

VIBRACIONES TERMICAS DE LOS CRISTALES Y LA
DIFRACCION DE NEUTRONES

Marcos Moshinsky

Institutos de Física y de Geofísica, Universidad de México e
Instituto Nacional de la Investigación Científica
(Recibido: Enero 11, 1954)

RESUMEN

In a previous paper we discussed the problem of the diffraction of neutrons by a crystal lattice, when the lattice vibrated around its position of equilibrium with a definite frequency. In the present paper, we extend the analysis to the case of thermal vibrations of the lattice. The method used could be called semi-classical, because on one hand, the state of the neutron is described by a wave function satisfying a Schrödinger equation, and on the other, the vibrations

of the crystal lattice are described from a classical standpoint. The interaction between neutron and vibrating nucleus is given in terms of a δ function, that depends on the instantaneous position of the nucleus, and therefore, on the time. The time dependent Schrödinger equation is solved by means of a Laplace transform, and the elastic and inelastic differential scattering crosssections are obtained. These crosssections are compared with the ones obtained by Weinstock, for the scattering of neutrons by crystals in thermal vibration.

I.- INTRODUCCION.

En un trabajo anterior, (que designaremos en lo sucesivo por I) el autor analizó el problema de la difracción de neutrones por una malla cristalina, cuando esta malla efectuaba vibraciones alrededor de su posición de equilibrio con una frecuencia definida. El método de análisis empleado para este problema puede considerarse como semi-clásico, ya que, si bien la ecuación de Schrödinger describía el comportamiento de los neutrones, en cambio la vibración de la malla se consideraba desde un punto de vista clásico. En efecto, la interacción entre el neutrón y los núcleos vibrantes de la malla se representaba por medio de un potencial apropiado que dependía de la posición del núcleo, la cual variaba con el tiempo debido a las vibraciones de la malla cristalina.

En el presente trabajo se tratará de generalizar el análisis semi-clásico desarrollado en I, al caso de vibraciones térmicas de los cristales. Como es bien sabido^{2,3}, las vibraciones térmicas pueden considerarse como debidas a superposiciones de ondas elásticas de diferentes frecuencias, en donde el es-

pectro de frecuencias depende del modelo particular que se utilice para representar el cristal. En este trabajo utilizaremos el modelo de Debye^{2,3} para determinar el espectro de frecuencias de las ondas elásticas, y consideraremos que los núcleos describen vibraciones alrededor de sus posiciones de equilibrio dadas por la superposición de las ondas elásticas del cristal. La interacción entre el neutrón y el núcleo estará de nuevo representada por una función δ que depende de la posición instantánea del núcleo, y por lo tanto del tiempo.

Nuestro análisis estará dividido en tres partes: En la primera, haremos un breve resumen de la descripción que la mecánica estadística da de las vibraciones térmicas del cristal. Nuestro principal objetivo en esta parte será el determinar la vibración de los núcleos y el valor medio de su desplazamiento cuando el cristal se encuentra a una temperatura determinada. En la segunda parte, consideraremos la interacción entre el neutrón y uno de los núcleos vibrantes de la malla. Como ahora el núcleo no vibrará con una sola frecuencia como en I, sino con una superposición de frecuencias, que en general, no tienen relaciones racionales entre sí, se tiene que el método de series de Fourier de I no será aplicable al presente problema. Sin embargo, con ayuda de una transformada de Laplace, podremos resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y encontrar la onda dispersa. En la tercera parte, procederemos a tomar en cuenta la superposición de las ondas dispersas de los diferentes núcleos vibrantes de la malla, y a obtener la sección diferencial de dispersión elástica e inelástica de neutrones por la malla, y encontrar su dependencia de la temperatura. Finalmente, compararemos

la sección diferencial obtenida por este método semi-clásico, con la sección diferencial para dispersión de neutrones por cristales discutida por Weinstock, en la cual la malla cristalina se representa por un conjunto de osciladores armónicos cuánticos.

II.- VIBRACIONES TERMICAS DE LOS CRISTALES.

Consideremos por simplicidad un cristal perfecto de un solo elemento, formando una malla primitiva caracterizada por los tres vectores elementales $\bar{\alpha}_i$, $i = 1, 2, 3$. Los núcleos de los átomos ocuparán las posiciones:

$$\bar{r}_p = p_1 \alpha_1 + p_2 \alpha_2 + p_3 \alpha_3 \quad (1)$$

donde p_1, p_2, p_3 son números enteros que se indican por el índice único p en \bar{r}_p . Supondremos que el cristal tiene la misma forma que la celda elemental, esto es, que consta del mismo número $N^{1/3}$ de celdas elementales a lo largo de cada una de las direcciones $\bar{\alpha}_i$. El número de celdas elementales, y por tanto también de núcleos en el cristal, es N . Los vectores elementales de la celda recíproca $\bar{\beta}_i$ satisfacen la relación $\bar{\alpha}_i \cdot \bar{\beta}_j = \delta_{ij}$ lo cual, como es bien sabido⁴, los determina completamente. Cualquier vector de la malla recíproca es combinación lineal de la $\bar{\beta}_i$ con coeficientes enteros.

Dentro de la aproximación de Debye^{2,3}, el espectro de frecuencias para las vibraciones térmicas de la malla, está dado por las frecuencias características de vibración inferiores a una cierta frecuencia, de un medio elástico isotrópico de dimensiones iguales a las del cristal. Estas frecuencias caracte-

rísticas dependen de las condiciones a la frontera que se impongan sobre la superficie del medio elástico. Por simplicidad, se impondrá como condición a la frontera la de periodicidad, esto es, que el desplazamiento en una cara del cristal y en la cara opuesta correspondiente sea el mismo.

