Санкт-Петербургский государственный университет
Физический факультет
Кафедра ядерно-физических методов исследования

Сыромятников

Арсений Владиславович

Лекция 2. Основы теории ядерного рассеяния нейтронов.

- *Выражение для сечения ядерного рассеяния*
- *Когерентное и некогерентное рассеяние*

$$\psi_\alpha, E_\alpha \quad \to \quad \psi_\beta, E_\beta$$

$$\mathbf{k}_i, E_i = \frac{(\hbar k_i)^2}{2m} \quad \to \quad \mathbf{k}_f, E_f = \frac{(\hbar k_f)^2}{2m}$$

$$V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \ldots, \mathbf{R}_N, \mathbf{r}) = V(\mathbf{R}, \mathbf{r})$$

Число переходов в ед. времени

в интервал $(\nu_f, \nu_f + d\nu_f)$

$$\boxed{d\omega_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f \,|\, V \,|\, i \rangle \right|^2 \delta(E_i - E_f) d\nu_f}$$

$$\int d^3\mathbf{r} d\nu \left| \psi_\nu(\mathbf{r}) \right|^2 = 1$$

Золотое правило Ферми

$$d\nu_f = \frac{d\nu_f}{dE_f} dE_f = \rho\left(E_f\right) dE_f$$

$$d\tilde{\omega}_{fi} = \int d\omega_{fi} = \int \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle f \,|V|\, i\rangle\right|^2 \delta\left(E_i - E_f\right) \rho\left(E_f\right) dE_f$$

$$\boxed{d\tilde{\omega}_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left|\langle f \,|V|\, i\rangle\right|^2 \rho\left(E_f\right) \quad \text{при условии, что } E_i = E_f}$$

Число переходов в ед. времени в наших терминах

$$d\omega_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle \beta f \,|V|\, \alpha i \rangle\right|^2 \delta(E_\alpha + E_i - E_\beta - E_f)\, d\nu_f$$

$$\langle \beta f \,|V|\, \alpha i \rangle = \int \psi_\beta^*(\mathbf{R})\varphi_f^*(\mathbf{r})V(\mathbf{R},\mathbf{r})\psi_\alpha(\mathbf{R})\varphi_i(\mathbf{r})\,d\mathbf{R}\,d\mathbf{r}$$

$$d\mathbf{R} = d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \ldots d\mathbf{R}_N$$

$$\varphi_i(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} \qquad \varphi_f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_f\mathbf{r}}$$

$$d\nu_f = \frac{d^3\mathbf{k}_f}{(2\pi)^3} = \frac{k_f^2\, dk_f\, d\Omega_f}{(2\pi)^3} = k_f \frac{m}{\hbar^2 (2\pi)^3} dE_f\, d\Omega_f$$

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m} k_f^2$$

$$dE_f = \frac{\hbar^2}{m} k_f\, dk_f$$

$$\Phi = \mathrm{v}_i = \frac{\hbar k_i}{m}$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\alpha\to\beta} = \frac{1}{dE_f d\Omega_f}\frac{1}{\Phi}$$

$$\times\frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle\beta f\,|V|\,\alpha i\rangle\right|^2\delta\left(E_\alpha + E_i - E_\beta - E_f\right)$$

$$\times k_f \frac{m}{\hbar^2(2\pi)^3} dE_f d\Omega_f$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\alpha\to\beta} = \frac{k_f}{k_i}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left|\langle\beta f\,|V|\,\alpha i\rangle\right|^2\delta\left(E_\alpha + E_i - E_\beta - E_f\right)$$

$$V(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \sum_j V_j\left(\mathbf{r}-\mathbf{R_j}\right) \qquad \mathbf{x}_j = \mathbf{r}-\mathbf{R}_j$$

$$\left\langle \beta f \mid V \mid \alpha i \right\rangle = \sum_j \int \psi_\beta^*(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}} V_j\left(\mathbf{r}-\mathbf{R_j}\right)\psi_\alpha(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} d\mathbf{R}d\mathbf{r}$$

$$= \sum_j \int \psi_\beta^*(\mathbf{R}) V_j(\mathbf{x}_j) e^{i\left(\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_f\right)\left(\mathbf{x}_j+\mathbf{R}_j\right)}\psi_\alpha(\mathbf{R}) d\mathbf{R}d\mathbf{x}_j$$

$$= \sum_j V_j(\mathbf{Q})\left\langle \beta \middle| e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_j} \middle| \alpha \right\rangle$$

$$V_j(\mathbf{Q}) = \int V_j(\mathbf{x}_j) e^{i\mathbf{Q}\mathbf{x}_j} d\mathbf{x}_j$$

$$\boxed{\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f \quad \text{переданный импульс}}$$

$$\left\langle \beta \middle| e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_j} \middle| \alpha \right\rangle = \int \psi_\beta^*(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_j}\psi_\alpha(\mathbf{R}) d\mathbf{R}$$

