§ 88. Неупругое рассеяние нейтронов кристаллами с испусканием или поглощением одного фонона

Перейдем к вычислению неупругого рассеяния нейтронов, т. е. рассеяния, при котором нейтрон обменивается энергией с колебаниями решетки. Как будет показано ниже, в области малых энергий наиболее вероятными являются процессы испускания или поглощения одного фонона. Поэтому вначале вычислим дифференциальное сечение рассеяния нейтрона с испусканием (+) или поглощением (—) одного фонона с волновым числом q_σ и частотой ω_σ. Для этого надо вычислить квадрат матричного элемента (87,14) следующего вида:

$$|(b|V|a)|_{\pm}^2 = \left| A \sum_n \exp\{i\boldsymbol{n}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\} M_{\nu_\sigma \pm 1, \nu_\sigma}(\boldsymbol{n}) \prod_s{}' M_{\nu_s \nu_s} \right|^2; \tag{88,1}$$

здесь штрих над произведением указывает, что в нем отсутствует член с $s = \sigma$. Кроме того, (88,1) надо усреднить по всем начальным состояниям кристалла. Эту операцию мы обозначим чертой над соответствующей величиной.

Так как каждый множитель в произведении $\prod'$ вследствие (87,17) мало отличается от единицы, то можно положить

$$\overline{\left|\prod_s{}' M_{\nu_s \nu_s}\right|^2} \approx \overline{\left|\prod_s M_{\nu_s \nu_s}\right|^2} = \exp\{-2W\}, \tag{88,2}$$

где W выражается формулой (87,22).

Из (87,17) следует, что $|M_{\nu_s - 1, \nu_s}|^2$ получается из $|M_{\nu_s + 1, \nu_s}|^2$ заменой $\nu_s + 1$ на ν_s. Поэтому в дальнейшем мы будем вычислять сечение испускания нейтроном одного фонона (случай поглощения получится из формул испускания при замене $\nu_\sigma + 1$ на ν_σ). Учитывая (87,11) и (87,17), запишем матричный элемент $M_{\nu_s + 1, \nu_s}$ в виде

$$M_{\nu_\sigma + 1, \nu_\sigma} = iQ_\sigma \sqrt{\frac{\nu_\sigma + 1}{8}} \begin{cases} e^{iq_\sigma n} + e^{-iq_\sigma n}, & \text{если } (q_\sigma)_s \leqslant 0, \\ \frac{1}{i}\left(e^{iq_\sigma n} - e^{-iq_\sigma n}\right), & \text{если } (q_\sigma)_s > 0; \end{cases}$$

тогда

$$\overline{|(b|V|a)|_{+}^2} = |A|^2 Q_\sigma^2 \frac{\nu_\sigma + 1}{8} e^{-2W} \left| \sum_n \{\exp[i\boldsymbol{n}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}_\sigma)] \pm \pm \exp[i\boldsymbol{n}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}_\sigma)]\} \right|^2. \tag{88,3}$$

Знак плюс в фигурных скобках относится к случаю $q_{\sigma s} \leqslant 0$, а знак минус — к случаю, когда $q_{\sigma s} > 0$.

Применяя те же рассуждения, что и в § 85, можно показать, что

$$\sum_n \exp\{in(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}' \pm i\boldsymbol{q}_s)\} = \frac{(2\pi)^3 N}{B}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}' \pm \boldsymbol{q}_s - 2\pi\boldsymbol{\tau}),$$

где $\boldsymbol{\tau}=\sum_j \tau_j \boldsymbol{b}_j$ — вектор обратной решетки. При заданной разности $\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$ и при $\boldsymbol{q}_s \neq 0$ только одна из двух дельта-функций отлична от нуля. Поэтому можно написать:

$$\overline{|(b|V|a)|_+^2} = \\ = |A|^2 \frac{\hbar(\bar{\nu}_s+1)(2\pi)^3}{2\omega_s MB} |(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\boldsymbol{e}_s|^2 e^{-2W}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}_s-2\pi\boldsymbol{\tau}). \quad (88,4)$$

Из-за наличия дельта-функции в (88,4) можно заменить $\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$ на $2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_s$; тогда получим:

$$\overline{|(b|V|a)|_+^2} = \\ = \frac{|A|^2\hbar(\bar{\nu}_0+1)4\pi^3}{MB\omega_s} |(2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_s)\boldsymbol{e}_s|^2 e^{-2W_q}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}_s-2\pi\boldsymbol{\tau}), \quad (88,5)$$