El desplazamiento en el medio elástico debido a una onda plana puede representarse bajo la forma:

$$a \bar{u} \exp[2\pi i(\bar{\tau} \cdot \bar{r} - \nu t + \varphi)] \quad (2)$$

donde $\bar{\tau}$ es el vector de propagación, ν es la frecuencia, φ la fase, \bar{u} un vector unitario que da la dirección del desplazamiento, y a es la amplitud del mismo. El vector de posición \bar{r} puede expresarse con ayuda de los vectores elementales $\bar{\alpha}_1$, bajo la forma:

$$\bar{r} = x_1 \bar{\alpha}_1 + x_2 \bar{\alpha}_2 + x_3 \bar{\alpha}_3 \quad (3)$$

y en tal caso la condición de periodicidad establece que:

$$\{\exp[2\pi i(\bar{\tau} \cdot \bar{r})]\}_{x_1=0} = \{\exp[2\pi i(\bar{\tau} \cdot \bar{r})]\}_{x_1=N^{1/3}} \quad (4)$$

y condiciones similares para x_2 y x_3 . De aquí se concluye que $\bar{\tau}$ toma la forma:

$$\bar{\tau}_q = N^{-1/3} [q_1 \bar{\beta}_1 + q_2 \bar{\beta}_2 + q_3 \bar{\beta}_3] \quad (5)$$

donde q_1, q_2, q_3 son números enteros que se indican por el índice único q en $\bar{\tau}_q$.

De las ecuaciones de la elasticidad⁵ sabemos que $\nu^2 = c_1^2 \bar{\tau}^2$ para ondas longitudinales en que \bar{u} es paralelo a $\bar{\tau}$, y $\nu^2 = c_t^2 \bar{\tau}^2$ para ondas transversales donde $(\bar{u} \cdot \bar{\tau}) = 0$. Las velocidades de las ondas elásticas longitudinales y transversales se indican respectivamente por c_1 y c_t . Es bien conocido que las frecuencias permisibles de las ondas elásticas que contribuyen a la vibración de malla, no pueden exceder una frecuencia límite ν_m dada por $\nu_m = h^{-1} k_0 \theta$, donde θ es la temperatura de Debye^{2,3} y k_0 la constante de Boltzmann, (que se designa por k_0 en lugar de k para que no se confunda con el número de onda que aparecerá posteriormente). Se sabe también que el número de ondas elásticas $g(\nu) d\nu$ cuya frecuencia esta entre ν y $\nu + d\nu$ es:

$$g(\nu) d\nu = 3N \frac{3\nu^2}{\nu_m^3} d\nu \quad (6)$$

donde $3N$ es el número de grados de libertad de la malla, ya que hay N núcleos en la misma.

La vibración de la malla puede representarse como una superposición de $3N$ ondas planas de la forma (2), en las que $\bar{\tau}$ esta dada por (5) y $|\bar{\tau}| < (\nu_m/c)$, donde c es un promedio apropiado² de las velocidades de las ondas elásticas que se propagan a lo largo de diferentes direcciones en el cristal.

Con el objeto de simplificar la notación, reemplazaremos los tres índices q_1, q_2, q_3 que caracterizan a $\bar{\tau}$ en (5) por un solo índice $\lambda = 1, 2, \dots, 3N$, en forma que λ crezca con $|\bar{\tau}|$, teniendo además alguna regla arbitraria para enumerar los vectores de la misma longitud. El desplazamiento de algun punto del interior del cristal debido a las vibraciones térmicas, puede representarse entonces por:

$$\sum_{\lambda=1}^{3N} a_{\lambda} \bar{u}_{\lambda} \exp[2\pi i (\bar{\tau}_{\lambda} \cdot \bar{r} - \nu_{\lambda} t + \varphi_{\lambda})] \quad , \quad (7)$$

donde los \bar{u}_{λ} son vectores unitarios en algunos casos paralelos a $\bar{\tau}_{\lambda}$, y entonces $\nu_{\lambda} = c_l |\bar{\tau}_{\lambda}|$, y en otros, perpendiculares a $\bar{\tau}_{\lambda}$ y en esos casos $\nu_{\lambda} = c_t |\bar{\tau}_{\lambda}|$. En (7) a_{λ} , φ_{λ} son respectivamente la amplitud y la fase asociadas con cada onda elástica.

Tanto la parte real como la imaginaria de (7) satisfacen las condiciones de periodicidad (4) y las ecuaciones de la elasticidad, y podemos tomar alguna de ellas para representar el vector de desplazamiento. Como a_{λ} , φ_{λ} son reales, se tiene que la parte real de (7) nos da un vector $\bar{\rho}$ de desplazamiento para puntos del interior del cristal de la forma:

$$\bar{\rho} = \sum_{\lambda=1}^{3N} a_{\lambda} \bar{u}_{\lambda} \cos[2\pi (\bar{\tau}_{\lambda} \cdot \bar{r} - \nu_{\lambda} t + \varphi_{\lambda})] \quad . \quad (8)$$

La vibración de alguno de los nucleos de la malla estará dada por (8), cuando \bar{r} se reemplaza por la \bar{r}_p de (1) y la designaremos por $\bar{\rho}_p$. La vibración del núcleo debida a la onda elástica λ estará dada por el término correspondiente de la suma en (8), y la designaremos por $\bar{\rho}_{\lambda p}$, que tiene la forma:

$$\bar{\rho}_{\lambda p} = a_{\lambda} \bar{u}_{\lambda} \cos[2\pi (\bar{\tau}_{\lambda} \cdot \bar{r} - \nu_{\lambda} t + \varphi_{\lambda})] \quad . \quad (9)$$

Nos interesa ahora el valor medio de la amplitud a_{λ} del desplazamiento para una onda elástica de frecuencia ν_{λ} , en un medio a temperatura T . La energía cinética del núcleo en \bar{r}_p que tiene un desplazamiento dado por (9), es $K_{\lambda p} = \frac{1}{2} M (\dot{\bar{\rho}}_{\lambda p})^2$, donde M es la masa del nucleo. Promediando esta energía ci-

nética sobre un periodo ν_λ^{-1} , ésta toma la forma:

$$K_{\lambda p} = M \pi^2 \nu_\lambda^2 a_\lambda^2 \quad , \quad (10a)$$

y la energía cinética del cristal debido a la onda elástica es:

$$K_\lambda = \sum_p K_{\lambda p} = N M \pi^2 \nu_\lambda^2 a_\lambda^2 \quad . \quad (10b)$$

