Лекция 13.

Упругое и неупругое когерентное рассеяние. Восстановление фононного спектра кристаллов по результатам неупругого однофононного рассеяния нейтронов. Времена жизни фононов.

Когерентное рассеяние:

В каждом акте рассеяния на атоме нейтронная волна рассеивается в одну и ту же фазу (решетка рассеивает как целое)

$\vec{k}_1 = \vec{k} - \vec{G}$ возведем в квадрат :

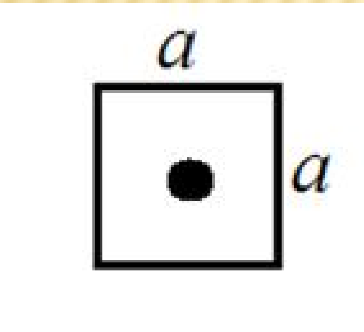
$$\cancel{k_1^2} = \cancel{k^2} - 2\left(\vec{k}\vec{G}\right) + G^2$$

$\boxed{\vec{G}(\vec{k} - \frac{\vec{G}}{2}) = 0}$ эквивалентное условие

(Условие рассеяния Брэгга-Вульфа)

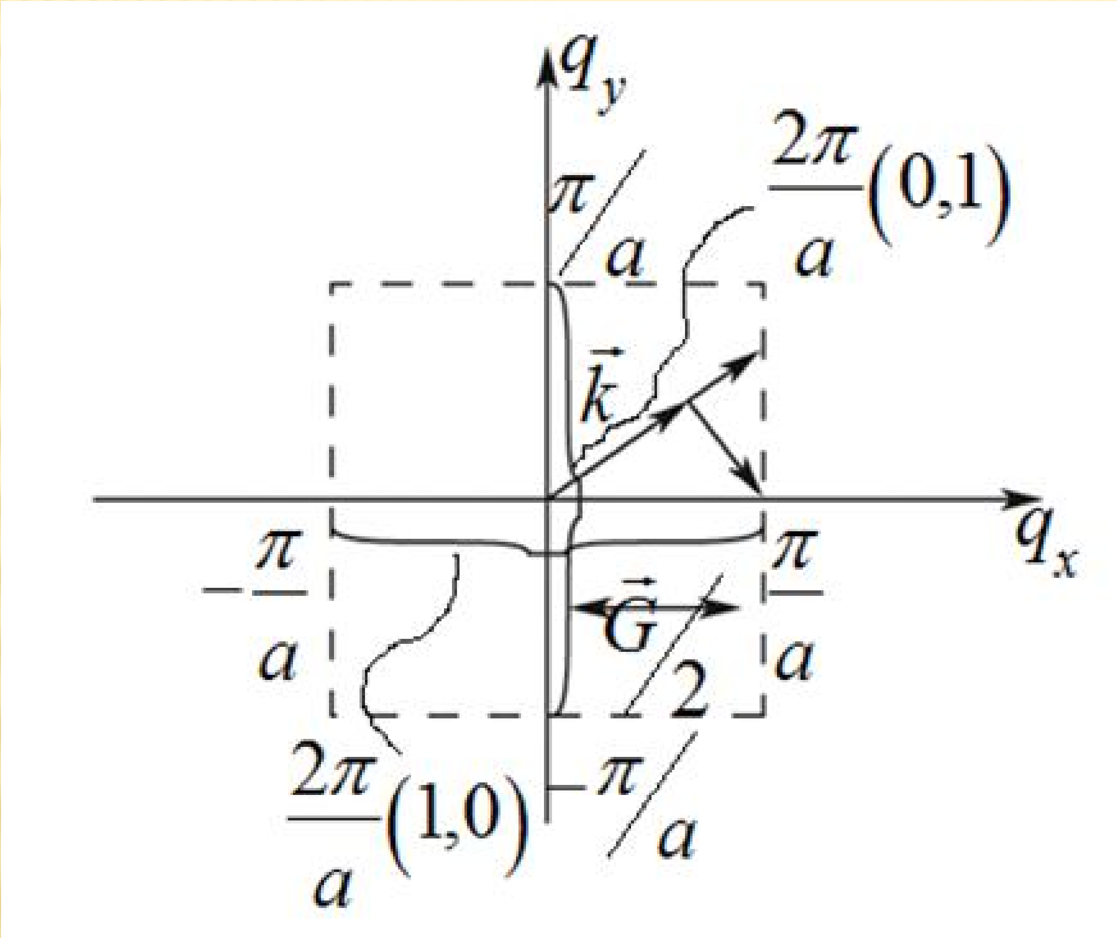
$\vec{G} = 2\pi(\vec{b}_1 m_1 + \vec{b}_2 m_2 + \vec{b}_3 m_3)$, где $\vec{b}_i$ - базисные вектора обратной решетки

