

## DIFRACCION DE NEUTRONES POR CRISTALES EN VIBRACION

Marcos Moshinsky

Institutos de Fisica y de Geofisica, Universidad de México,

Instituto Nacional de la Investigación Científica.

(Recibido: Abril 10, 1953)

## RESUMEN

*In the present paper, we analyse the effect that the vibration of the crystal lattice has on the diffraction of the neutrons incident upon it. Following the dynamical procedure developed by Von Laue for the corresponding electromagnetic problem, we divide the analysis into two parts. In the first one, we discuss the scattering of neutrons by a vibrating nucleus with the help of a time-dependent generalization of Fermi's equivalent potential. In the second, we discuss the superposition of the scattered waves from all the vibrating nuclei in the lattice, and obtain the differential cross sections for elastic and inelastic scattering by the vibrating crystal. Under certain assump-*

*tions, the scattering of neutrons and of electromagnetic radiation by a vibrating particle, show the resemblance that was predicted intuitively from the phenomenon of diffraction in time.*

## I. INTRODUCCION.

El efecto que la vibración de una malla cristalina produce sobre la difracción de un haz electromagnético o de neutrones, es de considerable interés particularmente por su importancia para el caso de vibraciones térmicas. En el caso electromagnético el efecto de la vibración de la malla ha sido analizado desde dos puntos de vista distintos. En el primero de ellos, que pudiéramos llamar estacionario<sup>1</sup>, la malla cristalina vibrante se representa por un sistema de osciladores, y se considera la interacción elástica e inelástica entre este sistema de osciladores y la onda electromagnética. En el segundo punto de vista, que pudiéramos llamar dinámico<sup>2</sup>, se analiza el efecto que la vibración de un átomo tiene sobre la dispersión de la onda electromagnética que sobre él incide, y posteriormente se considera el efecto combinado de estos átomos en vibración cuando están colocados en una malla cristalina. Los dos puntos de vista llevan a las mismas conclusiones para los efectos que tienen las vibraciones térmicas sobre la difracción producida por el cristal<sup>1,2</sup>.

El punto de vista estacionario desarrollado para la difracción de radiación electromagnética<sup>1</sup>, ha sido generalizado por Weinstock<sup>3,4</sup> al caso de difracción de neutrones por

cristales en vibración térmica.

En el presente trabajo desarrollaremos con ayuda del concepto del potencial equivalente de Fermi<sup>5</sup>, una descripción dinámica de la difracción de neutrones por un cristal en vibración. Supondremos que la vibración es producida por una onda elástica plana de frecuencia  $\omega$  que se propaga por el cristal. Nuestro análisis será válido siempre que la sección de dispersión para neutrones de los núcleos no varíe mucho cuando la energía  $E$  de neutrón aumente (disminuya) por absorción (emisión) de varios fonones de energía  $\hbar\omega$ . Tal cosa sucede para neutrones térmicos<sup>6</sup> que interactúan con las vibraciones térmicas del cristal, o para neutrones de cualquier energía fuera de resonancia si  $\hbar\omega \ll E$ . El segundo caso presenta analogías con el problema electromagnético que indicaremos en este trabajo.

Antes de entrar en detalles sobre la dispersión de un neutrón por un núcleo en vibración, repasaremos brevemente el efecto que produce la vibración de un átomo sobre la dispersión de una onda electromagnética<sup>2</sup>, y veremos como con ayuda del fenómeno de difracción en el tiempo que hemos analizado en un trabajo anterior<sup>7</sup>, es posible intuir las características del efecto de la vibración del núcleo sobre la dispersión de neutrones.

Von Laue<sup>2</sup> entre otros, ha analizado desde el punto de vista de la electrodinámica clásica el efecto de la vibración del átomo sobre la dispersión de la onda electromagnética incidente. Tomemos un átomo situado en el origen de coordenadas que describe una vibración alrededor de su posición de equilibrio dada por  $\bar{a} \cos \omega t$ , donde la frecuencia y amplitud de esa vibración satisfacen las restriccio-

nes<sup>2</sup>:

1) La frecuencia de vibración  $\omega$  es mucho menor que la frecuencia de la onda electromagnética  $\nu$ .

2) La velocidad de movimiento del átomo que es del orden de  $\omega|\bar{a}|$  es pequeña comparada con la velocidad de la luz, esto es  $\omega|\bar{a}|c^{-1} \ll 1$ .

3) La distancia del observador al átomo designada por  $r$  es grande comparada con la amplitud de vibración  $a$  y la longitud de onda  $\lambda = c\nu^{-1}$ .

