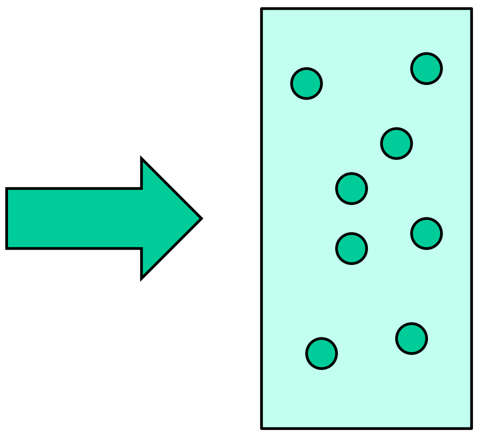
Учет спина нейтрона в теории многократного малоуглового рассеяния.

Д.В. Львов, Ф.С. Джепаров

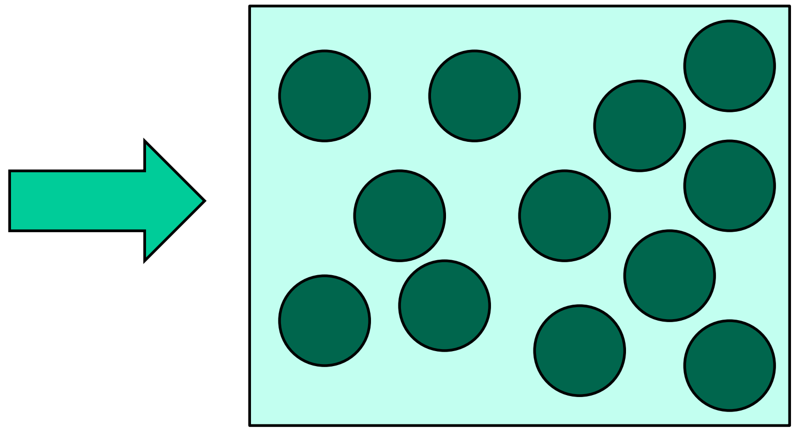
ГНЦ РФ Институт теоретической и экспериментальной физики, Москва

Single scattering



$$l << l_c$$

Multiple scattering



$$l >> l_c$$

Neutron free path

$$l_c = \frac{1}{c\sigma_t}$$

Born parameter $\nu = \frac{U_0}{2E}ka = \frac{U_0 a}{\hbar \mathrm{v}}$

Diffraction: $\nu << 1, \quad \sigma_t = 2\pi a^2 \nu^2$

Refraction $\nu >> 1, \quad \sigma_t = 2\pi a^2$

Multiple SANS. Moliere's formula.

Basic assumption: scatterers are uncorrelated.

For small angle scattering $\mathbf{q} \perp \mathbf{k}_0$

scattering vector

wave vector of incident neutron

Let us introduce a vector $\theta = \dfrac{\mathbf{k} - \mathbf{k}_0}{|\mathbf{k}_0|} \perp \mathbf{k}_0$

The scattering problem is equivalent to diffusion in the plane of $\boldsymbol{\theta}$

In this case the MSANS theory remains analytical to the end!

Two equivalent approaches

Moliere – considering successive collisions

Bethe – solution of transport equation

The standard transport equation

total scattering cross section

differential scattering cross section

$$\frac{dD(\mathbf{q},l)}{dl} = -c\sigma_t \left(D(\mathbf{q},l) - \int \frac{d^2q'}{k^2} \frac{\sigma(\mathbf{q}-\mathbf{q}')}{\sigma_t} D(\mathbf{q}',l) \right)$$

number of scatterers per cm^3

probability to find a neutron

distance from the sample surface

Equation is translationally invariant.

