imellem hinanden, og neutronen "mærker" kun tætheden af atomkerner.

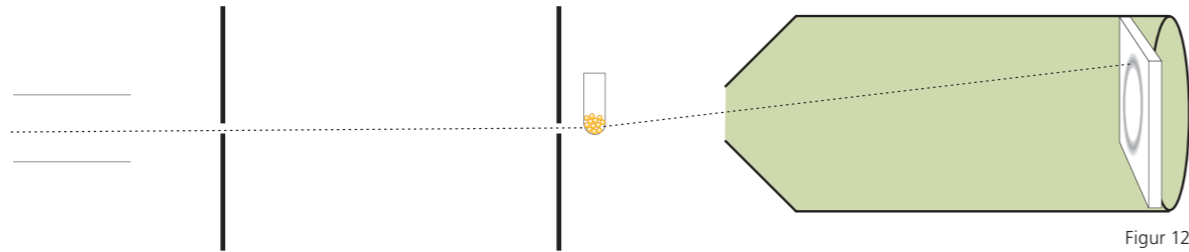
Selvom Braggs lov ikke er præcist gyldig i dette tilfælde, kan den alligevel give et fingerpeg om, at store afstande giver anledning til små spredningsvinkler. Som eksempel kan vi vise formlen for småvinkelspredning fra en kugle med radius R

$$I \sim \left(\frac{3(\sin(qR) - qR \cos(qR))}{(qR)^3} \right)^2$$

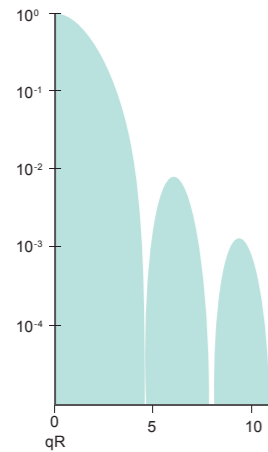
hvor I er intensiteten af de spredte neutroner, og q er spredningsvektoren defineret i boksen.

Neutronens totale bevægelsesmængde fås ud fra formlen $\lambda = h/(m_n \cdot v)$, som vi omskriver til $p = h/\lambda$. Man definerer ofte bølgetallet $k = 2\pi/\lambda$. En vektor, der har længden k og retning som neutronens bevægelsesretning kaldes bølgevektoren, \vec{k} . Vi kan nu se, at neutronens bevægelsesmængde, er givet som $\vec{p} = h/2\pi \cdot \vec{k}$. Størrelsen $|\Delta k| = 4\pi \sin(\theta)/\lambda$ er ændringen af bølgevektoren ved spredning af en neutron. Denne størrelse benævnes med symbolet q. Som vektor betegnet kaldes q for spredningsvektoren, og ændringen i bevægelsesmængden er $\Delta \vec{p} = h/2\pi \cdot \vec{q}$. I denne notation kan man skrive Braggs lov som $n \cdot 2\pi/d = q$.

Typisk instrument til småvinkelspredning. Neutronerne laves i korte "glimt" og sendes igennem to absorberende plader med et lille hul i hver. Kun neutroner, der bevæger sig i en helt præcis retning, kan komme igennem begge huller og ramme prøven. Til sidst måles neutronernes meget lille spredningsvinkel på en positionsfølsom detektor placeret langt væk fra prøven. Detektoren bestemmer også neutronernes flyvetid fra kilden, til de rammer detektoren. Derved kan man bestemme deres hastighed og bølgelængde.



Figur 12.



Figur 11. Den relative intensitet af neutroner spredt fra en kugle på nanometerstørrelse som funktion af kuglens radius, R, gange længden af neutronens spredningsvektor, q.

Som vist i figur 11 kommer kurvens første minimum ved ca. $qR = 4,5$ – eller $R = 4,5/q$. Dette kan direkte bruges til at bestemme størrelsen af partiklerne. En nærmere analyse af kurven kan derudover afsløre partiklernes form. Småvinkelspredning anvendes ofte til analyse af store, "bløde" molekyler i opløsning, fx polymerer og proteiner.

I småvinkelspredning er det vigtigt, at man kan bestemme spredningsvinklen meget præcist, da den relative usikkerhed af målingerne ellers bliver meget stor. Dette klares ved, at man lader neutronerne løbe igennem to små (ca. 1 cm i diameter) huller i en ellers absorberende plade med flere meters afstand, som vist på figur 12. Herved mistes mange neutroner, men til gengæld kendes retningen af de resterende neutroner meget præcist. På ESS bliver småvinkelspredning udført ved flyvetidsanalyse som vist i figur 7.

