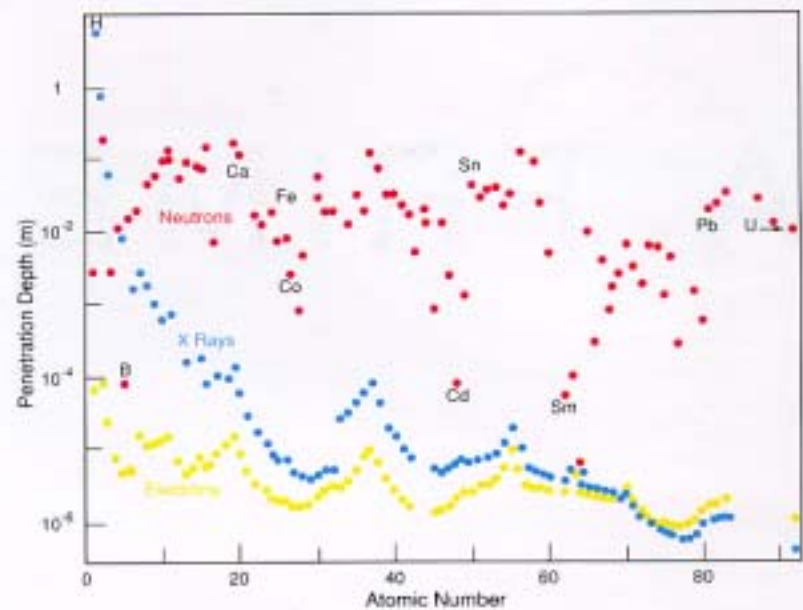


고체나 액체내의 원자들의 상대적인 위치와 그들의 운동을 어떻게 결정할 수 있을까? 어떻게든지 우리들은 적절한 돋보기로 물질의 내부를 볼 필요가 있을 것이다. 그러나 우리의 일상 생활에서 빛으로 보는 것과 같은 것으로는 충분하지 않을 것이다. 먼저 투명한 몇몇 물질의 내부만 볼 수 있을 뿐이고, 둘째로는 개별 원자들의 문제가 있다. 이런 것들은 단지 인간을 달여 보내는 것과 같은 기술적인 어려움이 아니고 본질적인 한계가 있다는 것이다. 우리는 불투명한 물체를 투명하게 만들 수도 없으며 또한 무엇인가를 관찰하기 위해 우리가 사용하는 복사 파장보다 더 세밀하게는 들여다 볼 수 없는 것이다. 가시광을 쓰는 관찰에서는 미크론(10^6) 정도 이상 떨어진 것만 볼 수 있고 이것은 고체내의 대표적인 원자간 거리(약 10^{10} m)보다 약 천 배 긴 것이다.

X선은 빛보다 훨씬 짧은 파장을 가지고 있어 이것을 원자 위치를 찾는데 시도할 수 있다. 수많은 결정체 물질들에서 이 기법은 아주 유용하다. X선은 물질에 의해 회절(diffraction)되고, 필름에 회절선의 점들이 만드는 회절상으로부터 상대적인 원자 위치를 알아낼 수 있다. 그러나 모든 원자들이 X-선에 똑같이 보이는(equally visible) 것이 아니다. 우리 턱뼈의 부드러운 조직에 있는 가벼운 원자들은 이빨을 채우는 치과용 아말감의 수는 원자만큼 X선을 막지 못한다. 이러한 현상은 치과 의사에게는 유용한 일이지만 원자 위치를 알아야 하는 과학자들에게는 자주 난처한 일이다.



NEUTRON, ELECTRON, AND X-RAY PENETRATION DEPTHS

Fig. 1. The plot shows how deeply a beam of electrons, x rays, or thermal neutrons penetrates a particular element in its solid or liquid form before the beam's intensity has been reduced by a factor of 1/e, that is, to about 37 percent of its original intensity. The neutron data are for neutrons having a wavelength of 1.4 angstroms (1.4×10^{-10} meter).

X선은 원자핵을 두르고 있는 전자들에 의해 산란된다. 그 결과 많은 수의 전자를 갖는 무거운 원자들은 (수은처럼) 가벼운 원자(산소나 그보다 더 낮은 경우로 수소)보다 훨씬 효과적으로 X선을 산란시킨다. 그래서 X선은 가벼운 물질들에서는 크게 감쇄되거나 휘어지지 않고 바로 무과하게 된다. 널리 알려진 고온 초전도체가 전세계의 거의 모든 대학이 X선 장치를 갖고 있음에도 X선 회절에 의해 그 구조가 밝혀지지 못한 이유가 바로 이것이다. 최초의 고온 초전도체의 하나는 이트륨과 구리를 포함하고 있는 것이 밝혀졌고, 이들은 모두 무거운 원자들로서 시료에 조사되는 X 선을 상대적으로 큰 비율로 산란한다. 유감스럽게도 이들 초전도체는 산소도 포함하고 있고, 이것의 미미한 X선 산란은 근처의 무거운 원자들의 산란에 과몰해 버리게 된다. 이들 초전도체에서 산소를 거의

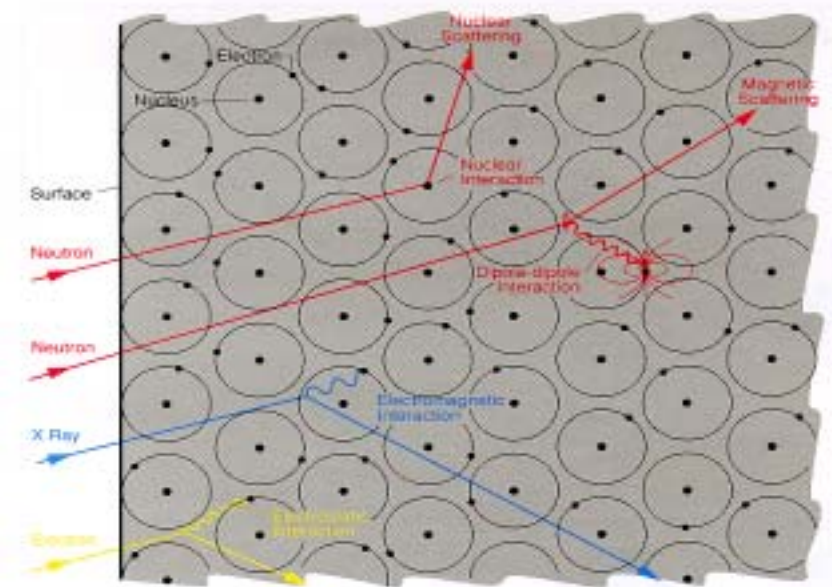
느끼지 못하는 X선을 가지고 산소의 위치를 알아내는 것은 불가능하다.

아마도 우리는 전자빔을 가지고 봄으로써 원자 위치를 찾으려고 시도할 수도 있을 것이다. 아무튼간에 양자역학은 입자는 파동성을 가지고 있고, 전자의 파장은 에너지를 바꾸어 주므로서 쉽게 원자간 거리에 맞도록 맞출 수 있다. 그러나 중선을 문질러 본 사람은 누구나 알고 있듯이 전하들간의 상호 작용은 강하다. 놀랄 필요도 없이 전자나 양전자같은 전하 입자는 물질 내에 이미 있는 전자들에 의해 끌어 당겨지거나 밀어내서 고체나 액체 내에서 멀리 가지 못한다. 이것이 부피 큰 물질 내부를 들여다 모는데 전자가 적절하지 못한 이유이다. 이들은 빛처럼 똑같은 투명성 문제가 있고, 전자 현미경을 보기 위해서는 특별히 준비된 얇은 시료가 필요하다.

중성자 산란

중성자는 어떠한가? 이들은 전하가 없고, 전기 쌍극자 능률은 없거나 현대 기술의 가장 민감한 것으로도 재기에는 너무나 작다. 이러한 이유로 중성자는 전하를 띤 입자들보다 물질을 훨씬 잘 투과할 수 있다. 게다가 중성자는 전기력보다 핵에 의해 원자들과 상호 작용하며, 핵력은 수 페르미(10^{-15}m) 정도 크기의 아주 짧은 거리에서 작용한다. 그러므로 중성자에 관한 한 산란 중심(핵)의 크기가 그러한 중심들간의 거리보다 10만배나 작아 고체라 할지라도 원자들이 밀집(dense)되어 있다할 수 없다. 그 결과 중성자는 대부분의 물질에서 산란되거나 흡수되지 않고 긴 거리를 지나갈 수 있다. ("중성자를 전망하며"의 첫 삽화를 보시오.) 예를 들어 알루미늄에 의한 낮은 에너지 중성자의 감쇠, 즉 강도의 감소는 X선이 1mm당 99% 또는 그 이상인 것에 비해 1% 정도밖에 되지 않는다. 그림 1은 다른 원자들에 대해 X선과 중성자는 물론 전자에 대해서도 이러한 점을 예시하고 있다.

생활 속의 많은 것들처럼 중성자의 투과력은 양날의 칼이다. 좋은 점으로는 비록 먼저 시료통을 지나가야 할 지라도 (예를 들어 시료가 액체이거나 저온, 또는 고압에서 유지되어야 할 때 필요하다.) 시료내를 깊이 투과할 수 있다. 당연한 결과로서 중성자는 그들이 투과할 때 약하게 산란된다. 또 아원자 입자를 검출하는 것은 그 입자들의 다른 입자와의 작용 관측을 의미하는데 중성자 검출은 상당한 독창력을 필요로 한다. (실제로 검출기



SCATTERING INTERACTIONS

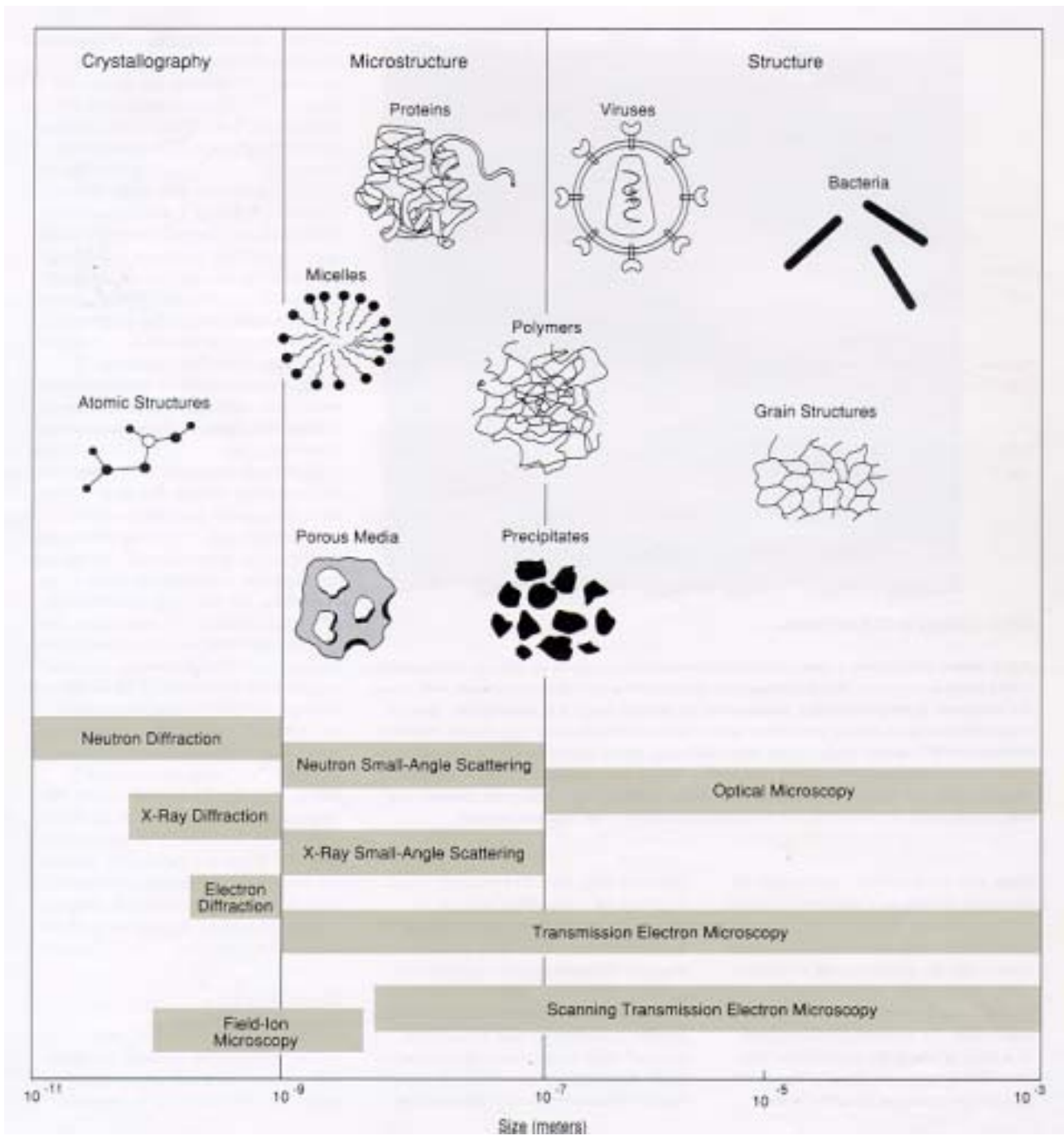
Fig. 2. Beams of neutrons, x rays, and electrons interact with material by different mechanisms. X rays(blue) and electron beams(yellow) both interact with electrons in the material; with x rays the interaction is electromagnetic, whereas with an electron beam it is electrostatic. Both of these interactions are strong, and neither type of beam penetrates matter very deeply. Neutrons(red) interact with atomic nuclei via the very short-range strong nuclear force and thus penetrate matter much more deeply than x rays or electrons. If there are unpaired electrons in the material, neutrons may also interact by a second mechanism: a dipole-dipole interaction between the magnetic moment of the neutron and the unpaired electron.

는 봉소, 헬륨-3, 리튬 같은 몇 개의 원자중의 하나를 이용하는 데 이들은 이온화 방사를 만들기 위해 강하게 중성자를 흡수하는 것들이다.) 일이 더 어려워지는 것은 사용할 수 있는 중성자의 세기가 근본적으로 낮다는 것이다. 강력한 중성자 산란장치가 같은 에너지 폭에서 1초당 1mm^2 에 10^4 중성자를 이용할 수 있는 반면 방사광 시설에 있는 X선 장치들은 약 10^{16} 광자를 이용할 수 있다.

약한 상호작용과 낮은 중성자 속(flux)은 중성자 산란을 신호에 민감한 기법 (signal-limited technique)으로 만들고, 이러한 제약에도 다른 수단으로는 얻을 수 없는 물질의 구조에 대한 정보를 제공하기 때문에 실제로 이용되고 있다. 이러한 제약은 중

성자 산란의 모든 면을 볼 수 있는 어떤 일반적인 장치가 있을 수 없다는 것을 의미한다. 대신에 각각의 장치가 중성자 산란 현상의 특정한 면에 전문화된 정밀로 분광장치들의 동물원(zoo)이 만들어 졌다.

이 특유의 이점에도 불구하고 중성자 산란은 물질의 구조를 탐구하는 일련의 기법중의 단지 하나일 뿐이다. X선 산란이나 전자 현미경 같은 모든 기법이 전반적인 물질의 구조적 특성을 알기 위해서 필요하고, 대부분의 경우 물질의 구조를 찾는 다른 방법들은 복사와 시료사이의 상호작용 특성이 다른 점 때문에 상호보완적인 정보를 주게 된다. 예를 들어 중성자는 핵과 상호작용하고, 반면에 X선과 전자는 물질내 전자만 불뿐이다.(그림 2) 어느 정도까지



STRUCTURE PROBES

Fig. 3. A variety of techniques can be used to probe structure, but one of the main determining factors in the choice of a technique is the length scale of the structure being examined. Techniques range from neutron diffraction, which can be used to study atomic structure with length scales of 10^{-11} to 10^{-9} meter, to optical microscopy, which can be used to study bacteria and crystalline grain structures at much greater length scales.

는 방법의 선택은 조사하고자 하는 구조의 거리 척도에 달려 있다. (그림 3) 두 개의 기법이 같은 척도를 다룰 때는 크기나 화학적 조성같은 추가적인 정보가 최적 기법을 선택할 때 고려된다.

