

ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ В МАГНИТНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Ю. А. Изюмов

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	41
I. Общие выражения для сечений рассеяния	43
§ 1. Временной формализм в теории рассеяния	43
§ 2. Взаимодействие медленных нейтронов с магнетиком	45
§ 3. Дифференциальные сечения рассеяния для неполяризованных нейтронов	48
II. Упругое рассеяние	50
§ 4. Ядерное рассеяние в монокристаллах и поликристаллах	50
§ 5. Магнитное рассеяние в монокристаллах и поликристаллах	55
III. Неупругое одноквантовое рассеяние	59
§ 6. Рассеяние с испусканием и поглощением фонона	59
§ 7. Рассеяние с испусканием и поглощением спиновой волны	66
IV. Магнитное критическое рассеяние	77
§ 8. Рассеяние вблизи точек Кюри или Нееля	77
V. Рассеяние поляризованных нейтронов	85
§ 9. Дифференциальное сечение рассеяния поляризованных нейтронов	85
§ 10. Изменение поляризации при рассеянии в ферро- и антиферромагнетиках	88
Цитированная литература	91

ВВЕДЕНИЕ

Медленные, или тепловые, нейтроны при взаимодействии с атомами рассеивателя испытывают два вида рассеяния: ядерное и магнитное. Первое обусловлено взаимодействием нейтрона с ядром посредством чисто ядерных сил и имеет сечение рассеяния порядка одного барна (10^{-24} см²). Второе рассеяние обусловлено наличием магнитного момента у нейтрона, взаимодействующего с магнитным моментом атома, если только он отличен от нуля. Сечение магнитного рассеяния, так же как ядерного, имеет величину порядка барна.

При рассеянии медленных нейтронов в кристалле, длина дебройлевской волны которых сравнима с межатомными расстояниями, возникает обычная дифракционная картина рассеяния: при углах рассеяния, соответствующих условиям Вульфа — Брэгга, появляются резкие пики интенсивности когерентно рассеянных нейтронов. Если кристалл не имеет в своем составе магнитных атомов, то вся интерференционная картина обусловлена ядерным рассеянием нейтронов от атомов, занимающих периодическое положение в пространстве. В том случае, когда кристалл имеет магнитные атомы, но они не образуют магнитного порядка (типа ферро- или антиферромагнитного), магнитное рассеяние нейтронов не будет когерентным вследствие хаотической ориентации магнитных моментов

атомов и, таким образом, когерентная картина опять обусловлена ядерным рассеянием.

Однако, если в кристалле имеется магнитный порядок в объеме одной или нескольких элементарных ячеек, магнитное рассеяние нейтронов будет также когерентным. В общем случае, условия брэгговских магнитных отражений будут отличны от ядерных, поэтому положение когерентных пиков магнитного рассеяния может не совпадать с положением ядерных пиков.

При рассеянии неполяризованных нейтронов не возникает интерференции ядерного и магнитного рассеяний, поэтому мы имеем простое наложение интенсивностей ядерного и магнитного рассеяний; при этом в зависимости от магнитной структуры кристалла магнитные пики могут налагаться на ядерные пики (поскольку каждый магнитный атом обуславливает еще и ядерное рассеяние нейтрона), но могут и существовать независимо от ядерных.

Как видно из сказанного, изучение когерентного рассеяния нейтронов в кристаллах позволяет понять кристаллохимическую и магнитную структуру кристалла. Именно это и составляет метод нейтронографии, который сейчас уже вырос в обширную область экспериментальной физики и приобретает все большее и большее значение, в особенности для науки о магнетизме вещества. Так называемая магнитная нейтронография является тем фундаментом, на котором строится современная теория ферро- и антиферромагнетизма.

Однако метод нейтронной дифракции не ограничивается возможностью изучения только структуры кристалла. Связанные с определением структуры когерентные брэгговские пики, оказываются, являются теми направлениями, вдоль которых нейтроны рассеиваются в основном упруго, т. е. без обмена энергией с кристаллом. Однако нейтроны могут рассеиваться и неупруго, отдавая часть своей энергии кристаллу или получая от него.

Хорошо известно, что неупругое ядерное рассеяние нейтронов происходит путем поглощения или испускания нейтроном определенного числа фононов. Магнитное неупругое рассеяние при наличии магнитного порядка происходит путем поглощения или испускания магнонов — квантов спинных волн. Фононы и магноны являются коллективными движениями связанных кристаллическими силами атомов и обменными силами магнитных моментов атомов кристалла. Отсюда следует, что изучение неупругого рассеяния нейтронов в кристаллах позволяет изучать динамику кристалла: спектр тепловых колебаний решетки (фононов) и спектр тепловых колебаний спин-системы (магнонов).

Укажем сразу, что большую информацию о состоянии магнитной системы кристалла, имеющего магнитный порядок, дает изучение рассеяния нейтронов вблизи точки перехода: магнитный порядок — беспорядок, а также изучение рассеяния поляризованных нейтронов, когда возникает интерференция ядерного и магнитного рассеяний. Уже такой беглый перечень возможностей нейтронографии показывает, что экспериментаторы имеют в своих руках мощный метод исследования твердого тела.

Обзор имеет целью последовательно и систематически изложить теорию рассеяния медленных нейтронов в кристаллах. Поскольку теория ядерного рассеяния в кристаллах была подробно изложена в монографии Ахизера и Померанчука¹, основное внимание уделено магнитному рассеянию, особенно вопросам, начавшим развиваться в последние годы: неупругому рассеянию, критическому рассеянию, а также поляризованным нейтронам. Различные приложения упругого магнитного рассеяния ранее были изложены в монографии Бэкона², а также в обзорах^{3, 4}. В то

же время мы старались поддерживать определенное равновесие между различными разделами теории, чтобы охватить широкий круг вопросов. Обзор не претендует на полное освещение вопроса, в нем изложены только разделы, которые имеют приложение к эксперименту, хотя экспериментальные данные приводятся редко *). В связи с этим мы совершенно не касались вопросов многофононного и многомагнонного рассеяний, ограничившись лишь описанием их основных особенностей.

Изложение ведется в единой математической схеме, соответствующей описанию рассеяния в борновском приближении. Путем введения так называемого временного формализма (Вап-Хове ^{5, 6}) задача вычисления сечения рассеяния в единицу телесного угла и единичный интервал энергий сводится к вычислению фурье-компоненты от корреляторов положений двух атомов в решетке в различные моменты времени для ядерного рассеяния и корреляторов спиновых проекций — для магнитного рассеяния. Соответствующий математический аппарат развит в гл. I. Далее он применяется к различным задачам теории рассеяния.

В главе II рассматривается упругое ядерное и магнитное рассеяние нейтронов и излагаются основы структурной нейтронографии — ядерной и магнитной. Гл. III посвящена неупругому рассеянию нейтронов. Здесь рассматривается только одноквантовое рассеяние, при котором поглощается или испускается один фонон или один магнон. Теория этого вопроса лежит в основе экспериментального метода восстановления из данных по неупругому рассеянию спектров фононов и спиновых волн. В гл. IV излагаются особенности магнитного рассеяния нейтронов вблизи точки Кюри. В условиях фазового перехода второго рода, когда возрастают флуктуации намагниченности, возникает «критическое» рассеяние нейтронов, эквивалентное рассеянию света в веществе, находящемся в критическом состоянии (опалесценция). И, наконец, гл. V посвящена рассеянию поляризованных нейтронов. Здесь рассматривается два круга вопросов: 1) сечения рассеяния для поляризованных нейтронов, 2) изменение вектора поляризации падающего нейтронного пучка при рассеянии в ферро- и антиферромагнетиках.

1. ОБЩИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ

§ 1. Временной формализм в теории рассеяния

В задачах о рассеянии медленных нейтронов в веществе в условиях, далеких от резонансного захвата их атомными ядрами, обычно исходят из борновского приближения, соответствующего первому порядку теории возмущений. В случае, когда рассеиватель состоит из большого числа частиц (например, кристалл) для вычисления сечений рассеяния удобно ввести временной формализм. В наиболее общей постановке проблема состоит в следующем.

Рассеиватель находится в состоянии статистического равновесия при заданной температуре и описывается статистическим оператором $\varrho = e^{-\beta \mathcal{H}} / \text{Sp } e^{-\beta \mathcal{H}}$, где \mathcal{H} — гамильтониан, а $\beta = 1/kT$. Пусть начальное состояние рассеивателя характеризуется волновой функцией $|n_0\rangle$, являющейся собственной функцией гамильтониана рассеивателя, так что

$$\mathcal{H} |n_0\rangle = E_{n_0} |n_0\rangle.$$

При взаимодействии с нейтроном рассеиватель перейдет в другое стационарное состояние, а нейтрон может изменить свой импульс и спин.

*) Обзор различных применений нейтронографического метода содержится в работе Жданова и Озерова ^{4b}.

Начальное состояние нейтрона описывается волновой функцией $|\mathbf{p}\sigma\rangle$, где \mathbf{p} — волновой вектор, а σ — спин. Определим полную вероятность процесса, при котором нейтрон после взаимодействия с рассеивателем перейдет в состояние $|\mathbf{p}'\sigma'\rangle$.

Полный гамильтониан системы рассеиватель + нейтрон состоит из двух частей:

$$H = H_0 + H',$$

где $H_0 = \mathcal{H} + \mathcal{H}_n$ — гамильтониан рассеивателя и нейтрона, а H' — оператор взаимодействия между ними.

Для изучения развития системы рассеиватель + нейтрон во времени удобно использовать оператор эволюции⁷, разложив его в ряд по степеням взаимодействия:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}HT} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0T} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^T e^{\frac{i}{\hbar}H_0t_1} H' e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t_1} dt_1 + \dots \right). \quad (1,1)$$

Перейдем в представление вторичного квантования для нейтронов, в котором имеем

$$\mathcal{H}_n = \sum_{\mathbf{p}\sigma} E_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}\sigma}^+ a_{\mathbf{p}\sigma}, \quad H' = \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\sigma\sigma'} V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma} a_{\mathbf{p}'\sigma'}^+ a_{\mathbf{p}\sigma}, \quad (1,2)$$

где $E_{\mathbf{p}}$ — энергия нейтрона, $V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma}$ — матричный элемент оператора взаимодействия, взятый по состояниям нейтрона.

Если в начальный момент система описывалась волновой функцией $|\mathbf{p}\sigma\rangle|n_0\rangle$, то к моменту T волновая функция системы будет

$$e^{-\frac{i}{\hbar}HT} |\mathbf{p}\sigma\rangle|n_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0T} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\sigma\sigma'} \int_0^T dt_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}})t_1} \times \right. \\ \left. \times V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma}(t_1) a_{\mathbf{p}'\sigma'}^+ a_{\mathbf{p}\sigma} + \dots \right] |\mathbf{p}\sigma\rangle|n_0\rangle, \quad (1,3)$$

где

$$V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} \quad (1,4)$$

— гейзенберговское представление оператора взаимодействия с гамильтонианом рассеивателя.

Из выражения (1,3) следует, что полная вероятность перехода нейтрона в состояние $|\mathbf{p}'\sigma'\rangle$ к моменту времени T , при котором рассеиватель выходит из начального состояния $|n_0\rangle$, равна

$$\frac{1}{\hbar^2} \left(n_0 \left| \int_0^T dt_2 \int_0^T dt_1 e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}})(t_1 - t_2)} V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma}^+(t_2) V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma}(t_1) \right| n_0 \right). \quad (1,5)$$

Усредним эту вероятность по начальным состояниям рассеивателя, т. е. умножим (1,5) на q_{n_0} , и просуммируем по n_0 . Заметим, что это эквивалентно взятию шпура от произведения q на оператор, стоящий в (1,5) под символом матричного элемента. Произведем, далее, замену переменных интегрирования в (1,5), вводя $t = t_1 - t_2$. Учитывая, что под знаком шпура можно делать циклическую перестановку операторов, получим для усредненной вероятности перехода выражение

$$\frac{1}{\hbar^2} \int_0^T dt_2 \int_{-t_2}^{T-t_2} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}})t} \langle V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma}^+ V_{\mathbf{p}'\sigma', \mathbf{p}\sigma}(t) \rangle, \quad (1,6)$$

где $\langle \dots \rangle$ — символ статистического усреднения по состояниям рассеивателя, т. е.

$$\langle \dots \rangle = \text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}} \dots) / \text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (1,7)$$

Во многих статистических системах, включая и кристаллы, корреляционные функции быстро уменьшаются со временем (часто экспоненциально). Если коррелятор в выражении (1,6) уменьшается быстро с некоторым характеристическим временем τ_c , то для времен $T \gg \tau_c$ можно найти асимптотику выражения (1,6), заменив во втором интеграле пределы на $+\infty$ и $-\infty$. Теперь видно, что при указанном условии вероятность перехода пропорциональна времени перехода, и можно ввести вероятность перехода за единицу времени

$$W_{p'\sigma', p\sigma} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_{p'} - E_p)t} \langle V_{p'\sigma', p\sigma}^+ V_{p'\sigma', p\sigma}(t) \rangle. \quad (1,8)$$

Если волновые функции нейтрона нормированы на единицу (на δ -функцию), то эффективное сечение рассеяния на единицу телесного угла и единичный интервал энергии $d^2\sigma/d\Omega dE_{p'}$ связан с этой вероятностью соотношением⁸

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} = \frac{m^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{p'}{p} W_{p', p}. \quad (1,9)$$

Здесь m — масса нейтрона, $W_{p', p}$ есть вероятность $W_{p'\sigma', p\sigma}$, усредненная по состояниям спинов в начальном пучке и просуммированная по спиновым состояниям в конечном пучке. Таким образом, эффективное сечение рассеяния равно

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dL_{p'}} = \frac{m^2}{(2\pi)^3 \hbar^5} \frac{p'}{p} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_{p'} - E_p)t} \overline{\langle V_{p', p}^+ V_{p', p}(t) \rangle}, \quad (1,10)$$

где $V_{p', p}$ — матричный элемент оператора взаимодействия нейтрона с рассеивателем, взятый только по импульсным состояниям нейтрона. Черта над оператором сверху означает

$$\bar{L} = \text{Sp} \varrho_\sigma L, \quad (1,11)$$

где ϱ_σ — оператор спиновой плотности в начальном пучке.

Таким образом, в общем случае эффективное сечение рассеяния нейтронов в веществе пропорционально фурье-компоненте коррелятора взаимодействий. Временные корреляции в теории рассеяния нейтронов впервые рассматривались Ван-Хове^{5,6} для задач ядерного и магнитного рассеяний.

Полезно записать еще выражение (1,8) в матричном виде (в представлении гамильтониана рассеивателя \mathcal{H}), выполнив интегрирование по времени:

$$W_{p'\sigma', p\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{nn_0} \varrho_{n_0} | \langle n_0 | V_{p', p} | n \rangle |^2 \delta(E_p - E_{p'} - E_n + E_{n_0}). \quad (1,12)$$

Отсюда видно, что развитый метод эквивалентен первому приближению в борновской теории рассеяния.

§ 2. Взаимодействие медленных нейтронов с магнетиком

Энергия взаимодействия нейтрона с магнетиком состоит из двух частей: энергии взаимодействия с ядрами и энергии магнитного взаимодействия с электронами. Вообще говоря, существует еще взаимодействие нейтрона с электронами, не зависящее от спина, и магнитное взаимо-

действие с магнитными моментами ядер, но оба эти взаимодействия очень малы и в дальнейшем не принимаются во внимание.

Для вычисления сечений рассеяния с помощью формализма, развитого в § 1, необходимо найти выражения для матричных элементов $V_{p', p}$ оператора взаимодействия нейтрона с рассеивателем.

1. Матричный элемент ядерного взаимодействия. Энергию взаимодействия нейтрона с ядром удобно описывать, вводя так называемый псевдопотенциал. Для медленных нейтронов при рассеянии существенна только S -волна, поэтому амплитуда рассеяния не зависит от угла рассеяния и псевдопотенциал выбирают в следующем виде¹:

$$V(\mathbf{r}_n) = \alpha \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}), \quad (2,1)$$

где \mathbf{r}_n и \mathbf{R} — координаты нейтрона и ядра и α определяется амплитудой рассеяния свободным ядром.

Если ядро имеет спин, то амплитуда рассеяния различна в зависимости от ориентации спинов ядра и нейтрона. Этот факт можно учесть, представив α в виде

$$\alpha = A + B(S_n \mathbf{I}), \quad (2,2)$$

где S_n и \mathbf{I} — спины нейтрона и ядра, A и B — константы. В силу известных свойств операторов S_n^x , S_n^y и S_n^z выражение (2,2) является наиболее общим видом для α .

В случае взаимодействия с системой N ядер имеем

$$V = \sum_{i=1}^N \alpha_i \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_i). \quad (2,3)$$

Матричный элемент $V_{p', p}$ оператора V между состояниями нейтрона с импульсом $\hbar \mathbf{p}$ и $\hbar \mathbf{p}'$ запишется на основании (2,3) в виде

$$V_{p', p} = \sum_l \alpha_l e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{R}_l}. \quad (2,4)$$

2. Матричный элемент магнитного взаимодействия. Под магнитным взаимодействием нейтрона с рассеивателем следует понимать взаимодействие магнитного поля, порождаемого нейтроном, с токами электронов, образующих незамкнутые оболочки атомов рассеивателя. Оператор энергии такого взаимодействия можно написать в виде

$$V = \sum_l \frac{1}{c} \mathbf{A}_n(\mathbf{r}_l) \mathbf{j}(\mathbf{r}_l), \quad (2,5)$$

где $\mathbf{A}_n(\mathbf{r}) = [\boldsymbol{\mu}_n \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)] / |\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^3$ — вектор-потенциал поля в точке \mathbf{r} , порождаемого нейтроном, находящимся в точке \mathbf{r}_n , $\boldsymbol{\mu}_n = 2\gamma \mu_{\text{яд}} S_n$ — магнитный момент нейтрона ($\gamma = -1,93$ — величина магнитного момента нейтрона в ядерных магнетонах бора $\mu_{\text{яд}}$), $\mathbf{j}(\mathbf{r}_l)$ — ток, порождаемый l -м электроном. Суммирование в (2,5) ведется по всем неспаренным электронам рассеивателя.

Вычислим матричный элемент между состояниями нейтрона с импульсами $\hbar \mathbf{p}$ и $\hbar \mathbf{p}'$ и состояниями рассеивателя Ψ_a и $\Psi_{a'}$. Имеем

$$\langle a' | V_{p', p} | a \rangle = \sum_l \iint \frac{[\boldsymbol{\mu}_n \times (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n)]}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n|^3} \frac{1}{c} \Psi_{a'}^* \mathbf{j}(\mathbf{r}_l) \Psi_a e^{i(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}_n} d\mathbf{r}_n (d\tau). \quad (2,6)$$

Интегрирование по $(d\tau)$ ведется по координатам всех электронов, включенных в (2,5). Как известно⁸, матричные элементы тока равны

$$\frac{1}{c} \Psi_a^* \mathbf{j}(\mathbf{r}_l) \Psi_a = i\mu_0 (\Psi_a \nabla_l \Psi_a^* - \Psi_a^* \nabla_l \Psi_a) + 2\mu_0 \text{rot}_l (\Psi_a^*, \mathbf{s}_l \Psi_a), \quad (2,7)$$

причем s_l — оператор спина l -электрона, μ_0 — магнетон Бора. Первый член правой части (2,7) описывает ток, вызванный орбитальным движением электрона, второй — спиновый ток. Пока мы будем рассматривать только спиновую часть тока. Подставив выражение для нее в (2,6) и введя относительные координаты $\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_n = \mathbf{R}$, представим выражение для матричного элемента (2,6) в виде

$$(a' | V_{\mathbf{p}', \mathbf{p}} | a) = - \sum_l \left[\mu_n \times \int \frac{e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} \mathbf{R} d\mathbf{R}}{R^3} \right] \int 2\mu_0 e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_l} \text{rot}_l (\Psi_a^* s_l \Psi_a) d\tau, \quad (2,8)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}'$ — вектор рассеяния. Учитывая, что

$$\int \frac{\mathbf{R} d\mathbf{R}}{R^3} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} = - \frac{4\pi i \mathbf{q}}{q^2},$$

$$\int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_l} \text{rot}_l (\Psi_a^* s_l \Psi_a) d\mathbf{r}_l = -i \left[\mathbf{q} \times \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_l} \Psi_a^* s_l \Psi_a d\mathbf{r}_l \right],$$

вместо (2,8) теперь имеем

$$(a' | V_{\mathbf{p}', \mathbf{p}} | a) = - \frac{4\pi \hbar^2}{m} r_0 \gamma \left(\left(a' \left| \sum_l e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_l} s_l \right| a \right), S_n - (e S_n) e \right). \quad (2,9)$$

Выражение в круглых скобках означает скалярное произведение векторов, $r_0 = e^2/m_0 c^2$ — электромагнитный радиус электрона, $e = \mathbf{q}/q$ — единичный вектор рассеяния.

В выражении (2,9) спиновые переменные нейтрона и рассеивателя разделены. Дальнейшее упрощение может быть достигнуто, если разбить суммирование по l на сумму по электронам отдельного атома \sum_v и сумму по всем атомам рассеивателя \sum_j . Мы будем рассматривать чисто магнитное рассеяние, когда состояние решетки не меняется, а $|a\rangle$ характеризуется набором спиновых чисел для электронов. В этом случае можно написать

$$\left(a' \left| \sum_l e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_l} s_l \right| a \right) = \sum_j^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \left(a' \left| \sum_v^{z_j} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} s_v \right| a \right), \quad (2,10)$$

где z_j — число неспаренных электронов в атоме j .

Для медленных нейтронов можно принять, что они не вызывают переходов атомов в возбужденные энергетические состояния, а производят лишь переориентировку атомного спина. Таким образом, переход $|a\rangle \rightarrow |a'\rangle$ имеет вид $|am\rangle \rightarrow |am'\rangle$, где m и m' — наборы спиновых квантовых чисел для атомов рассеивателя, а a — совокупности остальных квантовых чисел атомов. Из общих теорем квантовой механики *) следует,

*) В квантовой механике показывается (см., например, работу 9), что если векторные величины \hat{T}_k ($k=x, y, z$) удовлетворяют перестановочному соотношению $[\hat{J}_i, \hat{T}_k] = i\hbar \epsilon_{ikl} T_l$, где \hat{J}_i — проекция оператора момента количества движения, то имеет место соотношение

$$j(j+1) \langle \alpha j m | \mathbf{T} | \alpha' j m' \rangle = \langle \alpha j m | \mathbf{J} | \alpha j m' \rangle \langle \alpha j m' | (\mathbf{J} \mathbf{T}) | \alpha' j m' \rangle;$$

здесь j — величина полного момента системы, m — проекция полного момента. Применяя это соотношение к оператору $\hat{T} = \sum_v^{z_j} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} s_v$, получим формулу (2,11).

что матричный элемент в (2,10) можно в нашем случае представить в виде

$$\left(a' \left| \sum_v^{z_j} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} \mathbf{s}_v \right| a \right) = (m' | S_j | m) \left(am \left| \sum_v^{z_j} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} (\mathbf{s}_v S_j)}{S_j(S_j+1)} \right| am \right), \quad (2,11)$$

где $S_j = \sum_v^{z_j} \mathbf{s}_v$ — оператор спина атома j , а S_j — величина спина. Выражение

$$F_j(\mathbf{q}) \equiv \left(am \left| \sum_v^{z_j} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} (\mathbf{s}_v S_j)}{S_j(S_j+1)} \right| am \right) = \int \Psi_j^* \sum_v^{z_j} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_v} (\mathbf{s}_v S_j)}{S_j(S_j+1)} \Psi_j d\tau_j, \quad (2,12)$$

где Ψ_j — волновая функция электронов j -го атома, $d\tau_j$ — элемент объема в конфигурационном пространстве электронов j -го атома, не зависит от квантового числа m , т. е. от ориентации атомного спина, и является характеристикой рассеивающей способности атома. Эта величина называется магнитным формфактором атома (точнее ее следовало бы назвать спиновым формфактором). $F_j(\mathbf{q})$ характеризует распределение спиновой плотности в атоме. При $z_j = 1$ $F_j(\mathbf{q})$ есть просто фурье-компонента спиновой плотности.