Por otro lado, a la temperatura T , la energía media E_λ asociada con un oscilador de frecuencia ν_λ , es²:

$$E_\lambda = h\nu_\lambda \left\{ \frac{1}{2} + [\exp(h\nu_\lambda/k_0T) - 1]^{-1} \right\} \quad , \quad (11)$$

y como se trata de un oscilador armónico, la energía cinética $K_\lambda = \frac{1}{2} E_\lambda$ y de (10) y (11) se obtiene⁶:

$$a_\lambda^2 = (N M \pi^2 \nu_\lambda^2)^{-1} \frac{1}{2} h\nu_\lambda \left\{ \frac{1}{2} + [\exp(h\nu_\lambda/k_0T) - 1]^{-1} \right\} \quad . \quad (12)$$

Tenemos ahora el valor medio del cuadrado de la amplitud de desplazamiento de una onda elástica en el cristal, como función de la frecuencia y de la temperatura. Nos interesa también el valor medio del cuadrado de la proyección, a lo largo de una dirección arbitraria \bar{u}_0 , de la amplitud debido a todas las ondas elásticas, esto es:

$$\sum_{\lambda=1}^{8N} (a_\lambda \bar{u}_\lambda \cdot \bar{u}_0)^2 = \frac{1}{3} \sum_{\lambda=1}^{8N} a_\lambda^2 \quad . \quad (13)$$

La ecuación (13) se debe al hecho que los vectores unitarios \bar{u}_λ pueden tomar con la misma probabilidad todas las direcciones.

Para evaluar el segundo miembro de (13), reemplazamos la suma por una integral utilizando la densidad de ondas elásticas de frecuencia ν dada por (6), y de (12) obtenemos:

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda=1}^{8N} (a_{\lambda} \bar{u}_{\lambda} \cdot \bar{u}_0)^2 &= \\ &= \frac{1}{3} \int_0^{\nu_m} \frac{1}{2} \frac{h\nu}{MN\pi^2\nu^2} \left\{ \frac{1}{2} + [\exp(h\nu/k_0T) - 1]^{-1} \right\} \frac{9N\nu^2}{\nu_m^3} d\nu \quad . \quad (14) \end{aligned}$$

Introduciendo la temperatura de Debye $\theta = h\nu_m k_0^{-1}$ tenemos que (14) toma la forma:

$$\sum_{\lambda=1}^{8N} (a_{\lambda} \bar{u}_{\lambda} \cdot \bar{u}_0)^2 = \frac{3}{2} \frac{h^2}{M\pi^2 k_0 \theta} \left[\frac{1}{2} + \frac{T}{\theta} \phi \left(\frac{\theta}{T} \right) \right] \quad , \quad (15)$$

donde la función $\phi(y)$ esta dada por:

$$\phi(y) = \frac{1}{y} \int_0^y x (e^x - 1)^{-1} dx \quad . \quad (16)$$

Las temperaturas de Debye θ se obtienen de los calores específicos de los cristales² y por lo tanto, $\sum_{\lambda=1}^{8N} (a_{\lambda} \bar{u}_{\lambda} \cdot \bar{u}_0)^2$ queda determinado en términos de la temperatura T y de constantes físicas bien determinadas. De la relación (15) podemos también obtener una estimación del orden de magnitud de a_{λ}^2 . En efecto, podemos suponer que $a_{\lambda}^2 \simeq (3N)^{-1} \sum_{\lambda=1}^{8N} a_{\lambda}^2$, y considerando que $\frac{1}{2} + \frac{T}{\theta} \phi \left(\frac{\theta}{T} \right)$ se mantiene del orden de la unidad⁶, se tiene que:

$$a_{\lambda}^2 \simeq \frac{h^2}{NM\pi^2 k_0 \theta} \quad (17)$$

Las temperaturas de Debye, para la mayor parte de los elemen-

tos, son del orden de magnitud de 100°K , y de (17) tenemos que $\sqrt{a_\lambda^2} \approx N^{-\frac{1}{2}} 10^{-8}$ cm. Para cualquier cristal de dimensiones razonable, digamos $N^{\frac{1}{3}} > 10^3$, $\sqrt{a_\lambda^2}$ resulta mucho menor que 10^{-8} cm. En el presente trabajo haremos uso en forma fundamental, de la ecuación (15), y del hecho que $\sqrt{a_\lambda^2}$ es mucho menor que la longitud de onda de los neutrones térmicos, ya que ésta es del orden de 10^{-8} cm.

III.- DISPERSION DE NEUTRONES POR UN NUCLEO SOMETIDO A VIBRACIONES TERMICAS.

La ecuación de Schrödinger, con el potencial de interacción apropiado para representar la dispersión del neutrón por el nucleo vibrante, fué ya discutida en I. En el presente trabajo podemos utilizar la misma ecuación, en la que ahora introducimos una superposición de ondas elásticas para representar el movimiento del nucleo. Con el objeto de poner nuestra notación mas de acuerdo con la usual en estos problemas, introduciremos la longitud de dispersión⁷ "a" en la ecuación de Schrödinger, en lugar de la $(\sigma/4\pi)^{\frac{1}{2}}$ de I, donde σ es la sección total para la dispersión por el nucleo libre. Como es bien sabido^{4,7}, a energías térmicas, la dispersión de un neutrón por un nucleo es función solamente de un parámetro, la longitud de dispersión "a". Por simplicidad supondremos que el nucleo dispersor tiene spin 0, y que su masa es grande comparada con la del neutrón. En tal caso, la función de onda ψ que representa la dispersión por un nucleo en vibración colocado en \bar{r}_p , esta dada por:

$$\psi = [\exp(i\bar{k}\cdot\bar{r}) + \psi_s(\bar{r}, t)] \exp(-iEt/\hbar) ; E = (\hbar^2 k^2 / 2m) , \quad (18)$$

donde $\psi_s(\bar{r}, t)$ satisface la ecuación inhomogénea¹:

$$\begin{aligned} & [\nabla^2 + k^2 + 2mi\hbar^{-1} \partial/\partial t] \psi_s = \\ & = 4\pi a \delta[\bar{r}-\bar{r}_p - \sum_{\lambda=1}^{8N} a_\lambda \bar{u}_\lambda \cos 2\pi(\bar{\tau}_\lambda \cdot \bar{r}_p - \nu_\lambda t + \varphi_\lambda)] \exp(i\bar{k}\cdot\bar{r}) \quad . \quad (19) \end{aligned}$$