고정된 단일 핵에 의한 산란

핵에 의한 중성자 산란은 양자역학적 과정이다. 정식으로는 중성자와 핵의 파동함수로서 기술되어야만 한다. 그 이름이 의미하듯이 중성자의 파동함수는 파의 형태, 즉 공간과 시간의 사인함수적으로 진동하는 함수이다. 어떤 점에서 이 파의 진폭의 제곱은 그 중성자가 그 지점에서 발견될 확률을 주는 것이고, 우리가 중성자를 나타내는 파에 대해 얘기하는 중성자라 불리는 입자의 어떤 점에서의 확률을 말하든 같은 수학적 처리 즉 등가이므로 중요한 것은 아니다. 때때로 중성자를 파로 말하는 것이 편리한데 이는 파로서 상상할 수 있는 그림이 이해하기가 더 쉽기 때문이다. 다른 경우에는 중성자를 입자로 생각하는 것이 더 유용하다. 우리들은 마음대로 한가지 설명 방식에서 다른 방식으로 왔다 갔다 할 것이고, 수학적으로 정확하다면 언젠가 같은 결론에 도달할 것이다.

중성자 산란 실험에 이용되는 중성자는 대개 공기처럼 개스내의 원자들의 에너지와 비슷한 에너지를 갖는다. 놀랄 것도 없이 그들이 움직이는 속도는 개스 분자들의 속도와 엇비슷해서 초당 수 킬로미터 정도이다. 양자 역학적

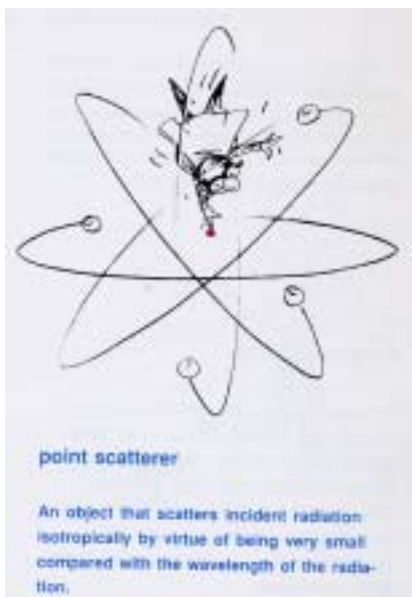
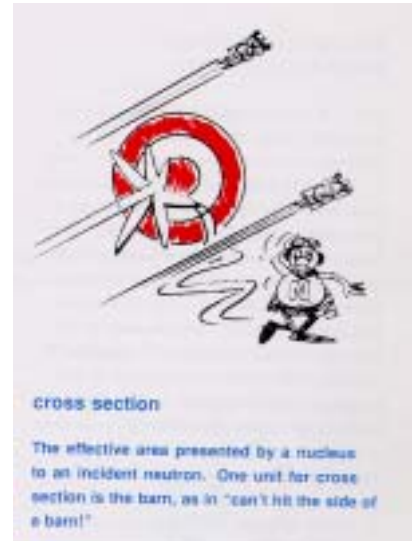
으로 중성자파의 파장은 중성자 속도의 크기, $v=|v|$ 에 역비례한다. (이 글을 통하여 굵은 글자는 벡터량을 나타내고, 같은 문자의 그렇지 않은 것은 그에 대응하는 크기를 나타낸다.) 산란 실험에 이용되는 중성자의 파장, λ 는 수 옹스트롬이 된다. (1 옹스트롬 = 10^{-10} 미터) 보통은 중성자의 파동 벡터, k 로 이야기하는 것이 편리한데 파동벡터는 중성자의 궤적을 따라 방향성을 갖는 $k=2\pi/\lambda$ 의 크기를 갖는 벡터량이다.

$$\frac{hk}{2\pi} = mv, \quad (1)$$

h 는 플랑크 상수이고, m 은 중성자 질량(1.67495×10^{-27} kg)이며, mv 는 중성자의 운동량이다.

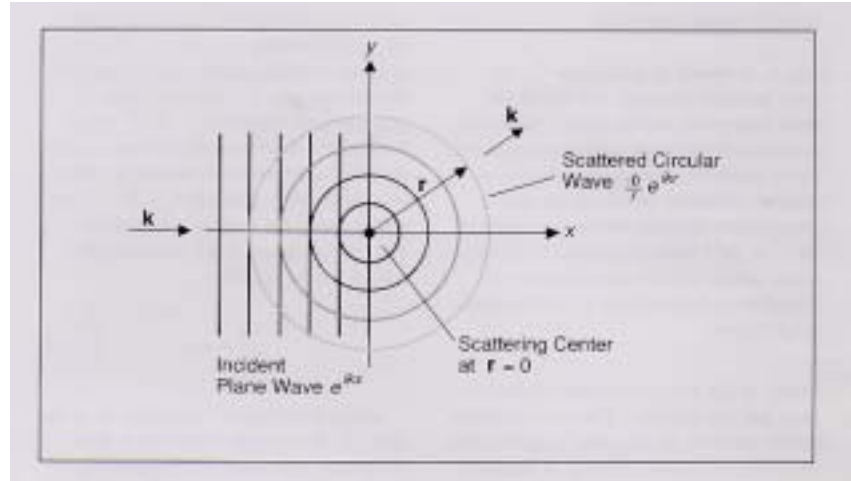
단일핵에 의한 중성자의 산란은 반(barn, $1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2$)단위로 측정되는 단란 단면적 σ 로 표현하는데, 이것은 걸을 지나가는 중성자에 대하여 핵이 갖는 실효 단면적과 등가이다. 중성자가 이 면적에 부딪히게 되면 중성자는 등방성, 즉 모든 방향으로 같은 확률로 산란된다. 왜 등방성을 갖는가? 핵력 포텐셜의 범위는 중성자의 파장에 비해 극히 작고, 그래서 핵은 실제적으로는 일점 산란체가 된다.(반면에 X선은 등방적으로 산란하지 않는데 X선을 산란시키는 원자를 둘러싸고 있는 전자 구름이 X선 파장의 크기와 비견할만 하기 때문이다.)

시간적으로 어떤 순간에 고정된 핵에 입사되는 중성자가 파동함수 $e^{ik \cdot r}$ 로 나타내 질다고 하자. 이 파동함수는 위치 벡터 r 로 표현되는 단위 크기의 평면파



NEUTRIN SCATTETING FROM A FIXED POINT

Fig. 4. A neutron beam incident on a single scattering center and traveling in the x direction can be represented as a plane wave e^{ikx} with unit amplitude. Because the neutron sees the scattering center (a nucleus) as a point, the scattering will be isotropic. As a result, the scattered neutron beam spreads out in spherical wavefronts (here drawn as circles) of b/r . The $1/r$ part of this amplitude factor, when squared in intensity, accounts for the $1/r^2$ decrease in intensity with distance that occurs as the scattered wavefront grows in size. Because we have here taken the scattering center to be rigidly fixed, the interaction is elastic, there is no exchange of energy, and the incident and scattered wave vectors both have magnitude k . (To be rigorous, we should have included the time dependence $e^{i\omega t}$. But since the scattering is elastic, this factor is the same for the incident and scattered waves and cancels out of relative expressions, such as the one for the cross section.)



scattering length

A measure of the strength of the neutron-nucleus interaction, denoted by b and related to the cross section σ by $\sigma = 4\pi b^2$.

isotopic leveling

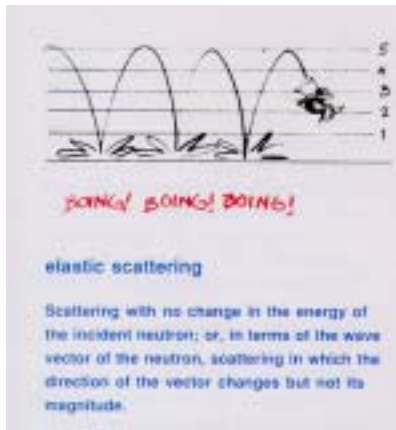
A technique that takes advantage of the considerable variation in scattering cross section among isotopes. By substituting one isotope for another (of either the same or a different element), the scattering from those constituents containing the substitute may be varied to reveal positions relative to other constituents.

이다. 이 파동함수의 제곱의 크기를 보면 언제나 1인데, 이것은 중성자가 공간내 어느 곳인가에서 발견될 확률이 똑같다는 것이고 명확한 운동량 $mv = hk/2\pi$ 를 가지고 있다는 것이다. 파의 매들, 즉 위상 $k \cdot r$ 이 $n\pi$ (n 은 정수)과 같은 위치들은 그림 4에서 보이는 직선적 파단들이다. 앞에서 말한 바에 비추어 본다면 중성자 파동 함수의 크기(지수에 곱하는 상수)를 선택해야 하고, 이 크기의 제곱은 어떤 위치 r 에서 중성자를 찾을 확률을 주며 이것은 우리가 이용하는 중성자 빔 내의 중성자의 수와 부합해야 한다. 그러나 실제로는 입사되고 산란되는 중성자의 파동함수 크기의 비율이 중요하므로 들어오는 중성자의 파동함수의 크기는 임의로 단위 크기, 즉 1로 할 수 있다.

핵에 의해 산란된 중성자 파동함수의 크기는 무엇을 말하는가? 이것은 중성자와 핵의 상호작용의 크기에 달려 있는데 산란된 중성자는 등방성이므로 그 파동함수는 산란핵이 좌표계의 원점에 있다면 $(-b/r)e^{ikr}$ 와 같이 쓸 수 있다. 산란된 중성자의 구형파 선단은 그림4에서 핵으로부터

퍼져나가는 원으로 표현되고 있다. 산란된 중성자의 파동함수에서 $1/r$ 인자는 모든 파동 운동에 적용되는 역제곱 법칙을 말하는데, 파동함수 크기의 제곱으로 주어지는 중성자 빔의 세기는 파원으로부터 거리의 제곱에 반비례하여 감소한다. 이 경우 파원은 산란핵이 된다. 핵의 산란 거리로 언급되는 상수 b 는 중성자와 산란핵간의 상호작용 강도를 표현한다. 파동함수에서 음의 부호는 반발적 상호작용에서 b 가 양수임을 뜻하는 것이다.

여기서 말하는 중들의 형태에서 중성자의 에너지는 고정된 산란핵의 내부에너지를 바꿀 정도보다는 너무나 작아서 어떤 운동 에너지를 전달할 수 없다. 따라서 산란은 중성자 에너지의 변화 없이 일어나고, 이는 탄성산란이라 불린다. 중성자의 에너지가 핵과의 산란에서 변하지 않으므로 속도의 크기, 즉 파동벡터의 크기도 변하지 않고 따라서 들어오는 중성자와 나가는 중성자의 파동함수에서 같은 k 값이 나타난다. 그러면 산란 상호작용의 강도의 한 척도인 산란 거리 b 와 산란 단면적 σ 의 관계는 무엇인가? 산란 단면적, 즉 면적 σ 는



거리 b 와 단순한 관계식 $a = 4\pi b^2$ 로 관련지어 지는데 산란거리가 마치 중성자가 보는 핵의 반경의 반(1/2)인 것처럼 보인다.

몇 개의 핵에 대해서는 산란거리 b 가 입사 중성자의 에너지와 함께 변하는데 여기된 핵의 상태와 비슷한 에너지를 갖는 산란 과정에서 형성되기 때문이다. 이러한 공명 현상은 b 에 복소수 값을 주게 되고, 실수부는 중성자의 산란에 대응하지만 허수는 핵에 의한 중성자의 흡수에 대응한다. 보통 그러한 공명 효과는 중성자의 에너지가 물질의 구조를 조사하는데 이용되는 에너지보다 큰 경우에 나타난다. 중성자 산란을 하는 사람들에게 흥미 있는 대부분의 경우에 b 는 실수이며 에너지에 무관한 양이다. 그러나 b 는 각 원자의 동위원소에 대하여 실험적으로 결정되어야 하는데 X선의 경우에 증가되는 양과는 달리 중성자 산란 거리는 기본 상수들로부터 신뢰성 있게 계산될 수 없기 때문이다.

또한 X선과는 달리 중성자는 (그림 1에서 명백한 것처럼) 원소의 원자번호와 상관없는 것처럼 원자들과 상호작용한다. 사실 한 원자의 핵과 중성자의 상호작용

용은 동위원소마다 다르다. 예를 들어 수소와 중수소는 둘 다 X선과는 약하게 작용하지만 중성자 산란 거리는 상대적으로 크고 아주 다르다. 동위원소마다 다른 산란거리는 개별적인 중성자 산란 실험에서 얻을 수 있는 정보를 증대시키기 위한 다양한 동위원소 식별법(isotopic-labelling)으로 이용될 수 있다. 동위원소 식별법은 소각산란을 말하면서 보다 자세히 말할 것이다.

물질에 의한 중성자 산란

물질에 의해 산란되는 중성자를 다루기 위해서는 개별 핵의 각각으로부터 산란을 모두 더할 필요가 있다. 이는 길고 특별히 유익하다고는 할 수 없는 양자역학적 계산이다. 다행히 자세한 계산은 그 자체는 크게 중요하지 않을 수 있으나 그 결과는 단순하고 매력적이다.

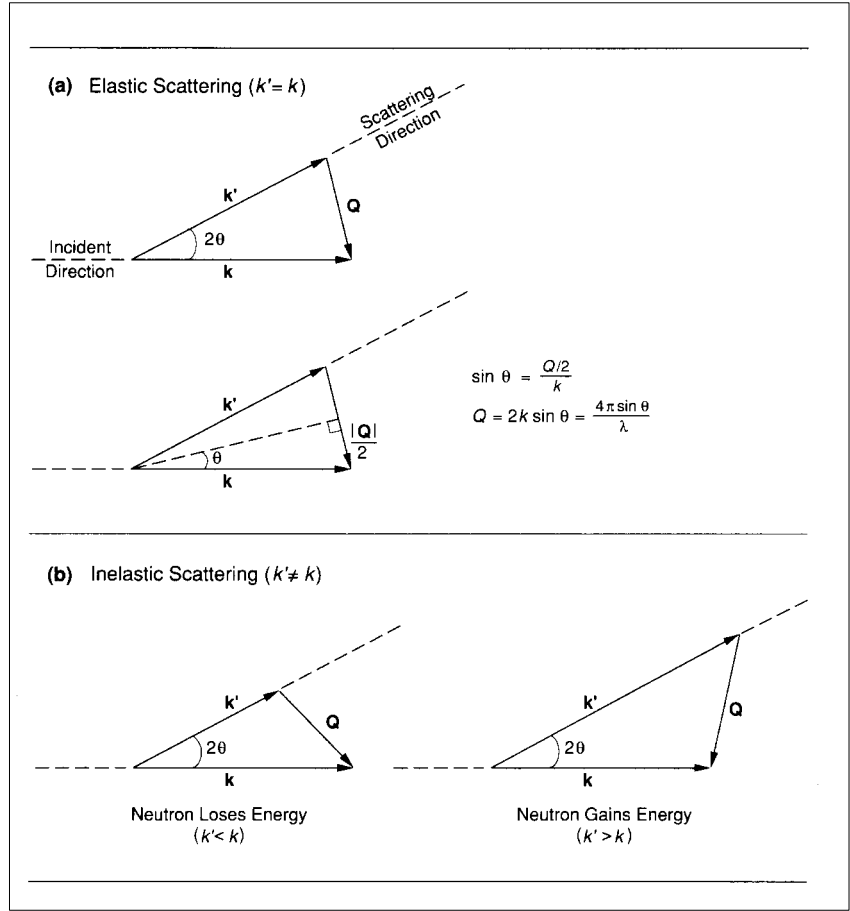
중성자가 물질에 산란될 때, 이 과정은 중성자와 물질의 운동량과 에너지 모두를 변경할 수 있다. 물질내의 원자들은 어느 정도까지는 자유롭게 움직일 수 있으므로 산란이 반드시 단단하고 정해진 단일핵에 의한 것처럼 단정적일 필요는 없다. 따라서 이들 원자들은 중성자와의 충돌에서 되튀길 수 있고, 중성자가 도착할 때 움직이고 있었다면 마치 야구 방망이처럼 에너지를 주거나 흡수할 수 있다.

