دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

فیزیک هسته‌ای کاربردی

شبیه‌سازی بازتابندگی اسپین-چرخشی نوترون‌های قطبیده از نانو لایه‌های مغناطیسی

استاد راهنما

دکتر سید فرهاد مسعودی

مشاور

سید سعید سیوف جهرمی

دانشجو

الهامه سحرخیزان

بهمن ۱۳۸۹

بسم الله الرحمن الرحيم

چکیده

یکی از کاربردهای بازتاب‌سنجی نوترونی[1] تعیین نوع و ضخامت لایه ها می‌باشد. امروزه برای تعیین نوع و ضخامت لایه های مغناطیسی با ابعاد نانومتر از بازتاب نوترونهای قطبیده از لایه های مغناطیسی استفاده می‌شود که تغییر راستای میدان مغناطیسی داخلی در این لایه‌ها باعث ایجاد حالت خاصی در بازتابندگی به نام بازتابندگی اسپین–چرخشی[2] می‌شود که در آن اسپین نوترون پس از بازتاب تغییر می کند.

در این پایان‌نامه با استفاده از برنامه‌ی محاسباتی فرترن (Fortran)، بازتابندگی‌های اسپین–چرخشی و در حالت عدم چرخش اسپین [3] نوترون‌های قطبیده را از نانولایه‌های مغناطیسی شبیه‌سازی کرده و اثرات چرخش راستای میدان را بر روی این بازتابندگی‌ها به خصوص بازتابندگی اسپین–چرخشی بررسی کرده ایم.

در ادامه به دلیل اینکه مرز بین لایه‌ها در نمونه‌های واقعی کاملا مجزا و مشخص نیست و بر اساس روش ساخت فیلم‌های نازک به دو صورت نرم[4] و زبر[5] می‌باشند و همچنین نوع مرز بین لایه ها بر روی بازتاب نوترون و قطبش آن تاثیر می گذارد، اثرات نرمی بین سطوح با استفاده از تابع اکارت[6] به عنوان تابع توصیف کننده‌ی نرمی پتانسیل بین سطوح بر روی بازتاب و قطبش نوترونهای بازتابیده مخصوصا حالت خاص اسپین–چرخشی مورد بررسی قرار گرفته است.

[1] Neutron reflectometry
[2] Spin-flip reflectivity
[3] Non-spin-flip reflectivity
[4] Smooth
[5] Rough
[6] Eckart function

