

НЕЙТРОННОЕ РАССЕЯНИЕ ОСНОВНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Зимняя школа ПИЯФ

Малеев С.В.

С чем мы имеем дело в физике конденсированного состояния?

Расстояния: $0.1 \text{ nm} \div > 1 \mu\text{m}$

Энергии: $1 \mu\text{eV} \div 100 \text{ meV}$ ($1 \text{ meV} = 11.62 \text{ K} = 8.071 \text{ cm}^{-1} = 8.645 \text{ T}$)

Нейтроны: Длина волны $\lambda = 2\pi / k = 0.01 \text{ nm} \div 3 \text{ nm}$.

Энергия: $E = 300 \text{ meV} \div 0.3 \mu\text{eV}$

В опытах по рассеянию интересен размер изучаемого объекта. Он характеризуется величиной, обратной переданному при рассеянии импульсу: $R \sim 1/Q$; $Q = |\vec{k}_i - \vec{k}_f|$ где

\vec{k}_i и \vec{k}_f импульсы нейтрона до и после рассеяния.

Q меняется в пределах $(10^{-1} \div 10^{-5}) \text{ nm}^{-1}$.

ЯДЕРНОЕ РАССЕЯНИЕ

В общем случае амплитуда нейтрон-ядерного рассеяния равна

$$f = a + b(\vec{J} \bullet \vec{s})$$

где \vec{J} и \vec{s} спины ядра и нейтрона соответственно, а и b константы порядка 10^{-13} см .

Спин-зависящая часть амплитуды для неполяризованных ядер обычно не существенна (исключение-водород). Мы ее рассматривать не будем. Сечение рассеяния на одном ядре $d\sigma/d\Omega = |a|^2$, а полное сечение $\sigma = 4\pi |a|^2$.

Нас интересует система ядер, и мы должны учитывать интерференцию возникающую при рассеянии на разных ядрах. Соответствующая амплитуда

$$F(\vec{Q}) = \sum a_l e^{i\vec{Q}\vec{R}_l} \quad \text{где } l \text{ нумерует ядра } \vec{R}_l \text{ их координаты,}$$
$$\vec{Q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f \text{ импульс переданный нейтроном рассеивателю.}$$

Для дальнейшего анализа необходимо сделать те или иные предположения о свойствах системы.

Три класса веществ:

- Аморфные вещества (стекла); Атомы колеблются вокруг случайных позиций.
- Газы и жидкости; Атомы случайно блуждают.
- Мы здесь ограничимся кристаллами

УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ В КРИСТАЛЛАХ

Кристалл состоит из одинаковых элементарных ячеек, содержащих несколько ($\nu \geq 1$) атомов, совмещающихся друг с другом при сдвиге на один или несколько основных периодов решетки: $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.

Другими словами, если забыть о границах, кристалл переходит сам в себя при сдвиге на вектор решетки

$$\underline{\vec{R} = g\vec{a} + h\vec{b} + k\vec{c}}, \quad \text{где } g, h, k \text{ целые числа.}$$

В результате амплитуду рассеяния можно представить в виде $F(\vec{Q}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{Q}\vec{R}} f(\vec{Q}); \quad f(\vec{Q}) = \sum_{\nu} a_{\nu} e^{i\vec{Q}\vec{r}_{\nu}}$

Где $f(\vec{Q})$ называют структурным фактором кристалла, он не зависит от \vec{R} .

ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА

Сумма по узлам решетки $\sum e^{i\vec{Q}\vec{R}}$ обладает свойством :

Если $\vec{Q} = m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 = \vec{K}$, где m, n, l целые числа

$$\vec{b}_1 = 2\pi[\vec{b} \times \vec{c}] / V; \vec{b}_2 = 2\pi[\vec{c} \times \vec{a}] / V; \vec{b}_3 = 2\pi[\vec{a} \times \vec{b}] / V,$$

$V = (\vec{a}[\vec{b} \times \vec{c}])$ объем элементарной ячейки ,

то для всех \vec{R} $\vec{Q}\vec{R} = 2\pi \times \text{целое число}$ и сумма равна полному числу $N \rightarrow \infty$ ячеек в кристалле.

Если же \vec{Q} даже слегка отличается от \vec{K} то разные члены суммы имеют разные знаки и она равна НУЛЮ.

Совокупность векторов \vec{K} со всеми m, n, l образуют
ОБРАТНУЮ решетку кристалла.

Таким образом упругое рассеяние имеет место только при \vec{Q} равном векторам обратной решетки.

