

Корреляционные функции и дифракция нейтронов в кристаллах

Рассмотрим кристаллическую систему, облучаемую падающими на нее частицами, слабо взаимодействующими с кристаллом. Среди возможных типов падающих частиц наиболее интересны рентгеновские фотоны и медленные нейтроны. Предположим, что в результате единичного акта рассеяния частица переходит из состояния $|k\rangle$ в состояние $|k'\rangle$, а кристалл при этом из состояния $|i\rangle$ с энергией ε_i переходит в состояние $|f\rangle$ с энергией ε_f . Особенно интересны процессы возбуждения в кристалле фононов или магнонов, поскольку они дают возможность изучать дисперсионные законы для значений k во всей зоне Бриллюэна.

Борновское приближение

В борновском приближении дифференциальное сечение неупругого рассеяния (отнесенное к единичному телесному углу, единичному интервалу энергий и к единице объема образца) записывается в виде

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon d\Omega} = \frac{k'}{k} \left(\frac{M}{2\pi}\right)^2 |\langle k'f | H' | ik \rangle|^2 \delta(\omega - \varepsilon_i + \varepsilon_f), \quad (19.1)$$

где H' — оператор, описывающий взаимодействие частицы с мишенью, ω — энергия, переданная мишени, M — приведенная масса частицы; Ω означает в данном случае телесный угол (а не объем, как раньше). Вывод выражения (19.1) приводится в обычных курсах квантовой механики.

В первом порядке борновского приближения состояния (без учета спина) можно описывать плоскими волнами $|k\rangle = \exp ik \cdot \mathbf{x}$, и $|k'\rangle = \exp ik' \cdot \mathbf{x}$. Здесь \mathbf{x} — координаты падающей частицы. Тогда

$$\langle k'f | H' | ik \rangle = \langle f | \int_V d^3x e^{ik' \cdot \mathbf{x}} H' | i \rangle, \quad (19.2)$$

где

$$\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \quad (19.3)$$

есть изменение волнового вектора падающей частицы. Если оператор взаимодействия H' представлен в виде суммы операторов парных взаимодействий (взаимодействие каждой падающей частицы с одной из частиц мишени), т. е. имеет вид

$$H' \equiv \sum_j V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (19.4)$$

то, согласно (19.2), получим

$$\langle \mathbf{k}' f | H' | i \mathbf{k} \rangle = V_{\mathbf{k}} \sum_j \langle f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j} | i \rangle, \quad (19.5)$$

где

$$V_{\mathbf{k}} = \int d^3x e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} V(\mathbf{x}). \quad (19.6)$$

Используя выражение (19.5) и предполагая, что начальное распределение состояний мишени имеет статистический характер, характеризуемый вероятностями p_i того, что мишень находится в состоянии $|i\rangle$, получим

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon d\Omega} = \frac{k'}{k} \left(\frac{M}{2\pi}\right)^2 |V_{\mathbf{k}}|^2 \sum_{i|j|l} p_i \langle i | e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j} | f \rangle \langle f | e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l} | i \rangle \delta(\omega - \varepsilon_l + \varepsilon_i). \quad (19.7)$$

Если для дельта-функции взять ее интегральное представление, то мы придем к следующему важному выражению, предложенному Ван Хове:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\varepsilon d\Omega} &= \frac{k'}{2\pi k} \left(\frac{M}{2\pi}\right)^2 |V_{\mathbf{k}}|^2 \times \\ &\times \sum_{i|j|l} p_i \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[i(\omega + \varepsilon_i - \varepsilon_j)t] \langle i | \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j) | f \rangle \times \\ &\times \langle f | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l) | i \rangle, \quad (19.8) \end{aligned}$$

или

$$\boxed{\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon d\Omega} = \frac{k'}{2\pi k} \left(\frac{M}{2\pi}\right)^2 |V_{\mathbf{k}}|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{j|l} \langle \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_j(0)] \times \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_l(t)] \rangle_T, \quad (19.9)}$$

где $\langle \dots \rangle_T$ означает квантовое среднее и среднее по ансамблю, взятое по каноническому распределению при температуре T .

Последний этап преобразований состоит в том, что мы берем $\mathbf{x}_i(t)$ в гейзенберговском представлении, т. е.

$$\begin{aligned} \exp [i(\epsilon_i - \epsilon_j)t] \langle f | \exp [i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_i] | i \rangle &\equiv \\ &\equiv \langle f | \exp (iH_0 t) \exp [i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_i(0)] \exp (-iH_0 t) | i \rangle \equiv \\ &\equiv \langle f | \exp [i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_i(t)] | i \rangle. \end{aligned} \quad (19.10)$$

При этом мы использовали также соотношение

$$\begin{aligned} \sum_j \langle i | \exp [-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_j(0)] | f \rangle \langle f | \exp [i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_i(t)] | i \rangle &= \\ = \langle i | \exp [-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_j(0)] \exp [i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_i(t)] | i \rangle. \end{aligned} \quad (19.11)$$

Обе экспоненциальные функции являются квантовыми операторами и коммутируют только для одного и того же момента времени; поэтому в общем случае мы не можем записать произведение двух экспонент в виде одной. Статистическое среднее в выражении (19.9) в состоянии теплового равновесия определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_i p_i \langle i | \exp [-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_j(0)] \exp [i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_i(t)] | i \rangle &\equiv \\ \equiv \langle \exp [-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_j(0)] \exp [i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_i(t)] \rangle_T. \end{aligned} \quad (19.12)$$

Результат (19.9) удобно записать в виде

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\epsilon} = A_{\mathbf{K}} \mathfrak{S}(\omega, \mathbf{K}), \quad (19.13)$$

где

$$A_{\mathbf{K}} = \frac{k'}{k} \left(\frac{M}{2\pi} \right)^2 |V_{\mathbf{K}}|^2 \quad (19.14)$$

зависит в основном от потенциала парного взаимодействия, а величина

$$\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{K}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \sum_{jl} \langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_j(0)] \exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_l(t)] \rangle_T, \quad (19.15)$$

в полном согласии с (6.64), представляет собой фурье-образ по времени от корреляционной функции, описывающей систему. Удобно ввести также оператор плотности частиц

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j(t)), \quad (19.16)$$

при помощи которого величину $\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{K})$ можно представить в виде пространственно-временного фурье-образа от плотности

корреляционной функции, т. е.

$$\mathfrak{S}(\omega, \mathbf{K}) = \frac{1}{2\pi} \int d^3x d^3x' \exp [i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \int dt \exp (-i\omega t) \times \\ \times \langle \rho(\mathbf{x}', 0) \rho(\mathbf{x}, t) \rangle_T. \quad (19.17)$$

Полученное выражение не относится к числу тех, которые повседневно используются в расчетах, но оно наглядно демонстрирует зависимость дифференциального сечения рассеяния от плотности корреляционной функции $\langle \rho(\mathbf{x}', 0) \rho(\mathbf{x}, t) \rangle_T$.

