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

Сыромятников
Арсений Владиславович

Лекция 8. Основы теории магнитного рассеяния нейтронов.

- *Выражение для сечения магнитного рассеяния*
- *Магнитное рассеяние при отсутствии орбитального вклада*

Магнитное взаимодействие нейтрона с веществом

$$\boldsymbol{\mu}_n = -\gamma \mu_N \boldsymbol{\sigma} \qquad \mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p} \qquad \gamma = 1.913$$

$$\boldsymbol{\mu}_e = -2\mu_B \mathbf{s} \qquad \mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

$$V_m(\mathbf{R}) = -\boldsymbol{\mu}_n \mathbf{B}(\mathbf{R})$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}) = \mathbf{B}_S(\mathbf{R}) + \mathbf{B}_L(\mathbf{R})$$

$$\mathbf{B}_S(\mathbf{R}) = \left[\bar{\nabla} \times \mathbf{A}\right] \qquad \mathbf{A} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\left[\boldsymbol{\mu}_e \times \mathbf{R}\right]}{R^3}$$

$$\mathbf{B}_L(\mathbf{R}) = \frac{\mu_0}{4\pi} I \frac{\left[d\mathbf{l} \times \mathbf{R}\right]}{R^3} \qquad I d\mathbf{l} = -\frac{e}{m_e}\mathbf{p} = -\frac{2\mu_B}{\hbar}\mathbf{p}$$

Магнитное взаимодействие нейтрона с веществом

$$\mathbf{B}(\mathbf{R}) = \mathbf{B}_S(\mathbf{R}) + \mathbf{B}_L(\mathbf{R}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\left(\left[\bar{\nabla} \times \left[\boldsymbol{\mu}_e \times \frac{\mathbf{R}}{R^3}\right]\right] - \frac{2\mu_B}{\hbar}\left[\mathbf{p} \times \frac{\mathbf{R}}{R^3}\right]\right)$$

$$V_m(\mathbf{R}) = -\boldsymbol{\mu}_n \mathbf{B}(\mathbf{R}) = -\frac{\mu_0}{4\pi} 2\gamma\mu_N \mu_B \boldsymbol{\sigma}\left(\mathbf{W}_S + \mathbf{W}_L\right)$$

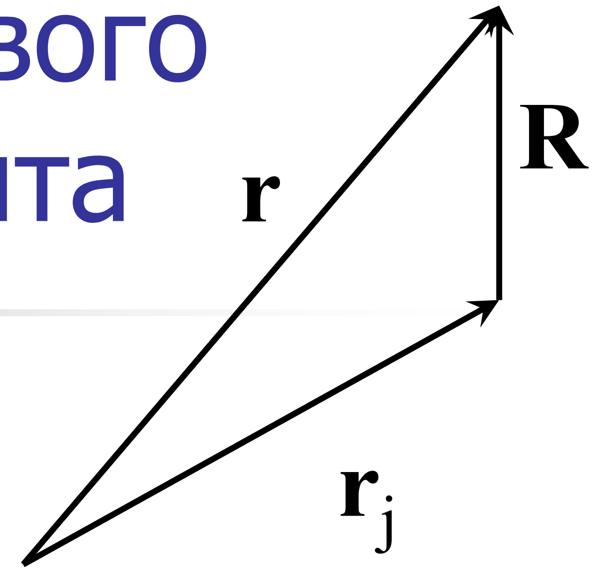
$$\mathbf{W}_S = \left[\bar{\nabla} \times \left[\mathbf{s} \times \frac{\mathbf{R}}{R^3}\right]\right] \qquad \mathbf{W}_L = \frac{1}{\hbar}\left[\mathbf{p} \times \frac{\mathbf{R}}{R^3}\right]$$

Сечение магнитного рассеяния

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f\, d\Omega_f}\right)_{\sigma_i\alpha\to\sigma_f\beta} = \frac{k_f}{k_i}\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2$$

$$\times\left|\left\langle \mathbf{k}_f\sigma_f\beta\,|\,V_m\,|\,\mathbf{k}_i\sigma_i\alpha\right\rangle\right|^2\delta\left(E_\alpha - E_\beta + \hbar\omega\right)$$

