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

Сыромятников
Арсений Владиславович

Лекция 5. Основы теории ядерного рассеяния нейтронов.

- Измерение дисперсии фононов
- Многофононное рассеяние
- Некогерентное рассеяние на фононах

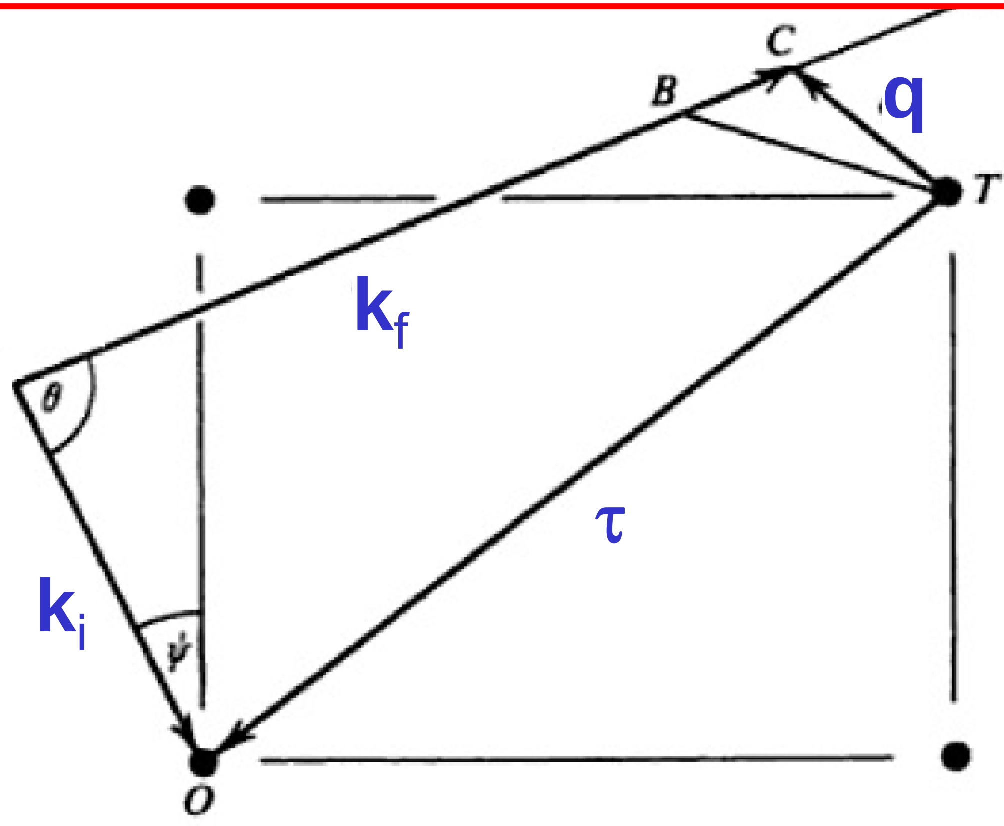
Измерение дисперсии фононов

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f\,d\Omega_f}\right)_{\text{coh 1ph}} = \frac{\sigma_{\text{coh}}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2M}\frac{(2\pi)^3}{\mathrm{v}_0}e^{-2W}\sum_{s=1}^{3}\sum_{\mathbf{q}}\sum_{\boldsymbol{\tau}}\frac{\left|\mathbf{Q}\mathbf{e}_s(\mathbf{q})\right|^2}{\omega_s(\mathbf{q})}$$