Таким образом, преобразование (2,10) и (2,11) позволило выразить матричный элемент (2,6) через матричные элементы $(m | S_j | m')$ операторов спина отдельных атомов рассеивателя. Комбинируя выражения (2,9) — (2,12), получаем следующее выражение для оператора магнитного взаимодействия:

$$V_{p',p} = -\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \sum_j F_j(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} (S_j, S_n - (eS_n) e), \quad (2,13)$$

которое было установлено Халперном и Джонсоном¹⁰.

Аналогичные вычисления можно проделать и для орбитальной части электронного тока, хотя они сложнее, так как оператор орбитального момента не коммутирует с $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$. Соответствующие результаты имеются в¹¹. Очевидно, что выражение, соответствующее (2,13), в случае рассеяния на орбитальном моменте атома должно содержать вместо операторов S_j операторы L_j орбитальных моментов атомов. Вместе с тем в ферромагнетиках, состоящих из элементов первой переходной группы, имеет место подавление орбитальных моментов, а именно, благодаря тому, что внутрикристаллическое электрическое поле, действующее на атом, не обладает осевой симметрией, среднее значение проекции орбитального момента атома в основном состоянии либо оказывается равным нулю, либо много меньше по сравнению с величиной орбитального момента атома. Поэтому рассеяние из-за взаимодействия нейтрона с орбитальным движением электронов в таких ферромагнетиках можно не учитывать.

§ 3. Д и ф ф е р е н ц и а л ь н ы е с е ч е н и я р а с с е я н и я д л я н е п о л я р и з о в а н н ы х н е й т р о н о в

Выражения для матричных элементов ядерного (2,4) и магнитного (2,13) взаимодействий нейтрона с рассеивателем позволяет с помощью основной формулы (1,10) записать эффективные дифференциальные сечения

рассеяния неполяризованных нейтронов. Для ядерного рассеяния

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{\mathbf{p}'}} = \frac{m^2}{(2\pi)^3 \hbar^5} \frac{p'}{p} \sum_{ll'} \overline{\langle \alpha_l \alpha_{l'} \rangle} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}})t - i\mathbf{q}\mathbf{R}_l(0)} \langle e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{l'}(t)} \rangle dt, \quad (3,1)$$

где $\mathbf{R}_l(t)$ — гейзенберговское представление величины \mathbf{R}_l с гамильтонианом рассеивателя \mathcal{H} ,

$$\mathbf{R}_l(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \mathbf{R}_l e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t}. \quad (3,2)$$

Для магнитного рассеяния находим выражение

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{\mathbf{p}'}} (r_0\gamma)^2 \frac{p'}{p} \sum_{jj'} F_j(\mathbf{q}) F_{j'}(\mathbf{q}) \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha}e_{\beta}) \times \\ \times \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}})t} \langle S_j^{\alpha}(0) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j(0)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{j'}(t)} S_{j'}^{\beta}(t) \rangle dt \quad (\alpha, \beta = x, y, z), \end{aligned} \quad (3,3)$$

где $S_j^{\alpha}(t)$ — гейзенберговское представление оператора спина S_j^{α}

$$S_j^{\alpha}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} S_j^{\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t}. \quad (3,4)$$

При получении (3,3) мы, в соответствии с требованием формулы (1,10), произвели усреднение по спиновым ориентациям в нейтронном пучке:

$$[\overline{S_n^{\alpha} - (\mathbf{e}\mathbf{S}_n) e_{\alpha}}] [\overline{S_n^{\beta} - (\mathbf{e}\mathbf{S}_n) e_{\beta}}] = \frac{1}{4} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha}e_{\beta}). \quad (3,5)$$

Легко видеть, что при рассеянии неполяризованных нейтронов не возникает интерференции ядерного и магнитного рассеяния, поэтому для магнетика

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{\mathbf{p}'}} = \frac{d^2\sigma_{\text{яд}}}{d\Omega dE_{\mathbf{p}'}} + \frac{d^2\sigma_{\text{маг}}}{d\Omega dE_{\mathbf{p}'}}.$$

В тех случаях, когда корреляцией в положении атома и проекциями его спина можно пренебречь, т. е. когда спин-решеточное взаимодействие несущественно, коррелятор в (3,3) можно приближенно записать в виде

$$\langle S_j^{\alpha}(0) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j(0)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{j'}(t)} S_{j'}^{\beta}(t) \rangle \approx \langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j(0)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{j'}(t)} \rangle \langle S_j^{\alpha}(0) S_{j'}^{\beta}(t) \rangle, \quad (3,6)$$

где усреднение в правой части производится независимо: в первом множителе по состояниям решетки, во втором — по состояниям спин-системы. Гейзенберговское представление величин $\mathbf{R}_j(t)$ и $S_j^{\alpha}(t)$ берется с соответствующими гамильтонианами.

Если пренебречь колебаниями решетки, т. е. положить

$$\langle e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j(0)} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{j'}(t)} \rangle \approx e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})}, \quad (3,7)$$

то выражение для сечения магнитного рассеяния принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{\mathbf{p}'}} = (r_0\gamma)^2 \frac{p'}{p} \sum_{jj'} F_j(\mathbf{q}) F_{j'}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha}e_{\beta}) \times \\ \times \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}})t} \langle S_j^{\alpha}(0) S_{j'}^{\beta}(t) \rangle dt. \end{aligned} \quad (3,8)$$

В дальнейшем, однако, мы будем использовать приближение (3,6), учитывая колебания решетки с помощью введения так называемого теплового фактора.

Выражения (3,1) и (3,8) будут основными в нашем изложении теории рассеяния. Мы видим, что сечения ядерного и магнитного рассеяний являются просто фурье-компонентами корреляторов ^{5,6}:

$$\langle e^{-iq\mathbf{R}_l(0)} e^{iq\mathbf{R}_{l'}(t)} \rangle, \quad \langle S_j^\alpha(0) S_{j'}^\beta(t) \rangle. \quad (3,9)$$

II. УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ

§ 4. Ядерное рассеяние в монокристаллах и поликристаллах

Дифференциальное сечение упругого рассеяния нейтронов на ядрах может быть получено из выражения (3,1), если в соответствующем корреляторе выделить член, не зависящий от времени. Наиболее естественно разбить коррелятор следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle e^{-iq\mathbf{R}_l(0)} e^{iq\mathbf{R}_{l'}(t)} \rangle = \\ = \langle e^{-iq\mathbf{R}_l(0)} e^{iq\mathbf{R}_{l'}(\infty)} \rangle + \{ \langle e^{-iq\mathbf{R}_l(0)} e^{iq\mathbf{R}_{l'}(t)} \rangle - \langle e^{-iq\mathbf{R}_l(0)} e^{iq\mathbf{R}_{l'}(\infty)} \rangle \}. \end{aligned} \quad (4,1)$$

Поскольку положения атомов на бесконечно большом отрезке времени не коррелируют между собой, первый член правой части в (4,1), ответственный за упругое рассеяние, равен

$$\langle e^{-iq\mathbf{R}_l(0)} e^{iq\mathbf{R}_{l'}(\infty)} \rangle = \langle e^{-iq\mathbf{R}_l} \rangle \langle e^{iq\mathbf{R}_{l'}} \rangle. \quad (4,2)$$

Подставляя разложение (4,1) в (3,1) и интегрируя по энергиям рассеянных нейтронов, получим для эффективного сечения упругого рассеяния в единицу телесного угла выражение

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \sum_{ll'} \overline{\langle \alpha_l \alpha_{l'} \rangle} \langle e^{-iq\mathbf{R}_l} \rangle \langle e^{iq\mathbf{R}_{l'}} \rangle. \quad (4,3)$$

Для простоты в дальнейшем будем рассматривать кристаллы, состоящий из атомов одного сорта, считая, однако, что могут быть различные изотопы. Выражение (4,3) следует усреднить по распределениям изотопов. Заметим прежде, что если разложить радиус-вектор \mathbf{R}_l на равновесную часть \mathbf{R}_l^0 и смещение \mathbf{U}_l :

$$\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_l^0 + \mathbf{U}_l, \quad (4,4)$$

то в выражении $\langle e^{-iq\mathbf{R}_l} \rangle \equiv e^{-iq\mathbf{R}_l^0} \langle e^{-iq\mathbf{U}_l} \rangle$ среднее значение от функции смещения \mathbf{U}_l не должно зависеть от l . Производя усреднение в сумме по l и l' из (4,3) по распределению изотопов, а также по ориентациям спинов в нейтронном пучке, в случае, если ядра рассеивателя имеют спин, представим выражение (4,3) в виде

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = \left\{ \sigma^{(0)} \left| \sum_l e^{iq\mathbf{R}_l^0} \right|^2 + N\sigma' \right\} e^{-2W\mathbf{q}}, \quad (4,5)$$

где введено обозначение

$$\sigma^{(0)} = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \overline{A^2}, \quad \sigma' = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \left[\overline{A^2} - \overline{A}^2 + \frac{1}{4} \overline{B^2 I(I+1)} \right], \quad (4,6)$$

$$e^{-2W\mathbf{q}} = \overline{| \langle e^{iq\mathbf{U}_l} \rangle |^2}. \quad (4,7)$$

В выражении (4,6) черта сверху означает среднее по распределению изотопов, например $\bar{A} = \sum_s A_s C_s$, где C_s — концентрация изотопа, для которого величина $A_l = A_s$, N — число ядер в кристалле, I — величина спина ядра. Введенная в (4,5) величина W_q называется тепловым фактором Дебая — Валлера¹². Он может быть вычислен с помощью соотношения (4,7).

Фазовая сумма, входящая в выражение (4,5), также легко вычисляется. Если в кристалле на одну элементарную ячейку приходится один атом, то имеет место соотношение^{1,13}

$$\left| \sum_l e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_l^0} \right|^2 = \frac{(2\pi)^3 N}{V_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}), \quad (4,8)$$

где $\boldsymbol{\tau}$ — вектор обратной решетки, умноженный на 2π , V_0 — объем элементарной ячейки. В случае, если в одной элементарной ячейке содержится несколько атомов, фазовую сумму по всем атомам следует разбить на сумму по атомам в пределах одной элементарной ячейки и сумму по всем элементарным ячейкам. Это даст¹

$$\left| \sum_l e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_l^0} \right|^2 = \frac{(2\pi)^3 N}{V_0} S(\mathbf{q}) \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}), \quad (4,9)$$

где

$$S(\mathbf{q}) = \left| \sum_v e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_v^0} \right|^2 \quad (4,10)$$

— структурный фактор: суммирование по v распространяется по всем атомам одной ячейки.

Подставляя выражение (4,8) в (4,5), получаем формулу для дифференциального сечения упругого ядерного рассеяния

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = \sigma^{(0)} \frac{(2\pi)^3 N}{V_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) e^{-2W_q} + N\sigma' e^{-2W_q}. \quad (4,11)$$

Первое слагаемое дает резкие максимумы интенсивности рассеянных нейтронов, определяемые формулой Вульфа — Брэгга

$$\mathbf{p}' - \mathbf{p} = \boldsymbol{\tau}. \quad (4,12)$$

Это слагаемое описывает когерентное рассеяние нейтронов. Второе слагаемое описывает некогерентное рассеяние. Если не считать множителя e^{-2W_q} , то оно не зависит от угла рассеяния и подобно фону, наблюдаемому при рассеянии рентгеновских лучей.

Из соотношений (4,6) видно, что когерентное рассеяние определяется средним значением (по распределению изотопов) величины \bar{A} . Некогерентное рассеяние определяется квадратичной флуктуацией величины A и величиной $B^2 I$ ($I + 1$), зависящей от спина ядра. Таким образом, когерентное рассеяние обуславливается столкновениями нейтрона с ядрами без изменения направления спина, а при некогерентном рассеянии может меняться спин нейтрона.

Вернемся к соотношению (4,12). Для упругого рассеяния $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$, что возможно при условии $p > \frac{\tau}{2}$, поэтому упругое когерентное рассеяние на отличный от нуля угол возможно, только если $p > \tau_{\min}/2$, где τ_{\min} — наименьший вектор обратной решетки. Этот же факт удобно выразить

так: когерентное упругое рассеяние невозможно, если длина волны нейтрона больше брэгговской длины волны $\lambda_B = 4\pi/\tau_{\min}$. Можно показать, что неупругое рассеяние также невозможно при этих условиях. Отсюда следует, что если на кристалл, состоящий из моноизотопных атомов, ядра которых не имеют спина, падает пучок тепловых нейтронов, то в направлении первоначального пучка после выхода из кристалла будут двигаться только такие нейтроны, волновой вектор которых меньше $\tau_{\min}/2$. Таким образом, можно отфильтровать очень медленные, так называемые холодные нейтроны. В качестве такого фильтра может служить поликристаллические графит, бериллий, окись бериллия и др.

Вычислим теперь тепловой фактор W_q , используя определение (4,7). Как известно, смещение атомов из положения равновесия может быть разложено в ряд Фурье*)

$$U_l = \sum_{kj} \mathbf{e}_j(\mathbf{k}) \left[\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\mathbf{k})} \right]^{1/2} (b_{kj} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l^0} + b_{kj}^+ e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l^0}) \quad (4,13)$$

с квантованными бозе-амплитудами, подчиняющимися перестановочным соотношениям

$$[b_{kj}, b_{k'j'}] = 0, \quad [b_{kj}, b_{k'j'}^+] = \delta_{jj'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}. \quad (4,14)$$

Здесь \mathbf{k} и $\mathbf{e}_j(\mathbf{k})$ — волновой вектор и вектор поляризации фонона, $\omega_j(\mathbf{k})$ — его частота, $j = 1, 2, 3$ — индекс поляризации фонона, M — масса атома.

Энергетический спектр колебаний решетки представляется тогда суммой определенного числа фононов:

$$\mathcal{H} = \sum_{kj} \hbar \omega_j(\mathbf{k}) b_{kj}^+ b_{kj}. \quad (4,15)$$

С помощью выражения (4,13) легко написать

$$\langle e^{iqU_l} \rangle = \langle \prod_{kj} e^{i[\eta_{kj}^l b_{kj} + \eta_{kj}^{*l} b_{kj}^+]} \rangle, \quad (4,16)$$

где для краткости обозначено

$$\eta_{kj}^l = \left[\frac{\hbar}{2MN\omega_j(\mathbf{k})} \right]^{1/2} (q \mathbf{e}_j(\mathbf{k})) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l^0}. \quad (4,17)$$

Из формулы (4,16) с учетом аддитивности оператора энергии (4,15) следует

$$\langle e^{iqU_l} \rangle = \prod_{kj} \langle e^{i[\eta_{kj}^l b_{kj} + \eta_{kj}^{*l} b_{kj}^+]} \rangle_{kj}, \quad (4,18)$$

где

$$\langle \dots \rangle_{kj} = \frac{\text{Sp} [e^{-\beta \hbar \omega_j(\mathbf{k}) b_{kj}^+ b_{kj}} \dots]}{\text{Sp} e^{-\beta \hbar \omega_j(\mathbf{k}) b_{kj}^+ b_{kj}}}. \quad (4,19)$$

*) Если элементарная ячейка состоит не из одного, а из нескольких атомов (в общем случае различных), вместо разложения (4,13) следует писать

$$U_{lv} = \sum_{kj} \left[\frac{\hbar}{2M_v \omega_j(\mathbf{k}) N} \right]^{1/2} [e_j^v(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l^0} b_{kj} + e_j^{*v}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l^0} b_{kj}^+], \quad (4,13')$$

где комплексные векторы поляризации $\mathbf{e}_j^v(\mathbf{k})$ удовлетворяют соотношениям ортонормировки

$$\sum_v \mathbf{e}_j^v(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^{*v}(\mathbf{k}) = \delta_{jj'}, \quad \sum_j \mathbf{e}_j^{\gamma\alpha}(\mathbf{k}) \mathbf{e}_j^{*\gamma\beta}(\mathbf{k}) = \delta_{\gamma\gamma'} \delta_{\alpha\beta}.$$

Здесь $\mathbf{e}_j^{\gamma\alpha}(\mathbf{k})$ — проекция вектора $\mathbf{e}_j^v(\mathbf{k})$ на ось $\alpha = x, y, z$.

Разлагая экспоненту в (4,18) в ряд и вычисляя шпуры от отдельных слагаемых, представим все выражение в виде

$$\langle e^{iqU_l} \rangle = \prod_{kj} \left\{ 1 - \frac{1}{2} |\eta_{kj}^l|^2 [2n_j(\mathbf{k}) + 1] + O(N^{-2}) \right\}, \quad (4,20)$$

причем

$$n_j(\mathbf{k}) \equiv \langle b_{kj}^+ b_{kj} \rangle_{kj} = (e^{\beta \hbar \omega_j(\mathbf{k})} - 1)^{-1} \quad (4,21)$$

— бозевская функция распределения для среднего числа фононов в состоянии kj при температуре $T = 1/\beta k$. Остаточный член включает члены разложения $\sim N^{-2}$ и более высокого порядка малости.

Если обозначить

$$a_{kj} = \frac{1}{2} |\eta_{kj}^l|^2 [2n_j(\mathbf{k}) + 1],$$

то выражение (4,20) легко представить в виде¹⁴

$$\begin{aligned} \langle e^{iqU_l} \rangle &= \prod_{kj} [1 - a_{kj} + O(N^{-2})] = \\ &= 1 - \sum_{kj} a_{kj} + \frac{1}{2!} \sum_{kj \neq k'j'} a_{kj} a_{k'j'} - \frac{1}{3!} \sum_{kj \neq k'j' \neq k''j''} a_{kj} a_{k'j'} a_{k''j''} + \\ &\quad + \sum_{kj} O(N^{-2}) + \sum_{kj \neq k'j'} a_{kj} O(N^{-2}) + \dots \end{aligned} \quad (4,22)$$

Так как сумма по \mathbf{k} содержит N слагаемых, все члены, содержащие суммы произведений a_{kj} , порядка 1, а члены, содержащие наряду с a_{kj} также и $O(N^{-2})$, по крайней мере порядка N^{-1} , и ими можно пренебречь. Из подобных же соображений ясно, что сумму, содержащую m множителей a_{kj} , можно заменить на $(\sum_{kj} a_{kj})^m$, делая при этом ошибку порядка N^{-1} , поэтому вместо (4,22) получаем

$$\langle e^{iqU_l} \rangle = 1 - \sum_{kj} a_{kj} + \frac{1}{2} \left(\sum_{kj} a_{kj} \right)^2 - \frac{1}{3!} \dots + O(N^{-1}) \approx e^{-\sum_{kj} a_{kj}}$$

с точностью до членов порядка N^{-1} .

Подставляя этот результат в (4,7), находим*)

$$W_q = \frac{\hbar}{2MN} \sum_{kj} \frac{[q e_j(\mathbf{k})]^2}{\omega_j(\mathbf{k})} \left[n_j(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \right]. \quad (4,23)$$

Это выражение можно вычислить путем перехода от суммирования к интегрированию:

$$\sum_{\mathbf{k}} \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \dots \quad (4,24)$$

В кубическом кристалле энергии фононов всех трех ветвей совпадают. Если учесть еще, что для такого кристалла $\sum_j (q e_j(\mathbf{k}))^2 = q^2$, то в приближении теории Дебая, когда принимается, что $\omega_j(\mathbf{k}) = ck$

*) Если элементарная ячейка состоит из нескольких атомов, то для атома v тепловой фактор W_q^v также задается выражением (4,23) с соответствующим значением массы атома M_v и вектора поляризации $e_j^v(\mathbf{k})$.

(c — скорость звука), выражение (4,23) сводится к следующему:

$$W_q = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 q^2}{M\theta} \left(\frac{1}{4} + \left(\frac{T}{\theta} \right)^2 \int_0^{\theta/T} \frac{x dx}{e^x - 1} \right). \quad (4,25)$$

Здесь θ — температура Дебая *). Таким образом, для кубического кристалла зависимость теплового фактора от направления рассеяния определяется множителем $q^2 = 16\pi^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} / \lambda^2$, где θ — угол между рассеянным и падающим пучком, λ — длина волны нейтронов в падающем пучке. При наличии анизотропии скорости звука в некубических кристаллах угловая зависимость W_q будет сложнее.

Формулы (4,11) относятся к рассеянию на монокристаллах. Для того чтобы получить сечения рассеяния в поликристаллах, надо полученные выше сечения усреднить по ориентациям микрокристаллов, предполагая, что все ориентации равновероятны.

Рассмотрим упругое когерентное рассеяние.

Для усреднения по ориентациям микрокристаллов достаточно в выражении

$$\frac{d\sigma_0^{\text{ког}}}{d\Omega} = \sigma^{(0)} \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\tau} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) e^{-2W_q} \quad (4,26)$$

усреднить¹ δ -функцию по всем ориентациям $\boldsymbol{\tau}$; при этом мы предполагаем, что зависимость теплового фактора от \mathbf{q} определяется величиной q^2 . Так как

$$\int d\Omega_{\tau} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) = \frac{1}{\tau^2} \delta(q - \tau) = \frac{1}{\tau^2} \delta\left(2p \sin \frac{\theta}{2} - \tau\right), \quad (4,27)$$

после усреднения (4,26) получаем

$$\left(\frac{d\sigma_0^{\text{ког}}}{d\Omega} \right)_{\text{поликр}} = \sigma^{(0)} \frac{(2\pi)^3 N}{V_0} \sum_{\tau} \frac{a_{\tau}}{\tau^2} e^{-2W_{\tau}} \delta(2p \sin \theta - \tau), \quad (4,28)$$

где a_{τ} — число различных векторов обратной решетки с длиной τ .

Из выражения (4,28) следует, что вместо отдельных дифракционных максимумов, определяемых равенством: $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \boldsymbol{\tau}$, которые были в монокристалле, при рассеянии в поликристалле имеются дифракционные конусы с осью вдоль \mathbf{p} и с углами между образующими и осью, определяемыми условиями

$$2p \sin \frac{\theta}{2} = \tau, \quad (4,29)$$

вдоль образующих которых рассеиваются нейтроны.

Интегрируя (4,28) по $d\Omega$, получим полное сечение когерентного рассеяния в поликристалле:

$$(\sigma_0^{\text{ког}})_{\text{поликр}} = \sigma^{(0)} \frac{4\pi^3 N}{V_0 p^2} \sum_{\tau \leq 2p} \frac{a_{\tau}}{\tau} e^{-2W_{\tau}}. \quad (4,30)$$

*) В последнее время была предпринята попытка вычисления теплового фактора с помощью более строгой теории колебания решеток, нежели теория Дебая. Эти работы были стимулированы открытием эффекта Мёссбауэра, для которого оказалось, что вероятность испускания γ -кванта ядром, находящимся в кристалле, без отдачи, определяется выражением e^{-W_q} . Как показано Каганом¹⁵, температура Дебая является удовлетворительной характеристикой теплового фактора лишь для одноатомной решетки. Уже в случае двухатомной решетки она не является даже приближенной характеристикой температурной зависимости теплового фактора. В случае многоатомных решеток оказывается существенной роль оптических ветвей колебаний.

Из формулы (4,30) видно, что с ростом p сечение увеличивается скачком, когда p достигает величины, равной половине какого-либо вектора обратной решетки τ . Затем оно уменьшается обратно пропорционально p^2 , т. е. энергии нейтрона, до тех пор, пока p не достигает половины модуля следующего по величине вектора обратной решетки. С увеличением p все большее число плоскостей, характеризуемых векторами τ , начинает участвовать в отражении, поэтому сечение постепенно становится плавно меняющейся функцией энергии нейтронов.

Из выражения (4,30) следует также, что полное когерентное сечение в поликристалле равно нулю, если $p < \tau_{\min}/2$. Это вполне естественно, так как при этом условии когерентное рассеяние в отдельных монокристаллах невозможно.

§ 5. Магнитное рассеяние в монокристаллах и поликристаллах

Дифференциальное сечение магнитного рассеяния на атомных спинах определяется формулой (3,8). Рассмотрим сначала рассеяние в парамагнетиках, для которых взаимодействием атомных спинов можно пренебречь. В этом случае $S_j^\alpha(t) \equiv S_j^\alpha$, так что из (3,8) видно, что рассеяние будет упругим. Поскольку между ориентациями атомных спинов парамагнетика нет никакой корреляции, а все ориентации равновероятны, имеет место соотношение

$$\langle S_j^\alpha S_{j'}^\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{jj'} \langle (S_j^\alpha)^2 \rangle = \frac{1}{3} S(S+1) \delta_{\alpha\beta} \delta_{jj'}. \quad (5,1)$$

Подставляя это выражение в (3,8) и интегрируя по энергии рассеянных нейтронов, получаем¹⁰

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = N \frac{2}{3} S(S+1) (r_0 \gamma)^2 F^2(\mathbf{q}). \quad (5,2)$$

Таким образом, угловая зависимость интенсивности рассеянных в парамагнетике нейтронов определяется целиком угловой зависимостью магнитного фактора.