Дифракция нейтронов

Теория рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах очень близка к теории рассеяния нейтронов. Обе эти теории занимают важное место в физике твердого тела, но мы рассмотрим лишь теорию рассеяния нейтронов, обращая особое внимание на определение законов дисперсии фононов и магнонов по данным о неупругом рассеянии нейтронов. Для физики твердого тела процессы неупругого рассеяния с возбуждением фононов и магнонов представляет такой же интерес, как и классические применения упругого рассеяния к определению кристаллической и магнитной структуры твердых тел. В заключение этого вводного раздела укажем несколько работ, прямо относящихся к затронутым проблемам, а именно обзоры [1—3]¹⁾.

Понятие *длины рассеяния* полезно для описания s -волны рассеяния падающих нейтронов низкой энергии, которые взаимодействуют с узкой и глубокой потенциальной ямой.

Рассмотрим ситуацию, изображенную на рис. 19.1. Для указанных выше условий регулярное решение волнового уравнения для внутренней части глубокой потенциальной ямы не чувствительно к малым изменениям энергии падающей частицы. Таким образом, логарифмическая производная на краю ямы нечувствительна к энергии падающих частиц. Это ее свойство очень полезно. Если ввести в рассмотрение фазовый сдвиг s -волны η_0 , то для волновой функции $\varphi(\mathbf{x})$ сразу же за границей потенциальной ямы получим

$$r\varphi = B \sin(kr + \eta_0) \approx B(kr + \eta_0). \quad (19.18)$$

Если ввести величины C и b , которые приближенно можно считать не зависящими от энергии (при небольших энергиях), то в соответствии с экспериментальными данными, отражающими дисперсионный закон (см. рис. 19.1), и высказанным выше

¹⁾ Следует упомянуть также лекции Маршалла в Харуэлле (не опубликованы).

соображением имеем право записать (19.18) в виде

$$r\varphi = C(r - b), \quad (19.19)$$

откуда $B = C/k$, $\eta_0 = -kb$. Величину b называют *длиной рассеяния*, или *амплитудой рассеяния*; она может быть определена по

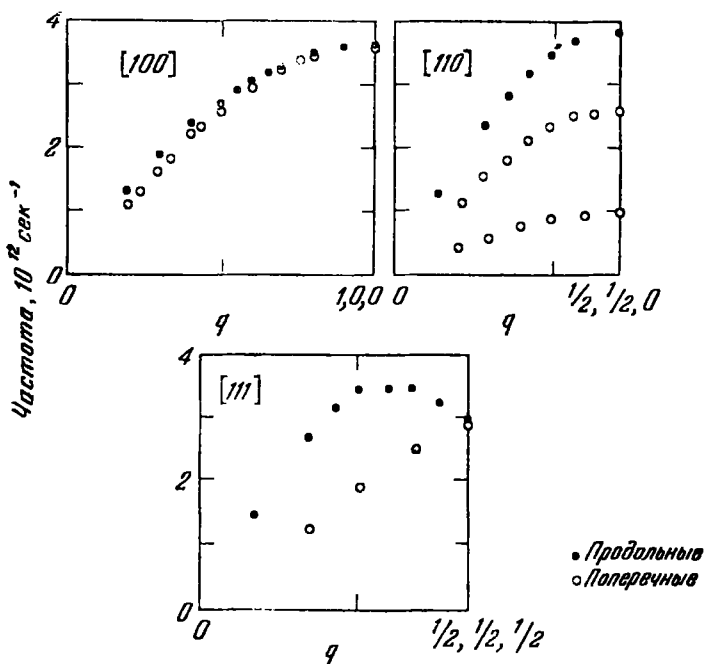


Рис. 19.1. Экспериментальные данные, характеризующие дисперсионный закон для натрия [4].

Эти данные получены для направлений [100], [110], [111] при 90° К методом неупругого рассеяния нейтронов.

отрезкам, отсекаемым на оси ординат. Обычный результат для сечения упругого рассеяния s-волны, выраженный через фазовый сдвиг η_0 , имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin^2 \eta_0}{k^2}, \quad (19.20)$$

так что в нашем приближении

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b^2, \quad (19.21)$$

т. е. $d\sigma/d\Omega$ приближенно не зависит от угла рассеяния и энергии, пока можно считать выполненным условие $k|b| \ll 1$ (напомним, что здесь b — длина, а не полевой оператор).

Сечение в виде (19.21) в приближении длины рассеяния можно описать в борновском приближении, если выбрать надлежащий эффективный потенциал или псевдопотенциал. Рассмотрим фиктивный потенциал

$$\tilde{V}(\mathbf{x}) = \frac{2\pi}{M} b \delta(\mathbf{x}); \quad (19.22)$$

тогда

$$V_{\mathbf{K}} = \frac{2\pi b}{M} \int d^3x \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}) \delta(\mathbf{x}) = \frac{2\pi}{M} b, \quad (19.23)$$

т. е. $V_{\mathbf{K}}$ не зависит от \mathbf{K} . Следовательно, из (19.14) для упругого рассеяния получим $A = b^2$. Далее, для упругого рассеяния на отдельном ядре формфактор (19.15) примет вид

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}(\omega, \mathbf{K}) &= \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) \langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}(0)] \exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}(0)] \rangle_T = \delta(\omega), \end{aligned} \quad (19.24)$$

и поэтому из (19.13) при $k = k'$ для упругого рассеяния, получим, пользуясь соотношениями (19.14), (19.23), (19.24), выражения

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} = b^2 \delta(\varepsilon); \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = b^2. \quad (19.25)$$

Когерентное и некогерентное упругое рассеяние на ядрах. Предположим, что мишень содержит N частиц. Пусть частица с номером j находится в точке \mathbf{x}_j и характеризуется амплитудой рассеяния b_j . Для псевдопотенциала мишени имеем

$$\tilde{V}(\mathbf{x}) = \frac{2\pi}{M} \sum_j b_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \quad (19.26)$$

где в случае упругого рассеяния от макроскопической мишени мы можем считать M массой нейтрона.