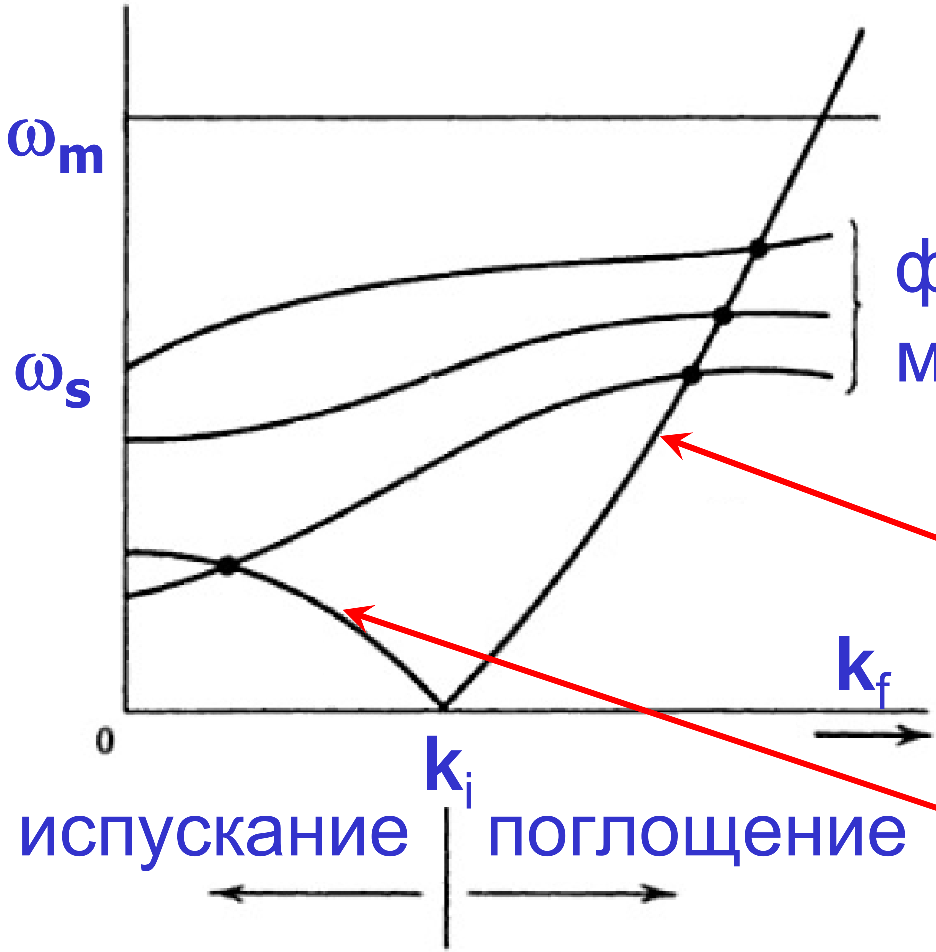
$$\times\Big(\delta(\omega_s(\mathbf{q})-\omega)\delta(\mathbf{Q}-\mathbf{q}-\boldsymbol{\tau})\left\langle n_{\mathbf{q},s}+1\right\rangle+\delta(\omega_s(\mathbf{q})+\omega)\delta(\mathbf{Q}+\mathbf{q}-\boldsymbol{\tau})\left\langle n_{\mathbf{q},s}\right\rangle\Big)$$

$$E_i - E_f = \pm\hbar\omega_s(\mathbf{q})$$

$$\begin{cases} \dfrac{(\hbar k_i)^2}{2m} - \dfrac{(\hbar k_f)^2}{2m} = \pm\hbar\omega_s(\mathbf{q}) \\ \mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f = \pm\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau} \end{cases}$$