El potencial vector asociado con la onda electromagnética producida por la presencia del átomo vibrante puede escribirse como<sup>2</sup>:

$$\bar{A} = \bar{A}_0 r^{-1} f \exp [i(kr - \nu t)] \exp ik[\bar{A} \cdot (\bar{s}_0 - \bar{s}) \cos \omega(t - \frac{r}{c})], \quad (1)$$

en donde  $f$  es el factor de estructura atómico,  $k$  el número de onda  $k = \nu c^{-1}$ ,  $\bar{s} = (\bar{r}/r)$  es la dirección del dispersor en el origen al punto de observación y  $\bar{s}_0 = (\bar{k}/k)$  es la dirección de propagación de la onda incidente.

La dispersión producida por un átomo en reposo en el origen de coordenadas está dada por (1) cuando se hace  $\bar{a}=0$ . De aquí que el efecto de la vibración del átomo sea el de multiplicar el potencial vector para el átomo en reposo por el factor:

$$\exp ik [\bar{a} \cdot (\bar{s}_0 - \bar{s}) \cos \omega(t - \frac{r}{c})] \quad . \quad (2)$$

Nos preguntamos ahora que características tendría la onda dispersa si en lugar de tener una onda electromagnéti-

ca incidente tuviéramos un haz de neutrones. El movimiento periódico de una partícula frente a la onda incidente tiene cierta analogía con el problema unidimensional de abrir y cerrar un obturador al paso de la onda incidente con el mismo período  $T = 2\pi\omega^{-1}$  del movimiento de la partícula. En el caso de ondas electromagnéticas la onda incidente satisface la ecuación de onda ordinaria, mientras que en el caso de neutrones, la onda incidente satisface la ecuación de Schrödinger. Como se mostró en un trabajo anterior<sup>7</sup>, la distribución de intensidades en la onda transmitida como función de su distancia al obturador, tiene que ver con el tipo de ecuación de onda. En el caso electromagnético, la intensidad varía discontinuamente de 0 a un valor igual al de la onda incidente en una distancia  $cT = 2\pi c\omega^{-1}$  como se ilustra en la Fig. No. 1. En el caso de neutrones, la corriente no varía en forma discontinua de 0 a su valor estacionario, sino que presenta un efecto de difracción como se ilustra en la Fig. No. 2. Sin embargo, si la anchura  $\tau$  del efecto de difracción en el tiempo<sup>7</sup>, es pequeña comparada con el tiempo  $T$  que permanece abierto el obturador, se puede suponer que los pulsos de corriente tienen una anchura  $\tau = 2\pi v\omega^{-1}$ . En tal caso, el efecto del obturador sobre la amplitud de la onda transmitida es muy similar en el caso electromagnético y en el caso de neutrones, ya que la diferencia reside solo en que en el primero aparece la velocidad de la luz, y en el segundo la velocidad del neutrón. Este resultado sugiere que si las tres condiciones anteriores impuestas a la partícula en vibración se reformulan apropiadamente para cuando incide un haz de neutrones, y si además se cumple la condición  $\tau \ll T$ , entonces