충돌에서 일반적으로 전체 운동량과 에너지는 보존된다. 중성자가 물질에 산란될 때 중성자가 잃어버리는 에너지 ϵ 는 물질이 얻어 갖는다. 식 (1)에서 충돌시



SCATTERING TRIANGLES

Fig. 5. Scattering triangles are depicted here for both (a) an elastic scattering event in which the neutron is deflected but the neutron does not lose or gain energy (so that $k'=k$) and (b) inelastic scattering events in which the neutron either loses energy ($k' < k$) or gains energy ($k' > k$) during the interaction. In both elastic and inelastic scattering events, the neutron is scattered through the angle 2θ , and the scattering vector is given by the vector relationship $Q = k - k'$. For elastic scattering, a little trigonometry shows (lower triangle in (a)) that $Q = 4\pi \sin \theta / \lambda$.



neutron-scattering law

The intensity of scattered neutrons as a function of the momentum and energy transferred to the sample during the scattering. The scattering law is written as $I(Q, \epsilon)$, where $\frac{\hbar}{2\pi} Q$ is the momentum transfer, and ϵ is the energy transfer (see Eq. 3 in "The Mathematical Foundations of Neutron Scattering").

중성자에 의해 주어지는 운동량의 총량, 즉 운동량 전달은 $\frac{\hbar}{2\pi} Q = \frac{\hbar}{2\pi} (k - k')$, 인데 이때 k 는 입사되는 중성자의 파동벡터이고, k' 은 산란되는 중성자의 것이다. 이 양 $Q = k - k'$ 은 산란벡터로 알려져 있고, 이들 Q, k, k' 사이의 벡터 관계식은 소위 그림 5의 산란 삼각형 (scattering triangle) 그림으로 예시할 수 있다. 이 삼각형은 또한 Q 의 크기와 방향이 입사되고 산란되는 중성자의 파동 벡터의 크기와 산란중 중성자가 휘어지는 각 2θ 로 결정된다는 것을 강조하고 있다. 일반적으로 2θ 는 산란각이라고 말해진다. 그림 5a의 탄성산란에서 $k=k'$ 이고 따라서 $\epsilon=0$ 이며 약간의 삼각함수 계산을 산란 삼각형에 적용하면

$Q = 4\pi \sin \theta / \lambda$ 임을 보일 수 있다.

모든 중성자 산란 실험에서 과학자들은 변수 Q 와 ϵ 의 함수로서 (입사 중성자당) 물질에 의해 산란되는 중성자의 세기를 측정한다. $I(Q, \epsilon)$ 로 표기되는 이 산란된 세기는 보통 일상적으로 시료에 대한 중성자 산란 법칙으로써 말해진다.

완벽하고 격조있는 분석으로 Van Hove는 1954년에 산란법칙이 시료내 원자쌍들의 위치들간의 시간에 관한 상관관계로써 정확히 써질 수 있음을 보였다. (자세한 것은 "중성자 산란의 수학적 기초"를 보시오) Van Hove의 결과는 $I(Q, \epsilon)$ 가 어떤 거리로

떨어져 있는 두 원자를 찾을 확률을 주는 함수의 Fourier 변환에 단순히 비례한다는 것을 의미한다. 중성자 산란의 위력을 말해주는 것은 바로 이 결과의 단순성이다. 자연이 불친절해서 산란법칙의 표현에서 세 원자나 네 원자간의 상관관계를 포함했다면 중성자 산란이 물질의 구조를 직접적으로 조사하는데 이용되어질 수 없었을 것이다.

물론 우리는 아직 어떻게 산란 중성자의 세기를 Q 와 ϵ 의 함수로서 측정할 수 있는지 설명하지 않았지만 Van Hove 결과는 산란 중성자의 세기를 풀걸내 원자들간의 상대적인 위치와 상대적인 운동에 연관시키는 방법을 제공할 것이다. 사실 Van Hove의 공식화는 두가지 형태의 산란 효과를 보여주도록 다룰 수 있다. 첫번째는 간섭성(coherent) 산란으로서 중성자 파가 시료 전체와 하나의 단일체로서 작용하는 것으로서 다른 핵에서 산란된 파들이 서로 간섭하는 것이다. 이런 형태의 산란은 물질 구성 원자간 거리들에 따라 정해지는데 물질 구조에 대한 정보를 주게 된다. 탄성 간섭성 산란은 평형 상태 구조를 말하고 비탄성 간섭성 산란($\epsilon \neq 0$)은 결정 격자내 진동과 같은 것을 만드는 원자들의 집단적 운동에 대한 정보를 주게 된다. 두 번째 형태의 산란, 즉 비간섭성(incoherent) 산란에서는 중성자파가 시료내 각 핵과 독립적으로 작용하여 서로 다른 핵에서 산란된 파들간에 간섭하지 않는다. 더 정확히 말하면 각 핵들에서의 세기를 단순히 더할 뿐이다. 예를 들어 비간섭성 산란은 같은 원자에 대해 다른 위치, 다른 시간에서의 중성자 파와의 상

호작용에 의한 것일 수도 있어 이 경우는 원자 확산에 대한 정보를 주게 된다.

회절 또는 Bragg 산란

간섭성 중성자 산란의 가장 단순한 형태가 회절이다. 원자들이 한 격자내 고정된 위치에 배열되어 있고, 중성자 빔이 그 격자에 대해 쏘여진다고 생각해 보자. 모든 중성자가 평행하게 같은 속도로 움직인다고 가정할 수 있으므로 입사되는 중성자 파동 함수는 모두 같은 값의 파동벡터를 가진다. 원자들과 이에 대응하는 핵들이 고정되어 있다고 상상하므로 산란중에 중성자 에너지 변화가 없는 탄성 산란이며 $k=k'$ 이다.

입사된 중성자 파가 각 원자에 도착하면서 각 원자 위치는 산란 구형파의 중심이 되며 각 구형파들은 모든 다른 산란파들에 대해 상대적으로 한정된 위상을 갖는다. 2차원적으로는 한 음극의 자갈이 고요한 연못에 던져진 것과 같다. 각각의 자갈이 연못(원자 위치)에 부딪히는 점에서 원형파가 밖으로 퍼져 나간다. 각 위치에서 나온 파들이 서로 겹치기 때문에 서로 다른 파들간의 교란이 서로를 강화시키는 위치나 서로를 상쇄시켜 버리는 위치가 있게 된다. 이것이 간섭 현상이다.

파동들이 규칙적으로 배열된 위치에서 퍼져나가기 때문에 개별 교란들은 특정한 방향에서만 서로를 강화시킬 것이다. 다른 말로 한다면 우리가 이들 파동 운동을 좀 떨어진 거리에서 관찰한다면 잘 정의된 방향으로 움직

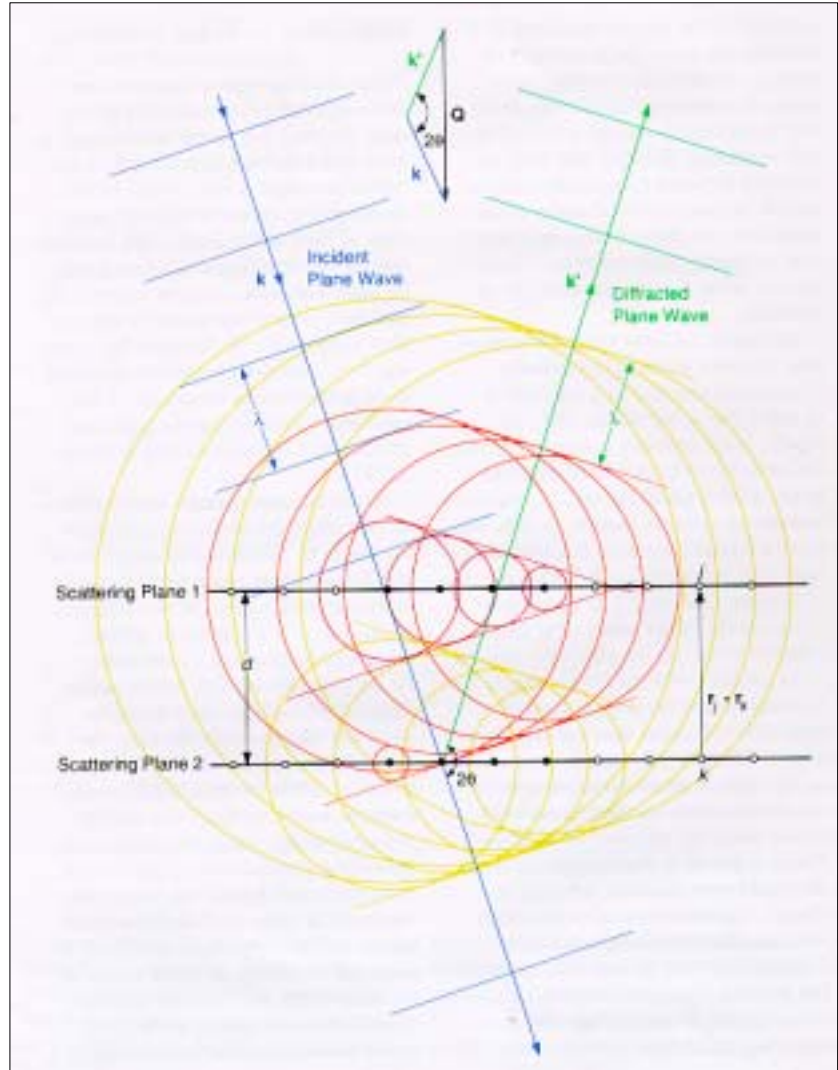


diffraction

A type of scattering in which coherently scattered waves interfere

DIFFRACTION FROM A LATTICE

Fig. 6. As a neutron (represented in the figure by a plane wave) passes through a lattice of regularly spaced scattering centers (rather than the single scattering center of Fig. 4), the spherical wavefronts that represent scattered neutrons will overlap and interfere with each other. In those directions in which the interference is constructive, scattered neutrons may be measured. The figure depicts such constructive interference in two dimensions with planar wavefronts represented as lines, spherical wavefronts as colored circles, and the scattering centers as small circles. To simplify the diagram, the scattering is shown only for four centers (solid black) in each of the two rows of scattering planes. Also, color is used to relate each incident wavefront to the scattered wavefronts that have so far been generated by it. Thus, the incident red wavefront has passed over and scattered from four scattering centers in Scattering Plane 1; the orange wavefront has passed over and scattered from these scattering centers plus the leftmost scattering center in Scattering Plane 2; the yellow wavefront has passed over all eight scattering centers in both planes. For constructive interference to take place, Q must be perpendicular to the two scattering planes, and the condition $Q \cdot (r_1 - r_k) = Qd = 2\pi n$ must be satisfied, where $|r_1 - r_k| = d$ is the distance between the two scattering planes and n is an integer. Combining this condition with $Q = 4\pi \sin \theta / \lambda$ (from Fig. 5a) yields Bragg's law: $n\lambda = 2d \sin \theta$.



이는 파들을 (즉 산란된 중성자 들) 보게 될 것이고(그림 6), 이들 방향은 대칭성과 산란 위치들 간의 간격(또는 격자)과 밀접하게 연관되어 있다 - 육각형 격자는 정사각형 격자와는 다른 종류의 파동을 만들어 낼 것이다. 따라서 여러 입사된 파가 산란되는 방향에 대한 지식을 격자의 대칭성과 원자들간의 거리를 추론하는데 이용할 수 있게 된다. 지금까지 말한 형태의 산란이 바로 회절이라 불린다.

회절은 탄성, 간섭성 산란이기 때문에 산란 법칙의 Van Hove 공식은 단순한 형태로 바뀌어진

다. 단일 동위원소로 구성된 3차원적 격자에서 산란 법칙은

$$\begin{aligned}
 K(Q) &= \sum_{j,k} b_{jkb}^2 e^{iQ \cdot (r_j - r_k)} \\
 &= \left| \sum_j b_{jkb} e^{iQ \cdot r_j} \right|^2 \quad (2) \\
 &= S(Q),
 \end{aligned}$$

과 같이 쓰여질 수 있는데 여기서 r_j, r_k 는 격자내에서 j 와 k 로 식별되는 원자들의 위치를 말하고 b_{jkb} 는 이들 원자들의 간섭성 산란거리이다.

식(2)는 실제 결정에서 중성자 회절 실험에서 측정될 수 있는 양으로서 보통 구조 인자, $S(Q)$, 라 불린다. 식(2)의 합산 과정에

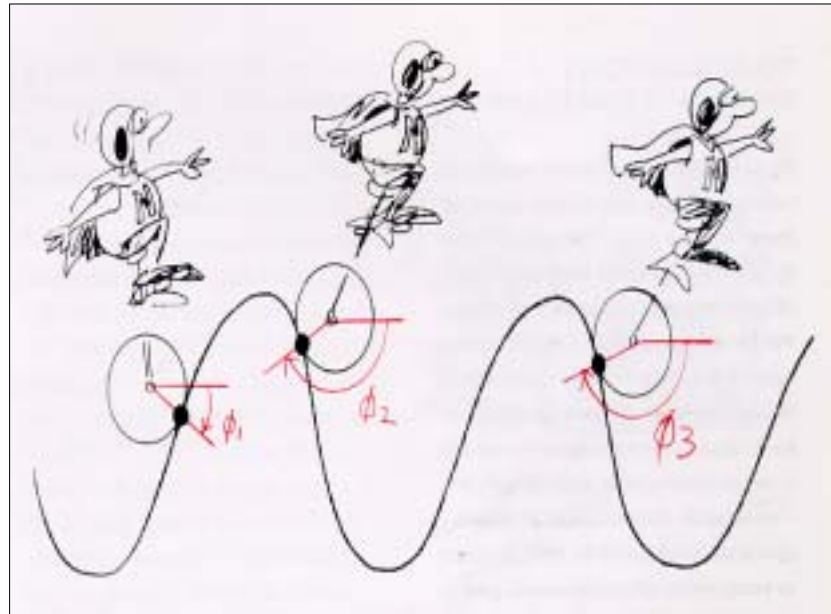
서 격자내 원자들을 셈하므로써 지수 함수의 실수부와 허수부가 모두 본질적으로 +와 - 사이에 임의로 퍼져있는 값들을 갖게 된다. 수많은 원자가 셈해지므로 이 합은 일반적으로 어떤 특정한 값의 Q 를 제외하고는 보통 평균하여 0으로 된다.

분명히 구조인자 $S(Q)$ 를 0이 아니게 하는 Q 값은 좀 특수하다 할 것이고 그렇게 많지 않은 Q 값만이 이 조건을 만족할 것이라고 생각해야 할 것이다. 더구나 식 (2)의 $r_j - r_k$ 벡터가 결정내 서로 다른 원자간 거리의 집합을 나타내기 때문에 이들 값은 결정의 구조와 직접적으로 관련되어 진다.

우리는 그림 6을 봄으로서 $S(Q)$ 가 0이 아닌 Q 값 즉, 회절이 일어나는 Q 값을 정할 수 있다. Q 가 이 그림의 산란면 1과 같은 원자들의 면에 수직하다고 가정하자. 이 Q 의 값이 $2\pi/d$ 의 정수배라면 d 는 원자들의 평행한 면들간의 거리이다.(그림 6의 산란면 1과 2같은) $Q \cdot (r_j - r_k)$ 는 2π 의 정수배이고 $S(Q)$ 는 0이 아닌데 이는 면들에 수직인 각 지수항들이 $2\pi/d$ 의 정수배이기 때문이다. 이 조건을 충족시키지 않는 Q 값들에 대해서는 $S(Q)=0$, 즉 산란이 없다.

중성자 산란이 생기는 Q 값에 대해서는 1912년에 부자간인 William과 Lawrence Bragg에 의해 X선에 대해서 정립되었다. 이를 보기 위해 위에서 말한 조건 $Q=n(2\pi/d)$ 를 탄성 산란의 산란 삼각형에 적용하자. 그러면 그림 5의 Q , θ , λ 의 관계를 이용하여 그 조건은

$$n\lambda = 2a \sin \theta \quad (3)$$



와 같이 쓰여질 수 있다. 브래그 법칙이라 불리는 이 방정식은 산란각 2θ 와 서로 결정면내의 면간 거리를 관계짓는다.

브래그 법칙은 그림 7의 인접한 원자들의 면들에서 산란되는 파동간의 경로차로서도 이해할 수 있다. 보강 간섭이 인접면에서 산란되는 파들 사이에서 발생하기 위해서는 경로차는 파장 λ 의 정수배가 되어야 한다. 이 조건을 그림 7에 적용하면 바로 식(3)에 주어진 것과 같은 형태의 브래그 법칙이 만들어진다. 이 글에서 설명하는 결과들의 많은 것들이 결국은 이러한 관점으로 돌아올 것이다.