C. REFLEKTIVITET

Når en lysbølge går fra et medium til

et andet, fx fra luft til vand, vil noget af den reflekteres med indfaldsvinkel lig udfaldsvinkel, som det ses i figur 13. Den anden del af bølgen vil gå igennem det nye medium, men typisk vil dens bevægelsesretning ændres. Dette kaldes refraction og er styret af materialets optiske brydningsindeks, som kommer fra den gennemsnitlige vekselvirkning mellem lysbølgen og materialets elektroner.

Materialer har også et brydningsindeks i forhold til neutroner, her kaldet n. Brydningsindekset skyldes neutronens gennemsnitlige vekselvirkning med materialets atomkerner. Ligningen, der beskriver refraction i begge tilfælde, hedder Snells lov. I neutronverdenen skriver man det oftest som

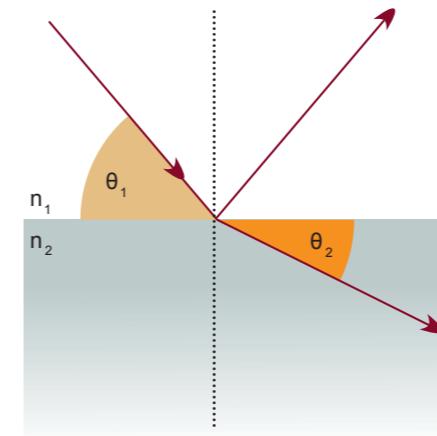
$$\frac{n_1}{n_2} = \frac{\cos(\theta_2)}{\cos(\theta_1)}$$

hvor vinklerne (θ_1 og θ_2) regnes i forhold til overfladen. Se figur 13.

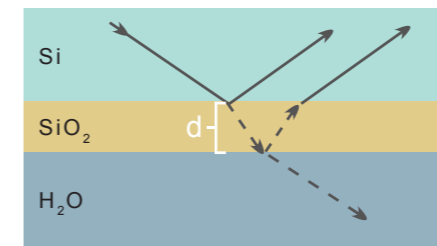
Det optiske brydningsindeks for neutroner er $n_1 = 1$ i vakuum, men for de fleste materialer er det $n_2 < 1$. Derfor vil neutronens vinkel i forhold til overfladen mindskes, når neutronen går fra vakuum ind i et materiale, $\theta_1 > \theta_2$. Dette er illustreret i figur 13. Når indfaldsvinklen, θ_1 , bliver tilstrækkeligt lille, kræver Snells lov, at $\cos \theta_2 = 1$ eller $\theta_2 = 0$. Denne værdi af θ_1 kaldes den kritiske vinkel. For indfaldsvinkler mindre end den kritiske vinkel kan Snells lov ikke længere opfyldes, og neutronen kan slet ikke trænge ind i materialet. I stedet vil neutronen altid reflekteres og altid med indfaldsvinkel lig udfaldsvinkel. Dette kaldes totalrefleksion. Man bruger denne effekt, når man laver neutronguides, som forklaret på side 16.

Ved at måle den kritiske vinkel kan man bestemme brydningsindekset af materialet. En endnu vigtigere brug af reflektivitet er dog, at man kan måle sammensætningen af overflader i stor detalje. Hvis man har en tynd film oven på et andet materiale, fx et oxideret SiO_2 -lag oven på et stykke Si, kan neutronen reflekteres fra begge grænseflader, som man ser i figur 14. De to reflekterede dele af bølgen vil interferere konstruktivt, hvis Braggs lov er opfyldt. Her skal d i Braggs lov forstås som tykkelsen af filmen.

En måleopstilling til reflektivitet kræver, at man bestemmer neutronens indkommende vinkel meget præcist i forhold til overfladen. Retningen parallelt med planen behøver dog ikke at være særlig præcist bestemt. Derfor vil man anvende absorberende materiale med to rektangulære åbninger til at definere strålen. Den ene side af rektanget er typisk meget lille, få millimeter, mens den anden er ret stor, adskillige centimeter. På ESS vil man benytte flyvetidsteknikker til at måle reflektivitet. Opstillingen minder meget om småvinkelspredning i figur 12.



Figur 13. Refleksion og brydning er givet ved Snells lov, som vist i teksten.



Figur 14. Interferens af bølger reflekteret fra to overflader.

D. TOMOGRAFI

Med gennemlysning med neutroner kan man danne et billede af, hvordan genstande ser ud indeni.