Para resolver esta ecuación no podemos utilizar el método de series de Fourier de I, porque las frecuencias ν_λ no tienen, en general, relaciones racionales entre sí. Veremos sin embargo, que con ayuda de una transformada de Laplace se puede encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (19). Como en nuestro problema nos interesa solamente la solución estacionaria de (19), esto es, la solución que se establece cuando $t \rightarrow \infty$, podemos suponer cualquier condición inicial, y en particular, resulta conveniente tomar $\psi_s(\bar{r}, 0) = 0$. La transformada de Laplace de $\psi_s(\bar{r}, t)$, que designamos por $\Psi_s(\bar{r}, p)$, está definida por:

$$\Psi_s(\bar{r}, p) = \int_0^\infty e^{-pt} \psi_s(\bar{r}, t) dt \quad (20)$$

y teniendo en cuenta la condición inicial del párrafo precedente, se tiene que $\Psi_s(\bar{r}, p)$ satisface:

$$\begin{aligned} & (\nabla^2 + k^2 + 2mi\hbar^{-1} p) \Psi_s(\bar{r}, p) = \\ & = 4\pi a \int_0^\infty \left\{ \delta[\bar{r}-\bar{r}_p - \sum_{\lambda=1}^{8N} a_\lambda \bar{u}_\lambda \cos 2\pi(\bar{\tau}_\lambda \cdot \bar{r}_p - \nu_\lambda t + \varphi_\lambda)] \right. \\ & \quad \left. \exp(i\bar{k}\cdot\bar{r} - pt) \right\} dt \quad . \quad (21) \end{aligned}$$

El miembro derecho de (21) es una cierta función de \bar{r} que designaremos por $F(\bar{r})$, y Ψ_s satisface entonces la ecuación:

$$(\nabla^2 + \kappa^2) \Psi_s(\bar{r}, p) = F(\bar{r}) \quad , \quad (22)$$

donde:

$$\kappa^2 = k^2 + 2mi\hbar^{-1} p \quad . \quad (23)$$

Como es bien sabido⁸, la solución de (22) para el caso que el punto de observación $\bar{r} \rightarrow \infty$, puede expresarse como:

$$\Psi(\bar{r}, p) = -(4\pi r)^{-1} \exp(i\kappa r) \iiint \exp[-i\kappa \left(\frac{\bar{r}}{r}\right) \cdot \bar{r}'] F(\bar{r}') d\bar{r}' \quad . \quad (24)$$

Substituyendo la forma explícita de $F(\bar{r})$, dada por el miembro derecho de (21), e intercambiando el orden de las integraciones, se tiene que:

$$\Psi_s(\bar{r}, p) = -(a/r) \exp(i\kappa r) \exp[i(k\bar{s}_0 - \kappa\bar{s}) \cdot \bar{r}_p] \int_0^\infty \left\{ \prod_{\lambda=1}^{8p} \exp(i\gamma_\lambda \text{sen } \delta_\lambda) \right\} e^{-pt} dp \quad , \quad (25)$$

donde:

$$\gamma_\lambda = (k\bar{s}_0 - \kappa\bar{s}) \cdot \bar{u}_\lambda a_\lambda \quad , \quad (26a)$$

$$\delta_\lambda = 2\pi(\bar{\tau}_\lambda \cdot \bar{r}_p - \nu_\lambda t + \varphi_\lambda + \frac{1}{4}) = \delta'_\lambda - \nu_\lambda t \quad , \quad (26b)$$

$$\bar{s}_0 = (\bar{k}/k) \quad , \quad \bar{s} = (\bar{r}/r) \quad (26c)$$

Para evaluar la integral en (25), hacemos uso de la conocida relación⁹:

$$\begin{aligned} \exp(i\gamma_\lambda \operatorname{sen} \delta_\lambda) &= \exp\left[\frac{1}{2} \gamma_\lambda (e^{i\delta_\lambda} - e^{-i\delta_\lambda})\right] = \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\gamma_\lambda) \exp(in\delta_\lambda) \quad , \end{aligned} \quad (27)$$

donde $J_n(\gamma_\lambda)$ son funciones de Bessel de orden n .

De la definición (26b) vemos que δ'_λ no depende de t y que podemos poner el producto en (25) bajo la forma:

$$\begin{aligned} \prod_{\lambda=1}^{8N} \exp\left[\frac{1}{2} \gamma_\lambda (e^{i\delta_\lambda} - e^{-i\delta_\lambda})\right] &= \\ &= \sum_{n_1, \dots, n_{8N}=-\infty}^{\infty} \left\{ J_{n_1}(\gamma_1) \dots J_{n_{8N}}(\gamma_{8N}) \right. \\ &\quad \cdot \exp[i(n_1\delta'_1 + \dots + n_{8N}\delta'_{8N})] \\ &\quad \left. \cdot \exp[-2\pi i (n_1\nu_1 + \dots + n_{8N}\nu_{8N})t] \right\} \quad . \end{aligned} \quad (28)$$