(обозначения связаны с $\vec{a}_i$), m_i - целые числа

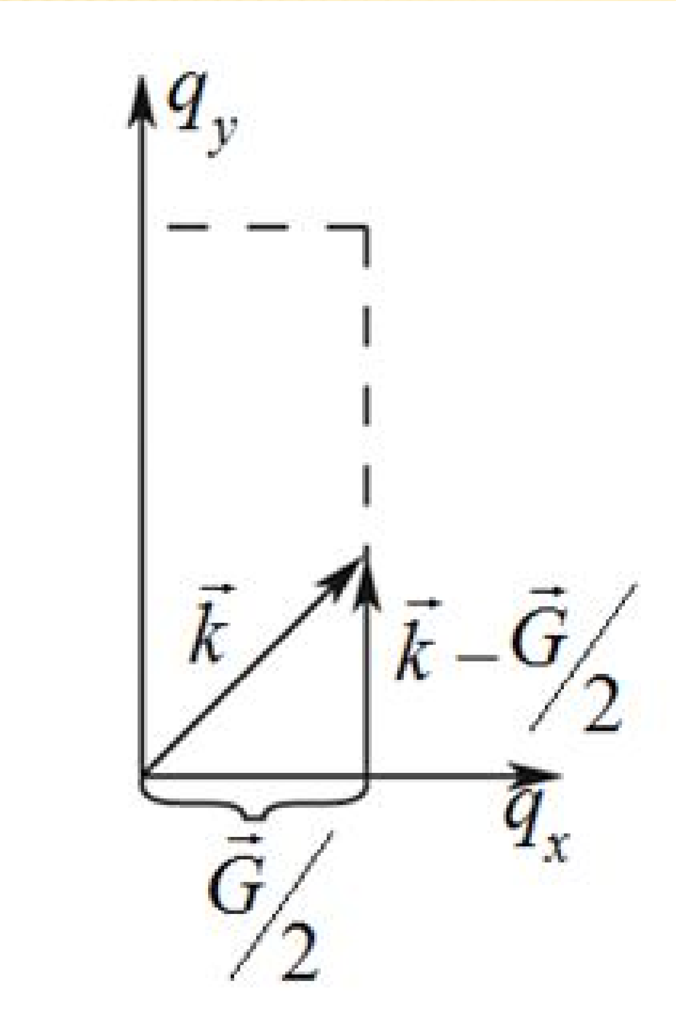


$$\vec{G} = 2\pi(\frac{m_1}{a}; \frac{m_2}{a})$$

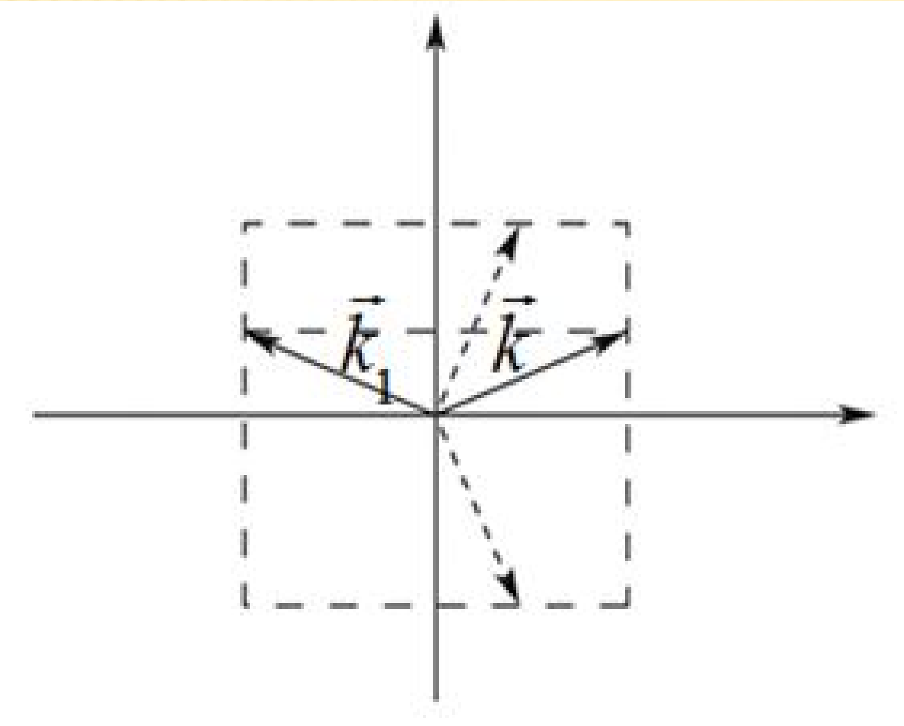
Чтобы $(\vec{k} - \frac{\vec{G}}{2})$ был $\perp$ $\vec{G}$, нужно, чтобы $\vec{k}$ точно попадал в сторону квадрата.



При вращении решетки вектор $\vec{k}$ «уходит» в сторону, рассеяние «исчезает». При повороте на 2π вектор $\vec{k}$ попадает на «стенку» 8 раз.



Когерентное рассеяние имеет пиковый характер; по измерению углов пиков рассеяния находят $\vec{G}$ и, тем самым появляется возможность восстановить структуру решетки.



Это справедливо и для рассеяния рентгеновских квантов.

$$W^{кг}_{упр}(\vec{q},\omega)=\frac{2\pi}{\hbar}\delta\left(\varepsilon_k-\varepsilon_{k_1}\right)\sum_n\overline{\left|\Delta\bigcup_n\left(\bar{q}\right)\right|^2}e^{-Z(\vec{q})}$$

Вклад в некогерентное рассеяние дают все $\vec{q}$; каждое ядро дает свой вклад независимо в меру своего отличия от среднего $\left(\Delta U_n(\vec{q})\right)$