Измерение дисперсии фононов



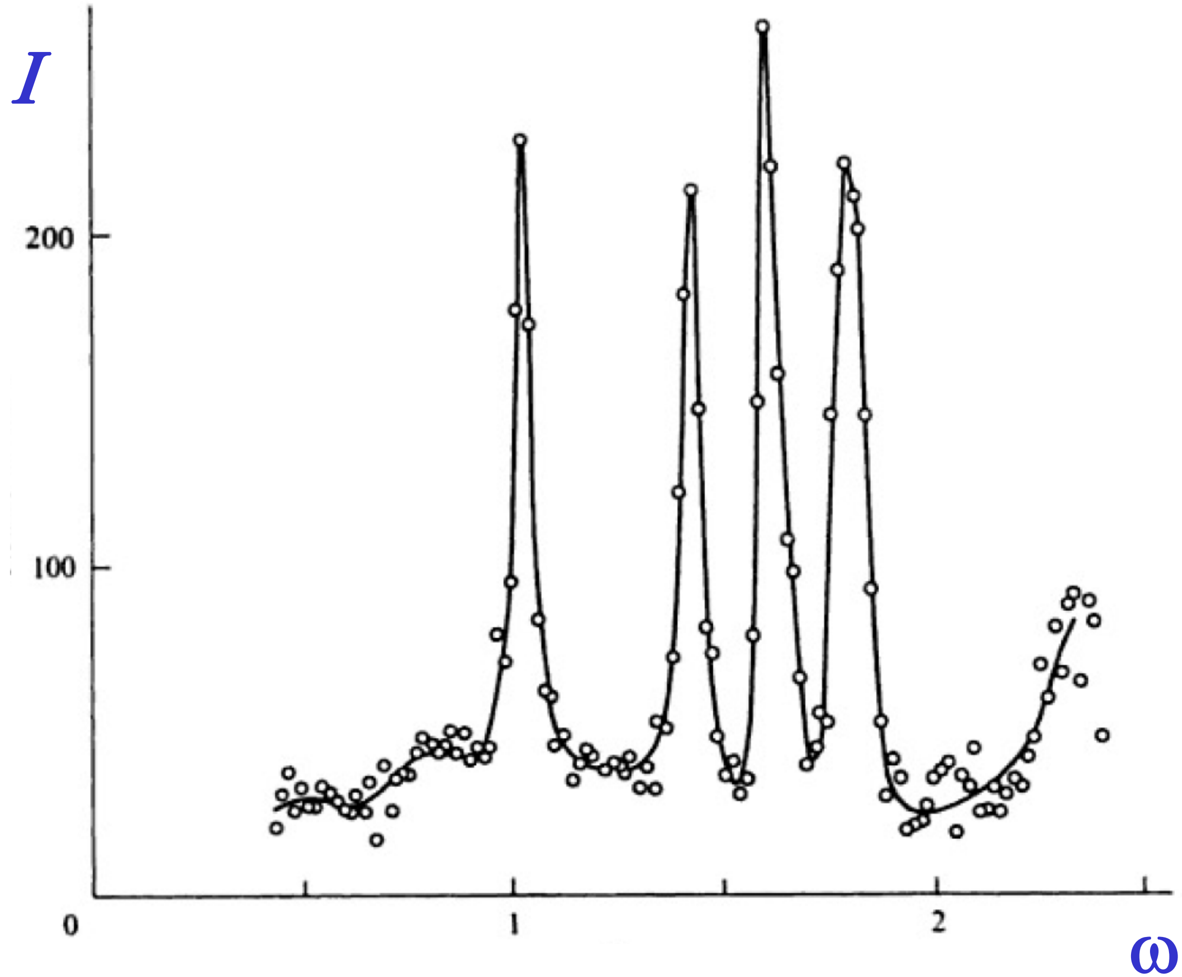
фононные моды

$$-\left(\frac{\left(\hbar k_i\right)^2}{2m}-\frac{\left(\hbar k_f\right)^2}{2m}\right) = \hbar\omega_s(\mathbf{q})$$

