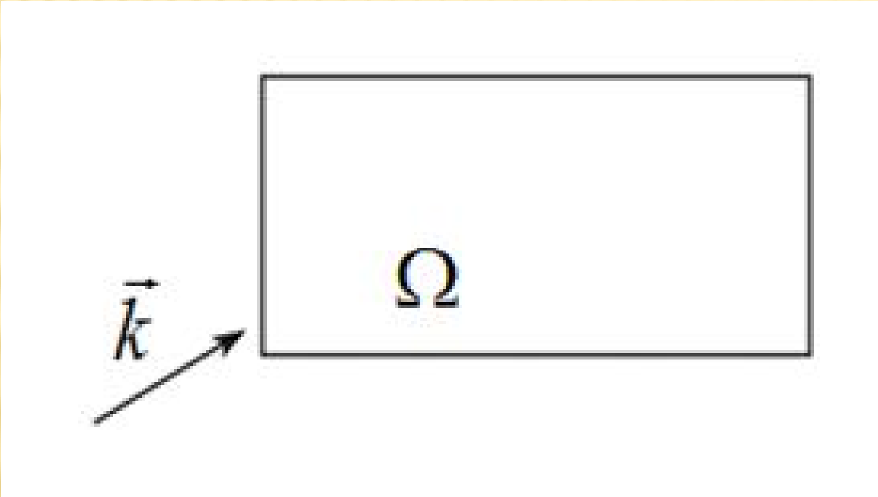
Лекция 12-я .

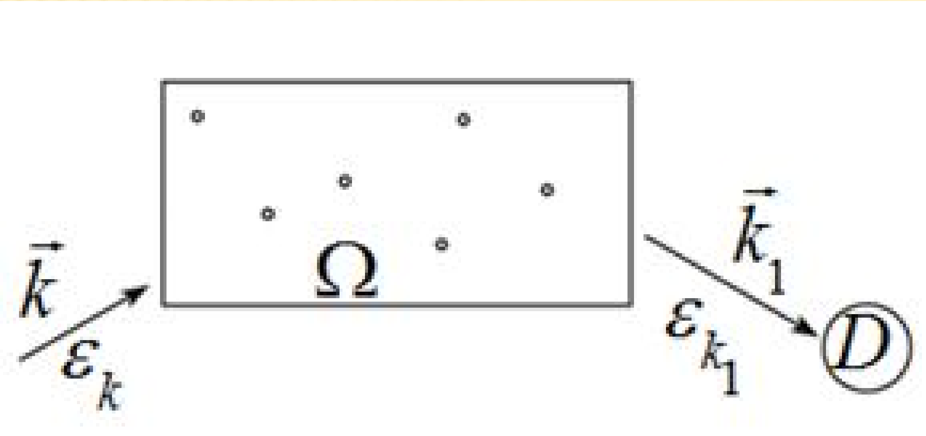
Рассеяние внешнего излучения на колеблющемся кристалле. Вероятность рассеяния в приближении тонкого кристалла.

Рассеяние тепловых нейтронов на кристалле



Нейтронная волна, влетевшая внутрь кристалла будет взаимодействовать только с ядрами (e^{-} - слишком легкие).

Размер атома $\sim 10^{8}$ см, размер ядра $\sim 10^{-13}$ см, таким образом, вероятность рассеяться очень мала, а основное пространство для нейтрона – вакуум.



Считаем, что рассеяние однократно (всегда).Для этого необходимо $\frac{I'}{I} \ll 1$

$\uparrow$

приближение тонкого кристалла

I' - интенсивность рассеянных нейтронов (по сути броуновское приближение)

I - интенсивность налетающих нейтронов

Золотое правило квантовой механики (Ферми)

$$W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k} \\ i\to f}} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|M_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1 \\ i\to f}}\right|^2 \delta(E_i + \varepsilon_k - E_f - \varepsilon_k)$$

i, f - начальное и конечное состояния кристалла как целого

$$M_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}} = \left\langle f \left| \int d\vec{r}\,\Psi^*_{\vec{k}_1}(\vec{r})U(\vec{r})\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \right| i \right\rangle ==$$

нейтрон взаимодействует со всеми ядрами

$$U(\vec{r}) = \sum_n U_n(\vec{r} - \vec{R}_n)$$

Если ядра тождественны, то вся разница между ядрами только в их пространственном положении (т.е. зависимость от n только в $\vec{R}_n$). В природе изотопы! К тому же ядра обладают спинами $\Rightarrow$ взаимодействуют между собой.