В случае ферромагнетика между атомными спинами существует сильное обменное взаимодействие, приводящее к спонтанной упорядоченности спинов. Всякая переориентация спина отдельного атома связана с затратой энергии против обменных сил, поэтому магнитное рассеяние нейтронов в ферромагнетике может быть упругим и неупругим.

Чтобы выделить из сечения (3,8) упругую часть, заменим, как и в случае ядерного рассеяния, временной коррелятор $\langle S_j^\alpha(0) S_{j'}^\beta(t) \rangle$ не зависящим от времени выражением $\langle S_j^\alpha(0) S_{j'}^\beta(\infty) \rangle$. Поскольку между ориентациями спинов на бесконечно большом промежутке времени нет корреляции, можно написать

$$\langle S_j^\alpha(0) S_{j'}^\beta(\infty) \rangle \cong \langle S_j^\alpha \rangle \langle S_{j'}^\beta \rangle. \quad (5,3)$$

Пусть среднее значение спина в узле j на направление спонтанного момента есть $S_j(T)$; это есть функция температуры, пропорциональная намагниченности ферромагнетика.

Из теории ферромагнетизма известно, что для температур, меньших температуры Кюри, но не близких к ней, среднее значение компонент спинов, перпендикулярных к направлению спонтанного момента, равно нулю. Учитывая этот факт, после подстановки соотношения (5,3) в (3,8) и интегрирования по энергии рассеянных нейтронов, получаем выражение для дифференциального сечения упругого рассеяния

в ферромагнетиках

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = (r_0\gamma)^2 \sum_{jj'} F_j(\mathbf{q}) F_{j'}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} S_j(T) S_{j'}(T) [1 - (\mathbf{em})^2], \quad (5,4)$$

где \mathbf{m} — единичный вектор в направлении спонтанного магнитного момента кристалла. В (5,4) суммирование по j проводится по магнитным атомам кристалла. Если ферромагнетик состоит из одинаковых магнитных атомов, то $F_j(\mathbf{q}) = F(\mathbf{q})$ и $S_j(T) = S(T)$ не зависят от номера узла и могут быть вынесены за знак суммы. Сумму по фазовым факторам можно преобразовать к виду (4,8), после чего выражение для сечения упругого рассеяния запишется в виде

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = (r_0\gamma)^2 S^2(T) F^2(\mathbf{q}) [1 - (\mathbf{em})^2]^2 \frac{(2\pi)^3 N}{V_0} \sum_{\tau} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) e^{-2i\mathbf{W}\mathbf{q}}. \quad (5,5)$$

Для ферромагнетиков, состоящих из магнитных и немагнитных атомов, магнитная ячейка совпадает с химической, однако расположение магнитных моментов внутри элементарной ячейки приводит к появлению в сечении рассеяния структурного фактора магнитного рассеяния, аналогичного ядерному (4,10).

Таким образом, при рассеянии нейтронов в ферромагнетике возникают когерентные максимумы интенсивности при углах, соответствующих условиям (4,12) Вульфа — Брэгга. Эти максимумы накладываются на максимумы интенсивности ядерного рассеяния. Поскольку сечение магнитного рассеяния пропорционально квадрату намагниченности, когерентное магнитное рассеяние должно исчезать выше температуры Кюри и, таким образом, когерентные максимумы в парамагнитной области соответствуют ядерному рассеянию.

Угловая зависимость когерентного упругого магнитного рассеяния значительно сложнее соответствующего ядерного рассеяния, поскольку она определяется дополнительно угловой зависимостью магнитного фактора, а также фактора $1 - (\mathbf{em})^2$, зависящего от ориентации вектора рассеяния по отношению к вектору \mathbf{m} спонтанного магнитного момента.

В случае сложного магнетика (типа феррита или антиферромагнетика) нужно учесть, что элементарная магнитная ячейка не совпадает с химической, а больше ее. Такой магнетик часто можно рассматривать состоящим из ряда $v = 1, 2, \dots, n$ отдельных подрешеток, вставленных одна в другую, направление спонтанного момента которых характеризуется единичным вектором \mathbf{m}_v . По отношению к среднему значению спина $S_v(T)$ в каждой из таких подрешеток справедливы те же соображения, какие были высказаны по отношению к простому ферромагнетiku, состоящему из одной подрешетки (см. соотношение (5,3) и последующий текст). Разбивая в выражении (3,8) сумму \sum_j на сумму \sum_s по магнитным ячейкам и сумму \sum_v по магнитным атомам внутри одной магнитной ячейки, или, что то же самое, по подрешеткам (поскольку с каждым магнитным атомом элементарной магнитной ячейки мы в общем случае связываем свою подрешетку), получаем для сечения рассеяния выражение¹⁶

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = (r_0\gamma)^2 \frac{(2\pi)^3 N_m}{V_{0m}} \sum_{vv'} F_v(\mathbf{q}) F_{v'}(\mathbf{q}) S_v(T) S_{v'}(T) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}_v - \mathbf{r}_{v'})} e^{-i\mathbf{W}_v\mathbf{q} - i\mathbf{W}_{v'}\mathbf{q}} \cdot [\mathbf{m}_v \mathbf{m}_{v'} - (\mathbf{em}_v)(\mathbf{em}_{v'})] \cdot \sum_{\tau_m} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}_m). \quad (5,6)$$

Здесь N'_m — число магнитных ячеек в кристалле, V_{0m} — объем элементарной магнитной ячейки, τ_m — вектор обратной магнитной решетки (умноженный на 2π), W_{vq} — тепловой фактор *), соответствующий атому v -й подрешетки.

При получении выражения (5,6) мы использовали соотношение

$$\left| \sum_s e^{iqR_s} \right|^2 = \frac{(2\pi)^3 N'_m}{V_{0m}} \sum_{\tau_m} \delta(\mathbf{q} - \tau_m), \quad (5,7)$$

аналогичное (4,8).

Таким образом, при магнитном упругом рассеянии нейтронов в магнетиках возникают когерентные максимумы интенсивности в местах, соответствующих брэгговским отражениям от плоскостей магнитной решетки. Если элементарная магнитная ячейка больше химической, должны возникать чисто магнитные максимумы рассеяния, не обязательно совпадающие с ядерными. Выше точки Кюри или точки Нееля они не существуют. Экспериментальное изучение этих максимумов с помощью соотношений типа (5,6) позволяет определять магнитную структуру магнетика. Соотношение типа (5,6) лежит в основе магнитной нейтронографии.

Из соотношения (5,6) легко получить частную формулу для сечения рассеяния в антиферромагнетике, состоящем из двух эквивалентных коллинеарных подрешеток:

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = (r_0 \gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) e^{-2W_{\mathbf{q}}} (1 - e_z^2) [1 - \cos(\mathbf{q} \mathbf{r}_{12})] \frac{(2\pi)^3 N'_m}{V_{0m}} \sum_{\tau_m} \delta(\mathbf{q} - \tau_m). \quad (5,8)$$

Здесь e_z — проекция вектора рассеяния на направление какой-либо подрешетки, \mathbf{r}_{12} — вектор, направленный из одного магнитного атома в соседний атом второй подрешетки. Формула (5,8) эквивалентна формуле (5,5) для рассеяния в ферромагнетике. Самое существенное различие состоит в том, что совокупности векторов $\{\tau\}$ и $\{\tau_m\}$ различны. Магнитная ячейка в данном случае в два раза больше химической. Температурная зависимость интенсивности антиферромагнитных пиков определяется квадратом намагнитченности какой-либо подрешетки.

Недавно были обнаружены новые магнитные структуры (MnAu_2 , Ho , Dy , Er и др.), в которых имеется совершенно особый магнитный порядок. Эти структуры характеризуются тем, что вдоль некоторого кристаллического направления, являющегося осью симметрии высокого порядка, ориентация спинов при переходе от одного атома к другому меняется периодически, причем период этого изменения не совпадает с периодом кристаллической решетки и может изменяться с температурой. Среди большого класса таких структур, получивших название геликоидальных, или винтовых, наиболее простейшей является так называемая ферромагнитная спираль (FS). Составляющие спинов на базисную плоскость в такой спирали испытывают периодическое вращение с некоторым углом ϕ , а составляющие на ось геликоида постоянны. Такой кристалл в целом является ферромагнетиком. Частным случаем структуры FS является простая спираль (SS), не имеющая ферромагнитной составляющей.

*) При получении выражения (5,5) из (5,4) мы дополнительно учли влияние на магнитное рассеяние нейтронов тепловых колебаний решетки по схеме соотношений (3,3), (3,6) и (4,7). Оно сводится к появлению множителя $e^{-2W_{\mathbf{q}}}$ в сечении чисто магнитного рассеяния. В дальнейшем все выражения, получаемые из общей формулы (3,8) для сечения магнитного рассеяния, мы будем исправлять на тепловой фактор $e^{-2W_{\mathbf{q}}}$.

Если спин атома, находящегося в начале координат, обозначить S_0 , то спин атома в узле j можно задать следующим преобразованием:

$$S_j = S_0^z \mathbf{m} + \frac{1}{2} S_0^- e^{-ik_0 R_j} \mathbf{m}^+ + \frac{1}{2} S_0^+ e^{ik_0 R_j} \mathbf{m}^-,$$

где \mathbf{m} — единичный вектор вдоль оси геликоида, $\mathbf{m}^\pm = \mathbf{m}^x \pm i\mathbf{m}^y$, где $\mathbf{m}^x, \mathbf{m}^y$ — единичные векторы в базисной плоскости, \mathbf{k}_0 — вектор, направленный вдоль оси геликоида ($\mathbf{k}_0 \parallel \mathbf{m}$) такой длины, что $k_0 c = \varphi$ — угол между двумя соседними спинами геликоида (c — расстояние между двумя магнитными атомами по оси геликоида).

Из выражения (3,8) следует, что поперечник упругого магнитного рассеяния в случае одинаковых магнитных атомов в кристалле равен

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = (r_0 \gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \sum_{jj'} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha} e_{\beta}) \langle S_j^\alpha S_{j'}^\beta \rangle.$$

С помощью предыдущего соотношения сумму по α и β можно переписать в виде

$$\sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha} e_{\beta}) \langle S_j^\alpha S_{j'}^\beta \rangle = \langle (S_0^z)^2 \rangle [1 - (\mathbf{em})^2] + \\ + \frac{1}{4} \langle (S_0^- S_0^+) \rangle [1 + (\mathbf{em})^2] e^{-ik_0 (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} + \frac{1}{4} \langle (S_0^+ S_0^-) \rangle [1 + (\mathbf{em})^2] e^{ik_0 (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} + \dots$$

Невыписанные члены содержат фазовые факторы вида $e^{\pm ik_0 (\mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{j'})}$.

После подстановки этого выражения в формулу для $\frac{d\sigma_0}{d\Omega}$ члены с факторами $e^{\pm ik_0 (\mathbf{R}_j + \mathbf{R}_{j'})}$ при суммировании по j и j' исчезают; тогда, используя соотношение (4,8), получаем окончательно

$$\frac{d\sigma_0}{d\Omega} = (r_0 \gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) \frac{(2\pi)^3 N}{V_0} \sum_{\tau} \left\{ \cos^2 \alpha [1 - (\mathbf{em})^2] \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{4} \sin^2 \alpha [1 + (\mathbf{em})^2] \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau} + \mathbf{k}_0) + \frac{1}{4} \sin^2 \alpha [1 + (\mathbf{em})^2] \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau} - \mathbf{k}_0) \right\} e^{-2W\mathbf{q}}, \quad (5,8')$$

где $S(T)$ — среднее при данной температуре значение проекции спина атома на равновесное положение, а α — угол между осью геликоида и направлением равновесного положения спинов.

Из формулы (5,8) видно, что имеется для каждого τ три магнитных пика. Один пик, при условии $\mathbf{q} = \boldsymbol{\tau}$, обусловлен «ферромагнитной» составляющей спина; он отсутствует в случае простой спирали. Два других должны быть при условиях $\mathbf{q} \pm \mathbf{k}_0 = \boldsymbol{\tau}$ связаны с проекциями спинов на базисную плоскость. Обычно $k_0 \ll \tau$, поэтому последние два магнитных пика должны быть близко расположены по отношению к ядерному пику $\mathbf{q} = \boldsymbol{\tau}$. Наличие такого «трезубца», состоящего из ядерного пика в центре и двух магнитных пиков по бокам, и привело к открытию геликоидальной структуры *).

Формула (5,5) относится к рассеянию в ферромагнитном монокристалле. Чтобы получить поперечник рассеяния в поликристалле, нужно

*) Впервые такой «трезубец» был обнаружен на нейтронограмме MnO_2 Эриксоном⁴⁹. Интерпретация такой нейтронограммы в духе геликоидальной структуры была дана Ишимори⁵⁰. В работе Кёлера⁵¹ дан общий метод интерпретации нейтронограмм геликоидальных структур. Теория геликоидального упорядочения развита Капланом⁵². Температурное изменение шага винта теоретически вычислено в работе⁵³.

усреднить это выражение по направлению векторов τ . При этом получаем¹⁷

$$\left(\frac{d\sigma_0}{d\Omega}\right)_{\text{поликр}} = (r_0\gamma)^2 S^2(T) (1 - e_z^2) \frac{2\pi^2 N}{V_0} \sum_{\tau \leq 2p} \frac{a\tau F^2(\tau)}{\tau^2} e^{-2W\tau} \delta(q - \tau). \quad (5,9)$$

Как и в случае ядерного рассеяния в поликристалле, магнитно рассеянные нейтроны движутся вдоль образующих конусов с осью вдоль вектора \mathbf{p} и раствором на угол 2θ . Угловая зависимость интенсивности, однако, сложнее, чем для ядерного рассеяния.

Представляет интерес еще вычислить полное рассеяние в поликристалле, для чего нужно проинтегрировать выражение (5,9) по всем углам рассеянных нейтронов, т. е. по $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$; θ — полярный угол вектора \mathbf{p}' в системе координат, где за ось z выбрано направление \mathbf{p} . Нетрудно показать, что e_z^2 следующим образом выражается через углы θ и φ :

$$e_z^2 = \left(\cos \frac{\theta}{2} \sin \varphi \sin \xi - \sin \frac{\theta}{2} \cos \xi \right)^2, \quad (5,10)$$

где ξ — угол между \mathbf{p} и намагниченностью \mathbf{m} , а φ — азимутальный угол вектора \mathbf{p}' , отсчитанный в плоскости, перпендикулярной к вектору \mathbf{p} от оси, направленной вдоль вектора $[\mathbf{p} \times \mathbf{m}]$.

Подставляя (5,10) в (5,9) и интегрируя по $d\Omega$, находим полное сечение в поликристалле

$$\langle \sigma_0 \rangle_{\text{поликр}} = (r_0\gamma)^2 S^2(T) \frac{(2\pi)^3}{4V_0 p^2} \sum_{\tau \leq 2p} \frac{a\tau F^2(\tau)}{\tau} c^{-2u} \tau \left[1 + \cos^2 \xi + \frac{\tau^2}{4p^2} (1 - 3\cos^2 \xi) \right]. \quad (5,11)$$

Существенное отличие этого выражения от (4,30) состоит в том, что полное сечение зависит от ориентации начального пучка нейтронов по отношению к магнитному моменту образца. Так же как и для ядерного рассеяния, оно увеличивается скачком при увеличении энергии нейтронов.

III. НЕУПРУГОЕ ОДНОКВАНТОВОЕ РАССЕЯНИЕ

§ 6. Рассеяние с испусканием и поглощением фонона

В этом параграфе мы подробно исследуем ядерное рассеяние в монокристалле. Будем исходить из общей формулы (3,1) для дифференциального сечения рассеяния. Как и в § 4, разложим координаты ядер \mathbf{R}_l на равновесную часть \mathbf{R}_l^0 и смещение \mathbf{U}_l . Разлагая смещение \mathbf{U}_l в ряд Фурье (4,13), представим выражение (3,1) в виде

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} = \frac{m^2}{(2\pi)^2 \hbar^4} \frac{p'}{p} \sum_{ll'} \langle \alpha_l \alpha_{l'} \rangle I_{ll'}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_l^0 - \mathbf{R}_{l'}^0)}, \quad (6,1)$$

где

$$I_{ll'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_{p'} - E_p)t} \prod_{\mathbf{k}j} \langle e^{-i[\eta_{\mathbf{k}j}^l b_{\mathbf{k}j} + \eta_{\mathbf{k}j}^{l*} b_{\mathbf{k}j}^*]} \cdot e^{i[\eta_{\mathbf{k}j}^{l'} b_{\mathbf{k}j} + (\eta_{\mathbf{k}j}^{l'} b_{\mathbf{k}j}^*)^*]} \rangle_{\mathbf{k}j}. \quad (6,2)$$

Здесь

$$b_{\mathbf{k}j}(t) = b_{\mathbf{k}j} e^{-i\omega_j(\mathbf{k})t}, \quad b_{\mathbf{k}j}^*(t) = b_{\mathbf{k}j}^* e^{i\omega_j(\mathbf{k})t} \quad (6,3)$$

— операторы $b_{\mathbf{k}j}$ и $b_{\mathbf{k}j}^*$ в гейзенберговском представлении.

Разложим экспоненты под знаком среднего в выражении (6,2) в ряд по степеням аргумента. С точностью до членов порядка $|\eta_{kj}^l|^2$ получим после усреднения

$$I_{ll'}(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}})t} \prod_{\mathbf{k}j} \{1 - |\eta_{kj}^l|^2 \cdot [2n_j(\mathbf{k}) + 1] + \\ + \eta_{kj}^l \eta_{kj}^{l'} [1 + n_j(\mathbf{k})] e^{i\omega_j(\mathbf{k})t} + \eta_{kj}^{l'} \eta_{kj}^l n_j(\mathbf{k}) e^{-i\omega_j(\mathbf{k})t} + \dots\}, \quad (6,4)$$

где $n_j(\mathbf{k})$ — функция распределения для фононов, определяемая выражением (4,21). Далее, с точностью до членов $\sim N^{-1}$ произведение $\prod_{\mathbf{k}j}$ в (6,4) можно представить в виде

$$\prod_{\mathbf{k}j} \dots \approx \prod_{\mathbf{k}j} \{1 - |\eta_{kj}^l|^2 (2n_j(\mathbf{k}) + 1)\} \{1 + \eta_{kj}^l \eta_{kj}^{l'} [1 + n_j(\mathbf{k})] e^{i\omega_j(\mathbf{k})t} + \\ + \eta_{kj}^{l'} \eta_{kj}^l n_j(\mathbf{k}) e^{-i\omega_j(\mathbf{k})t} + \dots\} \approx \\ \approx e^{-\sum_{\mathbf{k}j} |\eta_{kj}^l|^2 (2n_j(\mathbf{k}) + 1)} \{1 + \sum_{\mathbf{k}j} [\eta_{kj}^l \eta_{kj}^{l'} (1 + n_j(\mathbf{k})) e^{i\omega_j(\mathbf{k})t} + \\ + \eta_{kj}^{l'} \eta_{kj}^l n_j(\mathbf{k}) e^{-i\omega_j(\mathbf{k})t}]\}. \quad (6,5)$$

Интегрируя в выражении (6,4) по времени, получим теперь

$$I_{ll'}(\mathbf{q}) = e^{-2W_{\mathbf{q}}} \left\{ \delta(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}}) + \sum_{\mathbf{k}j} [\eta_{kj}^l \eta_{kj}^{l'} (1 + n_j(\mathbf{k})) \delta(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}} + \hbar\omega_j(\mathbf{k})) + \right. \\ \left. + \eta_{kj}^{l'} \eta_{kj}^l n_j(\mathbf{k}) \delta(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}} - \hbar\omega_j(\mathbf{k})) \right\}.$$

Подставим это выражение в (6,1). Усредняя сумму $\sum_{ll'}$ по распределению изотопов и используя преобразование (4,8), находим следующее выражение для дифференциального сечения рассеяния:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{\mathbf{p}'}} = N \left\{ \sigma^{(0)} \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\mathbf{\tau}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{\tau}) + \sigma' \right\} e^{-2W_{\mathbf{q}}} \delta(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}}) + \\ + N \frac{p'}{p} \sum_{\mathbf{k}j} \left\{ \sigma^{(0)} \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\mathbf{\tau}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k} - \mathbf{\tau}) + \sigma' \right\} e^{-2W_{\mathbf{q}}} \frac{\hbar (q_{ej}(\mathbf{k}))^2}{2MN\omega_j(\mathbf{k})} (1 + n_j(\mathbf{k})) \delta(E_{\mathbf{p}'} - \\ - E_{\mathbf{p}} + \hbar\omega_j(\mathbf{k})) + N \frac{p'}{p} \sum_{\mathbf{k}j} \left\{ \sigma^{(0)} \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\mathbf{\tau}} \delta(\mathbf{q} + \mathbf{k} - \mathbf{\tau}) + \sigma' \right\} e^{-2W_{\mathbf{q}}} \frac{\hbar (q_{ej}(\mathbf{k}))^2}{2MN\omega_j(\mathbf{k})} \times \\ \times n_j(\mathbf{k}) \delta(E_{\mathbf{p}'} - E_{\mathbf{p}} - \hbar\omega_j(\mathbf{k})), \quad (6,6)$$

где $\sigma^{(0)}$ и σ' — константы (4,6), определяющие когерентное и некогерентное рассеяние. Отдельные члены в выражении (6,6) имеют следующий смысл.

Первый член представляет дифференциальное сечение упругого ядерного рассеяния. Если его проинтегрировать по энергиям рассеянных нейтронов, то получим выражение для сечения рассеяния в единицу телесного угла, совпадающее с (4,11). Второй член описывает, так же как и третий, неупругое рассеяние. Первый из них дает сечение рассеяния с испусканием фонона, второй — с поглощением фонона. Как видно из (6,6), эти процессы приводят как к когерентному, так и некогерентному рассеянию. δ -функции, стоящие в (6,6), учитывают законы сохранения энергии и квазиимпульса при столкновении нейтрона с фононом.

Члены неупругого рассеяния, выписанные в (6,6), соответствуют одноквантовому рассеянию, т. е. такому рассеянию, при котором число фононов в рассеивателе изменяется на единицу. Если разложение экспонент в выражении (6,2) производить до более высоких степеней, можно получить выражение для сечений рассеяния с многофононными переходами, при которых поглощается или испускается сразу несколько фононов. Роль этих процессов была исследована в работах¹⁸. Здесь мы не будем рассматривать их подробно. Важно лишь подчеркнуть, что при температурах ниже дебаевской основной вклад в неупругое рассеяние вносят однофононные процессы.

Рассмотрим подробнее некогерентное однофононное рассеяние. Соответствующее сечение рассеяния, согласно (6,6), можно записать в виде

$$\frac{d^2\sigma_{\text{неког}}^{\pm 1}}{d\Omega dE_{p'}} = \sigma' e^{-2W_q} \sum_{kj} \frac{\hbar (q e_j(\mathbf{k}))^2}{2M\omega_j(\mathbf{k})} \left[n_j(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \frac{p'}{p} \delta(E_{p'} - E_p \pm \hbar\omega_j(\mathbf{k})). \quad (6,7)$$

Верхний знак соответствует рассеянию с испусканием, нижний — с поглощением фонона. Сумму по \mathbf{k} , вообще говоря, вычислить в общем невозможно, поскольку нам не известен вид функций $\omega_j(\mathbf{k})$. Исследуем поэтому, какие физические следствия можно извлечь из анализа выражения (6,7).

Прежде всего получаем, что нейтроны, рассеянные в любом направлении, имеют непрерывный энергетический спектр в интервале

$$E_p \leq E_{p'} \leq E_p + \hbar\omega_{\max} \quad (6,8)$$

в случае рассеяния с поглощением и

$$E_p \geq E_{p'} \geq \begin{cases} E_p - \hbar\omega_{\max}, & E_p > \hbar\omega_{\max}, \\ 0, & E_p < \hbar\omega_{\max} \end{cases} \quad (6,9)$$

в случае рассеяния с испусканием фонона. В этих неравенствах ω_{\max} максимальное значение частоты фонона.

