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

Сыромятников
Арсений Владиславович

Лекция 7. Основы теории ядерного рассеяния нейтронов.

- *Рассеяние нейтронов в жидкостях*

Отсутствие упругого рассеяния в жидкостях

$$I(\mathbf{Q},\infty)=\int G(\mathbf{r},\infty)e^{i\mathbf{Qr}}d\mathbf{r}$$

$$G(\mathbf{r},\infty)=\frac{1}{N}\int\left\langle\rho(\mathbf{r}',0)\rho(\mathbf{r}'+\mathbf{r},\infty)\right\rangle d\mathbf{r}'=\frac{1}{N}\int\left\langle\rho(\mathbf{r}')\right\rangle\left\langle\rho(\mathbf{r}'+\mathbf{r})\right\rangle d\mathbf{r}'$$

$$\left\langle\rho(\mathbf{r})\right\rangle=\rho=\frac{N}{V}$$

$$G(\mathbf{r},\infty)=\frac{1}{N}\rho^2V=\rho \qquad G_s(\mathbf{r},\infty)=\frac{\rho}{N}$$

$$\boxed{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega_f}\right)_{\mathrm{coh,el}}=\frac{\sigma_{\mathrm{coh}}}{4\pi}NI(\mathbf{Q},\infty)\propto\delta(\mathbf{Q})}$$

Отсутствие упругого рассеяния в жидкостях

$$S(\mathbf{Q},\omega)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int G(\mathbf{r},t)e^{-i\omega t}e^{i\mathbf{Qr}}dtd\mathbf{r}$$

$$G(\mathbf{r},t)=G(\mathbf{r},\infty)+G'(\mathbf{r},t)=\rho+G'(\mathbf{r},t)$$

$$S(\mathbf{Q},\omega)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int \rho e^{-i\omega t}e^{i\mathbf{Qr}}dtd\mathbf{r}+\frac{1}{2\pi\hbar}\int G'(\mathbf{r},t)e^{-i\omega t}e^{i\mathbf{Qr}}dtd\mathbf{r}$$

$$=\frac{(2\pi)^3}{\hbar}\rho\delta(\omega)\delta(\mathbf{Q})+\frac{1}{2\pi\hbar}\int G'(\mathbf{r},t)e^{-i\omega t}e^{i\mathbf{Qr}}dtd\mathbf{r}$$

$$S(\mathbf{Q},\omega)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\left(G(\mathbf{r},t)-\rho\right)e^{-i\omega t}e^{i\mathbf{Qr}}dtd\mathbf{r}$$

Когерентное рассеяние в жидкостях

$$G(\mathbf{r},0)=\delta(\mathbf{r})+\sum_{j\neq 0}\left\langle \delta(\mathbf{r}-\mathbf{R}_0+\mathbf{R}_j)\right\rangle=\delta(\mathbf{r})+g(\mathbf{r})$$

$$S(\mathbf{Q})=\int_{-\infty}^{\infty} S(\mathbf{Q},\omega)d(\hbar\omega)$$ Структурный фактор

$$=\int_{-\infty}^{\infty} d(\hbar\omega)\frac{1}{2\pi\hbar}\int\left(G(\mathbf{r},t)-\rho\right)e^{-i\omega t}e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}}dtd\mathbf{r}$$

$$=\int\int\left(G(\mathbf{r},t)-\rho\right)e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}}\delta(t)dtd\mathbf{r}=I(\mathbf{Q},0)=\int\left(G(\mathbf{r},0)-\rho\right)e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}}d\mathbf{r}$$

$$=\int\left(\delta(\mathbf{r})+g(\mathbf{r})-\rho\right)e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}}d\mathbf{r}=1+\int\left(g(\mathbf{r})-\rho\right)e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}}d\mathbf{r}$$

Когерентное рассеяние в жидкостях

$$g(\mathbf{r}) = g(r)$$

$$S(\mathbf{Q}) = S(Q) = 1 + \int \left(g(r) - \rho\right) e^{i\mathbf{Qr}} d\mathbf{r}$$

$$= 1 + \int dr \left(g(r) - \rho\right) r^2 \int_{-1}^{1} d\cos\theta e^{iQr\cos\theta} \int_{0}^{2\pi} d\varphi$$

$$= 1 + \int dr \left(g(r) - \rho\right) r^2 \frac{e^{iQr} - e^{-iQr}}{iQr} 2\pi$$

$$= 1 + \frac{4\pi}{Q} \int_{0}^{\infty} dr \left(g(r) - \rho\right) \sin\left(Qr\right) r$$

Когерентное рассеяние в жидкостях. Флуктуации плотности.