Из (19.23) и (19.26) находим

$$\left. \begin{aligned} V_{\mathbf{K}} &= \frac{2\pi}{M} \sum_j b_j \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_j), \\ |V_{\mathbf{K}}|^2 &= \left(\frac{2\pi}{M}\right)^2 \sum_{lm} b_l^* b_m \exp[i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_l)]. \end{aligned} \right\} \quad (19.27)$$

Здесь для удобства мы включили экспоненциальный множитель в $V_{\mathbf{K}}$, а не в формфактор $\mathcal{S}(\omega, \mathbf{K})$. Итак, если волновой вектор рассеянной частицы равен \mathbf{K} , то

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \sum_j b_j \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_j) \right|^2 = \sum_{lm} b_l^* b_m \exp[i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x}_m - \mathbf{x}_l)]. \quad (19.28)$$

Если между величинами b_l , b_m нет корреляции, то статистическое среднее (по ансамблю) при $l \neq m$ имеет вид

$$\langle b_l^* b_m \rangle = |\langle b \rangle|^2, \quad (19.29)$$

или в более общем случае

$$\langle b_l^* b_m \rangle = |\langle b \rangle|^2 + \delta_{lm} (\langle |b|^2 \rangle - |\langle b \rangle|^2). \quad (19.30)$$

Таким образом, для сечения рассеяния на ансамбле центров рассеяния имеем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \underbrace{|\langle b \rangle|^2}_{\text{когерентное}} \left| \sum_l e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_l} \right|^2 + \underbrace{N(\langle |b|^2 \rangle - |\langle b \rangle|^2)}_{\text{некогерентное}}. \quad (19.31)$$

Второй член в (19.31), описывающий некогерентное рассеяние, изотропен; он обусловлен наличием в мишени различных изотопов данного элемента, а также различными ориентациями спинов ядер относительно спинов падающих частиц.

Сечение когерентного рассеяния (отнесенное к одному атому) определяется из (19.31) следующим образом:

$$\sigma_{\text{ког}} = 4\pi \left(\sum_j p_j b_j \right)^2 = 4\pi |\langle b \rangle|^2, \quad (19.32)$$

где p_j — вероятность того, что данный атом будет иметь амплитуду рассеяния, равную b_j . Полное сечение рассеяния должно быть суммой вкладов в интенсивность рассеяния от всех источников; иначе говоря,

$$\sigma_{\text{полн}} = 4\pi \sum_j p_j b_j^2 = 4\pi \langle |b|^2 \rangle. \quad (19.33)$$

Сечение некогерентного рассеяния (отнесенное к одному атому) равно

$$\sigma_{\text{неког}} = \sigma_{\text{полн}} - \sigma_{\text{ког}} = 4\pi (\langle |b|^2 \rangle - |\langle b \rangle|^2). \quad (19.34)$$

В выражение для когерентного рассеяния мишенью входит величина $\left| \sum_l e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_l} \right|^2$, как можно видеть из (19.31). Эта сумма обращается в нуль, если произведение $\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_l$ не является целым кратным 2π для всех l . Пусть \mathbf{x}_l — радиусы-векторы узлов решетки, т. е.

$$\mathbf{x}_l = u_l \mathbf{a} + v_l \mathbf{b} + w_l \mathbf{c}, \quad (19.35)$$

где u, v, w — целые числа, $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ — орты системы координат, связанной с кристаллом; тогда когерентное рассеяние имеет место, если

$$\mathbf{K} = l\mathbf{a}^* + m\mathbf{b}^* + n\mathbf{c}^* \equiv \mathbf{G}, \quad (19.36)$$

где $\mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*$ — базисные векторы обратной решетки, а l, m, n — целые числа. В этом случае

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_l = 2\pi(ul + vm + wn) = 2\pi \times \text{целое число.}$$

Итак, мы пришли к условию Брэгга, выполняющемуся при равенстве волнового вектора рассеянной частицы \mathbf{K} одному из векторов \mathbf{G} обратной решетки.

Оценим сумму по решетке в (19.31) для случая одномерного кристалла с постоянной решетки, равной a , а затем обобщим результат на случай трех измерений. Пусть число атомов кристалла равно N ; координата l -го узла $x_l = la$, где l — целое число, принимающее одно из значений в интервале от 0 до $N - 1$. Тогда искомая сумма имеет вид

$$\sum_{l=0}^{N-1} e^{ilKa} = \frac{1 - e^{iNKa}}{1 - e^{iKa}},$$

и

$$\left| \sum_{l=0}^{N-1} e^{ilKa} \right|^2 = \frac{1 - \cos NKa}{1 - \cos Ka} = \frac{\sin^2 \frac{1}{2} NKa}{\sin^2 \frac{1}{2} Ka} \approx \frac{2\pi N}{a} \sum_G \delta(K - G). \quad (19.37)$$

Заметим, что стоящее в левой части отношение велико, когда знаменатель $(\sin^2 \frac{1}{2} Ka)$ мал, т. е. когда $\frac{1}{2} Ka = n\pi$, или $K = 2\pi n/a \equiv G$; иначе говоря, эта величина представляет собой периодическую дельта-функцию. Для выяснения вопроса о нормировке положим $K = G + \eta$, где η — малая величина, и вычислим интеграл

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \frac{\sin^2 \frac{1}{2} NKa}{\sin^2 \frac{1}{2} Ka} &= \frac{\cos^2 \frac{1}{2} NGa}{\cos^2 \frac{1}{2} Ga} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \frac{\sin^2 \frac{1}{2} N\eta a}{\sin^2 \frac{1}{2} \eta a} \approx \\ &\approx \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \frac{\sin^2 \frac{1}{2} N\eta a}{\frac{1}{4} \eta^2 a^2} \approx \frac{2\pi}{a} N \int d\eta \delta(\eta) \approx \frac{2\pi N}{a}; \end{aligned}$$

здесь мы ограничились значениями K , близкими к G , а также использовали то, что $Ga/2 = \pi \times \text{целое число}$. Обобщение этого

результата на случай трех измерений дает

$$\left| \sum_l e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_l} \right|^2 = (2\pi)^3 \frac{N}{V_c} \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{K} - \mathbf{G}) = NV_c^* \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{K} - \mathbf{G}), \quad (19.38)$$

где V_c — объем $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$ примитивной ячейки в прямой решетке, а V_c^* — объем ячейки в обратной решетке. Окончательно для сечения когерентного рассеяния кристалла получаем

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{кор}} = NV_c^* |\langle b \rangle|^2 \sum_{\mathbf{g}} \delta(\mathbf{K} - \mathbf{G}). \quad (19.39)$$

Неупругое решеточное рассеяние. Предположим, что все атомы в кристалле имеют одну и ту же амплитуду рассеяния, равную b , которую мы считаем вещественной. Формфактор (19.15) содержит величину

$$\begin{aligned} F(\mathbf{K}, t) &= \sum_{jl} \langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x}_j(0) + \mathbf{u}_j(0))] \exp[i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x}_l(0) + \mathbf{u}_l(t))] \rangle_T = \\ &= \sum_{jl} \exp[i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_j)] \langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_j(0)] \exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_l(t)] \rangle_T, \quad (19.40) \end{aligned}$$

где \mathbf{x}_l , \mathbf{x}_j — теперь координаты несмещенных атомов, а \mathbf{u}_l , \mathbf{u}_j — смещения относительно \mathbf{x}_l и \mathbf{x}_j . Фононные операторы вводятся в рассмотрение при разложении смещений \mathbf{u} в ряды по координатам фононов.