It can be solved by a Fourier transform.

$$\boxed{D(\mathbf{q},l) = \int d^2u \exp(i\mathbf{uq}) \exp(-cl[\sigma(0) - \sigma(\mathbf{u})])}$$

$$\sigma(\mathbf{u}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{d^2q}{k^2} \exp(-i\mathbf{uq}) \sigma(\mathbf{q})$$

Correlation effects in small angle scattering

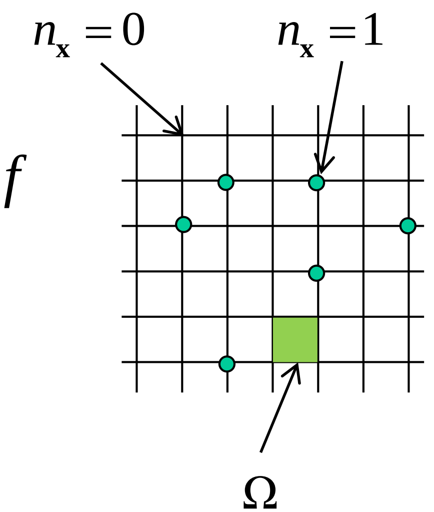
The neutron-optical potential of a medium through which neutrons propagate

occupation numbers

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}} U_0(\mathbf{r} - \mathbf{x}, \alpha_{\mathbf{x}}) \qquad \langle n_{\mathbf{x}} \rangle = f$$

potential of grain

grain parameters



In the continuum limit $\quad f \to 0, \;\; \mathbf{\Omega} \to 0, \;\; f / \mathbf{\Omega} = c = \mathrm{const}$

Correlations in the scatterers distribution

$$\mathbf{\Omega}^{-2} \langle n_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{y}} \rangle = C_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \neq c^2$$

pair correlation function

Scattering in Born approximation – single scattering

Intensity of single SANS

$$D_1(\mathbf{q}) = \left| f\left(\mathbf{q}\right)\right|^2,$$

Scattering amplitude on the sample

$$f\left(\mathbf{q}\right) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3 r e^{-i\mathbf{qr}} \sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}} U_0(\mathbf{r}-\mathbf{x})$$

Averaging over occupation numbers $n\mathbf{x}$

At $q \geq 2\pi / D$ we obtain Zernike-Prins equation

form factor

$$D_1(q) = N\left| f(q)\right|^2 \left[1 + c\int_0^\infty 4\pi r^2 dr \frac{\sin qr}{qr} \varkappa(r)\right] = NP(q)S(q)$$

structure factor

$$\varkappa(\mathbf{x}) = \frac{C_2(\mathbf{x})}{c^2} - 1.$$

Scattering in eikonal approximation – multiple scattering

Scattering amplitude

impact parameter

$$f(\mathbf{q}) = \frac{k}{2\pi i}\int d^2\rho\left[S(\boldsymbol{\rho})-1\right]\exp(-i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}),$$

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}} U_0(\mathbf{r}-\mathbf{x},\alpha_{\mathbf{x}})$$

$$S(\boldsymbol{\rho}) = \exp\left(-i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{\hbar \mathrm{v}}U(\mathbf{r})\right), \qquad \mathbf{r} = (\boldsymbol{\rho}, z)$$

neutron velocity

The normalized angular distribution of neutron momentum is studied

$$D(\mathbf{q}) = \Sigma(\mathbf{q})/\Sigma_0, \quad \Sigma(\mathbf{q}) = \left|f(\mathbf{q})\right|^2, \quad \Sigma_0 = \int \Sigma(\mathbf{q})d^2q/k^2.$$

The theoretical analysis can conveniently be carried out for the Fourier transform

$$D(\mathbf{u}) = \Sigma(\mathbf{u})/\Sigma_0, \quad \Sigma(\mathbf{u}) = \int \frac{d^2q}{k^2}\exp(-i\mathbf{q}\mathbf{u})\Sigma(\mathbf{q}), \quad \Sigma_0 = \Sigma(\mathbf{u}=\mathbf{0})$$

In the case of

a system with an uncorrelated random scatterer distribution,

the exact result can be obtained using the relationship

$$\left\langle \exp\left(\sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}} R_{\mathbf{x}} \right) \right\rangle = \exp\left[c \int_V d^3x \left\langle e^{R_{\mathbf{x}}} - 1 \right\rangle_{\alpha} \right].$$

Averaging with the use of this formula gives

$$D(\mathbf{u}) = D_0(\mathbf{u}) = \exp\left(-cl(\sigma_0 - \sigma(\mathbf{u}))\right).$$

This equation coincides with the standard result of the Moliere theory.