때때로 브래그 법칙이라 불리는 회절은 파장 λ 와 입사 중성자 빔과 면간에 이루는 각 θ 가 식(3)을 만족시키면 결정내에서 우리가 생각할 수 있는 어떠한 면들에서도 생길 수 있다. 원자면들의 특정한 집합에서 생기는 브래그 산란은 이러한 면들에 평행한 거울면에서의 반사와 닮았다. 입사 중성자 빔과 원

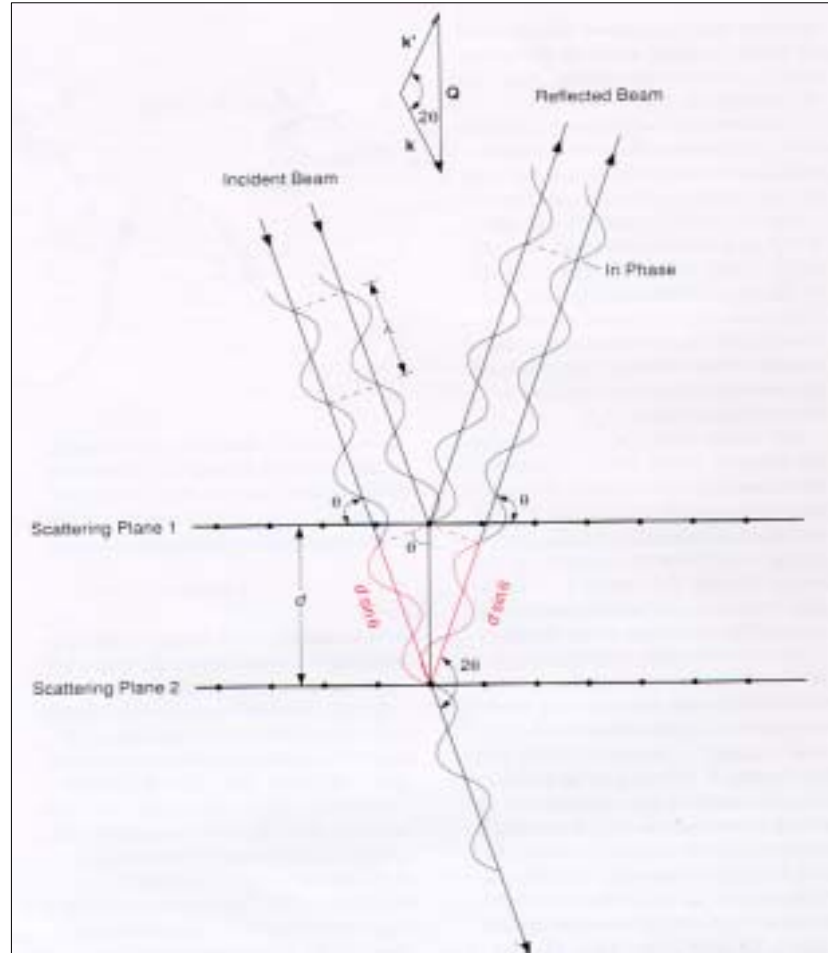
relative phase

The phase angle $\phi = k \cdot r \pmod{2\pi}$ appears in the expression $Ae^{i\phi}$ describing a plane wave of amplitude A . For a plane wave traveling in the x direction with wave vector $k = 2\pi/\lambda$, we can write the phase as $\phi = \frac{2\pi x}{\lambda}$

$\pmod{2\pi}$. Thus as the wave travels a distance λ , its phase changes by 2π . When two waves with wave vector k and equal amplitude A are in phase, their phases at any point in space are the same and the waves add constructively to yield an intensity of $4A^2$. When the relative phase $(\phi_1 - \phi_2)$ of two waves is nonzero, the waves will interfere with each other so that their resulting intensity fluctuates in space and is always less than $4A^2$. Incoherent scattering produces random changes in the phase of the incident wave so that the relative phases of the scattered waves are indeterminate, and the intensity of each wave is added separately to yield the total intensity

THE PATH-DIFFERENCE
APPROACH TO BRAGG'S LAW

Fig.7. Constructive interference occurs when the waves reflected from adjacent scattering planes remain in phase. This happens when the difference in distance traveled by waves reflected from adjacent planes is an integral multiple of the wavelength. The figure shows that the extra distance (shown in red) traveled by the wave reflected from Scattering Plane 2 is $2d \sin \theta$. When that distance is set equal to $n\lambda$, the result is, once again, Bragg's law : $n\lambda = 2d \sin \theta$. Primary scattering occurs when $n = 1$, but higher-order Bragg peaks are also observed for other values of n .



자들의 면사이의 작은 면과 산란 된 빔 사이의 각과 같다.(그림 7) 특정한 파장의 중성자 빔이 단결정에 입사되면 일반적으로 회절이 생기지 않는다. 일련의 면에서 회절이 있기 위해서는 이 결정은 브래그 법칙이 만족되도록 - 마치 어떤 사람의 얼굴에 햇빛을 비추려면 거울을 맞추어야 하듯이 - 방향을 맞추도록 회전되어야 한다. 그렇게 하여 특정한 산란각에서 중성자 검출기로 측정되는 신호는 하나의 브래그 피크(Bragg Peak)라 불리는데 우리가 회절을 얻기 위해 결정을 둘러보면 기록되는 신호에서는 피크를 보게 되기 때문이다.

식(2)에 따라 산란된 중성자의 세기는 그 산란에 관계하는 원자면내의 원자들의 밀도의 제곱에

비례한다. 이것은 한 원자면내 각 원자 j 에 대해 전체 합을 하면 단위 지수 인자들이 다른 원자면에 있는 모든 원자들 k 에 더해지기 때문이다. 하나의 반사면내에 원자들이 보다 밀집하게 분포되어 있을수록 더 많은 단위 인자들이 단위 면적당 더해질 것이다. 따라서 브래그 피크들의 관측에서 (브래그 법칙으로부터) 면들간의 거리와 면안에 있는 원자들의 밀도를 추론할 수 있게 된다. 특정한 파장의 중성자에서 수많은 다른 원자면에 대응하는 브래그 피크들을 측정하려면 산란각, 2θ ,과 결정 방향 두가지를 모두 바꾸어야 한다. 먼저 산란각이 브래그 법칙을 만족시키도록 검출기 위치를 정하고 나서 브래그 회절된 빔이 검출기에 들어올 때까지 결정을 회전시킨다.

여기까지 우리는 단순한 형태의 결정, 즉 단위포로만 구성되어 각각이 단지 하나의 원자만을 갖는 단순한 것들을 이야기하였다. 이 경우 식(2)에서 $S(\mathbf{Q})$ 에 기여하는 지수 인자 각각은 단위값이고, 그 구조는 브래그 피크들의 세기와 브래그 회절이 발생하는 산란각에서 쉽게 추론할 수 있다. 그러나 화학자나 생물학자들에게 흥미있는 물질들의 단위포들은 거의 예외없이 보다 복잡한 형상을 가지며 그 부피에 걸쳐 많은 다른 형태의 원자들이 분포된 것들이다. 물론 이러한 원자들이 단위포내에 임의로 위치한 것은 아니고 그들이 서로 결합된 방법에 따라 결정된 기하학적 형태에 따라 배치되어 있다. 그럼에도 불구하고 브래그 산란으로부터 원자들의 위치를 찾아내는 것이 평범한 일은 아닐 수 있는데 $S(\mathbf{Q})$ 에 기여하는 지수 인자들의 어떤 것은 이제 복소수값이고 이러한 양들의 위상은 브래그 회절의 측정에서 바로 얻을 수 있는 것이 아니기 때문이다. 복잡한 물질의 구조를 찾아내는 것은 수개월 이상의 시간과 굉장한 독창력이 필요할 수도 있다.

단결정 회절 실험에서는 브래그 산란을 얻으려면 결정을 중성자 빔에 대하여 정확히 맞추어 놓아야 한다. 더구나 단일 파장의 중성자가 사용되면 산란을 일으키는 원자면에 대해서 적절한 산란각으로 검출기도 정확하게 놓여져야 한다. 반면에 다결정 분말 (임의 방향으로 분포된 많은 단결정립으로 구성된)에 대해서는 입사 중성자 빔에 대하여 시료의 위치가 어떠한 중성자

를 회절시킬 것이다. 이때는 언제나 분말내에 회절을 일으킬 수 있는 바른 방향으로 있는 결정립들이 있기 때문이다. 그래서 산란각, 2θ ,와 중성자 파장 λ 가 일련의 면들에 대해 브래그 식(3)을 만족할 때마다 하나의 반사가 시료 방향과 독립적으로 검출될 것이다. 이러한 관찰이 분말회절 (powder diffraction)이라고 널리 알려진 기법의 기초로서 중성자원의 성격에 따라 약간 다른 방법으로 이루어진다. 분말 회절을 자세히 말하기 전에 산란 실험에 필요한 중성자를 만드는 데 이용될 수 있는 별개의 기술들에 대해서 생각해 보겠다.

중성자생산 (Neutron production)

국제적으로 중성자 산란 실험 시설들은 원자로 혹은 고 에너지 입자 가속기로서 중성자를 생산한다. 생산된 중성자는 수십 혹은 수백 MeV 에너지를 갖는데 이런 에너지의 중성자 파장은 응집 물질을 연구하기에는 너무 짧다. 더욱이 수 eV 이상의 에너지를 갖는 중성자는 고체내 원자에 충돌하여 원자의 원위치를 벗어나게 하거나 동공이나 틈새 (vacancies and interstitials)를 만들어 고체에 손상을 주는 경향이 있다. 이런 이유로 중성자는 산란 실험에 이용되기 전에 “냉각(cooled down)”되어야 한다.

이러한 냉각은 물 혹은 액체 수소와 같이 큰 산란 단면적 (cross section)을 갖는 “냉각 (moderating)” 물질로서 고에너지 중성자들을 열평형(thermal equilibrium) 상태의 중성자로 바



REACTOR AND SPALLATION NEUTRONS

Fig. 8. (a) The relative flux of neutrons as a function of energy for the high-flux reactor at the Institut Laue-Langevin in Grenoble, France. The curves show the distribution of neutrons emerging from moderators at temperatures of 20, 300, and 2000 kelvins. (b) Similar distribution curves for neutrons generated at the Manuel Lujan, Neutron Scattering Center at Los Alamos (LANSCE) by moderators at temperatures of 20 and 290 kelvins.

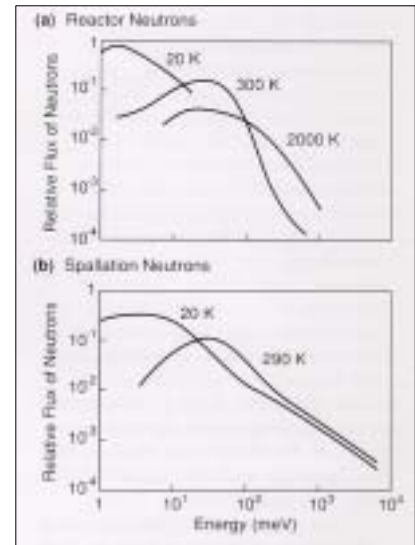


문다. 부피가 0.1 리터부터 수십 리터인 감속재는 중성자 전원 가까이 놓인다. 중성자들은 감속재에 입사하여 감속재 물질내의 원자와 연쇄 충돌하여 에너지가 감소한다. 수십 번의 충돌 후 중성자 에너지는 감속재 원자의 에너지와 비슷하여진다. 그래서 열중성자들이 감속재 온도에 해당되는 평균값 주변의 에너지 스펙트럼을 갖고 감속재 표면에서 나오게 된다. 주변 환경 온도의 물 감속재에서 나오는 중성자의 평균 에너지는 약 25 meV이며, 20K의 액체 수소 감속재에서 나오는 중성자 평균에너지는 약 5 meV이다. 25 meV 중성자의 파장은 원자간 거리와 비슷한 1.8옹스트롬(0.18nm)로서 회절실험에 매우 적합하다.

원자로 전원(Reactor Sources)

중성자는 실험용 원자로에서 사용되는 우라늄 핵연료의 원자핵 분열에 의해서 원자로 내에서 생산된다. 중성자는 위에 설명된 바와 같이 감속되며 그림 8a의 곡선(curves)과 비슷한 에너지 스펙트럼으로 연속하여 원자로에서 나온다.

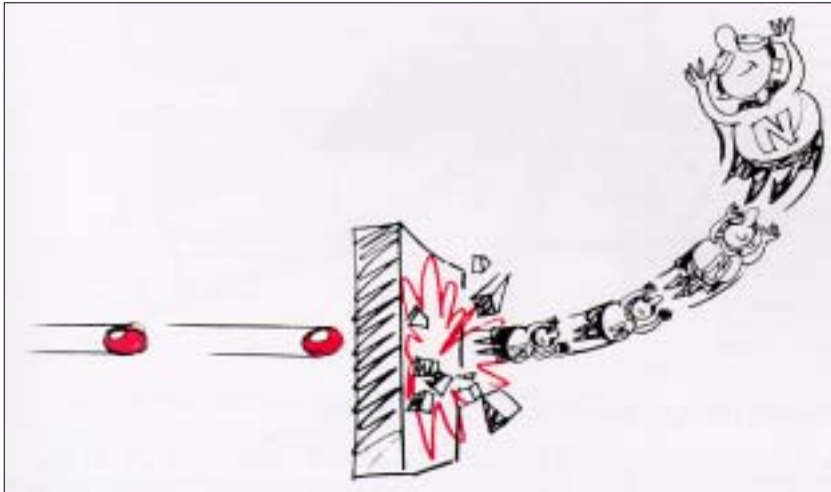
원자로에서 하는 대개의 중성자 산란 실험에서는 감속재에서 나오는 중성자가 단색화된(monochromatic) 빔으로 선택적 감소(reduce) 된다. 즉 스펙트럼에서 한 좁은 에너지 범위(narrow energy band)의 중성자만이 선택된다. 이러한 선택은 pyrolytic graphite, 게르마늄 혹은 구리와 같은 높은 중성자 반사성 물질의 커다란 단결정에 의한 Bragg 반사에 의해 이루어진다. 결정 단색기(crystal monochromator)는 비록 입사 빔



이 여러 파장의 중성자를 갖는다 하여도 원자들의 반사면간 거리, d, 및 산란각, 2θ , 의 Bragg 공식을 만족하는 중성자만을 실험하고자 하는 방향으로 보내는 일을 한다. 실험에 사용되는 중성자의 파장은 바로 이 단색기의 산란각을 바꿈으로써 조절될 수 있다.

파쇄 중성자원 (Spallation Sources)

로스 알라모스의 국립연구소, Manuel Lujan, Jr. 중성자 산란 센터와 같은 다른 중성자 산란 시설들은 핵파쇄(spallation) 중성자를 생산하도록 가속기를 사용한다. 이것은 고에너지 양성자(혹은 효율적으로는 적은 전자)가 텅스텐, 우라늄 같은 무거운 원소의 표적에 충돌하



spallation neutrons

Neutrons generated at an accelerator by driving a highly energetic beam of particles, typically protons, into a target of heavy atoms such as tungsten. The incident protons knock neutrons loose from the nuclei of the target, creating a pulse of highly energetic spallation neutrons.

여 표적의 핵에서 중성자를 유출함으로써 이루어진다. 양성자는 가속기에-로스 알라모스 메손 물리 시설(LAMPF)의 경우 양성자 저장링과 양성자가 1 micro-second 이하로 지속되는 beam burst로 연결됨-의해 생산된다. LANSCE 에서는 800 MeV 양성자의 충돌(burst)이 1초에 20번씩 있다. 그러므로 충돌마다 각각의 양성자는 약 20개의 중성자 빔을 생산한다.

과쇄 중성자원의 장점 중 하나는 아주 작은 양의 에너지만이 - 중성자당 27 MeV - 양성자에 의해 과쇄 표적에 축적된다. 핵분열에 의한 중성자를 생산하는 데는 약 4.5배의 에너지를 생산한다. 그렇지만 고에너지 양성자의 생산하는 비용은 결코 싸지 않다.

결국 과쇄 중성자원에서 실험 장소로 나오게 되는 감속된 중성자는 그림 8b의 곡선과 닮은 스펙트럼을 갖는다. 명확하게 이 스펙트럼은 높은 에너지 중성자의 비율이 높기 때문에 원자로(그림 8a)에서 생산되는 중성자와는 전혀 다르다. 그러나 스펙트럼만이 두 가지의 중성자 선원

에서 다른 것은 아니다. 과쇄 중성자원에서의 중성자는 원자로 중성자가 연속적인 것에 비하여 펄스(pulse)로서 나온다. 이 사실은 원자로에서 필요로 하는 단색화 결정이 필요 없이 모든 중성자를(단지 좁은 에너지범위의 중성자들보다) 사용할 수 있다는 것을 의미한다.