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

مقدمه **۱**

فصل ۱. برهمکنش‌های نوترون کند و معادله‌های موج در ماده **۳**

۱-۱. برهمکنش نوترون با ماده ۴

۱-۱-۱. پراکندگی نوترون از یک هسته ی آزاد ۴

۱-۱-۲. طول پراکندگی نوترون ۶

۱-۱-۳. بر همکنش بین نوترون و اسپین‌های هسته‌ای ۸

۱-۱-۴. شبه پتانسیل فرمی برای یک محیط مادی ۱۰

۱-۱-۵ . برهمکنش نوترون با مغناطش محیط ۱۱

۱-۲. معادله‌ی موج نوترون کند ۱۶

۱-۲-۱. معادله‌ی موج سه بعدی ۱۶

۱-۲-۲. ضریب شکست نوترون ۱۶

۱-۲-۲. بازتاب آینه‌ای از یک فیلم کاملاً مسطح : معادله‌ی موج در یک بعد ۱۷

فصل ۲. بازتابندگی آینه‌ای نوترون از ماده **۱۹**

۲-۱. ماتریس انتقال ۲۰

۲-۱-۱. ماتریس انتقال یک فیلم نازک ۲۰

۲-۱-۲. بازتابندگی از یک سیستم چند لایه‌ای ۲۲

۲-۲. فرمولبندی ماتریس ۲×۲ ۲۴

۲-۲-۱. فرمولبندی ماتریس ۲×۲ برای یک فیلم نازک ۲۴

۲-۲-۲. فرمولبندی ماتریس ۲×۲ برای سیستم چند لایه‌ای ۲۷

فصل۳. بازتاب آینه‌ای نوترون قطبیده از ماده‌ی مغناطیسی **۳۰**

۳-۱. تابع موج وابسته به اسپین نوترون ۳۱

۳-۱-۱. ضریب شکست ماده‌ی مغناطیسی برای نوترون ۳۱

۳-۱-۲. شکل صریح تابع موج وابسته به اسپین نوترون ۳۱

۳-۲. بازتاب وابسته به اسپین از یک فیلم مغناطیسی ۳۲

۳-۲-۱. ماتریس انتقال برای یک فیلم نازک مغناطیسی ۳۲

۳-۲-۲. بازتابندگی از یک سیستم چند لایه‌ای مغناطیسی ۳۸

۳-۲-۳. فرمولبندی ماتریس ۴×۴ ۴۱

فصل۴. بررسی اثرات نرمی بر روی بازتاب‌سنجی اسپین-چرخشی **۴۴**
۴-۱. توابع مورد استفاده به عنوان مرز ۴۵
۴-۱-۱. تابع خطی ۴۵
۴-۱-۲. تابع خطا ۴۶
۴-۱-۳. تابع اکارت ۴۷
۴-۲. محاسبه‌ی ضریب بازتاب از مرز نرم ۴۷
۴-۲-۱. بازتاب‌سنجی اسپین-چرخشی ۴۸
۴-۲-۲. اثرات نرمی روی بازتاب‌سنجی اسپین-چرخشی ۵۱
۴-۳. بحث و نتیجه‌گیری ۶۰

مراجع **۶۱**

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

مقدمه

.....

فصل ۱. برهمکنش‌های نوترون کند و معادله‌های موج در ماده

شکل۱-۱. بازتاب آینه‌ای یک موج تخت از یک لایه‌ی مسطح همگن با ضخامت L ۱۷

فصل ۲. بازتابندگی آینه‌ای نوترون از ماده

شکل۲-۱. یک فیلم تک لایه با ضریب شکست f و h برای محیط فرودی و عبوری..... ۲۰

شکل۲-۲. ساختار یک فیلم نازک با ضخامت d ۲۴

شکل۲-۳. ساختار یک سیستم چندلایه‌ای..... ۲۷

فصل۳. بازتاب آینه‌ای نوترون قطبیده از ماده‌ی مغناطیسی

.....

فصل۴. برر سی اثرات نرمی بر روی بازتاب‌سنجی اسپین-چرخشی

شکل۴-۱. تغییر خطی SLD در فصل مشترک بین دو لایه‌ی مجاور..... ۴۶

شکل۴-۲. تغییرات نرم SLD در فصل مشترک بین دو لایه‌ی مجاور با استفاده از تابع خطا..... ۴۶

شکل۴-۳. تغییرات نرم SLD در فصل مشترک بین دو لایه‌ی مجاور با استفاده از تابع اکارت..... ۴۷

شکل ۴-۴. تقسیم‌بندی ناحیه‌ی فصل مشترک محاسبه شده با تابع اکارت به لایه‌های مستطیلی ۴۸

شکل۴-۵. نمونه ی دو لایه ای Au/Fe_3O_4 ..... ۴۹

شکل ۴-۶ . نمودار بازتابندگی‌های NSF و SF برای زاویه‌های $\theta = 0 , \pi , \pi/2 , \pi/4$ ۵۰

شکل ۴-۷. نمونه ی دو لایه ای Au/Fe_3O_4 با اعمال نرمی در فصل مشترک بین لایه‌ها..... ۵۱

شکل ۴-۸ . مقایسه‌ی نمودار بازتابندگی‌های NSF و SF در حضور نرمی با پارامترهای نرمی $2A^{\circ}$ و $5A^{\circ}$ ،نسبت به حالت غیر نرم در زاویه‌ی $\theta = \pi/4$ برای نمونه‌ی دو لایه‌ای شکل (۴-۵)..... ۵۳