где в дебаевском приближении

$$W_q = \frac{3\hbar^2(2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_s)^2}{2M\Theta}\left\{\frac{1}{4}+\left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 D\left(\frac{\Theta}{T}\right)\right\}.$$

Подставляя (88,5) и значение A в (87,19), получим сечение неупругого рассеяния нейтрона в единицу телесного угла в направлении $\boldsymbol{k}'$ с испусканием одного фонона с волновым вектором $\boldsymbol{q}_s$ и поляризацией $\boldsymbol{e}_s$:

$$\overline{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_+} = \\ = \frac{4\pi^3|a|^2\hbar(\bar{\nu}_s+1)}{MNB\omega_s}\frac{k'}{k}|(2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_s)\boldsymbol{e}_s|^2 e^{-2W}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}_s-2\pi\boldsymbol{\tau}). \quad (88,6)$$

Для вычисления полного сечения неупругого рассеяния с испусканием одного фонона надо выражение (88,6) проинтегрировать по всем направлениям рассеяния нейтронов (по направлениям $\boldsymbol{k}'$). От направления $\boldsymbol{k}'$ зависит в (88,6) только дельта-функция, поэтому надо вычислить интеграл

$$\langle\delta\rangle \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}_s-2\pi\boldsymbol{\tau})\sin\theta\, d\theta.$$

Выберем направление полярной оси вдоль вектора $2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_s$; тогда компоненты по осям x и y этого вектора будут равны нулю. Далее перейдем к переменным $k'_x = k'\sin\theta\cos\varphi$, $k'_y = k'\sin\theta\sin\varphi$; получим:

$$\langle\delta\rangle = \frac{1}{(k')^2}\iint \delta(k_x-k'_x)\,\delta(k_y-k'_y)\,\delta(k_z-k'_z-|2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_s|)\frac{dk'_x\,dk'_y}{\cos\theta}. \quad (88,7)$$

Абсолютное значение k' связано с k законом сохранения энергии

$$\frac{(\hbar k')^2}{2\mu}=\frac{(\hbar k)^2}{2\mu}-\hbar\omega_\sigma.$$

Далее из (88,7) следует, что $\langle\delta\rangle$ отлична от нуля, если $k_y=k'_y$ и $k_x=k'_x$; поэтому

$$k'_z=\pm\left(k_z^2-2\mu\frac{\omega_\sigma}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\equiv\pm l;\qquad |\cos\theta|=\frac{|k'_z|}{k'}=\frac{l}{k'}.$$

Таким образом,

$$\langle\delta\rangle=\frac{1}{lk'}\,\delta\,(k_z\mp l-|\,2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma|),$$

а полное сечение рассеяния от монокристалла, отнесенное к одному ядру:

$$\sigma_+=\frac{4\pi^3|\,a\,|^2\hbar\,(\bar{\nu}_\sigma+1)}{MNB\omega_\sigma lk}\,|(2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma)\boldsymbol{e}_\sigma|^2\,e^{-2W_q}\delta\,(k_z\mp l-|\,2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma|).$$

Чтобы вычислить рассеяние от поликристаллического образца, надо усреднить σ_+ по всем ориентациям монокристаллов или, что то же самое, усреднить по всем направлениям $\boldsymbol{k}$. От $\boldsymbol{k}$ зависит только дельта-функция, поэтому надо вычислить интеграл

$$(\delta)=\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\delta\,(k_z\mp l-|2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma|)\sin\theta\,d\theta.$$

Введем новую переменную

$$\zeta\equiv k_z\mp l=k\cos\theta\mp\left(k^2\cos^2\theta-\frac{2\mu\omega_\sigma}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}};$$

тогда $\dfrac{d\zeta}{d\theta}=\dfrac{\zeta k\sin\theta}{l}$; поэтому

$$(\delta)=\frac{l}{2k}\int\delta\,(\zeta-|\,2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma|)\frac{d\zeta}{\zeta}=\frac{l}{2k\,|2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma|}.$$