Вычисление спинового матричного элемента



$$\langle \mathbf{k}_f | \mathbf{W}_{Sj} | \mathbf{k}_i \rangle = \int e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}} \left[\bar{\bar{\nabla}} \times \left[\mathbf{s}_j \times \frac{\mathbf{R}}{R^3} \right] \right] e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$\left[\bar{\bar{\nabla}} \times \left[\mathbf{s}_j \times \frac{\mathbf{R}}{R^3} \right] \right] = -\left[\bar{\bar{\nabla}} \times \left[\mathbf{s}_j \times \bar{\bar{\nabla}} \frac{1}{R} \right] \right] = -\left[\bar{\bar{\nabla}} \times \left[\mathbf{s}_j \times \bar{\bar{\nabla}} \frac{1}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}}{q^2} \right] \right]$$

$$= -\frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2} \left[\bar{\bar{\nabla}} \times \left[\mathbf{s}_j \times i\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \right] \right] = -\frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2} \left[\bar{\bar{\nabla}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \times \left[\mathbf{s}_j \times i\mathbf{q} \right] \right]$$

$$= -\frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2} \left[i\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \times \left[\mathbf{s}_j \times i\mathbf{q} \right] \right] = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2} \left[\mathbf{q} \times \left[\mathbf{s}_j \times \mathbf{q} \right] \right] e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}$$

Вычисление спинового матричного элемента

$$\left\langle \mathbf{k}_f \left| \mathbf{W}_{Sj} \right| \mathbf{k}_i \right\rangle = \int e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}} \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2} \left[\mathbf{q} \times \left[\mathbf{s}_j \times \mathbf{q} \right] \right] e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} d\mathbf{r} \frac{1}{q^2} \left[\mathbf{q} \times \left[\mathbf{s}_j \times \mathbf{q} \right] \right] e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} = 4\pi e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \frac{1}{Q^2} \left[\mathbf{Q} \times \left[\mathbf{s}_j \times \mathbf{Q} \right] \right]$$

$$= 4\pi e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \left[\hat{\mathbf{Q}} \times \left[\mathbf{s}_j \times \hat{\mathbf{Q}} \right] \right]$$

$$\hat{\mathbf{Q}} = \frac{\mathbf{Q}}{Q}$$

$$\boxed{\left\langle \mathbf{k}_f \left| \mathbf{W}_{Sj} \right| \mathbf{k}_i \right\rangle = 4\pi e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \left[\hat{\mathbf{Q}} \times \left[\mathbf{s}_j \times \hat{\mathbf{Q}} \right] \right]}$$

Вычисление орбитального матричного элемента

$$\left\langle \mathbf{k}_f \left| \mathbf{W}_{Lj} \right| \mathbf{k}_i \right\rangle = \int e^{-i\mathbf{k}_f\mathbf{r}} \frac{1}{\hbar}\left[\mathbf{p}_j \times \frac{\mathbf{R}}{R^3}\right] e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$= \frac{1}{\hbar}\int e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}}\left[\mathbf{p}_j \times \frac{\mathbf{R}}{R^3}\right] d\mathbf{r} = \frac{1}{\hbar} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \int e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}}\left[\mathbf{p}_j \times \frac{\mathbf{R}}{R^3}\right] d\mathbf{R}$$

$$\int e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \frac{\mathbf{R}}{R^3} d\mathbf{R} = -\int e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \overline{\nabla} \frac{1}{R} d\mathbf{R} = -\int e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \overline{\nabla} \frac{1}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}}{q^2} d\mathbf{R}$$

$$= -\frac{1}{2\pi^2}\int e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \int d\mathbf{q} \frac{i\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}}}{q^2} d\mathbf{R} = -\frac{1}{2\pi^2}\int d\mathbf{q} \frac{i\mathbf{q}}{q^2} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}+\mathbf{Q}) = 4\pi \frac{i\mathbf{Q}}{Q^2}$$

$$\boxed{\left\langle \mathbf{k}_f \left| \mathbf{W}_{Lj} \right| \mathbf{k}_i \right\rangle = \frac{1}{\hbar} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j}\left[\mathbf{p}_j \times 4\pi \frac{i\mathbf{Q}}{Q^2}\right] = \frac{4\pi i}{\hbar Q} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j}\left[\mathbf{p}_j \times \hat{\mathbf{Q}}\right]}$$