В дальнейшем для простоты ограничимся кристаллами кубической симметрии; тогда

$$\frac{d^2\sigma_{\text{неког}}^{\pm 1}}{d\Omega dE_{p'}} = \sigma' \frac{NV_0}{(2\pi)^3} \frac{\hbar}{6M} \sum_j \int d\mathbf{k} \frac{e^{-\alpha q^2}}{\omega_j(\mathbf{k})} q^2 \frac{p'}{p} \left[n_j(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(E_{p'} - E_p \pm \hbar\omega_j(\mathbf{k})), \quad (6,10)$$

где α определяется выражением (4,23) и не зависит от угла рассеяния.

Введем теперь функцию распределения частот $g(\omega)$, определяемую как число нормальных колебаний в единичном интервале частот, деленное на полное число колебаний:

$$\left. \begin{aligned} g(\omega) d\omega &= \frac{1}{3} \frac{V_0}{(2\pi)^3} \sum_j \int_{\omega \leq \omega_j(\mathbf{k}) \leq \omega + d\omega} d\mathbf{k}, \\ g(\omega) &= 0, \quad \text{если} \quad \omega > \omega_{\max}, \end{aligned} \right\} \quad (6,11)$$

после чего выражение (6,10) можно записать в виде¹⁹

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_{\text{неког}}^{\pm 1}}{d\Omega dE_{p'}} &= \\ &= N\sigma' \frac{\hbar}{2M} \frac{p'}{p} e^{-\alpha q^2} \frac{q^2}{|E_p - E_{p'}|} g\left(\frac{|E_p - E_{p'}|}{\hbar}\right) \left(\frac{1}{e^{\beta |E_p - E_{p'}|} - 1} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (6,12)$$

причем пределы изменения E_p' даются выражениями (6,8) и (6,9). Таким образом, для кубического кристалла сечение некогерентного однофотонного рассеяния пропорционально функции распределения частот $g(\omega)$. В случае кристаллов произвольной симметрии этого уже нет из-за наличия в выражении для сечения рассеяния поляризационных членов. Это налагает трудности на определение $g(\omega)$ в кристаллах некубической симметрии. Однако поляризационные члены в сечении при определенных условиях можно исключить. Заметим прежде всего, что при температуре ниже дебаевской тепловой фактор близок к 1. Оскотский²⁰ показал, что в этом случае поляризационные члены в (6,7) исключаются, если рассматривать рассеяние в составном образце.

Составим исследуемый образец из 12 пластин следующим образом. Ориентируем произвольно в первой пластине декартову систему координат X, Y, Z . Во второй пластине кристаллические оси должны быть повернуты относительно средней линии координатного триэдра на 120° , в третьей — на 240° . В четвертой, седьмой и 10-й пластинах кристаллические оси повернуты на 180° соответственно вокруг осей X, Y, Z . Относительно этих положений остальные три пары пластин ориентированы точно так же, как в первой тройке. Сечение рассеяния от всех пластин есть сумма сечений рассеяния от каждой пластины (t — номер пластины). В двенадцати суммах \sum_k выражения (6,7) будем одновременно рассматривать \mathbf{k}_t , одинаково направленные относительно кристаллических осей своих пластин. Тогда $\omega_j^t(\mathbf{k}_t) = \omega_j(\mathbf{k})$, где величины без индекса t относятся к первой пластине. От номера t зависят теперь только $|\mathbf{q}\mathbf{e}_j^t(\mathbf{k}_t)|^2$. Легко показать, что

$$\sum_t |\mathbf{e}_j(\mathbf{k}_t) \mathbf{q}|^2 = 4q^2.$$

Таким образом, без учета теплового фактора, сечение рассеяния от составного образца выражается формулой (6,12), пригодной для кубического кристалла, умноженной на 4, т. е. сечение оказывается пропорциональным частотной функции $g(\omega)$. Если в кристалле имеется ось третьего или четвертого порядка, то достаточно четырех или трех пластин. Для кубического кристалла, естественно, требуется только одна «пластина».

Более простой способ устранения поляризационных членов предложил Каган²¹. Именно, при фиксированном направлении рассеяния следует определить $d^2\sigma_{\text{неког}}^{\pm 1}/d\Omega dE_p'$ для трех положений монокристалла, отличающихся друг от друга циклической перестановкой координат. Нетрудно видеть, что сумма этих трех сечений (при $e^{-2W_q} \approx 1$)

$$\frac{1}{3} \sum_l \left. \frac{d^2\sigma_{\text{неког}}^{\pm 1}}{d\Omega dE_p'} \right|_l = N\sigma' \frac{\hbar}{2M} \frac{p'}{p} \frac{q^2}{|E_p - E_{p'}|} g\left(\frac{|E_p - E_{p'}|}{\hbar}\right) \left(\frac{1}{e^{q|E_p - E_{p'}|} - 1} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)$$

позволяет определить частотную функцию $g(\omega)$. В случае одноосных кристаллов достаточно двух положений кристалла. В кубическом кристалле достаточно одного положения образца, и мы приходим к формуле Плачека и Ван-Хове¹⁹ (6,12).

Если кристалл состоит из атомов нескольких сортов, то величина

$$\sum_l \left. \frac{d^2\sigma_{\text{неког}}^{\pm 1}}{d\Omega dE_p'} \left(\frac{d\sigma_{\text{неког}}^0}{d\Omega} \right)^{-1} \right|_l$$

также оказывается пропорциональной функции $g(\omega)$ ²¹. Таким образом, измерение сечения для трех положений монокристалла позволяет в любом случае восстановить частотную функцию $g(\omega)$.

Как было установлено в работе ²², функция $g(\omega)$ в кристалле имеет конечное число точек сингулярностей ω_c , являющихся корнями уравнения

$$\nabla \omega_j(\mathbf{k}) = 0. \quad (6,13)$$

Функция $g(\omega)$ в окрестностях сингулярных точек — имеет одну из двух форм:

$$g(\omega) = \begin{cases} A |\omega - \omega_c|^{1/2} + o(\omega - \omega_c), & \omega < \omega_c, \\ O(\omega - \omega_c), & \omega > \omega_c \end{cases} \quad (6,14)$$

или то же самое, но с переставленными соотношениями $\omega < \omega_c$ и $\omega > \omega_c$. Символ $O(\omega - \omega_c)$ означает остаточный член в ряду порядка $|\omega - \omega_c|$ при $\omega \rightarrow \omega_c$.

В силу (6,12) сечение однофононного некогерентного рассеяния при энергиях рассеяния $E_{p'}$, удовлетворяющих соотношению: $|E_p - E_{p'}| \approx \hbar \omega_c$, имеет также особенность типа (6,14), причем положение этой особенности в спектре рассеянных нейтронов не зависит от направления рассеяния. Далее, можно показать, что энергетическое распределение многофононного некогерентного рассеяния имеет непрерывную производную по энергии рассеянных нейтронов ¹⁸. С другой стороны, сингулярности в энергетическом распределении когерентно рассеянных нейтронов зависят от угла рассеяния и от ориентации кристалла по отношению к направлению падающих нейтронов, поэтому их можно экспериментально отделить от рассмотренных выше сингулярностей. Таким образом, некогерентное однофононное рассеяние является простейшим явлением, в котором могут быть определены сингулярности частотной функции кристалла (и сама функция, конечно).

Предшествующее обсуждение относилось к монокристаллу. Для неупругого рассеяния порошком выражение (6,7) должно быть усреднено по ориентациям микрористаллов. Поскольку сингулярности в энергетическом распределении не зависят от направления, они остаются также после усреднения.

Перейдем теперь к однофононному когерентному рассеянию. Из (6,6) получаем

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \sigma_{\text{кор}}^{\pm 1}}{d\Omega dE_{p'}} &= N \sigma^{(0)} \frac{\hbar}{2M} \sum_j \sum_{\tau} \int d\mathbf{k} e^{-2W_{\mathbf{q}}} \frac{p'}{p} \frac{(\mathbf{q} \mathbf{e}_j(\mathbf{k}))^2}{\omega_j(\mathbf{k})} \times \\ &\times \left[n_j(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(\mathbf{q} \mp \mathbf{k} - \boldsymbol{\tau}) \delta(E_{p'} - E_p \pm \hbar \omega_j(\mathbf{k})). \end{aligned} \quad (6,15)$$

С помощью δ -функции от импульсов мы избавляемся от интеграла по \mathbf{k} , заменив в каждом члене, зависящем от \mathbf{k} , величину \mathbf{k} на $\mathbf{q} + \boldsymbol{\tau}$. Все члены в (6,15) зависят от \mathbf{k} через функции с периодами, равными базисным векторам обратной решетки, умноженными на 2π , поэтому

$$\omega_j(\mathbf{q} + \boldsymbol{\tau}) = \omega_j(\mathbf{q}), \quad \mathbf{e}_j(\mathbf{q} + \boldsymbol{\tau}) = \mathbf{e}_j(\mathbf{q}). \quad (6,16)$$

Учитывая сказанное, из (6,15) получим для отражения вблизи вектора $\boldsymbol{\tau}$ выражение

$$\frac{d^2 \sigma_{\tau, \text{кор}}^{\pm 1}}{d\Omega dE_{p'}} = N \sigma^{(0)} \frac{\hbar}{2M} \sum_j e^{-2W_{\mathbf{q}}} \frac{p'}{p} \frac{(\mathbf{q} \mathbf{e}_j(\mathbf{q}))^2}{\omega_j(\mathbf{q})} \left[n_j(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(E_{p'} - E_p \pm \hbar \omega_j(\mathbf{q})). \quad (6,17)$$

Рассеяние с испусканием и поглощением фонона будет происходить при условии выполнения закона сохранения энергии

$$E_{p'} - E_p \pm \hbar \omega_j(\mathbf{q}) = 0,$$

или

$$\pm (p^2 - p'^2) - \frac{2M}{\hbar} \omega_j (\mathbf{p} - \mathbf{p}') = 0. \quad (6,18)$$

Здесь знак (+) соответствует рассеянию с испусканием, а (−) с поглощением фонона. Рассмотрим отдельно эти два случая.

Начнем с рассеяния с поглощением и покажем, что уравнение (6,18) имеет решение для \mathbf{p}' при любом угле рассеяния и любом \mathbf{p} . Очевидно, что при заданном \mathbf{p} область допустимых значений \mathbf{p}' определяется неравенствами (6,8). Построим функцию ¹⁹

$$\varphi_j^-(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = p'^2 - p^2 - \frac{2M}{\hbar} \omega_j (\mathbf{p} - \mathbf{p}').$$

При $p'^2 = p^2 + \frac{2M}{\hbar} \omega_{\max}$, $\varphi_j^-(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \geq 0$, а когда $p' = p$, то $\varphi_j^-(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \leq 0$,

но из этого следует, что в случае поглощения фонона уравнение (6,17) при любом p имеет хотя бы одно решение для любого угла рассеяния, причем все решения лежат между двумя концентрическими сферами S

и S_{\max}^- с радиусами p и $p_{\max} = \sqrt{p^2 + \frac{2M}{\hbar} \omega_{\max}}$, имеющими центр в начале координат. Эти решения образуют поверхности S_j^- в \mathbf{p} -пространстве, целиком лежащие между указанными сферами. Любой радиус-вектор, проведенный в какой-либо точке поверхности S_j^- , является допустимым, в силу законов сохранения энергии и импульса, волновым вектором рассеянного нейтрона. Очевидно, что в каждом направлении рассеяния имеется конечное число возможных значений p' (в общем случае не меньше трех, что соответствует трем возможным поляризациям фононов), и, следовательно, спектр нейтронов, рассеянных в каком-либо направлении в результате однофононного когерентного рассеяния, дискретен.

Перейдем теперь к рассеянию с испусканием фонона. Если $p^2 \geq p_1^2 \equiv \frac{2M}{\hbar} \omega_{\max}$, то область возможных значений p' в силу (6,9) лежит от p

до $p_{\min} = \sqrt{p^2 - p_1^2}$, и так же как в случае рассеяния с поглощением фонона, мы получаем поверхности S_j^+ , расположенные между концентрическими сферами S_{\min} и S радиусов p_{\min} и p . Каждому углу рассеяния опять соответствуют определенные дискретные значения p' . Если же $p < p_1$, то $p_{\min} = 0$ и функция

$$\varphi_j^+(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = p^2 - p'^2 - \frac{2M}{\hbar} \omega_j (\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

при $p' = 0$ равна $p^2 - \frac{2M}{\hbar} \omega_j(p)$. Нельзя сделать никакого заключения о знаке этого выражения, не обращаясь к конкретному виду функции $\omega_j(p)$, и можно лишь утверждать, что при $p < p_1$ нейтроны, вообще говоря, не могут рассеиваться во всех направлениях, испуская фонон.

Далее, если p достаточно мало, то рассеяние с испусканием невозможно. Действительно, из закона сохранения импульса следует при $\tau \neq 0$, что $\tau - \mathbf{k} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}$. Это равенство возможно, только если $|\tau - \mathbf{k}| \leq p' + p$. Но при рассеянии с испусканием фонона $p' + p \leq 2p$, и, следовательно, рассеяние возможно, если только $p > \frac{1}{2} |\tau - \mathbf{k}|$. Поэтому существует

такое $p_2 = \frac{1}{2} \tau_{\min}$, что при $p < p_2$ рассеяние с испусканием невозможно. Если же $\tau = 0$, а k мал, то рассеяние с испусканием возможно¹ только при $V > c$.

Таким образом, в любом направлении рассеяния наряду с непрерывным спектром нейтронов, рассеянных некогерентно, и в результате многофононного когерентного рассеяния должны наблюдаться при определенных значениях p' пики, обусловленные однофононным когерентным рассеянием. Изучая положение однофононных пиков в спектре нейтронов, рассеянных под различными углами, и используя уравнение (6,18), легко получить $\omega_j(\mathbf{k})$. Действительно, величина p нами задается, p' находится непосредственным измерением положения пика. Из (6,18) затем определяется величина $\omega_j(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$. Направление вектора \mathbf{p}' определяется задаваемым углом рассеяния.

Итак, пики когерентного однофононного рассеяния позволяют восстановить энергетический спектр колебаний кристалла, в то время как некогерентное однофононное рассеяние позволяет найти функцию распределения частот. Теперь встает вопрос: как разделить эти два типа рассеяния? Ведь если измерять интенсивность нейтронов в направлении рассеяния \mathbf{p}' , то она будет представлять сразу оба типа рассеяния.

Однако изменив методику измерения, можно исключить в некоторых случаях когерентное однофононное рассеяние (Каган²³). В самом деле, вернемся к формулам (6,10) и (6,17), определяющим сечения некогерентного и когерентного рассеяний. Из этих формул видно, что поперечники являются функциями двух величин $\Delta E \equiv E_{p'} - E_p$ и \mathbf{q} — энергии и импульса, переданных нейтроном кристаллу.

В общем случае обе эти величины можно считать независимыми. Раз это так, то возможно фиксировать \mathbf{q} и исследовать сечение как функцию только ΔE . Положим $\mathbf{q} = \boldsymbol{\tau}$; тогда, как видно из (6,17), когерентное сечение будет отличаться от нуля, если $\Delta E = \pm \hbar \omega_j(0)$, поскольку $\omega_j(\mathbf{q})$ есть периодическая функция \mathbf{q} с периодом, равным $\boldsymbol{\tau}$. Для акустических ветвей $\omega_j(0) = 0$, поэтому в случае произвольной одноатомной решетки, измеряя поперечник как функцию ΔE при $\Delta E \neq 0$, мы будем измерять сечение чисто некогерентного рассеяния, т. е. величину (6,10). Таким образом, для одноатомных решеток может быть проведено совершенно строгое разделение.

Если в элементарной ячейке кристалла больше одного атома, то наряду с акустическими ветвями имеются еще оптические ветви, для которых $\omega_j(0) \neq 0$. Если минимальное значение частот в оптических ветвях выше $\omega_{\max}^{\text{ак}}$ для акустических ветвей, то для $\Delta E < \omega_{\max}^{\text{ак}}$ рассеяние также будет чисто некогерентным. Для интервала же ΔE , соответствующего оптическим ветвям, имеет место наложение обоих видов рассеяния. В общем случае нельзя утверждать, что $\omega_{\max}^{\text{ак}} < \omega_{\min}^{\text{опт}}$, поэтому наложение может возникнуть еще в интервале частот $\Delta E/\hbar$, соответствующем акустическим ветвям. Однако когерентное рассеяние, соответствующее частотам оптических ветвей $\omega_j(0)$, будет приводить к узким резким линиям, поэтому, по-видимому, возможно как четкое отделение когерентного рассеяния на частотах $\omega_j(0)$, так и получение сечения некогерентного рассеяния для всего интервала частот фононного спектра.

Когерентное однофононное рассеяние в принципе позволяет определить не только спектр колебаний решетки, но и значения комплексных векторов поляризации колебаний. Для этого требуется изучение рассеяния на образцах различного изотопического состава. Такие измерения позволили бы решить полную обратную задачу — восстановление частотной функции распределения, спектра колебаний и векторов поляризации колебаний. Условия разрешимости полной обратной задачи недавно были исследованы Каганом²³. Практически такая задача, по-видимому, может быть решена лишь для решеток одноатомных и двухатомных, каждый узел которых является центром инверсии.

§ 7. Рассеяние с испусканием и поглощением спиновой волны

Перейдем к изучению магнитного рассеяния в ферромагнетиках. Будем исходить из простейшей гейзенберговской модели ферромагнетика: кристалл состоит из N магнитных атомов, каждый из которых имеет спин S . Учтем лишь изотропное обменное взаимодействие спинов, выбрав гамильтониан системы в виде

$$\mathcal{H} = - \sum_{j \neq j'} J(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}) (S_j S_{j'}). \quad (7.1)$$

Дифференциальное сечение рассеяния в магнетике определяется выражением (3.8), умноженным на e^{-2W} . В общем случае спиновый коррелятор $\langle S_j^\alpha(0) S_j^\beta(t) \rangle$ вычислить не удастся, поскольку мы не знаем собственных значений оператора энергии (7.1). Однако в двух предельных случаях можно развить приближенную теорию ферромагнетизма, а именно при температурах много меньших температуры Кюри, и в непосредственной близости к температуре Кюри. В этом параграфе мы будем рассматривать случай низких температур. Другой предельный случай будет специально рассмотрен в гл. IV.

В случае низких температур, когда намагниченность кристалла (имеется в виду один домен) не сильно отличается от намагниченности насыщения при 0°K , среднее значение проекции спина на направление спонтанного магнитного момента немного отличается от S , а средние значения поперечных компонент спина малы. В этом случае можно пользоваться хорошо известными соотношениями²⁴, выражающими приближенно операторы спина S_j отдельных узлов через бозе-операторы b_j и b_j^\dagger :

$$S_j^+ = (2S)^{1/2} b_j, \quad S_j^- = (2S)^{1/2} b_j^\dagger, \quad S_j^z = S - b_j^\dagger b_j, \quad (7.2)$$

где $S_j^\pm = S_j^x \pm i S_j^y$.

Если перейти от бозе-амплитуд b_j и b_j^\dagger к их фурье-компонентам $b_{\mathbf{k}}$ и $b_{\mathbf{k}}^\dagger$,

$$b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}}, \quad b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} b_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad (7.3)$$

то гамильтониан (7.1) будет диагонален:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}} + \text{const.} \quad (7.4)$$

Поскольку собственные значения оператора $b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}$ есть целые числа $0, 1, 2, 3, \dots$, этот результат можно трактовать следующим образом: при низких температурах состояние ферромагнетика эквивалентно состоянию идеального бозе-газа спиновых волн с энергией

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = 2S \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{J}(\mathbf{R}) (1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}). \quad (7.5)$$

Так как обменный интеграл быстро убывает с расстоянием, основной вклад в сумму по \mathbf{R} в (7.5) дают его ближайшие соседи. При малых k экспоненту в (7.5) можно разложить в ряд, тогда, например, для кубической решетки получим следующее выражение для энергии спиновой волны:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{1}{3} S z J_0 (ak)^2, \quad (7.6)$$

где J_0 — обменный интеграл между ближайшими соседями, z — число ближайших соседей. В выражении сечения магнитного рассеяния

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} = (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \frac{p'}{p} e^{-2W_{\mathbf{q}}} \sum_{j,j'} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha}e_{\beta}) \times \\ \times \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{p'} - E_p)t} \langle S_j^{\alpha}(0) S_{j'}^{\beta}(t) \rangle dt \quad (7,7)$$

можно пренебречь «недиагональными» корреляторами $\langle S_j^{\pm} S_{j'}^z(t) \rangle$, $\langle S_j^{\pm} S_{j'}^{\pm}(t) \rangle$ и $\langle S_j^z S_{j'}^{\pm}(t) \rangle$. Можно также показать, что при низких температурах они малосущественны по сравнению с оставленными не только в явлении рассеяния нейтронов, но и в других явлениях в ферромагнетике. В этом приближении выражение (7,7) запишется в виде

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} = (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \frac{p'}{p} \sum_{j,j'} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} e^{-2W_{\mathbf{q}}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{p'} - E_p)t} dt \times \\ \times \left\{ \frac{1}{4} \langle S_j^+ S_{j'}^-(t) + S_j^- S_{j'}^+(t) \rangle [1 + (\mathbf{em})^2] + \langle S_j^z S_{j'}^z(t) \rangle [1 - (\mathbf{em})^2] \right\}. \quad (7,8)$$

Используя соотношения (7,2), (7,3) и (4,8), получим

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} = (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) e^{-2W_{\mathbf{q}}} \left(S^2 - \frac{2S}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \right) [1 - (\mathbf{em})^2] \frac{(2\pi)^3 N}{V_0} \times \\ \times \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) \delta(E_{p'} - E_p) + (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) e^{-2W_{\mathbf{q}}} \frac{S}{2} \frac{p'}{p} [1 + (\mathbf{em})^2] \times \\ \times \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \sum_{\mathbf{k}} \{ \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k} - \boldsymbol{\tau}) Q'_{\mathbf{k}}(E_{p'} - E_p) + \delta(\mathbf{q} + \mathbf{k} - \boldsymbol{\tau}) Q''_{\mathbf{k}}(E_{p'} - E_p) \}, \quad (7,9)$$

где

$$Q'_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}Et} \langle b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) \rangle dt, \quad Q''_{\mathbf{k}}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}Et} \langle b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}}(t) \rangle dt, \quad (7,10) \\ n_{\mathbf{k}} = \frac{\text{Sp}(e^{-\beta \mathcal{H}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}})}{\text{Sp} e^{-\beta \mathcal{H}}}$$

— среднее число спиновых волн с импульсом \mathbf{k} при заданной температуре.

Если мы ограничимся описанием ферромагнетика с помощью идеальной системы спиновых волн, т. е. в качестве гамильтониана рассеивателя используем (7,4), выражение (7,10) легко вычисляется:

$$Q'_{\mathbf{k}}(E) = (1 + n_{\mathbf{k}}) \delta(E + \varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad Q''_{\mathbf{k}}(E) = n_{\mathbf{k}} \delta(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (7,11)$$

причем

$$n_{\mathbf{k}} = (e^{\beta \varepsilon_{\mathbf{k}}} - 1)^{-1} \quad (7,12)$$

— бозевская функция распределения для спиновых волн. Заметим еще, что один из множителей в первом члене выражения (7,9) приближенно можно представить в виде

$$S^2 - \frac{2S}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \approx \left(S - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \right)^2 = S^2(T).$$

С учетом этих замечаний дифференциальное сечение магнитного рассеяния равно

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} &= (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) e^{-2W_{\mathbf{q}}} [1 - (\mathbf{em})^2] \frac{(2\pi)^3 N}{V_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}) \delta \times \\ &\times (E_{p'} - E_p) + (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \frac{S}{2} e^{-2W_{\mathbf{q}}} \frac{p'}{p} [1 + (\mathbf{em})^2] \frac{(2\pi)^3}{V_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \sum_{\mathbf{k}} \times \\ &\times \{ \delta(\mathbf{q} - \mathbf{k} - \boldsymbol{\tau}) \delta(E_{p'} - E_p + \varepsilon_{\mathbf{k}}) (1 + n_{\mathbf{k}}) + n_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{q} + \mathbf{k} - \boldsymbol{\tau}) \delta(E_{p'} - E_p - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \}. \end{aligned} \quad (7,13)$$

Первый член этого выражения описывает упругое рассеяние. После интегрирования по $dE_{p'}$ он переходит в выражение (5,5), полученное ранее. Второй член дает сечение рассеяния нейтрона с испусканием или поглощением спиновой волны. Структура этого выражения весьма близка к когерентной части однофононного рассеяния, даваемого формулой (6,6). Существенное отличие магнитного одномагнонного рассеяния состоит в дополнительной угловой зависимости когерентных максимумов через величины $F^2(\mathbf{q})$ и $1 + (\mathbf{em})^2$. Заметим еще, что если в выражении (7,7) учитывать более высокие степени разложения операторов спина по бозе-амплитудам, что можно сделать, используя формализм Гольштейна и Примакова²⁴, легко дополнить выражение (7,13) членами, соответствующими мультимагнонному рассеянию с поглощением или испусканием сразу нескольких спиновых волн. Оценки, произведенные Малеевым²⁵, показывают, что при низких температурах вкладом в неупругое магнитное рассеяние от этих процессов можно пренебречь.