Соответствующие направления называются Брэгговскими пиками.

Обычно делают замену, верную при $N \gg 1$.

$$\frac{1}{N} \sum e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \rightarrow \frac{(2\pi)^3}{V} \delta(\mathbf{Q} + \mathbf{K})$$

и для упругого рассеяния нормированного на одну элементарную ячейку получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^3}{V} |f(\mathbf{Q})|^2 \delta(\mathbf{Q} + \mathbf{K})$$

Здесь $|f(\mathbf{Q})|^2$ определяет интенсивность Брэгговского пика.

Может оказаться, что для некоторых пиков $|f(\mathbf{K})|^2 = 0$

Такие рефлекссы называются запрещенными.

УСЛОВИЕ БРЭГГА

Из равенства $\vec{Q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f = -\vec{K}$ и упругости рассеяния $k_i = k_f$ следует $\vec{K}\vec{k}_i = -K^2 / 2$ или $\cos \Psi = -K / 2k_i$,

Где Ψ угол между направлением пучка и вектором обратной решетки. Поэтому K отражение может наблюдаться только если $k_i > K / 2$.

Длина минимального вектора обратной решетки

$$K_{\min} = 2\pi / a_{\max},$$

где a_{\max} максимальный основной вектор решетки.

Поэтому если $k_i < \pi / a_{\max}$ ($\lambda > 2a_{\max}$)

Брэгговское рассеяние невозможно.

Интенсивность Брэгговского пика

Интеграл $\int d\Omega \delta(\vec{k}_i - \vec{k}_f + \vec{K})$ расходится.

Интенсивность в пике порядка числа ячеек N .

Можно показать, что угловая ширина пика порядка $N^{-1/3}$.

Поэтому полная интенсивность рассеяния элементарной ячейкой порядка $N^{1/3}$, а всем кристаллом $N^{4/3}$.

В действительности это не так по двум причинам:

- Обычно угловая ширина пучка больше, чем $N^{-1/3}$ и не все нейтроны рассеиваются.
- Монокристалл состоит из слегка разориентированных блоков (кристаллитов).

Теория не описывает рассеяние в идеальных кристаллах.

В этом случае работает теория динамической дифракции.

РАССЕЯНИЕ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

Поликристаллы и порошки состоят из мелких произвольно ориентированных кристаллов и надо усреднить сечение Брэгговского рассеяния по всем их ориентациям. В результате

$$\overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}} = \frac{2\pi}{V K^2} \overline{|f(\mathbf{Q})|^2} \delta(Q - K)$$

Теперь условие Брегга выглядит проще $Q = 2k_{in} \sin \vartheta / 2 = K$, где ϑ угол рассеяния.

Таким обрезаем картина рассеяния-это круги с радиусами определяемыми длинами векторов K Полное сечение имеет вид

$$\underline{\sigma_K = \frac{4\pi^2 n}{V K k_{in}} \overline{|f(\mathbf{Q})|^2}}$$

где n число векторов с длиной K .

КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ

Атомы в кристаллах колеблются вокруг равновесных позиций. Обычно это малые, гармонические колебания.

Исключения: Окрестности структурных переходов и колебания в кристаллах изотопов гелия.

С учетом колебаний $\vec{R}_l \rightarrow \vec{R}_l + \vec{u}_l; \underline{\langle \vec{u}_l \rangle = 0}$.

Возникает два явления:

1. Уменьшение интенсивности Брэгговских пиков.
2. Неупругое рассеяние.

В гармоническом приближении колебания описываются с помощью квазичастиц, фононов, характеризующихся

Квазиимпульсом $q = q + K$

Частотами $\omega_j(q) = \omega_j(q + K)$

Поляризациями $e_j(q) = e_j(q + K)$

Вектор q лежит в первой зоне Бриллюэна

$$-b_i/2 < q_i < b_i/2; \quad i = 1, 2, 3.$$

Всего имеется 3ν фононных мод (ветвей спектра):
Различают три акустические ветви, одну продольную и две поперечных, описывающих совместные колебания соседних ячеек. Для них $\omega(\vec{q}) \sim q$.

Оптические ветви это колебания атомов относительно друг друга в одной ячейке и $\omega(0) \neq 0$.

Нейтроны неупруго рассеиваются с испусканием или поглощением одного фонона (многофононные процессы малы).



Законы сохранения $Q = k_i - k_f = -K \pm q; \quad \omega = E_i - E_f = \pm \omega_j(\mathbf{q})$.