Ved at rotere prøven og gennemlyse ved mange vinkler kan man til sidst rekonstruere genstandens bestanddele i tre dimensioner. Dette kaldes tomografi og svarer til den medicinske CT-scanning, der foretages med røntgenstråling.

Ved røntgentomografi vil strålen dæmpes mest af tunge grundstoffer, mens neutronstråler dæmpes anderledes. Der er en tendens til, at neutronstråler også dæmpes mere ved nogle af de tunge grundstoffer, men det er ikke generelt sandt. Hydrogen dæmper faktisk også neutronstrålen relativt meget, hvorved vand og organisk materiale træder meget kraftigt frem i neutrontomografi. Neutroner gennemtrænger mange metaller ganske godt og kan derfor bruges til undersøgelser af metalbjælker med tykkelser på mange centimeter. Mange

museums-genstande kan med fordel undersøges med en kombination af neutroner og røntgenstråling.

Neutronstrålen absorberes på samme måde som gammastråling absorberes i et materiale, eller som intensiteten af lys dæmpes, når det trænger igennem farvestoffer. Alle stråler dæmpes eksponentielt efter Lambert-Beers lov:

$$I(x) = I_0 e^{-\Sigma_t \cdot x}$$

Her er x tykkelsen af materialet, Σ_t kaldes det makroskopiske absorptions-tværsnit, I_0 er intensiteten ved overfladen.

Det makroskopiske absorptionstværsnit er givet ved:

$$\Sigma_t = \frac{\rho \cdot (\sigma_{abs} + \sigma_{spredt})}{m}$$

hvor σ_{abs} og σ_{spredt} er tværsnit (relative sandsynligheder) for henholdsvis absorption og spredning fra en enkelt kerne. Symbolernes værdier kan findes beskrevet i efterfølgende tabel.

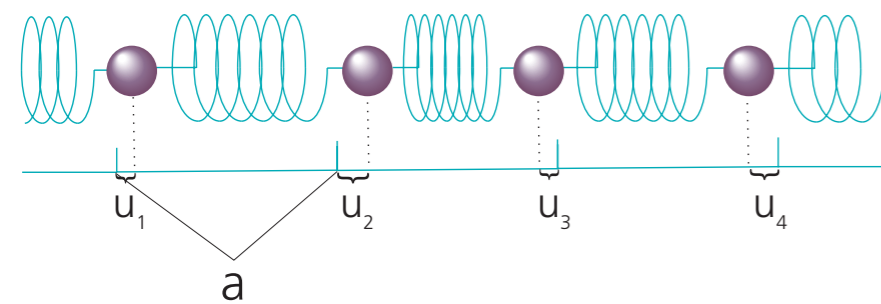


Billede skabt ved gennemlysning med neutroner.



Røntgenbillede.

| Stof | Atomnummer | Densitet ρ (g/cm ³) | Atomvægt m $1.66 \cdot 10^{-24}$ g | Absorptions-tværsnit σ_{abs} 10^{-24} cm ² | Spredningstværsnit σ_{spredt} 10^{-24} cm ² | Makroskopisk absorptionstværsnit Σ_t cm ⁻¹ |
|------------|------------|--------------------------------------|--------------------------------------|--|---|--|
| Hydrogen | 1 | | 1,008 | 0,3326 | 82,02 | |
| Deuterium | 1 | | 2,014 | 0,000519 | 7,64 | |
| Bor | 5 | 2,466 | 10,81 | 767,8 | 5,24 | 176,3 |
| Kulstof | 6 | 2,266 | 12,001 | 0,0035 | 5,551 | 1,04 |
| Oxygen | 8 | | 15,999 | 0,00019 | 4,232 | |
| Vand | | 1,00 | 18,02 | | | 3,7 |
| Tungt vand | | 1,105 | 20,03 | | | 0,49 |
| Aluminium | 13 | 2,69 | 26,98 | 0,231 | 1,503 | 0,17 |
| Jern | 26 | 7,87 | 55,85 | 2,56 | 11,62 | 1,99 |
| Sølv | 47 | 10,50 | 107,87 | 63,3 | 4,99 | 6,64 |
| Guld | 79 | 19,28 | 196,97 | 98,65 | 7,75 | 10,41 |
| Bly | 82 | 11,34 | 207,2 | 0,171 | 11,118 | 0,617 |



Figur 15. En simpel endimensional model af en krystals elastiske egenskaber. Hvert atom med massen M er forbundet med naboatomerne med fjederkræfter af styrken K og har ligevægtsafstanden a . U_1 til U_4 angiver atomernes udsving fra ligevægtspositionen til et tilfældigt valgt tidspunkt.

