

УДК 539.125:523.5

ОПТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ

А. В. Степанов

Институт ядерных исследований
АН СССР, Москва

Дан обзор состояния теории прохождения ультрахолодных нейтронов через вещество. Методом теории многократного рассеяния получено выражение для оптического потенциала, описывающего взаимодействие нейтронов этой области энергий с веществом. Рассмотрено влияние неоднородности рассеивающей среды на затухание и закон дисперсии нейтронной когерентной волны.

A review of the status of the theory of propagation of ultracold neutrons in the scattering media is presented. The expression for ultracold neutrons optical potential in scattering medium is obtained by the method of the multiple scattering theory. The effect of inhomogeneity of scattering medium on decay and dispersion law of neutron coherent wave is considered.

ВВЕДЕНИЕ

Исследования с нейтронами очень низких энергий (ультрахолодными нейтронами), на некоторые необычные свойства которых впервые обратил внимание Я. Б. Зельдович [1], были начаты Ф. Л. Шапиро с сотр. [2]. В настоящее время такие исследования ведутся в различных физических центрах и круг поставленных задач весьма широк: от измерения электрического дипольного момента нейтрона до изучения структуры вещества в конденсированном состоянии [3—5]. Основными положениями теории взаимодействия нейтронов этой области энергий с веществом * были даны Ф. Л. Ша-

* И. М. Франк [6] и А. Штайерл [4] предложили следующую более подробную классификацию нейтронов очень низких энергий: очень холодные нейтроны (ОХН): 10^{-7} эв $< E_n < 10^{-4}$ эв; ультрахолодные нейтроны (УХН): $E_n < 10^{-7}$ эв. Основанием для такого деления области очень низких энергий является физически различное поведение нейтронов этих групп в веществе: поведение ОХН характеризует волновой процесс в веществе, тогда как волновая функция УХН быстро затухает в среде (постоянная

пиро [2]. Для описания распространения ультрахолодных нейтронов в веществе используют потенциал

$$U_0 = U_{R0} + iU_{I0}, \quad (1)$$

где

$$U_{R0} = (2\pi\hbar^2/m) \rho \operatorname{Re} b, \quad (2)$$

b — длина когерентного рассеяния нейтронов на бесконечно тяжелом ядре; m — масса нейтрона; ρ — число рассеивающих ядер в 1 см^3 материала, облучаемого нейтронами. Ограничимся для простоты обсуждением взаимодействия нейтронов с немагнитными материалами.

С помощью формулы, аналогичной (2), вычисляют мнимую часть потенциала

$$U_{I0} = (2\pi\hbar^2/m) \rho \operatorname{Im} b. \quad (3)$$

При этом, согласно оптической теореме,

$$\operatorname{Im} b = -k [\sigma_{\text{abs}} + \sigma_{\text{inel}}]/4\pi, \quad (4)$$

где \mathbf{k} — волновой вектор падающих нейтронов; σ_{abs} — сечение поглощения; σ_{inel} — сечение неупругого рассеяния, в результате которого нейтрон покидает область низких энергий. Сумму $\sigma_{\text{abs}} + \sigma_{\text{inel}}$ целесообразно называть поперечным сечением выведения или увода нейтронов (по аналогии с термином, принятым в физике реакторов). Полуфеноменологические выражения (1) — (4) пытались обосновать многие авторы (см., например, [7, 8]). Существенным вопросом, который нуждается в тщательном исследовании, является возможность применения в данном случае оптической теоремы в форме (4). Во-первых, в этом соотношении амплитуда рассеяния f ($f = -b$) взята на «массовой» поверхности и поэтому оптический потенциал можно определить только в ограниченной области переменных. Во-вторых, формула (4) при нулевом поглощении нейтронов связывает мнимую часть амплитуды рассеяния f на одном ядре с поперечным сечением неупругого рассеяния на коллективе ядер. Это соотношение в какой-то степени обоснованно, если неупругое рассеяние рассматривается в некогерентном приближении, т. е. когда так же как и $\operatorname{Im} b$, σ_{inel} описывает рассеяние на одном ядре (см. ниже). Учет интерференционных эффектов в рамках такой схемы невозможен. Вывод, свободный от указанной выше непоследовательности, выражения для оптического потенциала, описывающего прохождение когерентной нейтронной волны через вещество, дан в работах [9, 10]. Исходным пунктом этого расчета служат известные формулы теории многократного рассеяния [11]. Этот потенциал оптической модели

затухания $\kappa_0 \approx 10^5 - 10^6 \text{ см}^{-1}$). В настоящем обзоре для краткости будем называть все нейтроны с энергией вблизи $E_n \approx 10^{-7} \text{ эв}$ и выше ультрахолодными, давая дополнительные разъяснения там, где этот термин может привести к недоразумениям.

(подобно тому, как это делается в теории ядерных реакций [11—13]) рассмотрим, как некоторый эффективный потенциал в уравнении Шредингера, которое описывает когерентную нейтронную волну, эквивалентную когерентному полю в исходной многоканальной задаче. Мнимая часть этого потенциала определяет ослабление когерентной волны во входном канале. Заметим, что при такой интерпретации применимость полученных выражений для оптического потенциала не ограничена только областью очень низких энергий нейтронов. Кроме того, при таком подходе нет необходимости использовать оптическую теорему при отыскании $\text{Im } U_0$, а можно непосредственно вычислить эту величину. Тем не менее рассмотрим подробно вычисление $\text{Im } U_0$ с помощью стандартной процедуры, основанной на оптической теореме, и оценим поправки, обусловленные уходом с «массовой» поверхности.

Расчет, выполненный во втором приближении теории многократного рассеяния (см. ниже), показывает, что для когерентно рассеивающей системы ядер сечение неупругого рассеяния в (4) содержит вклад интерференционного неупругого рассеяния с поглощением фононов (в качестве рассеивателя подробно рассмотрена модель гармонического кристалла). Согласно оценкам, полученным Плачком и Ван Ховом [14], поправка в результате интерференции нейтронных волн, рассеянных различными ядрами, в области низких энергий составляет 10—20% величины σ_{inel} , рассчитанной в некогерентном приближении. Поправка второго порядка относительно $\text{Re } b$ к действительной части оптического потенциала по порядку величины равна $(b/0,1a) U_{R_0} = 10^{-3} - 10^{-4} U_{R_0}$, где U_{R_0} определено (2); a — среднее расстояние между рассеивающими ядрами.

В общем случае оптический потенциал нелокален и зависит от энергии нейтрона. Такой результат хорошо известен в оптике и ядерной физике. Если рассматривать прохождение нейтронов при $E_n \lesssim 10^{-4}$ эв, то и зависимость от энергии и нелокальность оптического потенциала весьма слабо влияют на характер распространения нейтронной волны в веществе.

Неоднородность среды изменяет спектр возбуждений рассеивающей системы и вносит поправки к поперечному сечению неупругого рассеяния. В большинстве практически интересных случаев эти поправки малы. Обмен фононом между очень холодными нейтронами, распространяющимися в среде, приводит к очень слабой неидеальности нейтронного газа. В случае ультрахолодных нейтронов, захваченных в ловушке, такое взаимодействие между нейтронами оказывается еще более слабым.

В данном обзоре будет также изучено прохождение нейтронов через неоднородные среды [9, 10]. После анализа слабого однократного рассеяния на неоднородной мишени, когда применимо Борновское приближение, рассмотрены поправки к этим результа-

там за счет сильного рассеяния на одной неоднородности и многократного рассеяния в большом объеме рассеивающего вещества. Для описания многократного рассеяния в неоднородной среде снова применен вариант «оптической» модели. В рамках этой модели когерентное нейтронное поле удовлетворяет уравнению Шредингера с эффективным, регулярно зависящим от пространственных координат потенциалом — аналогом введенного выше оптического потенциала для учета неупругих процессов [9, 10, 15]. Упругое некогерентное рассеяние на статических неоднородностях приводит к ослаблению когерентной волны, аналогичному выведению нейтронов из входного канала вследствие неупругого рассеяния. Неоднородность среды может быть обусловлена как динамическими флуктуациями плотности (интенсивными, например, вблизи критических точек), так и носить статический характер. Пример неоднородности последнего типа — неоднородность в сплавах, идеальных поликристаллах и в реальных кристаллах с дефектами структуры.

Эффективный оптический потенциал для неограниченной рассеивающей среды позволяет найти показатель преломления для нейтронной волны и затем рассмотреть взаимодействие нейтронов со средой, занимающей ограниченный объем. Для ультрахолодных нейтронов ($E_n \ll 10^{-7}$ эв) из-за малой глубины их проникновения в стенку ловушки необходимо тщательно рассмотреть влияние структуры поверхности, ограничивающей рассеивающую среду на поведение нейтронной волны. Обсудим влияние шероховатостей стенок ловушки на коэффициент поглощения УХН [16, 17] и результаты расчетов углового распределения нейтронов, отраженных от неидеальной поверхности [17, 18]. Изучим также поглощение УХН в поверхностной пленке, загрязняющей стенки ловушки [19], и оценим величину среднего квадрата флуктуаций нейтронного поля в неоднородной среде и влияние шероховатостей стенок нейтронновода на распространяющуюся по нему нейтронную волну. \blacktriangle

1. ВЫВОД ОБЩИХ ФОРМУЛ ОПТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ОДНОРОДНОЙ СРЕДЫ

В теории многократного рассеяния (см., например, [11]) показано, что выражение для оптического потенциала U_0 , описывающего упругое рассеяние частиц на системе N рассеивателей, находящейся в состоянии $|i\rangle$, можно записать в виде следующего разложения*:

$$U_0 = \sum_{\alpha=1}^N \langle i | \hat{t}_\alpha | i, \rangle + \sum_{\alpha \neq \beta=1}^N \langle i | \hat{t}_\alpha \frac{1 - \Lambda_i}{d} \hat{t}_\beta | i, \rangle + \dots \quad (5)$$

* Возможны и другие формы оптического потенциала. Однако отличия их от (5) проявляются лишь в слагаемых более высокого порядка, рассмотрение которых выходит за пределы точности нашего расчета.

Здесь угловые скобки $\langle , i | \dots | i , \rangle$ обозначают матричный элемент по волновым функциям $|i\rangle$ рассеивающей среды. Для краткости не будем конкретизировать представление, в котором записан потенциал U_0 относительно переменных нейтрона. Величина $1/d$ — функция Грина уравнения Шредингера при выключенном взаимодействии между нейтроном и рассеивающими ядрами, т. е.

$$d = E_{0i} + i\eta - \hat{K}; \quad (6)$$

$$\hat{K} = \hat{K}_n + \hat{H}, \quad (7)$$

где $\hat{K}_n = -\hbar^2 \nabla_n^2 / 2m$ — оператор кинетической энергии нейтрона; $\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^N \hat{K}_\alpha + U$ — гамильтониан рассеивающей системы; $\hat{K}_\alpha = -\hbar^2 \nabla_\alpha^2 / 2M_\alpha$ — оператор кинетической энергии α -го рассеивающего ядра; U — оператор потенциальной энергии взаимодействия ядер вещества друг с другом; η — малое положительное число; E_{0i} — полная энергия системы «нейтрон и рассеиватель», находящийся в состоянии $|i\rangle$.

В реальных условиях квантовомеханическое состояние рассеивателя не определено, поскольку он находится в термодинамическом равновесии при температуре T . Поэтому, чтобы получить окончательный результат, волновую функцию нейтрона ψ_c , удовлетворяющую уравнению Шредингера с оптическим потенциалом U_0 (5), необходимо усреднить по статистическому распределению состояний $|i\rangle$. Приближенно будем полагать, что эта функция совпадает с решением волнового уравнения с оптическим потенциалом $\langle U_0 \rangle_T$, усредненным по равновесному распределению состояний рассеивающей системы. При этом пренебрегаем равновесными флуктуациями оптического потенциала. Чтобы учесть такие флуктуации, необходимо усреднить не оптический потенциал U_0 , а соответствующий ему оператор рассеяния \hat{T}_c . Погрешность, вносимая нашим приближением $\sim \langle (U_0 - \langle U_0 \rangle_T)^2 \rangle_T$, где символ $\langle \dots \rangle_T$ означает усреднение по равновесному распределению состояний рассеивателя. Поскольку зависимость оптического потенциала от состояния рассеивателя, главным образом, определяется плотностью рассеивающих ядер ρ (ρ — число ядер в 1 см^3 рассеивающего вещества), то величина $\langle (U_0 - \langle U_0 \rangle_T)^2 \rangle_T \sim \langle (\rho - \langle \rho \rangle)^2 \rangle_T$. Эти флуктуации вызывают рассеяние, аналогичное известному в оптике молекулярному рассеянию света.

Вернемся к обсуждению формулы (5). Обозначим t -матрицу рассеяния нейтрона на ядре, связанном в веществе, \hat{t}_α . Этот оператор удовлетворяет уравнению [11]

$$\hat{t}_\alpha = V_\alpha + V_\alpha [(1 - \Lambda_i)/d] \hat{t}_\alpha, \quad (8)$$

где $1 - \Lambda_i$ — проекционный оператор, исключаящий из полного набора промежуточных состояний рассеивателя состояние $|i\rangle$; V_α — оператор потенциальной энергии взаимодействия нейтрона с α -ым ядром. Подчеркнем, что \hat{t}_α является многочастичным оператором (см. выше определение d). Такое определение оператора \hat{t}_α удобно при анализе влияния неупругих процессов: во входном канале имеем состояние, соответствующее упругому рассеянию на системе N рассеивателей. Действительно, при $\Lambda_i = 1$ имеем $\hat{t}_\alpha = V_\alpha$ и $U_0 = \sum_{\alpha=1}^N \hat{t}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^N V_\alpha = \hat{V}$. Если под волновой функцией оптической модели понимать когерентную волну, то некогерентное упругое рассеяние также будет выводить частицы из входного канала. Для учета этого эффекта можно снова использовать разложение (5), но в уравнении для \hat{t}_α (8) следует опустить проекционный оператор Λ_i .

В приближении псевдопотенциала Ферми [20—23] имеем в координатном представлении

$$\langle \mathbf{r}_n | V_\alpha | \mathbf{r}_n' \rangle = (2\pi\hbar^2/m) b_\alpha \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_\alpha) \delta(\mathbf{r}_n' - \mathbf{R}_\alpha), \quad (9)$$

где \mathbf{R}_α и \mathbf{r}_n — радиусы-векторы α -го ядра и нейтрона, соответственно. При отыскании $\text{Re } \hat{t}_\alpha$ с помощью уравнения (8) можно ограничиться одной итерацией, т. е. приближенно положить *

$$\text{Re } \hat{t}_\alpha \approx \text{Re } V_\alpha \sim \text{Re } b_\alpha. \quad (10)$$

Поправка к этому результату по порядку величины составляет $r_n/0,1a \leq 10^{-3}$, (r_n — радиус ядра; a — среднее расстояние между ядрами рассеивающего вещества (см., например, [23]).

Величина $\text{Im } \hat{t}_\alpha$ содержит вклад от $\text{Im } V_\alpha$, пропорциональный $\text{Im } b_\alpha$ и, соответственно, поперечному сечению захвата нейтрона α -ым ядром. Это поперечное сечение не зависит от химической связи поглощающего ядра. Чтобы учесть вклад неупругого рассеяния в $\text{Im } \hat{t}_\alpha$, сделаем две итерации уравнения (8) и в результате получим

$$\hat{t}_\alpha \approx V_\alpha + V_\alpha [(1 - \Lambda_i)/d] V_\alpha \quad (11)$$

и, соответственно,

$$\text{Im } \hat{t}_\alpha \approx \text{Im } V_\alpha + \text{Im} (V_\alpha [(1 - \Lambda_i)/d] V_\alpha). \quad (12)$$

Рассмотрим второе слагаемое в (12), которое в основном обусловлено неупругим рассеянием нейтронов. В приближении псевдопо-

* Применение теории возмущений с псевдопотенциалом (9) в качестве возмущения, строго говоря, уже во втором порядке должно приводить к сингулярным выражениям. Однако усреднение по равновесному распределению состояний рассеивателя эффективно размывает область взаимодействия и устраняет сингулярность.

тенциала (9) имеем

$$\begin{aligned} & \langle i | \text{Im} (\hat{t}_\alpha - V_\alpha) | i \rangle = \\ & = (2\pi\hbar^2 b/m)^2 \text{Im} \langle i | \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_\alpha) [(1 - \Lambda_i)/d] \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_\alpha) | i \rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

Отбросим в (13) мнимую часть b , поскольку ее учет выходит за пределы точности нашего расчета.