Два фактора: изотопический состав + магнитное взаимодействие.

В разных узлах ядра могут по-разному воздействовать $\Rightarrow$ зависимость от n не только в $\vec{R}_n$, но и в амплитуде.

$$== \left\langle f \left| \int d\vec{r}\,\frac{e^{-i\vec{k}_1\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \sum_n U_n(\vec{r} - \vec{R}_n)\frac{e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} \right| i \right\rangle$$

пусть

$$\Psi_{\vec{k}} = \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}};\Psi_{\vec{k}_1} = \frac{e^{i\vec{k}_1\vec{r}}}{\sqrt{\Omega}};\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_1$$

$$M_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}} = \left\langle f \left| \sum_n e^{i\vec{q}\vec{R}_n} \underbrace{\frac{1}{\Omega}\int d\vec{r}_1 e^{i\vec{q}\vec{r}_1} U_n(\vec{r}_1)}_{U_n(\vec{q})} \right| i \right\rangle$$

$$\begin{cases} \Phi(\vec{r}) = \sum_{\bar{q}} \Phi(\bar{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}} \\ \Phi(\vec{q}) = \dfrac{1}{\Omega}\int_\Omega d\vec{r} e^{-i\vec{q}\vec{r}}\Phi(\vec{r}) \end{cases}$$

$$M_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}} = \left\langle f \left| \sum_n U_n(-\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{R}_n} \right| i \right\rangle$$

$$W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\langle f \left| \sum_n u_n(-\vec{q}) e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}} \right| i \right\rangle \left\langle i \left| \sum_{n_1} U_{n_1}(-\vec{q}) e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}} \right| f \right\rangle \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_i+\varepsilon_k-E_f-\varepsilon_{k_1})t}$$

$$W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_n \sum_{n_1} U_n(-\vec{q}) U_{n_1}(+\vec{q}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} e^{\frac{i}{\hbar}E_i t} \left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}} \right| f \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t} \left\langle f \left| e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}} \right| i \right\rangle$$

$$\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}_1$$

$$\hbar\omega = \varepsilon_k - \varepsilon_{k_1}$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}E_i t} \langle i| = \left\langle i \right| e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t} ; e^{-\frac{1}{\hbar}\widehat{H}t} \left| f \right\rangle = \left| f \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_f t}$$

E_i - собственное значение $\widehat{H}$ в состоянии $|i\rangle$, E_f - в состоянии $|f\rangle$

таким образом получим:

$$\left\langle i \left| \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t} e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}} e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}}_{e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}(t)}} \right| f \right\rangle \left\langle f \left| e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}} \right| i \right\rangle$$

$\exp\{оператор\} = беск.ряд \rightarrow$

$\uparrow$ $\nwarrow$

«собрали обратно» получили гайзенберговское представление оператора

оператор в гайзенберговском представлении $\widehat{\vec{R}_{n_1}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t} \widehat{\vec{R}_{n_1}} e^{-\frac{i}{\hbar}\widehat{H}t}$, тогда $e^{i\vec{q}\vec{R}_n} = \widehat{\vec{R}_n}(0)$

Вероятность рассеяния волны

$$W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}}=\frac{1}{\hbar^2}\sum_{n_0}\sum_{n_1}U_n(-\bar{q})U_{n_1}(q)\int_{-\infty}^{+\infty}dt e^{i\omega t}\sum_f\left\langle i\left|e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}(t)}\right|f\right\rangle\left\langle f\left|e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}(0)}\right|i\right\rangle$$

$W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}}$ просуммируем по всем возможным конечным состояниям, однако, тогда и i–ое состояние «теряется»; усредним по начальным состояниям:

$$\sum_i w_i\sum_f W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}}=\frac{1}{\hbar^2}\sum_n\sum_{n_1}U_n(-\vec{q})U_{n_1}(\vec{q})\int_{-\infty}^{+\infty}dt\sum_i w_i\sum_f\left\langle i\left|e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}(t)}\right|f\right\rangle\left\langle f\left|e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}(0)}\right|i\right\rangle$$

$w_i=\frac{1}{z}e^{-\frac{Ei}{kT}}$ - распределение Гиббса

$$W_{\vec{k}\to\vec{k}_1}=\sum_i w_i\sum_f W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1\\ i\to f}}$$

Учтем, что $\sum_f\widehat{A_{if}}\,\widehat{B_{fi}}=(\hat{A}\hat{B})_{ii}$ (это доказывается «вставлением» между A_{if} и B_{fi} $1=\sum_n|n\rangle\langle n|$)