$$S(\infty)=1$$

$$S(0)=1+\int\left(g(r)-\rho\right)d\mathbf{r}$$

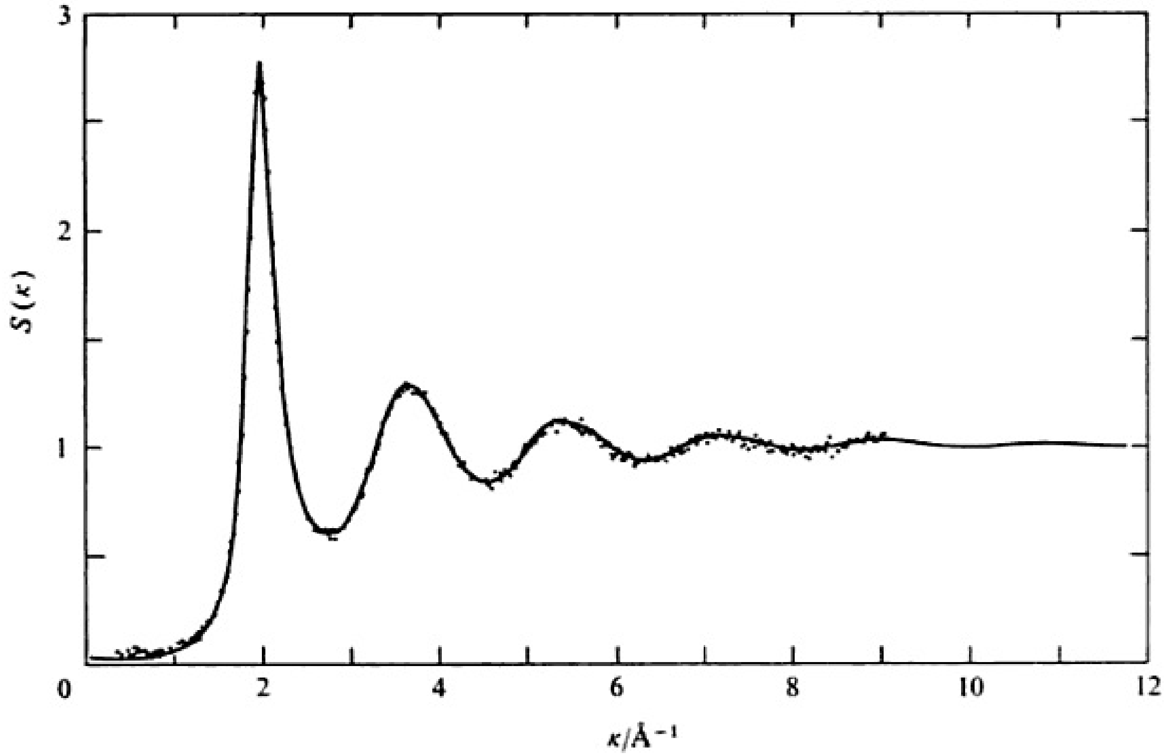
$$\tilde{V} \qquad \bar{n}=\rho\tilde{V}$$

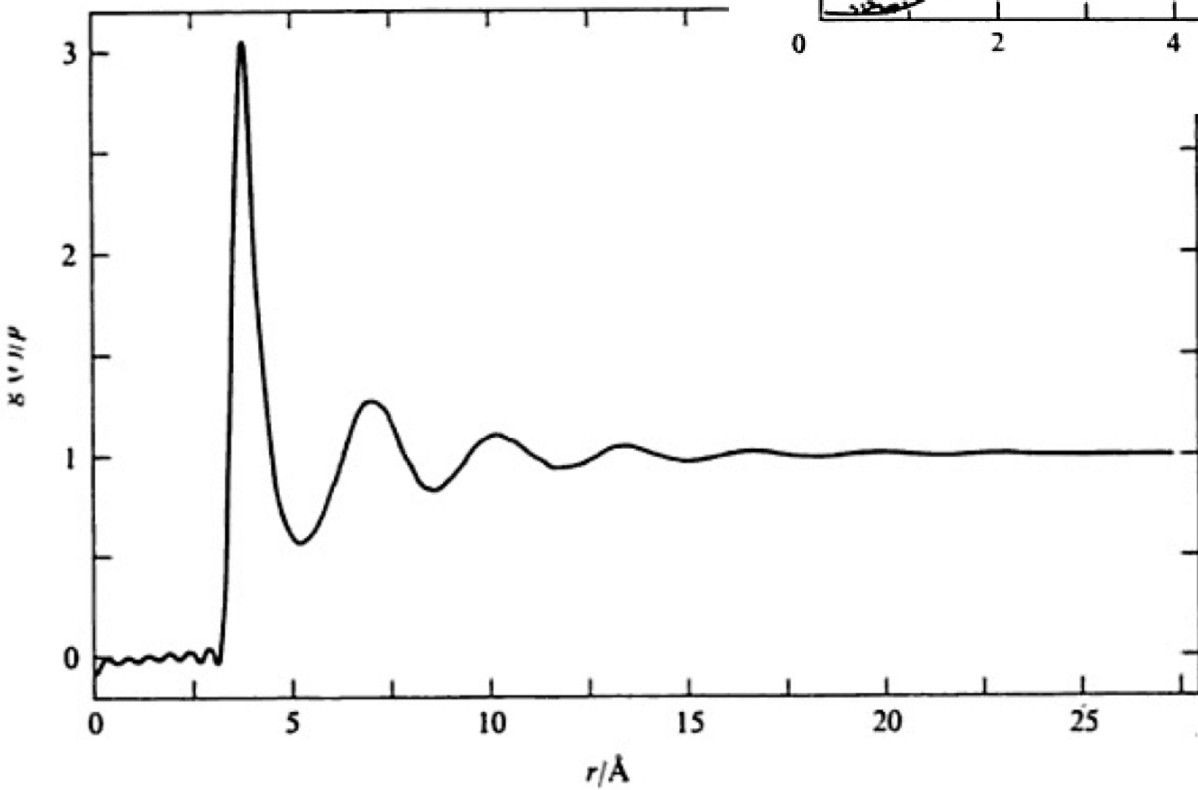
$$\overline{n^2}=\rho\int_{\tilde{V}}d\mathbf{r}_1\int_{\tilde{V}}d\mathbf{r}_2 G(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1,0)$$