В импульсном представлении по координатам нейтрона, подставляя явное выражение для пропагатора $1/d$ и вводя полный набор промежуточных состояний системы, получаем для матричных элементов $\hat{t}_\alpha - V_\alpha$ следующее выражение:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha - V_\alpha | \mathbf{q} \rangle & = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{\gamma \neq i} \langle i | \exp[-i\mathbf{R}_\alpha(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] | \gamma \rangle \times \\ & \times \left[E_i + \varepsilon_i + i\eta - E_\gamma - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right]^{-1} \langle \gamma | \exp[i\mathbf{R}_\alpha(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь E_i и E_γ — энергия рассеивающей системы в начальном и промежуточных состояниях; \mathbf{k}_i и $\varepsilon_i = \hbar^2 k_i^2/2m$ — волновой вектор и энергия падающего нейтрона. Принимая во внимание известное соотношение $1/(x + i\eta) = \mathcal{P}/x - i\pi\delta(x)$ и выделяя в явном виде слагаемое, соответствующее промежуточному состоянию $|i\rangle$, имеем

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha - V_\alpha | \mathbf{q} \rangle & = -\pi \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \times \\ & \times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left\{ \sum_{\gamma} \langle i | \exp[-i\mathbf{R}_\alpha(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] | \gamma \rangle \delta \left[E_i + \varepsilon_i - E_\gamma - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] \times \right. \\ & \times \langle \gamma | \exp[i\mathbf{R}_\alpha(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle - \delta \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varepsilon_i \right] \langle i | \exp[-i\mathbf{R}_\alpha(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] | i \rangle \times \\ & \left. \times \langle i | \exp[i\mathbf{R}_\alpha(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Можно выполнить суммирование по промежуточным состояниям рассеивателя. В результате $\text{Im} \langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha - V_\alpha | \mathbf{q} \rangle$ удастся выразить через временную корреляционную функцию [20, 21]:

$$\chi_{\alpha\beta}^{(i)}(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \langle i | \exp[-i\hat{\mathbf{R}}_\alpha(t)(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] \exp[i\hat{\mathbf{R}}_\beta(0)(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle, \quad (16)$$

а именно:

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha - V_\alpha | \mathbf{q} \rangle & = -\pi \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \times \\ & \times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \chi_{\alpha\alpha}^{(i)}(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k}) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{\hbar} \delta(\omega) \langle i | \exp[-i\hat{\mathbf{R}}_\alpha(0)(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] | i \rangle \langle i | \exp[i\hat{\mathbf{R}}_\alpha(0)(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь

$$\hat{R}_j(t) = \exp [i\hat{H}t/\hbar] \hat{R}_j(0) \exp [-i\hat{H}t/\hbar]$$

— оператор координаты j -го рассеивающего ядра, записанный в гейзенберговском представлении, и

$$\omega = \hbar k_i^2/2m - \hbar k^2/2m.$$

Усредним (17) по равновесному распределению состояний рассеивающей системы и получим

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha - V_\alpha | \mathbf{q} \rangle \rangle_T &= -\pi \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \times \\ &\times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \chi_{\alpha\alpha}^T(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k}) - \right. \\ &- \frac{1}{\hbar} \delta(\omega) \langle \langle i | \exp[-i\hat{R}_\alpha(0)(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] | i \rangle \rangle \times \\ &\left. \times \langle \langle i | \exp[i\hat{R}_\alpha(0)(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle \rangle_T, \right. \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k}) &= \\ &= \langle \langle i | \exp[-i\hat{R}_\alpha(t)(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] \exp[i\hat{R}_\beta(0)(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle \rangle_T. \end{aligned} \quad (19)$$

Принимая во внимание, что (см., например, [20, 21])

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k}) &= \langle \langle i | \exp[-i\hat{R}_\alpha(0)(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] | i \rangle \rangle_T \times \\ &\times \langle \langle i | \exp[i\hat{R}_\beta(0)(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle \rangle_T, \end{aligned} \quad (20)$$

запишем выражение (18) в более компактной форме*

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha - V_\alpha | \mathbf{q} \rangle \rangle_T &= \\ &= -\pi \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \times \right. \\ &\left. \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) [\chi_{\alpha\alpha}^T(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k}) - \lim_{t \rightarrow \infty} \chi_{\alpha\alpha}^T(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k})] \right\}. \end{aligned} \quad (21)$$

Функция $\chi_{\alpha\beta}^T$ при $\mathbf{q}' = \mathbf{q} = \mathbf{k}_i$ и $\mathbf{k} = \mathbf{k}_f$ определяет дважды дифференциальное сечение неупругого рассеяния нейтронов на систе-

* В случае макроскопических систем, когда отсутствуют выделенные степени свободы, $\langle \langle i | \hat{A} | i \rangle \langle i | \hat{B} | i \rangle \rangle_T \approx \langle \langle \hat{A} \rangle \rangle_T \langle \langle \hat{B} \rangle \rangle_T$.

ме N одноизотопных бесспиновых ядер [20, 21]

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon_f} \right]^{\text{inel}} = \frac{b^2}{2\pi\hbar} \frac{k_f}{k_i} \sum_{\alpha, \beta=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \times \\ \times [\chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f) - \lim_{t \rightarrow \infty} \chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f)]. \quad (22)$$

Здесь $\varepsilon_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}$ и \mathbf{k}_f — энергия и волновой вектор рассеянного нейтрона соответственно. В некогерентном приближении ($\alpha = \beta$) полное сечение неупругого рассеяния, отнесенное к одному ядру, имеет вид

$$[\sigma_{\text{tot}}^{\text{inel}}(\varepsilon_i)]^{\text{incoh}} = \frac{\hbar^2}{mk_i} b^2 \times \\ \times \int d\mathbf{k}_f \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) [\chi_{\alpha\alpha}^T(t; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f) - \right. \\ \left. - \lim_{t \rightarrow \infty} \chi_{\alpha\alpha}^T(t; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f)] \right\}. \quad (23)$$

Полагая в (21) $\mathbf{q} = \mathbf{q}' = \mathbf{k}_i$ и $\mathbf{k} = \mathbf{k}_f$, нетрудно показать, что

$$\langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha - V_\alpha | \mathbf{q} \rangle \rangle_T = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \left[\frac{k_i}{4\pi} (\sigma_{\text{tot}}^{\text{inel}}(\varepsilon_i))^{\text{incoh}} \right]. \quad (24)$$

Таким образом, мнимая часть матричного элемента $\langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha - V_\alpha | \mathbf{q} \rangle$, вычисленного на «массовой» поверхности, т. е. при $\mathbf{q}' = \mathbf{q} = \mathbf{k}_i$, однозначно определяется полным сечением неупругого рассеяния, вычисленным в некогерентном приближении («оптическая теорема»). Несколько забегая вперед, отметим, что переход к пространственно-однородной рассеивающей среде налагает ограничение на область изменения волновых векторов в матричных элементах: $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$. Если ограничиться рассмотрением операторов, локальных в координатном представлении относительно переменных нейтрона, то можно положить $\mathbf{q}' = \mathbf{q} = 0$ и в области очень низких энергий нейтрона ($\mathbf{k}_i = 0$) автоматически выполняется условие вычисления матричного элемента на массовой поверхности. Это означает, что при выполнении таких требований справедлива оптическая теорема в форме (24). Принимая во внимание, что

$$\langle \mathbf{q}' | \text{Im} V_\alpha | \mathbf{q} \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{k_i}{4\pi} \sigma_{\text{abs}} \quad (25)$$

$$(\mathbf{q}' = \mathbf{q} = \mathbf{k}_i),$$

запишем это соотношение в иной форме:

$$\text{Im} \langle \langle \mathbf{q}' | \hat{t}_\alpha | \mathbf{q} \rangle \rangle_T = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{k_i}{4\pi} \{ [\sigma_{\text{tot}}^{\text{inel}}(\varepsilon_i)]^{\text{incoh}} + \sigma_{\text{abs}}(\varepsilon_i) \} \\ (\mathbf{q} = \mathbf{q}' = \mathbf{k}_i). \quad (26)$$

В первом приближении теории многократного рассеяния имеем

$$U_{01} = \sum_{\alpha=1}^N \langle i, | \hat{t}_\alpha | i, \rangle. \quad (27)$$

Учитывая соотношения (9), (10) и (26), запишем в координатном представлении

$$\langle \mathbf{r}'_n | U_{01} | \mathbf{r}_n \rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{\alpha=1}^N \tilde{b}_\alpha \langle i | \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_\alpha) | i \rangle \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'_n). \quad (28)$$

Здесь

$$\tilde{b}_\alpha = \text{Re } b_\alpha + \frac{m}{2\pi\hbar^2} i \text{Im} \langle \mathbf{k}_i | \hat{t}_\alpha | \mathbf{k}_i \rangle = \text{Re } b_\alpha - i \frac{k_i}{4\pi} (\sigma_{\text{inel}}^{\text{incoh}} + \sigma_{\text{abs}}). \quad (29)$$

Таким образом, расчет $\text{Im } U_0$ в первом приближении теории многократного рассеяния учитывает вклад неупругого рассеяния в некогерентном приближении. Соответственно в импульсном представлении из (28) следует

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}' | U_{01} | \mathbf{q} \rangle &= \int \int d\mathbf{r}_n d\mathbf{r}'_n \exp[-i\mathbf{q}'\mathbf{r}'_n] \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_n) \langle \mathbf{r}'_n | U_{01} | \mathbf{r}_n \rangle = \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_{\alpha=1}^N \tilde{b}_\alpha \langle i | \exp[i(\mathbf{q} - \mathbf{q}')\mathbf{R}_\alpha] | i \rangle. \end{aligned} \quad (30)$$

Для пространственно-однородной среды выражения (28) и (30) необходимо усреднить по конфигурациям рассеивающих ядер. В результате получим

$$\overline{\langle \mathbf{r}'_n | U_{01} | \mathbf{r}_n \rangle} = (2\pi\hbar^2/m) \tilde{b} (N/V) \delta(\mathbf{r}'_n - \mathbf{r}_n) \quad (31)$$

и

$$\overline{\langle \mathbf{q}' | U_{01} | \mathbf{q} \rangle} = (2\pi\hbar^2/m) \tilde{b} (N/V) (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'). \quad (32)$$

Здесь V — объем рассеивающей системы, $\tilde{b} = \sum_{\alpha=1}^N \tilde{b}_\alpha / N$. Черта означает усреднение, т. е.

$$\overline{f(\mathbf{R}_\alpha)} = \int_V f(\mathbf{R}_\alpha) d\mathbf{R}_\alpha / V. \quad (33)$$

Усреднение по конфигурациям рассеивающих ядер, т. е. по положениям равновесия, представляет собой независимую операцию только в случае кристалла. В случае газообразной мишени или жидкого рассеивателя уже вычисление матричного элемента $\langle i | \dots | i \rangle$ приводит к выражениям, зависящим лишь от разности

пространственных координат. Отметим, что выполненное нами усреднение оптического потенциала вносит погрешность в волновую функцию нейтрона. Будем понимать под волновой функцией оптической модели когерентную нейтронную волну, т. е. волновую функцию, усредненную по конфигурациям рассеивающих ядер (см., например, [24]). Рассмотрение усредненного оптического потенциала, очевидно, означает пренебрежение его флуктуациями, обусловленными неоднородностью рассеивающей среды и, в частности, ее микроскопической структурой.

Перейдем теперь к вычислению поправки второго порядка оптического потенциала. Рассмотрим второе слагаемое в (5):

$$U_{02} = \sum_{\alpha \neq \beta=1}^N \left\langle i \left| \hat{t}_\alpha \frac{1-\Lambda_i}{d} \hat{t}_\beta \right| i \right\rangle. \quad (34)$$

Если спины рассеивающих ядер некоррелированы, то, принимая во внимание соотношения (9), (10) и (29), запишем

$$U_{02} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \sum_{\alpha \neq \beta=1}^N \tilde{b}_\alpha \tilde{b}_\beta \left\langle i \left| \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_\alpha) \frac{1-\Lambda_i}{d} \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_\beta) \right| i \right\rangle. \quad (35)$$

Для простоты будем полагать, что все рассеивающие ядра одинаковы, т. е. $\tilde{b}_\alpha = \tilde{b}_\beta = \tilde{b}$. Кроме того, в выражении для U_{02} отбросим мнимую часть \tilde{b} . Учет $\text{Im } \tilde{b}$, как легко видеть, выходит за пределы точности нашего расчета.

В импульсном представлении по координатам нейтрона имеем

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}' | U_{02} | \mathbf{q} \rangle &= \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \sum_{\alpha \neq \beta=1}^N \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_{\gamma \neq i} \langle i | \exp[-i\mathbf{R}_\alpha(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] | \gamma \rangle \times \\ &\times \left[E_i + \varepsilon_i + i\eta - E_\gamma - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right]^{-1} \langle \gamma | \exp[i\mathbf{R}_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{k})] | i \rangle. \quad (36) \end{aligned}$$

С помощью проведенных выше выкладок из (36) можно получить следующее соотношение:

$$\begin{aligned} \langle \text{Im } \langle \mathbf{q}' | U_{02} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T &= -\pi \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \sum_{\alpha \neq \beta=1}^N \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) [\chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k}) - \lim_{t \rightarrow \infty} \chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{q}', \mathbf{q}, \mathbf{k})] \right\}. \quad (37) \end{aligned}$$

Функция $\chi_{\alpha\beta}^T$ определена формулой (19). Полагая в (37) $\mathbf{q}' = \mathbf{q} = \mathbf{k}_i$ и снимая ограничение на суммирование по α и β (тем самым мы

включаем в рассмотрение часть $\text{Im } U_{01}$, обусловленную неупругим некогерентным рассеянием), имеем

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{k}_i | U_{02}^{\text{coh}} | \mathbf{k}_i \rangle \rangle_T = & -\pi \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \times \\ & \times \sum_{\alpha, \beta=1}^N \int \frac{d\mathbf{k}_f}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) [\chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f) - \right. \\ & \left. - \lim_{t \rightarrow \infty} \chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f)] \right\} = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} N \left[\frac{k_i}{4\pi} \frac{\sigma_{\text{tot}}^{\text{inel}}(\varepsilon_i)}{N} \right]. \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}}^{\text{inel}}(\varepsilon_i) = & \frac{\hbar^2}{mk_i} b^2 \int d\mathbf{k}_f \sum_{\alpha, \beta=1}^N \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \times \right. \\ & \left. \times [\chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f) - \lim_{t \rightarrow \infty} \chi_{\alpha\beta}^T(t; \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f)] \right\}. \end{aligned} \quad (39)$$

Соотношения (38), (39) являются обобщением рассмотренной выше оптической теоремы (24) на случай когерентно рассеивающей системы N ядер. Отметим, что (38), (39) имеют место и в случае локального оптического потенциала ($\mathbf{q}' = \mathbf{q} = 0$) в пространственно-однородной среде для нейтронов очень низких энергий ($\mathbf{k}_i = 0$), когда выполнено условие вычисления матричного элемента на массовой поверхности: $\mathbf{q}' = \mathbf{q} = \mathbf{k}_i$.

Рассмотрим практически интересный случай гармонического кристалла*. В рамках этой модели с помощью стандартной процедуры [20, 21] выражение для $\langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T$ можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T = & -\frac{\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \sum_{\alpha \neq \beta=1}^N \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \exp[-i\mathbf{R}_{\alpha 0}(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] \times \\ & \times \exp[i\mathbf{R}_{\beta 0}(\mathbf{q} - \mathbf{k})] \exp[-W(\mathbf{q}' - \mathbf{k})] \exp[-W(\mathbf{q} - \mathbf{k})] \times \\ & \times \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) [K_{\alpha\beta}(\mathbf{q}' - \mathbf{k}, \mathbf{q} - \mathbf{k}; t) - 1]. \end{aligned} \quad (40)$$

* Ради определенности все формулы будут записаны для вклада в мнимую часть оптического потенциала интерференционного рассеяния $\text{Im } U_{02}$. Очевидно, что, полагая $\alpha = \beta$ в этих выражениях, мы должны придти к результату расчета в первом приближении. Снимая ограничение на суммирование по α и β , получаем $\text{Im} (U_{01} + U_{02})$.

Здесь

$$W(\mathbf{q}-\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \sum_j (2\langle n_j \rangle_T + 1) |(\mathbf{q}-\mathbf{k}) S_\alpha^j|^2; \quad (41)$$

$$\begin{aligned} & K_{\alpha\beta}(\mathbf{q}'-\mathbf{k}, \mathbf{q}-\mathbf{k}; t) = \\ & = \exp \left\{ \sum_j [(\langle n_j \rangle + 1) ((\mathbf{q}'-\mathbf{k}) S_\alpha^j) ((\mathbf{q}-\mathbf{k}) S_\beta^{j*}) \exp(-i\omega_j t) + \right. \\ & \quad \left. + \langle n_j \rangle_T ((\mathbf{q}'-\mathbf{k}) S_\alpha^{j*}) ((\mathbf{q}-\mathbf{k}) S_\beta^j) \exp(i\omega_j t) \right\}, \quad (42) \end{aligned}$$

$$S_\alpha^j = i \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_j}} \mathbf{e}_{j\alpha} \exp(i\mathbf{f}_j \mathbf{R}_{\alpha 0}). \quad (43)$$

Здесь $\mathbf{R}_{\alpha 0}$ — радиус-вектор положения равновесия α -го ядра; j — индекс нормального колебания кристалла; ω_j , \mathbf{f}_j и \mathbf{e}_j — соответственно частота, волновой вектор и единичный вектор поляризации j -го колебания; $\langle n_j \rangle_T = \{\exp([\hbar\omega_j/(k_B T)] - 1)\}^{-1}$ — среднее число фононов j -го колебания при температуре T ; k_B — постоянная Больцмана; M — масса рассеивающего ядра (предполагается, что все ядра одинаковы).

Разложение экспоненциальной функции в (42) в степенной ряд приводит к представлению $K_{\alpha\beta}$ в виде ряда, каждое из слагаемых которого описывает процесс рассеяния с возбуждением или поглощением определенного числа фононов. Ограничимся анализом вклада однофононных процессов. В этом случае имеем

$$\begin{aligned} & \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T = -\frac{\pi}{\hbar} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right)^2 \times \\ & \times \sum_{\alpha \neq \beta=1}^N \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \exp[-i\mathbf{R}_{\alpha 0}(\mathbf{q}'-\mathbf{k})] \exp[i\mathbf{R}_{\beta 0}(\mathbf{q}-\mathbf{k})] \times \\ & \times \sum_j \{ ((\mathbf{q}'-\mathbf{k}) S_\alpha^j) ((\mathbf{q}-\mathbf{k}) S_\beta^{j*}) [\langle n_j \rangle_T + 1] \delta(\omega - \omega_j) + \\ & \quad + ((\mathbf{q}'-\mathbf{k}) S_\alpha^{j*}) ((\mathbf{q}-\mathbf{k}) S_\beta^j) \langle n_j \rangle_T \delta(\omega + \omega_j) \} \times \\ & \times \exp[-W(\mathbf{q}'-\mathbf{k}) - W(\mathbf{q}-\mathbf{k})]. \end{aligned}$$

В случае пространственно-однородной среды нетрудно выполнить усреднение этой формулы по распределению $\mathbf{R}_{\beta 0}$. Учитывая соотношение

$$\frac{1}{NV_{\text{яч}}} \int d\mathbf{R}_{\beta 0} \exp[i\mathbf{R}_{\beta 0}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')] = [(2\pi)^3/(NV_{\text{яч}})] \delta(\mathbf{q}-\mathbf{q}'),$$

где $V_{\text{яч}}$ — объем элементарной ячейки кристалла, и используя явный вид амплитуд нормальных колебаний S_{α}^j (43), имеем

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T &= -\pi \frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{NV_{\text{яч}}} \frac{b^2}{2NM} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \times \\ &\times \sum_{\alpha \neq \beta=1}^N \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \exp [i(\mathbf{R}_{\alpha 0} - \mathbf{R}_{\beta 0})(\mathbf{k} - \mathbf{q})] \times \\ &\times \sum_j \frac{|\langle \mathbf{q} - \mathbf{k} | \mathbf{e}_j \rangle|^2}{\omega_j} \langle n_j \rangle_T \exp [-if_j(\mathbf{R}_{\alpha 0} - \mathbf{R}_{\beta 0})] \times \\ &\times \exp [-2W(\mathbf{q} - \mathbf{k})] \delta \left[\frac{\hbar k_i^2}{2m} - \frac{\hbar k^2}{2m} + \omega_j \right]. \end{aligned} \quad (44)$$