(«полный набор»)

$$\sum_f \left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}(t)} \right| f \right\rangle \left\langle f \left| e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}(0)} \right| i \right\rangle = \left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}(t)} e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}(0)} \right| i \right\rangle$$

$$\frac{1}{z} e^{-\frac{E_i}{kT}} \langle i | \ldots | i \rangle = \left\langle i \left| \underbrace{\frac{e^{-\frac{\widehat{H}}{kT}}}{Z}}_{\widehat{\rho}} (\ldots) \right| i \right\rangle$$

матрица плотностти

$$\underbrace{\sum_i \left\langle i \left| \widehat{\rho} e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}(t)} e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}(0)} \right| i \right\rangle}_{Sp(\widehat{\rho}\ldots)} = \left\langle \left\langle e^{-i\vec{q}\widehat{\vec{R}_{n_1}}(t)} e^{i\vec{q}\widehat{\vec{R}_n}(0)} \right\rangle \right\rangle$$

корреляционная функция ядер

$$\overline{W_{\vec{k}\to\vec{k}_1}} = \overline{\sum_i w_i \sum_f W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1 \\ i\to f}}} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_n \sum_{n_1} \overline{U_n(-\overline{q}) U_{n_1}(\overline{q})} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle\langle \ldots \rangle\rangle$$

$$U_n = \overline{U} + (\Delta U_n)$$

$$\overline{U_n} = \overline{U}$$

т.к. $\overline{(U_n)} = 0$

$$\overline{U_n(-\vec{q})U_{n_1}(\vec{q})} = \overline{\left(\overline{U}(\vec{q}) + \left(\Delta U_{n_1}(\vec{q})\right)\right)\left(\overline{U}(-\vec{q}) + \left(\Delta U_n(-\vec{q})\right)\right)} =$$

$$= \left|\overline{U}(\vec{q})\right|^2 + 0 + 0 + \overline{\left(\Delta U_{n_1}(\vec{q})\right)\left(\Delta U_n(-\vec{q})\right)}$$

если $n \neq n_1$, то среднее от произведения равно произведению средних и равно 0, т.е.

остается только $n \neq n_1$

$$\boxed{\overline{U_{n_1}(\vec{q})U_n(-\vec{q})} = \left|\overline{U}(\overrightarrow{q})\right|^2 + \delta_{nn_1}\overline{\left|\Delta U_n(\vec{q})\right|^2}}$$ - среднеквадратичная флуктуация $\neq 0$

$$W(\vec{q},\omega) \equiv \overline{W_{\vec{k}\to\vec{k}_1}} = \overline{\sum_i w_i \sum_f W_{\substack{\vec{k}\to\vec{k}_1 \\ i\to f}}} = \frac{1}{\hbar^2}\sum_{n,n_1}\left[\left|\overline{U}(\overline{q})\right|^2 + \delta_{nn_1}\overline{\left|\Delta U_n(\vec{q})\right|^2}\right]*$$

$$*\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t}\left\langle\left\langle e^{-i\vec{q}\widehat{\overrightarrow{R_{n_1}}(t)}} e^{i\vec{q}\widehat{\overrightarrow{R_n}(0)}}\right\rangle\right\rangle$$

диагональный матричный элемент

$$\left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\overrightarrow{R_{n_1}}(t)} e^{i\vec{q}\overrightarrow{R_n}(0)} \right| i \right\rangle = e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)} \left\langle i \left| e^{-i\vec{q}\overrightarrow{u_{n_1}}(t)} e^{i\vec{q}\overrightarrow{u_n}(0)} \right| i \right\rangle =$$

$$\overrightarrow{R_n} = \vec{n} + \widehat{\vec{u}_n}$$ (ниже будем считать для простоты, что кристалл одноатомный)

$\uparrow$

содержит $\sqrt{N}$ в знаменателе

$$= e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)} \left\langle i \left| \prod_{\xi_1} e^{-i\vec{q}\widehat{\overrightarrow{u_{n_1\xi_1}}}(t)} \prod_{\xi} e^{i\vec{q}\widehat{\overrightarrow{u_{n\xi}}}(0)} \right| i \right\rangle \approx$$