For a high scatterer concentration the many-body distribution function cannot be factorized into a product of one-particle functions.

In the **presence of correlations** we expand $D(\mathbf{u})$ in powers of occupation numbers.

$$\exp\left(\sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}} R_{\mathbf{x}}\right) = \prod_{\mathbf{x}} \left[1 + n_{\mathbf{x}}(e^{R_{\mathbf{x}}} - 1)\right] =$$

$$= 1 + \sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}} \left(e^{R_{\mathbf{x}}} - 1\right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x} \neq \mathbf{y}} n_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{y}} \left(e^{R_{\mathbf{x}}} - 1\right)\left(e^{R_y} - 1\right) + \ldots \qquad (1)$$

Introducing $Q_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}, \alpha) = \exp(R_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}, \alpha)) - 1$ and averaging Eq.(1) term by term over the occupation numbers distribution, one obtains in the continuum limit

$$D(\mathbf{u}) = D_0(\mathbf{u}) \exp\left(\frac{c^2}{2} \int d^3x d^3y \varkappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \left\langle Q_{\mathbf{x}} Q_{\mathbf{y}} \right\rangle_\alpha + \right.$$

$$\left. + \frac{c^2}{2} \int d^3x d^3y (\left\langle Q_{\mathbf{x}} Q_{\mathbf{y}} \right\rangle_\alpha - \left\langle Q_{\mathbf{x}} \right\rangle_\alpha \left\langle Q_{\mathbf{y}} \right\rangle_\alpha) + O(c^3) \right)$$

$$\varkappa(\mathbf{x}) = \frac{C_2(\mathbf{x})}{c^2} - 1.$$

Monodisperse system of scatterers.

The scatterers are supposed to be identical spheres with radius a. Setting

$$U_0(\mathbf{r},\alpha) = U_0 \vartheta(r < a),$$

and taking into account that there is no internal variable α, one obtains

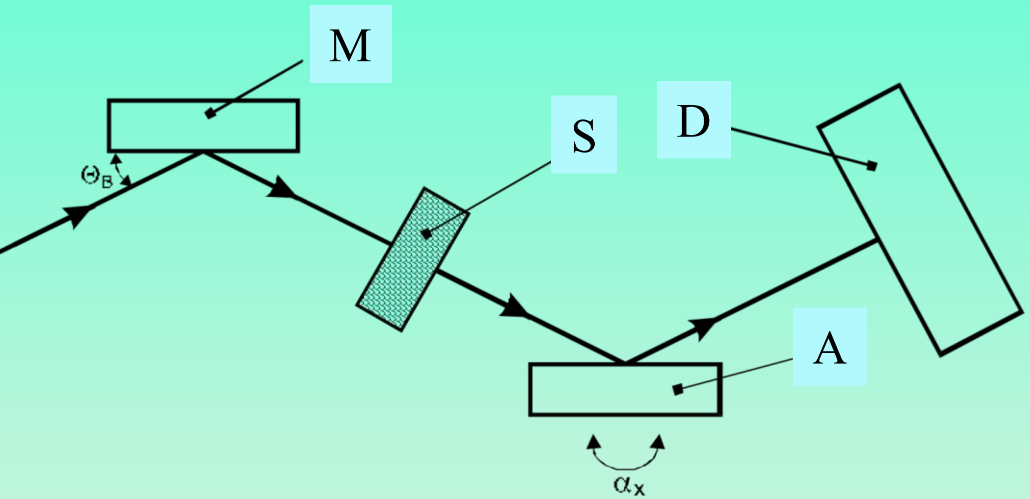
$$D(\mathbf{u}) = D_0(\mathbf{u}) \exp\left[\frac{c^2 l}{2} (K(\mathbf{u}) + O(c)) \right],$$