$$=\rho\int_{\tilde{V}}d\mathbf{r}_1\int_{\tilde{V}}d\mathbf{r}_2\left(\delta(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)+g(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)\right)=\bar{n}+\bar{n}\int_{\tilde{V}}d\mathbf{r}g(\mathbf{r})$$

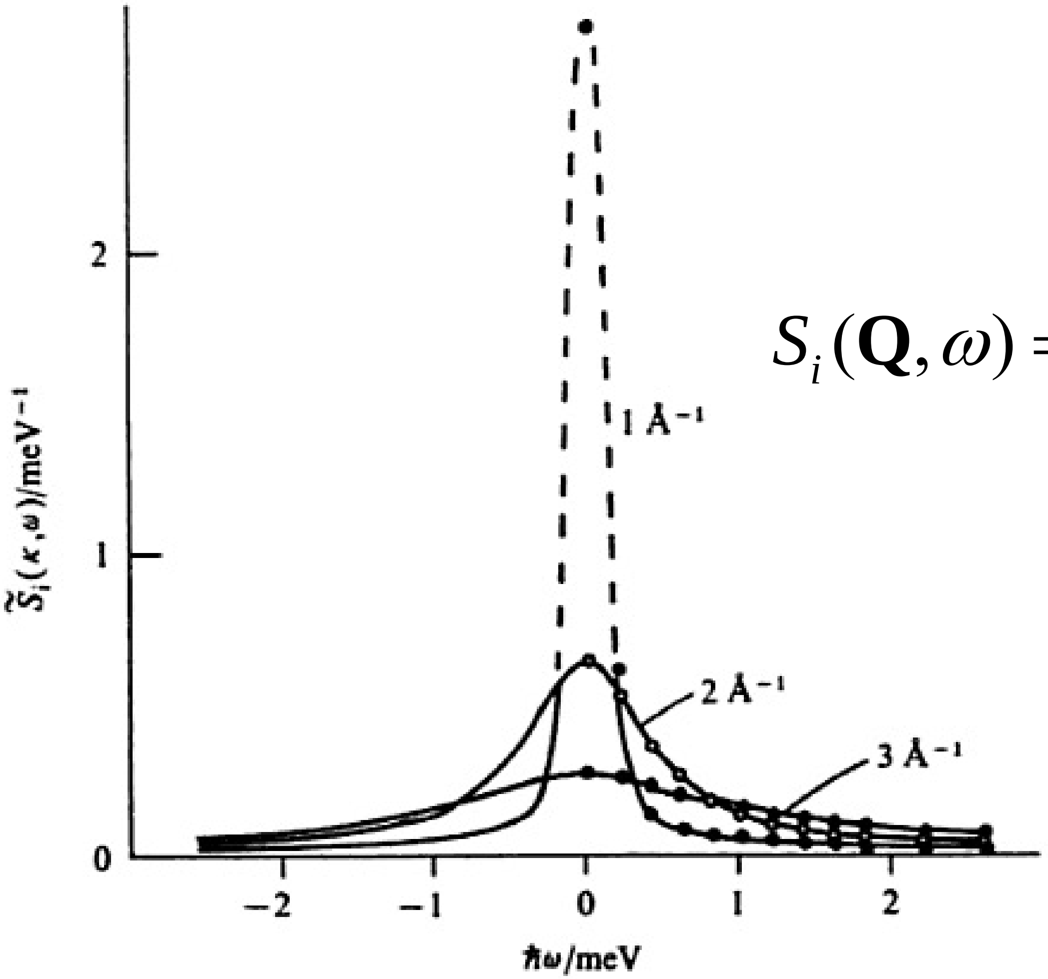
$$S(0)=\frac{\overline{n^2}}{\bar{n}}-\bar{n}=\frac{\overline{\left(n-\bar{n}\right)^2}}{\bar{n}}$$