과쇄 중성자원에서 모든 중성자를 사용할 수 있는 비결은 모든 검출되는 중성자가 감속재와 검출기 사이의 거리를 비행하는 시간을 측정할 수 있다는 데 있다. 이 비행 시간으로부터 중성자 속도가 결정되며, 식 (1)에서 중성자의 파장을 알 수 있다. 그러므로 단색 중성자 빔은 불필요하다.

25 meV의 열중성자는 약 초속 22 km 혹은 음속의 약 7배로 비행한다. 전형적인 중성자 분광장치는 약 10m 길이이므로 감속재부터 검출기까지는 약 5 msec 가 걸린다. 펄스 선원의 감속재에서 나오는 중성자 펄스의 폭은 일반적으로 수십 마이크로초로 중성자 비행시간은 상대적으로 높은 정밀도로 결정될 수 있다.



time of flight

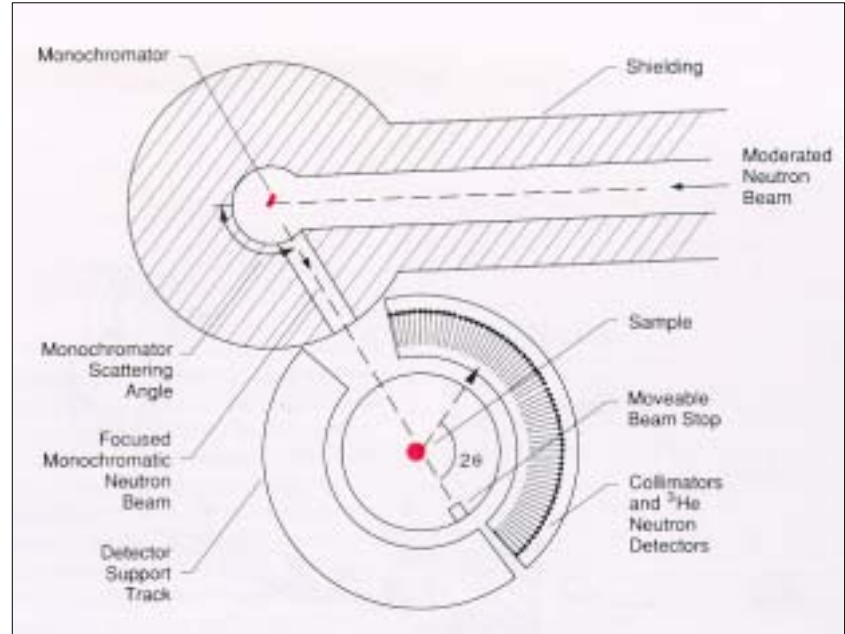
The time it takes a neutron to travel from a pulsed source to a detector, which is thus a measure of the neutron's velocity and kinetic energy.

분말 회절

분말회절 문제로 되돌아가면, 원자로 선원의(그림 9) 분말 회절장치에서는 단색화 빔이 분말 시료에 입사하여 시료로부터 산란되는 중성자는 2θ 각의 함수로 기록된다. 전형적인 산란 양태에서 각각의 브래그 피크는 다른 내부 구조면 간의 거리, 값 d 를 갖는 원자면에 의한 회절에 대응한다. 많은 피크들이 여러 산란 각도에 놓인 검출기에 의해(그림 9의 64개의 He-3 검출기와 같은) 동시에 기록될 수 있다.

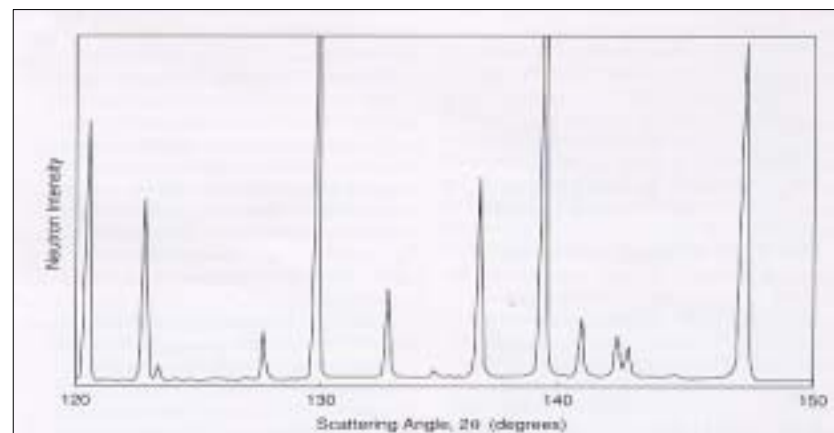
과쇄 중성자 선원의 분말 회절장치에서는 시료는 넓은 범위의 에너지 스펙트럼을 갖는 중성자의 펄스빔으로서 조사된다. 산란된 중성자는 서로 다른 산란각에 위치한 검출기의 제방(검출기 그룹을 말함, bank)에 기록되며, 검출기에 도착하는 산란 중성자의 시간 역시 기록된다. 특정한 산란각에서, 계측 결과는 원자로 선원에서의 결과와 매우 비슷한 회절상이나, 독립 변수가 산란각보다는 중성자의 비행 시간이다. 중성자 비행시간은 중성자의 과장에 비례하며 일정한 산란각에 대해서 과장은 원자간 면의 거리에 비례하기(식 3) 때문에 측정된 중성자 산란은 비행시간, λ , 혹은 간격 d 에 대하여 나타내어질 수 있다.(그림 12) (그림 10과 12에서의 유사성은 명확하다. 회절상은 Bragg 법칙에 따라 등가이며, 사실 원자로나 과쇄 중성자원에서 얻어지는 회절 데이터는 독립 변수로서 단순히 $Q=4\pi \sin \theta / \lambda$ 를 쓰면 같은 척도로 나타낼 수 있다.)

원자로의 경우처럼 과쇄 중성



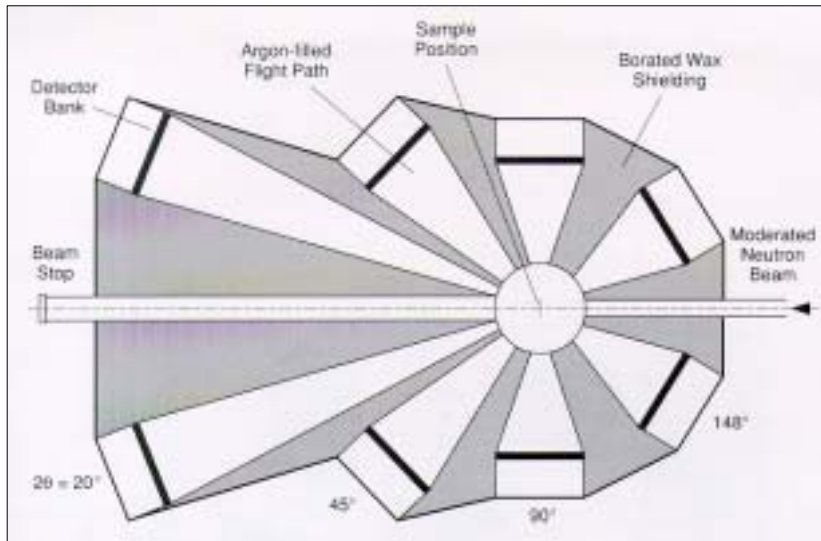
POWDER DIFFRACTION AT A REACTOR SOURCE

Fig. 9. An essential component of a powder diffractometer at a high-flux reactor is a very large crystal whose reflecting surface may also be curved, effectively acting as a concave mirror. A second scattering occurs at the powder sample, which scatters the monoenergetic focused beam toward a set of detectors (here, 64 helium-3 neutron detectors). These detectors are here shown positioned along an arc on one side of the sample, but the whole array can be moved to other positions along the circular support track. The distance between the monochromator and the sample is typically about 2 meters.



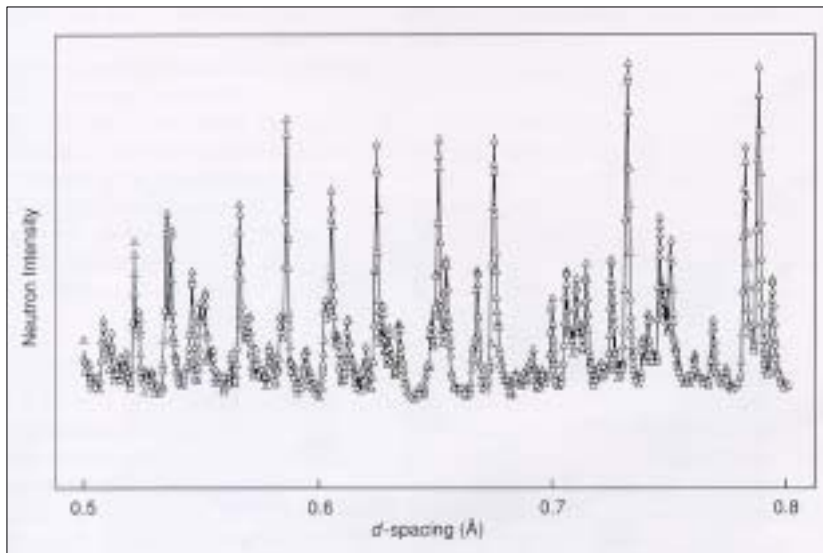
A POWDER DIFFRACTION PATTERN RECORDED AT A REACTOR

Fig. 10. A typical powder diffraction pattern obtained at a reactor source gives intensity, or numbers of neutrons, as a function of the scattering angle 2θ . Each peak represents neutrons that have been scattered from a particular set of atomic planes in the crystalline lattice.



POWDER DIFFRACTION AT A SPALLATION SOURCE

Fig. 11. The Neutron Powder Diffractometer (NPD) at LANSCE. The incident beam of neutrons, having been moderated with water chilled to 10° C, is directed onto the target in a large evacuated chamber. Surrounding this chamber are eight banks of detectors positioned at fixed scattering angles. Each bank consists of sixteen helium-3 detectors, and the d-spacing that can be measured ranges from about 1.2 to 33.6 angstroms at the 20° detector bank to about 0.25 to 5.2 angstroms at the 148° detector bank. The distance between the sample and the detectors at the 90° scattering angle is about 2 meters, so the whole spectrometer is very much larger than the equivalent instrument at a reactor.



A POWDER DIFFRACTION PATTERN RECORDED AT A SPALLATION SOURCE

Fig.12. A typical powder diffraction pattern obtained at a spallation source("fat garnet" measured at one of the 148° bank of detectors in the diffractometer of Fig. 11). As in Fig. 10, the vertical coordinate is the intensity, or number of neutrons, but the horizontal is the d-spacing between atomic planes. The horizontal variable could as well be λ (via Bragg's law, Eq.3) or the neutron time of flight(via Eqs. 1 and 3).

자원에서의 검출기들은 동시에 많은 회절상을 측정하는 것이 가능하도록 서로 다른 산란각에 놓일 수 있다. 낮은 산란각에 위치한 검출기들은 넓은 원자면에 대한 정보를 주는 반면 높은 산란각에 있는 것들은 좁은 간격에 대응하는 데이터를 기록하게 된다. 보통 다른 검출기들간에는 약간의 정보 겹침이 있다.

그림 10과 12와 같은 회절상을 써서 다결정성 시료의 원자수준의 구조가 식 (2)로부터 추론된다. 그러나 실제로는 원자 위치를 추측하여 식 (2)를 계산하며 계산 회절상과 측정 회절상을 비교하여 원자들의 위치를 정렬하게 된다.

이와 같은 절차는 Robert von Dreele박사의 글, "X선과 중성자 결정학 - 그 강력한 결합"에 자세히 설명되어 있다.

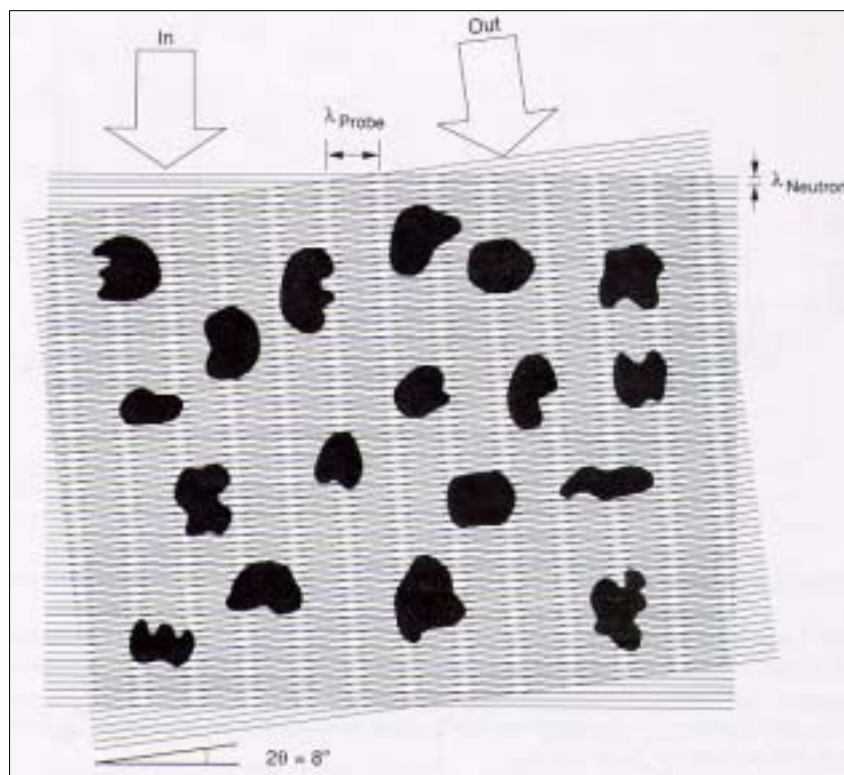
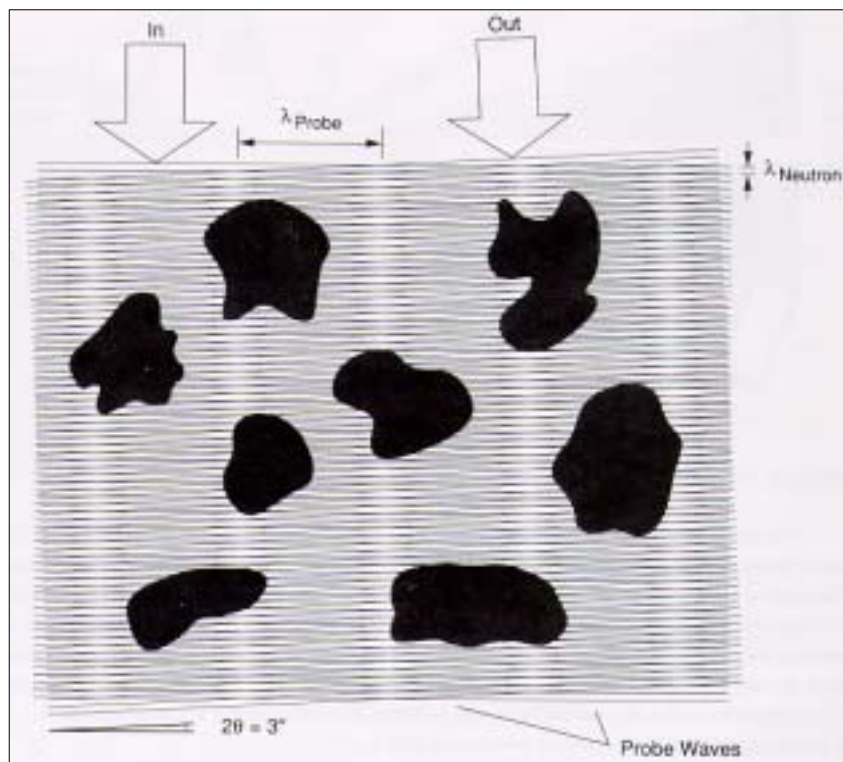
거대 구조 탐색

간접성 탄성 산란에 대해 생각하는 또 다른 방식이 그림 13에 보여지고 있다. 두 개의 어긋난 알짜 울타리가 일련의 Moire 간섭 무늬를 만드는 것처럼, 시료 내에서 "탐색파"를 설정하는 입사 및 산란 중성자 파를 상상할 수 있다. 탐색파의 파장, λ_{probe} 는 들어가고 나가는 파 사이의 각 (즉, 산란각)을 바꾸거나 사용되는 중성자 파장을 늘리거나 줄여서 바꿀 수 있다. 간접성 탄성 산란으로 구조에 대한 정보를 얻기 위해서는 λ_{probe} 는 반드시 구조 자체의 크기와 거의 같도록 선택되어야 한다. 결정학에 있어서 이는 λ_{probe} 가 원자간 간격과 비슷한 정도일 필요가 있음을 의미한다. 우리는 이미 이것이 브라그

THE PROBE-WAVE VIEW
OF NEUTRON SCATTERING

Fig. 13. Another way to view neutron scattering is to imagine that the incident neutron wave(In) and the scattered neutron wave(Out) form a secondary "probe wave"(here seen as a moire pattern in both examples) that must match the average periodicity of the structure in the scattering sample. Because the average periodicity of the top sample is larger than that of the lower one, the wavelength of the probe wave, λ_{probe} , must also be larger, which in turn means that the scattering angle, 2θ , must be smaller(here 3°). Another way to vary λ_{probe} is to change the wavelength of the neutron,

$\lambda_{neutron}$.





small-angle neutron scattering

A technique for studying structural details with dimensions between 10 and 1000 angstroms by measuring the intensity of neutrons scattered through small angles, usually less than 1 degree.