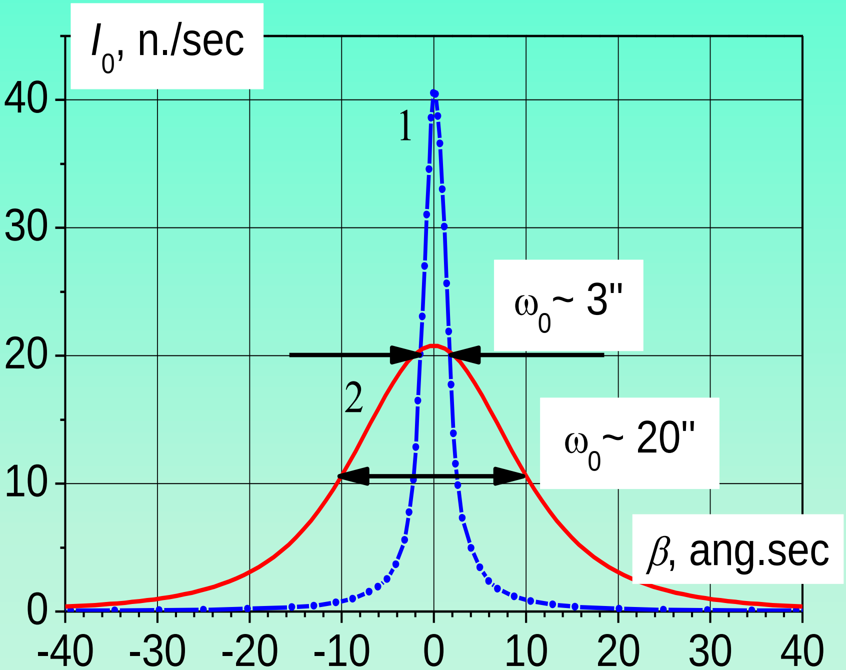
$$K(\mathbf{u}) = \int d^2x \int d^2y\, \varkappa_0(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|) Q_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}) Q_{\mathbf{y}}(\mathbf{u}), \qquad \varkappa_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dz\, \varkappa\left(\sqrt{x^2+z^2}\right)$$

$$Q_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}) = \exp\left[-i\varphi(\mathbf{x}-\mathbf{u}/2) + i\varphi(\mathbf{x}+\mathbf{u}/2)\right] - 1,$$

$$\varphi(x) = \frac{2U_0}{v} \sqrt{a^2 - x^2}\, \vartheta(x < a).$$

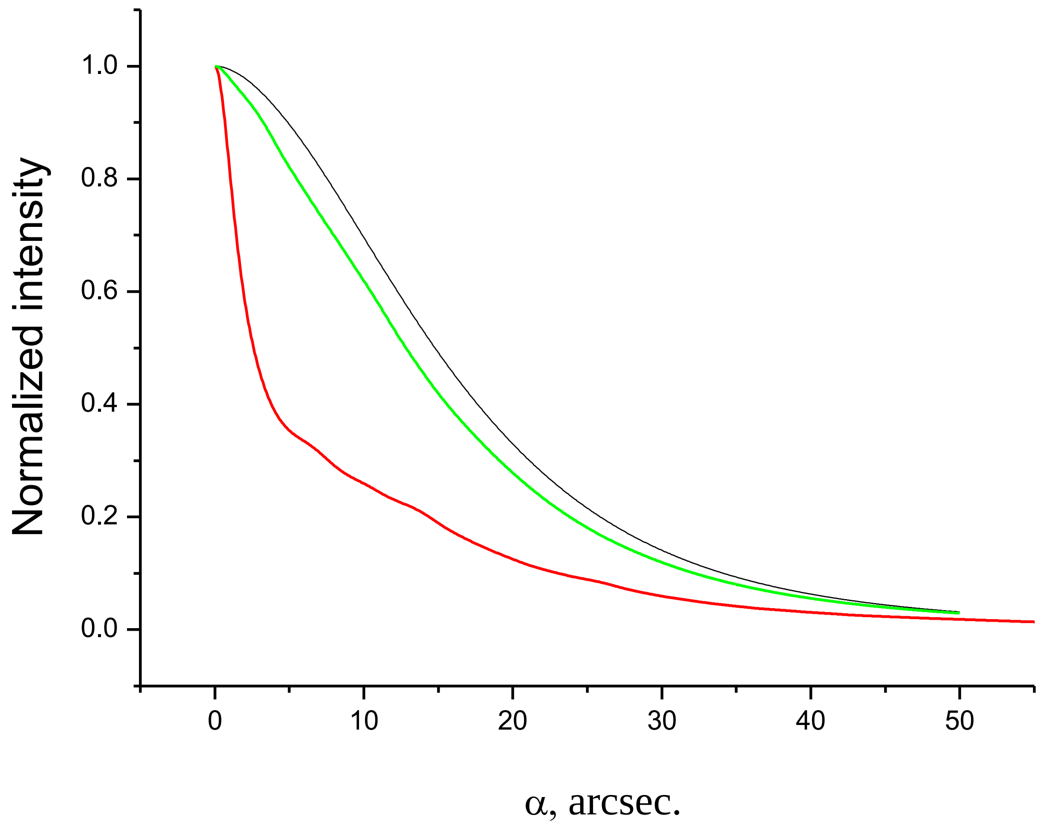
Double crystal diffractometer schematic.