В (44) опущено слагаемое, которое описывает процессы с испусканием фонона. В рассматриваемой области энергий нейтронов это слагаемое мало. Как известно [20, 21]

$$\sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \exp [i\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{R}_{\alpha 0} - \mathbf{R}_{\beta 0})] = \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{яч}}} N \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\boldsymbol{\kappa} - 2\pi\boldsymbol{\tau}). \quad (45)$$

Здесь $\boldsymbol{\tau}$ — вектор обратной решетки. Принимая во внимание это соотношение, получаем

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T &= -\pi \frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{NV_{\text{яч}}} \times \\ &\times \frac{b^2}{2M} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_j \frac{|\langle \mathbf{q} - \mathbf{k} | \mathbf{e}_j \rangle|^2}{\omega_j} \langle n_j \rangle_T \times \\ &\times \delta \left[\frac{\hbar k_i^2}{2m} - \frac{\hbar k^2}{2m} + \omega_j \right] \exp [-2W(\mathbf{q} - \mathbf{k})] \times \\ &\times \frac{(2\pi)^3}{V_{\text{яч}}} \left[\sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta[\mathbf{k} - \mathbf{q} - \mathbf{f}_j - 2\pi\boldsymbol{\tau}] - \frac{V_{\text{яч}}}{(2\pi)^3} \right]. \end{aligned} \quad (46)$$

Заметим, что суммирование по всем нормальным колебаниям решетки можно заменить следующей операцией:

$$\sum_{j=1}^N \dots = \sum_{s=1}^3 \frac{V_{\text{яч}} N}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{f} \dots$$

Замена суммирования по векторам обратной решетки интегрированием приводит к гашению интерференционных эффектов. Действительно, полагая $\sum_{\boldsymbol{\tau}} \dots = V_{\text{яч}} \int d\boldsymbol{\tau} \dots$, имеем $\langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T = 0$. Этот результат является следствием нашего выбора разложения (5), когда вклад неупругого рассеяния в некогерентном приближении был включен в оптический потенциал U_{01} . Опуская

второе слагаемое в квадратных скобках (46), приходим к выражению для мнимой части оптического потенциала $\langle\langle \mathbf{q}' | U_{02}^{\text{coh}} | \mathbf{q} \rangle\rangle_T$, вычисленному с учетом когерентности неупругого рассеяния нейтронов. Присутствие δ -функций от волновых векторов позволяет выполнить интегрирование по \mathbf{k} . Принимая во внимание, что в рассматриваемой области энергий нейтронов можно положить $k_i = 0$, имеем

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02}^{\text{coh}} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T = & -\pi \frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{NV_{\text{яч}}} \frac{Nb^2}{2M} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \times \\ & \times \sum_{s=1}^3 \sum_{\tau} \int \frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3} \frac{\exp[-2W(\mathbf{f} + 2\pi\tau)]}{\omega_s(\mathbf{f})} \delta \left[\omega_s(\mathbf{f}) - \frac{\hbar(\mathbf{f} + 2\pi\tau + \mathbf{q})^2}{2m} \right] \times \\ & \times \langle n(\omega_s) \rangle_T |(\mathbf{f} + 2\pi\tau) \mathbf{e}_s|^2. \end{aligned} \quad (47)$$

Пренебрежение нелокальностью $\text{Im} U_{02}^{\text{coh}}$ в координатном представлении соответствует приближению $\mathbf{q} = 0$ в (47). В этом приближении имеем

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02}^{\text{coh}} | \mathbf{q} \rangle \rangle_{\text{лок. } T} = & -\frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{NV_{\text{яч}}} \times \\ & \times Nb^2 \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{m}{M} \frac{1}{2\pi} \sum_{s=1}^3 \sum_{\tau} \int d\mathbf{f} \exp[-2W(\mathbf{f} + 2\pi\tau)] \langle n(\omega_s) \rangle_T \times \\ & \times \frac{|(\mathbf{f} + 2\pi\tau) \mathbf{e}_s|^2}{(\mathbf{f} + 2\pi\tau)^2} \delta \left[\frac{2m\omega_s(\mathbf{f})}{\hbar} - (\mathbf{f} + 2\pi\tau)^2 \right]. \end{aligned} \quad (48)$$

Учитывая, что поперечное сечение когерентного неупругого рассеяния с поглощением фонона определяется выражением [20, 21, 25]

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{tot}}^{\text{coh}} = & \frac{4\pi b^2}{k_i} \frac{1}{2\pi} \frac{m}{M} \sum_{s=1}^3 \sum_{\tau} \int d\mathbf{q} \exp[-2W(\mathbf{q} + 2\pi\tau)] \times \\ & \times \langle n(\omega_s) \rangle_T \frac{(\mathbf{e}_s(\mathbf{q} + 2\pi\tau))^2}{(\mathbf{q} + 2\pi\tau)^2} \delta \left[(\mathbf{q} + 2\pi\tau)^2 - \frac{2m\omega_s(\mathbf{q})}{\hbar} \right], \end{aligned} \quad (49)$$

нетрудно получить следующий результат [см. также (38)]:

$$\langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{02}^{\text{coh}} | \mathbf{q} \rangle \rangle_{\text{лок. } T} = -\frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{NV_{\text{яч}}} N \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{k_i \sigma_{\text{tot}}^{\text{coh}}}{4\pi}; \mathbf{k} \rightarrow 0. \quad (50)$$

Поперечное сечение σ^{coh} отнесено к одному ядру. В координатном представлении имеем

$$\langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{02}^{\text{coh}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_{\text{лок. } T} = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{2\pi\hbar^2}{m} \langle \rho \rangle \frac{k_i \sigma_{\text{tot}}^{\text{coh}}}{4\pi}. \quad (51)$$

Соотношения (50) и (51) служат обоснованием применения оптической теоремы для вычисления мнимой части оптического потенциала

ла. Запишем (51) при $\sigma_{\text{abs}} = 0$ в следующем виде:

$$\langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{02}^{\text{coh}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_{\text{лок. T}} = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} \langle \rho \rangle \frac{k_i \sigma_{\text{inel}}^{\text{incoh}}}{4\pi} \left[1 + \frac{\sigma_{\text{interf}}}{\sigma_{\text{incoh}}} \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (52)$$

Как уже было отмечено во введении, интерференционная поправка к полному поперечному сечению неупругого рассеяния в области очень низких энергий не превышает 10—20% значения поперечного сечения, вычисленного в некогерентном приближении [14].

Соотношения (50) — (52) были получены в предположении, что мнимая часть оптического потенциала представляет собой локальный оператор в координатном представлении. Вообще говоря, $\text{Im} U_{02}^{\text{coh}}$ можно вычислить, не прибегая к этому предположению, непосредственно с помощью формулы (47). Однако такой путь вычисления связан с довольно трудоемкими расчетами сумм по векторам решетки, которые определяют интерференционную часть, существенно зависят от структуры кристалла и меняются нерегулярно от вещества к веществу. Поэтому, учитывая относительную малость вклада интерференционного рассеяния в $\text{Im} U_{02}^{\text{coh}}$, ниже ограничимся только некогерентным приближением при рассмотрении вопроса о влиянии нелокальности оптического потенциала на прохождение когерентной нейтронной волны через вещество.

Выкладки, аналогичные проведенным выше, показывают, что интересующий нас вклад в мнимую часть оптического потенциала [за счет второго слагаемого в формуле (12)] имеет вид

$$\langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T = -\pi \frac{(2\pi)^3 \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{NV_{\text{ЯЧ}}} \frac{b^2}{2M} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \times \\ \times \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \sum_j \frac{|(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \mathbf{e}_j|^2}{\omega_j} \langle n_j \rangle_T \delta \left[\frac{\hbar k_i^2}{2m} - \frac{\hbar k^2}{2m} + \omega_j \right]. \quad (53)$$

Напомним, что здесь b обозначает действительную часть длины когерентного рассеяния.

В этой формуле для простоты множитель $\exp[-2W]$ опущен, что верно в случае малых переданных импульсов. В координатном представлении соответственно имеем

$$\langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{q}' \exp[i\mathbf{q}'\mathbf{r}'] \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \times \\ \times \langle \text{Im} \langle \mathbf{q}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{q} \rangle \rangle_T. \quad (54)$$

Найдем эту величину в дебаевском приближении для кристалла с кубической симметрией, когда

$$\sum_j (\kappa \mathbf{e}_j)^2 f(\omega_j) = \frac{\kappa^2}{3} \int g(\Omega) d\Omega f(\Omega) \quad (55)$$

и спектр частот нормальных колебаний

$$g(\Omega) = \begin{cases} \frac{9N\Omega^2}{\Omega_{\text{макс}}^3} & \Omega \leq \Omega_{\text{макс}}; \\ 0 & \Omega > \Omega_{\text{макс}}. \end{cases} \quad (56)$$

Выполняя интегрирования, получаем

$$\begin{aligned} \langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T &= -\frac{\pi}{V_{\text{яч}}} \frac{b^2}{2M} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \times \\ &\times \frac{3}{\Omega_{\text{макс}}^3} \int \frac{d\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \mathbf{x}^2 \exp[i\mathbf{x}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] \times \\ &\times \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\hbar k_{\text{макс}}} k dk \frac{\sin k|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|} \left(\frac{\hbar k^2}{2m} - \frac{\hbar k_i^2}{2m} \right) \times \\ &\times \left[\exp \left[\frac{\hbar^2}{2mk_{\text{B}}T} (k^2 - k_i^2) \right] - 1 \right]^{-1}; \\ k_{\text{макс}} &= \left(\frac{2m}{\hbar} \Omega_{\text{макс}} + k_i^2 \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (57)$$

В области относительно низких температур, когда $\hbar^2 k_{\text{макс}}^2 / (2mk_{\text{B}}T) \gg 1$, можно распространить интегрирование по k до бесконечности. Полученные при этом интегралы сводятся к табличным. В результате имеем

$$\langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T = \frac{\pi}{V_{\text{яч}}} \frac{b^2}{2M} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \frac{1}{2\pi^2} \delta^2(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) J(\mathbf{r}'-\mathbf{r}), \quad (58)$$

где

$$\begin{aligned} J(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &= \frac{3\sqrt{2\pi}}{4} \frac{\hbar}{m\Omega_{\text{макс}}^3} \left[\frac{mk_{\text{B}}T}{\hbar^2} \right]^{7/2} (\mathbf{r}'-\mathbf{r})^2 \times \\ &\times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{7/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{2\hbar^2 n} mk_{\text{B}}T \right] - \frac{9\sqrt{2\pi}}{4} \frac{\hbar}{m\Omega_{\text{макс}}^3} \left[\frac{mk_{\text{B}}T}{\hbar^2} \right]^{5/2} \times \\ &\times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{5/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}{2\hbar^2 n} mk_{\text{B}}T \right]. \end{aligned} \quad (59)$$

При вычислении (59) было положено $k_i = 0$. Погрешность этого приближения $\sim \hbar^2 k_i^2 / (2mk_{\text{B}}T) = \varepsilon_i / (k_{\text{B}}T) \ll 1$.

Величина $\text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T$ входит в уравнение Шредингера в качестве ядра интегрального слагаемого, т. е. в уравнении для когерентной нейтронной волны содержится интеграл $i \int d\mathbf{r} \langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T \langle \psi_c(\mathbf{r}) \rangle$, соответствующий нелокальному потенциалу. Подстановка в этот интеграл выражений (58)

и (59) и выполнение интегрирования приводят к результату:

$$\begin{aligned} & i \int d\mathbf{r} \langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T \langle \psi_c(\mathbf{r}) \rangle = \\ & = -i \frac{\pi}{V_{\text{яч}}} \frac{b^2}{2M} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \frac{3\sqrt{2\pi}}{4} \frac{\hbar}{m\Omega_{\text{макс}}^3} \frac{1}{2\pi^2} \left[\frac{mk_{\text{B}}T}{\hbar^2} \right]^{5/2} \times \\ & \times \left[\frac{15mk_{\text{B}}T}{\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{7/2}} \langle \psi_c(\mathbf{r}') \rangle - 3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{5/2}} \nabla_{\mathbf{r}'}^2 \langle \psi_c(\mathbf{r}') \rangle \right]. \quad (60) \end{aligned}$$

Второе слагаемое в (60) обусловлено нелокальностью оптического потенциала. Оно составляет от первого долю порядка $\hbar^2 k_i^2 / (2mk_{\text{B}}T) \ll 1$. В области энергий нейтронов $\varepsilon > U_R$ эта добавка имеет тот же знак, что и первое слагаемое, а при $\varepsilon < U_R$ — противоположный. Оставляя только первое слагаемое в (60), запишем:

$$\begin{aligned} & i \int d\mathbf{r} \langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T \langle \psi_c(\mathbf{r}) \rangle = \\ & = -i \langle \psi_c(\mathbf{r}) \rangle \frac{45}{4} \pi \frac{m}{M} \frac{b^2}{V_{\text{яч}}} \left(\frac{k_{\text{B}}T}{\hbar\Omega_{\text{макс}}} \right)^3 \hbar \sqrt{\frac{2\pi k_{\text{B}}T}{m}} \zeta(7/2), \quad (61) \end{aligned}$$

где $\zeta(7/2)$ — дзета-функция Римана.

Принимая во внимание, что поперечное сечение рассеяния нейтрона с поглощением одного фонона, вычисленное в некогерентном приближении, имеет вид [25]

$$\sigma_{\text{inel}}^{\text{incoh}} = \frac{45}{2} \pi \zeta(7/2) \frac{m}{M} \frac{b^2}{v_i} \sqrt{\frac{2\pi k_{\text{B}}T}{m}} \left(\frac{k_{\text{B}}T}{\hbar\Omega_{\text{макс}}} \right)^3, \quad (62)$$

где v_i — скорость падающих нейтронов, имеем из (61)

$$\frac{1}{\langle \psi_c(\mathbf{r}) \rangle} \int d\mathbf{r}' \langle \text{Im} \langle \mathbf{r}' | U_{01}^{\text{inel}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T \langle \psi_c(\mathbf{r}') \rangle = -\frac{\sigma_{\text{inel}}^{\text{incoh}}}{2V_{\text{яч}}} \hbar v_i. \quad (63)$$

Этот результат завершает исследование области применимости (4). Отметим, что пространственный масштаб нелокальности мнимой части оптического потенциала, обусловленной интерференционным рассеянием, определяется длиной свободного пробега фонона Λ . При достаточно низких температурах Λ может быть сравнимой или даже превышать длину волны ультрахолодных нейтронов.

В качестве модели рассеивателя выше был рассмотрен идеальный гармонический кристалл. Обсудим теперь кратко, как влияет неидеальность среды на спектр возбуждений рассеивающей системы и соответственно на неупругое рассеяние нейтронов. Эффект слабого ангармонизма колебаний рассеивающих ядер в решетке можно приближенно учесть, заменив δ -функции от энергии (или от $\omega = E/\hbar$) в (44) и в формулах, вытекающих из нее, некоторыми «размазанными» функциями с эффективной шириной, обратно

пропорциональной времени жизни фонона. Очевидно, это приводит лишь к малым поправкам к поперечному сечению рассеяния с поглощением фонона и к мнимой части оптического потенциала: мнимая часть оптического потенциала определяется интегралом по спектру частот колебаний и тонкие черты функции распределения частот в данном случае не существенны*. Наличие в кристалле микроскопических дефектов в практически интересных случаях также не меняет существенно оценку поперечного сечения неупругого рассеяния и $\text{Im} \langle U_0 \rangle$. Например, присутствие в кристаллической решетке дислокаций уменьшает число степеней свободы, связанных с колебаниями атомов. Соответственно эффективная дебаевская температура кристалла уменьшается на [26]

$$\Delta \Theta_D \approx -\rho_D a^2 \Theta_D, \quad (64)$$

где ρ_D — плотность дислокаций; a — постоянная решетки. При $\rho_D \approx 10^9 - 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $a \approx 10^{-8} \text{ см}$ имеем

$$|\Delta \Theta_D| / \Theta_D \approx 10^{-7} \div 10^{-6}. \quad (65)$$

Поскольку [25] при $k_B \Theta_D \gg k_B T \gg \epsilon_n$ поперечное сечение рассеяния с поглощением фонона

$$\sigma_{(-)}^{(1)} \sim 4\pi (\text{Re } b)^2 (k_B T / \epsilon_n)^{1/2} \frac{m}{M} (T / \Theta_D)^3, \quad (66)$$

то уменьшение эффективной дебаевской температуры увеличивает поперечное сечение неупругого рассеяния и мнимую часть оптического потенциала на

$$\Delta \text{Im} \langle U_0 \rangle / \text{Im} \langle U_0 \rangle \sim \Delta \sigma_{(-)}^{(1)} / \sigma_{(-)}^{(1)} \leq 3 \cdot 10^{-6}. \quad (67)$$

Большее изменение поперечного сечения неупругого рассеяния обусловлено непосредственно вкладом колебаний дислокаций. Действительно, дислокационные степени свободы приводят к увеличению фазового объема, приходящегося на низкочастотные колебания кристалла. Если принять, что энергия кванта колебаний дислокаций $\hbar \omega_0$ составляет $10^{-6} - 10^{-4} \text{ эв}$ [26], то поправка за счет неидеальности кристалла к поперечному сечению неупругого рассеяния при $T = 300 \text{ }^\circ\text{K}$, $\Theta_D = 1000 \text{ }^\circ\text{K}$ ($k_B \Theta_D \gg k_B T \gg \hbar \omega_0 \gg \epsilon_n$):

$$\Delta \sigma_{(-)}^{(1)} / \sigma_{(-)}^{(1)} = \rho_D a^2 / 3\Gamma(7/2) [k_B T / (\hbar \omega_0)]^{1/2} (\Theta_D / T)^3 \leq 10^{-3}; \quad (68)$$

$$\rho_D = 10^{10} \text{ см}^{-2}.$$

* Осцилляции плотности вещества в ангармоническом кристалле обусловлены не только движением фононов, но и связаны с флуктуациями температуры рассеивающего объема, которые приводят к появлению квазиупруго рассеянных нейтронов. В случае твердого отражателя отношение интенсивностей квазиупруго и неупруго рассеянных нейтронов мало: оно равно по порядку величины $(c_p - c_v) / c_v$.

С ростом температуры эта поправка уменьшается. Малость ее обусловлена относительно низкой плотностью дислокаций. Такова оценка динамических эффектов этого типа неидеальности кристаллической решетки.