Это фон; на этом фоне возникают пики упругого когерентного рассеяния.

$$W_{неупр}\left(\vec{q},\omega\right)=\frac{1}{\hbar^2}\sum_{n,n_1}\left[\left|\overline{U(\vec{q})}\right|^2+\delta_{nn_1}\left|\Delta U_n(\vec{q})\right|^2\right]e^{-Z(\vec{q})}e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}D_{nn_1}(\omega)$$

$\downarrow$ когерентное слагаемое

$\downarrow$ дает вклад только в меру отличия n_1 от n (некогерентная часть)

$$W_{ну}^{кг}\left(\vec{q},\omega\right)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\overline{U}(\vec{q})\right|^2 e^{-Z(\vec{q})}\sum_{n,n_1}e^{i\vec{q}\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}D_{n_1n}(\omega)$$

$$D_{n_1n}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}dte^{i\omega t}D_{n_1n}(t)$$

$$D_{n_1n}(t)\equiv\left\langle\left\langle\left(\vec{q}\widehat{\vec{u}_{n_1}}(t)\right)\left(\vec{q}\widehat{\vec{u}_n}(0)\right)\right\rangle\right\rangle=q^\alpha q^\beta\left\langle\left\langle\hat{u}_{n_1}^\alpha(t)\hat{u}_n^\beta(0)\right\rangle\right\rangle=$$