Появление вектора обратной решетки \mathbf{K} называется процессом переброса, благодаря которому около каждого Брэгговского пика имеется неупругое рассеяние..

Законы сохранения позволяют изучать дисперсию фононов $\omega_j(\mathbf{q})$: Фиксируя Q измерять зависимость от переданной энергии (ω -скан) или, фиксируя переданную энергию измерять зависимость от Q (Q -скан).

Как вычислить сечение нупругого рассеяния ?

Вектор смещения это сумма по всем модам

$$\mathbf{u}_\nu(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{q},j} \sqrt{\frac{1}{2NM\omega(\mathbf{q},j)}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} \mathbf{e}_j^\nu(\mathbf{q}) (c_{\mathbf{q},j} + c_{-\mathbf{q},j}^+) \quad M \text{ масса ячейки}$$

Оператор c^+ рождает фонон, c -уничтожает:

$\langle n+1 | c^+ | n \rangle = n+1; \langle n-1 | c | n \rangle = n$, где n число фононов.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega E_f} = \frac{|\mathbf{Q}\mathbf{e}_j(\mathbf{q})|^2}{2M\omega_{j,\mathbf{q}}} |f(\mathbf{Q})|^2 \frac{k_f}{k_i}$$

$$\begin{cases} (N_{j,\mathbf{q}} + 1)\delta(E_i - E_f - \omega_{j,\mathbf{q}}), & \text{emission;} \\ N_{j,\mathbf{q}}\delta(E_i - E_f + \omega_{j,\mathbf{q}}), & \text{absorbtion;} \end{cases}$$

$$N_{j,\mathbf{q}} = \frac{1}{e^{\omega_{j,\mathbf{q}}/T} - 1} \quad \text{функция Планка, . .}$$

ЗАМЕЧАНИЯ:

1. Реально фононы имеют конечное время жизни и дельта-функции слегка размазаны, однако, как правило точность эксперимента недостаточна для измерения этого времени.

2. Сечение увеличивается с ростом переданного импульса.

В ряде случаев это позволяет отличить фононное рассеяние от магнитного, уменьшающегося с ростом Q

ТЕПЛОВОЙ ФАКТОР ДЕБАЯ_ВАЛЛЕРА

Колебания атомов уменьшают сечение упругого рассеяния. Это описывается введением в структурный фактор дополнительного множителя

$$f(\mathbf{Q}) = \sum_{\nu} a_{\nu} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_{\nu}} \rightarrow \sum_{\nu} a_{\nu} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_{\nu} - W_{\nu}}$$

$$W_{\nu} = \sum \frac{|\mathbf{Q}\mathbf{e}_j^{\nu}|^2}{2NM\omega_{j,\mathbf{q}}} (N_{j,\mathbf{q}} + 1/2)$$

Из за нулевых колебаний $W \neq 0$ и при $T=0$.

В кубических кристаллах $W \sim Q^2$, в тетрагональных

$$W = Q_{\parallel}^2 W_{\parallel} + Q_{\perp}^2 W_{\perp} \text{ и т.д.}$$

МАГНИТНОЕ РАССЕЯНИЕ

Магнитное рассеяние является результатом взаимодействия магнитных моментов нейтрона и ионов

Амплитуда рассеяния

$$F_M(\mathbf{Q}) = r \sum e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_m} f_M(\mathbf{Q}) [(\mathbf{M}_m \boldsymbol{\sigma}) - (\mathbf{M}_m \mathbf{e})(\mathbf{e} \boldsymbol{\sigma})]$$

Здесь $r = 5.4 \times 10^{-13} \text{ cm}$, $\vec{S} = \boldsymbol{\sigma} / 2$ спин нейтрона.

\mathbf{R}_m координаты ионов, $f(\mathbf{Q})$ его форм-фактор.

Момент иона $\mathbf{M}_m = \begin{cases} \mathbf{S}_m, & d - \text{ions}; \\ \mathbf{J}_m, & f - \text{ions}. \end{cases}$

$\mathbf{e} = \mathbf{Q}/Q$ единичный вектор вдоль переданного импульса.

ОСНОВНЫЕ ОСОБЕННОСТИ

1. $f_M(\vec{Q}), f_M(0) = 1$ и убывает при $Q > 1/R_I$ где R_I радиус иона.