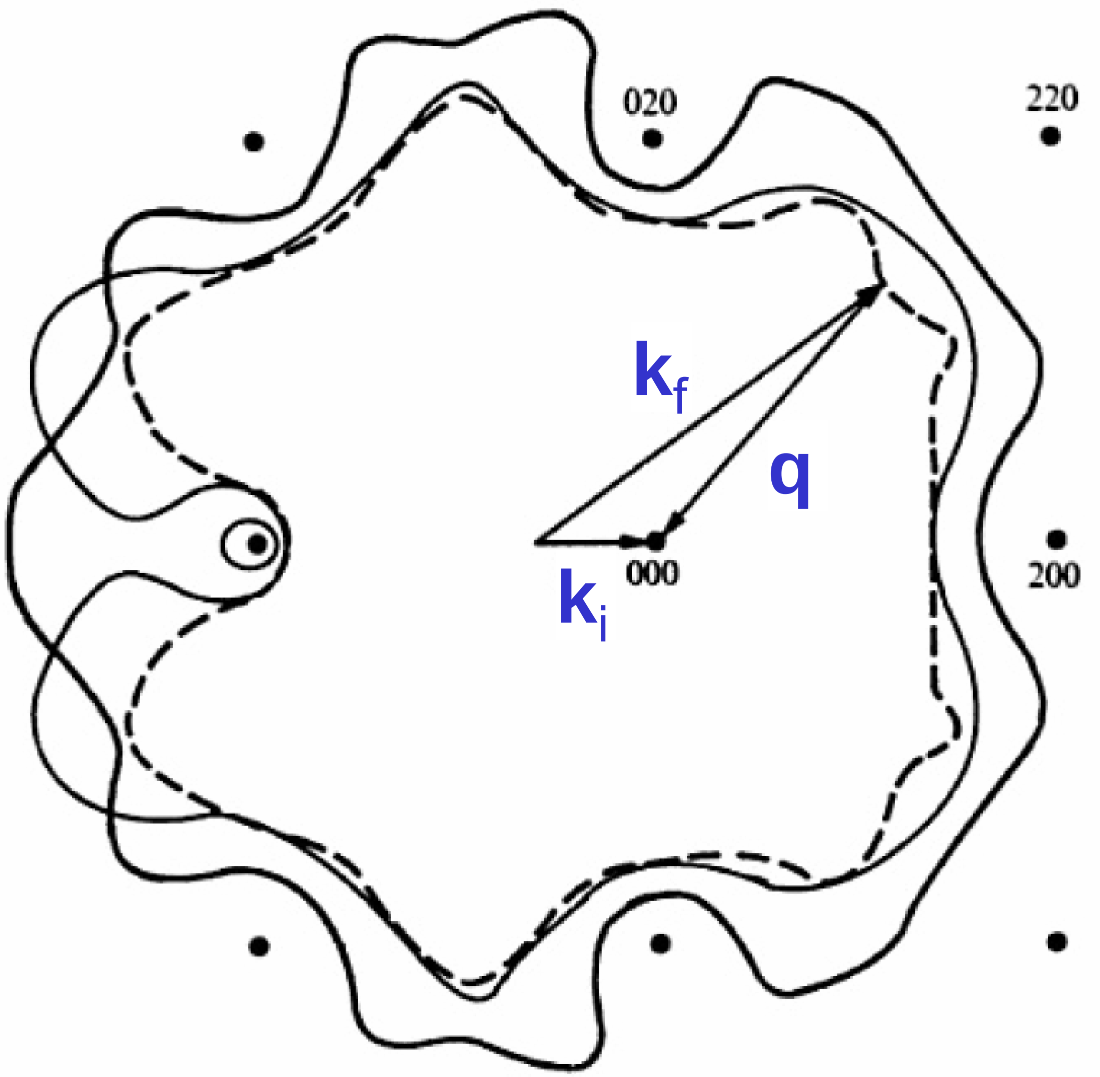
$$\frac{\left(\hbar k_i\right)^2}{2m}-\frac{\left(\hbar k_f\right)^2}{2m} = \hbar\omega_s(\mathbf{q})$$