^{36}Ar





Некогерентное рассеяние в жидкостях



$$S_i(\mathbf{Q},\omega)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int G_s(\mathbf{r},t)e^{i(\mathbf{Qr}-\omega t)}d\mathbf{r}dt$$

Некогерентное рассеяние в жидкостях. Связь с автокорреляционной функцией скоростей.

$$\left\langle r(t)^2 \right\rangle = \left\langle \left(\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)\right)^2 \right\rangle$$

$$\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) = \int_0^t \mathbf{v}(t_1)\,dt_1$$

$$\left\langle r(t)^2 \right\rangle = \left\langle \int_0^t \mathbf{v}(t_2)\,dt_2 \int_0^t \mathbf{v}(t_1)\,dt_1 \right\rangle = 2\int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \left\langle \mathbf{v}(t_1)\mathbf{v}(t_2) \right\rangle$$

$$= 2\int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \left\langle \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t_2 - t_1) \right\rangle = 2\int_0^t dt' \left\langle \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t') \right\rangle (t - t')$$

$$t' = t_2 - t_1$$

Некогерентное рассеяние в жидкостях

$$\langle \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t)\rangle = w(t)$$

$$\langle r(t)^2\rangle = 2\int_0^t dt' w(t')(t-t') = 2t\int_0^t dt' w(t') - 2\int_0^t dt' w(t')t'$$

$$\frac{d\langle r(t)^2\rangle}{dt} = 2\int_0^t dt' w(t') + 2tw(t) - 2w(t)t = 2\int_0^t dt' w(t')$$

$$\frac{d^2\langle r(t)^2\rangle}{dt^2} = 2\langle \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t)\rangle$$

$$\int_0^\infty p(\omega)d\omega = 1$$

$$p(\omega) = \frac{M}{3\pi k_B T}\int_{-\infty}^{\infty}\langle \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t)\rangle e^{-i\omega t}dt$$

$$\langle \mathbf{v}(0)^2\rangle = \frac{3k_B T}{M}$$

Velocity frequency function

Некогерентное рассеяние в жидкостях

$$\langle \mathbf{v}(0)\mathbf{v}(t)\rangle = \frac{3k_BT}{2M}\int_{-\infty}^{\infty} p(\omega)e^{i\omega t}d\omega = \frac{3k_BT}{M}\int_{0}^{\infty} p(\omega)\cos(\omega t)d\omega$$

$$\frac{d^2\langle r(t)^2\rangle}{dt^2} = \frac{6k_BT}{M}\int_{0}^{\infty} p(\omega)\cos(\omega t)d\omega$$

$$\langle r(t)^2\rangle = \frac{d\langle r(t)^2\rangle}{dt} = 0 \qquad \text{при } t = 0$$

$$\langle r(t)^2\rangle = \frac{6k_BT}{M}\int_{0}^{\infty} p(\omega)\frac{1-\cos(\omega t)}{\omega^2}d\omega$$

Некогерентное рассеяние в жидкостях

малые t

$$\left\langle r(t)^2 \right\rangle = \frac{6k_BT}{M}\int_0^\infty p(\omega)\frac{1-\cos(\omega t)}{\omega^2}d\omega \approx \frac{6k_BT}{M}\int_0^\infty p(\omega)\frac{\omega^2 t^2/2}{\omega^2}d\omega$$

$$= \frac{3k_BT}{M}t^2\int_0^\infty p(\omega)d\omega = \frac{3k_BT}{M}t^2 = \left\langle \mathbf{v}(0)^2 \right\rangle t^2$$

большие t

$$\left\langle r(t)^2 \right\rangle = \frac{6k_BT}{M}\int_0^\infty p(\omega)\frac{1-\cos(\omega t)}{\omega^2}d\omega = \frac{6k_BT}{M}t\int_0^\infty p\left(\frac{\omega t}{t}\right)\frac{1-\cos(\omega t)}{(\omega t)^2}d(\omega t)$$

$$= \frac{6k_BT}{M}t\int_0^\infty p\left(\frac{x}{t}\right)\frac{1-\cos x}{x^2}dx \approx \frac{6k_BT}{M}p(0)t\int_0^\infty \frac{1-\cos(x)}{x^2}dx \propto t$$