법칙에서 기인한다는 것을 알고 있다. 그림 13에서 적용된 약간의 삼각법은 $\lambda_{probe} = \lambda_{neutron} / 2 \sin \theta$ 임을 보여주어 λ_{probe} 가 두 개의 인접한 산란면 사이의 거리와 같을 때에 브라그 법칙이 만족된다.

탐색과 개념은 일반적인 원자간 간격보다 큰 구조를 어떻게 측정할 수 있을 것인가를 보여준다. 산란각을 줄이거나 중성자 파장을 늘려서 단순히 λ_{probe} 를 크게 할 수 있다. 실제로 그림 3에 보여진 일부 큰 구조 - 예를 들면 중합체, 콜로이드 또는 바이러스 - 를 검사하기 위해서 5옹스트롬 이상의 중성자 파장과 1° 이하의 산란각을 이용할 필요가 있다. 후자의 제약 때문에 이 기술이 소각 중성자 산란, 즉 SANS로 알려지고 있다.

중성자 산란에 대한 Van Hove 공식을 조작하여("중성자 산란의 수학적 기초" 참조) 다음과 같은 소각(즉, 작은 값의 Q)에서의 중성자 산란 강도에 관한 식을 얻을 수 있는데,

$$K(Q) = \left| \int K(r) e^{iQ \cdot r} d^3r \right|^2 \quad (4)$$

적분은 전체 산란 시료에 걸쳐 확장되며, 산란길이 밀도 $b(r)$ 은 작은 부피내 모든 원자들의 간섭성 산란 길이들을 합하고, 그 부피로 나누어 계산된다.

많은 경우에 SANS로 측정되

는 시료들은 산란 길이 밀도가 b_m 인 균질의 용매 내에 분산된 균일한 산란 길이 밀도 b_p 의 입자들로 구성되어 있다. 그 예로서는 암식내의 기공, 콜로이드 분산, 물 속의 생체 거대 분자를 비롯한 다수의 예를 들 수 있다. 이 경우에 식 (4)에서의 적분은 전체 시료에 걸친 균일 적분과 입자와 용매의 산란길이 밀도 차이, $b_p - b_m$ 에 의존하는 부분으로 나눌 수 있다. 이 산란 길이 밀도 차이는 대비 인자(contrast factor)로 불린다. 모든 입자들이 동일하고 그들의 위치가 서로 상관성이 없다면, 식 (4)는 다음과 같이 바꾸어 쓸 수 있는데,

$$K(Q) = (b_p - b_m)^2 N_p \left| \int_{V_p} e^{iQ \cdot r} d^3r \right|^2 \quad (5)$$

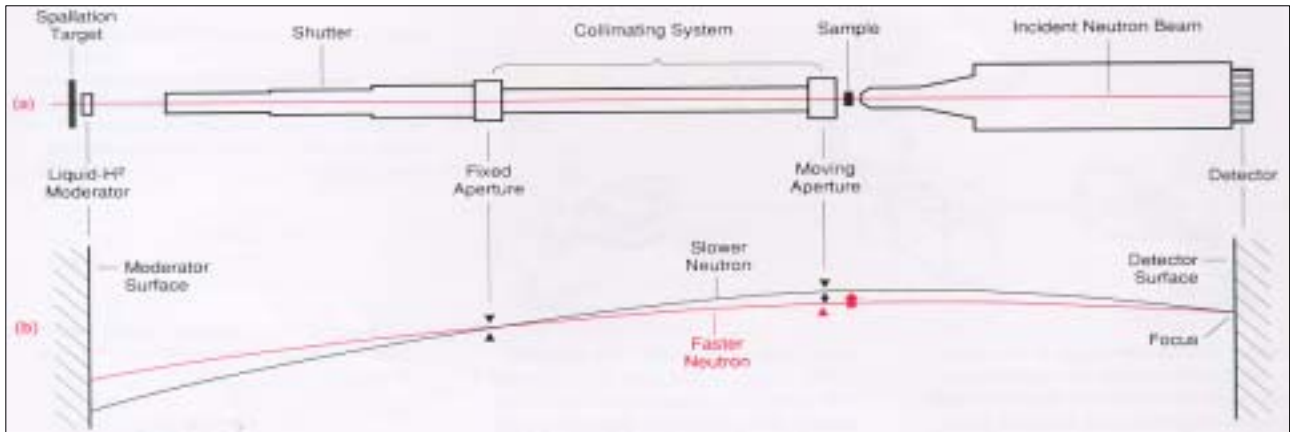
적분은 시료내 입자 하나의 전 부피 V_p 에 걸쳐 행해진다.

위 식에서 입자내에서의 위상인자 $e^{iQ \cdot r}$ 에 대한 적분은 그 입자의 형상 인자(form factor)라 한다. 많은 단순 입자 모양에 대한 형상 인자는 별 어려움 없이 계산될 수 있는데, 구형 대상물에 대한 표현은 1911년에 Lord Rayleigh에 의해 처음으로 유도되었다.

식 (5)에 의해서 대비 일치(contrast matching)라 하여 소각산란에서 이용되고 있는 중요한 기술에 대해 이해할 수 있다. 전산란은 입자와 이것이 잠겨 있

contrast matching

An isotopic-labeling technique based on the dramatic difference between the scattering lengths of hydrogen and deuterium, which is particularly useful in neutron-scattering studies of complex biological molecules in aqueous solution. The technique involves matching the scattering from the biological molecules by replacing the hydrogen atoms in the solvent or the component or both with deuterium. The observed scattering is then due to only the unmatched components.



A SMALL-ANGLE NEUTRON-SCATTERING SPECTROMETER

Fig. 14. (a) The spectrometer illustrated here, the Low-Q Diffractometer (LQD) at LANSCE, measures neutron scattering at small angles. The neutrons are first moderated in liquid hydrogen to increase the percentage of very cool, long-wavelength neutron in the beam that hits the sample. The moderated beam then passes through a collimating system that is more than 7 meters long before impinging on the sample. To increase the accuracy with which the small scattering angles can be measured, the large position-sensitive detector is placed far from the sample (about 4 meters). (b) Neutrons from a spallation source have a range of speeds and are thus under the influence of gravity for different amounts of time, an effect that smears the signal at the detector. However, the beam can be "focused" by placing a fixed aperture at the beginning of the collimator and a moveable aperture at the end of the collimator and accelerating the latter aperture upward during the pulse of neutrons. Such an arrangement selects only those neutrons with parabolic trajectories that end at the center, or focus, of the detector. Small-angle scattering is suitable for studying structures with dimensions in the range of 10 to 1000 angstroms

는 용매간의 산란 대비의 제곱에 비례한다. 입자가 산란길이가 같은 매체에 잠겨있다면 입자는 보이지 않을 것이다.(이 기술은 젤라틴 치약 제조업자들에 의해 이용되고 있다. 실제로는 그 치약 속에 이빨을 닦기 위한 모래같은 물질이 있지만, 그 모래와 젤라틴이 비슷한 굴절율을 가지고 있기 때문에 모래가 보이지 않는다!)

관심있는 입자가 균일한 구형 이라기보다 어떤 산란길이의 핵(노른자위)과 다른 산란길이의 외피(흰자위)를 갖는 구형 단량 이라고 가정하자. 그 입자들이 산란길이가 단량 흰자위의 것과 동일한 매체에 잠겨져 있다면 중성자 산란 실험은 오직 노른자위만을 보게 된다. 형상인자는 오직 중앙부분에 걸친 적분에 의해 계산된다. 반대로, 산란길이가 단량 노른자위의 것과 동일한 매체에 잠겨져 있다면 흰자위만이 보이게 되고, 그 형상인자는 속이 빈 두꺼운 껍질 형태의 것에 해당한다. 산란 상은 두 경우에 대해 서로 다르게 될 것이고, 이 두 실험으로부터 입자의 외피와 핵, 두 부분의 구조를 밝혀 수 있다.

용매내 산란길이가 밀도의 변화

는 종종 수소를 포함하는 용매(물과 같이)를 선택하여 이루어진다. 수소 원자의 서로 다른 비율을 중수소로 치환하므로써 용매에 대한 넓은 범위의 산란길이 밀도를 얻을 수 있다. 앞서 언급한 마와 같이 대비 일치 기술은 수소와 중수소의 현저히 다른 산란 길이 밀도 때문에 적용 가능하며, 이것이 생체 문제에 중성자 산란을 성공적으로 적용할 수 있는 주된 이유중의 하나이다. DNA와 단백질은 서로 다른 비율의 중수소를 포함하는 물에 의해 대비를 일치시킬 수 있다. 대비 일치에 의해 연구된 구조적 생체에서의 몇가지 문제들이 Jill Trewhella가 쓴 "무시된 크기 정도에서의 생물학"에 기술되어 있다.

소각산란은 아마도 실제로 현실화하기 가장 쉬운 중성자 산란 기술일 것이다. 회절 실험과 마찬가지로, 원자로 선원에서의 SANS 실험은 단백질을 필요로 하는 반면에 파쇄 선원에서는 비행시간 측정에 의해 입사 및 산란 중성자의 파장이 결정된다.

LANSCE 시설(그림 14a)에서 Low-Q 회절장치는 파쇄 선원에서의 SANS 분광장치의 한 예이다. 장치 필수 부품의 하나는 시

로 뒤의 입사빔 선상에 놓여 있는 커다란 위치민감형 증성자 검출기이다. 또 다른 중요 부품은 (LANSCE의 Paul Seeger에 의해 개발되었는데) 중력 초점기로 (그림 14b) 증성자가 중력의 영향으로 아래로 떨어진다는 사실로 설명된다. 입사 증성자 빔의 궤적을 정의하는 클리메터의 출구에 있는 개구(開口)가 고정되어 있다면, 서로 다른 속도의 증성자가 검출기에서 서로 다른 높이에 떨어져 그 곳에 생성된 상을 흐리는 포물선 경로를 따를 때만이 이 개구를 통과할 수 있을 것이다. 이러한 흐름을 방지하기 위해서 클리메터 출구의 개구는 각 증성자 펄스가 지나는 동안에는 위로 움직인다. 그러면 느린 증성자는 검출기 중심보다 상대적으로 높은 통로를 따라 통과하여야만 한다. 매 순간의 개구 위치는 모든 증성자가 시료에 의해 산란되지 않는다면, 속도와 상관없이 검출기 중심에 도달하도록 선택된다. 모든 상황은 약한 들뜬상태는 목표물을 맞추기 위해 들뜬 높은 궤적으로 던져야만 하는 들뜬상태 대외와도 같다.

비탄성 산란

실제로는 원자들이 결정내의 고정된 위치에 꼼짝없이 붙어 있지는 않다. 열에너지로 인해 원자들은 격자점을 중심으로 주위에서 진동하며 그 주변의 작은 부피내를 돌아다니게 된다. 한 원자는 격자내의 지정 위치에 정확히 자리하고 있을때만 브라그 산란의 보강 간섭에 완전히 기여할 수 있으므로, 원자가 더욱 더 진동하고 지정된 자리를 점유하는 시간이 적어질수록 그 산란은

더욱 약해진다.

결정구조가 단결정 또는 분말 회절에 의해 결정될 때는 원자의 열진동 정도도 원자 위치와 동시에 구해진다. 열 운동은 자주 비등방성인데 이는 원자가 그 평형 위치로부터 특정 방향으로 움직이기가 더 쉽다는 것을 나타낸다. 때때로 이 정보는 상전이에서 발생하는 구조 변화나 탄성 비등방성과 같은 다른 특성과 관련될 수 있다.

산란 신호의 그러한 약화가 탄성 브라그 산란에서의 원자의 열 운동에 의한 유일한 영향이라 할지라도 이것이 원자 운동 관측에 증성자를 이용하는 유일한 수단은 아니다. 사실 응집물질의 탐색자로서 증성자의 가장 큰 이점은 비탄성 산란 측정에 의해 원자 및 분자운동의 상세한 측정에 이용할 수 있다는 점이다. 바꾸어 말하면, 증성자가 완전히 견고하지 않은 분자 구조에서 되튕길 때 증성자와 격자간의 에너지 교환에 의한 비탄성 상호작용을 가질 수 있다는 것이다.

이것을 설명하기 위해 다른 단순한 유추로부터 시작해 보자. 줄의 한쪽 끝이 고정점에 묶여 있고, 다른 쪽 끝이 위 아래로 흔들리면, 파동이 줄을 타고 이동하는 것을 볼 수 있다. 이러한 효과의 불연속적인 변형은 합창단에서 얻을 수 있다(이 유추에 대해 중서부 텔레비전 방송국을 위해 안무를 담당했던 한 동료에게 감사한다). 선상의 각 단원이 한쪽 편의 이웃 단원보다 약간 늦게 출발하면서 다리를 흔들기 시작하면 전체적인 효과로 선을 타고 이동하는 파동이 나타난다.

결정내 원자의 열운동은 이러한 파동의 중첩으로 기술될 수 있다. 원자들은 합창단 단원들의 다리로 상상할 수 있다.

이 유추는 행태를 제외하고는 흔들리는 다리를 맨 끝에 무게가 실린 견고한 진자로 바꾸므로서 개선할 수 있다. 다리를 흔들기 위해 이웃을 지켜보기보다는 각 진자와 인접한 두 개의 이웃 사이에 동일한 용수철을 붙여 연결할 수 있다. 이제 한 진자를 옮기면 용수철들은 인접한 진자 또한 움직이려 하는 경향이 있고, 합창단에서 그러했던 것처럼 파동이 선상을 오르내리며 통과한다. 운동 주파수는 진자의 질량과 그들을 연결하는 용수철의 단단한 정도에 좌우된다.

진자 사슬에서의 유사한 파동이 물질의 결합을 이루는 결합력에 의해 연결되어 있는 원자 격자를 통과한다. 그러나 이 경우에는 3차원적으로 발생하기 때문에 전체적인 효과는 가시화하기가 매우 힘들다. 그럼에도 불구하고 결정내의 원자 운동은 서로 다른 주파수와 파장을 갖는 파동의 중첩으로 기술될 수 있다는 것을 증명할 수 있다. 바꾸어 말하면 격자점에 대한 원자의 열운동은 격자를 통해 움직이는 파동의 중첩으로 기술될 수 있으며, 이 파동들은 포논(phonon)으로 알려져 있다. 그 에너지는 각 포논이 에너지 $h\nu$ 를 갖도록 양자화되어 있으며, ν 는 그 포논에 관련하는 원자운동의 주파수이다. 바로 진자 유추에서처럼 포논의 주파수는 왜곡 파장, 원자 질량, 그리고 그들을 연결하는 "용수철"의 단단함, 즉, 결합력에 좌우된다.

phonons

Fundamental vibrational waves in a crystal in which nuclei oscillate in a coordinated manner about their "official" positions.