Измерение дисперсии фононов

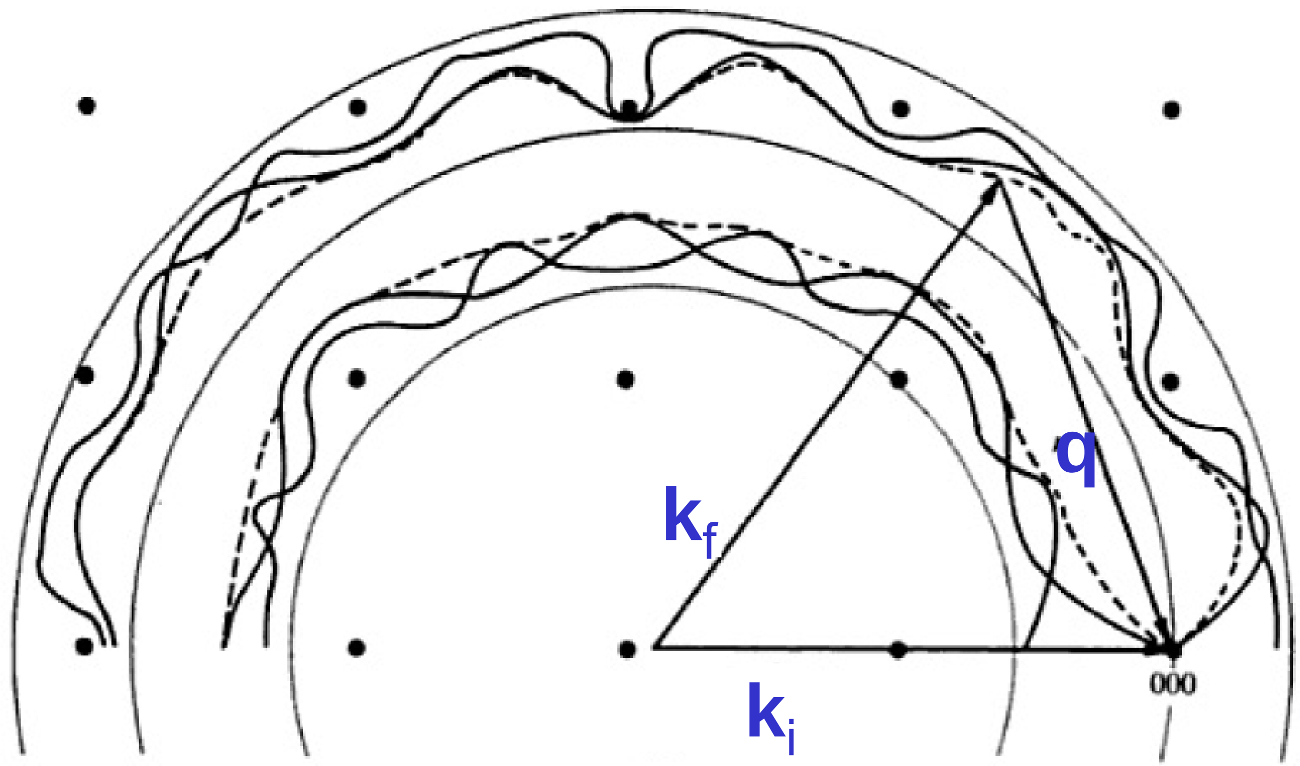
Конечная ширина линий. Главные причины– аппаратное уширение, мозаичность, ангармонизм.



