§ 87. Упругое рассеяние медленных нейтронов кристаллами с учетом колебаний атомов

Если освободиться от упрощающего предположения о жестком закреплении рассеивающих ядер, то можно учесть неупругое рассеяние медленных нейтронов в кристаллах, связанное с обменом энергией между нейтроном и колебаниями решетки. Исследованию этого вопроса посвящены теоретические работы Померанчука [4], Вайнштока [5], Ахиезера и Померанчука [6] и ряда других [7].

При исследовании неупругого рассеяния нейтронов кристаллами удобно пользоваться аналитическим выражением взаимодействия медленных нейтронов с ядрами, введенным Ферми [8] и называемым *ядерным псевдопотенциалом*. Согласно Ферми взаимодействие медленных нейтронов с ядром изображается в виде дираковской дельта-функции:

$$V(\boldsymbol{r}) = A\delta(\boldsymbol{r}), \tag{87,1}$$

где постоянная A выбирается таким образом, чтобы уже в борновском приближении получилось правильное значение длины рассеяния.

Пусть R — радиус ядра; тогда радиальная волновая функция, умноженная на r, при $kR \ll 1$ вне ядра согласно (84,1) будет иметь вид

$$\varphi = r\psi = \alpha (r - a), \tag{87,2}$$

где a — длина рассеяния. Внутри же ядра функция φ должна удовлетворять уравнению

$$\varphi'' - u(r)\varphi = 0 \tag{87,3}$$

с граничным условием $\varphi(0) = 0$. Здесь $u = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)$.

Запишем уравнение (87,3) в несколько ином виде:

$$\frac{d}{dr}\left(\frac{\varphi}{\varphi'}\right) = 1 - \frac{\varphi\varphi''}{(\varphi')^2} = 1 - u(r)\left(\frac{\varphi}{\varphi'}\right)^2.$$

Интегрируя это уравнение в пределах $(0, r)$, получим:

$$\left(\frac{\varphi}{\varphi'}\right)_r = r - \int_0^r u(r)\left(\frac{\varphi}{\varphi'}\right)^2 dr. \tag{87,4}$$

Если выполняется неравенство $R \gg \left|\int_0^R u(r)\, r^2 dr\right|$, то $\left(\frac{\varphi}{\varphi'}\right)^2 \sim r^2$ и (87,4) принимает вид

$$\left(\frac{\varphi}{\varphi'}\right)_r = r - \int_0^r u(r)\, r^2 dr. \tag{87,4a}$$

Приравнивая (87,4а) при $r=R$ с соответствующим выражением для функции (87,2) вне ядра, получим:

$$a=\int_0^R u(r)\,r^2dr=\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\,d\tau. \tag{87,5}$$

Это равенство связывает длину рассеяния со средним значением энергии взаимодействия в объеме ядра. Полагая $V(r)=A\delta(r)$ из (87,5), можно определить значение постоянной

$$A=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}a. \tag{87,5а}$$

Итак, если выполняются неравенства

$$|a|\ll R\ll\lambda, \tag{87,6}$$

где a — длина рассеяния, R — радиус ядра, λ — длина волны нейтрона, то взаимодействие между нейтроном и ядром можно изобразить функцией Ферми:

$$V(r)=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}a\delta(r). \tag{87,7}$$

Для исследования неупругого рассеяния нейтрона в кристаллах выразим оператор взаимодействия через псевдопотенциал Ферми для каждого ядра:

$$V(\boldsymbol{r})=\sum_n A\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_n), \quad A=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}a, \tag{87,8}$$

где $\boldsymbol{R}_n$ — радиус-вектор, определяющий положение ядра в кристалле. Если базисные векторы единичной ячейки кристалла $\boldsymbol{d}_1$, $\boldsymbol{d}_2$, $\boldsymbol{d}_3$, то $\boldsymbol{R}_n=\boldsymbol{n}+\boldsymbol{u}_n$; здесь вектор $\boldsymbol{n}=\sum_j n_j\boldsymbol{d}_j$ определяет узел решетки (n_j — целые числа), а $\boldsymbol{u}_n$ определяет отклонение ядра от равновесного положения в узле.

Предположим теперь, что монокристалл состоит из ядер одноизотопного элемента со спином нуль и имеет форму косоугольного параллелепипеда с осями $N_1\boldsymbol{d}_1$, $N_2\boldsymbol{d}_2$, $N_3\boldsymbol{d}_3$, так что общее число ядер в кристалле будет равно $N=N_1N_2N_3$.