Вблизи поверхности кристалла плотность дислокаций может быть выше, поскольку поверхность является стоком разного рода дефектов решетки. Сама по себе поверхность кристалла является двумерным дефектом, искажающим спектр частот колебаний атомов, расположенных в приповерхностном слое решетки. Ослабление связи этих атомов можно в очень грубом приближении учесть, вводя меньшую эффективную дебаевскую температуру Θ'_D , такую, что $\Theta_D \gg T \gg \Theta'_D$. Это ослабление жесткости решетки и увеличение амплитуды атомных колебаний захватывает ≤ 10 атомных слоев [27]. Несложный подсчет показывает, что увеличение σ^{inel} в 10 раз приводит к следующему ограничению на Θ'_D :

$$(T/\Theta'_D)^{1/2} \gtrsim (2,25\Gamma (1/2)/48) 10^4 (T/\Theta_D)^3. \quad (69)$$

Как при $\Theta_D > \Theta'_D \gg T$, так и в случае $\Theta_D \gg T \gg \Theta'_D$ можно придти к нереальным значениям амплитуды колебаний атомов вблизи поверхности [27]. Можно рассмотреть другую модель для оценки смягчения колебаний атомов в приповерхностном слое, полагая, что это «смягчение» затрагивает лишь колебания, поляризованные вдоль нормали к поверхности. В рамках такой модели этот приповерхностный слой можно рассматривать как часть анизотропного слоистого кристалла с двумя эффективными дебаевскими температурами $\Theta_D^{\parallel} \ll \Theta_D^{\perp} = \Theta_D$. Как известно (см., например, [28]), при $\Theta_D^{\perp} \gg T \gg \Theta_D^{\parallel}$ наибольший фазовый объем принадлежит колебаниям, которые поляризованы в плоскости, параллельной поверхности, и так называемым изгибным колебаниям. Функции распределения этих групп колебаний имеют вид:

$$g_{\perp}(\omega) = (4/3) (\omega/\omega_{\perp}^2); \quad (70)$$

$$\omega_{\perp} = k\Theta_D^{\perp}/\hbar.$$

$$g_{\parallel}(\omega) = 1/3\omega_{\perp}. \quad (71)$$

Нетрудно проверить, что колебания первого типа дают вклад в поперечное сечение неупругого рассеяния

$$\sigma_{(-)}^{\perp} = 0,1\sigma_{(-)}^{(D)} (8/45) [\hbar\omega_{\perp}/(k_B T)] (k_B T \ll \hbar\omega_{\perp}). \quad (72)$$

* Выражения (68), (72) и (73) получены в приближении однофононного рассеяния. Учет вклада многофононных процессов при $T \gg \Theta_D$, $\hbar\omega_0/k_B$ в модели идеального газа существенно не меняет полученных оценок. Усиление аномалии в выведении УХН с ростом глубины проникновения χ_0 при $E_H \rightarrow U_0$, также указывает на неэффективность «смягчения» колебаний атомов вблизи поверхности отражателя.

Вклад изгибных колебаний составляет

$$\sigma_{(-)}^{\parallel} = 0,1 \sigma_{(-)}^{(D)} (4/135) [\hbar \omega_{\perp} / (k_B T)]^2. \quad (73)$$

Здесь $\sigma_{(-)}^{(D)}$ — полное поперечное сечение неупругого рассеяния на объемных колебаниях кристалла в дебаевском приближении

$$\sigma_{(-)}^{(D)} = \sigma_s (m/M) \sqrt{k_B T / \varepsilon_H} 3\Gamma(7/2) (T/\Theta_D)^3;$$

фактор 0,1 представляет собой относительную долю числа степеней свободы, связанных с атомами в приповерхностном слое; $\sigma_s = 4\pi \operatorname{Re} b^2$.

Таким образом, рассмотренные различные механизмы выведения УХН при неупругом взаимодействии с атомами кристаллической решетки не объясняют аномально малое время жизни УХН в ловушках.

Имеются две поправки к действительной части оптического потенциала (2). Во-первых, поправка к приближению псевдопотенциала, составляющая по порядку величины $b/0,1a$ (b — длина рассеяния нейтронов; a — среднее расстояние между рассеивающими ядрами в веществе). Эту поправку, в частности, можно получить, оценив действительную часть второго слагаемого в (11). Во-вторых, возникает поправка за счет интерференционного неупругого рассеяния. Она описывается действительной частью второго слагаемого в формуле (5). Как нетрудно проверить, если не ограничиваться вычислением мнимой части, то (15) — (21), (37), (40) можно использовать и для анализа действительной части оптического потенциала, если в них заменить $(-1/2\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \dots$

на $(-i/\hbar) \int_0^{\infty} dt \exp[(i\omega t - \eta)t] \dots$. Приведем результат этих оценок [10]. В некогерентном приближении, т. е. когда учитывается только вклад второго слагаемого в (11), имеем

$$\begin{aligned} \Delta \operatorname{Re} \langle \langle \mathbf{r}' | U_{02}^{\text{incoh}} | \mathbf{r} \rangle \rangle_T &= \frac{2\pi \hbar^2}{m} b \frac{1}{V_{\text{яч}}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \times \\ &\times b \left[\frac{2\pi}{3} \frac{\hbar}{MN} \int \frac{g(\Omega) d\Omega}{\Omega} (2n_{\Omega} + 1) \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (74)$$

Таким образом, поправка к оптическому потенциалу U_{R_0} (2) в приближении псевдопотенциала Ферми составляет от U_{R_0} долю, равную

$$\begin{aligned} b \left[\frac{2\pi}{3} \frac{\hbar}{MN} \int \frac{g(\Omega) d\Omega}{\Omega} (2n_{\Omega} + 1) \right]^{-1/2} &\sim b \left[2\pi \frac{\hbar}{M \langle \Omega \rangle} \right]^{-1/2} \sim \\ &\sim \frac{b}{0,1a} = 10^{-3} \div 10^{-4}. \end{aligned}$$

Учет поправки за счет неупругого интерференционного рассеяния не меняет величину этой оценки.

Выше было рассмотрено влияние фононного поля на распространение нейтрона в веществе при вычислении собственно энергетической части функции Грина нейтронного поля. В принципе возможен обмен фононом между двумя нейтронами, распространяющимися в веществе. Этот процесс приводит к слабому притяжению между ними [10]. Вычисление амплитуды упругого рассеяния нейтрона на нейтроне, обусловленного обменом виртуальным фононом, приводит к следующей оценке для потенциальной энергии взаимодействия между нейтронами в веществе:

$$\operatorname{Re} \int d\mathbf{r} U_{\text{эф}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = -\frac{3}{2} \frac{\kappa^2}{M} \frac{1}{V_{\text{яч}}} \times \\ \times \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right) \exp[-2W(\kappa)] \frac{2}{\Omega_{\text{макс}}^2}, \quad (75)$$

где $\hbar\kappa$ — изменение импульса одного из нейтронов при рассеянии. Отношение этой величины к энергии нейтрона, захваченного в ловушке:

$$x = \operatorname{Re} \int d\mathbf{r} U_{\text{эф}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) / \int d\mathbf{r} \langle U_{R0} \rangle \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = \\ = -3 \frac{m}{M} \frac{(\hbar\kappa)^2/m [(2\pi\hbar^2)/m] b p}{(\hbar\Omega_{\text{макс}})^2} \approx -3 (m/M) (\langle U_R \rangle / \hbar\Omega_{\text{макс}})^2 \ll 1. \quad (76)$$

Таким образом, интенсивность этого взаимодействия между нейтронами крайне мала. В случае УХН, содержащихся в ловушке, это взаимодействие оказывается еще более слабым. Отметим, что радиус взаимодействия при учете интерференционного рассеяния определяется длиной свободного пробега фонона, который при благоприятных условиях может составлять $10^{-5} - 10^{-4}$ см (некогерентное рассеяние приводит к взаимодействию с эффективным радиусом 10^{-9} см).

Проведенное рассмотрение относится к случаю неограниченной среды. Найденные выражения для оптического потенциала позволяют вычислить показатель преломления рассеивающей среды

$$n = k_I/k_0 = \sqrt{1 - \langle U_0 \rangle / \epsilon_H}, \quad (77)$$

где $\mathbf{k}_0 = m\mathbf{v}/\hbar$ — волновой вектор нейтрона в вакууме [6, 29]. В случае однородной среды, как известно,

$$n^2 - 1 = - (v_{\text{гп}}/v)^2 [1 - i(u/v_{\text{гп}})^2], \quad (78)$$

где

$$v_{\text{гп}} = (2\hbar/m) \sqrt{\pi N \operatorname{Re} b}; \quad u = \sqrt{(\hbar/m)v\sigma_{\text{ув}}(v)N}; \quad \sigma_{\text{ув}} = \sigma_{\text{abs}} + \sigma_{\text{incl}}. \quad (79)$$

Эти выражения и формулы, аналогичные известным в оптике формулам Френеля, позволяют найти коэффициент отражения нейтронов от плоской границы рассеивающей среды. Этот коэффициент отражения при падении нейтронов из вакуума под углом θ имеет вид [25, 29, 30]

$$R(\theta) = \frac{\cos \theta - i \sqrt{-(n^2 - 1) - \cos^2 \theta}}{\cos \theta + i \sqrt{-(n^2 - 1) - \cos^2 \theta}} = \frac{\cos \theta - i \sqrt{(v_{gp}/v)^2 [1 - i(u/v_{gp})^2] - \cos^2 \theta}}{\cos \theta + i \sqrt{(v_{gp}/v)^2 [1 - i(u/v_{gp})^2] - \cos^2 \theta}}. \quad (80)$$

В случае рассеяния нейтронов на малых объемах вещества поперечное сечение можно найти при решении уравнения Шредингера с оптическим потенциалом. Поперечное сечение выведения нейтронов для этого объема определяется с помощью следующего соотношения [11]:

$$\Sigma_{yb} = -[2/(\hbar v)] \operatorname{Im}[(\varphi_p^+, U_0 \varphi_p)]. \quad (81)$$

Здесь φ_p — волновая функция нейтрона в оптическом потенциале U_0 ; v — скорость нейтрона в вакууме. Подчеркнем, что поперечное сечение (81) вычислено для всего рассеивающего объема. Поперечное сечение выведения, отнесенное к одному ядру, имеет лишь вспомогательное значение при промежуточных выкладках. Этот параметр можно найти экстраполяцией значений поперечного сечения выведения при энергии $\varepsilon \gg \langle U_0 \rangle$ в область очень холодных и ультрахолодных нейтронов.

Коэффициент «поглощения» нейтронов выразим через поперечное сечение выведения Σ_{yb} :

$$W = \Sigma_{yb}/S_0, \quad (82)$$

где S_0 — площадь поверхности, нормальной к падающему пучку.

В том случае, когда рассеивающая среда заполняет полупространство $z \leq z_0$, волновая функция оптической модели имеет следующий вид:

$$\varphi_p(x, z) = [1 + R(\theta)] \exp \left[ik_0 \sin \theta - ik_0 \int_{z_0}^z \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta} dz' \right]. \quad (83)$$

Полагая $\sqrt{n^2 - \sin^2 \theta} \approx i \sqrt{(v_{gp}/v)^2 - \cos^2 \theta}$, имеем из (81) — (83) следующее выражение для коэффициента поглощения УХН [2]:

$$W = (u/v_{gp})^2 [2v \cos \theta / \sqrt{v_{gp}^2 - v^2 \cos^2 \theta}]. \quad (84)$$

В случае прохождения очень холодных нейтронов через толстый слой вещества, когда затухание нейтронной волны обусловлено выведением нейтронов, плотность нейтронов убывает вглубь отража-

теля по закону

$$|\varphi_p(x, z)|^2 = |1 + R(\theta)|^2 \exp [k_0(z - z_0)(u/v)^2 / \sqrt{\cos^2 \theta - (v_{\text{ГР}}/v)^2}]. \quad (85)$$

При нормальном падении нейтронов показатель экспоненты в (85) равен $v\sigma_{\text{ув}}(v) N(z - z_0) / \sqrt{v^2 - v_{\text{ГР}}^2}$ (см. также [6]). Легко показать, что коэффициент поглощения нейтронов в толстом слое вещества при выполнении (85)

$$W = \frac{4 \cos^2 \theta}{(\cos \theta + \sqrt{\cos^2 \theta - (v_{\text{ГР}}/v)^2})^2} \frac{\sqrt{\cos^2 \theta - (v_{\text{ГР}}/v)^2}}{\cos \theta} \quad (86)$$

и в этом приближении не зависит от сечения выведения [$\cos^2 \theta > (v_{\text{ГР}}/v)^2$]. Поправка $\sim u^4$ возникает в результате разложения в ряд величин $1 + R(\theta)$ и $\sqrt{n^2 - \sin^2 \theta}$ в (81).

Если длина экстинкции нейтронной волны $d(v)$, обусловленная какой-либо причиной, меньше длины загущания за счет выведения, то коэффициент поглощения имеет вид

$$W = \frac{4 \cos^2 \theta}{[\cos \theta + \sqrt{\cos^2 \theta - (v_{\text{ГР}}/v)^2}]^2} \frac{mu^2}{\hbar v} \frac{d(v)}{\cos \theta}. \quad (87)$$

В тех случаях, когда a — толщина мишени мала по сравнению с длиной поглощения ОХН $l_{\text{abs}} = \frac{\sqrt{v^2 - v_{\text{ГР}}^2}}{v\sigma(v)N}$, коэффициент поглощения $W_{\text{охн}}$ оказывается пропорционален u^2 . Это позволяет непосредственно выразить $W_{\text{ухн}}$ через $W_{\text{охн}}$. Ограничиваясь для простоты случаем нормального падения нейтронной волны на стенку ловушки, получим в приближении линейной мишенью относительно u^2 следующий результат

$$W_{\text{ухн}} = \frac{2v/v_{\text{ГР}}}{\sqrt{1 - (v/v_{\text{ГР}})^2}} \cdot \frac{\hbar v_1}{4mav_{\text{ГР}}^2} \times \\ \times \frac{(1 + k'/k_1)^4 + (1 - k'/k_1)^4 - 2 \cos 2k'a [1 - (k'/k_1)^2]^2}{(1 + k'/k_1)^2 + (1 - k'/k_1)^2 - \frac{\sin 2k'a}{k'a} [1 - (k'/k_1)^2]} W_{\text{охн}}. \quad (88)$$

Здесь были приняты обозначения: $k = \frac{mv}{\hbar}$ — волновое число УХН в ловушке, $k_1 = \frac{mv_1}{\hbar}$ и $k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E_1 - U)}$ — волновые числа ОХН в вакууме и в стенке ловушки, соответственно; $v_{\text{ГР}} = \sqrt{\frac{2U_0}{m}}$. При $v_1 \gg v_{\text{ГР}}$ из (88) снова получаем формулу (83). Ограничение $l_{\text{abs}} \gg a$ предполагает $a \ll 0,1$ см при E_1 вблизи V_0 . В области энергий ОХН $E_1 \gg V_0$ это ограничение на толщину мишени ослабевает, так как l_{abs} увеличивается с ростом энергии нейтрона. При $E_1 \approx U_0$ и $\frac{l_{\text{abs}}}{a} \ll 1$ имеем [6]

$$W_{\text{охн}} \approx 2\sqrt{2} u/v_1.$$

Такое поведение $W_{\text{охн}}$ захватывает тем большую область энергий вблизи U_0 , чем сильнее поглощение. Этот результат справедлив и при $E_1 > U_0$ вблизи угла полного отражения.

Коэффициент W представляет собой вероятность поглощения нейтрона при одном столкновении со стенкой и вместе с n_0 — средним числом столкновений нейтрона со стенкой ловушки в единицу времени — определяет время жизни нейтронов в ловушке [2]

$$\tau = [n_0 W + \lambda_{\text{расп}}]^{-1};$$

$$\lambda_{\text{расп}} \approx 10^{-3} \text{ сек}^{-1}.$$

При этом движение нейтрона предполагается подчиняющимся законам классической механики. Аналогичный результат можно получить, рассматривая нейтронную ловушку как многоволновой резонатор (размер резонатора во много раз превышает длину волны излучения) или вычисляя постоянную релаксации плотности нейтронов с помощью теории затухания квазистационарного состояния квантовомеханической системы (см., например, [31]).

2. ПРОХОЖДЕНИЕ НЕЙТРОНОВ ОЧЕНЬ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ ЧЕРЕЗ НЕОДНОРОДНЫЕ СРЕДЫ

Продолжим здесь рассмотрение влияния неоднородности рассеивающей среды на распространение когерентной нейтронной волны. Выше уже коротко обсуждалось, как негомогенность среды меняет характер возбуждений в рассеивателе и тем самым воздействует на неупруго рассеянную волну. Кроме того, флуктуации плотности рассеивающего вещества непосредственно взаимодействуют с нейтронным полем и вызывают упруго рассеянную нейтронную волну. Очевидным примером, иллюстрирующим эти утверждения, является граница рассеивающей среды. Наличие границы, во-первых, изменяет спектр колебаний кристалла, а во-вторых, приводит к появлению упруго отраженной нейтронной волны. Перейдем теперь к рассмотрению процессов последнего типа.

Изложение вопроса начнем с изучения слабого однократного рассеяния нейтронной волны неоднородным веществом, занимающим объем V . При расчете рассеянного нейтронного поля $\psi_s(\mathbf{r})$ ограничимся борновским приближением теории возмущений. Тогда можно записать

$$\psi_s(\mathbf{r}) \approx \int_V G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}') \delta U(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') dr'. \quad (89)$$

Здесь δU — возмущение, обусловленное статическими неоднородностями среды. Объем V , в пределах которого δU отлично от нуля, может находиться в вакууме или окружен однородным веществом.

Функция Грина волнового уравнения без возмущения $G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0)$ имеет вид *

$$G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp[ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|]}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}. \quad (90)$$

Волновое число k нейтрона в однородной среде определяется энергией нейтрона ϵ_n и его потенциальной энергией в невозмущенной среде $\langle U \rangle$:

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\epsilon_n - \langle U \rangle)}. \quad (91)$$

Ограничимся в этом пункте анализом рассеяния очень холодных нейтронов. Прохождение УХН обсудим ниже. Будем полагать, что падающую волну можно представить в следующем виде:

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \tilde{\psi}_0(\mathbf{r}) \exp[ik|\mathbf{R}-\mathbf{r}|], \quad (92)$$

где \mathbf{R} — точка, в которой расположен источник нейтронов. Комплексная амплитуда $\tilde{\psi}_0(\mathbf{r})$ заметно меняется на расстояниях $L = V^{1/3} \gg 2\pi/k$.