Итак, сечение одномагнонного рассеяния в монокристалле равно

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma^{\pm 1}}{d\Omega dE_{p'}} &= N (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \frac{S}{2} e^{-2W_{\mathbf{q}}} [1 + (\mathbf{em})^2] \sum_{\boldsymbol{\tau}} \int d\mathbf{k} \frac{p'}{p} \times \\ &\times \left[n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(\mathbf{q} \mp \mathbf{k} - \boldsymbol{\tau}) \delta(E_{p'} - E_p \pm \varepsilon_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (7,14)$$

Здесь верхний знак относится к рассеянию с испусканием, нижний — с поглощением спиновой волны. δ -функция от импульсов снимает интегрирование по \mathbf{k} . Поскольку в спин-волновом приближении $ak \ll 1$ квазиимпульс спиновой волны много меньше величины важнейших векторов обратной решетки, в (7,14) можно заменить \mathbf{q} на $\boldsymbol{\tau}$. В результате имеем

$$\begin{aligned} \frac{d^2\sigma_{\boldsymbol{\tau}}^{\pm 1}}{d\Omega dE_{p'}} &= N (r_0\gamma)^2 F^2(\boldsymbol{\tau}) \frac{S}{2} e^{-2W_{\boldsymbol{\tau}}} \frac{p'}{p} \left[1 + \frac{(\boldsymbol{\tau m})^2}{\tau^2} \right] \left[n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta \times \\ &\times (E_{p'} - E_p \pm \varepsilon_{\mathbf{q} + \boldsymbol{\tau}}). \end{aligned} \quad (7,15)$$

Отсюда следует, что в энергетическом распределении нейтронов, рассеянных с испусканием или поглощением спиновой волны, должны наблюдаться пики, положение которых определяется законом сохранения энергии,

$$E_{p'} - E_p \pm \varepsilon_{\mathbf{q} + \boldsymbol{\tau}} = 0, \quad (7,16)$$

или, с учетом того, что $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ есть периодическая функция, — уравнением

$$\frac{\hbar^2 p'^2}{2m} - \frac{\hbar^2 p^2}{2m} \pm \varepsilon_{\mathbf{p} - \mathbf{p}'} = 0. \quad (7,16')$$

Ширина этих пиков оказывается равной нулю, что отражается наличием δ -функций в (7,15). Это связано с предположением, что состояние

ферромагнетика описывается системой невзаимодействующих спиновых волн, находящихся в стационарном состоянии. На самом деле, ввиду взаимодействия этих волн друг с другом и с решеткой, состояния их не являются стационарными, но можно считать их квазистационарными при температурах, значительно меньших температуры Кюри. Они характеризуются конечным временем жизни τ_k или, что эквивалентно, шириной уровня Γ_k . Эффект конечности времени жизни спиновых волн может быть учтен феноменологически, если в выражении, определяющем временную зависимость спин-волновых операторов, заменить ϵ_k на $\epsilon_k - i\Gamma_k$. Таким образом, получаем

$$b_k(t) = b_k e^{-i\frac{\epsilon_k}{\hbar}t} e^{-\frac{\Gamma_k}{\hbar}|t|}, \quad b_k^*(t) = b_k^* e^{i\frac{\epsilon_k}{\hbar}t} e^{-\frac{\Gamma_k}{\hbar}|t|}.$$

Подставляя эти выражения в (7,10), находим

$$Q_k(E) = (1 + n_k) I_k(-E), \quad Q_k^*(E) = n_k I_k(E).$$

где

$$I_k(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(E - \epsilon_k)t - \frac{\Gamma_k}{\hbar}|t|} dt = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_k}{(E - \epsilon_k)^2 + \Gamma_k^2}.$$

Из выражения (7,9) следует, что сечение одномагнитного рассеяния описывается теперь формулами (7,13)–(7,15), в которых только $\delta(E_p' - E_p \pm \epsilon_k)$ следует заменить на $I_k(\pm |E_p' - E_p|)$. Пики в энергетическом распределении нейтронов описываются, таким образом, линией Лоренца с полушириной Γ_k , равной энергии затухания соответствующей спиновой волны. Γ_k является сложной функцией квазиимпульса и температуры, определяемой механизмами взаимодействия спиновых волн. При низких температурах $\Gamma_k \ll \epsilon_k$, поэтому пики, описываемые функцией $I_k(E)$, остры и имеют максимумы в точках, определяемых уравнением (7,16). В пределе при $\Gamma_k \rightarrow 0$ $I_k(E)$ переходит в $\delta(E - \epsilon_k)$ -функцию. Лоренцевский характер формы пика получается из предположения об экспоненциальном затухании стационарных состояний. В общем случае форма пиков определяется выражением (7,10), которое может быть вычислено, например, с помощью метода температурных функций Грина²⁶. Этим методом Кривоглаз и Кащеев²⁷ вычислили уширение одномагнитной линии за счет взаимодействия спиновых волн с фононами и друг с другом. Изюмов²⁸ рассмотрел уширение линии в ферромагнитном металле за счет взаимодействия спиновых волн с электронами проводимости. Экспериментальное изучение уширения (после вычета аппаратной ширины) одномагнитных пиков позволило бы получить ценную информацию о взаимодействии атомных спинов внутри ферромагнетика (или антиферромагнетика *).

Рассмотрим теперь подробнее рассеяние с поглощением спиновой волны, предполагая, что закон дисперсии спиновых волн квадратичный.

В этом случае закон сохранения энергии можно переписать в виде

$$p'^2 = p^2 + \alpha(\mathbf{q} + \boldsymbol{\tau})^2, \quad \alpha = \frac{SZJ}{\hbar^2/2ma^2}, \quad (7,17)$$

откуда получаем два возможных значения для волнового вектора рассеянных нейтронов:

$$p'_{\pm} = \frac{\alpha P}{\alpha - 1} \{ \cos \theta \pm \sqrt{\cos^2 \theta - \cos^2 \theta_0} \}. \quad (7,18)$$

*) Все сказанное относительно уширения одномагнитных пиков относится также и к однофононным когерентным пикам. Величина уширения этих пиков рассчитывалась Кривоглазом²⁹ для различных видов взаимодействия фононов друг с другом и с искажениями решетки (см. также работу³⁰).

Здесь θ — угол рассеяния, отсчитанный от направления вектора $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \boldsymbol{\tau}$:

$$\cos^2 \theta_0 = \frac{\alpha-1}{\alpha} \left(1 + \frac{p^2}{\alpha P^2} \right). \quad (7,19)$$

Интегрируя (7,15) по энергиям рассеянных нейтронов, получаем, с учетом возможных значений p_{\pm} , дифференциальное сечение в единицу телесного угла (Малеев¹⁷):

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{-1}}{d\Omega} = N \frac{S}{2} (r_0 \gamma)^2 \sum_{\boldsymbol{\tau}} F^2(\boldsymbol{\tau}) e^{-2W\boldsymbol{\tau}} \left(1 + \frac{(\boldsymbol{\tau} \mathbf{m})^2}{\tau^2} \right) \frac{Pa}{p(\alpha-1)^2} \times \\ \times (\cos^2 \theta - \cos^2 \theta_0)^{-1/2} [n(k_+) (\cos \theta + \sqrt{\cos^2 \theta - \cos^2 \theta_0})^2 + n(k_-) \times \\ \times (\cos \theta - \sqrt{\cos^2 \theta - \cos^2 \theta_0})^2], \quad (7,20) \end{aligned}$$

где

$$k_{\pm}^2(\cos \theta) = \frac{P^2 \alpha}{(\alpha-1)^2} [(\cos \theta \pm \sqrt{\cos^2 \theta - \cos^2 \theta_0})^2 - \left(\frac{\alpha-1}{\alpha} \right)^2 \frac{p^2}{P^2}] \quad (7,21)$$

— квадрат квазимпульса участвующей в рассеянии спиновой волны.

Таким образом, рассеяние существенно зависит от величины параметра α . Для ферромагнетиков с температурой Кюри порядка нескольких сотен градусов параметр $\alpha \sim 100$, поэтому из (7,19) следует, что $\cos^2 \theta_0 > 1 - \frac{1}{\alpha}$, так что $\theta_0 < \alpha^{-1/2}$. Поскольку согласно (7,18) пределы изменения $\cos \theta$ есть

$$1 \geq \cos \theta \geq \cos \theta_0 > 0, \quad (7,22)$$

угол $\theta < \alpha^{-1/2}$. Это означает, что рассеяние с поглощением магнона возможно только в узком конусе с осью $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \boldsymbol{\tau}$, причем каждому направлению рассеяния, лежащему в этом конусе, соответствует два значения (7,18) импульсов рассеянных нейтронов.

Заметим, далее, что так как $\cos^2 \theta_0 < 1$, то

$$\frac{p^2}{P^2} < \frac{\alpha}{\alpha-1} \text{ или } \cos \Psi > -\frac{1}{2} \left(\frac{\tau}{p} + \frac{1}{\alpha} \frac{p}{\tau} \right), \quad (7,23)$$

где Ψ — угол между \mathbf{p} и $\boldsymbol{\tau}$.

Рассмотрим теперь рассеяние с испусканием магнона. Так же как в случае рассеяния с поглощением, получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma^{+1}}{d\Omega} = N \frac{S}{2} (r_0 \gamma)^2 \sum_{\boldsymbol{\tau}} F^2(\boldsymbol{\tau}) e^{-2W\boldsymbol{\tau}} \left[1 + \frac{(\boldsymbol{\tau} \mathbf{m})^2}{\tau^2} \right] \frac{Pa}{p(\alpha+1)^2} \times \\ \times \left[\cos \theta - \frac{\alpha+1}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{\alpha} \frac{p^2}{P^2} \right) \right]^{1/2} \times \{ [1 + n(k'_+)] \times \\ \times \left[\cos \theta + \sqrt{\cos^2 \theta - \frac{\alpha+1}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{\alpha} \frac{p^2}{P^2} \right)} \right]^2 + [1 + n(k'_-)] \times \\ \times \left[\cos \theta - \sqrt{\cos^2 \theta - \frac{\alpha+1}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{\alpha} \frac{p^2}{P^2} \right)} \right]^2 \}. \quad (7,24) \end{aligned}$$

Здесь волновые векторы магнона и рассеянного нейтрона имеют значения

$$\begin{aligned} k_{\pm}'^2(\cos \theta) = \frac{\alpha P^2}{(\alpha+1)^2} \left\{ \left(\frac{\alpha+1}{\alpha} \right)^2 \frac{p^2}{P^2} - \right. \\ \left. - \left[\sqrt{\cos^2 \theta - \frac{\alpha+1}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{\alpha} \frac{p^2}{P^2} \right)} \pm \cos \theta \right]^2 \right\}, \quad (7,25) \end{aligned}$$

$$p'_{\pm} = \frac{\alpha P}{\alpha+1} \left[\cos \theta \pm \sqrt{\cos^2 \theta - \frac{\alpha+1}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{\alpha} \frac{p^2}{P^2} \right)} \right]. \quad (7,26)$$

Рассеяние возможно, только если

$$\frac{p^2}{p^2} > \frac{\alpha}{\alpha+1} \quad \text{или} \quad \cos \Psi < -\frac{1}{2} \left(\frac{\tau}{p} - \frac{1}{\alpha} \frac{p}{\tau} \right). \quad (7,27)$$

Поскольку $\cos \Psi \geq -1$, то из (7,27) следует, что рассеяние с испусканием магнона возможно, только когда

$$p > \alpha \tau \left(\sqrt{1 + \frac{1}{\alpha}} - 1 \right) \approx \frac{\tau}{2} \left(1 - \frac{1}{4\alpha} \right). \quad (7,28)$$

Необходимо рассмотреть два случая:

$$(1) \quad \frac{\alpha+1}{\alpha} \left(1 - \frac{p^2}{\alpha P^2} \right) \equiv \cos^2 \theta_1 > 0; \quad (2) \quad 1 - \frac{p^2}{\alpha P^2} < 0. \quad (7,29)$$

Рассмотрим сначала первый случай. Как и при рассеянии с поглощением, $\cos \theta$ меняется в пределах

$$1 \geq \cos \theta \geq \cos \theta_1 > 0 \quad (7,30)$$

и каждому углу рассеяния θ соответствует два значения импульса рассеянных нейтронов (7,26). Структура этого выражения вполне аналогична (7,18).

Рассмотрим теперь второй случай. Он возможен, если только

$$\tau \sqrt{\alpha} (\sqrt{\alpha+1})^{-1} < p < \tau \sqrt{\alpha} (\sqrt{\alpha}-1)^{-1},$$

т. е. когда p мало отличается от τ . Из (7,26) следует, что в этом случае $p' < 0$ и, следовательно, каждому углу рассеяния соответствует только одно значение p' импульса рассеянного нейтрона, причем угол рассеяния может меняться от нуля до π .

В заключение отметим, что, как следует из (7,23) и (7,27), рассеяние с испусканием может происходить одновременно с рассеянием с поглощением магнона, только если

$$-\left(\frac{\tau}{p} + \frac{1}{\alpha} \frac{p}{\tau} \right) \leq 2 \cos \Psi < -\left(\frac{\tau}{p} - \frac{1}{\alpha} \frac{p}{\tau} \right), \quad (7,31)$$

т. е. в той области значений Ψ , где оба сечения достигают максимального значения.

Сейчас мы дадим геометрическую интерпретацию одноквантового когерентного рассеяния. Как уже указывалось выше, оно определяется законами сохранения энергии и импульса:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \frac{\hbar^2 p'^2}{2m} &= + \varepsilon_q, \\ \mathbf{p} - \mathbf{p}' + \boldsymbol{\tau} &= + \mathbf{q}, \end{aligned} \right\} \quad (7,32)$$

где \mathbf{q} — волновой вектор, участвующий в рассеянии спиновой волны (или фонона), а ε_q — энергия. Верхний знак относится к испусканию, а нижний — к поглощению спиновой волны. Оба эти уравнения совместно определяют поверхность в пространстве обратной решетки, на которой лежат концы волновых векторов \mathbf{p}' рассеянных нейтронов (при зафиксированной ориентации падающего пучка по отношению к вектору обратной решетки отражающей плоскости). Таким образом, поверхность рассеяния определяет возможные значения энергии нейтронов, рассеянных в заданном направлении.

В частном случае квадратичного закона дисперсии спиновых волн из (7,32) имеем (см. выражение (7,17)) для поглощения поверхность рассеяния, задаваемую уравнением

$$p'^2 = p^2 + \alpha (\mathbf{p}' - \mathbf{P})^2, \quad (7,33)$$

где

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} + \boldsymbol{\tau}. \quad (7,34)$$

Найдем геометрическое изображение этого уравнения (рис. 1). Выберем прямоугольную систему координат (xyz) так, что оси x и y лежат в плоскости векторов $(\mathbf{p}, \boldsymbol{\tau})$ (вектор \mathbf{p}' также лежит в этой плоскости). Тогда левая часть уравнения (7,33) $p'^2 = p_x'^2 + p_y'^2$ изображается параболоидом вращения с осью вдоль оси z (на рис. 1 изображена парабола a , получающаяся сечением параболоида плоскостью, проходящей через ось z). Правая часть уравнения изображается параболоидом с вершиной B , поднятой над плоскостью (x, y) на величину p^2 и проектирующейся в точку A , являющуюся концом вектора \mathbf{P} , проведенного из начала координат (на рис. 1 изображена парабола b , лежащая в той же вертикальной плоскости, что и парабола a).

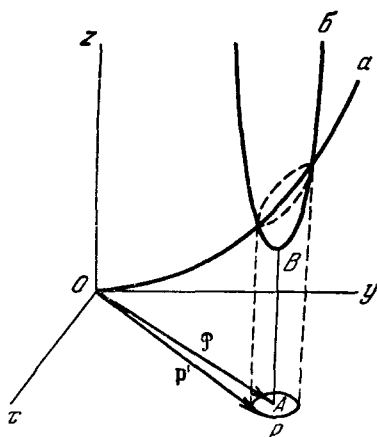


Рис. 1. Геометрическая интерпретация рассеяния с поглощением спиновой волны, $AB = p^2$.

Пересечение этих двух параболоидов образует некоторую кривую, обозначенную на рис. 1 пунктиром. Проекция этой кривой на плоскость (x, y) дает замкнутую линию, на которой лежат возможные значения концов векторов \mathbf{p}' , т. е. поверхность рассеяния, точнее, линию рассеяния, получающуюся пересечением пространственной поверхности рассеяния плоскостью, в которой происходит рассеяние. Нетрудно видеть, что эта «поверхность» рассеяния есть окружность с центром в точке, находящейся поблизости с концом вектора \mathbf{P} . При $\alpha \gg 1$ центр окружности практически сливается с концом вектора \mathbf{P} . Из рис. 1 видно, что рассеяние возможно в пределах узкого сектора вблизи направления \mathbf{P} .

Раствор угла θ_0 , в котором возможно рассеяние, определяется ранее найденным выражением (7,19).

В случае рассеяния с испусканием спиновой волны в последнем члене уравнения (7,33) должен стоять знак минус. Геометрически это соответствует тому, что параболоид b обращен раствором вниз. Отсюда видно, что рассеяние с испусканием возможно не всегда, а только при тех p , для которых отрезок $AB = p^2$ пересекает параболоид a , т. е. когда энергия нейтрона больше энергии испускаемой спиновой волны.

Заметим еще, что в случае линейного закона дисперсии спиновых волн (или в случае акустических фононов) вместо параболоида b должен быть конус с вершиной в точке B , так что качественно картина останется подобной, только поверхность рассеяния будет не окружностью, а эллипсом.

Из рис. 1 вытекает один интересный результат: если сдвигать точку A дальше от начала координат, то поверхности рассеяния будут при этом расширяться. Для развития экспериментальных методов исследования неупругого рассеяния необходимо найти связь между величиной вектора \mathbf{P} и радиусом поверхности рассеяния. Рассмотрим рис. 2, который, по существу, представляет более подробную картину рассеяния в плоскости (x, y) рис. 1. Здесь рассеяние с поглощением спиновой волны изображено в пространстве обратной решетки. Пунктирная прямая a изображает отражающую кристаллическую плоскость, которая проходит перпендикулярно к плоскости рисунка. Ее положение задается вектором обрат-

ной решетки τ . Взаимное расположение векторов \mathbf{p} , \mathbf{p}' , τ и \mathbf{q} удовлетворяет закону сохранения импульса при рассеянии. Окружность, проведенная из точки A , является поверхностью рассеяния. Концы векторов \mathbf{p}' должны лежать обязательно на этой окружности, только в этом случае вместе с законом сохранения импульса выполнится и закон сохранения энергии при рассеянии.

Пусть ориентация кристаллической плоскости a по отношению к падающему пучку нейтронов соответствует брэгговскому положению, определяемому условиями

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \tau, \quad p' = p, \quad (7,35)$$

или эквивалентным им

$$\sin \varphi_B \tau = 2\pi p. \quad (7,36)$$

Оставляя неизменной энергию нейтронов в падающем пучке, т. е. фиксируя p , повернем кристалл от брэгговского положения на угол $d\varphi = \varphi - \varphi_B$. В этом случае величина вектора \mathbf{P} будет изменяться вместе с $d\varphi$. Для нахождения этой зависимости возведем в квадрат соотношение (7,34). Имеем

$$p^2 + \tau^2 + 2(\mathbf{p}\tau) = P^2. \quad (7,37)$$

Очевидно,

$$(\mathbf{p}\tau) \equiv p\tau \cos\left(\frac{\pi}{2} + \varphi\right) = -p\tau \sin(\varphi_B + d\varphi).$$

Для малых отклонений $\sin(\varphi_B + d\varphi)$ можно разложить в ряд по $d\varphi$; подставляя разложение в (7,37) и используя (7,36), находим приближенно

$$p - P \approx \tau(\varphi - \varphi_B) \cos \varphi_B. \quad (7,38)$$

Как мы видели из рис. 1, при увеличении P поверхность рассеяния (по крайней мере в случае квадратичного закона дисперсии) расширяется. С помощью соотношения (7,38) теперь можно связать это изменение поверхности рассеяния с угловым отклонением кристалла от брэгговского положения. Это лежит в основе экспериментального определения закона дисперсии магнов (и фононов). Ранее было показано, что в энергетическом распределении нейтронов, рассеянных в заданном направлении когерентно с поглощением или испусканием одной квазичастицы (спиновой волны или фонона), должны быть пики, положение которых определяется законом сохранения энергии. Существует несколько экспериментальных методов*), позволяющих при этом определить импульс участвующей в рассеянии квазичастицы. Из них наиболее существенны следующие.

1. Конвенциональный метод. Эксперимент ведется так. Исследуемый кристалл устанавливается в брэгговское положение, соответствующее отражению от плоскости τ . Устройство, регистрирующее рассеянные нейтроны, устанавливается в такое положение, чтобы принимать нейтроны, рассеянные в направлении брэгговского пика. При таком положении регистрируются в основном нейтроны, рассеянные упруго. Доля нейтронов, рассеянных неупруго, будет ничтожна. Далее, не меняя угла

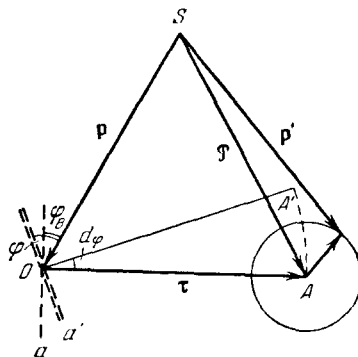


Рис. 2. Закон сохранения импульса при поглощении спиновой волны.

Отражение от кристаллической плоскости, изображенной пунктирной прямой a , когда пучок нейтронов падает на нее под углом Брэгга φ_B . Двойная прямая a' изображает отражающую плоскость, когда кристалл повернут на угол $d\varphi$ от брэгговского положения a .

*) Подробности экспериментальных методов, их возможности и сравнение друг с другом обсуждаются в обзорной статье Брокхауза⁵⁴, который является автором многих применяемых в настоящее время методов нейтронной спектроскопии.

рассеяния ψ (угла между векторами \mathbf{p} и \mathbf{p}'), поворачивают кристалл на некоторый угол от брэгговского положения и анализируют нейтроны, рассеянные в \mathbf{p} и \mathbf{p}' в этом направлении, по энергиям. В энергетическом распределении рассеянных нейтронов регистрируются пики, соответствующие поглощению или испусканию квазичастицы. Такие измерения проводятся для различных угловых отклонений кристалла от брэгговского положения; при этом во все время эксперимента $\psi = \text{const}$.

На рис. 3 в пространстве обратной решетки изображено неупругое рассеяние при трех положениях монокристалла. Рассмотрим положение 1. Расстоянию от точки S_1 до точки A (узла обратной решетки τ) соответствует поверхность рассеяния 1, которую мы изобразили окружностью.

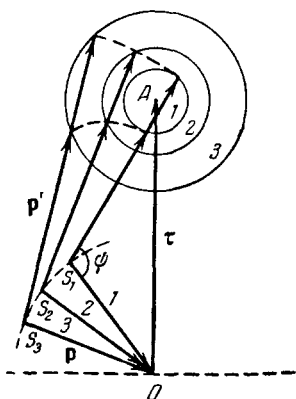


Рис. 3. Конвенциональный метод.