Utilizando (28) la integral en (25) se reduce a una suma de integrales elementales, y obtenemos finalmente que:

$$\begin{aligned} \Psi_s(\bar{r}, p) &= -(a/r) \exp(i\kappa r) \exp[i(\kappa\bar{s}_0 - \kappa\bar{s}) \cdot \bar{r}_p] \\ &\quad \sum_{n_1, \dots, n_{8N}=-\infty}^{\infty} \left\{ J_{n_1}(\gamma_1) \dots J_{n_{8N}}(\gamma_{8N}) \exp[i(n_1\delta'_1 + \dots + n_{8N}\delta'_{8N})] \right. \\ &\quad \left. \cdot [p + 2\pi i (n_1\nu_1 + \dots + n_{8N}\nu_{8N})]^{-1} \right\} \quad . \end{aligned} \quad (29)$$

De (29) y (26a, b, c) tenemos la expresión explícita para la

transformada de Laplace de la función de onda dispersa. Claramente se ve que Ψ_s dada por (29) como función de la variable compleja p , tiene polos en $p = -\sum_{\lambda=1}^{8N} 2\pi i n_{\lambda} \nu_{\lambda}$ para cualquier n_{λ} entero y además, tiene un punto ramal para $p = (iE/\hbar)$, ya que las ν_{λ} dependen de κ por (26a), y κ esta dada por (23).

La función de onda $\psi_s(\bar{r}, t)$ se obtiene de su transformada de Laplace por la integral:

$$\psi_s(\bar{r}, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \Psi_s(\bar{r}, p) e^{pt} dp \quad (30)$$

El contorno de integración de (30) esta indicado en la Fig. 1. Haciendo un corte del punto ramal (iE/\hbar) al ∞ paralelo al eje real en el plano p , podemos transformar el contorno original en otro que rodea los polos de Ψ_s , mas una integral alrededor de un contorno que rodea al corte*, como también se indica en la Fig.

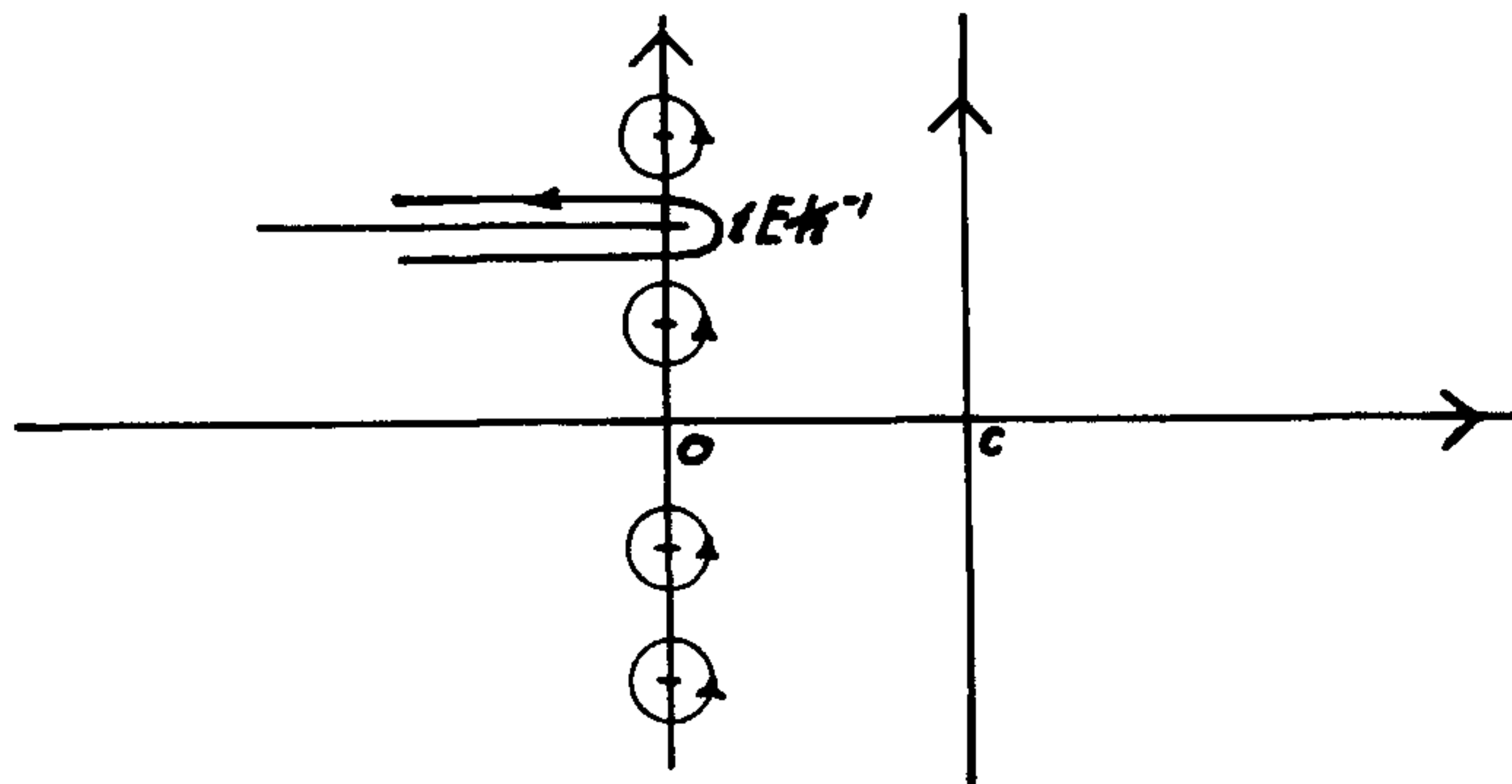


Fig. 1

*La deformación del contorno puede hacerse, ya que de (29) se ve que la contribución a la integral de una semi-circunferencia en la parte izquierda del plano, tiende a 0 cuando el radio de la circunferencia tiende a ∞ .