شکل ۴-۹. نمودار بازتابندگی R^{++} در حضور نرمی پتانسیل بین سطوح برای زاویه‌های $\theta = 0 , \pi/4 , \pi/2$ ۵۴

شکل ۴-۱۰. نمودار بازتابندگی R^{--} در حضور نرمی پتانسیل بین سطوح برای زاویه‌های $\theta = \pi/4 , \pi/2 , \pi$ ۵۵

شکل ۴-۱۱. نمودار بازتابندگی R_{SF} در حضور نرمی پتانسیل بین سطوح برای زاویه‌های $\theta = \pi/12 , \pi/4 , \pi/2$..... ۵۶

شکل ۴-۱۲. مقایسه‌ی نمودار بازتابندگی‌های NSF و SF در حضور نرمی با پارامتر نرمی 2A° ، نسبت به حالت غیر نرم در زاویه‌های $\theta = \pi/4, \pi/2$ برای نمونه‌ی دو لایه‌ای شکل (۴-۵) ۵۷
شکل ۴-۱۳. مقایسه‌ی نمودار بازتابندگی‌های NFS و SF در حضور نرمی با پارامتر نرمی 2A° ، نسبت به حالت غیر نرم در زاویه‌ی $\theta = \pi/2$ برای نمونه‌ی دو لایه‌ای شکل (۴-۵) با ضخامت‌های متفاوت..... ۵۹

فهرست جداول

مقدمه

.....

فصل ۱. برهمکنش‌های نوترون کند و معادله‌های موج در ماده

جدول ۱-۱. چگالی‌های طول پراکندگی هسته‌ای و مغناطیسی برای مواد مختلف.....۱۵

فصل ۲. بازتابندگی آینه‌ای نوترون از ماده

.....

فصل۳. بازتاب آینه‌ای نوترون قطبیده از ماده‌ی مغناطیسی

جدول (۳-۱). عناصر ماتریس انتقال برای بازتاب آینه‌ای نوترون قطبیده شده..... ۴۰

جدول (۳-۲). تابع موج نوترون برای عبور و بازتاب آینه‌ای نوترون قطبیده شده..... ۴۰

فصل۴. بررسی اثرات نرمی بر روی بازتاب‌سنجی اسپین-چرخشی

.....

مقدمه

هنگامی که باریکه‌ی نوترون به یک نمونه برخورد می‌کند، نوترون‌ها با هسته‌های اتمی منفرد و با گشتاورهای مغناطیسی تولید شده توسط اسپین هسته‌ها و حرکت دورانی الکترون‌های اتمی، برهمکنش می‌کنند. این پتانسیل برهمکنش تابعی از چگالی طول پراکندگی[1] (SLD) نمونه است. چگالی طول پراکندگی نمونه توصیف کننده‌ی نوع و ساختار نمونه است و برای عناصر گوناگون اندازه‌گیری شده است.

باریکه‌ی نوترونی که به صورت آینه‌ای از نمونه منعکس می‌شود دقیقا به پروفایل عمقی چگالی طول پراکندگی نمونه‌ی مورد بررسی، بستگی دارد. به همین دلیل با اندازه‌گیری بازتابندگی (تعداد نوترون‌هایی که به صورت کشسان و آینه‌ای منعکس می‌شوند) و بازخوانی چگالی طول پراکندگی نمونه، نوع و ضخامت لایه را به دست آورد.

بازتاب‌سنجی نوترونی بر اساس حل معادله‌ی شرودینگر یک بعدی برای پتانسیل برهمکنش نوترون با نمونه مورد بررسی می‌باشد. برای لایه‌های مغناطیسی این پتانسیل برهمکنشی تابعی از مولفه‌ی عمقی مغناطش نمونه نیز می‌باشد. به این دلیل با اندازه‌گیری بازتابندگی، پروفایل عمقی چگالی طول پراکندگی مغناطیسی (پروفایل عمقی مغناطش) را می‌توان محاسبه کرد و اطلاعاتی را در مورد خواص مغناطیسی لایه‌های مغناطیسی به دست آورد.