M and **A** are monochromator and analyzer crystals, **S** is a sample and **D** is a detector.
α_x is an angle of rotation, θ_B is the Bragg angle.
Intensity of neutrons on the detector **D** is measured as a function of rotational angle α_x of the analyzer.

1) Instrumental line of DCD $I_{ins}(\beta)$ at $\lambda = 1{,}75$ Å
2) becomes SANS curve when a sample is placed between crystals



Интенсивность многократного МУРН, измеряемая на двухкристальном дифрактометре. Кратность рассеяния N = 10, борновский параметр 0,3. Распределение рассеивателей по размерам лог-нормальное со средним радиусом 1 мкм и дисперсией 0,2 мкм^2.

Черная линия – фактор заполнения 0,1. Зеленая - фактор заполнения 0,4. Красная - фактор заполнения 0,6.

Учет спина нейтрона

Потенциал Ферми взаимодействия нейтронов со средой

$$V(\mathbf{r}) = V_q(\mathbf{r}) + V_s(\mathbf{r}) = \sum_R n_R \sum_{\mathbf{x}} \theta(\mathbf{x} \in V_R) \frac{2\pi}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{x})(b_{\mathbf{x}}^0 + b_{\mathbf{x}}^1 \mathbf{S}_{\mathbf{x}} \mathbf{I}),$$

V_q – не зависящая от спинов нейтрона и ядра часть взаимодействия

V_s – псевдомагнитное ядерное взаимодействие

$\mathbf{S}_{\mathbf{x}}$ – оператор спина ядра, расположенного в узле $\mathbf{x}$

$\mathbf{I}$ – оператор спина нейтрона

Фурье-образ интенсивности рассеяния

$$\Sigma(\mathbf{u}, z) = \int d^2\rho \langle U(\mathbf{r}, \mathbf{u}) \rho_0 U^+(\mathbf{r}, -\mathbf{u}) \rangle, \qquad \mathbf{r} = (\boldsymbol{\rho}, z),$$

ρ_0 – начальная спиновая матрица плотности нейтронов и среды

Оператор эволюции U равен

$$U = U_q U_s, \qquad U_q(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = \exp\left(-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{z} V_q(\mathbf{r} - \mathbf{u}/2) dz \right),$$

$$U_s(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = Texp\left(-\frac{i}{v} \int_{-\infty}^{z} V_s(\mathbf{r} - \mathbf{u}/2) dz \right)$$

Для U_s пришлось ввести упорядочение вдоль траектории!