Как известно, при не очень высоких температурах потенциальная энергия Π колебаний атомов кристалла представляет собой квадратичную функцию смещений ядер из положений равновесия и может быть записана в виде суммы квадратов

$$\Pi=\frac{1}{2}\sum_{j,q}\omega_{qj}^2\gamma_{qj}, \tag{87,9}$$

где γ_{qj} — нормальные координаты, связанные со смещениями из положений равновесия соотношениями

$$u_n = \sqrt{\frac{2}{MN}} \sum_{j,\, q} e_{qj} \gamma_{qj} F(qn), \tag{87,10}$$

где M — масса ядра,

$$F(qn) = \begin{cases} \sin qn, & \text{если } q_z > 0; \\ \cos qn, & \text{если } q_z \leqslant 0. \end{cases} \tag{87,11}$$

$e_{qj} F(qn)$ — плоские стоячие волны с волновыми вектором q и поляризацией j, определяемой тремя единичными взаимно ортогональными векторами e_{qj} для каждого вектора q. Вектор q определяется равенством

$$q = \sum_{j=1}^{3} \frac{2\pi}{N_j} \eta_j b_j,$$

где b_j — введенные в § 85 векторы обратной решетки; η_j — целые числа, удовлетворяющие неравенству $-\frac{N_j}{2} < \eta_j \leqslant \frac{N_j}{2}$, $j = 1, 2, 3$. Легко убедиться, что функции $F(qn)$ удовлетворяют соотношению

$$\sum_q F(qn) F(qn') = \frac{N}{2} \delta_{nn'}.$$

В дальнейшем для простоты записи вместо двух величин q и j будем пользоваться одним индексом $s \equiv (q, j)$; тогда (87,10) примет вид

$$u_n = \sqrt{\frac{2}{MN}} \sum_s e_s \gamma_s F(q_s n). \tag{87,12}$$

Волновая функция, описывающая колебательное состояние, соответствующее энергии $\sum\limits_s \hbar\omega_s \nu_s$ при определенном наборе квантовых чисел $\{\nu_s\}$ осцилляторов, будет иметь вид

$$\Phi_{\{\nu_s\}} = \prod_s \varphi_{\nu_s}\left(\frac{\gamma_s}{\alpha_s}\right), \quad \text{где} \quad \alpha_s = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_s}};$$

$\varphi_{\nu_s}\left(\frac{\gamma_s}{\alpha_s}\right)$ — нормированная волновая функция осциллятора *) типа s.

*) $\varphi_\nu\left(\frac{\gamma}{\alpha}\right) = [\sqrt{\pi}\, \alpha \nu!\, 2^\nu]^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{\gamma^2}{2\alpha^2}} H_\nu\left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)$, где $H_n(x) = (-1)^n e^{-x^2} \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^2}$ — полиномы Эрмита.

Начальное состояние системы, состоящей из кристалла и нейтрона с энергией $\frac{\hbar k^2}{2\mu}$ в нулевом приближении, можно изобразить волновой функцией:

$$\Psi_a = \Phi_{\{\nu_s\}} \exp\{i\boldsymbol{kr}\},$$

а конечное состояние

$$\Psi_b = \Phi_{\{\nu_s'\}} \exp\{i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{r}\}.$$

В борновском приближении вероятность перехода в единицу времени из начального состояния Ψ_a в конечное состояние Ψ_b под влиянием возмущения (87,8) равна

$$w_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|(b\,|\,V\,|\,a)\right|^2 \delta(E_a - E_b), \tag{87,13}$$

где

$$(b\,|\,V\,|\,a) \equiv A\sum_{n} \exp\{i\boldsymbol{n}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\}\prod_{s} M_{\nu_s'\nu_s}(\boldsymbol{n}), \tag{87,14}$$

где

$$M_{\nu_s'\nu_s}(\boldsymbol{n}) \equiv \int \exp\left\{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,\boldsymbol{e}_s\gamma_s F(\boldsymbol{qn})\sqrt{\frac{2}{MN}}\right\}\varphi_{\nu_s'}\varphi_{\nu_s}\,d\gamma_s. \tag{87,15}$$

Если воспользоваться свойствами нормированных волновых функций гармонического осциллятора, то можно показать [5], что

$$M_{n+\lambda,\,n}(t) \equiv \int \exp\left(\frac{t\gamma}{\alpha}\right)\varphi_{n+\lambda}\left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)\varphi_n\left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)d\gamma =$$

$$= \frac{\exp\left(\frac{t^2}{4}\right)}{\sqrt{n!\,(n+\lambda)!}}\sum_{\nu}\binom{n+\lambda}{\nu+\lambda}\frac{n!}{\nu!}\left(\frac{t^2}{2}\right)^{\nu+\frac{\lambda}{2}}. \tag{87,16}$$