$$=q^\alpha q^\beta\left\langle\left\langle\sqrt{\frac{\hbar}{2MN}}\sum_{\xi_1}(l_{\xi_1}^\alpha e^{i\vec{f}_1\vec{n}_1-i\omega_{\xi_1}t}\hat{b}_{\xi_1}+l_{\xi_1}^* e^{-i\vec{f}_1\vec{n}_1+i\omega_{\xi_1}t}\hat{b}_{\xi_1}^+)\frac{1}{\sqrt{\omega_{\xi_1}}}\times\right.\right.$$

$$\left.\left.\times\sqrt{\frac{\hbar}{2MN}}\sum_{\xi}\frac{1}{\sqrt{\omega_\xi}}(l_\xi^\beta e^{i\vec{f}\vec{n}}\cdot 1\cdot\hat{b}_\xi+l_\xi^{*\beta}e^{-i\vec{f}\vec{n}}\cdot 1\cdot\hat{b}_\xi^+)\right\rangle\right\rangle$$

$$D_{n_1n}(t)=q^\alpha q^\beta\left\{l_{\xi_1}^{*\alpha}l_\xi^\beta e^{i(-\vec{f}_1\vec{n}_1+\vec{f}\vec{n})}e^{i\omega_{\xi_1}t}\left\langle\left\langle\hat{b}_{\xi_1}^+\hat{b}_\xi\right\rangle\right\rangle+\right.$$

при раскрытии скобок возникает 4 слагаемых; при усреднении $b_{\xi_1} b_\xi$ и $b^+_{\xi_1} b^+_\xi$ дают ноль, остаются только перекрестные слагаемые

$$+l^\alpha_{\xi_1} l^{*\beta}_\xi e^{i(\vec{f}_1 \vec{n}_1 - \vec{f}\vec{n})} e^{-i\omega_{\xi_1} t} \left\langle\left\langle \hat{b}_{\xi_1} \hat{b}^+_\xi \right\rangle\right\rangle \Big\}$$

Если индексы разные, то среднее от произведения есть произведение средних, тогда это ноль.

Т.е. вклад дают только $\xi = \xi_1$

$$\left\langle\left\langle \hat{b}_{\xi_1} \hat{b}^+_\xi \right\rangle\right\rangle = \delta_{\xi_1 \xi} \left(\bar{n}_\xi + 1\right)$$

$$\left\langle\left\langle \hat{b}^+_{\xi_1} \hat{b}_\xi \right\rangle\right\rangle = \delta_{\xi_1 \xi} \bar{n}_\xi$$

$$D_{n_1 n}(t) = q^\alpha q^\beta \sum_\xi \left\{ l^{*\alpha}_{\xi_1} l^\beta_\xi e^{i(-\vec{n}_1 + \vec{n})\vec{f}} e^{i\omega_\xi t} \bar{n}_\xi + l^\alpha_\xi l^{*\beta}_\xi e^{i(\vec{n}_1 - \vec{n})\vec{f}} e^{-i\omega_\xi t} (\bar{n}_\xi + 1) \right\} \frac{\hbar}{2NM\omega_\xi}$$

$$D_{n_1 n}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} D_{n_1 n}(t) = \sum_\xi \left| \vec{q}\vec{l}_\xi \right|^2 \frac{\hbar}{2NM\omega_\xi} \times$$

$$\times \left\{ e^{i\vec{f}(-\vec{n}_1 + \vec{n})} \bar{n}_\xi \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{dt e^{i(\omega + \omega_\xi)t}}_{2\pi\delta(\omega + \omega_\xi)} + e^{i\vec{f}(\vec{n}_1 - \vec{n})} \left(\bar{n}_\xi + 1\right) \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{dt e^{i(\omega - \omega_\xi)t}}_{2\pi\delta(\omega - \omega_\xi)} \right\}$$