в каждой экспоненте показатель является макроскопически малым, поэтому можно разложить в ряд:

$$\approx e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)}\prod_{\xi_1}\prod_{\xi}\left\langle i\left|\left(1-i\widehat{\vec{q}\vec{u}_{n_1\xi_1}}(t)-\frac{1}{2}(\widehat{\vec{q}\vec{u}_{n_1\xi_1}}(t)\right)^2+\ldots\right)\left(1+i\widehat{\vec{q}\vec{u}_{n\xi}}(0)-\frac{1}{2}(\widehat{\vec{q}\vec{u}_{n\xi}}(0)\right)^2+\ldots\right|i\right.$$

$$\approx e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}\prod_{\xi_1}\prod_{\xi}\Bigg\{1-iq^{\alpha}\underbrace{\cancel{\left\langle i\left|\widehat{u^{\alpha}_{n_1\xi_1}}(t)\right|i\right\rangle}}_{0}+iq^{\alpha}\cancel{\left\langle i\left|\widehat{u^{\alpha}_{n\xi}}(0)\right|i\right\rangle}-\frac{1}{2}\left\langle i\left|(\widehat{\vec{q}u^{\alpha}_{n_1\xi_1}}(t))^2\right|i\right\rangle-$$

$$-\frac{1}{2}\left\langle i\left|(\widehat{\vec{q}u^{\alpha}_{n\xi}}(0))^2\right|i\right\rangle+\underbrace{\left\langle i\left|\left(\widehat{\vec{q}\vec{u}_{n_1\xi_1}}(t)\right)\left(\widehat{\vec{q}\vec{u}_{n\xi}}(0)\right)\right|i\right\rangle}_{D_{n_1\xi_1,n\xi(t)}}+\ldots\Bigg\}==$$

слагаемые выше второй степени по $\vec{u}$ не учитываем

$$\left\langle i\left|\left(\widehat{\vec{q}\vec{u}_{n\xi}}(0)\right)^2\right|i\right\rangle=q^{\alpha}q^{\beta}\left\langle i\left|\widehat{u^{\alpha}_{n\xi}}(0)\widehat{u^{\beta}_{n\xi}}(0)\right|i\right\rangle=q^{\alpha}q^{\beta}\delta^{\alpha\beta}\underbrace{\left\langle i\left|\left(\widehat{u^{\alpha}_{n\xi}}(0)\right)^2\right|\right\rangle}_{||}=\underbrace{\frac{1}{3}q^2\left\langle\widehat{u^2_{n\xi}}(0)\right\rangle}_{Z_{\xi}(\vec{q})}$$

$$\frac{1}{3}\left\langle i\left|\hat{u}^2_{n\xi}(0)\right|i\right\rangle = \frac{1}{3}\left\langle \hat{u}^2_{n\xi}(0)\right\rangle$$ предполагаем, что кристалл кубический

$$\left\langle i\left|\left(\vec{q}\hat{\vec{u}}_{n_1\xi_1}(t)\right)^2\right|i\right\rangle = q^\alpha q^\beta \left\langle i\left|\hat{u}^\alpha_{n_1\xi_1}(t)\hat{u}^\beta_{n_1\xi_1}(t)\right|i\right\rangle \equiv \frac{q^2}{3}\left\langle \hat{u}^2_{n_1\xi_1}(0)\right\rangle = z_{\xi_1}(\vec{q})$$

$$\left\langle i\left|\hat{A}(t)\hat{B}(t)\right|i\right\rangle \equiv \left\langle i\left|\hat{A}(0)\hat{B}(0)\right|i\right\rangle$$

$$== e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}\prod_{\xi_1}\prod_{\xi}\left\{1-\frac{z_{\xi_1}(\vec{q})}{2}-\frac{z_{\xi}(\vec{q})}{2}+D_{n_1\xi_1,n\xi}(t)+\ldots\right\}\approx$$

$$\approx e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}\left\{1-\frac{1}{2}z_{\xi}(\vec{q})-\frac{1}{2}\sum_{\xi_1}z_{\xi_1}(\vec{q})+\sum_{\xi_1}\sum_{\xi}D_{n_1\xi_1,n\xi}(t)+\ldots\right\}=$$

$$= e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}\left\{1-Z\left(\vec{q}\right)+D_{n_1n}(t)+\ldots\right\}\approx e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}\underbrace{\left(1-Z\left(\vec{q}\right)\right)}_{e^{-Z(\vec{q})}}\left(1+D_{n_1n}(t)\right)\approx$$

$$\approx e^{-Z(\vec{q})}e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}\left(1+D_{n_1n}(t)\right)$$