Некогерентное рассеяние в жидкостях. Гауссово приближение.

$$G_s(r,t) = \frac{1}{\left(2\pi\sigma(t)^2\right)^{3/2}} e^{-r^2/2\sigma(t)^2}$$

идеальный газ и диффузия

$$\sigma(t)^2 = \frac{k_B T}{M} t^2$$

$$I_s(\mathbf{Q},t) = \int G_s(\mathbf{r},t) e^{i\mathbf{Qr}} d\mathbf{r} = e^{-Q^2\sigma(t)^2/2}$$

$$\left\langle r(t)^2 \right\rangle = 4\pi \int_0^\infty G_s(\mathbf{r},t) r^4 dr = 3\sigma(t)^2$$

$G_s(\mathbf{r},t)$ в классическом идеальном газе

$$4\pi r^2 dr G_s(\mathbf{r},t) = P(\mathrm{v})d\mathrm{v} \qquad P(\mathrm{v}) \propto \mathrm{v}^2 \exp\left(-\frac{m\mathrm{v}^2/2}{k_B T}\right)$$

$$4\pi r^2 dr G_s(\mathbf{r},t) \propto \mathrm{v}^2 \exp\left(-\frac{m\mathrm{v}^2/2}{k_B T}\right)d\mathrm{v}$$

$$4\pi r^2 dr G_s(\mathbf{r},t) \propto \frac{r^2}{t^2} \exp\left(-\frac{m\mathrm{r}^2/2t^2}{k_B T}\right)\frac{dr}{t}$$

$$\boxed{\mathrm{v} = \frac{r}{t} \qquad d\mathrm{v} = \frac{dr}{t}}$$

$$\boxed{G_s(\mathbf{r},t) = A(t)\exp\left(-\frac{m\mathrm{r}^2/2t^2}{k_B T}\right) = \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi}\sigma(t)\right)^3} e^{-r^2/2\sigma(t)^2}}$$

$$\boxed{\sigma(t)^2 = k_B T \frac{t^2}{m}}$$

$$1 = \int G_s(\mathbf{r},t)d\mathbf{r} = 4\pi\int r^2 G_s(r,t)dr \quad \Rightarrow \quad A(t) = \left(\sqrt{2\pi}\sigma(t)\right)^{-3}$$

$G_s(\mathbf{r},t)$ в диффузионном режиме

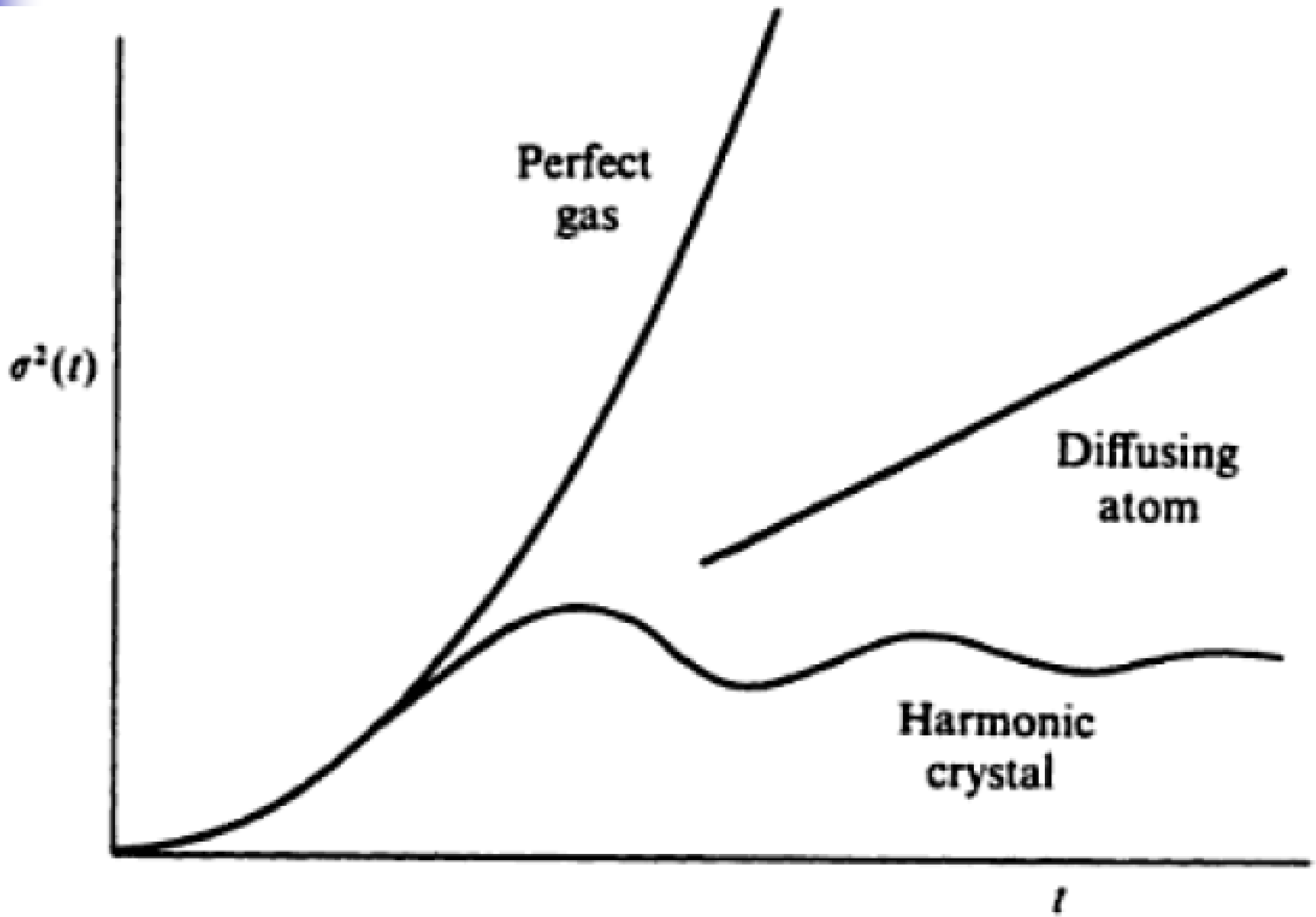
$$\frac{\partial n(\mathbf{r},t)}{\partial t} = D\Delta n(\mathbf{r},t)$$ Закон Фика (Fick's law)