E. SPEKTROSKOPI

I visse tilfælde kan neutronerne ændre energi ved spredning fra materialet. Dette sker ved at afgive eller optage energi fra vibrationer i prøven. Ligesom det er tilfældet med lys, kan energien i vibrationer kun optages og afgives i kvanter med energien hf , hvor h er Plancks konstant, og f er vibrationens frekvens.

Et materiales vibrationer kan approksimativt beskrives ved en simpel klassisk model, hvor atomerne er masser, der er forbundet med fjedre, vist for én dimension i figur 15. I virkeligheden kommer fjederkræfterne fra elektronernes orbitaler og elektrostatiske vekselvirkninger, men det er ikke vigtigt for modellen. Man kan løse den endimensionale model ved at antage, at alle kerner udfører bølgelignende

bevægelser med bølgelængden λ_f . Resultatet er, at frekvensen vil afhænge af udsvingenes bølgetal, $k_f = 2\pi/\lambda_f$, på følgende måde

$$\omega = 2\sqrt{\frac{K}{M}} \cdot \left| \sin \frac{k_f a}{2} \right|$$

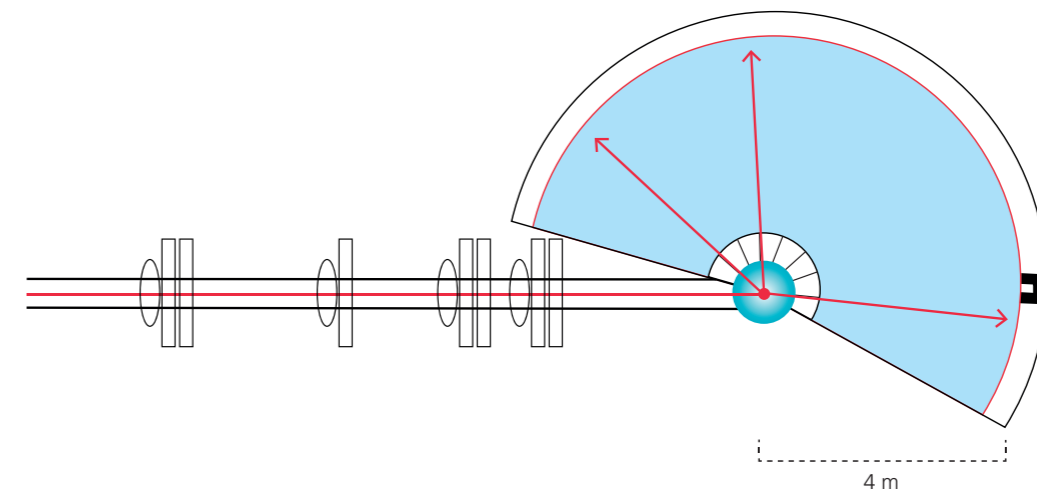
hvor a er afstanden mellem atomerne, M er atommassen og K fjederkonstanten mellem atomerne.

Den korteste bølgelængde, der meningsfyldt kan tilskrives en sådan bølge, er $L = 2a$, svarende til $k_f = \pi/a$.

Energien af disse gittervibrationer optræder i kvanter af størrelsen $h\omega/2\pi$, hvor $\omega = 2\pi f$. I materialefysikken kaldes disse energikvante fononer og svarer til lysets kvantisering som fotoner. Fononens bevægelsesmængde er som

for neutronen $\vec{p} = h\vec{k}/2\pi$. Ved at bestemme sammenhængen mellem ω og k kan man bestemme styrken og retningen af de atomare "fjedre" i materialer. Fononer har typisk frekvenser mellem 0 og 10 THz, svarende til energi fra 0 til 40 meV.

Næsten al termisk energi i stoffer optræder som fononer. Derfor kan man ud fra kendskab til fononerne bestemme et materiales varmekapacitet og varmeledningsevne ved forskellige temperaturer. Det er på den måde muligt at lære meget om et materiales egenskaber ved at måle frekvensen af dets fononer. Fononer er også afgørende for et materiales elastiske egenskaber, ligesom lyd er lavfrekvente fononer. Sidstnævnte sammenhæng har ført til selve navnet "fononer".