Выражение для сечения

$$\sum_j \left\langle \mathbf{k}_f \left| \mathbf{W}_{Sj} + \mathbf{W}_{Lj} \right| \mathbf{k}_i \right\rangle = 4\pi \mathbf{Y}_\perp$$

$$\boxed{\mathbf{Y}_\perp = \sum_j e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} \left(\left[\hat{\mathbf{Q}} \times \left[\mathbf{s}_j \times \hat{\mathbf{Q}} \right] \right] + \frac{i}{\hbar Q} \left[\mathbf{p}_j \times \hat{\mathbf{Q}} \right] \right)}$$

$$\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 (4\pi)^2 \left(\frac{\mu_0}{4\pi} 2\gamma\mu_N\mu_B \right)^2 = \left(\frac{m}{\pi\hbar^2} \mu_0\gamma\mu_N\mu_B \right)^2$$

$$= \left(\frac{m}{\pi\hbar^2} \mu_0\gamma \frac{e\hbar}{2m_p} \frac{e\hbar}{2m_e} \right)^2 = \left(\gamma \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^2}{m_e} \right)^2 = (\gamma r_0)^2$$

$r_0 = 2.818 \cdot 10^{-15}\,\mathrm{m}$ "классический радиус электрона"

$$\boxed{\left(\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} \right)_{\sigma_i\alpha\to\sigma_f\beta} = (\gamma r_0)^2 \frac{k_f}{k_i} \left| \left\langle \sigma_f \beta \left| \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Y}_\perp \right| \sigma_i \alpha \right\rangle \right|^2 \delta\left(E_\alpha - E_\beta + \hbar\omega \right)}$$

Связь оператора $Y_\perp$ с намагниченностью

$$\mathbf{Y}_{\perp S} = \sum_j e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j}\left[\hat{\mathbf{Q}}\times\left[\mathbf{s}_j\times\hat{\mathbf{Q}}\right]\right] = \left[\hat{\mathbf{Q}}\times\left[\mathbf{Y}_S\times\hat{\mathbf{Q}}\right]\right]$$

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{Y}_S &= \sum_j e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j}\mathbf{s}_j \\ \boldsymbol{\rho}_S(\mathbf{r}) &= \sum_j \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)\mathbf{s}_j \end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad \mathbf{Y}_S = \int \boldsymbol{\rho}_S(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

$$\mathbf{M}_S(\mathbf{r}) = -2\mu_B \boldsymbol{\rho}_S(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{Y}_S = -\frac{1}{2\mu_B}\mathbf{M}_S(\mathbf{Q})$$

$$\mathbf{Y}_{\perp S} = -\frac{1}{2\mu_B}\left[\hat{\mathbf{Q}}\times\left[\mathbf{M}_S(\mathbf{Q})\times\hat{\mathbf{Q}}\right]\right]$$

Связь оператора $Y_{\perp}$ с намагниченностью

$$\mathbf{Y}_{\perp L} = -\frac{1}{2\mu_B}\left[\hat{\mathbf{Q}}\times\left[\mathbf{M}_L(\mathbf{Q})\times\hat{\mathbf{Q}}\right]\right]$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_S + \mathbf{Y}_L = -\frac{1}{2\mu_B}\mathbf{M}(\mathbf{Q})$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{Q}) = \mathbf{M}_S(\mathbf{Q}) + \mathbf{M}_L(\mathbf{Q})$$

$$\mathbf{Y}_{\perp} = -\frac{1}{2\mu_B}\left[\hat{\mathbf{Q}}\times\left[\mathbf{M}(\mathbf{Q})\times\hat{\mathbf{Q}}\right]\right] = \left[\hat{\mathbf{Q}}\times\left[\mathbf{Y}\times\hat{\mathbf{Q}}\right]\right]$$