$p = \text{const}, \psi = \text{const};$ меняется q

Точки пересечения \mathbf{p}' с поверхностью рассеяния соответствуют двум пикам в энергетическом распределении рассеянных нейтронов. Векторы, проведенные из точки A в эти точки пересечения, дают волновые векторы квазичастиц, участвующих в рассеянии. Мы видим, что угол ψ должен быть подобран так, чтобы направление \mathbf{p}' пересекало поверхность рассеяния. Иначе одноквантового неупругого рассеяния не будет. Точке S_2 , более удаленной от точки A (большая величина вектора \mathbf{P}), соответствует другая поверхность рассеяния (2) и т. д.

Если соединить точки пересечения векторов \mathbf{p}' с поверхностями рассеяния для различных ориентаций монокристалла, получаются кривые, которые тоже называются «поверхностями рассеяния». На них лежат концы векторов \mathbf{p}' , соответствующих неупругому рассеянию. Истинных поверхностей рассеяния мы обычно не знаем, в эксперименте мы обычно получаем кривые, изображенные пунктиром. По этим кривым можно получить ряд точек зависимости ϵ_q — энергии квазичастиц — от волнового вектора.

Однако в этом методе мы не можем заранее управлять направлением волнового вектора квазичастицы \mathbf{q} , поскольку мы не знаем заранее поверхностей рассеяния и не можем ориентировать кристалл так, чтобы в направлении рассеяния были нейтроны, поглотившие или испустившие квазичастицу с заданным направлением волнового вектора. Поэтому в конвенциональном методе мы можем получать отдельные точки на дисперсионных кривых, соответствующие различным направлениям волнового вектора. Если мы хотим определить спектр квазичастицы для выбранного направления волнового вектора в пространстве обратной решетки, следует экспериментальную методику усложнить. Это достигается в следующих методах:

2. Метод постоянного Q . Эксперимент ведется так, что вектор $\mathbf{Q} \equiv \mathbf{p} - \mathbf{p}' = \text{const}$. Имеется два варианта такой методики.

а) Кристалл-анализатор устанавливается в такое положение, чтобы регистрировать одну энергию рассеянных нейтронов, т. е. на одно значение p' . Если мы удерживаем $Q = \text{const}$, то тем самым имеем $q = \text{const}$; таким образом, мы имеем заданное значение волнового вектора квазичастицы, для которого хотим измерить соответствующую энергию.

Энергия нейтронов в падающем пучке меняется, так что меняется длина вектора \mathbf{p} . Конец вектора \mathbf{p} должен лежать на дуге окружности с радиусом, равным длине вектора \mathbf{q} , проведенной из конца вектора \mathbf{p}' (рис. 4, а). Следовательно, конец вектора \mathbf{p} скользит по окружности, а вместе

с его длиной меняются углы φ и ψ . При каждом значении p измеряется интенсивность нейтронов, рассеянных с зафиксированной энергией p' . Шаг за шагом изменяют длину вектора p , так что точка S , двигаясь по окружности, будет удаляться или приближаться к точке обратной решетки A . При некотором значении p поверхность рассеяния пройдет через точку q и интенсивность нейтронов резко увеличится. Положение пиков в интенсивности рассеянных нейтронов как функции энергии начальных нейтронов определяет энергии участвующих в рассеянии квазичастиц с заданным волновым вектором q . Таким образом, в этом методе, оставляя фиксированным q , мы варьируем начальную энергию нейтронов до тех пор, пока не выполнится закон сохранения энергии при столкновении квазичастицы с нейтроном. Вместе с изменением величины p мы вынуждены менять еще φ и ψ по схеме, соответствующей картине рассеяния в пространстве обратной решетки.

Проделав измерение энергетического распределения при данном q , переходят к другому значению q и повторяют процедуру. Следовательно, этот метод является наиболее последовательным; он не требует знания заранее поверхности рассеяния. Технически, однако, метод сложен, так как в нем требуется движение кристалла-монокроматора, задающего энергию начального пучка, согласовать с движением кристалла-образца и кристалла-анализатора. Мы должны иметь, следовательно, так называемый **т р е х а к с и а л ь н ы й** спектрометр. Другой вариант метода постоянного Q может быть поставлен на обычном **д в у х а к с и а л ь н о м** трехкристальном спектрометре.

б) Энергия падающего пучка нейтронов остается все время постоянной. Конец вектора p лежит на окружности, проведенной из начала координат — точки O (рис. 4, б). Кристалл-анализатор устанавливается на регистрацию нейтронов с энергией, соответствующей заданному углу φ . Измеряется интенсивность как функция энергии рассеянных нейтронов. Пики на этой кривой также определяют энергии квазичастиц с данным волновым вектором q , участвующих в рассеянии. В методе постоянного Q (в обоих вариантах) мы получаем сечения всех дисперсионных кривых квазичастиц для выбранного направления волнового вектора вертикальными прямыми $q = \text{const}$. В ряде случаев удобно вести эксперимент так, чтобы получать сечения дисперсионных кривых горизонтальными прямыми $\varepsilon_q = \text{const}$.

3. М е т о д п о с т о я н н о г о ΔE . Энергии падающих нейтронов E и рассеянных E' не меняются, так что $\Delta E = E - E' = \text{const}$. Углы φ и ψ меняются, но так, чтобы конец вектора Q скользил вдоль выбранного направления волнового вектора квазичастиц (рис. 5). При каждом значении углов φ и ψ измеряется интенсивность рассеянных нейтронов как функция длины волнового вектора q . В интенсивности появляются пики, когда конец вектора q попадает на поверхность рассеяния. Получающееся значение q соответствует энергии квазичастицы ΔE . Далее изменяют ΔE и повторяют всю серию измерений.

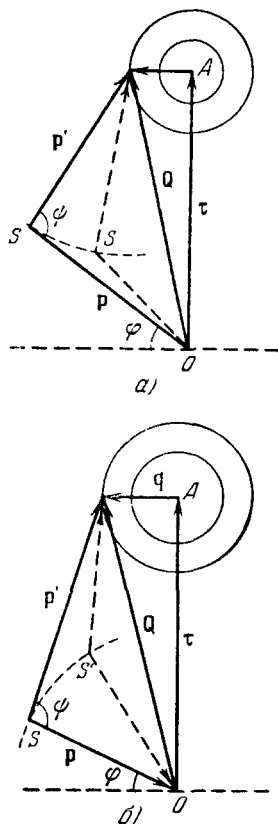


Рис. 4. Метод постоянного Q .

- а) Меняются p , φ , ψ , $p' = \text{const}$;
 б) меняются p' , φ , ψ , $p = \text{const}$.

В методе постоянного ΔE получаются сечения дисперсионных кривых горизонтальными прямыми. Метод удобен тем, что позволяет выбирать желаемое значение ΔE , но он, очевидно, неприменим для определения закона дисперсии ветвей квазичастиц, медленно меняющихся с q .

Рассмотренные методы определения дисперсионных кривых квазичастиц основаны на изучении энергетического распределения нейтронов, рассеянных в некотором направлении. Существуют еще методы, основанные на изучении угловой ширины пиков неупругого рассеяния, среди которых наиболее распространен метод Лауде.

4. М е т о д Л а у д е³¹. В случае квадратичного закона дисперсии, как мы видели, существует максимальный угол θ_0 (на рис. 1 — угол AOP),

в пределах которого существует одноквантовое неупругое рассеяние. Величина этого угла определяется выражением (7,19). Обычно $\alpha \gg 1$, поэтому из (7,19) следует приближенное выражение для θ_0 :

$$\theta_0 \approx \frac{1}{\sqrt{\alpha P}} \sqrt{2|P-p|}. \quad (7,39)$$

Подставляя сюда соотношение (7,38), получим

$$\theta_0 \approx \frac{\sqrt{2\tau \cos \varphi_B}}{\sqrt{\alpha P}} \sqrt{|\varphi - \varphi_B|}. \quad (7,40)$$

Можно показать, что в случае линейного закона дисперсии ($\epsilon_q = cq$, где c — скорость квазичастицы) вместо (7,40) выполняется соотношение

$$\theta_0 \approx \left(\frac{c^2}{v^2} - 1 \right)^{-1/2} \sin 2\varphi_B |\varphi - \varphi_B|, \quad (7,41)$$

пригодное только для $v > c$, где v — скорость падающего нейтрона. Таким образом, угловая ширина неупругого одноквантового пика меня-

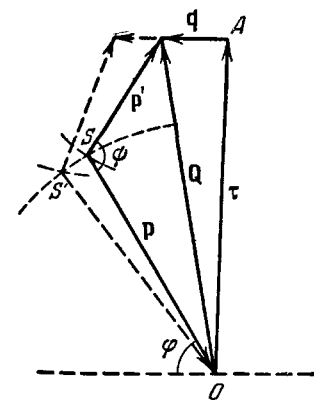


Рис. 5. Метод постоянного ΔE .

$\Delta E = E - E' = \text{const}$; φ и φ_B меняются, но так, чтобы вектор Q скользил вдоль выбранного направления

ется $\sim \sqrt{|\varphi - \varphi_B|}$ в случае квадратичного закона дисперсии квазичастиц и как $\sim |\varphi - \varphi_B|$ в случае линейного закона.

Эти две зависимости открывают возможности следующему экспериментальному методу³¹. Кристалл устанавливается в брэгговское положение и измеряется угловая ширина диффузного неупругого пика. Затем поворачивают кристалл на угол $\varphi - \varphi_B$ от брэгговского положения (missetting) и снова измеряют угловую ширину диффузного пика. Проведя ряд измерений, строят зависимость θ_0 от $|\varphi - \varphi_B|$. По виду этой зависимости определяют характер закона дисперсии — квадратичный он или линейный. Хотя этот метод очень прост (он требует двухкристального спектрометра), ясно, что с его помощью можно получить лишь ограниченную информацию о дисперсионных кривых.

В заключение рассмотрим один важный вопрос: экспериментальное определение параметра α в квадратичном законе дисперсии спиновой волны в ферромагнетике. Проще всего связать α с экспериментально наблюдаемыми величинами, если использовать формулу (7,18). Запишем разность двух возможных значений векторов рассеянных нейтронов в направлении центра неупругого пика, т. е. при $\theta = 0$. Из (7,18) и (7,39) имеем

$$\delta q \equiv [p'_+ - p'_-]_{\theta=0} = \frac{2\alpha P}{\alpha - 1} \sin \theta_0 \approx \frac{2\sqrt{2P|P-p|}}{\sqrt{\alpha}}.$$

Величины p и P фиксируются в эксперименте, поэтому последнее соотношение можно записать в виде

$$\alpha \sim (\delta q)^{-2}. \quad (7,42)$$

Если α изменяется под влиянием какого-либо физического фактора, например температуры, то это изменение можно определить по изменению δq — расстоянию в k -пространстве между двумя пиками неупругого рассеяния. Такие измерения недавно проделал Брокхауз⁵⁹ на магнетите. Схема эксперимента при двух температурах показана на рис. 6. Температурная зависимость параметра α , определенная по соотношению (7,42), хорошо укладывалась на кривую температурной зависимости спонтанной намагниченности ферромагнетика $M(T)$. Этот результат ($\alpha \sim M(T)$) имеет фундаментальное значение, так как он подтверждает качественно новую теорию ферромагнитного состояния Боголюбова и Тябликова^{26,61}, согласно которой спиновые волны существуют при любой температуре, в которой есть еще ферромагнитное упорядочение, но энергия их зависит от температуры, уменьшаясь как намагниченность. Развитие этих исследований должно сыграть важную роль в теории атомного магнитного упорядочения. Такие температурные измерения спектра спиновых волн следовало бы провести для различного типа магнитных структур. Соответствующая теория спиновых волн в произвольных структурах дана в работе⁶¹.

К настоящему времени спектр спиновых волн экспериментально исследован только для нескольких магнетиков: магнетит^{55,59}, железо⁵⁶, $\text{Co}_{0,92}\text{Fe}_{0,08}$ ⁵⁷, франклинит (цинково-марганцовый феррит)⁵⁸ и гематит³⁷. Из них только гематит является антиферромагнетиком, другие — ферромагнетики. В соответствии с выводами теории, в работах⁵⁵⁻⁵⁸ получен квадратичный закон дисперсии для спиновых волн в ферромагнетике и линейный — в антиферромагнетике³⁷. В работе⁵⁹ на магнетите впервые обнаружена оптическая ветвь спиновых волн в ферромагнетике, а закон дисперсии для «акустической» ветви исследован для главных направлений во всей зоне Бриллюэна. В работах^{58,59} оценивается время жизни спиновых волн в ферромагнетиках.

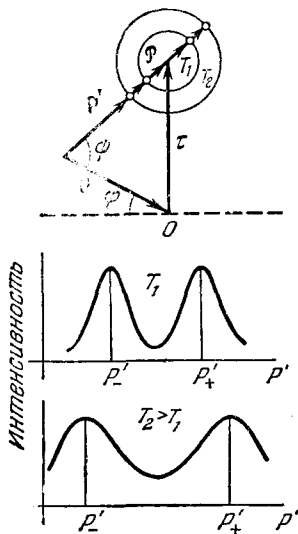


Рис. 6. Схема эксперимента по определению зависимости энергии спиновой волны в ферромагнетике от температуры.

IV. МАГНИТНОЕ КРИТИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ

§ 8. Рассеяние вблизи точек Кюри или Нееля

Эксперименты обнаруживают резкое увеличение магнитного рассеяния нейтронов в ферро-³² и антиферромагнетиках³³ вблизи брэгговских магнитных отражений при приближении к точке фазового превращения и выше ее — в парамагнитной области. Это явление, получившее название магнитного критического рассеяния, по своей природе совершенно аналогично рассеянию света в жидкости вблизи ее критического состояния (опалесценция) или рассеянию рентгеновских лучей в сплавах вблизи точки упорядочения.

Магнитное критическое рассеяние нейтронов связано с возрастанием больших спонтанных флуктуаций намагниченности в окрестности точки Кюри. Так как флуктуации распространяются на расстояния, большие межатомных промежутков, и существуют долгое время по сравнению со временем микроскопической релаксации, они создают магнитное рассеяние, распределение по углам и энергиям для которого сильно отличается

от тех распределений, которые действовали при низких температурах.

Теория критического рассеяния нейтронов в ферромагнетике впервые была построена Ван-Хове⁶ на основе изучения спиновых корреляций вблизи температуры Кюри. Феноменологическая трактовка явления, использующая термодинамическую теорию флуктуаций, была дана Кривоглазом³⁴, который выразил поперечник рассеяния через магнитную восприимчивость в окрестности точки Кюри. Наиболее полная теория, использующая квазиклассическое описание спин-системы вблизи точки упорядочения, была предложена недавно де Жаном и Вилланом³⁵, к изложению которой мы сейчас и перейдем.

Имея в виду применение теории к кристаллам с произвольной решеткой, ячейка которой может состоять из нескольких магнитных атомов, запишем сечение магнитного рассеяния (3,8) в следующей форме:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} = (r_0 \gamma)^2 \frac{p'}{p} \sum_{ij} F_i(\mathbf{q}) F_j(\mathbf{q}) \sum_{R_i R_j} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \times \\ \times \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha} e_{\beta}) \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (E_{p'} - E_p) t} \langle S_{R_i}^{\alpha}(0) S_{R_j}^{\beta}(t) \rangle dt, \quad (8,1)$$

где суммирование по магнитным атомам кристалла разбито на сумму \sum_i в пределах одной элементарной ячейки и сумму \sum_{R_i} по атомам данного сорта и положения во всех ячейках кристалла.

Поскольку в упорядоченной фазе средние компоненты спина каждого атома не все равны нулю, удобно спиновый коррелятор записать в виде

$$\langle S_{R_i}^{\alpha}(0) S_{R_j}^{\beta}(t) \rangle = \langle S_{R_i}^{\alpha} \rangle \langle S_{R_j}^{\beta} \rangle + \gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i, t). \quad (8,2)$$

Первый член, соответствующий дальнему порядку, дает упругое брэгговское рассеяние. Второй член дает добавочное диффузное рассеяние, которое в общем случае неупруго. Именно эта часть коррелятора и обуславливает критическое рассеяние вблизи температуры упорядочения. Соответствующая ему часть сечения рассеяния равна

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} \right)_{\text{крит}} = (\tau_0 \gamma)^2 \frac{p'}{p} \sum_{ij} F_i(\mathbf{q}) F_j(\mathbf{q}) \sum_{R_i R_j} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \sum_{\alpha\beta} (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha} e_{\beta}) \times \\ \times \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (E_{p'} - E_p) t} \{ \langle S_{R_i}^{\alpha}(0) S_{R_j}^{\beta}(t) \rangle - \langle S_{R_i}^{\alpha} \rangle \langle S_{R_j}^{\beta} \rangle \} dt. \quad (8,3)$$

Будем рассматривать пока рассеяние, при котором энергия перехода $E_{p'} - E_p$ мала по сравнению с начальной энергией. В этом случае можно исходить из статической аппроксимации для корреляций, рассматривая их предельные значения при $t=0$. Ясно, что такая аппроксимация описывает упругое рассеяние. Интегрируя в этом случае выражение (8,3) по $dE_{p'}$, выразим сечение критического рассеяния в единицу телесного угла в виде

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{крит}} = (r_0 \gamma)^2 \frac{kT}{g^2 \mu_0^2} \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} F_i(\mathbf{q}) F_j(\mathbf{q}) \chi_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) (\delta_{\alpha\beta} - e_{\alpha} e_{\beta}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}, \quad (8,4)$$

где

$$\chi_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \beta g^2 \mu_0^2 \sum_{R_i R_j} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j + \mathbf{r}_j)} \{ \langle S_{R_i}^{\alpha} S_{R_j}^{\beta} \rangle - \langle S_{R_i}^{\alpha} \rangle \langle S_{R_j}^{\beta} \rangle \} \quad (8,5),$$

— тензор магнитной восприимчивости рассеивателя, описывающий реакцию его магнитной системы на неоднородное внешнее магнитное поле. В самом деле, если на спин, находящийся в узле \mathbf{R}_i , действует магнитное поле \mathbf{H}_{R_i} , то оно приведет к изменению равновесного значения магнитного момента на величину $\delta\mu_{R_i}$. Среднее значение магнитного момента при наличии внешнего неоднородного поля равно

$$\mu_{R_i} = \frac{g\mu_0 \text{Sp} [e^{-\beta(\mathcal{H} + \delta\mathcal{H})} S_{R_i}]}{\text{Sp} e^{-\beta(\mathcal{H} + \delta\mathcal{H})}} \equiv \mu_{R_i}^0 + \delta\mu_{R_i}, \quad (8,6)$$

где $\delta\mathcal{H} = -g\mu_0 \sum_{iR_i} (S_{R_i} \mathbf{H}_{R_i})$. Разлагая шпуры по степеням $\delta\mathcal{H}$, получим в первом приближении

$$\delta\mu_{R_i}^\alpha \approx g^2\mu_0^2 \sum_{\beta R_j} \int_0^\beta d\beta_1 [\langle S_{R_i}^\alpha(0) S_{R_j}^\beta(i\hbar\beta_1) \rangle - \langle S_{R_i}^\alpha(0) \rangle \langle S_{R_j}^\beta(0) \rangle] H_{R_j}^\beta. \quad (8,7)$$

В дальнейшем нас интересует классический предел спиновых свойств системы, находящейся вблизи точек фазового перехода, поэтому мы пренебрежем некоммутативностью спиновых операторов, полагая $S_{R_i}^\beta(i\hbar\beta_1) = S_{R_i}^\beta$. Вместо (8,7) будем иметь

$$\delta\mu_{R_i}^\alpha = \beta g^2\mu_0^2 \sum_{\beta} \sum_{jR_j} (\langle S_{R_i}^\alpha S_{R_j}^\beta \rangle - \langle S_{R_i}^\alpha \rangle \langle S_{R_j}^\beta \rangle) H_{R_j}^\beta. \quad (8,8)$$

Уравнение для фурье-компонент (8,8) имеет вид

$$N\delta\mu_i^\alpha(\mathbf{k}) = \sum_j \sum_{\beta} \chi_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) H_j^\beta(\mathbf{k}), \quad (8,9)$$

где $H_j^\beta(\mathbf{k}) = \sum_{R_j} H_{R_j}^\beta e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_j - \mathbf{r}_j)}$ — фурье-компонента внешнего поля, N —

число ячеек в образце. Последнее соотношение показывает, что $\chi_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k})$, определенное выражением (8,5), есть тензор магнитной восприимчивости. Согласно (8,4) вычисление сечения сводится к вычислению тензора магнитной восприимчивости с учетом пространственной дисперсии. Его компоненты могут быть выражены через обменные интегралы, если написать, что каждый спин находится в равновесии под действием внешнего поля и молекулярного поля своих соседей.

Выше точки перехода ($T > T_0$) локальное уравнение для магнитного момента в узле \mathbf{R}_i можно, очевидно, записать в виде³⁵

$$\mu_{R_i} = \frac{S_i(S_i + 1)}{3kT} \left(g^2\mu_0^2 \mathbf{H}_{R_i} + \sum_{jR_j} 2J_{R_i R_j} \mu_{R_j} \right). \quad (8,10)$$

Если определить эрмитовскую матрицу ранга n соотношением

$$A_{ij}(\mathbf{k}) = \delta_{ij} \frac{3kT}{S_i(S_i + 1)} - \sum_{R_j} 2J_{R_i R_j} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j - \mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)}, \quad (8,11)$$

то уравнение (8,10) в фурье-компонентах легко записать в виде

$$\sum_i A_{ij}(\mathbf{k}) \mu_j^\alpha(\mathbf{k}) = g^2\mu_0^2 H_j^\alpha(\mathbf{k}). \quad (8,12)$$

Переходя к обратной матрице A^{-1} и сравнивая с (8,9), получим

$$\chi_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = N g^2\mu_0^2 [A^{-1}(\mathbf{k})]_{ij} \delta_{\alpha\beta}. \quad (8,13)$$

Ниже температуры перехода ($T < T_0$) мы должны учесть наличие спонтанной намагниченности в системе. Уравнение для вычисления магнитного момента иона в точке \mathbf{R}_i в направлении спонтанной намагниченности (ось z) записывается в виде

$$\mu_{R_i} = B_i(|\mathbf{F}_{R_i} + \mathbf{H}_{R_i}|), \quad (8,14)$$

где

$$B_i(H) = \frac{1}{2} g\mu_0 \left\{ (2S_i + 1) \coth \left[\beta g\mu_0 \left(S_i + \frac{1}{2} \right) H \right] - \coth \left[\frac{1}{2} \beta g\mu_0 H \right] \right\} \quad (8,15)$$

— функция Бриллюэна, \mathbf{F}_{R_i} — молекулярное поле в точке \mathbf{R}_i . Оно дается выражением

$$\mathbf{F}_{R_i} = \frac{1}{g^2\mu_0^2} \sum_{jR_j} 2J_{R_i R_j} \mu_{R_j}. \quad (8,16)$$

Уравнение (8,14) приводит к следующему выражению для тензора восприимчивости при $T < T_0$:

$$\chi_{ij}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = N g^2 \mu_0^2 [A^{\alpha-1}(\mathbf{k})]_{ij} \delta_{\alpha\beta}, \quad (8,17)$$

где

$$\begin{aligned} A_{ij}^z(\mathbf{k}) &= \delta_{ij} \frac{g^2 \mu_0^2}{\left(\frac{\partial B_i}{\partial H} \right)_{\mathbf{F}_i}} - \sum_{jR_j} 2J_{R_i R_j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j - \mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)}, \\ A_{ij}^x(\mathbf{k}) &= A_{ij}^y(\mathbf{k}) = g^2 \mu_0^2 \frac{F_i}{\mu_i} \delta_{ij} - \sum_{jR_j} 2J_{R_i R_j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j - \mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j)}. \end{aligned} \quad (8,18)$$

В последних соотношениях μ_i и \mathbf{F}_i — средние значения спина иона в положении i , и молекулярного поля, действующего на него, в отсутствие внешнего поля.

Таким образом, в приближении молекулярного поля критическое рассеяние описывается формулой (8,4), где тензор магнитной восприимчивости выражается соотношением (8,13) для $T > T_0$ и (8,17) для $T < T_0$. Конкретные вычисления сечения критического рассеяния с помощью описанного здесь метода де Жана и Виллана были недавно проделаны для магнетита³⁶ и гематита³⁷. Развитие метода на случай антиферромагнетизма сделано де Жаном в работе³⁸.