Усреднение интенсивности по спинам кристалла

При динамической поляризации ядер имеем

$$\langle \mathbf{S}_{\mathbf{x}} \rangle = \mathbf{n}_z p / 2, \qquad \langle \Delta S_{\mathbf{x}}^{\alpha} \Delta S_{\mathbf{y}}^{\beta} \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mathbf{xy}} \varkappa_{\alpha},$$

$$\varkappa_z = \frac{1}{4}(1 - p^2), \qquad \varkappa_x = \varkappa_y = \frac{1}{4},$$

где p - поляризация ядер среды

Ацаркин В. А. "Динамическая поляризация ядер в твердых диэлектриках" УФН 126 3–39 (1978)

Для расчета фурье-образа интенсивности введем величину

$$F(\mathbf{u},z) = U_s(\mathbf{r},\mathbf{u})\rho_0 U_s^+(\mathbf{r},-\mathbf{u})$$

и запишем для нее дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial F}{\partial t} = v\frac{\partial F}{\partial z} = -iLF$$

$$LF = V_s(\mathbf{r}-\mathbf{u}/2)F - FV_s(\mathbf{r}+\mathbf{u}/2).$$

Величина $\langle F\rangle$, являющаяся средним от F по спинам среды, удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle F\rangle = -i\langle L\rangle\langle F\rangle - M\langle F\rangle, \qquad (*)$$

$$M\langle F\rangle = \int_0^\infty d\tau \langle \Delta L(\tau)\Delta L\rangle\langle F\rangle.$$

Здесь $t = 0$ соответствует моменту пересечения нейтроном входной поверхности образца.

Величину $\langle F\rangle$ удобно разложить по матрицам Паули

$$\langle F\rangle=\sum_{\mu=0}^{3} g_\mu I_\mu,\quad I_0=1/2,\quad I_i=\sigma_i/2,$$

где g_i - поляризация нейтрона вдоль i-ой оси.

Первый член в (*}), отвечающий среднему значению псевдомагнитного потенциала, равен

$$\langle L\rangle F_s=\frac{p}{2}\sum_R n_R\sum_{\mathbf{x}}\theta(\mathbf{x}\in V_R)(v_{\mathbf{x}}(\mathbf{r}-\mathbf{u}/2)I_z F_s-v_{\mathbf{x}}(\mathbf{r}+\mathbf{u}/2)F_s I_z)$$

$$v_{\mathbf{x}}(\mathbf{r})=\frac{2\pi}{m}b_{\mathbf{x}}^{1}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{x})$$

Второй член в (*), содержащий флуктуации псевдомагнитного потенциала

$$M(\boldsymbol{\rho},\mathbf{u},z)F_s=\sum_R n_R\sum_{\mathbf{x}}\theta(\mathbf{x}\in V(R))\times$$

$$\times\{(W_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho}-\mathbf{u}/2,\boldsymbol{\rho}-\mathbf{u}/2)+W_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho}+\mathbf{u}/2,\boldsymbol{\rho}+\mathbf{u}/2))2Z_0F_s-$$

$$-(W_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho}+\mathbf{u}/2,\boldsymbol{\rho}-\mathbf{u}/2/2)+W_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho}-\mathbf{u}/2,\boldsymbol{\rho}+\mathbf{u}/2))\sum_{\mu=0}^{3}g_\mu Z_\mu\}.$$

$$W_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho}_1,\boldsymbol{\rho}_2,z)=\int_0^\infty\frac{d\zeta}{v}v_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho}_1,z+\zeta)v_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho}_2,z)$$

$$Z_0=\frac{1}{4}(\varkappa_3+2\varkappa_1)I_0=\bar{Z}_0I_0,\qquad Z_1=-\frac{\varkappa_3}{4}I_1=\bar{Z}_1I_1,$$

$$Z_2=-\frac{\varkappa_3}{4}I_2=\bar{Z}_2I_2,\qquad Z_3=-\frac{1}{4}(\varkappa_3-2\varkappa_1)I_z=\bar{Z}_3I_3.$$