La contribución a la integral (30) del contorno que rodea al corte, tiende a 0 cuando $t \rightarrow \infty$, ya que contiene el término $\exp(pt) = \exp(p_x t) \exp(ip_y t)$ y $p_x < 0$ en ese contorno. Cuando $t \rightarrow \infty$, esto es cuando se establece el fenómeno estacionario, la única contribución importante es la de los polos de Ψ_s que, como indicamos antes, están dados por $p = -2\pi i \sum_{\lambda=1}^{8N} n_\lambda \nu_\lambda$ para cualquier n_λ enteros. Tenemos entonces que la forma estacionaria de $\psi_s(\bar{r}, \bar{r}_p, t)$ puede expresarse como:

$$\psi_s(\bar{r}, \bar{r}_p, t) = \sum_{n_1, \dots, n_{8N} = -\infty}^{\infty} \psi_{sn_1 \dots n_{8N}}(\bar{r}, \bar{r}_p, t) \quad , \quad (31)$$

donde:

$$\begin{aligned} \psi_{sn_1 \dots n_{8N}}(\bar{r}, \bar{r}_p, t) = & -(a/r) \exp(i\kappa_n r) \exp[i(k\bar{s}_0 - \kappa_n \bar{s}) \cdot \bar{r}_p] \\ & J_{n_1}[(k\bar{s}_0 - \kappa_n \bar{s}) \cdot \bar{u}_1 a_1] \dots J_{n_{8N}}[(k\bar{s}_0 - \kappa_n \bar{s}) \cdot \bar{u}_{8N} a_{8N}] \\ & \cdot \exp\left\{2\pi i [n_1(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{r}_p + \varphi_1 + \frac{1}{2}) + \dots + n_{8N}(\bar{\tau}_{8N} \cdot \bar{r}_p + \varphi_{8N} + \frac{1}{2})]\right\} \\ & \cdot \exp[(-2\pi i)(n_1 \nu_1 + \dots + n_{8N} \nu_{8N}) t] \quad , \quad (32) \end{aligned}$$

y κ_n representa con el índice único n a $\kappa_{n_1 \dots n_{8N}}$ dado por:

$$\kappa_{n_1 \dots n_{8N}} = [k^2 + 4\pi m \hbar^{-1} (n_1 \nu_1 + \dots + n_{8N} \nu_{8N})]^{1/2} \quad . \quad (33)$$

La función de onda $\psi_{sn_1 \dots n_{8N}}(\bar{r}, \bar{r}_p, t)$ cuando esta multiplicado por $\exp(-iEt/\hbar)$ de (18), representa un estado cuya energía $\epsilon_{n_1 \dots n_{8N}}$ está dada por

$$\epsilon_{n_1 \dots n_{3N}} = E + h(n_1 \nu_1 + \dots + n_{3N} \nu_{3N}) \quad , \quad (34)$$

y que corresponde por lo tanto a un neutrón que ha absorbido o emitido, (según n_λ sea positiva o negativa) n_1 fonones de energía $h\nu_1$, n_2 fonones de energía $h\nu_2$, etc.

Como es bien sabido¹, la sección diferencial de dispersión de neutrones por el núcleo vibrante es la suma de las secciones diferenciales de dispersión asociadas con las funciones de onda de diferentes energías, ya que los términos de interferencia se anulan al ser promediados sobre un periodo. De aquí que en adelante nos ocuparemos solamente de la sección de dispersión, para procesos en que un número definido de fonones ha sido emitido o absorbido por el neutrón. En particular, nos van a interesar los casos de dispersión elástica, en que $n_1 = \dots = n_{3N} = 0$, y de emisión o absorción de un solo fonón.

IV.- DIFRACCION DE NEUTRONES POR UN CRISTAL SOMETIDO A VIBRACIONES TERMICAS.

Para obtener la sección diferencial de dispersión de un neutrón por un cristal en vibración térmica, debemos proceder a sumar las funciones de onda dispersas asociadas con cada núcleo de la malla. Analizaremos en primer término el caso dispersión elástica, para el cual la función de onda (32) se reduce a:

$$\psi_{s_0 \dots s_{3N}}(\bar{r}, \bar{r}_p, t) = -(a/r) \exp(ikr) \exp[ik(\bar{s}_0 - \bar{s}) \cdot \bar{r}_p] \cdot \prod_{\lambda=1}^{3N} J_0[k(\bar{s}_0 - \bar{s}) \cdot \bar{u}_\lambda a_\lambda] \quad . \quad (35)$$

Como se vió en I, la sección diferencial para dispersión elástica por el cristal toma la forma:

$$d\Sigma_{\bullet 1} = \left| \sum_p \psi_{s_0 \dots s_0}(\vec{r}, \vec{r}_p) \right|^2 r^2 d\Omega, \quad (36)$$

donde $d\Omega$ es el elemento de ángulo sólido, y la suma sobre el índice p representa a la suma sobre todos los tripletes p_1, p_2, p_3 que nos dan la posición de los núcleos en la malla.

De (35) y (36) tenemos que:

$$\frac{d\Sigma_{\bullet 1}}{d\Omega} = a^2 (2\pi)^3 NV^{-1} \sum_p \delta[k(\vec{s}_0 - \vec{s}) - 2\pi \vec{B}_p] \prod_{\lambda=1}^{3N} \{J_0 [k(\vec{s}_0 - \vec{s}) \cdot \vec{u}_\lambda a_\lambda]\}^2, \quad (37)$$

y la función δ del primer factor se debe a:

$$\left| \sum_p \exp i[k(\vec{s}_0 - \vec{s}) \cdot \vec{r}_p] \right|^2 = (2\pi)^3 NV^{-1} \sum_p \delta[k(\vec{s}_0 - \vec{s}) - 2\pi \vec{B}_p], \quad (38)$$

donde V es el volumen de la celda unitaria, y los \vec{B}_p son vectores de la malla recíproca caracterizados por:

$$\vec{B}_p = p_1 \vec{\beta}_1 + p_2 \vec{\beta}_2 + p_3 \vec{\beta}_3. \quad (39)$$

El primer factor de (37) corresponde simplemente a la ley de Bragg-Laue, y el efecto de las vibraciones térmicas del cristal entra en juego solamente en el segundo factor. Nuestro objetivo es ahora el de expresar este segundo factor, como función de la temperatura y de las constantes específicas del cristal.