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \cancel{\frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}}$$

$$\frac{\partial G_s(r,t)}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) G_s(r,t)$$

$$\frac{d\sigma(t)^2}{dt} = 2D \quad \Rightarrow \quad \boxed{\sigma(t)^2 = 2D|t| + c \sim 2D|t|}$$

Некогерентное рассеяние в жидкостях. Гауссово приближение



Некогерентное рассеяние в жидкостях. Гауссово приближение

$$Q \to 0$$

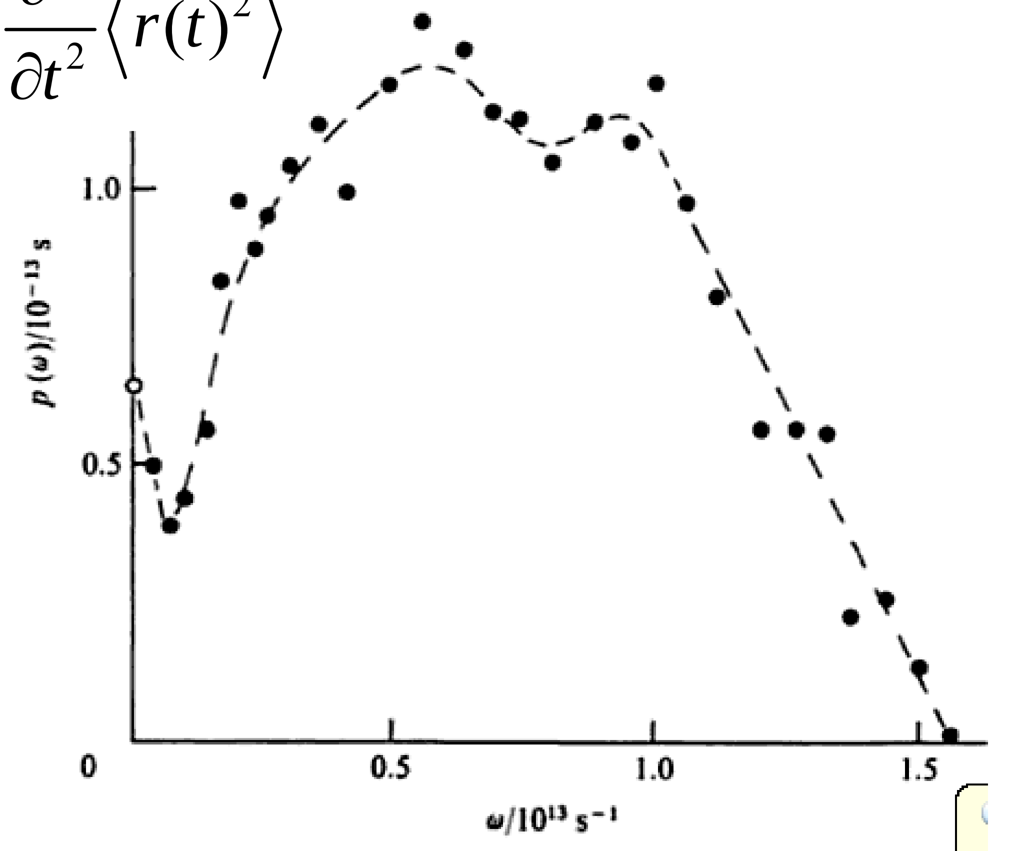
$$I_s(\mathbf{Q},t) \approx 1 - Q^2\sigma(t)^2/2$$