Умножая уравнение (*) на последовательно I_0, I_1, I_2, I_3 и вычисляя след, получаем систему уравнений на поляризации

$$\frac{\partial g_0}{\partial t} = -iL_0 g_3 - \bar{Z}_0 (W_1 - W_2) g_0,$$

$$\frac{\partial g_3}{\partial t} = -iL_0 g_0 - (\bar{Z}_0 W_1 - \bar{Z}_z W_2) g_3,$$

$$\frac{\partial g_1}{\partial t} = -L_1 g_2 - (\bar{Z}_0 W_1 - \bar{Z}_x W_2) g_1,$$

$$\frac{\partial g_2}{\partial t} = L_1 g_1 - (\bar{Z}_0 W_1 - \bar{Z}_x W_2) g_2,$$

$$L_0 = \frac{p}{4} \sum_R n_R \sum_{\mathbf{x}} \theta(\mathbf{x} \in V_R)(v_{\mathbf{x}}(\mathbf{r} - \mathbf{u}/2) - v_{\mathbf{x}}(\mathbf{r} + \mathbf{u}/2))$$

$$L_1 = \frac{p}{4} \sum_R n_R \sum_{\mathbf{x}} \theta(\mathbf{x} \in V_R)(v_{\mathbf{x}}(\mathbf{r} - \mathbf{u}/2) + v_{\mathbf{x}}(\mathbf{r} + \mathbf{u}/2))$$

Опуская второе слагаемое, приводящее к деполяризации нейтрона, находим решение

$$g_1(t) + ig_2(t) = (g_1^0 + ig_2^0)\exp\left(i\int_0^t L_1(\tau)d\tau \right),$$

$$g_0(t) + g_3(t) = (g_0^0 + g_3^0)\exp\left(-i\int_0^t L_0(\tau)d\tau \right).$$

Пусть падающий на образец пучок нейтронов полностью поляризован вдоль оси OZ. Тогда

$$g_3^0 = 1, g_0^0 = g_1^0 = g_2^0 = 0.$$

$$g_0(t) = -i\sin\left(\int_0^t L_0(\tau)d\tau \right),$$

$$g_3(t) = \cos\left(\int_0^t L_0(\tau)d\tau \right).$$

Переходя от псевдомагнитного потенциала отдельных ядер к среднему потенциалу гранулы по правилу

$$\sum_{\mathbf{x}} \theta(\mathbf{x} \in V_R) v_{\mathbf{x}}(\mathbf{r}) \to U_p(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

Получаем фурье-образ интенсивности рассеяния

$$D(\mathbf{u}) = \langle \exp\left(\sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}} (R_{\mathbf{x}} + \frac{p}{4} P_{\mathbf{x}}) \right) \left(I_3 + \frac{1}{2} \right) +$$

$$+ \exp\left(\sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}} (R_{\mathbf{x}} - \frac{p}{4} P_{\mathbf{x}}) \right) \left(I_3 - \frac{1}{2} \right) \rangle,$$

$$P_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho}, \mathbf{u}) = -i \int_0^{\infty} d\tau (U_p(\mathbf{r} - \mathbf{x} - \mathbf{u}/2) - U_p(\mathbf{r} - \mathbf{x} + \mathbf{u}/2)).$$

Выражение для $P_{\mathbf{x}}$ получается из выражения для $R_{\mathbf{x}}$ заменой среднего ядерного потенциала U_0 на средний псевдомагнитный ядерный потенциал U_p. Эффективный потенциал среды равен $U_0 \pm (p/4) U_p$, т.е. имеется возможность варьирования контраста.