Рассмотрим корреляционную функцию рассеянной волны $K_{\psi\psi}(\mathbf{r}' | \mathbf{r}) = \langle \psi_s^*(\mathbf{r}') \psi_s(\mathbf{r}) \rangle$. Угловые скобки означают усреднение относительно закона распределения неоднородностей в среде. Функция $K_{\psi\psi}$ является важной характеристикой нейтронного поля. Например, $K_{\psi\psi}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1)$ представляет собой среднюю плотность рассеянных нейтронов $\langle |\psi_s(\mathbf{r}_1)|^2 \rangle$ в точке \mathbf{r}_1 . Принимая во внимание известное квантовомеханическое выражение для плотности тока

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{2m} [\psi(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \psi^*(\mathbf{r}) - \psi^*(\mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})], \quad (93)$$

можно показать, что

$$\langle \mathbf{j}(\mathbf{r}_1) \rangle = \frac{i\hbar}{2m} (\nabla_{\mathbf{r}_1} - \nabla_{\mathbf{r}_2}) K_{\psi\psi}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_2) |_{\mathbf{r}_1=\mathbf{r}_2}. \quad (94)$$

Учитывая выражения (89) — (92), можно выразить функцию $K_{\psi\psi}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_2)$ через корреляционную функцию возмущения δU с помощью следующего соотношения:

$$\begin{aligned} K_{\psi\psi}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_2) &= (m/2\pi\hbar^2)^2 \int \int_{VV} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \frac{\exp[-ik|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'|]}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}'|} \times \\ &\times \frac{\exp[ik|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}''|]}{|\mathbf{r}_2-\mathbf{r}''|} K_{UU}(\mathbf{r}' | \mathbf{r}'') \times \\ &\times \tilde{\psi}_0^*(\mathbf{r}') \tilde{\psi}_0(\mathbf{r}'') \exp[-ik|\mathbf{R}-\mathbf{r}'|] \exp[ik|\mathbf{R}-\mathbf{r}''|]. \end{aligned} \quad (95)$$

* Использование в (87) более сложных выражений для функции Грина $G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}')$ и волновой функции $\Psi_0(\mathbf{r})$, соответствующих движению в плавно изменяющихся в пространстве потенциалах, приводит к известным в теории рассеяния результатам «борновского приближения с искаженными волнами» [14, 15].

Здесь

$$K_{UU}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_2) = \langle \delta U(\mathbf{r}_1) \delta U(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (96)$$

— корреляционная функция возмущения δU .

Если рассеивающая среда пространственно-однородна (однородна в среднем) и рассеивающий объем достаточно велик: $L = V^{1/3} \gg l_0$ (l_0 — длина корреляции возмущения δU , т. е. расстояние, на котором K_{UU} обращается в нуль), то

$$K_{UU}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_2) \equiv K_{UU}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (97)$$

Если расстояния от рассеивающего объема до источника R и до точки наблюдения r велики так, что kl_0^2/r , $kl_0^2/R \ll 1$, т. е. когда реализованы условия дифракции Фраунгофера, то выражение (95) приближенно можно записать в следующем виде:

$$K_{\Psi\Psi}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_2) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int_V d\mathbf{r}' \frac{|\tilde{\Psi}_0(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'| |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'|} \exp[-ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'|] \times \\ \times \exp[ik|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'|] \int_V d\boldsymbol{\rho} K_{UU}(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\rho}), \quad (98)$$

где $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}_f(\mathbf{r}) - \mathbf{k}_i(\mathbf{r}')$ — изменение волнового вектора при рассеянии. Если объем достаточно велик, то интеграл от K_{UU} в (98) представляет собой спектральную плотность $\Phi_U(\mathbf{q})$, причем

$$K_{UU}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) \Phi_U(\mathbf{q}). \quad (99)$$

Таким образом, имеем

$$K_{\Psi\Psi}(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_2) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \int_V d\mathbf{r}' \frac{|\tilde{\Psi}_0(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'| |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'|} \times \\ \times \exp[-ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'|] \exp[ik|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'|] \Phi_U(\boldsymbol{\kappa}). \quad (100)$$

Здесь

$$\Phi_U(\boldsymbol{\kappa}) \approx \int_V K_{UU}(\boldsymbol{\rho}) \exp(i\boldsymbol{\kappa}\boldsymbol{\rho}) d\boldsymbol{\rho}. \quad (101)$$

Вычислим рассеянный поток от элементарного объема dV' . Учитывая (100), выполним дифференцирование в выражении (94). При $k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'|$, $k|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'| \gg 1$ можно дифференцировать только экспоненциалы. В результате получим

$$\langle d\mathbf{j} \rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 dV' \frac{\hbar\mathbf{k}_f(\mathbf{r}')}{m} \frac{|\tilde{\Psi}_0(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'|^2} \Phi(\boldsymbol{\kappa}). \quad (102)$$

Плотность падающего потока

$$j_0 = [\hbar\mathbf{k}_i(\mathbf{r}')/m] |\tilde{\Psi}_0(\mathbf{r}')|^2. \quad (103)$$

Из (102) и (103) непосредственно вытекает следующее выражение для среднего дифференциального поперечного сечения рассеяния:

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \langle \mathbf{k}_f \cdot d\mathbf{j} \rangle / |j_0| k_f = [m/(2\pi\hbar^2)^2] dV' \Phi_U(\boldsymbol{\kappa}). \quad (104)$$

Для упрощения записи введем новые величины:

$$\delta\gamma(\mathbf{r}) = [m/(2\pi\hbar^2)] \delta U(\mathbf{r}) \quad (105)$$

и

$$\Phi_\gamma(\boldsymbol{\kappa}) = [m/(2\pi\hbar^2)]^2 \Phi_U(\boldsymbol{\kappa}). \quad (106)$$

Тогда

$$\langle d\sigma/d\Omega \rangle = dV' \Phi_\gamma(\boldsymbol{\kappa}). \quad (107)$$

Если рассеивающий объем V мал по сравнению с r^3 и R^3 , то угловое распределение рассеянных нейтронов всем объемом определяется формулой

$$\langle d\sigma/d\Omega \rangle = V \Phi_\gamma(\boldsymbol{\kappa}) = V \int d\rho \exp(i\boldsymbol{\kappa}\rho) K_{\gamma\gamma}(\rho). \quad (108)$$

Напомним, что в то же время $V \gg l_0^3$, но $V^{1/3}$ мало по сравнению с длиной свободного пробега при рассеянии на неоднородностях среды. Соответственно, поперечное сечение, отнесенное к одному рассеивающему ядру:

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle_1 = \frac{1}{N_{\text{яд}}} \left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle = \frac{V}{N_{\text{яд}}} \Phi_\gamma(\boldsymbol{\kappa}). \quad (109)$$

При $\kappa l_0 \ll 1$ в случае изотропной среды, когда $K_{\gamma\gamma}(\rho) \equiv K_{\gamma\gamma}(|\rho|)$, имеем

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle_1 \approx \frac{V}{N_{\text{яд}}} \int d\rho K_{\gamma\gamma}(\rho) \left[1 - \frac{\kappa^2}{6} \frac{\int d\rho K_{\gamma\gamma}(\rho) \rho^2}{\int d\rho K_{\gamma\gamma}(\rho)} \right]. \quad (110)$$

Выражения (107) — (110) можно получить непосредственно усредняя известную квантовомеханическую формулу для поперечного сечения рассеяния в борновском приближении [4]. Из (107) — (110) следует, что интенсивность нейтронной волны, рассеянной под углом θ , определяется спектральной компонентой неоднородности с пространственным масштабом

$$l(\theta) = 2\pi/\kappa = \pi/(k \sin \theta/2) = \lambda/(2 \sin \theta/2). \quad (111)$$

Конечность рассеивающего объема приводит к тому, что в рассеянии на данный угол принимают участие близкие спектральные компоненты (в интервале $\sim \lambda/V^{1/3}$ [32]).

Корреляционную функцию $K_{\gamma\gamma}$ (или ее первые моменты $\int K_{\gamma\gamma}(\rho) \rho^n d\rho$) можно восстановить по экспериментально полу-

ченному угловому распределению рассеянных нейтронов с помощью фурье-анализа. Оценим поперечное сечение флуктуационного рассеяния для простой модели локализованных одинаковых рассеивателей (каждый из таких рассеивателей будем называть примесью). В этом случае

$$\delta\gamma(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \delta\gamma_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (112)$$

где \mathbf{R}_j — точка, в которой расположена j -ая примесь; $\delta\gamma_0$ описывает действие одного рассеивателя. Соответственно для корреляционной функции $K_{\gamma\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ имеем

$$\begin{aligned} K_{\gamma\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \sum_{j, j'=1}^N \langle \delta\gamma_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \delta\gamma_0^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_{j'}) \rangle = \\ &= \sum_{j, j'=1}^N \frac{1}{(2\pi)^6} \iint d\mathbf{q} d\mathbf{q}' \langle \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)] \exp[i\mathbf{q}'(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_{j'})] \rangle \times \\ &\quad \times \delta\tilde{\gamma}_0(\mathbf{q}) \delta\tilde{\gamma}_0^*(\mathbf{q}'). \end{aligned} \quad (113)$$

Здесь

$$\delta\tilde{\gamma}_0(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \delta\gamma_0(\mathbf{r}).$$

В случае, когда корреляция в расположении рассеивателей отсутствует, слагаемые с $j \neq j'$ обращаются в нуль и выражение для $K_{\gamma\gamma}$ принимает вид

$$K_{\gamma\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{N}{V} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \exp[-i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] |\delta\tilde{\gamma}_0(\mathbf{q})|^2. \quad (114)$$

Соответственно для спектральной плотности такой неоднородной среды имеем

$$\Phi_{\gamma\gamma}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{N}{V} |\delta\tilde{\gamma}_0(\boldsymbol{\kappa})|^2. \quad (115)$$

Подставим (115) в формулу (109). Тогда для дифференциального поперечного сечения рассеяния, отнесенного к одному ядру, получим следующее выражение:

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle_1 = \frac{N}{N_{\text{яд}}} |\delta\tilde{\gamma}_0(\boldsymbol{\kappa})|^2. \quad (116)$$

Отдельные рассеивающие центры, каждый из которых в среднем содержит $N_{\text{яд}}/N$ ядер, в нашей модели рассеивают некогерентно. Если рассеиватель представляет собой однородную сферу радиуса R_0 так, что

$$\delta\gamma_0(\mathbf{r}) = \begin{cases} \Gamma^{(0)} & r \leq R_0; \\ 0 & r > R_0, \end{cases} \quad (117)$$

то

$$\delta \tilde{\gamma}_0(\mathbf{q}) = (4\pi \Gamma^{(0)}/q^3) [\sin qR_0 - qR_0 \cos qR_0]; \quad (118)$$

$$\approx (4\pi R_0^3/3) \Gamma^{(0)}, \quad qR_0 \ll 1; \quad (119)$$

$$\approx - (4\pi \Gamma^{(0)}/q^2) R_0 \cos qR_0, \quad qR_0 \gg 1 \quad (120)$$

и

$$\left. \begin{aligned} \left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle_1 &= \left(\frac{N}{N_{\text{яд}}} \right) |\Gamma^{(0)}|^2 (4\pi R_0^3/3)^2, & qR_0 \ll 1; \\ &= \left(\frac{N}{N_{\text{яд}}} \right) |\Gamma^{(0)}|^2 \left(\frac{2\pi}{q^4} \right) 4\pi R_0^2, & qR_0 \gg 1. \end{aligned} \right\} \quad (121)$$

Пусть возмущение обусловлено флуктуациями плотности вещества ρ , причем $\Delta\rho_0$ — амплитуда флуктуаций этой величины. Тогда $\langle (\Delta\rho)^2 \rangle = (\Delta\rho_0)^2 N [4\pi R_0^3/(3V)]$. Поскольку $\delta\gamma \approx \text{Re } b \Delta\rho$ (при $\text{Im } b = 0$), то при $\kappa R_0 \ll 1$ имеем

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle_1 &= (\text{Re } b)^2 \frac{\langle (\Delta\rho)^2 \rangle}{\langle \rho \rangle^2} \langle \rho \rangle^2 \frac{4\pi R_0^3}{3} \frac{V}{N_{\text{яд}}} = \\ &= (\text{Re } b)^2 \frac{\langle (\Delta\rho^2) \rangle}{\langle \rho \rangle^2} N_{\text{яд}}^2 \frac{4\pi R_0^3}{3V} \frac{1}{N_{\text{яд}}}. \end{aligned}$$

Отношение $4\pi R_0^3/(3V)$ — доля вещества, рассеивающего когерентно, и появление фактора $N_{\text{яд}}^2 4\pi R_0^3/(3V)$ имеет прозрачную физическую причину. Итак, окончательно можно записать

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle_1 &= (\text{Re } b)^2 \left\langle \left(\frac{\Delta\rho}{\langle \rho \rangle} \right)^2 \right\rangle \langle \rho \rangle \frac{4\pi R_0^3}{3} = \\ &= (\text{Re } b)^2 \left\langle \left(\frac{\Delta\rho}{\langle \rho \rangle} \right)^2 \right\rangle \frac{4\pi R_0^3}{3v_0}, \end{aligned} \quad (122)$$

где v_0 — объем, приходящийся на одно рассеивающее ядро.

В рассмотренном приближении ($\kappa R_0 \ll 1$) рассеяние изотропно и полное сечение флуктуационного рассеяния, отнесенное к одному рассеивающему ядру:

$$\langle \sigma \rangle_1 = 4\pi (\text{Re } b)^2 \left\langle \left(\frac{\Delta\rho}{\langle \rho \rangle} \right)^2 \right\rangle \left[\frac{4\pi R_0^3}{3v_0} \right]. \quad (123)$$

Возможность экспериментального исследования структуры неоднородностей измерением коэффициента пропускания очень холодных нейтронов слоями вещества обсуждалась Штайерлом [4]. Из анализа, проведенного в этой работе, следует, что такой подход дает ту же информацию о структуре мишени, что и измерение углового распределения при рассеянии под малыми углами в области тепловых энергий. Измерение полного сечения имеет по сравнению с измерением углового распределения ряд методических преимуществ [4]. Энергетический интервал для падающих нейтронов

определяется размерами частиц, которые предполагается исследовать [см. обсуждение (11)]. Экспериментально наблюдались значительное отклонение хода поперечного сечения от закона $1/v_n$ при прохождении нейтронов через пироэлектрический графит,

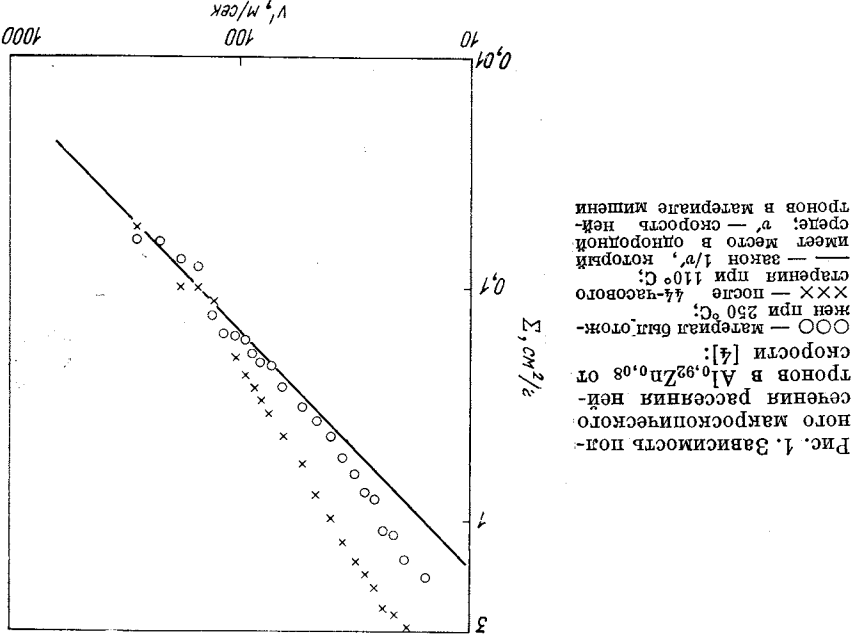


Рис. 1. Зависимость поперечного макроскопического сечения рассеяния нейтронов в $Al_{0.92}Zn_{0.08}$ от скорости [4]:
 ○○○ — материал был отожжен при 250°C;
 ××× — после 44-часового старения при 110°C;
 — закон $1/v$, который имеет место в однородной среде; v — скорость нейтронов в материале мишени

электрорафит и $Al_{0.92}Zn_{0.08}$. Этот результат был интерпретирован как проявление значительного вклада флуктуационного рассеяния на неоднородной мишени [4, 5] (рис. 1 и 2). С помощью (123) найдено значение l_s очень холодных нейтронов в неоднородной среде

$$l_s = \frac{4\pi (Re v)^2}{1} \left\langle \left(\frac{d\rho}{\rho} \right)^2 \right\rangle^{-2} \frac{4\pi R_0^3}{3v_0^3} \quad (124)$$

В случае ультрахолодных нейтронов понятие длины свободного пробега не имеет смысла. Вязовое число OXH получает минимальную добавку $Im k$, причем $Im k = 1/l_s$. Если источник нейтронов и область, где регистрируется поток рассеянных примеси, находятся вне объема V , содержащего рассеивающую примесь, то необходимо учитывать отражение и преломление нейтронной волны на границе этого объема [18].

Было рассмотрено рассеяние на системе хаотически расположенных неоднородностей. Строго говоря, в размещении таких рассеивающих центров всегда имеются корреляции и рассеяние

оказывается частично когерентным. Рассмотрим вклад этого когерентного рассеяния. Интенсивность рассеянной нейтронной

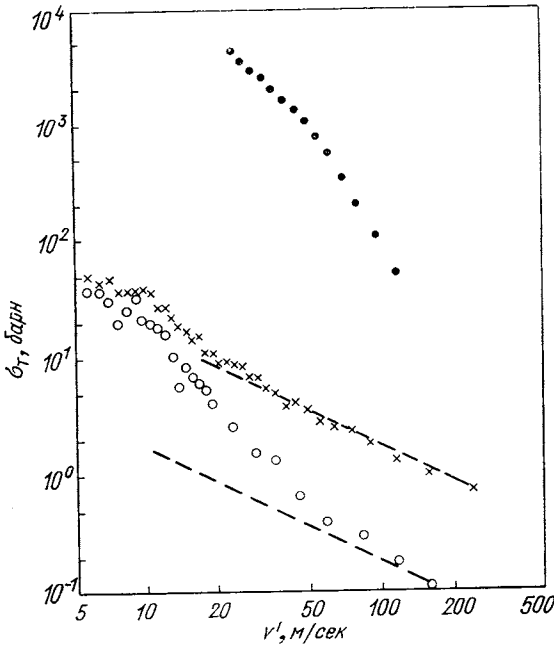


Рис. 2. Зависимость полного сечения рассеяния нейтронов в графите от скорости:
 ●●● — электрографит при 295° К;
 ××× — пиролитический графит при 295° К;
 ○○○ — то же при 100° К;
 — — — соответствует закону $1/v'$ [5]

волны, если в объеме V имеется N одинаковых рассеивателей, пропорциональна величине

$$I(\boldsymbol{x}) = f^2 \left\{ N + \sum_{k \neq j=1}^N \exp [i\boldsymbol{x} (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)] \right\}, \quad (125)$$

где f — амплитуда рассеяния отдельным центром.