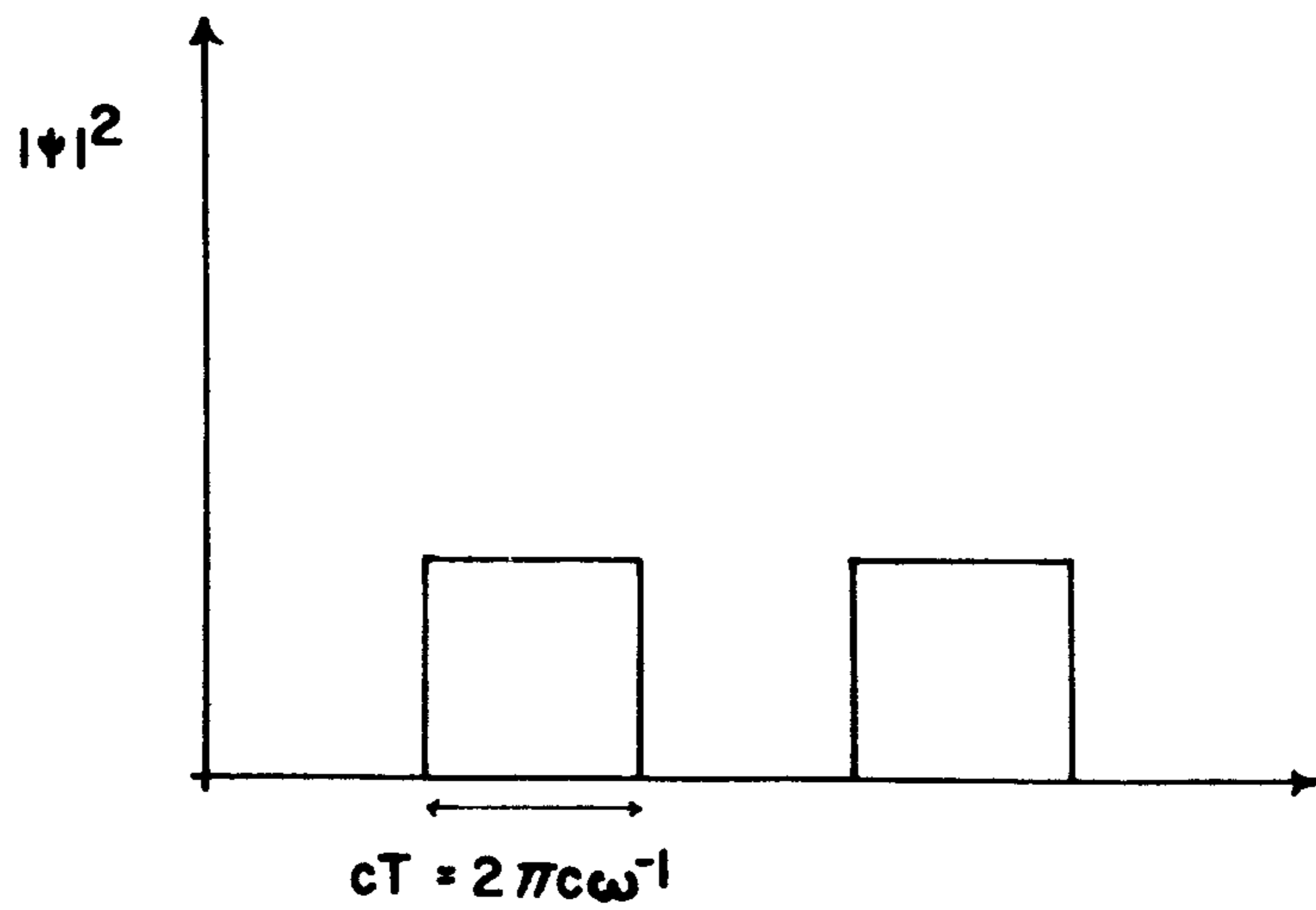


FIG. 1

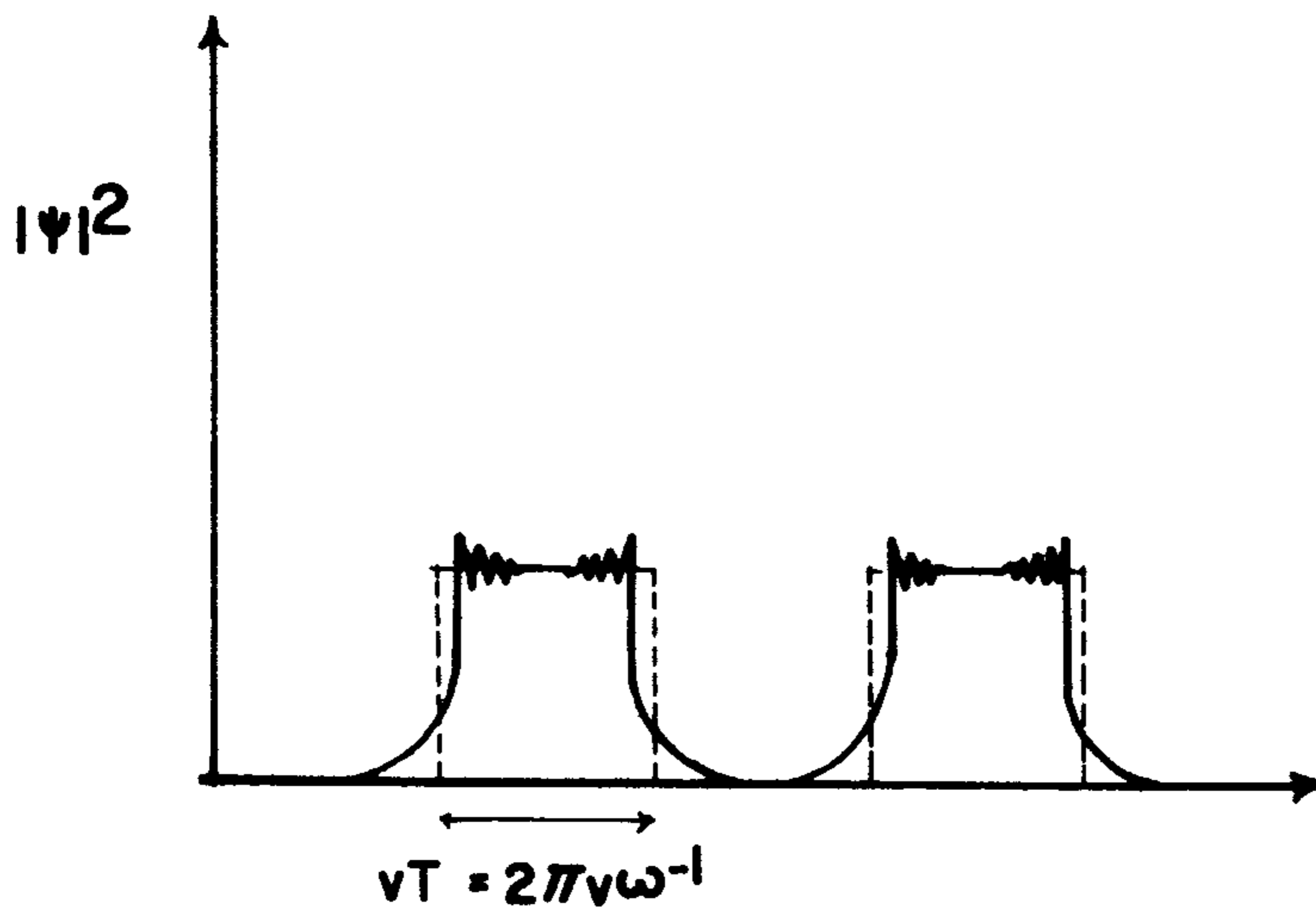


FIG. 2

el efecto de la vibración del núcleo sobre la dispersión de neutrones estaría dado por un factor de la forma (2) en la que solo se reemplaza la velocidad  $c$  de la luz por la velocidad  $v$  del neutrón.

En la siguiente sección, en la que analizaremos la dispersión de neutrones por un núcleo de vibración con ayuda del potencial de Fermi, veremos que nuestra suposición es correcta.

## II. DISPERSION DE NEUTRONES POR UN NUCLEO EN VIBRACION.

Es bien sabido que para analizar el proceso de difracción de neutrones por cristales, Fermi<sup>5</sup> ha propuesto substituir la compleja interacción entre el neutrón y el núcleo por un potencial equivalente dado por una función  $\delta$ . Si suponemos por simplicidad que la masa  $m$  del neutrón es pequeña comparada con la del núcleo, y designamos por  $E = (\hbar^2 k^2 / 2m)$  la energía del neutrón, y por  $\sigma$  la sección de dispersión del neutrón a esa energía\*, tenemos que la función de onda del neutrón satisface:

$$[\nabla^2 + k^2 - (4\pi\sigma)^{\frac{1}{2}} \delta(\bar{r})] \psi = 0 \quad (3)$$

La ecuación (3) no es correcta en su interpretación literal ya que es fácil ver que implica la condición a la frontera<sup>6</sup>  $(r\psi)_{r=0} = -(\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}} (\psi)_{r=0}$ , que no puede satisfacerse para ninguna solución de (3). Sin embargo, esta dificultad se

\*En el presente trabajo supondremos que la interacción entre neutrón y núcleo da lugar a una dispersión pura sin que haya absorción, y haremos caso omiso del spin de las partículas. En lugar de longitud de dispersión "a", emplearemos  $(\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}}$ , lo que implica que  $a > 0$ .