Измерение дисперсии фононов

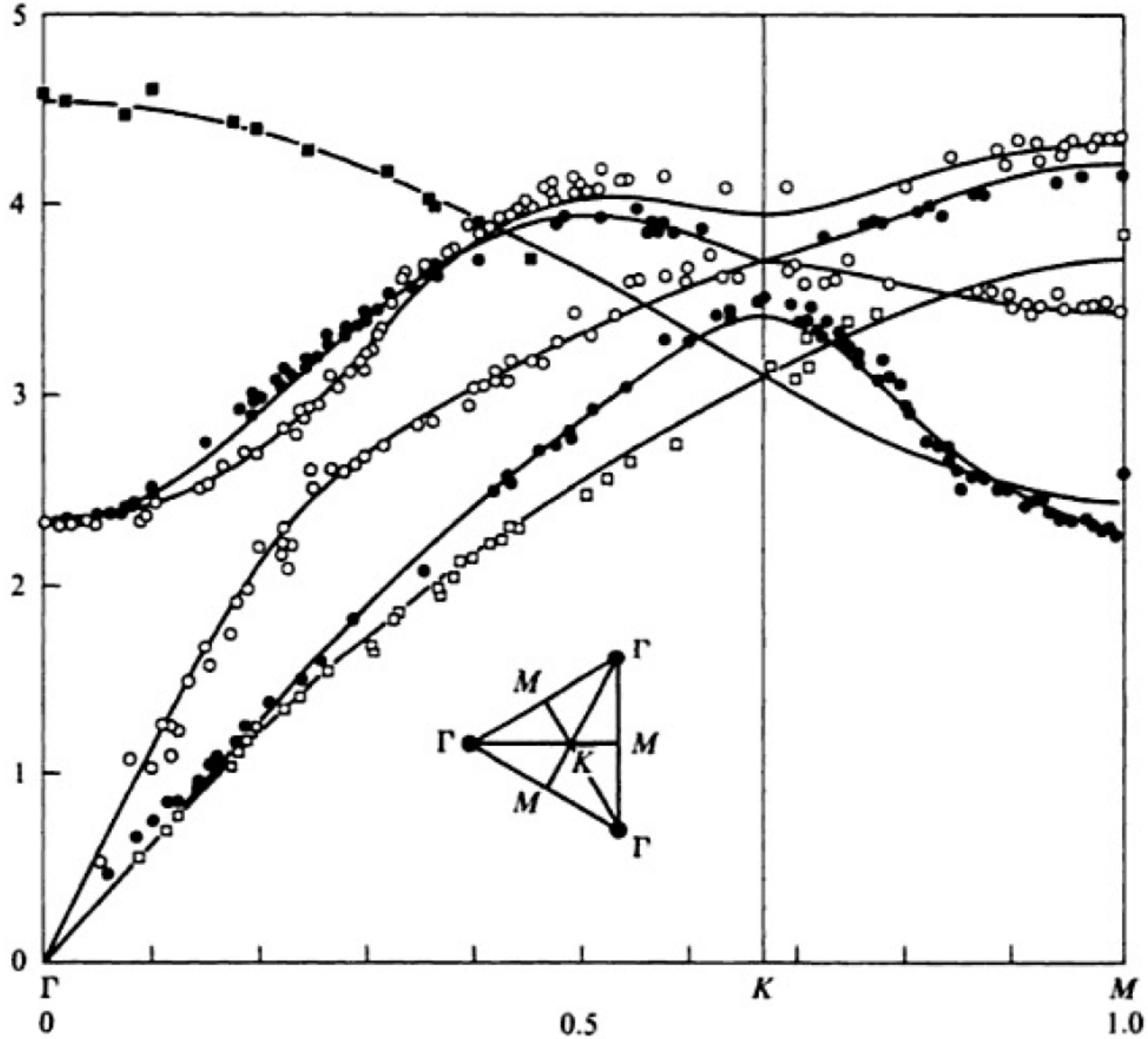


Измерение дисперсии фононов



Измерение дисперсии фононов

ω



q

Когерентное многофононное рассеяние

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f\, d\Omega_f}\right)_{\mathrm{coh}} = \frac{\sigma_{\mathrm{coh}}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{N}{2\pi\hbar} e^{\langle U^2\rangle} \sum_j e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_j^{(0)}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\langle UV\rangle} e^{-i\omega t}\, dt$$

$$e^{\langle UV\rangle} = 1 + \langle UV\rangle + \frac{1}{2}\langle UV\rangle^2 + \ldots + \frac{1}{n!}\langle UV\rangle^n + \ldots$$

$$\boxed{E_i - E_f = \pm\hbar\omega_{s_1}(\mathbf{q}_1) \pm \hbar\omega_{s_2}(\mathbf{q}_2) \qquad \mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f = \pm\mathbf{q}_1 \pm \mathbf{q}_2 - \boldsymbol{\tau}}$$

Некогерентное рассеяние

$$\mathbf{R}_j(t) = \mathbf{R}_j^{(0)} + \mathbf{u}_j(t)$$

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

$$= \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar} N \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle e^{-i\mathbf{Qu}_0(0)} e^{i\mathbf{Qu}_0(t)} \right\rangle e^{-i\omega t} dt$$

$$= \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2\pi\hbar} N \int_{-\infty}^{\infty} \left\langle e^{U} e^{V_0} \right\rangle e^{-i\omega t} dt$$

$$U = -i\mathbf{Qu}_0(0) \qquad V_0 = i\mathbf{Qu}_0(t)$$

Некогерентное упругое рассеяние

$$\left\langle e^{U} e^{V_0} \right\rangle = \left\langle e^{U+V_0} \right\rangle e^{\frac{1}{2}(UV_0 - V_0U)} = e^{\frac{1}{2}\left\langle (U+V_0)^2 \right\rangle} e^{\frac{1}{2}(UV_0 - V_0U)}$$

$$= e^{\frac{1}{2}\left\langle U^2 + V_0^2 \right\rangle} e^{\left\langle UV_0 \right\rangle} = e^{\left\langle U^2 \right\rangle} e^{\left\langle UV_0 \right\rangle}$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} \right)_{\text{inc}} = \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4\pi} \frac{k_f}{k_i} \frac{N}{2\pi\hbar} e^{\left\langle U^2 \right\rangle} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\left\langle UV_0 \right\rangle} e^{-i\omega t} dt$$

$$e^{\left\langle UV_0 \right\rangle} = 1 + \left\langle UV_0 \right\rangle + \frac{1}{2} \left\langle UV_0 \right\rangle^2 + \ldots + \frac{1}{n!} \left\langle UV_0 \right\rangle^n + \ldots$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f} \right)_{\text{inc el}} = \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4\pi} N e^{\left\langle U^2 \right\rangle} = \frac{\sigma_{\text{inc}}}{4\pi} N e^{-2W}$$