Figur 16. Almindeligt flyvetidsspektrometer. En chopper tæt ved prøven udvælger korte pulser af neutroner. På grund af en tilsvarende chopper tættere på moderatoren vil de neutroner, der rammer prøven, alle have samme fart – og derved energi. Strålen rammer nu prøven, og nogle neutroner mister energi ved at skabe fononer i prøven. De udgående neutroner flyver direkte til en detektor, og ved flyvetidsanalyse kan man igen udregne den enkelte neutrons energi, efter at den har ramt prøven. Ud fra den position, hvor neutronen ramte prøven, kan man finde retningen af dens bevægelse og derved udregne overførslen af bevægelsesmængde. Herved kan man analysere sammenhængen mellem energi og bevægelsesmængde af fononerne.

Man kan bestemme neutronens kinetiske energi via dens bølgelængde, som man kan omregne til bevægelsesmængde og derfra til energi. Ved at måle neutronernes energi – både før og efter de rammer prøven – kan man beregne deres energændring. Ved hjælp af energibevarelse får man, at den energi, neutronen mister, $\Delta E = E_{\text{før}} - E_{\text{efter}}$, må være overført til at skabe en fonon, eller:

$$\Delta E = h \cdot \omega / 2\pi$$

Samtidig giver sætningen om bevarelse af bevægelsesmængde, at neutronens ændring i bevægelsesmængde må være lig fononens bevægelsesmængde:

$$\Delta \vec{p} = h\vec{q} / 2\pi = h\vec{k} / 2\pi$$

Det er bemærkelsesværdigt, at neutronen i denne proces skal betragtes som både bølge og partikel på samme tid: Vi anvender bevarelse af energi og bevægelsesmængde som ved stød mellem partikler – men samtidig vekselvirker neutronen med mange kerner ad gangen for at kunne sætte en hel bølgebevægelse i gang. Den er altså også en bølge med en vis udstrækning, typisk omkring 1 μm .

Neutronspektroskopi kan benyttes til at studere mange andre ting end vibrationer af kernerne i krystaller. Et tilsvarende område er bevægelse af atomernes magnetiske momenter. Man kan også studere vibrationer af molekyler, med frekvenser op til 100 THz. Langsomme processer kan også studeres, fx diffusion og bevægelse af store molekyler i opløsning. Her vil man på ESS kunne studere frekvenser ned til 1 MHz.

For at kende neutronens bevægelsesmængde og energi både før og efter skabelsen af en fonon vil man på ESS benytte flyvetidsmetoder. Et typisk spektrometer ses i figur 16. Her vil en chopper bruges til at bestemme tiden, hvor den enkelte neutron rammer prøven. På den måde kan man bestemme både den indkommende og udgående flyvetid og derudfra beregne fart, bevægelsesmængde og energi. På ESS vil der også blive bygget spektrometre, der anvender mere komplicerede metoder, for at kunne dække hele frekvensspektrret fra 1 MHz til 100 THz.

Som det ses på de foregående sider, er der ekstremt meget spændende fysik at lære om materialer gennem neutronspredning og også bag produktionen og behandlingen af neutronerne ved ESS.

Forskning og udvikling af nye materialer er en vigtig del af udviklingen af fremtidens samfund. Så formentlig vil det om 40-50 år vise sig, at ESS har været alle pengene værd



MARTS 2014



FEBRUAR 2016

UDGIVER

Det Natur- og Biovidenskabelige Fakultet
Københavns Universitet
Bülowsvej 17
1870 Frederiksberg C
2016

FORFATTERE OG REDAKTION

Mikkel Rønne, Brøndby Gymnasium
Kim Lefmann, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet
Esben Klinkby, Nutech, Danmarks Tekniske Universitet

FIGURER

Monika Kovacic, Niels Bohr Institutet og Kemisk Institut,
Københavns Universitet
Mikkel Rønne, Brøndby Gymnasium
Mikkel Schou Nielsen, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet
Bente Lebeck, DTU Fysik
Rentegning af figurer: Kenneth Velling Johansen,
SCIENCE Kommunikation

KILDER

ESS

DISTRIBUTION

SCIENCE Kommunikation
Det Natur- og Biovidenskabelige Fakultet

TRYK

GraphicCo

DESIGN

Kenneth Velling Johansen
SCIENCE Kommunikation

KORREKTUR

Turi Kirstine Schäffer
Ida Viola Andersen
Anine Borger
Ken Andersen
Sidsel Bülow Lefmann

Flere temahæfter kan bestilles gratis på
[www.science.ku.dk/oplev-science/gymnasiet/
undervisningsmateriale/](http://www.science.ku.dk/oplev-science/gymnasiet/undervisningsmateriale/)

Her kan også findes en samling af opgaver til
dette hæfte.

Oplag: 10.000 stk.

ISBN: 978-87-996295-2-7



Denne produktion er
Svanemærkegodkendt