Подберем подходящий потенциал V

$\mathbf{R}_1 = 0 \qquad \alpha = \beta$ упругое рассеяние

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|V(\mathbf{Q})\right|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|\int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{Qr}} d\mathbf{r}\right|^2$$

$$V(\mathbf{r}) = a\delta(\mathbf{r})$$

$$V(\mathbf{Q}) = \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{Qr}} d\mathbf{r} = a\int \delta(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{Qr}} d\mathbf{r} = a$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 a^2 = b^2 \qquad \Rightarrow \qquad a = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b$$

$$\boxed{V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\delta(\mathbf{r})}$$

Псевдопотенциал Ферми

Проверим условие применимости борновского приближения

$$\boxed{|V| \ll \frac{\hbar^2}{mu^2}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}u} e^{-x^2/u^2} \to \delta(x), \quad u \to 0$$

$$V(\mathbf{r}) \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m} b \frac{1}{\pi^{3/2}u^3} e^{-r^2/u^2}$$

$$|V| \sim \frac{\hbar^2}{m}\frac{|b|}{u^3} \ll \frac{\hbar^2}{mu^2} \quad \text{если} \quad |b| \ll u$$

Выражение для сечения ядерного рассеяния

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\alpha\to\beta} = \frac{k_f}{k_i}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left|\sum_j \frac{2\pi\hbar^2}{m} b_j \left\langle \beta \middle| e^{i\mathbf{QR}_j} \middle| \alpha \right\rangle\right|^2$$

$$\times\delta(E_\alpha + E_i - E_\beta - E_f)$$

$$\boxed{\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\alpha\to\beta} = \frac{k_f}{k_i}\left|\sum_j b_j \left\langle \beta \middle| e^{i\mathbf{QR}_j} \middle| \alpha \right\rangle\right|^2 \delta\left(E_\alpha + E_i - E_\beta - E_f\right)}$$

Для упругого рассеяния

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|\sum_j b_j e^{i\mathbf{QR}_j}\right|^2}$$

$$\delta(E_\alpha + E_i - E_\beta - E_f) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar} e^{-i\omega t} dt$$

$$\boxed{\hbar\omega = E_i - E_f}$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\alpha\to\beta}$$

$$= \frac{k_f}{k_i}\sum_{j,n} b_j^* b_n \left\langle \beta \middle| e^{i\mathbf{QR}_j} \middle| \alpha \right\rangle^* \left\langle \beta \middle| e^{i\mathbf{QR}_n} \middle| \alpha \right\rangle \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar} e^{-i\omega t} dt$$

$$= \frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{j,n} b_j b_n \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \alpha \middle| e^{-i\mathbf{QR}_j} \middle| \beta \right\rangle \left\langle \beta \middle| e^{i\mathbf{QR}_n} \middle| \alpha \right\rangle e^{i(E_\beta - E_\alpha)t/\hbar} e^{-i\omega t} dt$$

$$= \frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{j,n} b_j b_n \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle \alpha \middle| e^{-i\mathbf{QR}_j} \middle| \beta \right\rangle \left\langle \beta \middle| e^{iHt/\hbar} e^{i\mathbf{QR}_n} e^{-iHt/\hbar} \middle| \alpha \right\rangle e^{-i\omega t} dt$$

Суммирование по α и β

$$\sum_{\beta}\langle\alpha\,|\,A\,|\,\beta\rangle\langle\beta\,|\,B\,|\,\alpha\rangle=\langle\alpha\,|\,AB\,|\,\alpha\rangle$$

$$P_{\alpha}=\frac{1}{Z}e^{-E_{\alpha}/(k_bT)}$$

$$Z=\sum_{\alpha}e^{-E_{\alpha}/(k_bT)}$$

$$\frac{d^2\sigma}{dE_f\,d\Omega_f}=\sum\nolimits_{\alpha,\beta}P_{\alpha}\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f\,d\Omega_f}\right)_{\alpha\to\beta}$$

$$=\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum\nolimits_{j,n}b_jb_n\int_{-\infty}^{\infty}\sum\nolimits_{\alpha}P_{\alpha}\left\langle\alpha\left|e^{-i\mathbf{QR}_j}e^{iHt/\hbar}e^{i\mathbf{QR}_n}e^{-iHt/\hbar}\right|\alpha\right\rangle e^{-i\omega t}dt$$

Общее выражение для сечения ядерного рассеяния

$$\mathbf{R}_n(t) = e^{iHt/\hbar}\mathbf{R}_n e^{-iHt/\hbar}$$

$$e^{i\mathbf{QR}_n(t)} = e^{iHt/\hbar} e^{i\mathbf{QR}_n} e^{-iHt/\hbar}$$

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \langle \alpha | A | \alpha \rangle$$

$$\boxed{\frac{d^2\sigma}{dE_f\, d\Omega_f} = \frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{j,n} b_j b_n \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle e^{-i\mathbf{QR}_j(0)} e^{i\mathbf{QR}_n(t)} \right\rangle e^{-i\omega t}\, dt}$$