Некогерентное неупругое рассеяние

$$\langle UV_0 \rangle = \frac{\hbar}{2MN} \sum_{s=1}^{3} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\left| \mathbf{Q}\mathbf{e}_s(\mathbf{q}) \right|^2}{\omega_s(\mathbf{q})} \left(e^{i\omega_s(\mathbf{q})t} \langle n_{\mathbf{q},s} + 1 \rangle + e^{-i\omega_s(\mathbf{q})t} \langle n_{\mathbf{q},s} \rangle \right)$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f\, d\Omega_f} \right)_{\text{inc 1ph}} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi} \frac{k_f}{k_i} \frac{1}{2M} e^{-2W}$$

$$\times \sum_{s=1}^{3} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\left| \mathbf{Q}\mathbf{e}_s(\mathbf{q}) \right|^2}{\omega_s(\mathbf{q})} \left(\delta(\omega_s(\mathbf{q}) - \omega) \langle n_{\mathbf{q},s} + 1 \rangle + \delta(\omega_s(\mathbf{q}) + \omega) \langle n_{\mathbf{q},s} \rangle \right)$$

$$E_i - E_f = \pm \hbar \omega_s(\mathbf{q})$$

Плотность фононных состояний в кубических кристаллах

$$\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{q}} f\left(\omega(\mathbf{q})\right) \quad \rightarrow \quad \int_0^\infty Z(\Omega) f\left(\Omega\right) d\Omega$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f\, d\Omega_f}\right)_{\text{inc }+1} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2M}e^{-2W}\sum_{s=1}^{3}\sum_{\mathbf{q}}\frac{\left|\mathbf{Q}\mathbf{e}_s(\mathbf{q})\right|^2}{\omega_s(\mathbf{q})}\delta(\omega_s(\mathbf{q})-\omega)\left\langle n_{\mathbf{q},s}+1\right\rangle$$

$$= \frac{\sigma_{inc}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2M}e^{-2W}\sum_{\mathbf{q}}\frac{Q_x^2+Q_y^2+Q_z^2}{\omega(\mathbf{q})}\delta(\omega(\mathbf{q})-\omega)\left\langle n_{\mathbf{q}}+1\right\rangle$$

$$= \frac{\sigma_{inc}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{2M}e^{-2W}Q^2\int_0^\infty Z(\Omega)\frac{1}{\Omega}\delta(\Omega-\omega)\frac{1}{2}\left(\coth\left(\frac{\hbar\Omega}{2k_BT}\right)+1\right)d\Omega$$