Матричные элементы (87,15) получаются из (87,16), если положить

$$t = i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,\boldsymbol{e}_s F(\boldsymbol{qn})\sqrt{\frac{2\hbar}{MN\omega_s}}.$$

Величина $t \sim N^{-1/2}$, поэтому в ряду (87,16) следует сохранять только члены с наименьшими степенями t. При больших значениях N вклад в вероятность, как будет показано ниже, дадут только члены:

$$\left.\begin{aligned}
M_{\nu_s\nu_s}(\boldsymbol{n}) &= 1 - Q_s^2\left(\frac{\nu_s+\frac{1}{2}}{2}\right)F^2(\boldsymbol{q}_s\boldsymbol{n}),\\
M_{\nu_s+1,\,\nu_s}(\boldsymbol{n}) &= iQ_s\sqrt{\frac{\nu_s+1}{2}}\,F(\boldsymbol{q}_s\boldsymbol{n}),\\
M_{\nu_s-1,\,\nu_s}(\boldsymbol{n}) &= -iQ_s\sqrt{\frac{\nu_s}{2}}\,F(\boldsymbol{q}_s\boldsymbol{n}),
\end{aligned}\right\} \tag{87,17}$$

где

$$Q_s \equiv (\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,\boldsymbol{e}_s \sqrt{\frac{2\hbar}{MN\omega_s}}\,. \qquad (87,18)$$

Вероятность перехода в единицу времени из состояния a в состояние b с направлением волнового вектора нейтрона $\boldsymbol{k}'$, заключенным в элементе телесного угла $d\Omega$, равна

$$dP_{ba}=d\Omega\int w_{ba}\rho_{E_b}dE_b=\frac{2\pi}{\hbar}\,|(b\,|\,V\,|\,a)|^2\rho_{E_b}d\Omega,$$

где $\rho_{E_b}=\frac{\mu k'}{(2\pi)^3\hbar^2}$ — плотность конечных состояний на единицу телесного угла и единичный интервал энергии. Разделив dP_{ba} на скорость падающих нейтронов $\frac{\hbar k}{\mu}$ и число ядер в кристалле N, получим эффективное сечение рассеяния в единицу телесного угла, отнесенное к одному ядру:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{\mu^2}{N(2\pi)^2\hbar^4}\frac{k'}{k}\,|(b\,|\,V\,|\,a)|^2. \qquad (87,19)$$

Нам необходимо вычислить эффективное сечение упругого рассеяния ($\nu_s'=\nu_s$, $|\boldsymbol{k}'|=|\boldsymbol{k}|$) нейтрона кристаллом. Для этого предварительно вычислим $M^2 \equiv \prod\limits_s M_{\nu_s\nu_s}(\boldsymbol{n})\,M_{\nu_s\nu_s}(\boldsymbol{n}')$. Подставляя (87,17) и учитывая что при малом x: $1-x\approx e^{-x}$, получим:

$$M^2=\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_s Q_s^2\left(\nu_s+\frac{1}{2}\right)\left[F^2(\boldsymbol{q}_s\boldsymbol{n})+F^2(\boldsymbol{q}_s\boldsymbol{n}')\right]\right\}.$$

Пользуясь определением функций $F(\boldsymbol{q}\boldsymbol{n})$ (87,11), можно при суммировании по s объединить попарно члены, отличающиеся только знаком q_3. Тогда учтя, что

$$\underset{q_3>0}{F^2(\boldsymbol{q}_s\boldsymbol{n})}+\underset{q_3<0}{F^2(\boldsymbol{q}_s\boldsymbol{n})}=1,$$

получим:

$$M^2=\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_s\left(\nu_s+\frac{1}{2}\right)Q_s^2\right\}. \qquad (87,20)$$

Для сравнения с экспериментальными результатами необходимо еще усреднить (87,20) по всем начальным состояниям решетки. В результате такого усреднения квантовые числа ν_s в (87,20) надо заменить на $\bar{\nu}_s=\left(e^{\frac{\hbar\omega_s}{T}}-1\right)^{-1}$, где T — температура кристалла в энергетических единицах.

С помощью (87,20), (87,14), (87,5а) и (87,19) получим эффективное сечение упругого рассеяния нейтронов кристаллом, отнесенное к одному ядру:

$$\overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}} = \frac{|a|^2}{N} \left| \sum_n \exp\{in(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\} \right|^2 \exp(-2W), \tag{87,21}$$

где

$$W \equiv \frac{1}{4} \sum_s \left(\bar{\nu}_s + \frac{1}{2}\right) Q_s^2. \tag{87,22}$$

Сечение (87,21) отличается от выражения, полученного в § 85, для случая закрепленных в узлах решетки ядер множителем $\exp(-2W)$, зависящим от температуры и свойств кристалла. Этот множитель определяет уменьшение брегговского рассеяния из-за теплового движения рассеивателей.