2. Амплитуда пропорциональна спину нейтрона. Поэтому имеют место явления связанные с его поляризацией

$$\mathbf{P} = \langle \vec{\sigma} \rangle .$$

Сечение может зависеть от \mathbf{P} . Поляризация может возникать и поворачиваться при рассеянии.

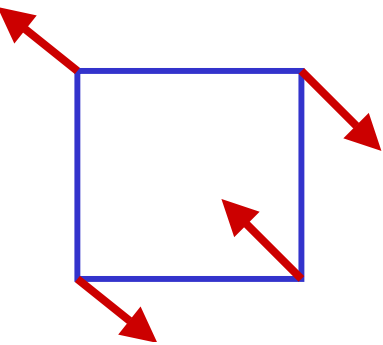
3. Амплитуда содержит только перпендикулярные переданному импульсу компоненты магнитных моментов ионов. Эта перпендикулярность остается и в пределе $Q \rightarrow 0$. и является следствием дальнего действия магнитного взаимодействия

МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ

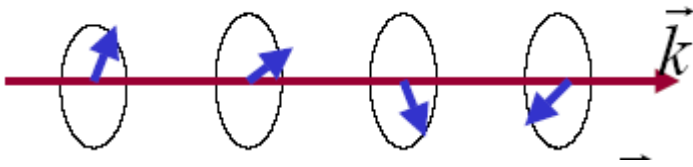
Существует огромное количество магнитных структур, исследуемых с помощью нейтронов. Классиком в их расшифровке является J. Brown. Как иллюстрацию мы рассмотрим простейшие.



Ферромагнетики, все спины параллельны.



Антиферромагнетики, соседние спины антипараллельны.



Магнитные спирали. Спины вращаются направо или налево в направлении вектора \vec{k} . Период вращения $2\pi / k \gg a$, где a постоянная решетки.

УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ, ФЕРРОМАГНЕТИКИ

Магнитная решетка совпадает с ядерной и в случае одного атома в ячейке (железо) для фиксированного вектора \mathbf{K}

$$a \rightarrow a + r f_M(\mathbf{K}) [(\mathbf{S}\sigma) - (\mathbf{SK})(\mathbf{K}\sigma)/K^2]$$

В результате в сечении вместо a^2 стоит множитель

$$a^2 + 2ar f_M(\mathbf{K}) \left[(\mathbf{S}\mathbf{P}_0) - \frac{(\mathbf{SK})(\mathbf{K}\mathbf{P}_0)}{K^2} \right] + r^2 f_M^2(\mathbf{K}) \left[\mathbf{S}^2 - \frac{(\mathbf{SK})^2}{K^2} \right]$$

Второе слагаемое это интерференция ядерного и магнитного рассеяния, а третье — чисто магнитное. В ненамагниченном образце интерференция исчезает а последняя скобка равна 2/3.

Если $\mathbf{S} \parallel \mathbf{K}$ то магнитный вклад исчезает как и надо.

ПОЛЯРИЗАЦИЯ ПРИ РАССЕЯНИИ

Рассмотрим опять амплитуду

$$a + r f_M(\mathbf{K}) [(\mathbf{S}\sigma) - (\mathbf{SK})(\mathbf{K}\sigma)/K^2]$$

Пусть для нейтронов например со спином вниз (-) эта сумма равна нулю. Они не рассеиваются, а амплитуда рассеяния со спином вверх (+) равна $2a$.

В результате поляризация нейтронов рассеянных со спином вверх

$$P_+ = \frac{\sigma_+ - \sigma_-}{\sigma_+ + \sigma_-} = 1,$$

где σ_{\pm} соответствующие сечения.

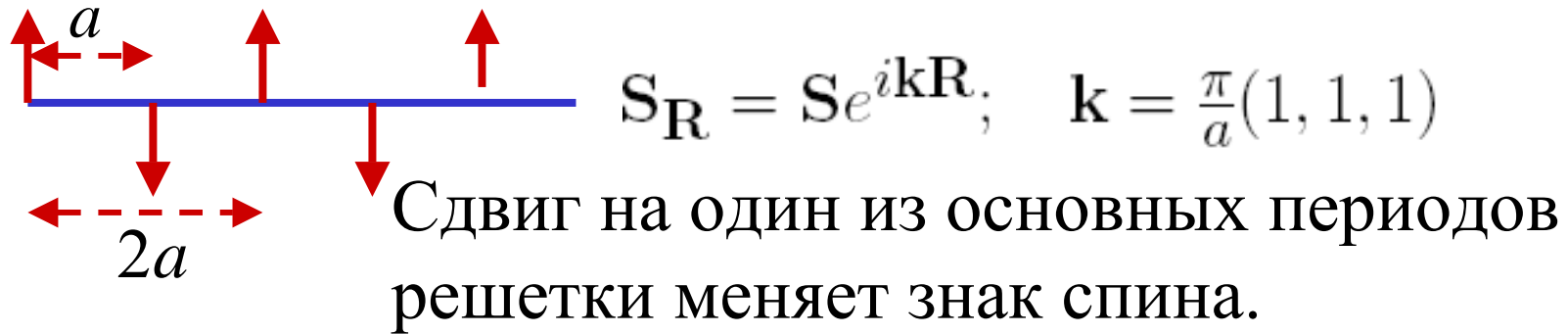
Это старый способ поляризации нейтронов.

