



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

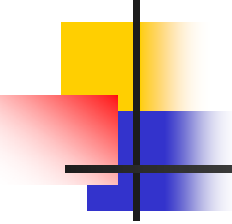


Сыромятников

Арсений Владиславович

Лекция 2. Основы теории ядерного рассеяния нейтронов.

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


$$\begin{aligned} \psi_\alpha, E_\alpha &\rightarrow \psi_\beta, E_\beta \\ \mathbf{k}_i, E_i = \frac{(\hbar k_i)^2}{2m} &\rightarrow \mathbf{k}_f, E_f = \frac{(\hbar k_f)^2}{2m} \end{aligned}$$

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

Число переходов в ед. времени
в интервал $(\nu_f, \nu_f + d\nu_f)$

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

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



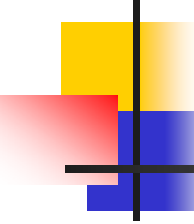
Золотое правило Ферми

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

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

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

Число переходов в ед. времени в наших терминах


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

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

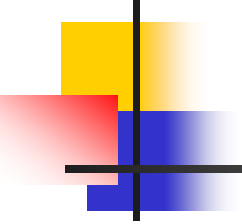
$$d\mathbf{R} = d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \dots d\mathbf{R}_N$$

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

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

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

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



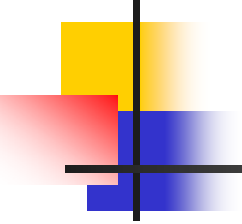
$$\Phi = v_i = \frac{\hbar k_i}{m}$$

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

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

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

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


$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \sum_j V_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad \mathbf{x}_j = \mathbf{r} - \mathbf{R}_j$$

$$\begin{aligned} \langle \beta f | V | \alpha i \rangle &= \sum_j \int \psi_\beta^*(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k}_f \mathbf{r}} V_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \psi_\alpha(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{r}} d\mathbf{R} d\mathbf{r} \\ &= \sum_j \int \psi_\beta^*(\mathbf{R}) V_j(\mathbf{x}_j) e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)(\mathbf{x}_j + \mathbf{R}_j)} \psi_\alpha(\mathbf{R}) d\mathbf{R} d\mathbf{x}_j \\ &= \sum_j V_j(\mathbf{Q}) \langle \beta | e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_j} | \alpha \rangle \end{aligned}$$

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

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

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

Подберем подходящий потенциал V

$$\mathbf{R}_1 = 0$$

$$\alpha = \beta$$

упругое рассеяние

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

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

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

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

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

Псевдопотенциал
Ферми

Проверим условие применимости борновского приближения

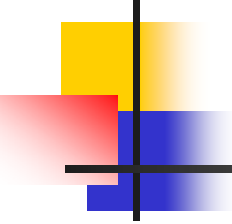
$$|V| \ll \frac{\hbar^2}{mu^2}$$

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

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

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

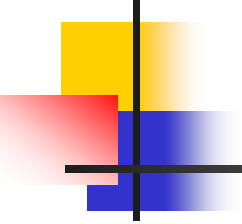
Выражение для сечения ядерного рассеяния


$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} \right)_{\alpha \rightarrow \beta} = \frac{k_f}{k_i} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \sum_j \frac{2\pi\hbar^2}{m} b_j \langle \beta | e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_j} | \alpha \rangle \right|^2 \times \delta(E_\alpha + E_i - E_\beta - E_f)$$

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

Для упругого
рассеяния

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



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

$$\hbar\omega = E_i - E_f$$

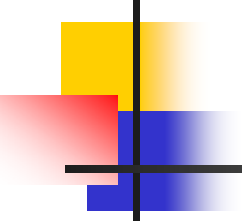
$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} \right)_{\alpha \rightarrow \beta}$$

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

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

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

Суммирование по α и β



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

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

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

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

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

Общее выражение для сечения ядерного рассеяния

$$\mathbf{R}_n(t) = e^{iHt/\hbar} \mathbf{R}_n e^{-iHt/\hbar}$$
$$e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_n(t)} = e^{iHt/\hbar} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_n} e^{-iHt/\hbar}$$
$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \langle \alpha | A | \alpha \rangle$$

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

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

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

$$\sigma_{\text{coh}} = 4\pi \bar{b}^{-2}$$

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

Сечения когерентного и некогерентного рассеяния

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

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

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

Вычисление сечений σ_{coh} и σ_{inc}

$$I + \frac{1}{2} \rightarrow 2 \left(I + \frac{1}{2} \right) + 1 = 2I + 2$$

$$f^+ = \frac{2I + 2}{4I + 2} = \frac{I + 1}{2I + 1}$$

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

$$f^- = \frac{2I}{4I + 2} = \frac{I}{2I + 1}$$

$$\bar{b} = f^+ b^+ + f^- b^- = \frac{(I + 1)b^+ + I b^-}{2I + 1}$$

$$\overline{b^2} = f^+ (b^+)^2 + f^- (b^-)^2 = \frac{(I + 1)(b^+)^2 + I (b^-)^2}{2I + 1}$$

Усреднение с учетом наличия разных изотопов

$$\bar{b} = \sum_a c_a \frac{(I_a + 1)b_a^+ + I_a b_a^-}{2I_a + 1}$$

$$\overline{b^2} = \sum_a c_a \frac{(I_a + 1)(b_a^+)^2 + I_a (b_a^-)^2}{2I_a + 1}$$

Nuclide	Combined spin	b/fm	Nuclide	Combined spin	b/fm
^1H	1	10.85	^{23}Na	2	6.3
	0	-47.50		1	-0.9
^2H	$\frac{3}{2}$	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}
^1H	1	1.8	80.2	V	23	0.02	5.0
^2H	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 .