$$-\frac{2}{Q^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}I_s(\mathbf{Q},t) = \frac{\partial^2}{\partial t^2}\sigma(t)^2 = \frac{1}{3}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\left\langle r(t)^2\right\rangle$$

$$= \frac{k_B T}{2M}\int_{-\infty}^{\infty} p(\omega)e^{i\omega t}d\omega$$

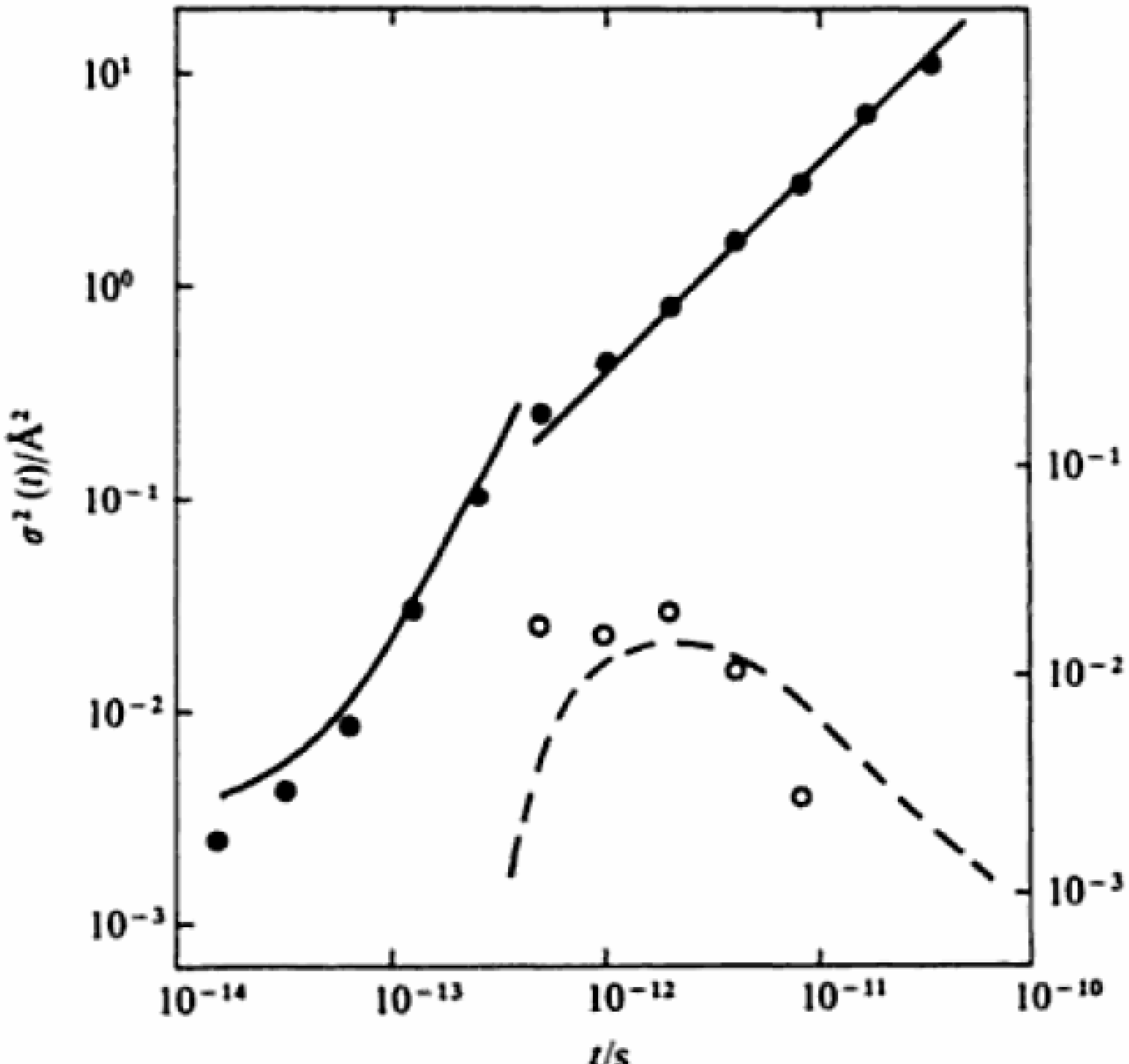
$$I_s(\mathbf{Q},t) = \hbar\int_{-\infty}^{\infty} S_i(\mathbf{Q},\omega)e^{i\omega t}d\omega$$

$$p(\omega) = \frac{2M\hbar}{k_B T}\omega^2 \lim_{Q\to 0}\frac{S_i(\mathbf{Q},\omega)}{Q^2}$$