Усредняя это выражение по распределению координат $\{\mathbf{R}_j\}$, получаем

$$\begin{aligned} \overline{I(\boldsymbol{x})} = f^2 \left\{ N + N(N-1) \int_V \int_V \frac{d\mathbf{R}_j d\mathbf{R}_k}{V^2} \times \right. \\ \left. \times W(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k) \exp [i\boldsymbol{x} (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)] \right\}. \end{aligned} \quad (126)$$

Здесь $W(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k) d\mathbf{R}_k/V$ — вероятность нахождения рассеивающего элемента вблизи точки \mathbf{R}_k , если в точке \mathbf{R}_j уже находится другая примесь. Выражение (126) удобно записать в следующем

виде:

$$\begin{aligned} \overline{I(\boldsymbol{\kappa})} = f^2 \left\{ N - N(N-1) \times \right. \\ \times \int_V \int_V \frac{d\mathbf{R}_j d\mathbf{R}_k}{V^2} \exp [i\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)] [1 - W(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)] + \\ \left. + N(N-1) \int_V \exp(i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{R}_j) \frac{d\mathbf{R}_j}{V} \int_V \exp(-i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{R}_k) \frac{d\mathbf{R}_k}{V} \right\}. \quad (127) \end{aligned}$$

Первое слагаемое описывает чисто некогерентное рассеяние на N хаотически расположенных центрах. Второе слагаемое учитывает корреляции в расположении различных неоднородностей и описывает вклад когерентной части рассеянной нейтронной волны. Последнее слагаемое отлично от нуля в области малого телесного угла вблизи направления падающего пучка нейтронов ($\sim \lambda/L$). Оно описывает волну, когерентно рассеянную всем объемом $V = L^3$. В практически интересных случаях, когда объем V имеет макроскопические размеры, это слагаемое можно опустить.

В качестве примера рассмотрим систему N ($N \gg 1$) рассеивающих сферических частиц радиуса R_0 . Так как эти частицы не могут проникать друг в друга, то $W(\mathbf{r}) = 0$ при $r \leq 2R_0$. В остальном их распределение по объему V произвольно, т. е. $W(\mathbf{r}) = 1$ при $r > 2R_0$. В этом случае

$$\overline{I(\boldsymbol{\kappa})} = Nf^2 [1 - 8N\delta\tilde{\gamma}_0(\boldsymbol{\kappa})]. \quad (128)$$

Величина $\delta\tilde{\gamma}_0(\boldsymbol{\kappa})$ определена (118) при $\Gamma^0 = 1/V$. Доля когерентно рассеянной волны в интенсивности $\overline{I(\boldsymbol{\kappa})}$ убывает при уменьшении плотности рассеивающих центров N/V .

Рассмотрим теперь взаимодействие нейтронной волны с примесью, внедренной в мишень, когда это взаимодействие оказывается достаточно сильным и борновское приближение не применимо. Задачи такого рода были рассмотрены в работах [9, 10, 33, 34]. Запишем выражение для функции Грина $G(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0)$ волнового уравнения в среде с примесью

$$G(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) = G(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) + \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}') t(\mathbf{r}' | \mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'' | \mathbf{r}_0). \quad (129)$$

Здесь $G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0)$ — функция Грина волнового уравнения в случае однородной среды; $t(\mathbf{r}' | \mathbf{r}'')$ — t -матрица рассеяния нейтронной волны на примеси, записанная в координатном представлении относительно переменных нейтрона. Величина $t(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0)$ удовлетворяет уравнению Липшманна — Швингера:

$$t(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) = V(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) + \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' V(\mathbf{r} | \mathbf{r}') G_0(\mathbf{r}' | \mathbf{r}'') t(\mathbf{r}'' | \mathbf{r}_0), \quad (130)$$

где $V(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0)$ — потенциал взаимодействия нейтронов с примесью. Если примесь содержит достаточно большое число рассеивающих ядер, то $V(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0)$ представляет собой оптический потенциал, соответствующий материалу примеси. В тех случаях, когда длина волны нейтрона велика по сравнению с размером примеси (будем для простоты полагать, что примесь имеет форму сферы радиуса a), для описания s -рассеяния можно использовать следующую модель потенциала $V(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0)$:

$$V(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) = U_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1), \quad (134)$$

где \mathbf{r}_1 — радиус-вектор центра тяжести примеси. Для этой модели решение уравнения (130) можно найти в аналитической форме:

$$t(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) = t_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1), \quad (132)$$

где

$$t_0 = U_0 / [1 - U_0 G_0(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1)]. \quad (133)$$

Функцию Грина при совпадающих аргументах доопределим следующим образом:

$$G_0(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1) \equiv G_0(a). \quad (134)$$

Если U_0 — действительная величина, т. е. поглощение в примеси отсутствует, то нетрудно показать, что

$$\text{Im } t_0 = |t_0|^2 \text{Im } G_0(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1). \quad (135)$$

Это соотношение выражает содержание оптической теоремы для данного случая. Если же примесь поглощает нейтроны, т. е. $U_0 = U_1 + iU_2$, то формула (135) принимает следующий вид:

$$\text{Im } t_0 = |t_0|^2 \{ \text{Im } G_0(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1) + U_2 / (U_1^2 + U_2^2) \}; \quad (136)$$

$$U_2 < 0.$$

Величину t_0 можно выразить через амплитуду рассеяния на примеси

$$t_0 = -(2\pi\hbar^2 f / m). \quad (137)$$

При этом сечение рассеяния

$$\sigma = 4\pi |f|^2 = 4\pi [m / (2\pi\hbar^2)]^2 |t_0|^2. \quad (138)$$

Если $G_0(\mathbf{r}_0 | \mathbf{r}) = -[m / (2\pi\hbar^2)] \{ \exp[ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|] / |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \}$ и соответственно

$$\text{Im } G_0(\mathbf{r}_0 | \mathbf{r}_0) = [-m / (2\pi\hbar^2)] k, \quad (139)$$

то

$$\text{Im } f = \frac{k\sigma}{4\pi} \left[1 - \frac{2\pi\hbar^2}{mk} \frac{U_2}{U_2^2 + U_1^2} \right]. \quad (140)$$

Величину $[-\sigma 2\pi\hbar^2 / (mk)] [U_2 / (U_2^2 + U_1^2)]$ естественно рассматривать как поперечное сечение поглощения нейтронов в примеси.

Если поглощающая примесь находится в глубине материала мишени, то при слабом поглощении нейтронов и малом неупругом рассеянии в материале мишени мнимая часть функции Грина $\text{Im } G_0(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}_1)$ в случае УХН мала и оптическая теорема принимает следующий вид:

$$\text{Im } t_0 = |t_0|^2 U_2 / (U_1^2 + U_2^2). \quad (144)$$

Таким образом, в этом случае рассеяние на примеси не дает вклада в затухание когерентной нейтронной волны (УХН). Подробный анализ соотношения (136) содержится в работе [10]. Отметим, что действие большого числа примесей можно учесть с помощью волнового уравнения с оптическим потенциалом (см. разд. 1), причем t -матрица элементарного рассеивателя должна быть заменена на t -матрицу примеси. Такой подход и некоторые физические задачи, которые удастся решить с его помощью, рассмотрим ниже, а сейчас обратимся к анализу взаимодействия нейтронов с системой рассеивающих центров, размер которых мал по сравнению с длиной волны нейтрона. Этот вопрос удобно рассмотреть, непосредственно применяя формулы теории многократного рассеяния [11, 24]. Одной из задач такого типа, представляющей практический интерес, является вычисление поправок к оптическому потенциалу, обусловленных дискретностью структуры рассеивающей среды [17].

Для средней $\langle T \rangle$ -матрицы рассеяния имеем в так называемом квазикристаллическом приближении [24] следующие соотношения:

$$\langle T(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) \rangle = N \langle Q(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) \rangle; \quad (142)$$

$$\langle Q(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0) \rangle = \frac{1}{V} \int d\mathbf{R}_n \langle\langle Q(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0; \mathbf{R}_n) \rangle\rangle; \quad (143)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle Q(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0; \mathbf{R}_n) \rangle\rangle = & t(\mathbf{r} | \mathbf{r}_0; \mathbf{R}_n) + \sum_{m \neq n} \int \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \int d\mathbf{R}_m \Gamma^{(2)}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) \times \\ & \times t(\mathbf{r} | \mathbf{r}'; \mathbf{R}_n) G_0(\mathbf{r}' | \mathbf{r}'') \langle\langle Q(\mathbf{r}'' | \mathbf{r}_0; \mathbf{R}_m) \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (144)$$

Здесь $\Gamma^{(2)}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) d\mathbf{R}_m$ — условная вероятность того, что вблизи точки \mathbf{R}_m имеется m -ый рассеиватель, если в точке \mathbf{R}_n уже находится n -ый рассеивающий центр; N — полное число рассеивающих центров в объеме V . Уравнение (144) оказывается точным в случае полностью хаотического расположения рассеивателей и для строго периодической структуры. С помощью преобразования Фурье это уравнение сводится к алгебраическому. Известно, что полюса трансформанты Фурье $T(\mathbf{p}) = \int d\mathbf{r} \langle T(\mathbf{r}) \rangle \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r})$, как функции комплексной переменной p , определяют закон дисперсии нейтронной волны в рассеивающей среде. Можно показать, что полюса $T(p)$ при $\text{Im } p / \text{Re } p \ll 1$ находятся с помощью уравнения

(уравнения дисперсии)

$$K(\mathbf{p}) = 1. \quad (145)$$

Здесь

$$K(\mathbf{p}) = \frac{N-1}{(2\pi)^3} V \int d\mathbf{p}_1 \gamma^{(2)}(\mathbf{p}-\mathbf{p}_1) \tau(\mathbf{p}_1) g_0(\mathbf{p}_1), \quad (146)$$

где $\gamma^{(2)}(\mathbf{p})$, $\tau(\mathbf{p})$ и $g_0(\mathbf{p})$ — трансформанты Фурье функций $\Gamma^{(2)}(\mathbf{r})$, $\langle t(\mathbf{r}) \rangle$ и $G_0(\mathbf{r})$ соответственно.

Если неоднородность среды обусловлена только ее микроскопической структурой, т. е. каждый рассеивающий центр представляет собой атомное ядро, то

$$\tau(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar^2/m) b (1/V). \quad (147)$$

В случае полностью разупорядоченной системы атомных ядер

$$\gamma^{(2)}(\mathbf{p}) = [(2\pi)^3/V] \delta(\mathbf{p}). \quad (148)$$

Подставим выражения (145) и (147) в (148). В результате получим

$$1 = (N-1) g_0(\mathbf{p}) (2\pi\hbar^2/m) b (1/V) \quad (149)$$

и

$$p^2 = k^2 [1 - (U_0/\varepsilon) (1 - 1/N)], \quad (150)$$

где $k = \sqrt{2m\varepsilon/\hbar}$ и $U_0 = (2\pi\hbar^2/m) b (N/V)$. Если атомные ядра образуют строго периодическую структуру, то

$$\gamma^{(2)}(\mathbf{p}) = \frac{1}{N-1} \sum'_{\rho_l} \exp[i\mathbf{p}\rho_l]. \quad (151)$$

Штрих у знака суммирования по узлам решетки означает, что следует исключить слагаемое с $\rho_l = 0$. Закон дисперсии в этом случае можно записать в следующем виде:

$$1 = -b \sum'_{\rho_l} \exp(i\mathbf{p}\rho_l) \exp(ik\rho_l)/\rho_l. \quad (152)$$

Замена в (152) суммирования интегрированием снова приводит к результату, соответствующему хаотическому расположению ядер (150). Поправочные члены, обусловленные периодичностью в расположении рассеивающих ядер, по порядку величины равны $(d/\lambda_{\text{гР}})^2 \sim 2\pi \operatorname{Re} b/d \ll 10^{-3}$, где d — постоянная кристаллической решетки.

Когда объем, занимаемый рассеивающей средой, достаточно велик ($V^{1/3} \gg l_s$), то становится существенным многократное рассеяние. Выше уже были рассмотрены уравнения дисперсии когерентной нейтронной волны для системы примесей малого размера ($a \ll \lambda_n$). Обратимся теперь к анализу распространения когерент-

ной нейтронной волны через объем, занятый неоднородной рассеивающей средой с произвольной структурой. Некогерентное рассеяние, вызывающее затухание когерентной нейтронной волны, можно обусловить флуктуациями плотности рассеивающего вещества, наличием нескольких изотопов и отличным от нуля спином рассеивающих ядер. Рассмотрим сначала влияние неоднородности рассеивателя.

В теории распространения волн в неоднородных средах (см., например, [32]) показано, что когерентное волновое поле $\langle \psi_c \rangle$ удовлетворяет уравнению Дайсона

$$\langle \psi_c(\mathbf{r}) \rangle = \psi_0(r) + \int \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}') M(\mathbf{r}'|\mathbf{r}'') \langle \psi_c(\mathbf{r}'') \rangle. \quad (153)$$

Здесь $M(\mathbf{r}'|\mathbf{r}'')$ — «массовый» оператор (аналог рассмотренного в разд. 1 оптического потенциала), учитывающий вклад флуктуаций потенциала:

$$\delta U = U(\mathbf{r}) - \langle U \rangle = (2\pi\hbar^2/m) b [\rho(\mathbf{r}) - \langle \rho \rangle]; \quad (154)$$

$G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ — функция Грина уравнения Шредингера с усредненным потенциалом $\langle U \rangle$. В случае очень холодных нейтронов, распространяющихся в неограниченной среде:

$$G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp[ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|]}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}; \quad (155)$$

$$k = \sqrt{2m[\varepsilon - U]}/\hbar. \quad (156)$$

Массовый оператор $M(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ можно записать в виде ряда теории возмущений. В первом исчезающем приближении относительно δU имеет место следующее соотношение [10, 15, 32]:

$$M(\mathbf{r}|\mathbf{r}') \approx M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \left[\frac{2\pi\hbar^2}{m} b \right]^2 G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}') K_{\rho\rho}(\mathbf{r}|\mathbf{r}'). \quad (157)$$

Здесь

$$K_{\rho\rho}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \langle [\rho(\mathbf{r}) - \langle \rho \rangle] [\rho(\mathbf{r}') - \langle \rho \rangle] \rangle \quad (158)$$

— корреляционная функция флуктуаций плотности. Величину $M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ можно выразить через поперечное сечение рассеяния в борновском приближении [формула (108)]:

$$M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \right)^2 \frac{G_0^*(\mathbf{r}|\mathbf{r}')}{V} \int \frac{d\kappa}{(2\pi)^3} \exp[-i\kappa(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] \left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle, \quad (159)$$

где κ — изменение волнового вектора при рассеянии.

Опустим временно мнимую часть длины когерентного рассеяния b . Тогда из (157) имеем

$$\text{Im } M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m} \text{Re } b \right)^2 K_{\rho\rho}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') \text{Im } G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}'). \quad (160)$$

Принимая во внимание, что в случае, когда объем V велик:

$$\operatorname{Im} G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \begin{cases} -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{\sin k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} & \varepsilon > \operatorname{Re} \langle U \rangle; \\ 0 & \varepsilon < \operatorname{Re} \langle U \rangle, \end{cases} \quad (161)$$

имеем из (160)

$$\begin{aligned} & \operatorname{Im} M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \\ & = \begin{cases} -\frac{\operatorname{Re} b}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \sin k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \operatorname{Re} \langle U \rangle \frac{K_{\rho\rho}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')}{\langle \rho \rangle} & \varepsilon > \operatorname{Re} \langle U \rangle; \\ 0 & \varepsilon < \operatorname{Re} \langle U \rangle. \end{cases} \end{aligned} \quad (162)$$

Учет наличия границы приводит к тому, что $\operatorname{Im} G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}') \neq 0$ и при $\varepsilon < \operatorname{Re} \langle U \rangle$ (УХН), так как имеется поток от источника внутри среды по направлению к границе с вакуумом. В этом случае $\operatorname{Im} M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ также отлична от нуля, но затухает при продвижении вглубь среды. Подробнее обсудим этот вопрос ниже. При $\varepsilon > \operatorname{Re} \langle U \rangle$ (очень холодные нейтроны) флуктуационное упругое рассеяние дает вклад в мнимую часть оптического потенциала, не зависящий от пространственных координат (внутри рассеивающей среды).

Если l — радиус корреляций флуктуаций плотности мал по сравнению с λ_n , то в случае очень холодных нейтронов выражение (162) принимает вид

$$\operatorname{Im} M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = -k \operatorname{Re} b \operatorname{Re} \langle U \rangle K_{\rho\rho}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')/\langle \rho \rangle. \quad (163)$$

При $l \ll \lambda_n$ радиус корреляций l определяет масштаб пространственной нелокальности «массового» оператора $M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$, т. е. $\operatorname{Im} \int M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \approx l^3 \operatorname{Im} M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r})$.