Величину W легко вычислить, использовав упрощенную модель колебаний решетки — модель Дебая, в которой скорость звуковых волн предполагается независимой от длины волны, направления распространения и поляризации, т. е. полагается $\omega_s \equiv \omega_{qj} = cq$, где c — постоянная скорость звука. При этом в (87,21) легко выполнить суммирование по поляризациям фононов. Учтя, что

$$\sum_j [(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\,\boldsymbol{e}_{qj}]^2 = (\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')^2,$$

получим:

$$W = \frac{\hbar(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')^2}{4MN} \sum_q \frac{1+2\bar{\nu}_q}{\omega_q},$$

где $\sum_q$ обозначает суммирование по всем возможным частотам нормальных колебаний. Учитывая, что в интервале ω, $\omega + d\omega$ содержится $\frac{V\omega^2 d\omega}{2\pi^2 c^2}$ нормальных колебаний определенной поляризации, можно перейти от суммы к интегралу и написать:

$$W = \frac{V\hbar(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')^2}{2(2\pi)^2 MNc^3} \int_0^{\omega_{\max}} (1+2\bar{\nu})\,\omega\, d\omega,$$

где $\omega_{\max}$ определяется из условия $\frac{V}{2\pi^2 c^3} \int_0^{\omega_{\max}} \omega^2 d\omega = N$, из которого следует, что $\omega_{\max}^3 = 6\pi^2 c^3 \frac{N}{V}$. Подставляя $\bar{\nu} = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right) - 1\right]^{-1}$, получим:

$$W = \frac{3\hbar(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')^2}{2M\omega_{\max}^3} \left[\frac{\omega_{\max}^2}{4} + \int_0^{\omega_{\max}} \frac{\omega\, d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right) - 1}\right].$$

Полагая $\hbar\omega_{max} = \Theta$ (температура Дебая в энергетических единицах), получим:

$$W = \frac{3\hbar^2 (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')^2}{2M\Theta} \left[\frac{1}{4} + \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 D\left(\frac{\Theta}{T}\right)\right], \tag{87,23}$$

где

$$D\left(\frac{\Theta}{T}\right) \equiv \int\limits_0^{\frac{\Theta}{T}} \frac{x\,dx}{e^x - 1}.$$

При низких температурах, когда $T >> \Theta$, второе слагаемое в квадратных скобках (87,23) может быть заменено выражением

$$\left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 D\left(\frac{\Theta}{T}\right) \approx \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{T}{\Theta}\right)^2;$$

при высоких температурах ($T \gg \Theta$),

$$\left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 D\left(\frac{\Theta}{T}\right) \approx \frac{T}{\Theta}.$$

При упругом рассеянии $|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'|^2 = 4k^2 \sin^2\frac{\vartheta}{2}$, где ϑ — угол рассеяния; поэтому (87,23) примет вид

$$W = \frac{6\hbar^2 k}{M\Theta} \sin^2\frac{\vartheta}{2} \cdot \left[\frac{1}{4} + \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 D\left(\frac{\Theta}{T}\right)\right]. \tag{87,24}$$

Множитель W растет с ростом угла рассеяния, энергии нейтрона и температуры кристалла и, как показывает формула (87,21), приводит к ослаблению упругого когерентного рассеяния для всех углов рассеяния $\vartheta \neq 0$. При $T = \Theta$ W по порядку величины равно μ/M, где μ — масса нейтрона, а M — масса рассеивателя. Следовательно, для тяжелых рассеивателей множитель $e^{-2W} \sim 1$ и существенно не влияет на интенсивность рассеяния.

Выполняя суммирование по $\boldsymbol{n}$ в (87,21) таким же образом, как и в § 85, мы убедимся, что вклад в рассеяние будут давать значения τ, связанные с углом рассеяния соотношением $2k \sin\frac{\vartheta}{2} = 2\pi\tau$; при этом

$$\bar{\sigma}_\tau = \frac{2\pi^2}{Bk^2\tau} |a|^2 e^{-2W_\tau},$$

где

$$W_\tau = \frac{6\hbar\pi^2\tau^2}{M\omega_{max}} \left\{\frac{1}{4} + \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 D\left(\frac{\Theta}{T}\right)\right\},$$

а полное сечение упругого рассеяния (без рассеяния вперед)

$$\bar{\sigma} = \frac{2\pi^2}{Bk^2} |a|^2 \sum_{\tau \leq \frac{k}{\pi}} \frac{1}{\tau} e^{-2W_\tau}. \tag{87,25}$$