중성자가 결정성 고체에 의해 산란될 때 포논 에너지 양자 $h\nu$ 에 해당하는 에너지 양을 흡수하거나 방출할 수 있다. 이것이 중성자 에너지가 산란 전후에 포논 에너지 ϵ 만큼 다른 중성자의 비탄성 간섭 산란을 일으킨다. 대부분의 고체에서 ν 는 수 10^{12} Hz 이고, 이에 해당하는 포논 에너지는 수 meV이다(10^{13} Hz는 에너지 4.18 meV에 해당한다). 산란 실험에 이용되는 열중성자 또한 meV 범위의 에너지를 가지고 있기 때문에 포논에 의한 산란은 중성자 에너지의 상당한 크기의 변화를 야기한다. 이러한 점이 에너지 변화의 정교한 측정을 가능하게 하고, 중성자로 포논 주파수를 측정하므로써 물질을 서로 유지하는 힘에 대한 정보를 얻는 이상적인 도구로 만든다.

비탄성 산란 - 예를 들면 포논으로부터의 - 에 대해서 중성자는 시료와의 상호작용 전후에 서로 다른 속력, 따라서 서로 다른 파동 벡터를 가져, 산란 삼각형의 해당 변(그림 5b의 k 와 k')들이 동일하지 않은 길이를 갖는다. 포논 에너지와 산란벡터, Q 를 결정하기 위해서는 산란 전후의 중성자 파수 벡터를 결정할 필요가 있다. 원자로에서는 이미 논의된-단결정으로부터의 브래그 산란 방법에 의존할 수도 있다. 첫번째 결정인 단색기는 (그림 9에 보인 분말회절장치에서 그랬던 것처럼) 시료에 주어진 에너



지의 중성자를 제공한다. 시료가 이 중성자들을 다양한 방향으로 산란한 다음, 두번째 결정-잘 정의된 산란각에 위치해 있으며, 분석기로 불림-은 특정한 에너지를 갖는 중성자들만을 적절히 배치된 검출기로 브래그 반사한다. 이러한 형태의 장치는 산란각이 바뀔 수 있는 세 개의 중심(단색기, 시료 및 분석기)이 있어서 3축 분광장치로 불리운다(그림 15). 이러한 장치는 원자로 시설에서 포논을 측정하는 일에 매우 쓸모있게 이용되고 있다.

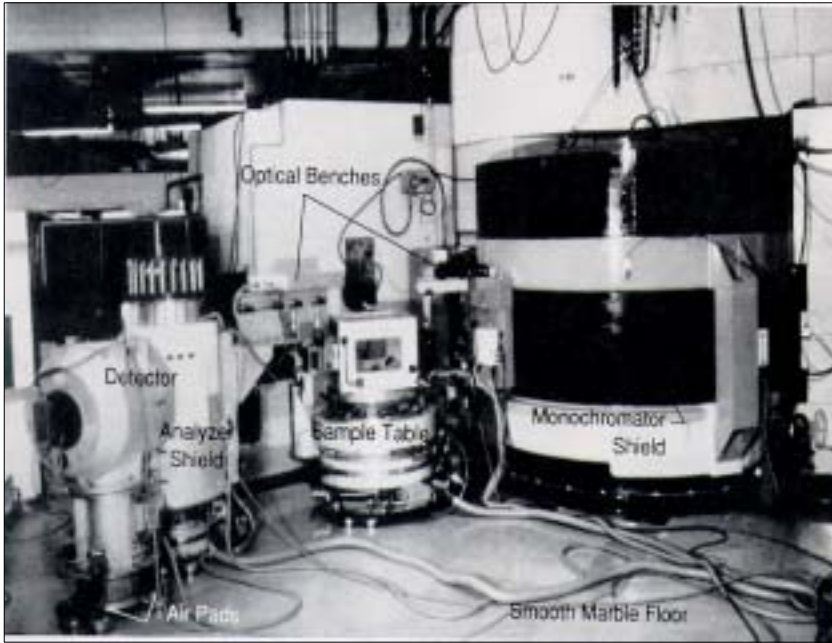
3축 분광장치는 중성자 산란에 의해 연구된 다양한 과학적 문제들에, 아마도 그렇게도 비능률적이었기 때문에, 다량으로 공헌하였다. 분광장치의 각 세팅에서-단색기, 시료 및 분석기에서 특정한 산란각에 해당하는-측정은 단일 산란 벡터, Q 와 에너지 전이, ϵ 에 대해 이루어진다. 각 측정은 보통 수 분이 걸려서 일련의 ϵ 값에서의 전체 스캔은 수 시간 심지어 수 일이 걸릴 수 있다. 그럼에도 이러한 비능률성은 실험자가 특정한 값의 Q 와 ϵ 에서 특정한 소여기 측정에 주력하고, 이는 그 사람에게 이미 쌓여진 데이터에 비추어서 각기 새로운 측정을 계획할 수 있는 시간을 주는 장점을 갖는다.

3축 분광장치의 성공은 재미있는 철학적 고민을 가져왔다. 그 가장 근본적인 특성에서 재료과학은 그 연구를 위해 3축 분광장치와 같은 장치를 필요로 하는가? 즉, 브래그 산란과 같이 제한

된 영역의 Q 와 ϵ 에서만 대다수의 흥미롭고 중요한 현상이 발생한다고 믿는 어떠한 이유가 있는가? 아니면, 3축 분광장치가 그렇게도 인기 있고 널리 퍼져 있기 때문에 재료에 대한 우리들의 이해가 실제로는 제한되어 왔는가? 3축 분광장치가 한번에 단일 산란 벡터와 에너지 전이만을 탐색할 수 있기 때문에 진실의 한 단면만을 보아 온 것인가? 넓은 영역의 Q 와 ϵ 를 동시에 측정할 수 있다면 보다 더 많은 것을 배울 수 있을 것인가? 물론 광범위한 다른 형태의 분광장치 이용을 통해서만이 이 질문에 대한 답을 얻을 수 있을 것이다. 넓은 범위의 산란 벡터와 에너지 전이에 대한 중성자 산란 조사에 최적인 다수의 분광장치들이 LANSCE의 것과 같은 파쇄 중성자원에 설치되어 있다.

실제로 3축 분광장치와 동일한 것을 파쇄 선원에 지을 수는 없다. 그러나 비탄성 산란은 다양한 방법으로 측정될 수 있다. 아마도 가장 단순한 방법은 3축 분광장치에서 그랬던 것처럼 산란 중성자 빔에 분석 결정을 놓는 것이다. 이 결정은 시료에 의해 산란된 최종 에너지를 결정한다. 이 에너지와 감속제로부터 검출기까지의 전 비행시간이 알려지고 나면, 입사 에너지 또한 추산될 수 있다.

펄스형 파쇄 선원에서 비탄성 산란을 측정하는 또 다른 방법이 Juergen Eckert와 Phil Vergamini에 의해 토의된 일부



THREE-AXIS NEUTRON SPECTROMETER

Fig. 15. A three-axis spectrometer built by the author at the Institut Laue Langevin in Grenoble, France. The scattering angles at the monochromator, sample, and analyzer can be varied by moving these connected units on the air pads seen in the photograph. This spectrometer is equipped for polarization analysis. The hollow box-like object on the sample table has current-carrying wires along each edge that can produce a field of about 100 oersteds at any direction on a sample placed at the center of the box. Various spin flippers, diaphragms, and filters are mounted on the optical benches before and after the sample position.

데이터를 얻기 위해 사용되었다 (“중성자와 촉매” 참조). 이 방법은 산란 중성자 빔에 분석기라기 보다는 필터를 이용한다. 필터는 일정한 절단 값보다 작은 에너지의 중성자만이 그 뒤에 있는 검출기로 통과하도록 한다. 이러한 형태의 필터는, 예를 들어, 수 cm 두께의 냉각된 다결정 베릴륨 블록으로 만들 수 있다. 중성자가 블록에 부딪힐 때는 마치 일반적인 다결정 재료에서처럼 산란된다. 그러나 어느 이상에서는 브래그 산란이 일어날 수 없는 중성자 파장의 최대값이 있는데, 이는 이 장파장의 중성자를 회절시키기에 충분한 간격을 갖는 원자면이 없기 때문이다. 따라서 이 절단 값보다 큰 파장의 중성자는 빔으로부터 산란되어 나가는 것 없이 그대로 필터를 통과한다. 베릴륨의 경우, 약 4Å 이상의 파장 길이(약 5 meV 이하의 에너지)를 갖는 중성자는 부과한다. LANSCE의 Filter-Difference 분광장치에서는 베릴륨과 산화 베릴륨, 두 개의 필터가 사용된다. 후자는 3.7 meV 이하의 에너지를 갖는 중성자를 부

과시킨다. Be 필터로 얻은 데이터로부터 BeO로 얻은 데이터를 빼므로서, 두 여과 에너지 3.7 meV와 5meV 사이의 좁은 창의 최종 에너지를 갖는 중성자만을 포함하는 결과를 얻는다. 이 기술로 산란 중성자 에너지를 정교하게 결정할 수 있다. 대개는 전 비행 시간에 의해 입사 중성자 에너지를 추산할 수 있다.

Filter-Difference 분광장치는 장치 기하학적 구조가 산란벡터, Q 를 높은 정확도로 결정하는 것을 예상초 어렵게 하여, 또는 측정에는 그리 적절하지는 않다. 그러나, 이는 비간섭성 비탄성 산란 측정에는 장점이 되는데, 에너지 전이 ϵ 이 종종 Q 에 무관하고, 다수의 Q 값에 대한 산란 강도를 더하여 얻어진 데이터의 통계 정확도를 올릴 수 있기 때문이다. 이 합산은 LANSCE의 Filter-Difference 분광장치에서 자동적으로 이루어진다.

과채선원에서 비탄성 산란을 측정하는 마지막 방법-산란벡터를 정확하게 결정하는 방법-은

이른바 초퍼(chopper) 분광장치를 이용하는 것이다. 초퍼는 길이에 수직인 축에 대해 회전하는 짧은(20cm) 파이프로 생각할 수 있는데, 산란 시료의 앞쪽의 중성자 빔에 놓여 있다. 파이프가 펄스 중성자 선원 주파수의 정수 배에 해당하는 주파수로 회전하고 있으면, 각 중성자가 감속제로부터 펄스로 나오는 동시에 파이프가 간단하게 중성자 빔에 정렬하게 된다. 초퍼는 대개 감속제로부터 수 m 떨어져 있어서 각 펄스내의 빠른 중성자가 보다 느린 형제들에 앞서 초퍼에 도착한다. 초퍼가 열려 있을 때 - 즉, 빔과 정렬되었을 때 - 도착한 중성자만이 통과한다. 따라서, 초퍼는 작은 속도 띠 내의 중성자를 선택하여 시료로 입사시킨다. 이때 마찰의 중성자들은 초퍼에 너무 늦거나 빨리 도착하여 막혀버려 정지된다. 따라서 초퍼는 시료에 입사하는 중성자의 파동 벡터를 결정하고, 반면에 전 비행 시간 측정에 의해 산란 중성자의 파동 벡터 또한 계산할 수 있다.

초퍼 분광장치의 큰 장점은 중

성자 검출기를 동시에 많은 서로 다른 산란각에 배치하여 많은 Q 와 ϵ 값에서의 산란을 한번에 기록할 수 있다는 것이다. 단점은 실험자가 데이터에 파묻혀서 대량의 숫자 배열을 이해할 수 있는 상태로 변형하기 위해 컴퓨터에 크게 의존해야만 한다는 것이다.

사실상 대량의 데이터는 파쇄 선원의 분광장치에서는 보통이다. 각 검출기에서 검출 중성자의 비행 시간을 달리하는 전 영역에 해당하는 일련의 Q 와 ϵ 이 측정된다. 데이터 홍수를 원하든, 아니던 간에 자동적으로 이러한 값들이 얻어진다. 간단히 말해서 원자로 선원에서의 3축 분광장치가 소용이라면 파쇄선원에서의 것은 산탄총이다. 어느 선원이 주어진 실험에 대해 더 효과적인가는 진정으로 어떤 형태의 정보가 요구되는가-단일 정곡이나 또는 흥미로운 구멍으로 가득한 큰 과녁이나!-에 달려있다. 보다 진지하게 말해서 원자로 선원에서는 몇 개의 Q 와 ϵ 값에 대한 산란 법칙의 상세한 지식을 얻을 수 있고, 파쇄 선원에서는 이러한 변수의 넓은 범위를 걸치는 보다 확장된 묘사를 얻을 수 있다.

자기산란

지금까지는 단지 중성자와 원자핵들 사이의 상호작용만을 검토하였다. 그러나 중성자와 물질 사이의 다른 상호작용 즉, 중성자가 자기 능률(모우멘트)를 가진다는 사실에서 야기되는 것이 있다.(그림 2.) 반대편을 끌어당기거나 밀어내는 두 막대 자석처럼 중성자는 물질내의 전자와 같

은 다른 자기 입자에 가깝게 통과할 때 자기력을 경험한다.

대다수 원자 또는 물질내 전자들은 한 전자의 자기 능률이 상대편의 것을 상쇄할 수 있도록 쌍을 짓는다. 그러나 때로는 외각 또는 속박 전자들이 특별한 화합물에서 모두 쌍을 짓는 것은 아니며 중성자들은 결과적인 자기 능률에 의해 산란된다. 회전 실험들은 앞서의 기술과 유사하게 고체 원자들 사이의 짝을 짓지 않은 전자들의 밀도 측정에 이용될 수 있다.

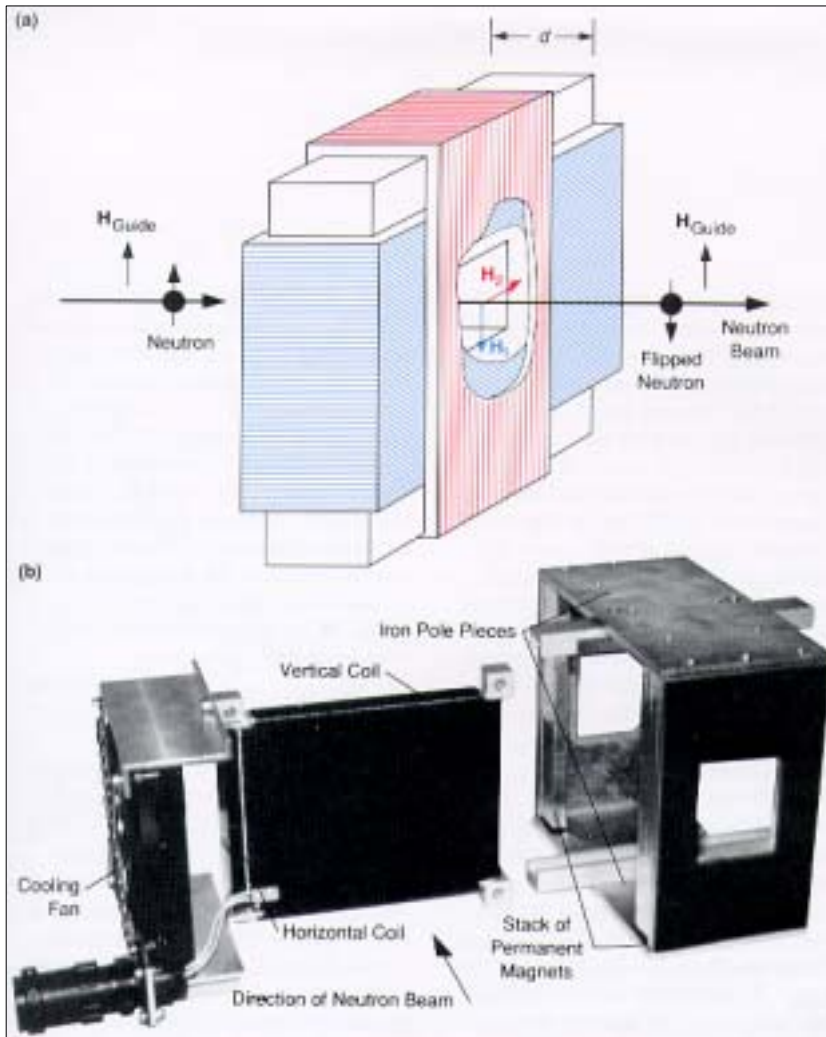
철과 같은 강자성 물질은 쌍을 짓지 않는 전자들이 자발적으로 정렬하려는 경향이 있기 때문에 자기적이다. 많은 목적을 위하여, 이러한 물질들은 마치 하나의 작은 자기 능률이 각 원자 위치에 있는 능률들의 방향이 같도록 배치되어 있는 것처럼 행동한다. 이러한 능률들은 핵 상호작용과 유사한 방법으로 중성자의 브라그 회절을 불러일으킨다. 핵 그리고 자기 상호작용은 중성자에 의해 경험되기 때문에 유사한 양이며, 관련된 각각의 브라그 반사들은 또한 서로 비교 가능한 세기이다.