Пример: отражение (220) в магнетите Fe_3O_4 .

Эта поляризация является результатом интерференции ядерного и магнитного рассеяния, возможной благодаря совпадению обеих структур. Если структуры различны – интерференция невозможна. Однако есть другой канал возникновения поляризации: спиновая киральность, или другими словами винтовая структура

УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ, АНТИФЕРРОМАГНЕТИКИ

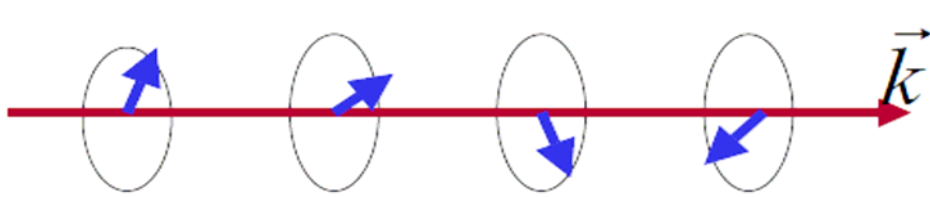
Рассматривается классический двух подрешеточный антиферромагнетик. Период магнитной структуры в два раза больше, чем ядерной



Векторы обратной магнитной решетки $\mathbf{K}_A = \mathbf{K} \pm \mathbf{k}$ не совпадают с ядерными. Интерференции нет, поляризация не возникает, но при магнитном Брэгговском рассеянии поворачивается на 180° вокруг вектора

$$\mathbf{S}_\perp = \mathbf{S} - \frac{(\mathbf{S}\mathbf{K}_A)\mathbf{K}_A}{K_A^2}$$

УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ, СПИРАЛИ



Вращение в плоскости
перпендикулярной вектору
спирали \mathbf{k} . *Ho, Dy, MnSi, FeGe*.

$$\mathbf{S}_{\mathbf{R}} = S(\hat{a} \cos \mathbf{kR} + \hat{b} \sin \mathbf{kR}) = \\ (S/2)[(\hat{a} - i\hat{b})e^{i\mathbf{kR}} + (\hat{a} + i\hat{b})e^{-i\mathbf{kR}}]; \quad \hat{a} \times \hat{b} = \hat{c}.$$

Две возможности: правя спираль, вектор \mathbf{k} параллелен \hat{c} .

левая спираль, вектор \mathbf{k} антипараллелен \hat{c}

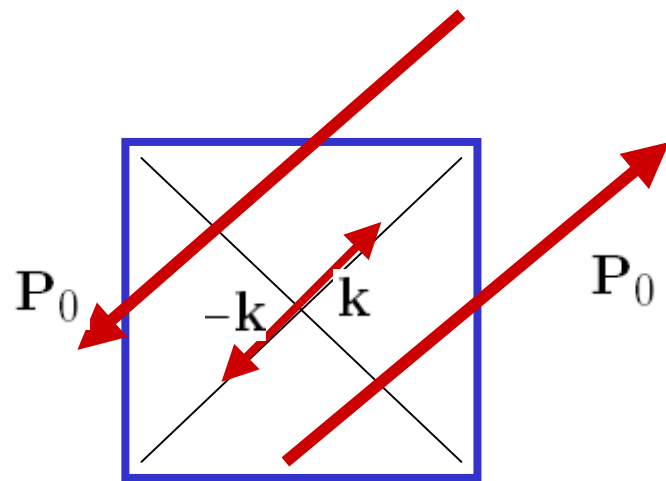
Поляризованные нейтроны позволяют
определить тип спирали.