Суммирование по проекциям спина нейтрона

$$\sum_{\sigma_i \sigma_f} p_{\sigma_i} \left| \left\langle \sigma_f \beta \middle| \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Y}_\perp \middle| \sigma_i \alpha \right\rangle \right|^2 \qquad p_\uparrow + p_\downarrow = 1$$

$$\sum_{\lambda,\gamma} \left\langle \sigma_i \alpha \middle| \sigma^\lambda \left(Y_\perp^\lambda \right)^+ \middle| \sigma_f \beta \right\rangle \left\langle \sigma_f \beta \middle| \sigma^\gamma Y_\perp^\gamma \middle| \sigma_i \alpha \right\rangle \qquad \lambda, \gamma = x, y, z$$

$$= \sum_{\lambda,\gamma} \left\langle \sigma_i \middle| \sigma^\lambda \middle| \sigma_f \right\rangle \left\langle \sigma_f \middle| \sigma^\gamma \middle| \sigma_i \right\rangle \left\langle \alpha \middle| \left(Y_\perp^\lambda \right)^+ \middle| \beta \right\rangle \left\langle \beta \middle| Y_\perp^\gamma \middle| \alpha \right\rangle$$

$$\sum_{\sigma_f} \left\langle \sigma_i \middle| \sigma^\lambda \middle| \sigma_f \right\rangle \left\langle \sigma_f \middle| \sigma^\gamma \middle| \sigma_i \right\rangle = \left\langle \sigma_i \middle| \sigma^\lambda \sigma^\gamma \middle| \sigma_i \right\rangle$$

$$= \delta_{\lambda\gamma} + i\varepsilon_{\lambda\gamma\chi} \left\langle \sigma_i \middle| \sigma^\chi \middle| \sigma_i \right\rangle$$

Отлично от нуля только при $\chi = z$

$$\sigma^\lambda \sigma^\gamma = \delta_{\lambda\gamma} + i\varepsilon_{\lambda\gamma\chi} \sigma^\chi$$

Суммирование по проекциям спина нейтрона

$$\sum_{\sigma_i \sigma_f} p_{\sigma_i} \left| \left\langle \sigma_f \beta \left| \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Y}_\perp \right| \sigma_i \alpha \right\rangle \right|^2$$

$$= \sum_{\sigma_i} p_{\sigma_i} \sum_{\lambda,\gamma} \left(\delta_{\lambda\gamma} + i\varepsilon_{\lambda\gamma z} \left\langle \sigma_i \left| \sigma^z \right| \sigma_i \right\rangle \right) \left\langle \alpha \left| \left(Y_\perp^\lambda \right)^+ \right| \beta \right\rangle \left\langle \beta \left| Y_\perp^\gamma \right| \alpha \right\rangle$$

если $p_\uparrow = p_\downarrow = \dfrac{1}{2}$, то $\sum_{\sigma_i} p_{\sigma_i} \left\langle \sigma_i \left| \sigma^z \right| \sigma_i \right\rangle = 0$

$$\sum_{\sigma_i \sigma_f} p_{\sigma_i} \left| \left\langle \sigma_f \beta \left| \boldsymbol{\sigma} \mathbf{Y}_\perp \right| \sigma_i \alpha \right\rangle \right|^2 = \sum_{\lambda} \left\langle \alpha \left| \left(Y_\perp^\lambda \right)^+ \right| \beta \right\rangle \left\langle \beta \left| Y_\perp^\lambda \right| \alpha \right\rangle$$

Выражение для сечения

$$\mathbf{Y}_\perp = \mathbf{Y} - \left(\mathbf{Y}\hat{\mathbf{Q}}\right)\hat{\mathbf{Q}}$$

$$Y_\perp^\lambda = Y^\lambda - \left(\mathbf{Y}\hat{\mathbf{Q}}\right)\hat{Q}^\lambda = \sum_\chi \left(\delta_{\chi\lambda} - \hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\chi\right) Y^\chi$$

$$\sum_\lambda \sum_\chi \left(\delta_{\chi\lambda} - \hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\chi\right)\left(Y^\chi\right)^+ \sum_\eta \left(\delta_{\eta\lambda} - \hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\eta\right) Y^\eta$$