قطبش نوترون‌های فرودی به تغییر راستای میدان مغناطیسی درونی لایه‌های مغناطیسی حساس می‌باشد و باعث ایجاد حالت خاصی در بازتابندگی به نام بازتابندگی اسپین–چرخشی می‌شود که در این حالت اسپین نوترون‌های فرودی پس از بازتاب تغییر می‌کند. در این پایان‌نامه به بررسی این حالت خاص می‌پردازیم.

در بازتاب‌سنجی نوترونی پتانسیل برهمکنشی را به صورت ناپیوسته و پله‌ای در مرز بین لایه‌ها در نظر می‌گیرند که چنین تصوری از پتانسیل در مورد نمونه‌ی ایده‌ال صادق است در حالی که در نمونه‌های واقعی بر اساس فرایندی که در مرحله‌ی ساخت فیلم‌های نازک رخ می‌دهد مرز بین لایه‌ها به دو صورت نرم و زبر می‌باشد که اعمال این دو حالت موجب تغییراتی در نتایج حاصل از بازتابندگی می‌شود. مطالبی که در فصل‌های این پایان‌نامه مورد بررسی قرار گرفته است به صورت زیر است:

در فصل اول، برهمکنش نوترون با ماده، برهمکنش نوترون‌های قطبیده با گشتاور مغناطیسی نمونه و روش محاسبه‌ی چگالی‌های طول پراکندگی هسته‌ای و مغناطیسی توضیح داده شده است و همچنین نشان داده شده است که در زاویه‌های کوچک و در صورت ناچیز بودن پراکندگی‌های چندگانه، بازتاب آینه‌ای است و معادله‌ی موج برای بازتاب آینه‌ای نوترون از یک محیط طبقه بندی[2] شده یک بعدی می‌باشد.

در فصل دوم، با استفاده از دو روش ماتریسی که به تفصیل توضیح داده شده می‌شود به محاسبه‌ی ضریب بازتاب مختلط و فاز ضریب بازتاب مختلط و در نهایت بازتابندگی ازیک نمونه‌ی چندلایه‌ای می‌پردازیم.

در فصل سوم، با استفاده از دو روش ماتریسی معرفی شده در فصل قبل، بازتاب نوترون‌های قطبیده را از لایه‌های مغناطیسی مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای محاسبه‌ی بازتابندگی‌های غیراسپین–چرخشی و اسپین–چرخشی

[1] Scattering Length Density
[2] Stratified medium

نوترون‌های قطبیده از سیستم‌های چند لایه‌ای مغناطیسی ماتریس‌های ۲×۲ فصل دوم به ماتریس‌های ۴×۴ تعمیم داده می‌شود.

در فصل چهارم با استفاده از نتایج به دست آمده در فصل‌های قبلی، بازتابندگی‌های غیراسپین–چرخشی و اسپین–چرخشی نوترون‌های قطبیده را از لایه‌های مغناطیسی شبیه‌سازی کرده و اثرات تغییر راستای میدان مغناطیسی در صفحه‌ی فیلم (در دو بعد) را بر روی بازتابندگی‌ها بالاخص بازتابندگی اسپین–چرخشی بررسی می‌کنیم. در ادامه‌ی این فصل، با اعمال نرمی پتانسیل در مرز بین لایه‌ها، اثرات نرمی بر روی بازتاب و قطبش نوترونهای بازتابیده را بررسی کرده و نتایج حاصل را با نتایج به دست آمده در حالت بدون نرمی مقایسه می‌کنیم. در نهایت با نتیجه‌گیری در مورد مطالب مطرح شده، پایان‌نامه به پایان می‌رسد.