Второй множитель в правой части выражения (19.40) — величина в известном смысле замечательная; для случая $l=j$ мы детально будем обсуждать ее свойства в следующей главе, посвященной испусканию гамма-квантов без отдачи. Сейчас мы воспользуемся получаемыми в гл. 20 выражениями (20.51) и (20.53) и надлежащим образом видоизменим их для случая $l \neq j$. Тогда

$$\langle \exp[-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_l(0)] \exp[i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}_l(t)] \rangle_T = \exp[-Q_{lj}(t)], \quad (19.41)$$

где

$$Q_{lj}(t) = \frac{1}{2} K^2 (\langle [u_j(t) - u_l(0)]^2 \rangle_T - [u_l(0), u_j(t)]). \quad (19.42)$$

Здесь для упрощения предполагаем, что все фононные собственные колебания с данным значением волнового вектора \mathbf{q} вырождены, и поэтому мы всегда можем выбрать поляризацию одного из собственных колебаний с \mathbf{q} так, чтобы направление \mathbf{q} совпадало с \mathbf{K} .

В выражении (19.42) мы, согласно (2.33), разложим смещение по фононным координатам; имеем

$$u_j(t) = \sum_{\mathbf{q}} (2NM\omega_{\mathbf{q}})^{-1/2} (a_{\mathbf{q}} \exp [i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_j - \omega_{\mathbf{q}}t)] + a_{\mathbf{q}}^+ \exp [-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_j - \omega_{\mathbf{q}}t)]), \quad (19.43)$$

где $a_{\mathbf{q}}$, $a_{\mathbf{q}}^+$ — фононные операторы. Тогда

$$u_j(t) - u_i(0) = \sum_{\mathbf{q}} (2NM\omega_{\mathbf{q}})^{-1/2} (a_{\mathbf{q}} (\exp [-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_j - \omega_{\mathbf{q}}t)] - \exp (i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i)) + a_{\mathbf{q}}^+ (\exp [-i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_j - \omega_{\mathbf{q}}t)] - \exp (-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_i))), \quad (19.44)$$

откуда, выделяя члены, диагональные по числам заполнения фононов, получим для квадрата величины (19.44)

$$\begin{aligned} [u_j(t) - u_i(0)]^2 = \\ = \frac{1}{2NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} (2 - e^{i\theta_{ij}} - e^{-i\theta_{ij}}) (a_{\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{q}} + a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^+) + \\ + \text{недиагональные члены}, \end{aligned} \quad (19.45)$$

где

$$\theta_{ij} = \omega_{\mathbf{q}}t + \mathbf{q} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j). \quad (19.46)$$

Для коммутатора $[u_i(0), u_j(t)]$ находим

$$\begin{aligned} [u_i(0), u_j(t)] = \frac{1}{2NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} \{ [a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}}^+] e^{i\theta_{ij}} + [a_{\mathbf{q}}^+, a_{\mathbf{q}}] e^{i\theta_{ij}} \} = \\ = \frac{i}{NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} \sin \theta_{ij}. \end{aligned} \quad (19.47)$$

Итак, для $Q_{ij}(t)$ получаем из (19.42)

$$Q_{ij}(t) = \frac{K^2}{2NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} ((2 \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + 1)(1 - \cos \theta_{ij}) - i \sin \theta_{ij}). \quad (19.48)$$

Выделив в $Q_{ij}(t)$ члены, зависящие от времени, и члены, не зависящие от времени, имеем

$$\begin{aligned} e^{-Q_{ij}(t)} = \exp \left\{ -\frac{K^2}{2NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} (2 \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + 1) \right\} \times \\ \times \exp \left\{ \frac{K^2}{2NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} [(2 \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + 1) \cos \theta_{ij} + i \sin \theta_{ij}] \right\}. \end{aligned} \quad (19.49)$$

Каждый член в показателе экспоненты мал, поскольку он имеет порядок величины N^{-1} , и поэтому второй множитель в правой

части (19.49) можно разложить в степенной ряд

$$\exp\{\dots\} = 1 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{K^2}{2NM\omega_{\mathbf{q}}} [(2\langle n_{\mathbf{q}} \rangle + 1) \cos \theta_{ij} + i \sin \theta_{ij}] + \dots \quad (19.50)$$

Члены, которыми мы здесь пренебрегаем, описывают многофононные эффекты. Первый множитель в правой части (19.49) запишем в виде $\exp(-2W)$; тогда

$$\begin{aligned} \frac{F(\mathbf{K}, t)}{e^{-2W}} = & \sum_{jl} \{ \exp [i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_l)] + \\ & + \sum_{\mathbf{q}} \frac{K^2}{2NM\omega_{\mathbf{q}}} (\langle n_{\mathbf{q}} + 1 \rangle \exp(i\omega_{\mathbf{q}}t) \exp [i(\mathbf{q} - \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)] + \\ & + \langle n_{\mathbf{q}} \rangle \exp(-i\omega_{\mathbf{q}}t) \exp [-i(\mathbf{q} + \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)]) \}. \end{aligned}$$

Используя (19.38), получим окончательно выражение для $F(\mathbf{K}, t)$ в виде

$$\begin{aligned} F(\mathbf{K}, t) = NV_c^* e^{-2W} \left\{ \sum_{\mathbf{G}} \delta(\mathbf{K} - \mathbf{G}) + \right. \\ \left. + \sum_{\mathbf{q}} \frac{K^2}{2NM\omega_{\mathbf{q}}} \left(\langle n_{\mathbf{q}} + 1 \rangle e^{i\omega_{\mathbf{q}}t} \sum_{\mathbf{G}} \delta(\mathbf{K} - \mathbf{q} - \mathbf{G}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \langle n_{\mathbf{q}} \rangle e^{-i\omega_{\mathbf{q}}t} \sum_{\mathbf{G}} \delta(\mathbf{K} + \mathbf{q} - \mathbf{G}) \right) \right\}. \quad (19.51) \end{aligned}$$

Первый член в правой части (19.51) описывает упругое рассеяние при произвольном \mathbf{G} ; второй член описывает неупругое рассеяние при $\mathbf{K} = \mathbf{G} + \mathbf{q}$, при котором фотон с \mathbf{q} испускается нейтроном; наконец, последний, третий, член соответствует случаю, когда фотон с \mathbf{q} поглощается нейтроном, и тогда $\mathbf{K} = \mathbf{G} - \mathbf{q}$.