Если пучок нейтронов поляризован вдоль оси OX, то

$$g_1^0 = 1,\ \ g_0^0 = g_2^0 = g_3^0 = 0.$$

Зависимость поляризации от времени

$$g_1(t) = \cos\left(\int_0^t L_1(\tau)d\tau\right), \qquad g_2(t) = \sin\left(\int_0^t L_1(\tau)d\tau\right).$$

Фурье-образ интенсивности рассеяния

$$D(\mathbf{u}) = \langle \exp\left(\sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}}(R_{\mathbf{x}} + \frac{p}{4}S_{\mathbf{x}})\right)\frac{1}{2}(I_1 + iI_2) +$$

$$+\exp\left(\sum_{\mathbf{x}} n_{\mathbf{x}}(R_{\mathbf{x}} - \frac{p}{4}S_{\mathbf{x}})\right)\frac{1}{2}(I_1 - iI_2)\rangle,$$

$$S_{\mathbf{x}}(\boldsymbol{\rho},\mathbf{u}) = -i\int_0^\infty d\tau(U_p(\mathbf{r}-\mathbf{x}-\mathbf{u}/2) + U_p(\mathbf{r}-\mathbf{x}+\mathbf{u}/2)).$$

Здесь $S_{\mathbf{x}}$ отвечает среднему псевдомагнитному полю гранул, а соответствующий оператор эволюции описывает вращение спина нейтрона вокруг оси OZ.

Заключение.

- Проведено обобщение теории многократного малоуглового рассеяния на случай рассеяния поляризованных нейтронов на поляризованных мишенях.
- Показано, что при учете спиновых эффектов общая структура теории остается прежней. Рассеяние нейтронов на отдельном рассеивающем центре определяется средней величиной псевдомагнитного ядерного поля, а флуктуации поля приводят к деполяризации нейтронов.
- Показано, что использование метода динамической поляризации для создания поляризованных мишеней, дает возможность варьирования контраста и увеличения информативности способности метода МУРН.

Intensity of unscattered neutrons

$$I = I_0 e^{-l/l_c} = I_0 e^{-lc\sigma_t} \quad \longrightarrow \quad I = I_0 e^{-lc\bar{I}_1(x=0)}$$

$$\bar{I}_1(x=0) = \sigma_t + c\int d^2 r\,\sigma(\mathbf{r})\varkappa_0(\mathbf{r}).$$

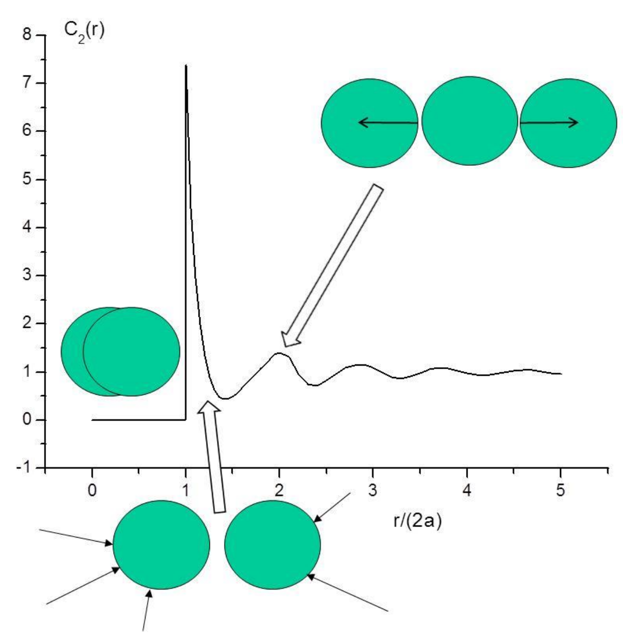
Defines integration domain

Negative in this domain

$$\int d^2 r\,\sigma(\mathbf{r})\varkappa_0(r) < 0$$

$$\bar{I}_1(x=0) < \sigma_0$$

Pair correlation function of identical hard spheres.



Угловое распределение, измеренное на двухкристальном спектрометре:

$$I(q)=\int_{-\infty}^{\infty} dkD_0(q-k)I_0(k)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty} dx\cos(qx)D(x,0)I_0(x)$$

где $I_0(x)$ - фурье-образ инструментальной линии $I_0(k)$

Данное распределение удобно представить в виде

$$D_0(q)=F_t\delta(q)+F_s(q) \qquad I(q)=F_tI_0(q)+I_s(q)$$

$$F_t=\exp\left(-\frac{l}{l_c}\frac{\overline{I}_1(x=0)}{\sigma_t}\right)$$