Сравним вклад $\operatorname{Im} M_1$ в оптический потенциал с величиной $\operatorname{Im} \langle U \rangle$, обусловленной неупругим рассеянием и поглощением нейтронов. Как правило, $\operatorname{Im} \langle U \rangle = \alpha \operatorname{Re} \langle U \rangle$, где $\alpha = 10^{-3} \div 10^{-5}$, и получаем

$$\frac{l^3 |\operatorname{Im} M_1|}{|\operatorname{Im} \langle U \rangle|} = \frac{1}{\alpha} k \operatorname{Re} b l^3 \langle \rho \rangle \langle (\Delta\rho/\langle \rho \rangle)^2 \rangle. \quad (164)$$

В случае равновесных флуктуаций плотности

$$\langle (\Delta\rho/\langle \rho \rangle)^2 \rangle = k_B T \beta_T / V_0, \quad (165)$$

где β_T — изотермическая сжимаемость; k_B — постоянная Больцмана; $V_0 \sim l^3$. Характерные значения β_T для металлов лежат вблизи 10^{-12} см/дин. Полагая $T = 300^\circ \text{K}$, $\operatorname{Re} b = 10^{-12}$ см, $k =$

$= 10^6 \text{ см}^{-1}$, $\langle \rho \rangle = 10^{23} \text{ см}^{-3}$, имеем из (164)

$$\frac{l^3 |\text{Im } M_1|}{|\text{Im } \langle U \rangle|} \ll 10^{-4} \text{ при } \varepsilon > \text{Re } \langle U \rangle. \quad (166)$$

Аналогичным образом можно получить оценку при $l \ll \lambda$ и в случае слабых статических флуктуаций плотности (вследствие неоднородности среды). Действительно, при $\langle (\Delta \rho / \langle \rho \rangle)^2 \rangle \approx 10^{-4}$ имеем

$$\frac{l^3 |\text{Im } M_1|}{|\text{Im } \langle U \rangle|} \ll 10^{-2}. \quad (167)$$

В том случае, когда $l \gtrsim \lambda$, оценка вклада $|\text{Im } M_1|$ изменяется. Область нелокальности $M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ в этом случае определяется затуханием функции $G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$. Для оценок будем полагать характерный масштаб пространственной нелокальности $M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ равный λ_n . Тогда из (164) имеем при $\varepsilon > \text{Re } \langle U \rangle$

$$\frac{\lambda_n^3 |\text{Im } M_1|}{|\text{Im } \langle U \rangle|} \approx \frac{2\pi}{\alpha} \lambda_n^2 \text{Re } b \langle \rho \rangle \left\langle \left(\frac{\Delta \rho}{\langle \rho \rangle} \right)^2 \right\rangle. \quad (168)$$

Отсюда в случае равновесных флуктуаций плотности получаем

$$\frac{\lambda_n^3 |\text{Im } M_1|}{|\text{Im } \langle U \rangle|} \ll 10^{-4}. \quad (169)$$

В случае статических неоднородностей при $\left\langle \left(\frac{\Delta \rho}{\langle \rho \rangle} \right)^2 \right\rangle \approx 10^{-4}$ имеем

$$\frac{\lambda_n^3 |\text{Im } M_1|}{|\text{Im } \langle U \rangle|} \ll 1. \quad (170)$$

Таким образом, некогерентное рассеяние на крупномасштабных неоднородностях может привести к существенному затуханию когерентной волны очень холодных нейтронов. Приведенные оценки получены в первом исчезающем приближении теории возмущений. Чтобы установить область применимости M_1 -приближения, необходимо найти оценку следующего члена ряда теории возмущений для массового оператора (см., например, [32]). Квазиклассический расчет прохождения скалярной волны через неоднородную среду при $l \gg \lambda_n$ приведен в работе [35].

Включим в рассмотрение мнимую часть длины когерентного рассеяния $\text{Im } b$. Это приводит к появлению дополнительного слагаемого

$$\begin{aligned} \Delta \text{Im } M_1(\mathbf{r}|\mathbf{r}') &= -\frac{2 \text{Re } b}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \text{Im } \langle U \rangle \frac{\bar{K}_{\rho\rho}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')}{\langle \rho \rangle} \times \\ &\times \begin{cases} \cos k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| & \varepsilon > \text{Re } \langle U \rangle, \\ \exp[-\kappa_0|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|] & \varepsilon < \text{Re } \langle U \rangle, \end{cases} \end{aligned} \quad (171)$$

где

$$\kappa_0 = \sqrt{2m [\operatorname{Re} \langle U \rangle - \varepsilon]} / \hbar. \quad (172)$$

Величина $\Delta \operatorname{Im} M_1$ учитывает влияние своеобразного «блок-эффекта» в поглощении нейтронов: поглощение нейтронов оказывается ослабленным при флуктуациях нейтронного поля, обусловленных неоднородностью рассеивающей среды. На возможность подобного эффекта указано в работах [6]. Величина этой поправки мала [10]. Учет $\operatorname{Im} \langle U \rangle$ при вычислении G_0 в массовом операторе приводит к дополнительной поправке того же порядка величины.

Выражения (162) и (171) соответствуют случаю, когда рассеивающая среда заполняет все пространство. Оценим теперь влияние границы среды, ограничиваясь для простоты рассмотрением одномерной задачи. Массовый оператор M_1 при малом масштабе корреляций l в среде имеет вид

$$M_1'(z|z_0) = \begin{cases} -\langle (\Delta U)^2 \rangle l \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2\kappa_0} \times \\ \times \left[1 + \frac{\kappa_0 + ik}{\kappa_0 - ik} \exp(-2\kappa_0 z) \right] \delta(z - z_0); & z, z_0 > 0 \\ 0; & z, z_0 < 0. \end{cases} \quad (173)$$

Граница среды расположена в плоскости $z = 0$. ΔU — амплитуда флуктуаций потенциала среды. Этот вид массового оператора позволяет найти решение уравнения Дайсона (153) в аналитической форме, а именно при $z > 0$ в области, занятой рассеивающей средой

$$\langle \psi_c(z) \rangle = C J_q(c \exp(-\kappa_0 z)),$$

где

$$c^2 = (1 - q^2) [(\kappa_0 + ik_0)/(\kappa_0 - ik_0)];$$

k_0 — волновой вектор УХН в ловушке;

$$q^2 = 1 - \frac{l \operatorname{Re} \kappa_0}{2} \left\langle \left(\frac{\Delta U}{\langle U \rangle} \right)^2 \right\rangle \left[1 - \frac{\varepsilon}{\operatorname{Re} \langle U \rangle} \right]^{-2} \times$$

$$\times \left[1 + i \frac{1}{2} \frac{\operatorname{Im} \langle U \rangle}{\operatorname{Re} \langle U \rangle} \frac{1 - 4\varepsilon/\operatorname{Re} \langle U \rangle}{1 - \varepsilon/\operatorname{Re} \langle U \rangle} \right].$$

Используя стандартные граничные условия на поверхности среды ($z = 0$), можно найти амплитуду отраженной волны от этой поверхности и коэффициент отражения R . Он имеет вид*

$$R = SQ,$$

где

$$S = 1 - \left\langle \left(\frac{\Delta U}{\langle U \rangle} \right)^2 \right\rangle \frac{l \operatorname{Re} \kappa_0}{1 - \varepsilon/\operatorname{Re} \langle U \rangle} \frac{\varepsilon}{\operatorname{Re} \langle U \rangle} \times$$

$$\times \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\operatorname{Im} \langle U \rangle}{\operatorname{Re} \langle U \rangle} \frac{(\varepsilon/\operatorname{Re} \langle U \rangle)^{1/2}}{[1 - \varepsilon/\operatorname{Re} \langle U \rangle]^{3/2}} \right]$$

* Этот результат получен совместно с А. В. Шелагиным.

И

$$Q = 1 + 2 \frac{\text{Im} \langle U \rangle}{\text{Re} \langle U \rangle} \left[\frac{\varepsilon / \text{Re} \langle U \rangle}{1 - \varepsilon / \text{Re} \langle U \rangle} \right]^{1/2} \times \\ \times \left[1 + \frac{l \text{Re} \kappa_0}{2} \left\langle \left(\frac{\Delta U}{\langle U \rangle} \right)^2 \right\rangle \frac{\varepsilon / \text{Re} \langle U \rangle}{[1 - \varepsilon / \text{Re} \langle U \rangle]^2} \right].$$

Фактор $S - 1$ обусловлен влиянием границы рассеивающей среды, тогда как поправка $Q - 1$ имеет место и в приближении (162) и (171). Видно, что оба слагаемых имеют один порядок величины. Из этих результатов следует, что влияние неоднородности среды при малом масштабе неоднородности на коэффициент отражения нейтронной волны мало. Исключение может составить только область энергий $\varepsilon \approx \langle U_0 \rangle$, для исследования которой необходимо использовать другие методы, поскольку поправки оказываются велики, а теория возмущений неприменимой. В общем случае коэффициент отражения (поглощения) можно вычислить с помощью формул оптической модели (81), (82), если известна волновая функция $\langle \psi_c \rangle$.

Наконец, обсудим влияние спиновой и изотопической некогерентности рассеяния нейтронов очень низких энергий. Поскольку спиновая некогерентность проявляется при рассеянии на отдельном ядре, то эту часть сечения некогерентного рассеяния следует включить в мнимую часть длины рассеяния b на одном ядре. В рассматриваемой области энергий $\sigma^{\text{incoh}} \ll \sigma^{\text{inel}}$, так как последнее пропорционально $1/v_n$, а $\sigma^{\text{incoh}} \approx \text{const}$. Изотопическая некогерентность аналогична рассмотренным выше статическим флуктуациям плотности рассеивающей среды* и ее можно учесть включением соответствующего слагаемого в массовый оператор:

$$M^{\text{изотоп}}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') \approx M_1^{\text{изотоп}}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = (2\pi\hbar^2/m)^2 K_{bb}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') \langle \rho \rangle^2 G_0(\mathbf{r}|\mathbf{r}'). \quad (174)$$

Здесь $K_{bb}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ — корреляционная функция флуктуаций длины когерентного рассеяния $b(\mathbf{r})$. Очевидно, приведенные выше результаты можно использовать для получения оценок $\text{Im} M_1^{\text{изотоп}}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$. Это слагаемое может внести заметный вклад в затухание когерентной волны, если только распределение изотопов коррелировано, а радиус корреляции $l \gtrsim \lambda_n$.

Рассмотрим теперь влияние неоднородности среды на закон дисперсии нейтронной волны $\mathbf{k} = \mathbf{k}(\varepsilon)$ (\mathbf{k} — волновой вектор нейтрона; ε — энергия нейтрона). При этом неоднородность среды не обязательно должна быть обусловлена тепловыми флуктуациями плотности или внедрением случайных примесей. Приведенный выше расчет позволяет рассмотреть прохождение когерентной нейтронной волны через периодическую структуру из тонких

* Здесь не учитывается влияние изотопного состава на спектр частот собственных колебаний кристалла.

пленок и т. д. Преобразуя по Фурье однородное уравнение Дайсона (153), получаем соотношение дисперсии в следующем виде:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \varepsilon - \langle U_R \rangle - \operatorname{Re} m(\mathbf{E}, \mathbf{k}), \quad (175)$$

где $\langle U_R \rangle$ определено (2), а

$$m(\mathbf{E}, \mathbf{k}) = \int d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') M(\mathbf{E}, \mathbf{r} - \mathbf{r}') \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]. \quad (176)$$

В M_1 -приближении

$$m_1(\mathbf{E}, \mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} k_{\gamma\gamma}(\mathbf{q}) / [E - \langle U_R \rangle - (\hbar^2/2m)(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2 + i\eta], \quad (177)$$

где

$$k_{\gamma\gamma}(\mathbf{q}) = \int d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] K_{\gamma\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (178)$$

$K_{\gamma\gamma}(\mathbf{r})$ — корреляционная функция величины $(2\pi\hbar^2/m) b(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r})$. В тех случаях, когда отклонения от однородности в среде обусловлены наличием некоторой периодической структуры, фурье-образ корреляционной функции флуктуаций $\gamma(\mathbf{r})$ имеет вид

$$k_{\gamma\gamma}(\mathbf{q}) = [(2\pi)^3/V_{\text{яч}}^2] \sum_{\mathbf{s}} |A_{\gamma}(\mathbf{s})|^2 \delta(\mathbf{q} - 2\pi\mathbf{s}), \quad (179)$$

где
$$A_{\gamma}(\mathbf{s}) = \int_{V_{\text{яч}}} \exp[2\pi i \mathbf{s} \mathbf{r}] [\gamma(\mathbf{r}) - \langle \gamma \rangle] d\mathbf{r}. \quad (180)$$

Соответственно из (177) имеем

$$\operatorname{Re} m_1(\mathbf{E}, \mathbf{k}) = \frac{1}{V_{\text{яч}}^2} \sum_{\mathbf{s}} \frac{|A_{\gamma}(\mathbf{s})|^2}{E - \langle U_R \rangle - \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - 2\pi\mathbf{s})^2}. \quad (181)$$

Если период [структуры] l мал по сравнению с длиной волны нейтрона λ_n , то $2\pi|\mathbf{s}| \gg 2\pi/\lambda_n = k$ и

$$\operatorname{Re} m_1(\mathbf{E}, \mathbf{k}) \approx -\frac{1}{V_{\text{яч}}^2} \frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{s}} \frac{|A_{\gamma}(\mathbf{s})|^2}{|2\pi\mathbf{s}|^2}. \quad (182)$$

Из (175) и (182) следует, что $l \ll \lambda_n$ периодическое нарушение однородности среды приводит к понижению потенциального барьера (или к углублению потенциальной ямы) рассеивающего вещества. Это изменение оптического потенциала мало: оно равно по порядку величины $\langle U_R \rangle \left\langle \left(\frac{\Delta\gamma}{\gamma} \right)^2 \right\rangle \left(\frac{b}{l} \right)$. Более существенное изменение закона дисперсии имеет место, если период структуры сравним с длиной волны нейтрона, т. е. при $l \sim \lambda_n$. В частности, интересна ситуация, когда удовлетворяется условие

$$k^2 \approx (\mathbf{k} - 2\pi\mathbf{s}_0)^2 \quad (\text{условие Лауэ — Брэгга}). \quad (183)$$

В этом случае рассмотрение одной волны с определенным волновым вектором недостаточно и необходимо учесть взаимодействие волн с волновыми векторами \mathbf{k} и $\mathbf{k} - 2\pi\mathbf{s}_0$. Закон дисперсии тогда можно записать в следующем виде:

$$E - \langle U_R \rangle - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{V^2} |A_V(\mathbf{s}_0)|^2 \left[E - \langle U_R \rangle - \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - 2\pi\mathbf{s}_0)^2}{2m} \right]^{-1}. \quad (184)$$

В частности, из (184) вытекает существование запрещенных энергетических зон в спектре пропускания периодической структуры (см., например, [10, 36]).

Решая уравнение дисперсии с учетом многократного рассеяния волн на неоднородностях среды, можно найти эффективное волновое число нейтронной волны в среде и показатель преломления среды (он в общем случае является комплексной величиной). Имея в своем распоряжении эти параметры, можно вычислить коэффициенты отражения и прохождения нейтронной волны (и поперечное сечение рассеяния) для конечных объемов вещества. Для того чтобы можно было пренебречь ограниченностью объема при вычислении корреляционной функции $K_{\gamma\gamma}$, необходимо $V^{1/3} \gg l$. Это является относительно слабым ограничением в практически интересных случаях. В случае слабого рассеяния на неоднородностях среды можно воспользоваться результатами борновского приближения теории возмущений.

Обсудим кратко возмущение нейтронного поля вследствие шероховатостей границы среды [16—19, 33]. Будем полагать, что отклонение отражающей нейтроны поверхности от идеально гладкой можно описать с помощью некоторой случайной функции $\zeta(x, y)$, т. е. граница раздела сред задана в виде:

$$z = \zeta(x, y). \quad (185)$$

Для простоты будем полагать $\langle \zeta(x, y) \rangle = 0$. Тогда идеально гладкая граница раздела, очевидно, совпадает с плоскостью $z = 0$.

Вычислим коэффициент поглощения УХН в среде, ограниченной такой шероховатой поверхностью. Само рассеивающее вещество будем полагать однородным. По определению W коэффициент поглощения УХН — отношение потока $J_z^{(-)} = J_z^{\text{пад}} + \langle J_z^{\text{отр}} \rangle$ к падающему потоку $J_z^{\text{пад}}$, т. е.

$$W = J_z^{(-)} / J_z^{\text{пад}}, \quad (186)$$

где $\langle J_z^{\text{отр}} \rangle$ — средний отраженный поток. Ось oz для определенности полагаем направленной внутрь среды.

В случае малых и пологих неоднородностей границы, когда $\langle |\zeta|^m \rangle \ll \lambda_n^m$ и $\langle |\nabla \zeta|^m \rangle \ll 1$, для вычисления $\psi_i(\mathbf{r})$ нейтронного поля в i -ой среде можно воспользоваться следующим разложением

в ряд теории возмущений по возрастающим степеням $|\zeta|$ и $|\nabla\zeta|$ [37]:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i^{(0)}(\mathbf{r}) + \psi_i^{(1)}(\mathbf{r}) + \psi_i^{(2)}(\mathbf{r}) + \dots \quad (187)$$

Здесь $\psi_i^{(0)}$ описывает распространение нейтронов в ловушке (внутри и в стенках) с гладкой границей раздела; $\psi_i^{(1)}$ представляет собой поправку первого порядка за счет неоднородностей и т. д. Подставляя это разложение в стандартные условия непрерывности волновой функции ψ и ее нормальной производной на границе раздела сред, получаем систему уравнений для отыскания $\psi_i(\mathbf{r})$. При этом граничные условия на шероховатой поверхности удается преобразовать в условия на гладкой поверхности раздела, содержащей поверхностные источники нейтронного поля. Эта процедура была проведена в работе [16] до второго порядка (см. также работы [17, 18]). Такой объем вычислений позволяет найти основной вклад в угловое распределение рассеянных нейтронов

$$I_+(\theta) = \frac{1}{4} \left(\frac{kv_{\text{ГР}}}{v} \right)^4 w_{\zeta\zeta}(k_{x_i} - k_{x_f}, k_{y_i} - k_{y_f}) \quad (188)$$

и поправку к коэффициенту поглощения W_0

$$\begin{aligned} W - W_0 = & W_0 \left\{ 2k \sqrt{\left(\frac{v_{\text{ГР}}}{v} \right)^2 - \cos^2 \theta} \times \right. \\ & \times \left[\frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{p_x^2 + p_y^2 \leq k^2} dp_x dp_y w_{\zeta\zeta}(p_x - k_x, p_y - k_y) \times \right. \\ & \times \left. \left(\frac{k^2 - p_x^2 - p_y^2}{\sqrt{p_x^2 + p_y^2 + k^2 [(v_{\text{ГР}}/v)^2 - 1]}} - \frac{\sqrt{k^2 - p_x^2 - p_y^2} \cos \theta}{\sqrt{(v_{\text{ГР}}/v)^2 - \cos^2 \theta}} \right) \right] + \\ & + k^2 (v_{\text{ГР}}/v)^2 \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x dp_y \times \\ & \times w_{\zeta\zeta}(p_x - k_x, p_y - k_y) \left[1 - \frac{k \sqrt{(v_{\text{ГР}}/v)^2 - \cos^2 \theta}}{\sqrt{[(v_{\text{ГР}}/v)^2 - 1] k^2 + p_x^2 + p_y^2}} \right] \left. \right\}. \quad (189) \end{aligned}$$

Здесь

$$W_0 = (u/v_{\text{ГР}})^2 \frac{2 \cos \theta}{\sqrt{(v_{\text{ГР}}/v)^2 - \cos^2 \theta}} \quad (190)$$

— коэффициент поглощения УХН в среде с гладкой границей [2];
 θ — угол падения нейтронной волны;

$$w_{\zeta\zeta}(\kappa_x, \kappa_y) = \frac{1}{Q} \langle |\tilde{\zeta}(\kappa_x, \kappa_y)|^2 \rangle; \quad (191)$$

Q — площадь облучаемой подстилающей поверхности;

$$\tilde{\zeta}(\kappa_x, \kappa_y) = \iint dx dy \exp[-i\kappa_x x - i\kappa_y y] \zeta(x, y). \quad (192)$$

Скорости v_{gp} и u определены формулами (79). Если l — длина корреляции неоднородностей границы мала по сравнению с длиной волны нейтрона, то с точностью до членов линейных по l имеем

$$W = W_0 [1 + (kv_{gp}/v)^2 \langle (\zeta^2) \rangle] \left[1 - kl \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sqrt{(v_{gp}/v)^2 - \cos^2 \theta} \right]. \quad (193)$$

Усреднение этого выражения по изотропному угловому распределению падающих на стенку нейтронов и по максвелловскому спектру скоростей УХН приводит к результату

$$\begin{aligned} \langle \langle W \rangle \rangle &= \langle \langle W_0 \rangle \rangle \left[1 + \left(k \frac{v_{gp}}{v} \right)^2 \langle \zeta^2 \rangle \right] - \\ &- \frac{8\sqrt{\pi}}{15} \left(\frac{u}{v_{gp}} \right)^2 \left(k \frac{v_{gp}}{v} \right)^3 \langle \zeta^2 \rangle l; \end{aligned} \quad (194)$$

$$\langle \langle W_0 \rangle \rangle = \frac{\pi}{2} \left(\frac{u}{v_{gp}} \right)^2. \quad (195)$$

Таким образом, наличие шероховатостей поверхности среды приводит к некоторому увеличению коэффициента поглощения при однократном столкновении нейтрона со стенкой ловушки: при $\lambda_n = 10^{-5}$ см, $\langle \zeta^2 \rangle^{1/2} = 5,0 \cdot 10^{-7}$ см ($W - W_0$)/ $W_0 \approx 0,1$. Расчет коэффициента поглощения УХН в среде, когда граница содержит редко расположенные некоррелированные примеси малого размера, был проведен в работе [33]. Влияние пониженной плотности вещества в приповерхностном слое на поглощение УХН было рассмотрено в работе [17]. В статье [19] было исследовано воздействие поверхностных пленок на поглощение нейтронов в стенках ловушки. В частности, было показано, что действие пленки кроме собственно выведения УХН проявляется в экранировании материала стенки: пленка, обладающая для УХН потенциалом притяжения, увеличивает интенсивность выведения ультрахолодных нейтронов, а отражающая — уменьшает. Оценка поглощения УХН в загрязняющих пленках показывает, что для объяснения экспериментально измеренного аномально малого времени жизни УХН в ловушке толщина пленки должна иметь слишком большое значение.