Изменение энергии в процессах неупругого рассеяния определяется из множителей, зависящих от времени. Для процессов испускания фотонов зависящая от времени подынтегральная функция в выражении для формфактора $\mathcal{S}(\omega, \mathbf{K})$ (см. (19.15)) будет содержать множитель вида $\exp(-i\omega t) \exp(i\omega_{\mathbf{q}} t)$, т. е. в этих процессах нейтрон должен терять энергию $\omega_{\mathbf{q}}$. В случае поглощения фотонов будет появляться множитель $\exp(-i\omega t) \exp(-i\omega_{\mathbf{q}} t)$, что отвечает увеличению энергии нейтрона на величину $\omega_{\mathbf{q}}$.

Изложенные выше соображения приводят к заключению, что при неупругом рассеянии нейтрона может происходить как ис-

пускание, так и поглощение одного фонона. Это утверждение соответствует случаю, когда мы ограничиваемся первым порядком в разложении (19.50). Экспериментальные данные о зависимости ω от волнового числа k для фононов в металлическом натрии приведены на рис. 19.1. Из значений $G+q$, которые мы

** Значения энергии, теряемой при поглощении фонона*

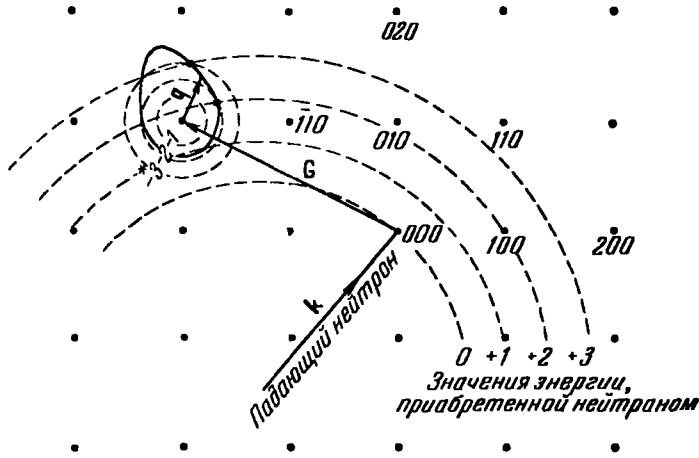


Рис. 19.2. Энергетическая схема неупругого рассеяния падающих на мишень нейтронов с волновым вектором k вблизи точки $\bar{2}10$ в обратном пространстве.

Фононы с волновым вектором q на поверхности рассеяния поглощаются нейтронами (набор значений q показан сплошной кривой). На поверхности рассеяния испытывающие рассеяние нейтроны имеют волновой вектор $k + G(\bar{2}10) + q$; их энергия возрастает на величину ω_q по сравнению с энергией падающих нейтронов.

можем оценить для данных G , следует, что мы будем наблюдать лишь те фононы, для которых обеспечивается выполнение закона сохранения во всей системе в целом. Требования, вытекающие из законов сохранения энергии и сохранения волнового вектора, резко ограничивают энергии и направления нейтронов, испытавших неупругое рассеяние при данном k .

Рис. 19.2 схематически иллюстрирует баланс энергии для процессов, в которых происходит поглощение фонона. Установлено, что энергетические поверхности, соответствующие рассеянию (в трехмерном случае) и являющиеся аналогами показанной на рис. 19.2 одномерной картины, обладают центром симметрии относительно каждой точки обратной решетки.

Часто оказывается удобным иметь дело с очень медленными нейтронами. Если энергия падающих нейтронов столь мала, что ею можно пренебречь, то нейтроны уже не способны испускать фононы, а могут лишь поглощать их. Кроме того, медленные нейтроны не могут испытывать упругого рассеяния. Тогда можно считать, что в однофононном приближении весь спектр рассеяния обусловлен нейтронами, для которых $\mathbf{K} = -\mathbf{q}$ и, следовательно,

$$\frac{1}{2M} q^2 = \omega_{\mathbf{q}}. \quad (19.52)$$

Это соотношение справедливо для кристаллов с большими значениями упругих постоянных, причем волновой вектор \mathbf{K} должен равняться $-\mathbf{q} + \mathbf{G}$. Решения уравнения (19.52) в одномерном случае показаны на рис. 19.3.

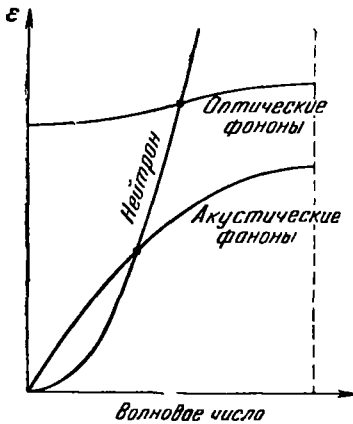


Рис. 19.3. Схематическое изображение дисперсионного закона и зависимости энергий нейтронов от волнового числа фононов.

Точки пересечения, показанные черными кружками, соответствуют энергиям, при которых возможно рассеяние нейтрона. Кривые относятся к одномерному случаю; рассеяние нейтрона с $k \rightarrow 0$ сопровождается поглощением фонона из кристалла. Нижняя точка отвечает поглощению одного акустического фонона, верхняя — поглощению одного оптического фонона.

Из экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов можно определять законы дисперсии для всех ветвей акустического и оптического фононного спектра. В настоящее время — это единственный общий метод определения законов дисперсии для фононов. Аналогичным путем можно установить законы дисперсии для магнонов. Кроме того, из экспериментальных данных о «толщине» энергетической поверхности, соответствующей рассеянию, можно оценить времена релаксации для фононов и магнонов.

Фактор Дебая — Валлера. Из выражения (19.51) следует, что ширина максимумов упругого рассеяния не увеличивается при возрастании температуры, но их высота уменьшается по закону $\exp(-2W)$, где

$$2W = \frac{K^2}{2NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} (2 \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + 1). \quad (19.53)$$

Множитель $\exp(-2W)$ известен под названием **фактора Дебая — Валлера**. Полагая для удобства $x_{\mathbf{j}} = 0$, заметим, что, со-

гласно (19.43), для $\langle u_j^2 \rangle$ легко получить выражение

$$\langle u_j^2 \rangle = \frac{1}{2NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} (2 \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + 1). \quad (19.54)$$

Здесь сумма берется по всем $3N$ нормальным колебаниям, тогда как в (19.53) сумма берется по N нормальным колебаниям, поскольку вектор поляризации был выбран параллельным \mathbf{K} . Если определение $2W$ (см. (19.53)) мы обобщим на случай всех $3N$ нормальных колебаний, то получим

$$2W = \frac{1}{3} \frac{K^2}{2NM} \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}}^{-1} (2 \langle n_{\mathbf{q}} \rangle + 1) = \frac{1}{3} K^2 \langle u_j^2 \rangle. \quad (19.55)$$