evita interpretando a (3) como válida solo en la aproximación de Born<sup>8,9</sup>, en donde  $\psi$  se expresa como  $\psi = \exp i\bar{k}\cdot\bar{r} + \psi_s$  y la  $\psi_s$  satisface la ecuación inhomogénea:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_s - (4\pi\sigma)^{\frac{1}{2}} \delta(\bar{r}) \exp(i\bar{k}\cdot\bar{r}) = 0. \quad (4a)$$

De (4a) vemos de inmediato<sup>9</sup> que:

$$\psi_s = - (\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}} r^{-1} \exp(ikr), \quad (4b)$$

y que como era de esperarse, la sección para la dispersión es  $\sigma$ .

Nós preguntamos ahora como es posible modificar este formalismo para tomar en consideración la vibración del núcleo. Supongamos que la vibración alrededor de la posición de equilibrio está dada por el vector  $\bar{a} \cos \omega t$ . Se sugiere entonces de inmediato reemplazar el potencial equivalente  $\delta(\bar{r})$  de (3) por  $\delta(\bar{r}-\bar{a} \cos \omega t)$ . Como el potencial depende ahora del tiempo, no podemos seguir considerando el problema como estático, y debemos introducir en (3) el operador  $(2im\hbar^{-2}) \partial/\partial t$  que se reduce a  $k^2$  en el caso estático. De nuevo debemos interpretar la ecuación dentro de la aproximación de Born, y poniendo:

$$\psi = [\exp i(\bar{k}\cdot\bar{r}) + \psi_s(\bar{r}, t)] \exp [-i(\hbar k^2/2m)t], \quad (5)$$

obtenemos para la onda dispersa  $\psi_s$  la ecuación:

$$\left[ \nabla^2 + k^2 + \frac{2mi}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial t} \right] \psi_s - (4\pi\sigma)^{\frac{1}{2}} \delta(\bar{r}-\bar{a} \cos \omega t) \exp i(\bar{k}\cdot\bar{r}) = 0. \quad (6)$$