Рассмотрим теперь подробно критическое рассеяние в простейшем ферромагнетике, состоящем из одной подрешетки, для парамагнитной области ($T > T_0$). При этом нам сейчас удобнее пользоваться не методом де Жана — Виллана, а исходить от первичных формул (8,4) и (8,5), выражающих сечение через восприимчивость $\chi^{\alpha\beta}(\mathbf{q})$. Поскольку в парамагнитной области $\chi^{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = \chi(\mathbf{q})\delta^{\alpha\beta}$, выражение (8,4) принимает вид

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{крит}} = N (r_0 \gamma)^2 \cdot \frac{2}{3} S(S+1) F^2(q) \frac{\chi(\mathbf{q})}{\chi_0}, \quad (8,19)$$

где $\chi_0 = N \frac{g^2 \mu_0^2 S(S+1)}{3kT}$ — парамагнитная восприимчивость в отсутствие обменного взаимодействия, $\chi(\mathbf{q})$ — восприимчивость, описывающая отклик системы на неоднородное магнитное поле с волновым вектором \mathbf{q} . Согласно (8,5) $\chi(\mathbf{q})$ следующим образом выражается через спиновый коррелятор:

$$S(S+1) \frac{\chi(\mathbf{q})}{\chi_0} = \sum_R \langle S_0 S_R \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}. \quad (8,20)$$

Здесь S_0 — спин узла, выбранного за начало координат. Мы учли здесь, во-первых, что $\langle S_R^a, S_{R'}^b \rangle$ зависит только от разности $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ и, во-вторых, $\langle S_R^a, S_{R'}^a \rangle$ одинаков для всех $a = x, y, z$ выше точки Кюри.

Дальнейшее вычисление требует знания коррелятора $\langle S_0 S_R \rangle$. В настоящее время не существует метода точного расчета этой величины, однако некоторые общие свойства ее как функции R могут быть выяснены из физических соображений. Совершенно очевидно, что в отсутствие обменного взаимодействия $\langle S_0 S_R \rangle \equiv 0$, поскольку в этом случае проекции спинов, относящихся к разным узлам, статистически независимы, а их средние значения равны нулю. Наличие обменного взаимодействия приводит к некоторой корреляции спиновых проекций в разных узлах, которая возрастает по мере приближения к точке Кюри. Эта корреляция проявляется в возникновении флуктуаций намагниченности, размер которых возрастает вблизи точки Кюри. Феноменологический анализ, проведенный Ван-Хове⁶, привел к следующей зависимости корреляций вблизи температуры Кюри при больших R (дальнодействующая часть корреляций):

$$\langle S_0 S_R \rangle = \frac{V_0 S(S+1)}{4\pi r_1^2 R} e^{-k_1 R}, \quad (8,21)$$

где V_0 — объем, приходящийся на магнитный атом, а r_1 и k_1 — некоторые феноменологические константы, зависящие от температуры; r_1 должно медленно меняться с температурой и по порядку величины составляет несколько межатомных расстояний, в то время как k_1 ведет себя совершенно по-иному. При приближении к точке Кюри корреляции должны возрастать, поэтому k_1^{-1} достигает в точке Кюри макроскопического размера и убывает с повышением температуры до значения порядка r_1 .

Из соотношений (8,20) и (8,21) немедленно следует, что

$$(k_1 r_1)^2 = \frac{\chi_0}{\chi(0)}. \quad (8,22)$$

Подставив формулу (8,21) в (8,20) и суммируя по всему кристаллу, найдем $\chi(\mathbf{q})$. Однако нас не интересует область всех значений \mathbf{q} , а только тех, которые лежат вблизи векторов обратной решетки, т. е. нас интересует критическое расстояние вблизи положения брэгговского пика. В связи с этим, записав правую часть (8,20) в виде $\sum_R \langle S_0 S_R \rangle e^{i(\mathbf{q}-\boldsymbol{\tau})\mathbf{R}}$ и разложив экспоненту в ряд по $\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}$, найдем после суммирования по узлам решетки для малых значений $|\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|$ (в случае кубического кристалла)

$$\frac{\chi(\mathbf{q})}{\chi_0} = \frac{1}{r_1^2 (k_1^2 + |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^2)}. \quad (8,23)$$

Выражение для сечения рассеяния для $T > T_0$ принимает вид

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{крит}} = \frac{2}{3} S(S+1) (\gamma r_0)^2 \frac{F^2(\mathbf{q})}{r_1^2 [k_1^2 + |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^2]}; \quad (8,24)$$

Поскольку k_1 резко убывает при приближении к точке Кюри, из формулы (8,24) следует, что вблизи брэгговского пика интенсивность рассеяния резко возрастает с понижением температуры, достигая максимального значения в точке Кюри. При фиксированной температуре зависимость интенсивности от отклонения угла рассеяния θ от положения брэгговского пика θ_B , соответствующего вектору обратной решетки $\boldsymbol{\tau}$, определяется фактором

$$[k_1^2 + \tau^2 (\theta - \theta_B)^2]^{-1}, \quad (8,24')$$

т. е. распределение имеет лоренцевскую форму с шириной $\sim k_1$.

Критическое рассеяние с $\tau = 0$ соответствует рассеянию на малые углы. Критическое рассеяние с $\tau \neq 0$ может наблюдаться фактически, если формфактор $F(\mathbf{q})$ не мал при $\mathbf{q} = \boldsymbol{\tau}$. Появление критического рассеяния с $\tau \neq 0$ является важной особенностью критического магнитного рассеяния по сравнению, например, с критическим рассеянием света жидкостью, где оно отсутствует. Рассеяние с $\tau \neq 0$, безусловно, отражает то, что несмотря на сильные разупорядочивающие флуктуации намагниченности, спиновая система сохраняет свое упорядоченное расположение в пространстве, обусловленное структурой решетки исследуемого кристалла.

Полезно заметить, что такое же выражение для восприимчивости $\chi(\mathbf{q})$, как (8,23), можно получить с помощью метода де Жана — Виллана, если исходить из соотношений (8,13) и (8,11). В самом деле, записав выражение (8, 11) при $i = j = 1$, и разложив экспоненту в ряд по степеням $|\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|$, получим сразу с помощью (8,13) соотношение (8,23), где параметры r_1 и k_1 равны:

$$r_1^2 = \frac{a^2}{z} \frac{T_0}{T}, \quad k_1^2 = \frac{z}{a^2} \frac{T - T_0}{T_0}. \quad (8,25)$$

Здесь a — постоянная решетки, z — число ближайших соседей, $T_0 = 2zJS(S+1)/3k$ — температура Кюри. Мы видим, что r_1 и k_1 имеют свойства, предсказанные феноменологической теорией Ван-Хове. r_1 имеет микроскопические размеры и слабо зависит от температуры в окрестности точки Кюри. k_1^{-1} резко возрастает при приближении к точке Кюри, но вдали от нее совпадает с r_1 . Таким образом, метод де Жана и Виллана позволяет вычислить величины r_1 и k_1 и дать их температурную зависимость. Кроме того, он позволяет обобщить выражения для сечения рассеяния (8,24) на случай нескольких ферромагнитных подрешеток. Можно показать³⁵, что в общем случае вблизи брэгговских максимумов критическое рассеяние равно

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{крит}} = \frac{2}{3} (r_0 \gamma)^2 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n S_i (S_i + 1) \frac{F_i^2(\mathbf{q})}{r_1^2(\boldsymbol{\tau}) [k_1^2 + |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^2]}, \quad (8,26)$$

где

$$k_1^2 = \frac{\sum_i \chi_0^i}{r_1^2(0) \sum_{ij} \chi_{ij}(0)}, \quad (8,27)$$

$$r_1^2(\boldsymbol{\tau}) = \frac{\sum_i S_i (S_i + 1)}{18kT \sum_{ij} \tilde{A}_{ij}(\boldsymbol{\tau}) e^{i\boldsymbol{\tau}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial^2 \Delta}{\partial k_{\alpha}^2} \right)_{\mathbf{k}=0}^{T=T_0}}, \quad (8,28)$$

причем $\tilde{A}_{ij}(\mathbf{k})$ есть минор матрицы $A_{ij}(\mathbf{k})$, а $\Delta(\mathbf{k})$ — ее детерминант, так что $[A^{-1}(\mathbf{k})]_{ij} = \tilde{A}_{ij}(\mathbf{k})/\Delta(\mathbf{k})$.

В общем случае выражение (8,22) заменяется следующим:

$$[k_1 r_1(0)]^2 = \frac{\sum_i \chi_0^i}{\sum_{ij} \chi_{ij}(0)}. \quad (8,29)$$

Выражение (8,26), как и (8,24), справедливо вблизи точки Кюри, когда $T - T_0 \ll T_0$. Ниже точки Кюри, когда $T_0 - T \ll T_0$, критическое рассеяние описывается формулой (8,4) с учетом (8,17).

В случае, когда ферромагнетик имеет одну подрешетку, выражение для сечения принимает простой вид

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{крит}} = N(r_0\gamma)^2 \frac{kT}{g^2\mu_0^2} F^2(\mathbf{q}) \{\chi_{\parallel}(\mathbf{q})(1 - e_z^2) + \chi_{\perp}(\mathbf{q})(1 + e_z^2)\}, \quad (8,30)$$

где χ_{\parallel} и χ_{\perp} — продольная и поперечная составляющие тензора магнитной восприимчивости. С помощью выражений (8,18) для векторов рассеяния, вблизи брэгговских пиков сечение (8,30) можно представить в виде

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{крит}} = N(r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) \frac{1}{3} S(S+1) \left\{ \frac{1 - e_z^2}{r_1^2 [k_{\parallel}^2 + |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^2]} + \frac{1 + e_z^2}{r_1^2 [k_{\perp}^2 + |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^2]} \right\}. \quad (8,31)$$

Здесь $r_1^2 = \frac{a^2}{z} \frac{T_0}{T}$ — параметр, формально совпадающий с тем, который фигурировал в парамагнитной области, а параметры k_{\parallel}^2 и k_{\perp}^2 равны

$$k_{\parallel}^2 = \frac{g^2\mu_0^2 \left(\frac{\partial B}{\partial H}\right)^{-1}_{\text{F}} - 2zJ}{2Ja^2}, \quad k_{\perp}^2 = \frac{g^2\mu_0^2 \frac{F}{\mu} - 2zJ}{2Ja^2}. \quad (8,32)$$

Параметры k_{\parallel} и k_{\perp} быстро убывают при приближении к температуре Кюри, поэтому интенсивность рассеяния согласно (8,31) резко увеличивается, достигая максимального значения в точке Кюри. Далее, с повышением температуры интенсивность так же резко падает и описывается уже формулой (8,24). Таким образом, рассеяние нейтронов вблизи брэгговских отражений в окрестности точки Кюри образует пики в температурной зависимости интенсивности.

Существенное отличие критического рассеяния в ферромагнитной области от рассеяния выше точки Кюри заключается в том, что в первом случае его интенсивность зависит от положения вектора рассеяния по отношению к направлению спонтанного магнитного момента кристалла. Рассеяние, описываемое двумя членами в фигурных скобках выражения (8,31), связанное с корреляцией продольных или поперечных компонент спинов, можно разделить, если измерить рассеяние в двух направлениях: когда вектор \mathbf{q} перпендикулярен и параллелен вектору \mathbf{m} . Поскольку в точке Кюри k_{\parallel} и k_{\perp} равны нулю, интенсивность рассеяния, определяемая формулой (8,31), как легко видеть, совпадает со значением интенсивности в точке Кюри, даваемой формулой (8,24); таким образом, обе эти формулы смыкаются в точке Кюри.

Интересно также отметить, что из сопоставления (8,31) и (8,24) следует, что ниже точки Кюри дальнедействующая часть корреляций меняется с расстоянием по тому же закону, что и в парамагнитной области (см. (8,21)), с той лишь разницей, что степень спада корреляций будет различна для продольных и перпендикулярных составляющих спинов. Она будет определяться факторами k_{\parallel} и k_{\perp} соответственно вместо k_1 . Вплоть до самой точки Кюри $k_{\perp} \gg k_{\parallel}$, поэтому корреляции перпендикулярных компонент спадают быстрее. Это приводит к тому, что вклад в рассеяние от второго члена в (8,31) мал по сравнению с вкладом первого члена, связанного с продольными корреляциями (за исключением, конечно, случая, когда \mathbf{q} близко к \mathbf{m}).

Отметим в заключение, что распределение интенсивности критического рассеяния нейтронов по углам определяется дальнедействующей частью спиновых корреляций, определяемых выражением (8,2). Эти корреляционные функции определяют рассеяние не только нейтронов, но и, например, электронов в ферромагнитном металле, что также приводит

к аномалиям электропроводности и других кинетических коэффициентов в окрестности точки Кюри. Поэтому вычисление таких корреляционных функций представляет общетеоретический интерес.

Изложенный здесь метод де Жана — Виллана состоит в использовании связи этих корреляционных функций с магнитной восприимчивостью, которая вычисляется с помощью приближения молекулярного поля. Другой способ вычисления был ранее предложен Эллиотом и Маршаллом³⁹, которые составили уравнения для корреляционных функций с помощью метода кластеров Бете — Пайерлса⁴⁰, т. е. опять-таки в приближении молекулярного поля, пригодном в окрестности температуры Кюри.

Наиболее общий путь вычисления корреляционных функций в гейзенберговской модели ферромагнетизма состоит, по-видимому, в использовании двухвременных функций Грина. Боголюбов и Тябликов²⁶ составили таким образом корреляционную функцию для спина $s = \frac{1}{2}$. Обобщение их метода для произвольного спина сделано недавно в работе⁴¹. Полученное этим методом выражение для корреляционной функции в виде ряда Фурье справедливо приближенно для всего интервала температур, в котором существует ферромагнитное состояние, однако суммирование ряда Фурье в области промежуточных температур можно провести лишь численно.

Вернемся к критическому рассеянию. До сих пор изучалась только статическая аппроксимация критического рассеяния, при которой пренебрегалось изменением энергии нейтрона $\hbar\omega = E_p - E_{p'}$ при рассеянии. Энергетическое распределение рассеянных нейтронов связано с зависимостью спиновых операторов или спиновых корреляций от времени. Проще всего получить качественный характер этой зависимости с помощью феноменологического метода. Предположим, что зависимость от времени корреляций определяется вблизи точки Кюри (при $T > T_0$) затуханием флуктуаций намагниченности, описываемым в свою очередь феноменологическим уравнением необратимых процессов в спиновой системе, например уравнением диффузии

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \Lambda_1 \Delta M, \quad (8,33)$$

где Λ_1 — коэффициент диффузии, который обратно пропорционален магнитной восприимчивости. Отсюда фурье-компонента намагниченности $M_q \sim e^{-\Lambda_1 q^2 t}$, поэтому для временного коррелятора можно написать

$$\sum_R \langle S_0 S_R(t) \rangle e^{iqR} = \sum_R \langle S_0 S_R \rangle e^{iqR} e^{-\Lambda_1 q^2 t}. \quad (8,34)$$

Подставляя это выражение в (8,3) для случая $i=j=1$ и интегрируя по времени, находим вместо (8,24)

$$\left(\frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE_{p'}} \right)_{\text{крит}} = \frac{2}{3} (r_0 \gamma)^2 S(S+1) \frac{F^2(q)}{r_1^2 [k_1^2 + |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^2]} \frac{1}{\pi} \frac{\Lambda_1 \hbar |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^2}{(\Lambda_1 \hbar)^2 |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^4 + [E_{p'} - E_p]^2}. \quad (8,35)$$

Распределение нейтронов по энергиям вблизи брэгговского пика описывается лоренцевской линией с шириной $\Lambda_1 \hbar |\mathbf{q} - \boldsymbol{\tau}|^2$. Поскольку при приближении к точке Кюри $\Lambda_1 \rightarrow 0$, функция энергетического распределения в (8,35) стремится к $\delta(E_p - E_{p'})$ -функции. Это означает, что вблизи точки Кюри критическое рассеяние нейтронов квазиупруго. При интегрировании выражения (8,35) по $dE_{p'}$ получается угловое распределение (8,24), умноженное на фактор, близкий к единице.

Из изложенного видно, что экспериментальное изучение критического рассеяния вблизи точек фазового перехода должно давать важную информацию о поведении флуктуаций намагниченности.

К настоящему времени наиболее полно критическое рассеяние изучено в магнетите³⁶. Несостоятельность спин-волновой теории рассеяния нейтронов в окрестности точки Кюри была экспериментально показана на магнетите в работе⁴². Позднее Ристе³⁶ было проведено тщательное исследование критического рассеяния и сравнение экспериментальных результатов с теорией де Жана и Виллана. Общая картина рассеяния оказалась такой, какая была предсказана Ван-Хове, а количественно результаты хорошо согласуются с предсказаниями де Жана и Виллана для магнетита. Тщательно было изучено также критическое рассеяние на гематите³⁷.

V. РАССЕЯНИЕ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ

§ 9. Дифференциальное сечение рассеяния поляризованных нейтронов

Для рассеяния поляризованных нейтронов характерна интерференция ядерного и магнитного рассеяний, которая отсутствовала, если нейтроны не имели поляризации. В связи с этим в выражении для дифференциального сечения рассеяния

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE_{p'}} = \frac{m^2}{(2\pi)^3 \hbar^5} \frac{p'}{p} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}(E_{p'} - E_p)t} \text{Sp} [\varrho_\sigma \langle V_{p', p}^+ V_{p', p}(t) \rangle] \quad (9,1)$$

мы должны учесть сразу оба взаимодействия нейтрона с кристаллом, ядерное и магнитное, поэтому величину $V_{p', p}$ запишем в виде

$$V_{p', p} = \sum_l \left[A_l + \frac{1}{2} B_l (\sigma \mathbf{I}_l) \right] e^{i\mathbf{qR}_l} - \frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \frac{1}{2} \sum_j F_j(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{qR}_j} (S_j, \sigma - (e\sigma) e). \quad (9,2)$$

Состояние поляризации падающего пучка нейтронов задается матрицей спиновой плотности

$$\varrho_\sigma = \frac{1}{2} (1 + \mathbf{p}_0 \sigma), \quad (9,3)$$

где $\frac{1}{2} \sigma$ — оператор спина нейтрона, а $\mathbf{p}_0 = \text{Sp } \varrho_\sigma \sigma$ — вектор поляризации, равный удвоенному среднему значению спина нейтрона в пучке. Отдельные компоненты вектора σ суть матрицы Паули, подчиняющиеся перестановочным соотношениям

$$\sigma_\alpha \sigma_\beta - \sigma_\beta \sigma_\alpha = 2i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \sigma_\gamma, \quad \sigma_\alpha \sigma_\beta + \sigma_\beta \sigma_\alpha = 2\delta_{\alpha\beta}. \quad (9,4)$$

Следует подчеркнуть, что выражение (9,1) имеет наиболее общий вид для пучка частиц со спином $1/2$, что следует непосредственно из свойств матриц Паули.

Ясно, что при вычислении сечения рассеяния потребуются выражения для шпуров от различных произведений матриц Паули. Из перестановочных соотношений (9,4) легко получить следующие необходимые соотношения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Sp } 1 &= 1, \quad \frac{1}{2} \text{Sp } \sigma_\alpha = 0, \quad \frac{1}{2} \text{Sp } (\sigma_\alpha \sigma_\beta) = \delta_{\alpha\beta}, \\ \frac{1}{2} \text{Sp } (\sigma_\alpha \sigma_\beta \sigma_\gamma) &= i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}, \quad \frac{1}{2} \text{Sp } (\sigma_\alpha \sigma_\beta \sigma_\gamma \sigma_\delta) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} - \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}. \end{aligned} \quad (9,5)$$

Как легко видеть из соотношений (9,1) и (9,2), все задачи о рассеянии поляризованных нейтронов в магнетике приводят

к необходимости вычислять шпуры от операторов

$$L_j = (S_j, \sigma - (e\sigma)e) \quad (9,6)$$

в произведении с другими такими же операторами и с матрицами Паули. Результаты таких вычислений сведены в следующую таблицу (9,8), в которой вектор \mathfrak{M}_j означает

$$\mathfrak{M}_j = S_j - (eS_j)e. \quad (9,7)$$

Итак, мы имеем

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Sp} \{ \sigma L \} &= \mathfrak{M}, \\ \frac{1}{2} \text{Sp} \{ (p\sigma) L \} &= (\mathfrak{M}p), \\ \frac{1}{2} \text{Sp} \{ (p\sigma) \sigma L \} &= i [\mathfrak{M} \times p], \\ \frac{1}{2} \text{Sp} \{ (p\sigma) L \sigma \} &= -i [\mathfrak{M} \times p], \\ \frac{1}{2} \text{Sp} \{ L_1 L_2 \} &= (\mathfrak{M}_1 \mathfrak{M}_2), \\ \frac{1}{2} \text{Sp} \{ L_1 \sigma L_2 \} &= -i [\mathfrak{M}_1 \times \mathfrak{M}_2], \\ \frac{1}{2} \text{Sp} \{ (p\sigma) L_1 L_2 \} &= i [\mathfrak{M}_1 \times \mathfrak{M}_2] p, \\ \frac{1}{2} \text{Sp} \{ (p\sigma) L_1 \sigma L_2 \} &= \mathfrak{M}_1 (\mathfrak{M}_2 p) + (\mathfrak{M}_1 p) \mathfrak{M}_2 - p (\mathfrak{M}_1 \mathfrak{M}_2). \end{aligned} \right\} \quad (9,8)$$

Используя эту таблицу, нетрудно получить следующее общее выражение для шпура, определяющего дифференциальное сечение (9,1):

$$\begin{aligned} \text{Sp} [q_\sigma \langle V_{p', p}^+ V_{p', p}(t) \rangle] &= \sum_{ll'} \left[A_l A_{l'} + \frac{1}{4} B_l^2 I_l (I_l + 1) \delta_{ll'} \right] \langle e^{-iqR_l} e^{iqR_{l'}(t)} \rangle + \\ &+ \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \right)^2 \frac{1}{4} \sum_{jj'} F_j(q) F_{j'}(q) \langle e^{-iqR_j} e^{iqR_{j'}(t)} \rangle \langle (\mathfrak{M}_j \mathfrak{M}_{j'}(t)) \rangle - \\ &- \frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \frac{1}{2} \sum_{lj} A_l F_j(q) \langle e^{-iqR_l} e^{iqR_j(t)} \rangle \langle (\mathfrak{M}_j(t)) p_0 \rangle - \\ &- \frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \frac{1}{2} \sum_{lj} A_l F_j(q) \langle e^{-iqR_j} e^{iqR_l(t)} \rangle \langle (\mathfrak{M}_j) p_0 \rangle + \\ &+ \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \right)^2 \frac{1}{4} \sum_{jj'} F_j(q) F_{j'}(q) \langle e^{-iqR_j} e^{iqR_{j'}(t)} \rangle i \langle [\mathfrak{M}_j \times \mathfrak{M}_{j'}(t)] \rangle p_0. \quad (9,9) \end{aligned}$$

При получении этого выражения мы допустили приближение: пренебрегли взаимодействием спин-системы с решеткой, в результате чего оказалось возможным разбить среднее от произведения на произведение средних по состояниям магнитной системы и решетки.

Сечение рассеяния получается интегрированием выражения (9,9) по времени, поэтому, как легко видеть, первые два члена описывают рассеяние неполяризованных нейтронов. Добавочный член в сечении, возникающий за счет поляризации нейтронов, пропорционален вектору начальной поляризации p_0 . Третий и четвертый члены в (9,9) происходят от интерференции ядерного и магнитного рассеяний.

Представляет особый интерес рассмотреть выражение (9,9) в двух частных случаях: когда рассеиватель является ферромагнетиком и антиферромагнетиком. Для простоты положим, что в обоих случаях кристалл состоит из атомов только одного сорта. Из выражения (9,9) следует выделить сначала части, соответствующие упругому и неупругому рассеянию. Для этой цели выразим оператор вектора спина S_j в системе координат, где ось z направлена вдоль спонтанного магнитного момента. (Если бы кристалл состоял из нескольких подрешеток, следовало бы для каждой из них выбрать свою систему координат с осью z вдоль вектора намагниченности подрешетки.)