Отсюда видно, что величина W пропорциональна среднему значению квадрата амплитуды колебаний $\langle u^2 \rangle$ атома в состоянии теплового равновесия при температуре T . В следующей главе будет показано, что для фононного спектра в дебаевском случае можно написать

$$\frac{1}{3} K^2 \langle u_j^2 \rangle = \frac{3K^2}{4Mk_B\Theta} \left\{ 1 + \frac{2\pi^2}{3} \left(\frac{T}{\Theta} \right)^2 + \dots \right\} = 2W. \quad (19.56)$$

Первый член в правой части (соответствующий единице в фигурных скобках) обусловлен нулевыми колебаниями, т. е. суммарными эффектами испускания фононов падающими нейтронами при абсолютном нуле. При $K \rightarrow 0$ получим $\exp(-2W) \rightarrow 1$. Заметим, что при абсолютном нуле величина W приблизительно равна отношению энергии отдачи нейтронов ($K^2/2M$) к дебаевской энергии $k_B\Theta$.

Фактор Дебая — Валлера был первоначально введен в теории дифракции рентгеновских лучей. Он служит мерой влияния теплового движения на наблюдаемое нарушение периодичности решетки. Полное рассмотрение экспериментальных данных, относящихся к фактору Дебая — Валлера, в связи с явлениями дифракции рентгеновских лучей, имеется в книге Джеймса [5]. Подробное обсуждение процессов неупругого рассеяния нейтронов приведено в работе [6].

Магнитное рассеяние нейтронов. При магнитном взаимодействии электронного магнитного момента парамагнитного атома с магнитным моментом медленного нейтрона амплитуда рассеяния оказывается по порядку величины такой же, как и при чисто ядерном рассеянии, рассмотренном выше. Ниже приведены значения сечений рассеяния на связанных ядрах и на соответствующих парамагнитных ионах.

Ядро	Сечение когерентного ядерного рассеяния, 10^{-24} см ²	Парамагнитный ион	Сечение магнитного рассеяния, 10^{-24} см ²
Mn ⁵⁵	2	Mn ⁺⁺	21
Fe ⁵⁶	13	Fe ⁺⁺	21
Ni ⁵⁸	26	Ni ⁺⁺	5
Co ⁵⁹	6	Co ⁺⁺	9

Значения сечений для магнитного рассеяния относятся к рассеянию вперед.

Мы будем рассматривать магнитное рассеяние, вычислив прежде всего матричные элементы магнитного взаимодействия нейтрона с электроном в борновском приближении. Гамильтониан взаимодействия можно записать в виде

$$H = -\mu_e \cdot \mathbf{H}_n, \quad (19.57)$$

где \mathbf{H}_n — магнитное поле, созданное магнитным моментом μ_n нейтрона. Мы пренебрегаем магнитным полем, вызванным орбитальным движением электрона. Для элементов группы железа это будет хорошим приближением. Итак, если ввести обозначение $\mathbf{r} = \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_e$, то для \mathbf{H}_n можно написать

$$\mathbf{H}_n = \text{rot} \frac{\mu_n \times \mathbf{r}}{r^3} = -\text{rot} \mu_n \times \nabla \frac{1}{r}; \quad (19.58)$$

используя обычные формулы векторной алгебры, получим

$$\text{rot} \mu_n \times \nabla \frac{1}{r} = -(\mu_n \cdot \nabla) \nabla \frac{1}{r} + \mu_n \nabla^2 \frac{1}{r}. \quad (19.59)$$

Далее

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad (19.60)$$

и, следовательно,

$$H = -\mu_e \cdot \nabla \left(\mu_n \cdot \nabla \frac{1}{r} \right) - 4\pi\mu_e \cdot \mu_n \delta(\mathbf{r}). \quad (19.61)$$

Обычно это выражение записывают в виде суммы членов вида

$$H_{\text{дип}} = \frac{\mu_e \cdot \mu_n}{r^3} - \frac{3(\mu_e \cdot \mathbf{r})(\mu_n \cdot \mathbf{r})}{r^5} \quad (19.62)$$

и

$$H_{\text{конт}} = -\frac{8\pi}{3} \mu_e \cdot \mu_n \delta(\mathbf{r}). \quad (19.63)$$

В борновском приближении нам потребуются матричные элементы оператора H между спиновыми состояниями a и b и со-

стояниями \mathbf{k} и $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{K}$. Вектор \mathbf{r} в выражениях (19.58) — (19.63), по определению равный $\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_e$, представляет собой разность векторов, определяющих положения ядра и электрона. Мы хотим разделить пространственную и спиновую части в выражениях для матричных элементов с тем, чтобы в явном виде ввести функцию, зависящую от спина. Начало координат удобно выбрать в центре масс атома. Начальное состояние можно записать в виде

$$|i\rangle = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_n} \varphi_i(\mathbf{x}_e) |a_i\rangle, \quad (19.64)$$

где a_i содержит спиновые координаты электрона и нейтрона, а $\varphi_i(\mathbf{x}_e)$ — исходная (координатная) волновая функция электрона. Конечное состояние описывается функцией

$$|f\rangle = e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}_n} \varphi_f(\mathbf{x}_e) |a_f\rangle, \quad (19.65)$$

где индекс f означает конечное состояние. Тогда

$$\begin{aligned} \langle f | H | i \rangle &= \langle a_f | \int d^3x_n d^3x_e \varphi_f^*(\mathbf{x}_e) \varphi_i(\mathbf{x}_e) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_n} H | a_i \rangle = \\ &= \langle a_f | \int d^3r e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} H | a_i \rangle \int d^3x_e \varphi_f^*(\mathbf{x}_e) \varphi_i(\mathbf{x}_e) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_e}, \end{aligned} \quad (19.66)$$

где мы произвели преобразование координат, функциональный детерминант которого равен единице. В силу (19.61) второй член в H содержит $\delta(\mathbf{r})$; поэтому соответствующая часть $\langle a_f | \dots | a_i \rangle$ после интегрирования дает $-4\pi \mu_e \cdot \mu_n$; первый член в (19.61) после интегрирования по частям дает

$$\begin{aligned} - \int d^3r e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \mu_e \cdot \nabla \left(\mu_n \cdot \nabla \frac{1}{r} \right) &= i\mathbf{K} \cdot \mu_e \int d^3r e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \mu_n \cdot \nabla \frac{1}{r} = \\ &= (\mathbf{K} \cdot \mu_e) (\mathbf{K} \cdot \mu_n) \int d^3r \frac{1}{r} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} = (\mathbf{K} \cdot \mu_e) (\mathbf{K} \cdot \mu_n) \frac{4\pi}{K^2}. \end{aligned} \quad (19.67)$$