두 산란 형식 사이의 차이는 핵에 의한 것과는 달리 비등방적이라는 것이다. 자기 상호작용은 쌍극자 특성을 가지고 있으며 두 막대자석을 다른 하나에 가깝게 가져감으로 쉽게 관찰할 수 있다. 두 개의 자석의 북극들이 위로 나란히 향하고 있다고 가정하자. 만일 한 자석이 다른 자석의 위쪽에 있으면, 다른 극들이 가까워지고, 자석들은 끌어당길 것이다. 만약 이들이 나란히 있으면, 같은 극들이 가까워지고, 자

석들은 서로 밀어 낼 것이다. 중성자들에 대하여 자기상호작용의 쌍극성은 단지 산란 벡터 Q 에 수직인 시료의 자화 성분만이 중성자 산란에서 유효함을 의미한다. 따라서 중성자 산란은 공간 분포에 대한 것과 마찬가지로 물질내의 자화 방향에 민감하다.

자기 상호작용의 비등방성은 강자성체에서 브라그 피크들이 같은 Q 값에서 발생하는 핵과 자기적 브라그 피크들을 분리하기 위하여 이용될 수 있다. 만일 전기적 모우멘트들이 인가한 자기장에 의해 정렬할 수 있다면 Q 가 유도 자기장에 평행한 자기 브라그 피크들은 사라지고, 단지 핵에 의한 성분만이 남는다. 반면에 산란 벡터가 자기장에 수직인 같은 브라그 피크들은 핵 및 자기적 기여들이 모두 명백할 것이다.

반강자성체(교차 또는 반평행한 배열을 가진 쌍짓지 않은 전자들을 가진 물질)에서 자기 능률들 사이의 반복 거리는 관련된 원자면들 사이 간격의 두배이다. 결과로서 브라그 법칙은 정상적인 경우의 절반이 되는 산란각에서 만족된다. 이 경우 자기적 브라그 피크들은 그들의 핵에 의한 피크들 사이에 떨어지며 자기 및 핵에 의한 기여의 분리 문제는 발생하지 않는다. 그럼에도 불구하고 자기 상호작용의 쌍극성은 다시 전기적 스핀 방향을 확립하는 것을 허용한다. 이러한 것의 최근의 보기는 산소가 부족할 때 반강자성체인 것들 중의 하나인 이른바 고온 초전도체인 초전도성 구리 산화물에서 발견되었다.



A FLAT-COIL NEUTRON-SPIN FLIPPER

Fig. 16. (a) Schematic diagram of one type of neutron flipper. A direct current in the horizontal coil of aluminum wires (blue) produces a field H_h inside the device that is equal opposite to the neutron guide field H_{guide} , effectively canceling that component. The vertical (red) produces a field H_v that is at right angles to the guide field and the thickness d of the flipper are chosen so that the neutron precesses exactly 180 degree during its passage. (b) Photograph of disassembled neutron flipper. The penetrating power of neutrons is apparent in the fact that there is no "window" in the two coils of wire: the neutrons pass on through the aluminum wire unimpeded. The component on the right produces a vertical guide field of about 40 oersteds.

편극중성자 : 일반적으로 중성자 빔은 모든 방향을 향하는 자기 중성자를 가진 중성자들을 포함하고 있다. 만일 특별한 방향, 말하자면 인가 자기장에 대해 평행 및 반평행한 중성자를 가진 중성자들의 수를 측정할 수 있다면 같은 수(population)를 발견할 수 있을 것이다. 여하튼 여러 가지 특수한 기술로 방향이 같은 중성자 중성자의 비율이 큰 것 즉, 편

극 빔을 생성할 수 있다. 이러한 빔의 편극은 적절한 자기장(수천 외르스테드)을 줄곧 빔에 인가함으로써 유지할 수 있다. 이러한 하나의 장을 유도장(guide field)이라고 한다.

빔을 편극하는 데는 여러 방법이 있다. 예를 들면, 적절히 자화된 결정으로부터 브라그 회절, 코발트와 철(CoFe)로 만들어진

자와 거울로부터의 반사, 편극된 He-3를 통한 부과 등이다. 이러한 각 방법들은 인가 자기장에 평행 또는 반평행하게 자기 중성자들을 정렬한다. 만일 중성자 중성자들이 인가 자기장에 평행하면 그들은 상향(up)되었다고 한다. 만일 그 중성자들이 인가 자기장에 반평행하면 그들은 하향(down)되었다고 한다. 이와 같이 산란 시료 전후에 상향 및 하향 편극기를 놓음으로서 중성자 산란 법칙으로 중성자 중성자의 방향이 변하지 않는 산란 과정의 것들을 측정할 수 있다. 위를 향하는 중성자들이 아래로 향하는 중성자들로 바뀌는 것과 같은 다른 조합을 측정하기 위해서는 다양한 상향 및 하향 편극기 또는 반전기(flipper)라 불리는 기구가 필요하다. 편극기들이 값비싼 경향이 있기 때문에 반전기들이 현실적인 선택이다.

반전기는 중성자 중성자의 방향을 위로부터 아래 또는 반대로 바꿀 수 있는 기구이다. 이는 두 가지 방법으로 수행될 수 있다. 유도장 방향은 공간에서 중성자 중성자의 방향을 바꾸지 않고서 거꾸로 할 수 있고 또한 중성자 중성자는 유도장의 방향을 바꾸지 않고 뒤바꿀 수 있다. 양쪽의 경우에 유도장에 관한 중성자 중성자의 방향은 바뀌었다.

두 번째 종류의 반전기의 보기는 그림 16에 있다. 이것은 두개의 남작한 코일들로 이루어져 있으며, 다른 코일의 상부에 또 하나의 코일이 쌓여 있다. 코일들 중 하나는 반전기 내부에 유도장과 같거나 또는 반대 방향인 장을 생성하며 효과적으로 그 성분을 소거한다. 그리고 다른 코일

은 유도장에 수직한 장을 생성한다. 이와 같이 하나의 중성자가 반전기 내부로 들어갔을 때, 이 중성자는 자기 능력의 방향에 직각인 자기장을 접하게 된다. 이러한 상황에서 중성자 능력의 운동을 기술하는 고전 방정식들은 그 면으로부터의 힘에 의해 밀리는 회전 평이의 그것과 유사하며 원래 회전축에 대하여 세차하기 시작한다. 중성자는 똑같은 일을 한다. 즉, 중성자의 능력은 Larmor 진동수로 알려진 비율로 국소장(local field) 방향에 대해 세차하기 시작하며, 반전기 내부의 장의 크기에 의존한다. 반전기 두께와 이차 코일내의 장의 크기를 적절히 선택함으로써 반전기를 통과하는 동안 정확하게 180° 회전하도록 중성자 능력을 배열할 수 있다. 명백하게, 만일 중성자의 능력이 반전기 이전에 상향이었다면 반전기 이후에 중성자는 하향이 되고, 반대 과정도 성립한다.

이제 산란시료 전후에 편극기를 갖춘 분광장치를 가지고 있다고 가정하자. 만일 반전기들이 시료 전후에 삽입되면 단순히 적절한 반전기를 켜거나 끄므로써 모든 중성자 산란 법칙들, up-to-down, up-to-up, 등등을 측정할 수 있다. 편극해석으로 알려져 있는 이 기술은 일부 산란 과정들이 중성자 능력을 반전시키는 반면에 다른 것들은 반전시키지 않으므로 유용하다.

자화된 시료로부터의 산란은 좋은 보기를 제공한다. 자기 산란은 만일 산란에 책임이 있는 자화가 중성자 편극을 유지하기 위하여 이용되는 유도장에 수직하면 중성자 능력을 반전시킬 것

이다. 만일 자화가 유도장에 평행하면 어떠한 반전도 발생하지 않는다. 이와 같이 앞서 기술한 쌍극자 상호작용과 같이 편극 해석은 물질내의 전기적 능력들의 방향을 결정하는데 도움을 주는 기술이다.

물질내 핵스핀들의 불규칙한 분포로부터 발생하는 비간섭성 산란은 편극해석 이용의 다른 보기를 제공한다. 대다수의 동위원소들은 다른 스핀 상태를 가지고 있고, 핵자에 대한 산란 단면적은 스핀 상태에 따라서 변화한다. 시료에서 핵스핀들의 불규칙한 분포는 중성자들의 비간섭성 산란을 불러일으킨다. 이러한 비간섭성 과정에 의해 산란되는 중성자의 2/3는 그 능력이 반전되는 반면에 나머지 1/3은 영향을 받지 않는다는 것이 판명되었다. 이러한 결과는 산란에 책임이 있는 동위원소 및 유도장의 방향에 무관하다. 비록 비간섭성 산란이 시료가 특별한 원소의 동위원소 혼합물을 포함하고 있을 때 또한 발생할 수 있지만 이러한 두 번째 비간섭성산란과 간섭성산란도 중성자 능력을 반전시키지는 않는다. 편극해석은 위와 같이 이러한 다른 형태의 산란들을 분류하는데 필수적인 수단이며, 또한 핵 간섭성 산란을 자기산란과 스핀-비간섭성 산란과 구별 되도록 한다.

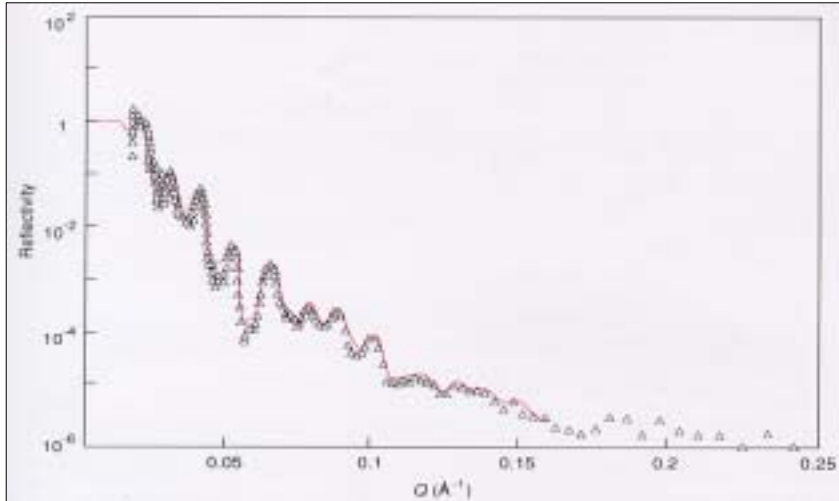
편극해석은 산란에 책임이 있는 자기 요동의 방향을 결정하는데 도움을 주었기 때문에 자기 현상의 연구에 특히 유용하였다. 이러한 기술 없이는 비선형 물리에 관한 아이디어에 대한 확신을 주었던 우아한 실험 중 다수가 수행될 수 없었을 것이다.(see

"Nonlinear Science - From Paradigms to Practicalities" by David K. Campbell, Los Alamos Science No. 15, 1987) 예를 들어 그림 15의 3축 분광장치는 편극 해석을 위한 것을 장치하고 있다.

마그논(magnon) : 철과 같이 자화된 재료의 다른 중요한 면은 원자 능력의 방향들이 앞서 격자 진동을 위하여 고려되었던 전자와 같이 진동할 수 있다는 사실이다. 여기서 다시 다른 원자 위치에서의 자화 사이의 결합이 있으며, 자기적 진동과는 물질을 통과할 수 있다. 이러한 자기적 여기들, 또는 마그논들은 앞서 기술한 포논 변위과의 자기적 유추와 같은 것이다. 마그논 진동수들이 포논 진동수에서와 같은 방법으로 비탄성 중성자 산란에 의해 측정될 수 있다는 것은 놀라운 것이 아니다. 마그논을 구성하는 자기 진동수들이 원자 능력의 평행 방향에 수직하기 때문에 산란은 중성자들의 자기 능력이 반전되도록 하며, 또한 원자 능력의 평행 방향에 나란한 중성자 유도장을 제공하는 원인이 된다. 물론 이를 이용하여 포논과 마그논을 구분한다.

표면구조

지금까지 단지 땅어리 물질의 구조를 탐색하는 실험을 기술하였다. 중성자들이 재료의 표면 구조에 관한 어떠한 정보를 제공할 수 있는지 의문을 가질 수 있다. 일견, "아니오!" 라고 반항하는 답을 기대할 수 있다. 무엇보다도 중성자의 장점중의 하나는 표면에 의해 영향을 받지 않



SURFACE REFLECTIVITY MEASUREMENTS

Fig. 17. Neutron reflectivity as a function of $Q(=4\pi\sin\theta/\lambda)$ for a 1500-angstrom thick diblock copolymer (polystyrene-poly-methyl-methacrylate) multilayer deposited on a silicon substrate. The solid line represents calculated reflectivity for the data shown. The calculation was performed by Tom Russell, IBM Almaden Research Labs.

고 물질 깊숙이 부파할 수 있다는 것이다. 더욱이, 중성자들은 물질과 단지 약하게 반응하기 때문에 일반적으로 큰 시료들이 요구된다. 내부보다는 시료 표면에 훨씬 적은 원자들이 있기 때문에 중성자 산란이 표면 구조에 민감하리라 기대하는 것은 타당성이 없는 것처럼 보인다.

이러한 난점에도 불구하고 중성자들이 충분히 낮은 각도로 시료 표면에 부딪힐 때 표면 구조에 민감하다는 것이 판명되었다. 사실상, 매끈한 표면에 대하여 중성자들의 완전한 반사는 γ_c 로 기술되는 임계각보다 작은 입사각(입사면과 표면사이의 각도)에서 거의 모든 물질들에 대하여 발생한다. 이 작은 물질의 간섭성 산란 길이 밀도와 중성자 파장에 비례한다. Ni과 같은 좋은 반사체에 대하여 각도($^\circ$)로 측정되는 임계각은 옴스트롱으로 측정되는 중성자 파장의 대략 1/10로, 열중성자에 대하여 1" 이하이다. 입사각이 임계각 이상으로 증가함에 따라 입사 중성자들이 표면에 의해 반사되는 정도가 점점 줄어들게 된다. 사실상 표면에서 반사되는 중성자들의 비율로 측정되는 반사율은 충분히 크

게 스치는(grazing) 각도에서의 반사에 대해 적용되는 프레넬(Fresnel)이 발전한 법칙을 따른다.

그러나 프레넬의 법칙은 불균일한 물질의 매끄럽고, 평평한 표면으로부터의 복사 반사에 적용되었다. 만일 물질이 불균일하고 표면에 수직인 방향으로 산란 길이 밀도의 변화가 있으면 입사각의 함수로서 측정되는 중성자 반사율은 보다 복잡한 행동을 보여준다. 중성자 반사율측정(reflectometry)은 반사각 θ 를 작게 유지함으로써 수 Å의 분해능으로 수천 Å의 깊이까지 표면에서의 밀도 변화를 탐색하기 위하여 이용될 수 있다.

오늘날 기계 장치의 대부분은 부식 또는 마모를 방지하기 위하여 어느 정도 도색되거나 도막되어 있다. 리플렉토메트리는 때로 그러한 보호층에 대한 유용한 정보를 제공할 수 있다. 예를 들어 그림 17은 실리콘 기관상에 침전된 하나의 1500Å 층 또는 두 개 블록 공중합체(폴리스티렌-폴리메틸메타아크릴레이트) 다층박막에 의한 반사율을 LANSCE Surface Profile Reflectometer

(SPEAR)를 이용하여 측정한 것을 보인 것이다. 이 결과에서 굵이침의 간격은 필름에서 중합체 층의 평균 두께의 직접적인 값을 제공한다. 반사율상의 자세한 형태가 이론적인 예측과 비교되었을 때 중합체 박들의 두께와 밀도, 층 사이의 경계면의 두께를 추론할 수 있다.

중성자 리플렉토메트리는 상대적으로 새로운 기술이다. 이 기술은 또한 파쇄선원에 이상적으로 맞는다. 나는 다음 수년 내에 중합체의 재활용, 자기 저장 매체, 기름 덩어리나 막정화와 같은 광범위한 주제들에 대하여 새로운 정보를 제공할 방법을 기대한다. 20년 이상 중성자 산란과 관계를 맺고 있는 나와 같은 사람들에게 이러한 신기술의 탄생은 행복한 일이다. 그것은 우리들이 의지하는 물질들의 복잡한 구조를 구명하는데 중성자가 도움을 줄 수 있는 절적으로 새로운 방법들이 여전히 존재함을 의미한다.