Обозначая отнесенное к одному ядру усредненное по всем ориентациям монокристаллов сечение рассеяния с испусканием одного фонона через $\bar{\sigma}_{\tau+}$, получим:

$$\bar{\sigma}_{\tau+}=\frac{2\pi^3\hbar\,|\,a\,|^2\,(\bar{\nu}_\sigma+1)}{MNB\omega_\sigma k^2}\,\frac{|\,(2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma)\,\boldsymbol{e}_\sigma|^2}{|\,2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma\,|}\,e^{-2W_q}.\qquad(88,8)$$

Аналогичным образом можно показать, что сечение рассеяния с поглощением одного фонона будет определяться формулой

$$\bar{\sigma}_{\tau-}=\frac{2\pi^3\hbar\,|\,a\,|^2\,\overline{(\nu_\sigma)}}{MNB\omega_\sigma k^2}\,\frac{|\,(2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma)\,\boldsymbol{e}_\sigma|^2}{|\,2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma\,|}\,e^{-2W_q}.\qquad(88,9)$$

Для вычисления измеряемых на опыте величин надо выражения (88,8) и (88,9) просуммировать по всем возможным значениям абсолютной величины вектора обратной решетки $\boldsymbol{\tau}$. Возможные значения $\boldsymbol{q}$ и $\boldsymbol{\tau}$ определяются законом сохранения импульса

$$\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'=2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q} \qquad (88,10)$$

и законом сохранения энергии

$$(k')^2=k^2\mp\frac{2\mu\omega}{\hbar}. \qquad (88,11)$$

В (88,11) знак минус относится к случаю испускания фонона, а знак плюс — к случаю поглощения фонона. Из (88,10) непосредственно следует, что $\boldsymbol{\tau}$ и $\boldsymbol{q}$ должны удовлетворять неравенству

$$|k-k'|\leqslant|2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}|\leqslant k+k', \qquad (88,12)$$

из которого при $\tau=0$ вытекает $q\leqslant k+k'$ или $q^2+k^2-2qk\leqslant(k')^2$. Тогда в силу (88,11) для случая испускания фонона должно выполняться неравенство

$$q^2-2qk\leqslant-\frac{2\mu\omega}{\hbar}.$$

В дебаевском приближении $\omega=cq$. Введя $v=\frac{\hbar k}{\mu}$ — скорость падающего нейтрона, преобразуем последнее неравенство к виду

$$\frac{\hbar q}{\mu}\leqslant 2(v-c).$$

Из этого неравенства следует, что при $\tau=0$ невозможно испускание фонона нейтроном, скорость которого меньше скорости звука. Поглощение фонона в этом случае возможно только при выполнении неравенства

$$\frac{\hbar q}{\mu}\geqslant 2(c-v).$$

В связи с тем, что в решетке возможны только значения $q\leqslant q_{\max}=\frac{\Theta}{c\hbar}$, поглощение нейтроном фонона в кристалле с дебаевской температурой Θ и скоростью звука c возможно при $\tau=0$ только в том случае, если скорость нейтрона v удовлетворяет неравенству

$$\frac{\Theta}{\hbar c}\geqslant q\geqslant\frac{2\mu}{\hbar}(c-v).$$

Выполняя суммирование по трем направлениям поляризации, получим из (88,8) и (88,9):

$$\bar\sigma_{\tau+}=\frac{2\pi^3\hbar\,|a|^2(\bar\nu_\sigma+1)}{MNB\omega_\sigma k^2}\,|2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma|\,e^{-2W_q},$$

$$\bar\sigma_{\tau-}=\frac{2\pi^3\hbar\,|a|^2\,\bar\nu_\sigma}{MNB\omega_\sigma k^2}\,|2\pi\boldsymbol{\tau}-\boldsymbol{q}_\sigma|\,e^{-2W_q}.$$

Полученные выражения надо еще просуммировать по всем значениям вектора $\boldsymbol{q}$. Умножая эти выражения на

$$N(2\pi)^{-3}dq_1dq_2dq_3 = N(2\pi)^{-3}\sin\theta\, d\theta\, q^2\, dq\, d\varphi,$$