$$W_{ну}^{кг}\left(\overrightarrow{q,\omega}\right)=\frac{2\pi}{\hbar^2}\left|\overline{U}(\vec{q})\right|^2 e^{-Z(\vec{q})}\sum_{\xi}\left|\vec{q}\vec{l}_{\xi}\right|^2\frac{\hbar}{2NM\omega_{\xi}}\left\{\bar{n}_{\xi}\delta\left(\omega+\omega_{\xi}\right)\left[\sum_{n,n_1}e^{i\left(\vec{q}+\vec{f}\right)\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}\right]+\right.$$

$$\left.+\left(\bar{n}_{\xi}+1\right)\delta\left(\omega-\omega_{\xi}\right)\left[\sum_{n,n_1}e^{i\left(\vec{q}-\vec{f}\right)\left(\vec{n}-\vec{n}_1\right)}\right]\right\}$$

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

$$\sum e^{i\left(\vec{q}+\vec{f}\right)\vec{n}'}=N^2\delta_{\vec{q}+\vec{f},\vec{G}}=N^2\delta_{\vec{f},\vec{G}-\vec{q}}$$

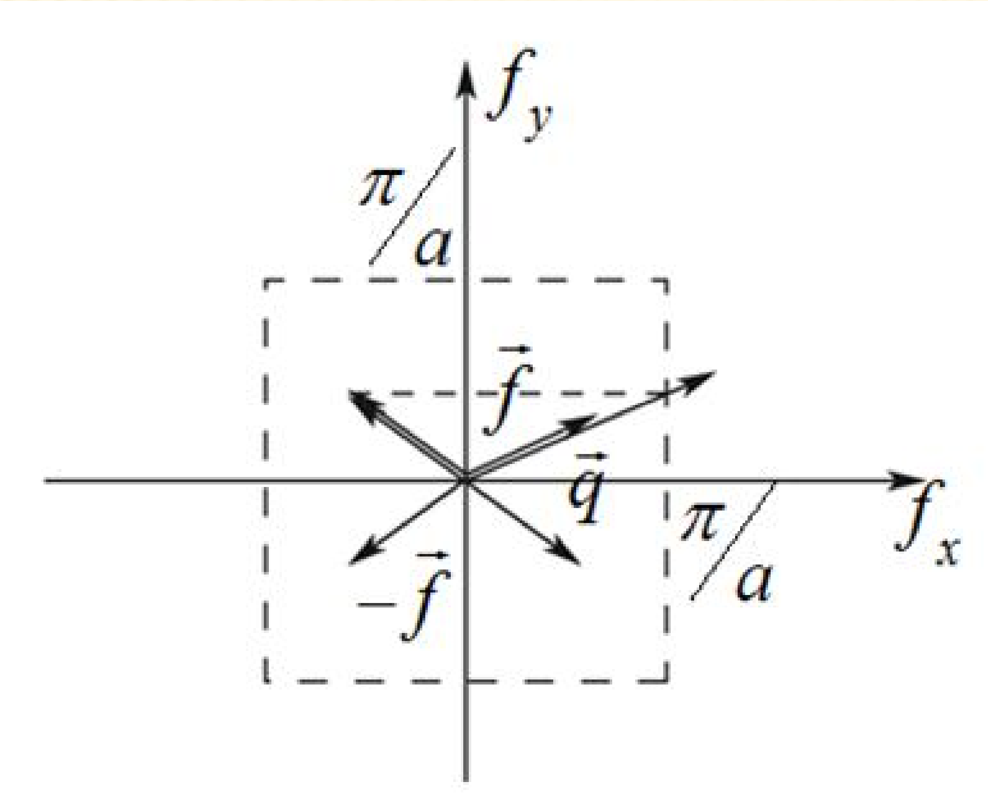
$$\sum_{\vec{n},\vec{n}'}e^{i\left(\vec{q}-\vec{f}\right)\vec{n}'}=N^2\delta_{\vec{q}-\vec{f},\vec{G}}=N^2\delta_{\vec{f},\vec{q}-\vec{G}}$$

