Neutronų sklaida fononais

Dar pateiksiu vieną būdą naudojamą fononų (gardelės svyravimų) dispersijos dėsniui nustatyti eksperimente. Tai netampri neutronų sklaida fononais.

Neutronų sąveikos su kristalo gardele yra keli mechanizmai. Mes nagrinėsime jų sąveiką su atomų branduoliais, neturinčiais sukinio (magnetinio momento). Elektroninio apvalkalo sumarinis sukinys tegul taip pat lygus nuliui. Tuo atveju vyksta neutronų sklaida panaši į mūsų nagrinėtą bangų difrakciją gardelėje.

Neutronus aprašysime panašiai kaip elektronus laisvų nesąveikaujančių elektronų modelyje, t.y. laikysime, kad jie juda laisvai ir tarpusavyje nesąveikauja (bent iki susidūrimo su branduoliu). Šredingerio lygtis tokiam neutronui turinčiam masę M_n=1.675$\cdot$10^{-24}g gali būti užrašyta taip

$$-\frac{\hbar^2}{2M_n}\nabla^2\psi = \varepsilon\psi \tag{12.1}$$

nes hamiltonianas turi tik kinetinės energijos operatorių. Sprendinį, kaip ir laisvų elektronų modelyje, galima užrašyti plokščios bangos pavidale

$$\psi = Ae^{i\boldsymbol{qr}} \tag{12.2}$$

kur $\boldsymbol{q}$ – neutrono bangos vektorius, $\boldsymbol{r}$ – jo koordinatė.

Paprastai sklaidos eksperimentuose naudojami lėti neutronai, kurių energija mažesnė negu $\varepsilon \le 0.025\text{eV} = 4\cdot 10^{-21}\text{ J}$ (1eV=1.602$\cdot$10^{-19}J)

$$\varepsilon = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M_n} = \frac{(\hbar\boldsymbol{q})^2}{2M_n} = \frac{h^2}{2M_n\lambda^2} \tag{12.3}$$

Taigi jų de Broilio (L. de Broglie) bangos ilgis

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2M_n\varepsilon}} \tag{12.4}$$

sulyginamas su atstumais tarp branduolių $\lambda = \dfrac{6.626\cdot 10^{-34}\,J\cdot s}{\sqrt{2\cdot 1.675\cdot 10^{-27}\,kg\cdot 4\cdot 10^{-21}\,J}} \approx 1.8\cdot 10^{-10}\,m = 1.8\,\overset{0}{\mathrm{A}}$.

Tuo būdu neutronų sklidimas kristalu labai panašus į bangos difrakciją kristale, kurią nagrinėjome kalbėdami apie atvirkštinę gardelę. Naudojantis neutrono impulsu $\boldsymbol{p} = -i\hbar\nabla$, kuris lygus $\hbar\boldsymbol{q}$, galima užrašyti tampriai neutronų sklaidai difrakcijos sąlygą

$$\boldsymbol{q} + \boldsymbol{G} = \boldsymbol{q}' \tag{12.5}$$

Energija šiuo atveju nesikeičia. Čia $\boldsymbol{q}$ – pradinis neutrono bangos vektorius, $\boldsymbol{q}'$ – galinis (po sklaidos); $\boldsymbol{G}$ – atvirkštinės gardelės vektorius.

Netamprios sklaidos atveju skirtumas toks, kad neutrono banga sklisdama kristalu gali sukurti arba sunaikinti fononą ir dėl to reikia suvesti impulso bei energijos balansą. Taigi neutrono sklaidos fononais schema apsprendžiama tvermės dėsnių. Impulso tvermės dėsnis gaunamas panašiai kaip bangai difraguojančiai kristale, tik reikia dar įvesti fonono bangos vektorių

$$\boldsymbol{q} + \boldsymbol{G} = \boldsymbol{q}' \pm \boldsymbol{k} \tag{12.6}$$

$\boldsymbol{k}$ – fonono bangos vektorius. Pliusas prieš $\boldsymbol{k}$ reiškia fonono atsiradimą, minusas – išnykimą.

Kinetinė krentančio į kristalą neutrono energija lygi $\hbar^2\boldsymbol{q}^2/2M_n$. Išsklaidyto neutrono energija bus atitinkamai $\hbar^2\boldsymbol{q}'^2/2M_n$. Tad energijos tvermės dėsnį užrašysime taip

$$\frac{\hbar^2\boldsymbol{q}^2}{2M_n} = \frac{\hbar^2\boldsymbol{q}'^2}{2M_n} \pm \hbar\omega_{\boldsymbol{k}} \tag{12.7}$$

Pliuso ženklas šioje lygybėje reiškia fonono atsiradimą, o minuso – išnykimą.

(12.6) ir (12.7) lygybės leidžia suskaičiuoti fonono (gardelės svyravimo kvanto) dispersijos dėsnį $\omega_{\boldsymbol{k}}$. Matuojame krentančio ir sklaidyto neutrono $\boldsymbol{q}$-$\boldsymbol{q}'$ priklausomai nuo sklaidymo krypties ir suskaičiuojame fonono $\boldsymbol{k}$ bei $\omega_{\boldsymbol{k}}$.