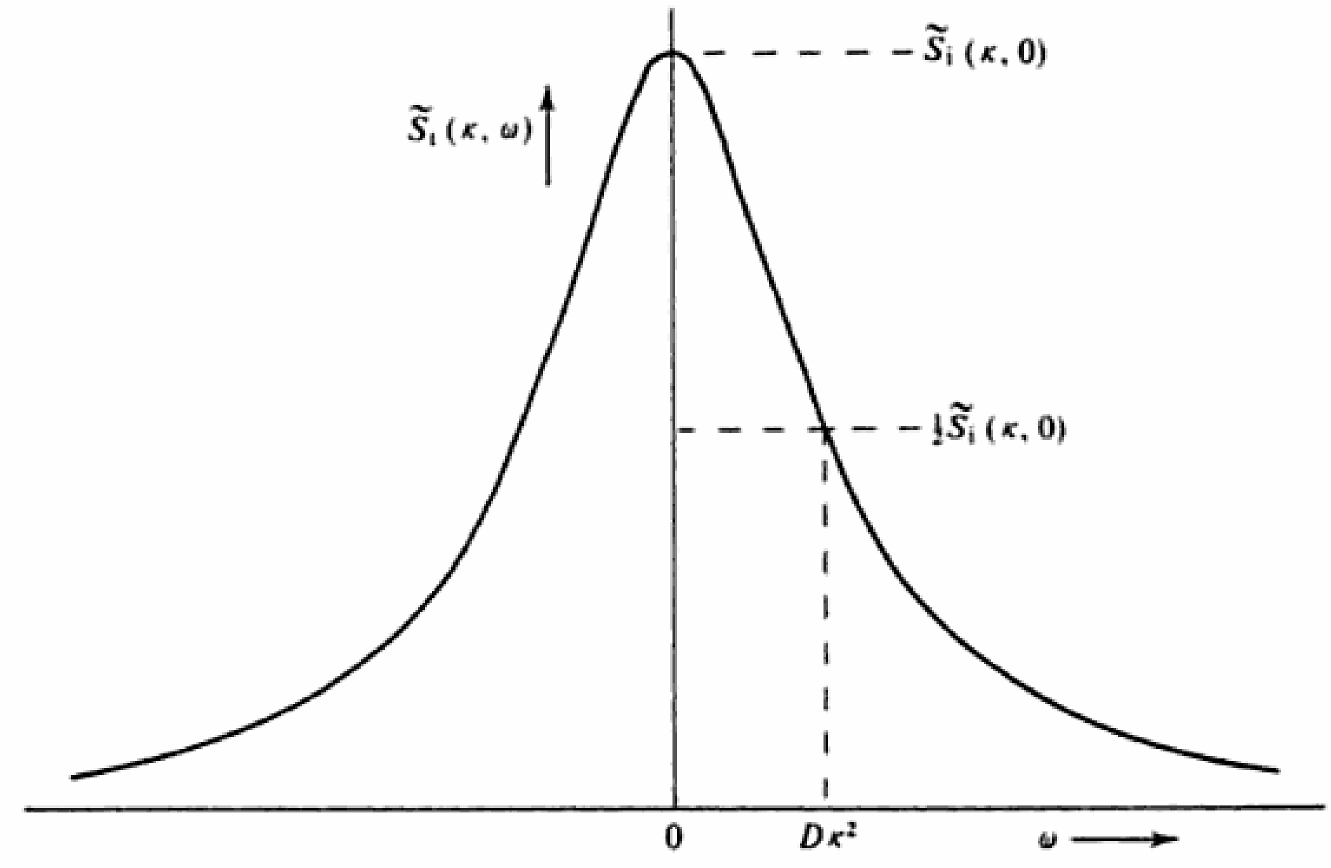
Диффузия

$$\sigma(t)^2 = 2D\,|\,t\,|$$



Диффузия

$$S_i(Q,\omega) = e^{\hbar\omega/2k_BT}\,\frac{1}{\pi\hbar}\,\frac{DQ^2}{\left(DQ^2\right)^2+\omega^2}$$



Диффузия

$$\Delta E = 2DQ^2$$

$$S_i(Q,0) = \frac{1}{\pi\hbar}\frac{1}{DQ^2}$$