В случае одной подрешетки

$$S_j = S_j^z \mathbf{m} + \frac{1}{2} S_j^+ \mathbf{m}^- + \frac{1}{2} S_j^- \mathbf{m}^+, \quad (9,10)$$

где $\mathbf{m}^\pm = \mathbf{m}^x \pm i\mathbf{m}^y$, \mathbf{m}^x , \mathbf{m}^y — единичные векторы вдоль осей x и y . Соответственно (9,10) вектор \mathfrak{M}_j (9,7) разлагается на составляющие:

$$\mathfrak{M}_j = S_j^z \mathbf{M} + \frac{1}{2} S_j^+ \mathbf{M}^- + \frac{1}{2} S_j^- \mathbf{M}^+, \quad (9,11)$$

причем

$$\mathbf{M} = \mathbf{m} - (\mathbf{em}) \mathbf{e}, \quad \mathbf{M}^\pm = \mathbf{m}^\pm - (\mathbf{em}^\pm) \mathbf{e}. \quad (9,12)$$

Таким образом, все выражение (9,9) может быть разбито на «продольную» часть, связанную с проекциями S_j^z и приводящую к упругому рассеянию, и на «поперечную» часть, связанную с операторами S_j^\pm и приводящую к неупругому рассеянию. Указанным способом получаем для ферромагнетика

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Sp} \{Q_\sigma \langle V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^+ V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(t) \rangle\} = N \left\{ \overline{A^2} - \overline{A^2} + \frac{1}{4} B^2 I(I+1) \right\} e^{-2W_{\mathbf{q}}} + \\ + \left\{ \overline{A^2} + \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} \right)^2 (r_0\gamma)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) \frac{1}{4} M^2 - \frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0\gamma F(\mathbf{q}) S(T) \overline{A}(\mathbf{M}\mathbf{p}_0) \right\} \times \\ \times \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \right|^2 e^{-2W_{\mathbf{q}}} + \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0\gamma \right)^2 e^{-2W_{\mathbf{q}}} F^2(\mathbf{q}) \frac{1}{16} \sum_{jj'} e^{-i(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} \times \\ \times \{ \langle S_j^z S_{j'}^z(t) \rangle [1 + (\mathbf{em})^2 + 2(\mathbf{em})(\mathbf{ep}_0)] + \langle S_j^+ S_{j'}^-(t) \rangle [1 + (\mathbf{em})^2 - 2(\mathbf{em})(\mathbf{ep}_0)] \}, \end{aligned} \quad (9,13)$$

и для антиферромагнетика (две подрешетки)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \text{Sp} \{Q_\sigma \langle V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^+ V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}(t) \rangle\} = N \left\{ \overline{A^2} - \overline{A^2} + \frac{1}{4} B^2 I(I+1) \right\} e^{-2W_{\mathbf{q}}} + \\ + \overline{A^2} \left| \sum_l e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_l} \right|^2 e^{-2W_{\mathbf{q}}} + \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0\gamma \right)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) \cdot \frac{1}{2} (1 - \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}_{12})) \times \\ \times M^2 \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_j} \right|^2 e^{-2W_{\mathbf{q}}} + \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0\gamma \right)^2 F^2(\mathbf{q}) e^{-2W_{\mathbf{q}}} \times \\ \times \frac{1}{16} \sum_{jj'} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'})} \sum_{\mathbf{v}\mathbf{v}'} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_{\mathbf{v}} - \mathbf{r}_{\mathbf{v}'})} \langle S_{j\mathbf{v}}^+ S_{j'\mathbf{v}'}^-(t) + S_{j\mathbf{v}}^- S_{j'\mathbf{v}'}^+(t) \rangle [1 + (\mathbf{em})^2]. \end{aligned} \quad (9,14)$$

В последнем выражении \mathbf{m} — единичный вектор в направлении намагниченности какой-либо подрешетки. Как видно, это выражение инвариантно относительно выбора подрешеток. Это совершенно естественно, поскольку подрешетки эквивалентны.

Подставив выражения (9,13) и (9,14) в формулу (9, 1), мы можем получить явное выражение для сечений рассеяния поляризованных нейтронов⁴³, однако выписывать их не стоит, ибо все особенности их легко увидеть из последних двух выражений.

Интересно отметить, что для антиферромагнетика с двумя подрешетками сечение рассеяния поляризованных нейтронов ничем не отличается от сечения рассеяния неполяризованных нейтронов. Это и не могло быть иначе. Действительно, как следует из соотношений (9,1) и (9,3), сечение есть линейная функция вектора поляризации \mathbf{p}_0 . Поскольку \mathbf{p}_0 есть псевдовектор, а сечение — скаляр, \mathbf{p}_0 мог войти в выражение для него лишь в произведении с некоторым псевдовектором, характеризующим рассеиватель. Антиферромагнетик не характеризуется каким-либо магнитным псевдовектором (подрешетки задают только ось антиферромагнетизма, но не направление), поэтому в поперечнике и нет члена, содержащего вектор поляризации.

С другой стороны, ферромагнетик характеризуется псевдовектором — направлением спонтанного магнитного момента. Благодаря этому в сечении рассеяния, получаемом из выражения (9,13), содержатся члены, зависящие от поляризации. Эти члены изменяют интенсивности брэгговских пиков за счет интерференции ядерного и магнитного рассеяний, а также интенсивность неупругого магнитного рассеяния.

§ 10. Изменение поляризации при рассеянии в ферро- и антиферромагнетиках

При рассеянии поляризованных нейтронов в магнетиках наибольшую информацию о свойствах его магнитной системы можно получить, изучая не сечение рассеяния, а изменение вектора поляризации рассеянных в заданном направлении нейтронов. Вектор поляризации нейтронов после рассеяния определяется формулой

$$\mathbf{p} = \frac{\text{Sp} \{ \mathbf{q}_\sigma \langle V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^+ \sigma V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \rangle \}}{\text{Sp} \{ \mathbf{q}_\sigma \langle V_{\mathbf{p}'\mathbf{p}}^+ V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \rangle \}}, \quad (10,1)$$

с помощью которой легко вычислить вектор поляризации нейтронов, рассеянных в заданном направлении в результате различных процессов: ядерного и магнитного, упругого и неупругого. Рассмотрим рассеяние в двух случаях.

1. Ферромагнетик. При чисто ядерном рассеянии вектор поляризации, очевидно, не может изменить своего направления, однако в результате рассеяния может произойти частичная деполяризация пучка. Вычисления с использованием формулы (10,1) приводят к следующему выражению для вектора поляризации нейтронов, рассеянных некогерентно и упруго:

$$\mathbf{p}_{\text{неког}} = \frac{\overline{A^2} - \overline{A^2} - \frac{1}{12} \overline{B^2 I (I+1)}}{\overline{A^2} - \overline{A^2} + \frac{1}{4} \overline{B^2 I (I+1)}} \mathbf{p}_0. \quad (10,2)$$

Вектор поляризации нейтронов, испытавших рассеяние без изменения магнитного состояния рассеивателя (без поглощения или испускания спиновых волн) равен⁴⁴

$$\mathbf{p}_{nm} = \frac{\overline{A^2} \mathbf{p}_0 + \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \right)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) \cdot \frac{1}{4} [2M(\mathbf{M}\mathbf{p}_0) - M^2 \mathbf{p}_0] - \frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \overline{A} F(\mathbf{q}) S(T) \mathbf{M}}{\overline{A^2} + \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \right)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) \frac{1}{4} M^2 - \frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0 \gamma \overline{A} F(\mathbf{q}) S(T) (\mathbf{M}\mathbf{p}_0)}. \quad (10,3)$$

Вектор поляризации $\mathbf{p}_m^{\pm}(\mathbf{p}_m^{\pm})$, обусловленный рассеянием с испусканием (поглощением) одной спиновой волны, точнее, процессами рассеяния, при которых число спиновых волн увеличивается (уменьшается) на единицу, имеет вид ⁴⁴

$$\mathbf{p}_m^{\pm} = \frac{\pm 2(\text{em})\mathbf{e} + 2M_x(M_x\mathbf{p}_0) + 2M_y(M_y\mathbf{p}_0) - (M_x^2 + M_y^2)\mathbf{p}_0}{1 + (\text{em})^2 \mp 2(\text{em})(\mathbf{e}\mathbf{p}_0)}. \quad (10,4)$$

Легко убедиться, что это выражение не зависит от поворота координатных осей вокруг вектора \mathbf{m} , т. е. от выбора осей x и y .

Средний вектор поляризации нейтронов, рассеянных в данном направлении \mathbf{n} , очевидно, равен

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{p}_{\text{неког}}\sigma_{\text{неког}}(\mathbf{n}) + \mathbf{p}_{nm}\sigma_{nm}(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) + \mathbf{p}_m^+\sigma_m^+(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) + \mathbf{p}_m^-\sigma_m^-(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0)}{\sigma_{\text{неког}}(\mathbf{n}) + \sigma_{nm}(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) + \sigma_m^+(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) + \sigma_m^-(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0)}. \quad (10,5)$$

Здесь $\sigma_{\text{неког}}(\mathbf{n})$ — сечение некогерентного ядерного рассеяния,

$$\sigma_{nm}(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) = \left[1 + \frac{\left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0\gamma \right)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) \cdot \frac{1}{4} M^2 - \frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0\gamma F(\mathbf{q}) S(T) \bar{A}(\mathbf{M}\mathbf{p}_0)}{\bar{A}^2} \right] \sigma_n(\mathbf{n}). \quad (10,6)$$

$$\sigma_m^{\pm}(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) = \left[1 \mp \frac{2(\text{em})(\mathbf{e}\mathbf{p}_0)}{1 + (\text{em})^2} \right] \sigma_m^{\pm}(\mathbf{n}), \quad (10,7)$$

причем $\sigma_n(\mathbf{n})$ — сечение ядерного рассеяния неполяризованных нейтронов, а $\sigma_m^{\pm}(\mathbf{n})$ — сечение магнитного рассеяния неполяризованных нейтронов с увеличением или уменьшением числа спиновых волн на единицу.

Интересно отметить следующее обстоятельство: в том случае, когда $\sigma_{\text{неког}}(\mathbf{n}) = 0$, что имеет место для решетки, состоящей из атомов одного изотопа, не имеющих спина, вектор поляризации нейтронов, рассеянных в данном направлении, представляется как линейная комбинация трех, в общем случае не лежащих в одной плоскости, векторов \mathbf{p}_{nm} , \mathbf{p}_m^+ и \mathbf{p}_m^- . Эти векторы определяются равенствами (10,3) и (10,4). Из этих равенств видно, что мы можем вычислить их заранее, зная амплитуду ядерного рассеяния, а также $F(\mathbf{q})$, $S(T)$, \mathbf{e} и \mathbf{p}_0 . Таким образом, измерив вектор поляризации \mathbf{p} нейтронов, рассеянных в направлении \mathbf{n} , а также полное сечение в данном направлении

$$\sigma(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) = \sigma_{nm}(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) + \sigma_m^+(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0) + \sigma_m^-(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0), \quad (10,8)$$

мы, очевидно, сможем определить в отдельности $\sigma_{nm}(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0)$, $\sigma_m^+(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0)$ и $\sigma_m^-(\mathbf{n}, \mathbf{p}_0)$, а следовательно, $\sigma_n(\mathbf{n})$ и $\sigma_m^{\pm}(\mathbf{n})$.

Выражения (10,3) — (10,5) позволяют рассмотреть случай рассеяния неполяризованных нейтронов в ферромагнетике (Малеев ⁴⁵). Положив в них $\mathbf{p}_0 = 0$, получим

$$\mathbf{p}_{nm} = \frac{-\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0\gamma \tilde{A} F(\mathbf{q}) S(T) \mathbf{M}}{\bar{A}^2 + \left(\frac{4\pi\hbar^2}{m} r_0\gamma \right)^2 F^2(\mathbf{q}) S^2(T) \frac{1}{4} [1 - (\text{em})^2]}, \quad (10,9)$$

$$\mathbf{p}_m^{\pm} = \pm \frac{2(\text{em})\mathbf{e}}{1 + (\text{em})^2}, \quad (10,10)$$

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{p}_{nm}\sigma_{nm}(\mathbf{n}, 0) + \mathbf{p}_m^+[\sigma_m^+(\mathbf{n}) - \sigma_m^-(\mathbf{n})]}{\sigma_{nm}(\mathbf{n}, 0) + \sigma_m^+(\mathbf{n}) + \sigma_m^-(\mathbf{n})}. \quad (10,11)$$

Таким образом, из последних соотношений следует, что первоначально неполяризованные нейтроны, рассеянные в ферромагнетике в направлении \mathbf{n} , оказываются поляризованными, причем вектор поляризации

(10,13) состоит из двух составляющих. Одна (p_{nm}) обусловлена интерференцией ядерного и упругого магнитного рассеяний; соответствующая поляризация направлена вдоль вектора $M = m - (em) e$. Другая составляющая, возникающая за счет неупругого магнитного рассеяния, направлена вдоль вектора e . Обе составляющие взаимно перпендикулярны, поэтому их легко разделить. Так, намагничивая кристалл перпендикулярно к вектору рассеяния e , мы выделяем часть поляризации, обусловленную интерференцией ядерного и магнитного рассеяний. Намагничивая кристалл вдоль вектора e , получаем часть вектора p , обусловленную неупругим магнитным рассеянием. Это позволяет отделить неупругое магнитное рассеяние от упругого.

2. Антиферромагнетик. При рассеянии неполяризованных нейтронов в антиферромагнетике поляризация, очевидно, возникать не может. Это связано опять-таки с тем, что антиферромагнетик не характеризуется каким-либо псевдовектором, вдоль которого могла бы быть направлена поляризация рассеянных нейтронов. Вместе с тем при рассеянии поляризованных нейтронов в антиферромагнетике возможен, оказывается, поворот вектора поляризации. Как и в случае ферромагнетика, выпишем векторы поляризации нейтронов, рассеянных в заданном направлении в результате различных процессов рассеяния.

При некогерентном ядерном рассеянии поляризация пропорциональна поляризации падающего пучка

$$p_{\text{неког}} = \alpha p_0, \quad (10,12)$$

где коэффициент $\alpha \leq 1$ имеет довольно сложный вид и может быть вычислен в каждом конкретном случае отдельно.

При когерентном ядерном рассеянии поляризация не меняется. Вектор поляризации, обусловленный рассеянием без изменения магнитного состояния рассеивателя (упругое магнитное рассеяние), имеет вид ⁴⁴

$$p_{m0} = \frac{2(Mp_0)M}{M^2} - p_0, \quad (10,13)$$

где $M = m - (em) e$, а m — направление вектора намагниченности какой-либо подрешетки. Эта формула описывает, в частности, поляризацию нейтронов, рассеянных в направлении тех брэгговских пиков, обусловленных магнитным рассеянием, которые не совпадают с ядерными брэгговскими пиками, так как в этих направлениях всеми процессами рассеяния, кроме магнитного упругого рассеяния, можно пренебречь. Нетрудно убедиться, что по абсолютной величине вектор p_{m0} равен p_0 . Разлагая вектор p_{m0} на две составляющие, параллельную и перпендикулярную к вектору M , и подставляя такое разложение в (10,13), можно убедиться, что вектор p_{m0} получается из вектора p_0 поворотом вокруг направления m на 180° .

Таким образом, если p_0 параллелен M , то в результате магнитного отражения поляризация не меняется, причем этот результат, очевидно, справедлив для любого брэгговского пика. Если же p_0 перпендикулярен к M , то для магнитных брэгговских пиков, не совпадающих с ядерными, поляризация оказывается равной

$$p = \frac{\sigma_{\text{яд}} - \sigma_{\text{маг}}}{\sigma_{\text{яд}} + \sigma_{\text{маг}}} p_0, \quad (10,14)$$

где $\sigma_{\text{яд}}$ и $\sigma_{\text{маг}}$ — сечения ядерного и магнитного рассеяний в направлении брэгговского пика.

Теперь запишем вектор поляризации для неупругого магнитного рассеяния ⁴⁴

$$p_{m1} = 2 \frac{M_x (M_x p_0) + M_y (M_y p_0)}{M_x^2 + M_y^2} - p_0. \quad (10,15)$$

Это же выражение можно переписать в инвариантном виде

$$p_{m1} = 2 \frac{p_{0\perp} - e_{\perp} (p_0 e) + e (em) (Mp_0)}{1 + (em)^2} - p_0, \quad (10,16)$$

где $p_{0\perp}$ и e_{\perp} — составляющие векторов p_0 и e , перпендикулярные к вектору m . Так, например, $p_{\perp} = p - (pm) m$.

Теперь, используя (10, 12), (10, 13) и (10, 15), мы можем представить среднюю поляризацию нейтронов, рассеянных в данном направлении, в виде

$$p = \frac{\alpha \sigma_n(n) p_0 + \sigma_{m0}(n) p_{m0} + \sigma_{m1}(n) p_{m1}}{\sigma_n(n) + \sigma_{m0}(n) + \sigma_{m1}(n)}. \quad (10,17)$$

Здесь $\sigma_n(n)$ — сечение ядерного рассеяния в направлении n , $\sigma_{m0}(n)$ — сечение магнитного рассеяния, при котором число спиновых волн не меняется, и наконец, $\sigma_{m1}(n)$ — сечение рассеяния, при котором полное число спиновых волн меняется на единицу. Очевидно, формула (10, 17) позволяет определить α , $\sigma_{m0}(n)$ и $\sigma_{m1}(n)$, если известны поляризация p и полное сечение рассеяния в данном направлении:

$$\sigma(n) = \sigma_n(n) + \sigma_{m0}(n) + \sigma_{m1}(n).$$

Заметим, что аналогичным образом можно провести рассмотрение эффектов поляризации при рассеянии нейтронов в кристаллах с более сложной магнитной структурой ферри- и антиферромагнетиках, слабых ферромагнетиках с неколлинеарными подрешетками и т. п.

Особенно интересные эффекты, связанные с поляризацией нейтронов, должны возникать в кристаллах с геликоидальной магнитной структурой^{47,48}.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. А х и е з е р, И. Я. П о м е р а н ч у к, Некоторые вопросы теории ядра. М., Гостехиздат, 1950.
2. Дж. Б э к о н, Дифракция нейтронов. М., ИЛ., 1957.
3. Р. П. О з е р о в, УФН 45, 481 (1951); 47, 445 (1952).
4. C. G. S h u l l, E. O. W o l l a n, Solid State Phys. 2, 138 (1956).
5. L. V a n N o v e, Phys. Rev. 95, 249 (1954).
6. L. V a n N o v e, Phys. Rev. 95, 1374 (1954).
7. Y. T o u z a w a, Prog. Theor. Phys. 20, 53 (1958); Ю. А. И з ю м о в, Физ. метал. и металловед. 11, 801 (1961).
8. Л. Л а н д а у, Е. Л и ф ш и ц, Квантовая механика. М., Гостехиздат, 1948.
9. Е. К о н д о н, Г. Ш о р т л и, Теория атомных спектров. М., ИЛ., 1949.
10. O. H a l p e r n, M. H. J o n s o n, Phys. Rev. 55, 898 (1939).
11. G. T. T r a m m e l l, Phys. Rev. 92, 1387 (1953).
12. P. D e b y e, Ann. d. Phys. 43, 49 (1914); J. W a l l e r, Zs. Phys. 17, 398 (1923).
13. М. А. К р и в о г л а з, А. А. С м и р н о в, Теория упорядочивающихся сплавов. М., Гостехиздат, 1958.
14. С. В. М а л е е в, Кандидатская диссертация (Ленинград, 1958).
15. Ю. К а г а н, В. А. М а с л о в, ЖЭТФ 41, 10 (1961); Ю. К а г а н, ЖЭТФ 41, 659 (1961).
16. В. Г. Б а р ь я х т а р, С. В. М а л е е в, ЖЭТФ 39, 1430 (1960).
17. С. В. М а л е е в, ЖЭТФ 33, 1010 (1957).
18. A. S j ö l a n d e r, Ark. fys. 14, 315 (1958).
19. G. P l a z e k, L. V a n N o v e, Phys. Rev. 93, 1207 (1954).
20. В. С. О с к о т с к и й, Физ. тв. тела 2, 701 (1960).
21. Ю. К а г а н, ЖЭТФ 40, 312 (1961).
22. L. V a n N o v e, Phys. Rev. 89, 1189 (1953).
23. Ю. К а г а н, ЖЭТФ 42, 1375 (1962).
24. Т. H o l s t e i n, Н. P r i m a k o f f, Phys. Rev. 58, 1098 (1940).
25. С. В. М а л е е в, ЖЭТФ 34, 1518 (1958).
26. Н. Н. Б о г о л о б о в, С. В. Т я б л и к о в, ДАН СССР, 126, 53 (1959).
27. В. Н. К а щ е е в, М. А. К р и в о г л а з, Физ. тв. тела 3, 1541 (1961).
28. Ю. А. И з ю м о в, Физ. метал. и металловед. 12, 480, (1961).

29. М. А. Кривоглаз, ЖЭТФ 40, 567 (1961), В. Н. Кашеев, М. А. Кривоглаз, Физ. тв. тела 3, 1528 (1961). М. А. Кривоглаз, Физ. тв. тела 3, 2761 (1961).
30. G. Baym, Phys. Rev. 121(3), 741 (1961).
31. R. J. Elliott, R. D. Lowde, Proc. Roy. Soc. 230, 46 (1955).
32. Н. Palevsky, D. J. Hughes, Phys. Rev. 92, 202 (1953); G. L. Squires, Proc. Phys. Soc. Lond. A67, 248 (1954); M. K. Wilkinson, C. G. Shull, Phys. Rev. 103, 516 (1956); R. D. Lowde, Proc. Roy. Soc. A235, 305 (1956); R. D. Lowde, Rev. Mod. Phys. 30, 69 (1958); M. Ericson, B. Jacrot, J. Phys. Chem. Solids 13, 235 (1960).
33. A. W. Macreynolds, T. Riste, Bull. Amer. Phys. Soc. 1, 133 (1956); T. Riste, Congrès de magnetisme, Grenoble, 1958; A. W. Macreynolds, T. Riste, Phys. Rev. 95, 1161 (1954); T. Riste, K. Blinowski, J. Janik, J. Phys. Chem. Solids 9, 153 (1959).
34. М. А. Кривоглаз, ДАН СССР 118, 51 (1958).
35. P. G. de Gennes, J. Villain, J. Phys. Chem. Solids 13, 10 (1960).
36. T. Riste, J. Phys. Chem. Solids 17, 308 (1961).
37. T. Riste, A. Wanic, J. Phys. Chem. Solids 17, 318 (1961).
38. P. G. de Gennes, J. Phys. Chem. Solids 6, № 1, 43 (1958).
39. R. J. Elliott, W. Marshall, Revs. Mod. Phys. 30, 75 (1958).
40. R. Bethel, Ann. der Phys. 40, 295 (1941).
41. R. A. Tahir-Kheli, D. ter Haar, Phys. Rev. 127, 88 (1962).
42. T. Riste et al., J. Phys. Chem. Solids 9, 153 (1959).
43. A. W. Saenz, Phys. Rev. 119, 1542 (1960).
44. Ю. А. Изюмов, С. В. Малеев, ЖЭТФ 41, 1644 (1961).
45. С. В. Малеев, ЖЭТФ 40, 1224 (1961).
46. Г. С. Жданов, Р. П. Озеров, УФН 76, 239 (1962).
47. Ю. А. Изюмов, ЖЭТФ 42, 1673 (1962).
48. С. В. Малеев, В. Г. Барьяхтар, Р. А. Суриц; Физ. тв. тела (в печати).
49. R. Ericksson, не опубликовано, см.⁵⁰.
50. A. Yoshimori, J. Phys. Soc. Japan 14, 807 (1959).
51. W. C. Koehler, Acta Crystallogr. 14, 535 (1961).
52. T. A. Kaplan, Phys. Rev. 116, 1460 (1960).
53. K. Yosida, H. Miwa, J. Appl. Phys. 32S, 8 (1961).
54. B. N. Brockhouse, J. Appl. Phys. Suppl. 33 (1) (1962). Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids, I. A. E. A., Vienna, 1961.
55. B. N. Brockhouse, Phys. Rev. 106, 859 (1957); 111, 1273 (1958).
56. R. D. Lowde, N. Umakantha, Phys. Rev. Letts. 4, 452 (1960).
57. R. N. Sinclair, B. N. Brockhouse, Phys. Rev. 120, 1638 (1960).
58. A. Murasik, K. Ruta-Wala, A. Wanic, Physica 27, 883 (1961).
59. B. N. Brockhouse, H. Watanabe, Конференция по неупругому рассеянию нейтронов в твердых телах и жидкостях, Чок-Ривер, 1962.
60. H. Mori, K. Kawasaki, Prog. Thor. Phys. 27, 529 (1962).
61. Ю. А. Изюмов, Физ. тв. тела 5, 717 (1963).