Итак, мы получили

$$\langle f | H | i \rangle = -4\pi \langle a_f | \mu_e \cdot \mu_n - (\mu_e \cdot \mathbf{K})(\mu_n \cdot \mathbf{K}) \cdot K^{-2} | a_i \rangle F(\mathbf{K}), \quad (19.68)$$

где $F(\mathbf{K})$ — магнитный формфактор, который определяется выражением

$$F(\mathbf{K}) = \int d^3x_e \varphi_f^*(\mathbf{x}_e) \varphi_i(\mathbf{x}_e) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_e}. \quad (19.69)$$

Для переходов, при которых состояние, зависящее от координат, остается неизменным, имеем $\varphi_f = \varphi_i$; в этом случае $F(0) = 1$. Поскольку

$$\mu_e = -\frac{|e|}{m_e c} \mathbf{S}_e, \quad \mu_n = g \frac{|e|}{m_n c} \mathbf{S}_n, \quad g = -1,91,$$

можно написать

$$\langle f | H | i \rangle = 4\pi g \frac{e^2}{m_e m_n c^2} \langle a_i | \mathbf{S}_e \cdot \mathbf{S}_n - (\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{K})(\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{K}) K^{-2} | a_i \rangle F(\mathbf{K}). \quad (19.70)$$

Заметим, что если $\hat{\mathbf{K}}$ — единичный вектор в направлении \mathbf{K} , то функции от спинов в (19.70) можно записать в виде

$$\mathbf{S}_n \cdot [\hat{\mathbf{K}} \times [\mathbf{S}_e \times \hat{\mathbf{K}}]],$$

откуда видно, что матричный элемент рассеяния пропорционален компоненте \mathbf{S}_e , перпендикулярной к \mathbf{K} . Если ввести вектор \mathbf{P}_\perp , имеющий длину $S_{e\perp}$ и направление, совпадающее с направлением вектора $\hat{\mathbf{K}} \times [\mathbf{S}_e \times \hat{\mathbf{K}}]$, то матричный элемент будет содержать скалярные произведения $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{P}_\perp$.

Обозначим через s, s' спиновые квантовые числа нейтрона, а через q, q' — спиновые квантовые числа электрона; тогда сечение рассеяния будет пропорционально величине

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{q's' \\ qs}} \langle qs | S_n^\alpha P_\perp^\alpha | q's' \rangle \langle q's' | S_n^\beta P_\perp^\beta | qs \rangle \langle qs | \rho | qs \rangle = \\ & = \sum_{\substack{q's' \\ qs}} \langle s | S_n^\alpha | s' \rangle \langle s' | S_n^\beta | s \rangle \langle q | P_\perp^\alpha | q' \rangle \langle q' | P_\perp^\beta | q \rangle \langle qs | \rho | qs \rangle, \end{aligned} \quad (19.71)$$

где ρ — спиновая матрица плотности для начального состояния. Далее,

$$\begin{aligned} & \sum_{s'} \langle s | S_n^\alpha | s' \rangle \langle s' | S_n^\beta | s \rangle \langle s | \rho | s \rangle = \\ & = \langle s | S_n^\alpha S_n^\beta | s \rangle \langle s | \rho | s \rangle = \frac{1}{4} \delta_{\alpha\beta} \langle s | \rho | s \rangle. \end{aligned} \quad (19.72)$$

Если пучок нейтронов не поляризован, то все $\langle s | \rho | s \rangle$ равны $1/2$ и тогда

$$\sum_s \frac{1}{4} \delta_{\alpha\beta} \langle s | \rho | s \rangle = \frac{1}{4} \delta_{\alpha\beta}. \quad (19.73)$$

В дальнейшем мы продолжаем считать нейтроны не поляризованными. Тогда для процессов упругого рассеяния, когда все $\langle q | \rho | q \rangle$ одинаковы, величина, входящая в выражение (19.71), окажется равной

$$\frac{1}{4} \delta_{\alpha\beta} \langle q | P_\perp^\alpha P_\perp^\beta | q \rangle = \frac{1}{4} \langle q | P_\perp^\alpha P_\perp^\alpha | q \rangle. \quad (19.74)$$

Для того чтобы учесть процессы неупругого рассеяния, мы должны обобщить процедуру, использованную выше при рассмот-

рени зависящей от времени части нейтрон-фононного рассеяния. Комбинируя (19.13), (19.70) и (19.71), получим

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} &= \frac{k'}{k} \left(\frac{m_n}{2\pi}\right)^2 \left(\frac{e^2}{m_e m_n c^2}\right)^2 \frac{(4\pi g)^2}{4(2\pi)} |F(\mathbf{K})|^2 \int dt e^{-i\omega t} \langle \mathbf{P}_\perp(0) \cdot \mathbf{P}_\perp(t) \rangle_T = \\ &= \frac{1}{2\pi} (gr_0)^2 \frac{k'}{k} |F(\mathbf{K})|^2 \int dt e^{-i\omega t} \langle \mathbf{P}_\perp(0) \cdot \mathbf{P}_\perp(t) \rangle_T, \end{aligned} \quad (19.75)$$

где $r_0 = e^2/mc^2 = 2,82 \cdot 10^{-13}$ см — классический радиус электрона.

Парамагнитное рассеяние. Рассмотрим теперь некоторые применения формулы (19.75). В случае упругого рассеяния на изолированном парамагнитном ионе со спином S в отсутствие магнитного поля получим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (gr_0)^2 |F(\mathbf{K})|^2 \langle \mathbf{P}_\perp^2 \rangle_T, \quad (19.76)$$

где в случае хаотического распределения спиновых ориентаций можно написать

$$\langle \mathbf{P}_\perp^2 \rangle_T = \frac{2}{3} S(S+1), \quad (19.77)$$

поскольку все компоненты парных произведений типа $S^a S^a$ вносят одинаковый вклад, за исключением компонент S , параллельных \mathbf{K} . Итак,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2}{3} (gr_0)^2 |F(\mathbf{K})|^2 S(S+1). \quad (19.78)$$

Зависимость от угла рассеяния содержится только в формфакторе. Сечение магнитного рассеяния несколько больше квадрата классического радиуса электрона. Парамагнитное рассеяние часто используется для определения магнитного формфактора $F(\mathbf{K})$.