$$W_{ну}^{кг}\left(\overrightarrow{q,\omega}\right)=\frac{2\pi}{\hbar^2}\left|\overline{U}(\vec{q})\right|^2 e^{-Z(\vec{q})}\sum_{s}\frac{\cancel{\hbar}N^{\cancel{2}}}{2\cancel{N}M}\left\{\frac{\bar{n}\left(\omega_s\left(\vec{G}-\vec{q}\right)\right)}{\omega_s\left(\vec{G}-\vec{q}\right)}\left|\vec{q}\vec{l}_s\left(\vec{G}-\vec{q}\right)\right|^2\delta\left(\omega+\omega_s\left(\vec{G}-\vec{q}\right)\right)\right.$$

$$\left.+\frac{\bar{n}\left(\omega_s\left(\vec{q}-\vec{G}\right)\right)+1}{\omega_s\left(\vec{q}-\vec{G}\right)}\left|\vec{q}\vec{l}_{s}(\vec{q}-\vec{G})\right|^2\delta\left(\omega-\omega_s\left(\vec{q}-\vec{G}\right)\right)\right\}$$

$\vec{q}-\vec{G}$ и $\vec{G}-\vec{q}$ будут равняться $\vec{f}$ только в случае, когда они оказываются в первой ячейке обратной решетки (область однозначности $\vec{f}$ ограничено одной ячейкой)

вектор $\vec{q}$ - это тот импульс, который нейтрон передал кристаллу. Если $\vec{q}$ »вылезает» за пределы одной ячейки, то нужно из него вычесть $\vec{G}$, чтобы «вернуть» $\vec{q}$ внутрь; тогда уже приравнивать $\vec{f}=\vec{q}$ (или $\vec{f}=-\vec{q}$). Если $\vec{q}$ попадает в первую ячейку, $\vec{G}=0 \Rightarrow$ в полученной формуле используется не произвольное $\vec{G}$, а они строго определяются вектором $\vec{q}$.



С другой стороны, все фотонные функции, зависящие от векторов периодические, и период можно «отбросить» (т.е. выкинуть $\vec{G}$).

Но тогда мы не получим значений функций от $\vec{q}$, не попавшего в ячейку (т.к. мы его не «вернули»).

$\omega\left(\vec{G}-\vec{q}\right)\to\omega\left(-\vec{q}\right)=\omega\left(\vec{q}\right)$ в силу «четности»;

$\vec{l}_s\left(\vec{G}-\vec{q}\right)\to\vec{l}_s\left(-\vec{q}\right)=\vec{l}_s^{\,*}(\vec{q})$, но это уже не важно, т.к. у нас только квадрат модуля.

Получим:

$$W_{ну}^{кг}\left(\overrightarrow{q,\omega}\right)=\frac{2\pi}{\hbar^2}\left|\overline{U}(\vec{q})\right|^2 e^{-Z(\vec{q})}\sum_s\frac{N}{2M\omega_s(\vec{q})}\left|\vec{q}\vec{l}_s\left(\vec{q}\right)\right|\times$$

$$\times\left\{\overline{n}\left(\omega_s\left(\vec{q}\right)\right)\underbrace{\delta\left(\omega+\omega_s\left(\vec{q}\right)\right)}_{\omega=\frac{\varepsilon_k-\varepsilon_{k_1}}{\hbar}=-\omega_s\left(\vec{q}\right)}+\left(\overline{n}\left(\omega_s\left(\vec{q}\right)\right)+1\underbrace{\left(\omega-\omega_s\left(\vec{q}\right)\right)}_{\omega=\frac{\varepsilon_k-\varepsilon_{k_1}}{\hbar}=\omega_s\left(\vec{q}\right)}\right\}$$

$\boxed{\varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} - \hbar\omega_s\left(\vec{q}\right)}$ $\boxed{\varepsilon_k = \varepsilon_{k_1} + \hbar\omega_s\left(\vec{q}\right)}$