Другие спирали: В мультиферроиках вектор \mathbf{k}
лежит в плоскости вращения

Если период спирали большой, достаточно рассмотреть рассеяние на малые углы $\mathcal{G} = k / k_i$.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^3 (Sr)^2}{2V} \{ [1 + (\mathbf{P}_0 \mathbf{Q})(\mathbf{Q} \hat{c})] \delta(\mathbf{Q} + \mathbf{k}) + [1 - (\mathbf{P}_0 \mathbf{Q})(\mathbf{Q} \hat{c})] \delta(\mathbf{Q} - \mathbf{k}) \}$$

$$\hat{a} \times \hat{b} = \hat{c}. \text{ это винт!}$$



Пусть $\mathbf{P}_0 \parallel \mathbf{k}$. Правая спираль $\hat{c} \parallel \mathbf{k}$

Первое слагаемое удваивается,
второе 0!

Левая спираль $\hat{c} \parallel (-\mathbf{k})$

Первое слагаемое 0!

Меняем знак поляризации-все наоборот.

Энергия кристалла не должна зависеть от направления вращения спирали. Поэтому реальный кристалл должен состоять из правых и левых доменов и зависимость от поляризации отсутствовать. Это так и есть в Dy и Ho .

В $CsMnBr_3$ небольшая зависимость от поляризации была обнаружена и объяснена случайной разницей правых и левых доменов.

В Ho такая разность была достигнута путем охлаждения скрученного образца ниже точки перехода.

ЗАГАДКА ПРИРОДЫ.

В $MnSi$ наблюдается только ЛЕВАЯ спираль.

В $Fe_{1-x}Co_xSi$ левая спираль переходит в правую при $x \approx 0.2$.

НЕУПРУГОУ РАССЕЯНИЕ

В магнитоупорядоченных веществах основным возбуждениями являются слабо затухающие квазичастицы спиновые волны или магноны. Их измерения также, как и фононы. Единственное отличие: В законах сохранения надо пользоваться векторами магнитной структуры.

В качестве примера приведем ферромагнетики..

$$\frac{d\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{r^2 S |f_M(\mathbf{Q})|^2 k_f}{2} \frac{1}{k_i} \frac{1 - \exp(-\omega/T)}{[\delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{Q}}) - \delta(\omega + \epsilon_{\mathbf{Q}})]}$$

где переданная энергия $\omega = E_i - E_f$.

Вблизи от Брэгга $\epsilon_{\mathbf{Q}} \sim (\mathbf{Q} - \mathbf{K})^2$

Аналогичные формулы есть и в других случаях.
Но бывает, что квазичастиц нет. Например выше температуры фазового перехода второго рода. В этом случае вблизи будущих Брэгговских пиков возникают критические флуктуации. Современная теория (скелинг) предсказывает величину характерной энергии этих флуктуаций в зависимости от близости к переходу и расстоянию до Брэгга, но не дает их формы.

В этом случае выражают сечение неупругого рассеяния через мнимую часть магнитной восприимчивости

$$\chi_{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) = i \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle [\mathbf{S}_{\mathbf{Q}}^{\alpha}(t), \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}}^{\beta}(0)] \rangle$$

$$\alpha, \beta = x, y, z; [A, B] = AB - BA.$$

При $\mathbf{Q}=0$, это обычная магнитная восприимчивость.

Сечение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega d\omega} = r^2 |f_M(\mathbf{Q})|^2 \frac{\text{Im} \chi_{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) (\delta_{\alpha\beta} - \hat{e}_{\alpha} \hat{e}_{\beta})}{1 - e^{-\omega/T}}$$

СПИНОВАЯ КИРАЛЬНОСТЬ


Эта формула для сечения верна, если тензор восприимчивости симметричен $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\beta\alpha}$

Если есть антисимметричная часть

$$\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\alpha\beta}^S + \chi_{\alpha\beta}^A; \quad \underline{\chi_{\alpha\beta}^A = -i_{\alpha\beta\gamma} \mathbf{C}_\gamma}$$

\mathbf{C} вектор киральности. Киральное сечение

$$\left[\frac{d\sigma}{d\Omega d\omega} \right]_C = r^2 |f_M(\mathbf{Q})|^2 \frac{2(\mathbf{P}_0 \hat{e})(\hat{e} \text{Im} \mathbf{C}(\mathbf{Q}, \omega))}{1 - e^{-\omega/T}}$$

Оно появляется если есть винт: магнитное поле
(намагниченность), спираль, вектор Дзялошинского. 

Моя лекция в прошлом году.