En la sección II de este trabajo vimos que a_λ es mucho me

nor que la longitud de onda $2\pi k^{-1}$ para neutrones térmicos. Como \bar{s} y \bar{s}_0 son vectores unitarios, tenemos que:

$$k(\bar{s}_0 - \bar{s}) \cdot \bar{u}_\lambda a_\lambda = 2 \operatorname{sen} \left(\frac{\theta}{2} \right) (\bar{u}_0 \cdot \bar{u}_\lambda) k a_\lambda \ll 1, \quad (40)$$

donde θ es el ángulo entre \bar{s} y \bar{s}_0 , y \bar{u}_0 es un vector unitario en la dirección $\bar{s} - \bar{s}_0$. Ahora bien, la función Bessel $J_0(z)$ para $|z| \ll 1$, puede expresarse como:

$$J_0(z) \simeq 1 - \frac{z^2}{4}; \quad \ln J_0(z) \simeq \ln \left(1 - \frac{z^2}{4} \right) \simeq -\frac{z^2}{4};$$

$$J_0^2(z) \simeq e^{-\frac{z^2}{2}}. \quad (41)$$

De (40) y (41) se tiene que (37) toma la forma:

$$(d\Sigma_{e1}/d\Omega) = a^2 (2\pi)^3 NV^{-1} \sum_p \delta [k(\bar{s}_0 - \bar{s}) - 2\pi \bar{B}_p] \cdot \exp \left\{ -2 \left(k^2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} \right) \sum_{\lambda=1}^{3N} [(\bar{u}_0 \cdot \bar{u}_\lambda) a_\lambda]^2 \right\}. \quad (42)$$

Ahora podemos aprovechar el hecho de que la suma en el último término de (42) ya fue evaluada en (15) de la sección II, para expresar la sección de dispersión elástica como función de la temperatura del cristal, en la forma:

$$(d\Sigma_{e1}/d\Omega) = a^2 (2\pi)^3 NV^{-1} \sum_p \delta [k(\bar{s}_0 - \bar{s}) - 2\pi \bar{B}_p] \exp \left\{ -2 \left(k^2 \operatorname{sen}^2 \frac{\theta}{2} \right) \left(\frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{M\pi^2 k_0^2 c} \right) \left[\frac{1}{4} + \frac{T}{\Theta} \Phi \left(\frac{\Theta}{T} \right) \right] \right\}. \quad (43)$$

El factor que multiplica al primer término de (43) es función sólo del número de onda k , de la temperatura T y de

la temperatura de Debye del cristal, así como de constantes universales y del ángulo θ entre \bar{s}_0 y \bar{s} . Este factor de corrección es el mismo que aparece en la teoría⁶ de los rayos X, y ha sido también obtenido por Weinstock¹⁰ para el caso de difracción de neutrones, tratando las vibraciones desde un punto de vista cuántico y utilizando una aproximación de Born en la interacción.

Consideremos ahora el caso de la dispersión inelástica del neutrón por el cristal, con absorción o emisión de un solo fonón. Supondremos por comodidad, que la frecuencia del fonón absorbido o emitido es ν_1 , y en tal caso, la función de onda dispersa (32) asociada a este proceso toma la forma:

$$\psi_{\pm 1 \ 0 \dots 0}(\bar{r}, \bar{r}_p, t) = -(a/r) \exp(ik'r) \exp[i(k\bar{s}_0 - k'\bar{s}) \cdot \bar{r}_p] \\ J_{\pm 1}[(k\bar{s}_0 - k'\bar{s}) \cdot \bar{u}_1 a_1] \prod_{\lambda=2}^{8N} \{J_0[(k\bar{s}_0 - k'\bar{s}) \cdot \bar{u}_\lambda a_\lambda]\} \\ \exp[\pm 2\pi i (\bar{\tau}_1 \cdot \bar{r}_p + \varphi_1 \pm \frac{1}{2} - \nu_1 t)] \quad , \quad (44)$$

donde $k' = (k^2 \pm 4\pi m \hbar^{-1} \nu_1)^{\frac{1}{2}}$, y el signo + es para un proceso de absorción de un fonón de frecuencia ν_1 , y el - para emisión del mismo fonón. La sección diferencial para la dispersión inelástica por el cristal estará dada por¹:

$$d\Sigma_{\pm} = (k'/k) \left| \sum_p \psi_{\pm 1 \ 0 \dots 0}(\bar{r}, \bar{r}_p, t) \right|^2 r^2 d\Omega = \\ = (k'/k) a^2 \left| \sum_p \exp[i(k\bar{s}_0 - k'\bar{s} \pm 2\pi \bar{\tau}_1) \cdot \bar{r}_p] \right|^2 \\ \cdot J_1^2[(k\bar{s}_0 - k'\bar{s}) \cdot \bar{u}_1 a_1] \left\{ \prod_{\lambda=2}^{8N} J_0[(k\bar{s}_0 - k'\bar{s}) \cdot \bar{u}_\lambda a_\lambda] \right\}^2 d\Omega \quad . \quad (45)$$

Por un análisis similar al de (38) vemos que el primer término de (45) nos da⁴:

$$(2\pi)^3 NV^{-1} \sum_p \delta(k\bar{s}_0 - k'\bar{s} \pm 2\pi \bar{\tau}_1 - 2\pi \bar{B}_p), \quad (46a)$$

donde la suma se hace sobre todos los tripletes p_1, p_2, p_3 que caracterizan a los vectores de la malla recíproca \bar{B}_p . El término de (45) comprendido entre llaves, se puede evaluar en forma enteramente similar a como se hace en el caso elástico, ya que la exclusión de la frecuencia ν_1 del producto, no altera el análisis. Como también en este caso el argumento de las funciones de Bessel $J_0(z)$ es pequeño, obtenemos de (40), (41) y (15) que:

$$\begin{aligned} & \{ \prod_{\lambda=2}^{8N} J_0[(k\bar{s}_0 - k'\bar{s}) \cdot \bar{u}_\lambda a_\lambda] \}^2 = \exp(-2W') = \\ & = \exp \left\{ -2(k\bar{s}_0 - k'\bar{s})^2 \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{Mk_0\theta} \left[\frac{1}{4} + \frac{T}{\theta} \Phi \left(\frac{\theta}{T} \right) \right] \right\} \nu. \end{aligned} \quad (46b)$$