Nos interesa ahora la solución estacionaria de (6). Como el potencial  $\delta(\bar{r}-\bar{a} \cos \omega t)$  es periódico con período  $T = 2\pi\omega^{-1}$ , vemos que la  $\psi_s$  estacionaria también debe tener el mismo período y por lo tanto, admite un desarrollo en serie de Fourier de la forma:

$$\psi_s(\bar{r}, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_{ns}(\bar{r}) \exp(-in\omega t) \quad (7)$$

Introduciendo (7) en (6) y usando las propiedades de ortogonalidad de las  $\exp(-in\omega t)$ , obtenemos:

$$[\nabla^2 + k_n^2] \psi_{ns} = (4\pi\sigma)^{\frac{1}{2}} (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \left[ \delta(\bar{r}-\bar{a} \cos\phi) \times \right. \\ \left. \times \exp i(\bar{k} \cdot \bar{r} + n\phi) \right] d\phi \quad , \quad (8a)$$

$$\text{donde:} \quad k_n^2 = k^2 + 2m\hbar^{-1}n\omega \quad \text{y} \quad \phi = \omega t \quad . \quad (8b)$$

La expresión (8a) tiene una interpretación física bien definida, ya que nos da la función de onda  $\psi_{ns}$  asociada con la absorción o emisión (según  $n$  sea positivo o negativo) por el neutrón de  $n$  cuanta (fonones) del oscilador. La expresión (8) es ciertamente válida si  $\sigma(E+n\hbar\omega)$  no difiere apreciablemente de  $\sigma(E)$ , cosa que ocurre si  $\hbar\omega \ll E$  y nos hallamos fuera de una resonancia. Puede darse el caso que aun cuando  $\hbar\omega$  sea del orden de  $E$ , la sección de dispersión varíe poco en esa región de energías (por ejemplo como sucede para neutrones térmicos y epitérmicos<sup>6</sup>) y entonces (8a) continúa siendo válida para este caso.

Procedemos ahora a la solución de (8). Como el punto de observación está a una distancia  $r$  mucho mayor que las longitudes de onda  $\lambda_n = 2\pi k_n^{-1}$ , podemos escribir  $\psi_{ns}$  bajo la forma<sup>9</sup>:

$$\psi_{ns} = -(4\pi r)^{-1} \exp(ik_n r) \iiint \exp(-ik_n \bar{s} \cdot \bar{r}') f_n(\bar{r}') d\bar{r}', \quad (9)$$

donde  $\bar{s} = (\bar{r}/r)$  y\*:

$$f_n(\bar{r}') = -(4\pi\sigma)^{\frac{1}{2}} (2\pi)^{-1} \int_0^{2\pi} \delta(\bar{r}' - \bar{a} \cos\phi) \times \\ \times \exp i(\bar{k} \cdot \bar{r}' + n\phi) d\phi. \quad (10)$$

Introduciendo (10) en (9) y cambiando el orden de las integraciones obtenemos:

$$\psi_{ns} = -(\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}} r^{-1} \exp(ik_n r) (2\pi)^{-1} \times \\ \times \int_0^{2\pi} \exp i[(k \bar{s}_0 - k_n \bar{s}) \cdot \bar{a} \cos\phi] \exp(in\phi) d\phi, \quad (11)$$

donde  $\bar{s}_0 = (\bar{k}/k)$ . Finalmente, la integral en (11) corresponde a una función de Bessel<sup>10</sup> y  $\psi_{ns}$  toma la forma:

$$\psi_{ns} = -(\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}} r^{-1} \exp(ik_n r) i^n J_n[(k\bar{s}_0 - k_n\bar{s}) \cdot \bar{a}]. \quad (12)$$

---

\*Si se quiere dar un significado preciso a  $f_n(\bar{r}')$  habría que reemplazar la función  $\delta$  por alguna de las expresiones analíticas que tienden a ella para el valor límite de un parámetro, hacer la integración (10) con esta función analítica y luego tomar el límite de la integral.

Substituyendo (12) en (7) tenemos la forma explícita para la onda dispersa  $\psi_s$  que, como indicábamos en un párrafo anterior, es válida mientras  $\sigma(E + n\hbar\omega)$  no difiera mucho de  $\sigma(E)$ .

Vamos ahora a introducir las tres restricciones consideradas en el caso electromagnético, más la restricción referente al fenómeno de difracción en el tiempo, y con ayuda de ellas veremos que  $\psi_s$  tiene características análogas al caso electromagnético, tal como habíamos supuesto en la introducción.