Таким образом, вероятность приобретает вид:

$$W(\vec{q},\omega)\equiv\frac{1}{\hbar^2}\sum_{nn_1}\left[\left|\overline{U}(\vec{q})\right|^2+\delta_{nn_1}\overline{\left|\Delta U_n(\vec{q})\right|^2}\right]\cdot e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)}e^{-Z(\vec{q})}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}dte^{i\omega t}(1+D_{n_1n}(t))}_{\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i\omega t}\cdot 1+\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i\omega t}D_{n_1n}(t)}$$

$$\begin{array}{cc} \| & \| \\ 2\pi\delta(\omega) & D_{n_1n}(\omega) \end{array}$$ - это

Фурье-образы.

$$\boxed{W(\vec{q},\omega)\approx\frac{1}{\hbar^2}\sum_{nn_1}\left[\left|\overline{U}(\vec{q})\right|^2+\delta_{nn_1}\overline{\left|\Delta U_n(\vec{q})\right|^2}\right]\cdot e^{i\vec{q}(\vec{n}-\vec{n}_1)}\left[2\pi\delta(\omega)+D_{n_1n}(\omega)\right]}$$

Наличие $\delta(\omega)$ означает, что ω дает вклад только, если $\hbar\omega=\varepsilon_k-\varepsilon_{k_1}=0\Rightarrow\varepsilon_k=\varepsilon_{k_1}$ (состояние не изменилось) $\Rightarrow$ слагаемое $2\pi\delta(\omega)$ отвечает упругому рассеянию.

$$W_{упр}(\vec{q},\omega)=\frac{2\pi}{\hbar}\delta\left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k_1}\right)\left|\overline{U}(\vec{q})\right|^2 e^{-Z(\vec{q})}\sum_{n,n_1}e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}+\frac{2\pi}{\hbar}\delta\left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k_1}\right)e^{-Z(\vec{q})}\cdot$$

$$\cdot\sum_n\overline{\left|\Delta U_n(\vec{q})\right|^2}\cdot 1$$

$$\sum_{n,n_1}e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}=\underbrace{\sum_n 1}_{N}\underbrace{\left(\sum_{\vec{n}'}e^{i\vec{q}\vec{n}'}\right)}=N^2\delta_{\vec{q}\vec{G}}$$

$$\vec{n}-\vec{n}_1\equiv\vec{n}'$$

при больших $\vec{q}$ экспонента сильно осциллирует и сумма $\to 0$;

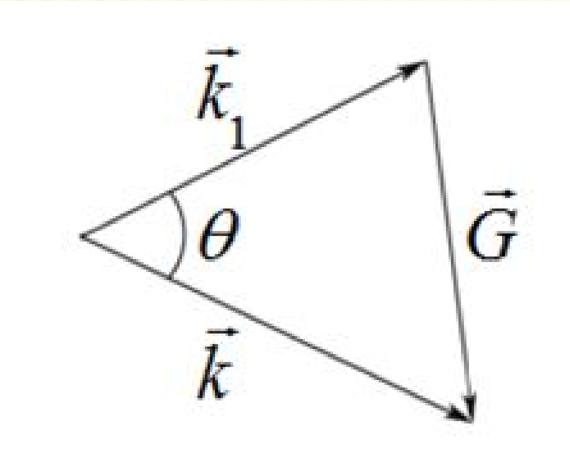
экспонента

не успевает много раз проосциллировать при $\vec{q}=0$ (но это нам не интересно: $\vec{q}=\vec{k}-\vec{k}_1=0\to\vec{k}=\vec{k}_1$ ничего не случилось), либо при $\vec{q}=\vec{G}$ (вектор обратной решетки)

$$W^{k}_{упр}(\vec{q},\omega)=\frac{2\pi}{\hbar}\delta\left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k_1}\right)\underbrace{\left|N\overline{U}(\vec{q})\right|}^{2}e^{-Z(\vec{q})}\delta_{\vec{q},\vec{G}}$$ - слагаемое отвечает когерентному рассеянию

значение, отнесенное к одной элементарной ячейке

$$\begin{cases}\varepsilon_k=\varepsilon_{k_1}\to k^2=k_1^2\\ \vec{q}=\vec{k}-\vec{k}_1=\vec{G}\end{cases}$$



$$\frac{G/2}{k}=\sin\frac{\Theta}{2}$$

$$\left.\begin{aligned}G&=\frac{2\pi}{a}\cdot m\\ k&=\frac{2\pi}{\lambda}\end{aligned}\right\}$$

$$\frac{(\pi/a)\cdot m}{\lambda}=\sin\frac{\Theta}{2}$$

$$\boxed{\frac{\left(\lambda/2\right)}{a}\cdot m=\sin\frac{\Theta}{2}}$$

(рассеяние Брегга-Вульфа)

получили условие интерференции на дифракционной решетке периода a