$$= \sum_\lambda \sum_{\chi,\eta} \left(\delta_{\chi\lambda} - \hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\chi\right)\left(\delta_{\eta\lambda} - \hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\eta\right)\left(Y^\chi\right)^+ Y^\eta$$

$$= \sum_\lambda \sum_{\chi,\eta} \left(\delta_{\chi\lambda}\delta_{\eta\lambda} - \delta_{\eta\lambda}\hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\chi - \delta_{\chi\lambda}\hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\eta + \hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\chi \hat{Q}^\lambda \hat{Q}^\eta\right)\left(Y^\chi\right)^+ Y^\eta$$

$$= \sum_{\chi,\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^\eta \hat{Q}^\chi - \hat{Q}^\chi \hat{Q}^\eta + \hat{Q}^\chi \hat{Q}^\eta\right)\left(Y^\chi\right)^+ Y^\eta$$

$$= \sum_{\chi,\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^\eta \hat{Q}^\chi\right)\left(Y^\chi\right)^+ Y^\eta$$

Выражение для сечения

$$\frac{d^2\sigma}{dE_f\,d\Omega_f} = (\gamma r_0)^2 \frac{k_f}{k_i} \sum_{\chi,\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^{\eta} \hat{Q}^{\chi} \right)$$
$$\times \sum_{\alpha\beta} P_\alpha \left\langle \alpha \middle| \left(Y^{\chi} \right)^{+} \middle| \beta \right\rangle \left\langle \beta \middle| Y^{\eta} \middle| \alpha \right\rangle \delta\left(E_\alpha - E_\beta + \hbar\omega \right)$$

Рассеяние при отсутствии орбитального вклада

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{R}_{ld} + \mathbf{r}_\nu$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_S = \sum_j e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j}\mathbf{s}_j = \sum_{ld} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_{ld}} \sum_{\nu(d)} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_\nu}\mathbf{s}_\nu$$

$$\langle\beta|\mathbf{Y}|\alpha\rangle_{ld} = \left\langle\beta\left|e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_{ld}}\sum_{\nu(d)} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_\nu}\mathbf{s}_\nu\right|\alpha\right\rangle = \sum_\gamma\sum_{\nu(d)}\langle\beta|e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_\nu}|\gamma\rangle\langle\gamma|e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_{ld}}\mathbf{s}_\nu|\alpha\rangle$$

$$= \sum_\gamma\langle\beta|e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_1}|\gamma\rangle\left\langle\gamma\left|e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_{ld}}\sum_{\nu(d)}\mathbf{s}_\nu\right|\alpha\right\rangle = \langle\beta|e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_1}|\beta\rangle\langle\beta|e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_{ld}}\mathbf{S}_{ld}|\alpha\rangle$$

$$= F_d(\mathbf{Q})\langle\beta|e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_{ld}}\mathbf{S}_{ld}|\alpha\rangle$$

$$F_d(\mathbf{Q}) = \int \mathfrak{s}_d(\mathbf{r})e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}}d\mathbf{r} \qquad \begin{cases} F_d(\mathbf{Q}\to 0)\to 1 \\ F_d(\mathbf{Q}\to\infty)\to 0 \end{cases}$$

Рассеяние при отсутствии орбитального вклада

$$\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} = (\gamma r_0)^2 \frac{k_f}{k_i} \sum_{\chi\eta} \left(\delta_{\chi\eta} - \hat{Q}^\eta \hat{Q}^\chi\right) \sum_{l'd'} \sum_{ld} F_{d'}^*(\mathbf{Q}) F_d(\mathbf{Q})$$
$$\times \sum_{\alpha\beta} P_\alpha \left\langle \alpha \left| e^{-i\mathbf{QR}_{l'd'}} S_{l'd'}^\chi \right| \beta \right\rangle \left\langle \beta \left| e^{i\mathbf{QR}_{ld}} S_{ld}^\eta \right| \alpha \right\rangle \delta\left(E_\alpha - E_\beta + \hbar\omega\right)$$

- Хорошо работает, когда L=0 (например, EuO и EuS)
- Когда орбитальный момент «заморожен» (quenched)