Supondremos ahora que:

- 1) La energía del neutrón es grande comparada con la energía del oscilador, esto es  $\hbar\omega \ll E$ .
- 2) La velocidad de movimiento del núcleo que es del orden  $\omega|\bar{a}|$  es pequeña comparada con la velocidad del neutrón  $v = (2E/m)^{\frac{1}{2}}$ , esto es  $v^{-1}\omega|a| \ll 1$ .
- 3) La distancia del observador al núcleo  $r \gg \lambda, a$ , donde  $\lambda = (2\pi k^{-1})$
- 4) La anchura del efecto difracción en el tiempo<sup>7</sup>  $\tau$  es mucho menor que el período  $T = (2\pi\omega^{-1})$  de vibración del núcleo. En la referencia 6 vimos que  $\tau \approx (\hbar r/mv^3)^{\frac{1}{2}}$  y por tanto esta condición implica\*:  $\omega(\hbar r/mv^3)^{\frac{1}{2}} \ll 1$ .

De (8b) tenemos que:

$$k_n = k(1 + n\hbar\omega E^{-1})^{\frac{1}{2}} = k \left[ 1 + \frac{1}{2} \frac{n\hbar\omega}{E} - \frac{1}{8} \left( \frac{n\hbar\omega}{E} \right)^2 + \dots \right] \quad (13)$$

El argumento de la función de Bessel en (12) puede entonces expresarse como:

---

\*Para neutrones térmicos y distancias  $r$  del orden de  $1\text{ m}$ ,  $\tau$  es del orden de  $10^{-8}$  seg. La condición 4) se cumple en este caso si  $\omega \ll 10^8$  cic/seg.

$$(k \bar{s}_0 - k_n \bar{s}) \cdot \bar{a} = k (\bar{s}_0 - \bar{s}) \cdot \bar{a} - \frac{1}{2} (\bar{s} \cdot \bar{a}) k n \hbar \omega E^{-1} + \dots \quad (14)$$

Al ser  $(\hbar k/2E) = v^{-1}$ , tenemos que el segundo término en (14) toma la forma  $n(\bar{s} \cdot \bar{a}) \omega v^{-1}$  que por 2) es muy pequeña para los primeros valores de  $n$  que son los que importan en la serie (7). El argumento de la función de Bessel se reduce entonces al primer término de (14).

Consideremos ahora el argumento en la exponencial de (12) y por (13) tenemos que:

$$k_n r = kr + n\omega r v^{-1} - \frac{1}{4} (n\omega r v^{-1}) (n \hbar \omega E^{-1}) + \dots \quad (15a)$$

El último término en (15a) puede escribirse como:

$$\frac{1}{4} n^2 [\omega (\hbar r/mv^3)^{\frac{1}{2}}]^2, \quad (15b)$$

y por 4) vemos que es un término muy pequeño. El argumento de la exponencial se reduce entonces a los dos primeros términos de (15a) y de (7) vemos que  $\psi_s$  toma la forma:

$$\psi_s(\bar{r}, t) = -(\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}} r^{-1} \exp(ikr) \times \\ \times \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n [k(\bar{s}_0 - \bar{s}) \cdot \bar{a}] \exp in\omega \left( \frac{r}{v} - t \right). \quad (16)$$

Comparando (16) con (4b) vemos que el factor correctivo debido al efecto de la vibración está dado por la suma infinita que aparece en (16). De las propiedades de las funciones de Bessel<sup>10</sup> se sabe que esta suma representa a la función:

$$\exp ik [(\bar{s}_0 - \bar{s}) \cdot \bar{a} \cos \omega(t - \frac{r}{v})] , \quad (17)$$

y tal como lo habíamos previsto en la introducción, el factor correctivo para neutrones que satisfacen las restricciones mencionadas arriba, es el mismo que para el caso electromagnético, solo reemplazando  $c$  por  $v$  como puede verse de (2) y (17).

Habiendo analizado el efecto que sobre la dispersión de neutrones tiene la vibración del núcleo, podemos ahora atacar el problema de la difracción de neutrones por un cristal en vibración. Basaremos nuestro análisis sobre la función de onda dispersa  $\psi_n$  dada por (7) y (12), aunque indicaremos las simplificaciones que hay en el fenómeno cuando se cumplen las cuatro condiciones que mencionamos anteriormente. Antes de entrar en materia obtendremos la  $\psi_n$  cuando el núcleo, en lugar de estar en el origen esta en punto  $\bar{r}_p$ , y cuando además hay un defasamiento en la vibración, esto es, cuando el potencial equivalente toma la forma  $\delta[\bar{r} - \bar{r}_p - \bar{a} \cos(\omega t - \varphi)]$ . Del análisis dado en esta sección, es fácil ver que la modificación del potencial puede ser tomada en cuenta reemplazando en  $\psi_n$ ,  $r$  por  $|\bar{r} - \bar{r}_p|$ ,  $\omega t$  por  $\omega t - \varphi$  e introduciendo un factor  $\exp(i\bar{k} \cdot \bar{r}_p)$ . Suponiendo ahora que  $r_p \ll r$ , se tiene  $|\bar{r} - \bar{r}_p| \approx r - \bar{s} \cdot \bar{r}_p$ , y podemos finalmente expresar  $\psi_n$  bajo la forma:

$$\psi_n \approx - (\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}} r^{-1} \exp(i\bar{k} \cdot \bar{r}_p) \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n [(k\bar{s}_0 - k_n\bar{s}) \cdot \bar{a}] \times \\ \times \exp i[k_n r - k_n \bar{s} \cdot \bar{r}_p - n(\omega t - \varphi)] \quad (18)$$