можно заменить суммирование интегрированием. Выбирем направление вектора $\boldsymbol{\tau}$ за направление полярной оси и вводим вместо угла θ новую переменную λ $(-1 \leqslant \lambda \leqslant 1)$ с помощью равенства $|2\pi\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{q}| = 2\pi\tau + \lambda q$. Возведя это равенство в квадрат:

$$q^2 - 4\pi\tau q\cos\theta = 4\pi\tau\lambda q + \lambda^2 q^2,$$

получим:

$$\sin\theta\, d\theta = \frac{2\pi\tau + \lambda q}{2\pi\tau}\, d\lambda.$$

Таким образом,

$$\sigma_{\tau+} = \frac{\hbar\,|a|^2}{4k^2M\tau}\int \frac{(2\pi\tau + \lambda q)^2}{\omega_\sigma}\, e^{-2W_q}\, q^2dq\, d\lambda.$$

Вынесем из-под знака интеграла $\exp(-2W_q)$ при значении $q = 0$:

$$W_0 = \frac{6\hbar^2\pi^2\tau}{M\Theta}\left\{\frac{1}{4} + \left(\frac{T}{\Theta}\right)^2 D\left(\frac{\Theta}{T}\right)\right\};$$

далее, выполняя интегрирование по λ, найдем:

$$\sigma_{\tau+} = \frac{\hbar\,|a|^2\exp\{-2W_0\}}{4k^2M\tau}\int\left[4\pi^2\tau^2\lambda + 2\pi\tau q\lambda^2 + \frac{1}{3}\lambda^3q^2\right]_{\lambda_1}^{\lambda_2}\frac{\bar{\nu}+1}{\omega}\, q^2dq,$$

где λ_1 и λ_2 — пределы интегрирования по λ. Они являются функциями τ и q и в силу (88,12) определяются неравенствами:

$$|k' - k| \leqslant 2\pi\tau + \lambda q \leqslant k + k', \quad -1 \leqslant \lambda_1 \leqslant \lambda_2 \leqslant 1.$$

В дебаевском приближении $\omega = cq$, и сечение рассеяния с испусканием фонона приобретает вид

$$\sigma_{\tau+} = \frac{\hbar\,|a|^2 e^{-2W_0}}{4k^2Mc^3\tau}\int_0^{\omega_1}\Big[4\pi^2\tau^2(\lambda_2 - \lambda_1) + 2\pi\tau\omega(\lambda_2^2 - \lambda_1^2) +$$

$$+ \frac{\omega^2}{3}(\lambda_2^3 - \lambda_1^3)\Big]\,\omega\left[1 + \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right) - 1}\right]d\omega. \qquad (88,13)$$

При малых энергиях нейтрона верхний предел интегрирования ω_1 определяется из закона сохранения энергии $\omega_1 = \frac{(\hbar k)^2}{2\mu} = \frac{\varepsilon_0}{\hbar}$, где ε_0 — энергия нейтрона до рассеяния $(\varepsilon_0 < \Theta)$; если энергия нейтронов $\varepsilon_0 \geqslant \Theta$, то

$\omega_1 = \frac{\Theta}{\hbar}$, однако в этом случае наряду с однофононными процессами надо рассматривать и многофононные.

Таким образом, сечение рассеяния с поглощением фонона будет определяться формулой

$$\sigma_{\tau-} = \frac{\hbar |a|^2 e^{-2W_0}}{4k^2 M c^3 \tau} \int\limits_0^{\theta \hbar} \left[4\pi^2\tau^2 (\lambda_2 - \lambda_1) + 2\pi\tau\omega (\lambda_2^2 - \lambda_1^2) + \right.$$

$$\left. + \frac{\omega^2}{3} (\lambda_2^3 - \lambda_1^3) \right] \frac{\omega \, d\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right) - 1}. \quad (88,14)$$

Для получения полных сечений рассеяния нейтронов с испусканием и поглощением одного фонона следует просуммировать (88,13) и (88,14) по всем возможным значениям векторов обратной решетки

$$\sigma_+ = \sum_\tau \sigma_{\tau+}, \quad \sigma_- = \sum_\tau \sigma_{\tau-}.$$