Por último, como el argumento de J_1 en (45) es pequeño, tenemos que:

$$J_1^2[(k\bar{s}_0 - k'\bar{s}) \cdot \bar{u}_1 a_1] \simeq \frac{1}{4} (k\bar{s}_0 - k'\bar{s})^2 \left[\frac{(k\bar{s}_0 - k'\bar{s})}{|k\bar{s}_0 - k'\bar{s}|} \cdot \bar{u}_1 \right]^2 a_1^2. \quad (46c)$$

El valor medio de a_1^2 está dado por (12) cuando $\lambda = 1$, y el valor medio de la proyección de \bar{u}_1 , sobre un vector unitario determinado es $\frac{1}{3}$. En caso que consideremos que las ondas elásticas tienen una velocidad promedio "c", como indicamos en la sección II, entonces $|\bar{\tau}_1|^2 c^2 = \nu_1^2$ y para cada dirección $\bar{\tau}_1$ habrá tres direcciones de polarización, una paralela a $\bar{\tau}_1$ y otras dos perpendiculares a $\bar{\tau}_1$. Si queremos obtener ahora

la sección de dispersión inelástica para absorción o emisión de un fonón de frecuencia ν_1 , independientemente de su estado de polarización, debemos multiplicar (45) por 3, lo que elimina el factor $\frac{1}{3}$ de la proyección promediada de \bar{u}_1 . Finalmente, de (46a,b,c) y (12) tenemos que la sección diferencial sumada sobre todas las direcciones de polarización, toma la forma:

$$(d\Sigma_{\pm}/d\Omega) = (k'/k) a^2 (2\pi)^3 NV^{-1} \sum_p \delta(k\bar{s}_0 - k'\bar{s} \pm 2\pi \bar{\tau}_1 - 2\pi \bar{B}_p) \\ (k\bar{s}_0 - k'\bar{s})^2 \frac{1}{2} \frac{\hbar}{NM(\pm 2\pi\nu_1)} \left[\frac{\exp(\pm h\nu_1/k_0T) + 1}{\exp(\pm h\nu_1/k_0T) - 1} \right] e^{-2W'}. \quad (47)$$

La expresión (47) nos da en forma explícita, la sección diferencial de la dispersión inelástica causada por las vibraciones térmicas del cristal, cuando se absorbe, (en cuyo caso se utiliza el signo + en (47)), o emite, (en cuyo caso se utiliza el signo - en (47)) un fonón de frecuencia ν_1 . Utilizando la relación $\sigma = 4\pi a^2$, donde σ es la sección de dispersión del núcleo libre, vemos que (47) difiere de las expresiones correspondientes para absorción o emisión de un fonón obtenidas por Weinstock^{10,4}, por el factor:

$$\frac{1}{2} [\exp(\pm h\nu_1/k_0T) + 1]. \quad (48)$$

La razón de esta diferencia procede del hecho que en el presente trabajo las vibraciones de la malla fueron consideradas desde un punto de vista clásico, y no desde el punto de vista de osciladores armónicos cuánticos, como en el análisis de Weinstock. Esperamos sin embargo, que a altas temperaturas, esto es, cuando $h\nu_1 \ll k_0T$, donde el principio de correspon-

dencia es válido; los resultados de Weinstock coinciden con (47), y en efecto, en ese caso (48) tiende a la unidad. En el caso de dispersión elástica, el análisis semi-clásico de este trabajo, y el análisis de Weinstock coinciden, cosa que Placzek¹¹ ya había predicho por consideraciones de carácter general.

El método desarrollado en el presente trabajo para el análisis de la dispersión de neutrones por las vibraciones térmicas de la malla, puede extenderse sin dificultad a la absorción y emisión de mas de un fonón, ya que tenemos la expresión general de la onda dispersa (32). Debido a las dificultades que se presentan en los análisis usuales^{4, 10}, para la descripción de fenómenos de absorción o emisión de varios fonones, el presente método puede ser de utilidad para analizar estos casos, particularmente si la frecuencia ν de los fonones es tal que $h\nu \ll k_0T$.

REFERENCIAS.

1. M. Moshinsky, Rev. Mex. Fis. 2, 137, (1953).
2. J. E. Mayer y M. G. Mayer. Statistical Mechanics. (John Wiley and Sons, New York, 1940) Cap. XI, pp. 237-258.
3. P. P. Debye, Ann. Physik, 39, 789, (1912).
4. J. M. Cassels. The Scattering of Neutrons by Crystals. (Progress in Nuclear Physics, Vol. I, Butterworth-Springer, London, 1950) pp. 185-208.
5. A. E. H. Love. Mathematical Theory of Elasticity. Fourth Edition. (Dover Publications, New York, 1944). Cap. XIII, pp. 293-309.

6. M. von Laue. Rotgenstrahl-Interferenzen. (Edward Broth. Ann Arbor, Mich. 1943) Sección 20, 21 pp. 175-211.
7. H.A.Bethe. Phys.Rev. 76, 38, (1949).
8. N.F.Mott y H.S.W.Massey. The Theory of Atomic Collisions (Oxford, Clarendon Press, 2nd.Edition, 1949). Cap.VI p.114.
9. E.T.Whittaker y G.N.Watson. Modern Analysis (American Edition, 1943) p.101.
10. R.Weinstock, Phys.Rev. 65, 1, (1944).
11. G.Placzek. Comunicación privada.