### III. DIFRACCION DE NEUTRONES POR UN CRISTAL EN VIBRACION.

Consideremos un cristal cuya malla esta definida por los tres vectores elementales  $\bar{\alpha}_1$ . Los nucleos de los átomos que forman el cristal ocuparán las posiciones:

$$\bar{r}_p = p_1 \bar{\alpha}_1 + p_2 \bar{\alpha}_2 + p_3 \bar{\alpha}_3 , \quad (19)$$

donde  $p_1, p_2, p_3$  son numeros enteros que se indican por el indice único  $p$  en  $\bar{r}_p$ . Suponemos ahora que en el cristal se propaga una onda elástica plana dada por:

$$\bar{a} \cos (\omega t - \bar{\kappa} \cdot \bar{r}) , \quad (20)$$

donde  $\bar{a}$  es el vector de amplitud,  $\omega$  la frecuencia y  $\bar{\kappa}$  el vector de propagación. Si el movimiento de los núcleos se debiera exclusivamente a esta onda elástica, la posición del núcleo en un instante dado sería:

$$\bar{r}_p + \bar{a} \cos (\omega t - \bar{\kappa} \cdot \bar{r}_p) . \quad (21)$$

Si sobre el cristal se hace incidir un haz de neutrones de momento  $\hbar k$ , entonces la amplitud de la onda dispersa por cada uno de los núcleos estaría dada por (18), en la que  $\varphi$  se reemplaza por  $\bar{\kappa} \cdot \bar{r}_p$ . La amplitud de la onda dispersa por el cristal sería la suma de las amplitudes para cada uno de los núcleos, y designando esa amplitud por  $\Psi$  tenemos despues de intercambiar el orden de las sumas que:

$$\Psi = \sum_p \psi_{sp} = (\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}} r^{-1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[ i^n J_n [(k\bar{s}_0 - k_n\bar{s}) \cdot \bar{a}] \exp i(k_n r - n\omega t) \times \right. \\ \left. \times \left\{ \sum_p \exp [i(k\bar{s}_0 - k_n\bar{s} + n\bar{\kappa}) \cdot \bar{r}_p] \right\} \right] , \quad (22)$$

en donde la  $\sum_p$  representa la suma sobre todos los núcleos del cristal caracterizados por los tripletes  $p_1, p_2, p_3$ .

Definimos ahora la sección diferencial  $d\Sigma$  para la dispersión por el cristal como la razón del flujo disperso en el ángulo sólido  $d\Omega$  al flujo incidente por  $\text{cm}^2$ , promediando sobre un período de vibración. Como el flujo incidente es para la onda plana igual a  $v = (\hbar k/m)$ , obtenemos de esta definición que:

$$d\Sigma = \frac{1}{2ik} \left[ \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \left( r\Psi^* \frac{\partial r\Psi}{\partial r} - r\Psi \frac{\partial r\Psi^*}{\partial r} \right) dt \right] d\Omega \quad (23)$$

Debido a la ortogonalidad de las  $\exp(-in\omega t)$  al ser promediadas sobre un período, vemos que solo nos queda en (23) los terminos diagonales independientes del tiempo asociados con cada valor de  $n$ , y  $d\Sigma$  toma la forma:

$$d\Sigma = \sum_{n=-\infty}^{\infty} d\Sigma_n \quad (24)$$

donde

$$\frac{d\Sigma_n}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} \frac{k_n}{k} \{J_n [(k\bar{s}_0 - k_n\bar{s}) \cdot \bar{a}]\}^2 \times \\ \times \left| \sum_p \exp [i(k\bar{s}_0 - k_n\bar{s} + n\bar{\kappa}) \cdot \bar{r}_p] \right|^2 \quad (25)$$

Como es bien sabido<sup>4, 11</sup>, el valor absoluto al cuadrado de la suma que aparece en (25) puede evaluarse con ayuda de funciones  $\delta$  asociadas con la malla recíproca. Designando por  $V$  al volumen irradiado del cristal, por  $\bar{\beta}_1$  a los vectores elementales de la malla recíproca que satisfacen