Найденные формулы относятся только к рассеянию нейтронов кристаллом одноизотопного состава с ядрами, имеющими нулевой спин. Если волновой вектор нейтрона $k < \pi\tau_{\min}$, где $\tau_{\min}$ — наименьшее значение длины вектора обратной решетки (в простой кубической решетке $\tau_{\min} = {}^1/_d$), то сечения упругого и неупругого рассеяния с испусканием одного фонона будут равны нулю. Таким образом, рассмотренные явления рассеяния будут наблюдаться только в том случае, когда энергия нейтрона

$$\varepsilon_0 \geqslant \frac{(\pi \hbar \tau_{\min})^2}{2\mu}.$$

Покажем теперь, что при низких температурах и малых энергиях нейтрона основную роль в неупругом рассеянии играют однофононные процессы. Для этого достаточно оценить вероятное испускание двух фононов. Вероятность испускания двух фононов будет пропорциональна квадрату соответствующего матричного элемента:

$$|(b|V|a)|^2_{2+} = \left| A \sum_n \exp\{in(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')\} M_{\nu_\sigma+1, \nu_\sigma} M_{\nu_\rho+1, \nu_\rho} \prod_s{}'' M_{\nu_s \nu_s} \right|^2. \quad (88,15)$$

Сравнивая (88,15) с (88,4) и учитывая, что при большом N имеет место приближенное равенство $\prod_s{}' M_{\nu_s \nu_s} \approx \prod_s{}'' M_{\nu_s \nu_s}$, мы убедимся, что квадрат матричного элемента для излучения двух фононов (88,15) содержит лишний множитель:

$$f = |M_{\nu_\sigma+1, \nu_\sigma}|^2 \approx (\nu_s + 1) \frac{\hbar |(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \boldsymbol{e}_\sigma|^2}{MN\omega}.$$

Этим же множителем отличается вероятность однофононного излучения от упругого рассеяния. Умножая f на число состояний фонона

$\frac{4\pi V\,\omega^2\,d\omega}{(2\pi c)^3}$ и суммируя по состояниям поляризации, получим:

$$\overline{f} = \frac{\hbar k^2 \mu V}{2\pi^2 M N c^2} \int\limits_0^{\varepsilon/\hbar} \omega \left(1 + \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{T}\right) - 1} \right) d\omega.$$

При

$$T << \Theta, \quad \overline{f} \approx \frac{\varepsilon_0 \mu V}{2\pi^2 N M c^3 \hbar} \left(\frac{\varepsilon_0}{\hbar} \right)^2.$$

Если принять во внимание, что $\omega^3_{\max} = 6\pi^2 c^3 \frac{N}{V}$ и $\hbar\omega_{\max} = \Theta$, то

$$\overline{f} \approx \frac{\mu}{M} \left(\frac{\varepsilon_0}{\Theta} \right)^3.$$

Таким образом, при

$$\frac{(\hbar\pi\tau_{\min})^2}{2\mu} \leqslant \varepsilon_0 \leqslant \Theta$$

и $T << \Theta$ сечение рассеяния с испусканием одного фонона пропорционально $\frac{\mu}{M}\left(\frac{\varepsilon_0}{\Theta}\right)^3$, а сечение рассеяния с испусканием двух фононов пропорционально $\left(\frac{\mu}{M}\right)^2 \left(\frac{\varepsilon_0}{\Theta}\right)^6$. Поэтому при $\varepsilon_0 << \Theta$ при неупругом рассеянии существенны только процессы с испусканием только одного фонона. С ростом энергии нейтрона становятся существенны и процессы множественного рождения фононов. Эти процессы мы рассмотрим в следующем параграфе.

§ 89. Неупругое рассеяние нейтронов кристаллами при множественном рождении и поглощении фононов

Предположим, что конечное состояние кристалла, характеризуемое набором квантовых чисел $\{\nu'_s\}$, отличается от начального состояния $\{\nu_s\}$ более чем одним квантовым числом ν'_s. Эффективное сечение рассеяния в единицу телесного угла (отнесенное к одному ядру) определяется формулой (87,19):

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ba} = \frac{\mu^2}{(2\pi)^2 N \hbar^4} \frac{k'}{k} \left| (b \,|\, V \,|\, a) \right|^2, \tag{89,1}$$

где

$$k' = \left\{ k^2 + \frac{1}{\hbar} \sum_s \omega_s (\nu_s - \nu'_s) \right\}^{1/2}, \tag{89,2}$$

а квадрат матричного элемента

$$\left| (b \,|\, V | a) \right|^2 = |A|^2 \sum_{\{\nu'_s\}} \left| \sum_n \exp\{ i\boldsymbol{n} (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \} \prod_s M_{\nu'_s \nu_s} \right|^2. \tag{89,3}$$