Рассмотрим теперь корреляционную функцию нейтронного поля с учетом многократного рассеяния на неоднородностях среды $K_{\Psi\Psi}(\mathbf{r}_1|\mathbf{r}_2) = \langle \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}_2) \rangle$. Эта функция удовлетворяет уравнению

типа уравнения Бете — Сольпитера [15, 32, 38]

$$\begin{aligned} \langle \psi^*(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_2) \rangle &= \langle \psi^*(\mathbf{r}_1) \rangle \langle \psi(\mathbf{r}_2) \rangle + \\ &+ \int \dots \int d\rho_1 d\rho_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 \langle G(\mathbf{r}_1, \rho_1) \rangle \langle G(\mathbf{r}_2, \rho_2) \rangle \times \\ &\times \mathcal{B}_{\gamma\gamma}(\rho_1, \mathbf{r}'_1; \rho_2, \mathbf{r}'_2) \langle \psi^*(\mathbf{r}'_1) \psi(\mathbf{r}'_2) \rangle. \end{aligned} \quad (196)$$

Здесь $\mathcal{B}_{\gamma\gamma}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4)$ — ядро так называемого оператора интенсивности. В первом приближении теории возмущений

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\gamma\gamma}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{y}, \mathbf{y}') &\approx \mathcal{B}_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; \mathbf{y}, \mathbf{y}') = \\ &= \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(\mathbf{y} - \mathbf{y}') K_{\gamma\gamma}(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \end{aligned} \quad (197)$$

и уравнение для корреляционной функции нейтронного поля в пространственно-однородной среде принимает вид

$$\begin{aligned} \langle \psi^*(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_2) \rangle &= \langle \psi^*(\mathbf{r}_1) \rangle \langle \psi(\mathbf{r}_2) \rangle + \\ &+ \int d\mathbf{r}'_1 \int d\mathbf{r}'_2 \langle G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) \rangle \langle G(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2) \rangle \times K_{\gamma\gamma}(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2) \langle \psi^*(\mathbf{r}'_1) \psi(\mathbf{r}'_2) \rangle. \end{aligned} \quad (198)$$

Решение этого уравнения в случае мелкомасштабных неоднородностей ($kl \ll 1$) получено в монографии [32]. Приведем результат для среднего квадрата флуктуаций поля $\Phi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - \langle \psi(\mathbf{r}) \rangle$:

$$\langle \Phi^* \Phi \rangle / \langle \psi(\mathbf{r}) \rangle^2 = |k|^4 \varepsilon^2 l^3 / 8\pi \operatorname{Im} k_{\text{эф}}. \quad (199)$$

Здесь $k_{\text{эф}}$ — волновой вектор распространения когерентной нейтронной волны в неоднородной среде; ε^2 — дисперсия флуктуаций плотности вещества. Этому выражению можно придать следующий вид:

$$\langle \Phi^* \Phi \rangle / \langle \psi \rangle^2 = |k|^4 \varepsilon^2 l^3 / (8\pi \operatorname{Im} k') [n_{\text{эф}} / (2n_{\text{эф}}^2 - 1)], \quad (200)$$

где $n_{\text{эф}}$ — показатель преломления среды. Первый множитель в (200) представляет собой относительное значение среднего квадрата флуктуаций нейтронного поля в приближении однократного рассеяния. Многократное рассеяние, которое учитывается фактором $n_{\text{эф}} / (2n_{\text{эф}}^2 - 1) \ll 1$, ослабляет флуктуации поля. Формулы (199), (200) применимы при малых осцилляциях нейтронного поля $\langle \Phi^* \Phi \rangle / \langle \psi \rangle^2 \ll 1$.

Уточнение решения уравнения (198) с учетом более высоких членов ряда теории возмущений требует предварительного отыскания средней функции Грина волнового уравнения $\langle G \rangle$. Отметим, что при анализе ряда теории возмущений оказывается эффективным диаграммный метод квантовой теории поля [15, 32]. Упомянутые выше операции должны быть самосогласованы, поскольку оператор интенсивности и массовый оператор M связаны между

собой отношением, вытекающим из закона сохранения числа частиц в непоглощающей среде («оптическая теорема» [38]):

$$M^*(x, y) - M(y, x) = \int dx' \int dy' \times \\ \times \{ \langle G^*(x', y') \rangle - \langle G_1(y', x') \rangle \} \mathcal{F}(x', x; y', y). \quad (201)$$

В первом порядке теории возмущений

$$\left. \begin{aligned} M(x, y) &\approx M_1(x, y) = G_0(x, y) K(x, y); \\ \mathcal{F}(x, x'; y, y') &\approx \mathcal{F}_1(x, x'; y, y') = \\ &= \delta(x - x') \delta(y - y') K(x, y) \end{aligned} \right\} \quad (202)$$

и справедливость соотношения (201) проверяется непосредственно.

В квазиклассическом приближении уравнение Бете — Сольпитера для корреляционной функции нейтронного поля сводится к более простому уравнению переноса [38], которое учитывает лишь интегрально баланс частиц, но не принимает во внимание интерференционные явления. Уравнение переноса неприменимо, разумеется, при описании такого существенно волнового явления, как полное отражение, когда важен вклад неоднородных волн, и для процессов, проходящих в системах малого объема: $V^{1/3} \lesssim 10^{-4}$ см [39]. В качестве примера применения уравнения переноса в физике УХН рассмотрим распространение ультрахолодных нейтронов в нейтронных волноводах с шероховатыми стенками. Обычно решение такой задачи проводится в рамках классической механики, аналогично рассмотрению течения разреженного газа по трубам [40]. Так же как и в задачах о хранении УХН в ловушках, экспериментальные данные по течению нейтронов по нейтронным волноводам не согласуются с результатами теоретических расчетов достаточно полно. Представляет интерес другой подход к решению этой задачи, а именно: движение ультрахолодных нейтронов можно рассмотреть как распространение волны в многомодовом волноводе. В случае шероховатых поверхностей волновода для когерентной нейтронной волны можно снова записать уравнение Дайсона [42], учитывающее затухание среднего нейтронного поля вследствие рассеяния на случайных неоднородностях стенок волновода. Шероховатости поверхности волновода приводят также к взаимодействию между отдельными нормальными модами волновода и к изменению длины волны, групповой скорости и т. д. по сравнению со случаем гладкого волновода. Корреляционная функция нейтронного поля удовлетворяет уравнению типа Бете — Сольпитера. Пренебрегая тонкой интерференционной структурой нейтронного поля, можем ограничиться исследованием более простого уравнения переноса для плотности нейтронов. В случае крупномасштабных неоднородностей ($l/\lambda_n \gg 1$) это уравнение удастся свести к уравнению диффузионного типа, описывающему

25. Ахизер А., Померанчук И. Некоторые вопросы теории ядра. М., Гостехиздат, 1950.
26. Фридель К. Дислокации. Пер. с англ. М., «Мир», 1967; Зайцев Р. О. «ЖЭТФ», 1968, т. 54, с. 1445.
27. Zimmerman S. «Appl. Phys.», 1974, v. 3, p. 235; Стецов Я. И. «ФТТ», 1975, т. 17, с. 118; Allen R. E. e.a. «Phys. Rev. B», 1971, v. 4, p. 1648, 1661, 1682; Brown R. C., March N. H. «Phys. Repts. C», 1976, v. 24, p. 77.
28. Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М., «Наука», 1972.
29. Франк И. М. «Природа», 1972, № 9, с. 24.
30. Антонов А. В. и др. «Письма в ЖЭТФ», 1969, т. 10, с. 380.
31. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. Пер. с англ., М., Изд. иностр. лит., 1956.
32. Татарский В. И. Распространение волн в турбулентной атмосфере. М., «Наука», 1967.
33. Степанов А. В. «ТМФ», 1975, т. 22, с. 425.
34. Игнатович В. К. Сообщения ОИЯИ P4-7831. Дубна, 1974.
35. Андреев И. В. «ЖЭТФ», 1965, т. 48, с. 1437.
36. Бриллюэн Л., Пароди М. Распространение волн в периодических структурах. Пер. с англ., М., Изд. иностр. лит., 1959; De Wames K. E., Sinka S. K. «Phys. Rev. B», 1973, v. 7, p. 917; Антонов А. В. и др. Препринт ФИАН СССР, 1974, № 43.
37. Рытов С. М. Введение в статистическую радиофизику. М., «Наука», 1966.
38. Барабаненков Ю. Н., Финкельберг В. М. «ЖЭТФ», 1967, т. 53, с. 978; Барабаненков Ю. Н. «УФН», 1975, т. 117, с. 49.
39. Jauho P., Riska D. O. «Nucl. Science Enging.», 1968, v. 33, p. 303; Osborn R. K., Yip S. The Foundations of Neutron Transport Theory. N. Y., 1967.
40. Берчану И., Игнатович В. К. Сообщения ОИЯИ P4-7331. Дубна, 1973; «Vacuum», 1973, v. 23, p. 441.
41. Robson J. M., Winfield D. «Phys. Lett. B», 1972, v. 40, p. 537.
42. Басс Ф. Г., Фукс И. М. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности. М., «Наука», 1972.
43. Golub R., Pendlebury J. M. «Phys. Lett. A», 1974, v. 50, p. 177.
44. Saam W. F. «Phys. Rev. A», 1973, v. 8, p. 1048.
45. Померанчук И. Я. Собрание научных трудов, т. 1. М., «Наука», 1972, с. 234.
46. Сатаров Л. М. Препринт ИАЭ-2681, 1976.
47. Грошев Л. В. и др. Сообщения ОИЯИ, P3-9534, Дубна, 1976.

46]. При этом возможно, в принципе, изучение поверхностных мод колебаний среды, которые подавляются в случае рассеяния ОХН вкладом объемных колебаний. Это замечание служит иллюстрацией того факта, что исследование распространения нейтронов низких энергий представляет интерес не только само по себе (достаточно напомнить, что аномальная утечка УХН из ловушки не имеет до сих пор объяснения [47]), но скорее как метод изучения статических и динамических свойств вещества. Особый интерес представляют эксперименты по взаимодействию поляризованных нейтронов с магнитными материалами [3].

Автор выражает глубокую признательность М. В. Казарновскому за плодотворные дискуссии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я. Б. «ЖЭТФ», 1959, т. 36, с. 1952.
2. Шапиро Ф. Л. Сообщения ОИЯИ, РЗ-7135. Дубна, 1973.
3. Егоров А. И. и др. «Ядерная физика», 1974, т. 19, с. 300.
4. Steyerl A. В кн.: II Международная школа по нейтронной физике. Алушта, 1974. Препринт ОИЯИ ДЗ-7991. Дубна, 1974.
5. Steyerl A., Trüstedt W.-D. «Z. Phys.», 1974, Bd 267, S. 379.
6. Франк И. М. Сообщения ОИЯИ РЗ-7809, РЗ-7810. Дубна, 1974.
7. Луциков В. И. В кн.: II Международная школа по нейтронной физике. Алушта, 1974. Препринт ОИЯИ ДЗ-7991. Дубна, 1974.
8. Игнатович В. К. Сообщения ОИЯИ Р4-6553, Р4-6681. Дубна, 1972.
9. Степанов А. В. «Краткие сообщения по физике», ФИАН СССР, 1974, № 8, с. 34.
10. Степанов А. В. Препринт ИЯИ АН СССР, П 0004. М., 1975.
11. Гольдбергер М., Ватсон К. Теория столкновений. М., «Мир», 1967.
12. Feshbach Н. «Ann. Phys.», 1958, v. 5, p. 357. Имеется перевод в кн.: Лейн А., Томас Р. Теория ядерных реакций при низких энергиях. Пер. с англ. М., Изд. иностр. лит., 1960.
13. Kerman A. K., Mc. Manus H., Thaler R. M. «Ann. Phys.», 1959, v. 8, p. 551.
14. Placzek G., Van Hove L. «Nuovo cimento», 1955, v. 11, p. 223.
15. Степанов А. В. In.: Pulsed Neutron Research. V.1, IAEA, Vienna, 1965, p. 355; Казарновский М. В., Степанов А. В. «Труды ФИАН СССР», 1964, т. 33, с. 205.
16. Степанов А. В., Шелагин А. В. «Краткие сообщения по физике», ФИАН СССР, 1974, № 1, с. 12.
17. Игнатович В. К. Сообщения ОИЯИ Р4-7055. Дубна, 1973; Игнатович В. К., Луциков В. И. Сообщения ОИЯИ РЗ-8795, Дубна, 1975.
18. Steyerl A. «Z. Phys.», 1972, Bd 254, S. 169.
19. Игнатович В. К., Степанов А. В. Сообщения ОИЯИ Р4-7832. Дубна, 1974.
20. Гуревич И. И., Тарасов Л. В. Физика нейтронов низких энергий. М., «Наука», 1965.
21. Турчин В. Ф. Медленные нейтроны. М., Атомиздат, 1963.
22. Goldberger M., Seitz F. «Phys. Rev.», 1947, v. 71, p. 294. Имеется перевод в кн.: Исследования радиоактивных излучений кристалл-дифракционным методом. Пер. с англ., М., Изд. иностр. лит., 1949.
23. Базь А. И. и др. «Ядерная физика», 1968, т. 8, с. 65; Mehringer W. «Z. Phys.», 1968, Bd 210, S. 434.
24. Lax M. «Phys. Rev.», 1952, v. 85, p. 624; «Rev. Mod. Phys.», 1951, v. 23, p. 287.

трансформацию углового распределения движущихся нейтронов: диффузия происходит в «пространстве номеров нормальных колебаний нейтронного поля» [42]. Оказывается, что на расстоянии x от границы волновода интенсивность поля отлична от нуля лишь в тех модах, которые отстоят от начального номера n_0 (при $x = 0$) на $\sqrt{(\Delta n)^2}$, причем $(\Delta n)^2 = 4D_{n_0}x$. Величина D_{n_0} определяется статистическими свойствами стенок волновода и имеет смысл коэффициента диффузии. Соответственно интенсивность поля как функции номера моды имеет вид:

$$I(x) = \frac{I_0}{2\sqrt{\pi D_{n_0} x}} \exp[-(n - n_0)^2 / (4D_{n_0}x)], \quad (203)$$

т. е. неэкспоненциально зависит от длины трассы в волноводе. Возможно, что особенности прохождения УХН по нейтронводам обусловлены описанной выше трансформацией интенсивности нейтронного поля на шероховатостях стенок нейтронвода. Заметим, наконец, что если макроскопическое сечение некогерентного рассеяния на неоднородностях $\Sigma_{\text{incoh}} \gg \Sigma_{\text{inel}}$, то выход ОХН из неоднородного конвертора падает приблизительно в $\sqrt{\Sigma_{\text{incoh}}/\Sigma_{\text{inel}}}$ раз вследствие роста длины пути нейтрона в веществе (см. [2]).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе было получено выражение для оптического потенциала, описывающего когерентное поле ультрахолодных нейтронов в веществе. Исходным пунктом расчета послужили известные формулы теории многократного рассеяния Ватсона, учитывающие возможность возбуждения рассеивающей системы. Аналогичная «оптическая» модель была предложена для того, чтобы учесть затухание когерентной нейтронной волны вследствие рассеяния на неоднородностях среды. Найденный эффективный оптический потенциал позволяет найти эффективное волновое число в среде и вычислить показатель преломления материала. Этот показатель преломления, характеризующий распространение волны в неограниченной среде, используют при решении задачи о рассеянии нейтронов на ограниченных объемах рассеивающего вещества. Погрешности такого подхода в случае ОХН ($\epsilon_n > \epsilon_{\text{TP}}$) малы, если толщина рассеивающего слоя велика по сравнению с радиусом корреляций флуктуаций. Следует иметь в виду, что $\Delta k_{\text{эф}}$ — погрешность, вычисленная для модуля волнового вектора $|k_{\text{эф}}|$, налагает ограничение на длину пути x , проходимого волной в среде: $\Delta k_{\text{эф}}x \ll 1$. В случае ультрахолодных нейтронов учет только объемных эффектов в эффективном потенциале недостаточен и необходимо учитывать особые свойства поверхностного слоя. Очевидно, вывод этот справедлив и для очень холодных нейтронов, когда они испытывают полное отражение от границы среды [43—