$\bar{\alpha}_i \cdot \bar{\beta}_j = \delta_{ij}$ , y por  $\bar{B}_p$  al vector de la malla recíproca:

$$B_p = p_1 \bar{\beta}_1 + p_2 \bar{\beta}_2 + p_3 \bar{\beta}_3 \quad , \quad (26)$$

caracterizado por el triplete  $p_1, p_2, p_3$ , tenemos que (25) toma la forma:

$$\frac{d\Sigma_n}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} \frac{k_n}{k} \{J_n [(k\bar{s}_0 - k_n\bar{s}) \cdot \bar{a}]\}^2 (2\pi)^3 \times \\ \times V \sum_p \delta(k\bar{s}_0 - k_n\bar{s} + n\bar{\kappa} - 2\pi \bar{B}_p) \quad . \quad (27)$$

En (27) tenemos la sección diferencial para dispersión de neutrones por un cristal en vibración, cuando en la colisión el neutrón absorbe o emite (según  $n$  sea positivo o negativo)  $n$  cuanta (fonones) de energía  $\hbar\omega$ .

La fórmula (27) nos da el resultado usual si es que la amplitud de vibración en el cristal se hace 0, esto es si  $\bar{a} = 0$ . En ese caso, como  $J_n(0) = 0$  si  $n \neq 0$ , vemos que  $d\Sigma_n = 0$  para  $n \neq 0$ , y:

$$\frac{d\Sigma_0}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} (2\pi)^3 V \sum_p \delta [k (\bar{s}_0 - \bar{s}) - 2\pi B_p] \quad . \quad (28)$$

El efecto de la vibración es el de disminuir la intensidad de la dispersión elástica en las direcciones de Bragg-Laue por un factor  $|J_0 [k (\bar{s}_0 - \bar{s}) \cdot \bar{a}]|^2$ , mientras que aparecen neutrones debidos a dispersiones inelásticas con intercambio de  $n$  fonones en las direcciones definidas por la ecuación:

$$k\bar{s}_0 - k_n\bar{s} + n\bar{\kappa} = 2\pi \bar{B}_p \quad . \quad (29)$$



En el caso de que se cumplan las condiciones especificadas en la sección anterior, es solo necesario reemplazar  $k_n$  por  $k$  en (27) para obtener la correspondiente sección diferencial. Si la longitud de onda  $\Lambda = 2\pi \kappa^{-1}$  de la onda elástica es grande comparada con las dimensiones de la celda unitaria del cristal y con la longitud de onda  $\lambda = 2\pi k^{-1}$ , vemos de (29) que en este caso los neutrones dispersados inelásticamente aparecen en direcciones cercanas a las Bragg-Laue, y el efecto neto de la vibración es el de hacer más difusa la dispersión producida por el cristal.

La presente descripción dinámica de la dispersión de neutrones producida por un cristal en vibración, sugiere la posibilidad de hacer desde un punto de vista dinámico, el análisis del efecto de las vibraciones térmicas sobre la interacción de los neutrones con los cristales. Por otro lado, también tiene interés investigar la posibilidad de reemplazar el potencial equivalente de Fermi, por un análisis más correcto que permitiera discutir la difracción de neutrones en las cercanías de una resonancia<sup>12</sup>. Ambos problemas serán discutidos en publicaciones posteriores.

#### RÉFERENCIAS

- 1.- M. Born, Reports on progress of physics 9, 294, (1943).  
M. Born y K. Sarginson, Proc. Roy. Soc. A 179, 69, (1941).
- 2.- M. von Laue, Röntgenstrahl-Interferenzen. (Edward Broth. Ann Arbor Mich. 1943) Sección # 9 pp. 57-65 ;  
Sección # 21 pp. 189-194.
- 3.- R. Weinstock, Phys. Rev. 65, 1, (1944).

- 4.- J.M. Cassels, The scattering of neutrons by crystals.  
(Progress in nuclear physics, Vol. I, Butterworth-Springer, London 1950) pp. 185-208.
- 5.- E. Fermi, Ric. Sci. 1, 13, (1936).
- 6.- E. Fermi, Nuclear physics (University of Chicago Press, Revised edition, 1950) p. 144.
- 7.- M. Moshinsky, Phys. Rev. 88, 625, (1952).
- 8.- G. Breit, Phys. Rev. 71, 215, (1947).
- 9.- N.F. Mott y H.S.W. Massey, The theory of atomic collisions. (Oxford, Clarendon Press, 2nd.edition 1949).  
Cap. VI p. 114.
- 10.- E.T. Whittaker y G.N. Watson. Modern analysis (American edition 1943) p. 362, 101.
- 11.- W.H. Zachariasen, Theory of X-ray diffraction in crystals. (Wiley, 1945) pp. 99-111.
- 12.- M.L. Goldberger y F. Seitz. Phys. Rev. 71, 282, (1947).