Когерентное и некогерентное рассеяние

$$\frac{d^2\sigma}{dE_f\, d\Omega_f} = \frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{j,n}\overline{b_j b_n}\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle e^{-i\mathbf{QR}_j(0)} e^{i\mathbf{QR}_n(t)}\right\rangle e^{-i\omega t}dt$$

$$\overline{b} = \sum_i f_i b_i$$

$$\overline{b^2} = \sum_i f_i b_i^2$$

$$\sum_i f_i = 1$$

$$\overline{b_j b_n} = \overline{b}^2, \quad \text{если } j \neq n$$

$$\overline{b_j b_n} = \overline{b^2}, \quad \text{если } j = n$$

Когерентное и некогерентное рассеяние

$$\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} = \frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\left(\bar{b}^2 \sum_{j,n,j\neq n} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle e^{-i\mathbf{QR}_j(0)} e^{i\mathbf{QR}_n(t)} \right\rangle e^{-i\omega t} dt\right.$$

$$\left. + \overline{b^2} \sum_{j} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle e^{-i\mathbf{QR}_j(0)} e^{i\mathbf{QR}_j(t)} \right\rangle e^{-i\omega t} dt\right)$$

$$= \frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\left(\bar{b}^2 \sum_{j,n} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle e^{-i\mathbf{QR}_j(0)} e^{i\mathbf{QR}_n(t)} \right\rangle e^{-i\omega t} dt\right.$$

$$\left. + \left(\overline{b^2} - \bar{b}^2\right) \sum_{j} \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle e^{-i\mathbf{QR}_j(0)} e^{i\mathbf{QR}_j(t)} \right\rangle e^{-i\omega t} dt\right)$$

$$\sigma_{\text{coh}} = 4\pi \bar{b}^2 \qquad \sigma_{\text{inc}} = 4\pi\left(\overline{b^2} - \bar{b}^2\right)$$

Сечения когерентного и некогерентного рассеяния

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\mathrm{coh}} = \frac{\sigma_{\mathrm{coh}}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{j,n}\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle e^{-i\mathbf{QR}_j(0)}e^{i\mathbf{QR}_n(t)}\right\rangle e^{-i\omega t}dt$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\mathrm{inc}} = \frac{\sigma_{\mathrm{inc}}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{j}\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle e^{-i\mathbf{QR}_j(0)}e^{i\mathbf{QR}_j(t)}\right\rangle e^{-i\omega t}dt$$

$$\sigma_{\mathrm{coh}} = 4\pi\bar{b}^2 \qquad \sigma_{\mathrm{inc}} = 4\pi\left(\overline{b^2} - \bar{b}^2\right)$$

Вычисление сечений σ_{coh} и σ_{inc}

$$I+\frac{1}{2}\rightarrow 2\left(I+\frac{1}{2}\right)+1=2I+2 \qquad f^{+}=\frac{2I+2}{4I+2}=\frac{I+1}{2I+1}$$

$$I-\frac{1}{2}\rightarrow 2\left(I-\frac{1}{2}\right)+1=2I \qquad f^{-}=\frac{2I}{4I+2}=\frac{I}{2I+1}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\overline{b}&=f^{+}b^{+}+f^{-}b^{-}=\frac{(I+1)b^{+}+Ib^{-}}{2I+1}\\ \overline{b^{2}}&=f^{+}(b^{+})^{2}+f^{-}(b^{-})^{2}=\frac{(I+1)(b^{+})^{2}+I(b^{-})^{2}}{2I+1}\end{aligned}}$$

Усреднение с учетом наличия разных изотопов

$$\overline{b}=\sum_{a}c_{a}\frac{\left(I_{a}+1\right)b_{a}^{+}+I_{a}b_{a}^{-}}{2I_{a}+1} \qquad \overline{b^{2}}=\sum_{a}c_{a}\frac{\left(I_{a}+1\right)\left(b_{a}^{+}\right)^{2}+I_{a}\left(b_{a}^{-}\right)^{2}}{2I_{a}+1}$$

Nuclide	Combined spin	b/fm	Nuclide	Combined spin	b/fm
^{1}H	1	10.85	^{23}Na	2	6.3
	0	−47.50		1	−0.9
^{2}H	$\frac{3}{2}$	9.53	^{59}Co	4	−2.78
	$\frac{1}{2}$	0.98		3	9.91

Element or nuclide	Z	σ_{coh}	σ_{inc}	Element	Z	σ_{coh}	σ_{inc}
^{1}H	1	1.8	80.2	V	23	0.02	5.0
^{2}H	1	5.6	2.0	Fe	26	11.5	0.4
C	6	5.6	0.0	Co	27	1.0	5.2
O	8	4.2	0.0	Ni	28	13.4	5.0
Mg	12	3.6	0.1	Cu	29	7.5	0.5
Al	13	1.5	0.0	Zn	30	4.1	0.1

The units of σ_{coh} and σ_{inc} are 10^{-28} m^2.