Упругое ферромагнитное рассеяние. В ферромагнитном кристалле, в котором с каждой точкой решетки \mathbf{x}_i связан спин \mathbf{S}_i , вектор \mathbf{P}_\perp определяется соотношением

$$\mathbf{P}_\perp(\mathbf{K}) = \sum_i e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}_i} \mathbf{S}_{\perp i}. \quad (19.79)$$

Тогда можно записать

$$\langle \mathbf{P}_\perp(0) \cdot \mathbf{P}_\perp(t) \rangle_T = \sum_{j,l} \exp[i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{x}_l - \mathbf{x}_j)] \langle \mathbf{S}_{\perp j}(0) \cdot \mathbf{S}_{\perp l}(t) \rangle_T. \quad (19.80)$$

В случае упругого рассеяния сумму диагональных элементов в (19.80) можно заменить ее средним по времени:

$$\text{Среднее по времени от } \langle S_j^a(0) S_l^b(t) \rangle_T = \langle S_j^a \rangle_T^2 \delta_{ab}, \quad (19.81)$$

где $\langle S \rangle$ — функция температуры, σ определяется как единичный вектор направления оси преимущественной ориентации магнитных моментов. Тогда, воспользовавшись (19.38) и результатом задачи 19.4, получим

$$NV_c^* \langle S \rangle^2 \{1 - (\hat{\mathbf{K}} \cdot \sigma)^2\} \sum_{\mathbf{G}} \delta(\mathbf{K} - \mathbf{G})$$

и из (19.75) —

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (gr_0)^2 NV_c^* \langle S \rangle_T^2 \sum_{\mathbf{G}} |F(\mathbf{K})|^2 \{1 - (\hat{\mathbf{K}} \cdot \sigma)^2\} \delta(\mathbf{K} - \mathbf{G}). \quad (19.82)$$

Это выражение описывает магнитное брэгговское рассеяние для ферромагнетика на тех же точках обратной решетки, что и при ядерном рассеянии. Для антиферромагнетика определения векторов \mathbf{G} для магнитной и атомной примитивных ячеек различны, и поэтому плоскости брэгговских отражений для магнитного и для ядерного рассеяния неодинаковы.

Из выражения (19.82) можно усмотреть, что в силу наличия множителя $\langle S \rangle_T^2$ когерентное магнитное упругое рассеяния будет резко уменьшаться с температурой вблизи точки Кюри. Кроме того, магнитное рассеяние исчезает для случая, когда вектор \mathbf{K} параллелен вектору намагниченности. Магнитное рассеяние зависит от формфактора $F(\mathbf{K})$, тогда как соответствующий ядерный формфактор равен единице, если не учитывать эффектов, связанных с колебаниями решетки.

Теория неупругого рассеяния в ферромагнетиках очень похожа на теорию неупругого решеточного рассеяния. Эту теорию можно построить, исходя из результата (19.80) и вводя магنونные операторы. Результаты экспериментов по магнитному рассеянию можно использовать для установления законов дисперсии и определения времен релаксации магновов в некоторой области значений волновых векторов; в настоящее время нет каких-либо иных методов, позволяющих экспериментально решать подобные задачи.

ЗАДАЧИ

19.1. Пусть некоторое состояние описывается функцией, представляющей собой сумму двух функций, а именно e^{ikhz} (падающая волна) и $(\alpha/r)e^{ikr}$ (изотропная рассеянная волна), т. е.

$$\varphi = e^{ikhz} + \frac{\alpha}{r} e^{ikr}. \quad (19.83)$$

Усреднив эту функцию по сфере, показать, что часть функции φ , описывающая s -волну, имеет вид

$$\varphi_s = \frac{1}{kr} \sin kr + \frac{\alpha}{r} e^{ikr}. \quad (19.84)$$

В задачах, связанных с рассмотрением процессов рассеяния, функцию φ_s обычно записывают в иной форме, а именно

$$\varphi_s = e^{i\eta_0} \frac{\sin(kr + \eta_0)}{kr}; \quad (19.85)$$

здесь η_0 — фазовый сдвиг s -волны; показать, что

$$\alpha = \frac{1}{k} e^{i\eta_0} \sin \eta_0 = -e^{i\eta_0} b, \quad (19.86)$$

где b — амплитуда рассеяния.

19.2. Предположим, что рассеивающая мишень состоит из ядер одного и того же изотопа данного элемента; спины ядер равны I . Пусть b_+ — амплитуда рассеяния в состоянии $I + \frac{1}{2}$ (ядро плюс нейтрон), а b_- — амплитуда рассеяния в состоянии $I - \frac{1}{2}$. Показать, что

$$\langle b \rangle = \left\{ \frac{I+1}{2I+1} b_+ + \frac{I}{2I+1} b_- \right\}, \quad (19.87)$$

$$\langle |b|^2 \rangle = \left\{ \frac{I+1}{2I+1} |b_+|^2 + \frac{I}{2I+1} |b_-|^2 \right\}. \quad (19.88)$$

Рассеяние на образце природного железа почти полностью когерентно, поскольку в таком образце изотопы со спином $I=0$ составляют подавляющее большинство. Рассеяние от образца ванадия почти полностью некогерентно. Рассеяние на водороде (но не на дейтерии) также почти полностью некогерентно.

19.3. Результат (19.79) получен для изолированного парамагнитного иона. Показать, что такой же результат получится и для иона в парамагнитном кристалле, если между распределениями направлений спинов ионов нет корреляции, т. е. $\langle S_i^a S_j^b \rangle = \delta_{ij} \langle S_i^a S_i^b \rangle$, где индексы i и j относятся к любой паре ионов в различных узлах решетки.

19.4. Показать, что

$$P_{\perp}^{\alpha} P_{\perp}^{\beta} = (\delta_{\alpha\beta} - \hat{K}^{\alpha} \hat{K}^{\beta}) S^{\alpha} S^{\beta}. \quad (19.89)$$

Правая часть этого выражения имеет такой же вид, как и использовавшийся в работах Ван Хове и других авторов.

19.5. Пусть $n(\mathbf{x})$ — концентрация ядер с амплитудой рассеяния, равной b ; показать, что дифференциальное сечение упругого рассеяния имеет тогда вид

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon} = b^2 \delta(\varepsilon) \left| \int d^3x e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{x}} n(\mathbf{x}) \right|^2. \quad (19.90)$$

Для жидкости величина $n(\mathbf{x}) = \text{const}$ и, следовательно, в выражении для сечения появится $\delta(\mathbf{K})$, что соответствует отсутствию рассеяния. Следовательно, в жидкостях какого-либо упругого рассеяния, строго говоря, нет.

Литература

1. Kothari L. S., Singwi K. S., в сб. «Solid State Physics», vol. 8, N. Y., 1959, p. 109.
2. Shull C. G., Wollan E. O., в сб. «Solid State Physics», vol. 2, N. Y., 1956, p. 137.
3. Van Hove L., Phys. Rev. **95**, 249; 1347 (1954).
4. Woods A. D. B. a. o., Proc. Phys. Soc. **79**, 440 (1962).
5. Джеймс Р., Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей, ИЛ, 1950, гл. 5.
6. Weinstock R., Phys. Rev. **65**, 1 (1944).