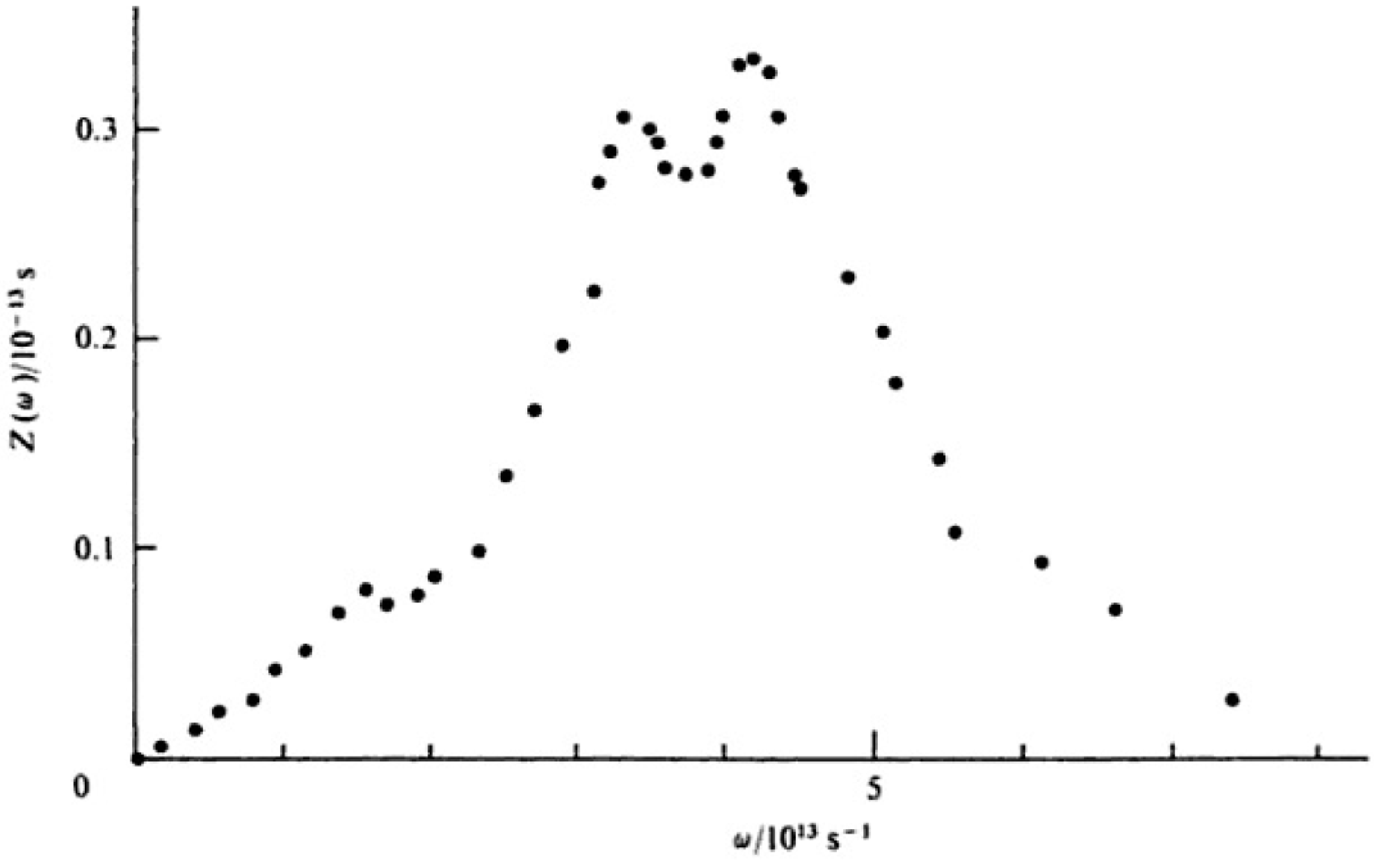
$$\left\langle n_{\mathbf{q}}\right\rangle = \frac{1}{2}\left(\coth\left(\frac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{2k_BT}\right)-1\right)$$

Плотность фононных состояний в кубических кристаллах

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\text{inc }+1} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{4M}e^{-2W}Q^2\frac{Z(\omega)}{\omega}\left(\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)+1\right)$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f}\right)_{\text{inc -1}} = \frac{\sigma_{inc}}{4\pi}\frac{k_f}{k_i}\frac{1}{4M}e^{-2W}Q^2\frac{Z(\omega)}{\omega}\left(\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)-1\right)$$

Плотность фононных состояний в кубических кристаллах



Некогерентное рассеяние. Случай нескольких атомов в элементарной ячейке.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f}\right)_{\text{inc el}} = N\sum_d \left(\overline{b_d^2} - \bar{b}_d^{\,2}\right) e^{-2W_d}$$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f\, d\Omega_f}\right)_{\text{inc }+1} = \frac{k_f}{k_i}\sum_d \frac{1}{2M_d}\left(\overline{b_d^2} - \bar{b}_d^{\,2}\right) e^{-2W_d}$$

$$\times \sum_{s=1}^{3\nu}\sum_{\mathbf{q}} \frac{\left|\mathbf{Q}\mathbf{e}_{s,d}(\mathbf{q})\right|^2}{\omega_s(\mathbf{q})}\,\delta(\omega_s(\mathbf{q})-\omega)\left\langle n_{\mathbf{q},s}+1\right\rangle$$