فصل ۱

برهمکنش‌های نوترون کند و معادله‌های موج در ماده

۱-۱. برهمکنش نوترون با ماده

در این فصل برهمکنش‌های نوترون کند با ماده را به صورت مختصر تحت مفاهیمی چون طول پراکندگی نوترون[1]، برهمکنش وابسته به اسپین نوترون–هسته و برهمکنش نوترون‌ها با القای مغناطیسی در محیط توضیح می‌دهیم و نشان می‌دهیم که معادله‌ی موج برای بازتاب آینه‌ای نوترون از یک محیط طبقه بندی شده یک بعدی می‌باشد [۱]. منظور از بکار بردن عبارت نوترون کند، اشاره به نوترون‌های گرمایی و سرد می‌باشد.

۱-۱-۱. پراکندگی نوترون از یک هسته ی آزاد

در برهمکنش بین باریکه‌ی تک انرژی از نوترون‌های آزاد و هسته‌ی آزاد منفرد، تابع موج مربوط به باریکه‌ی نوترون قبل از برهمکنش را می‌توان توسط تابع موج زیر بیان کرد:

$$\psi_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}q\hat{\mathrm{i}}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad (۱-۱)$$

که $\hat{\mathrm{i}}$ راستای فرود و q عدد موج نوترون در خلأ است.

$$\mathrm{q} = 2\pi/\lambda = \sqrt{2\,\mu E/\hbar^2} \qquad (۲-۱)$$

E انرژی جنبشی در دستگاه مرکز جرم، $\hbar$ ثابت پلانک، λ طول موج نوترون در خلأ و μ جرم کاهش یافته‌ی نوترون است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mu = mM/(m+M) \qquad (۳-۱)$$

که در آن m جرم سکون نوترون و M جرم هسته پراکننده است. پس از برهمکنش، تابع حالت باریکه‌ی نوترون توسط تابع موج جدید $\psi(\boldsymbol{r})$ تعریف می‌شود:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi_s(\boldsymbol{r}) + \psi_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{r}) \qquad (۴-۱)$$

که $\psi_s(\boldsymbol{r})$ تابع موج پراکنده شده است.
اگر پتانسیل بین نوترون و هسته را با $V(\boldsymbol{r})$ نمایش دهیم، تابع موج $\psi(\boldsymbol{r})$ از معادله‌ی شرودینگر زیر پیروی می‌کند:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \qquad (۵-۱)$$

که به این صورت نیز می‌توان نوشت:

$$\left(\nabla^2 + q^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) = \left(2\mu/\hbar^2\right)\psi(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}) \qquad (۶-۱)$$

[1] Neutron scattering lenght

با نوشتن تابع گرین برای معادله‌ی (۱–۶)، جواب عمومی زیر به دست خواهد آمد:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}q\hat{\mathrm{i}}\cdot\boldsymbol{r}} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\int_{\Omega} dv' g(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}') \qquad (۱–۷)$$

در رابطه‌ی بالا dv' المان حجم و Ω محدوده‌ای است که $V(\boldsymbol{r}')$ غیر صفر است و

$$g(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = -\frac{e^{\mathrm{i}q|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \qquad (۱–۸)$$

شرط زیر را ارضا می‌کند:

$$(\nabla^2 + q^2)g(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \qquad (۱–۹)$$

در میدان‌های دور داریم؛ $|\boldsymbol{r}| \gg |\boldsymbol{r}'|$ و

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| \approx \boldsymbol{r} - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}')/\boldsymbol{r} \qquad (۱–۱۰)$$

با جاگذاری رابطه‌ی (۱–۱۰) در رابطه‌ی (۱–۷)، خواهیم داشت:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}q\hat{\mathrm{i}}\cdot\boldsymbol{r}} - \frac{e^{\mathrm{i}qr}}{r}\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_{\Omega} dv' V(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\, e^{-\mathrm{i}q\hat{\mathrm{o}}\cdot\boldsymbol{r}'} \qquad (۱–۱۱)$$

که $\hat{\mathrm{o}}$ راستای پراکندگی است که با رابطه‌ی $\hat{\mathrm{o}} = \boldsymbol{r}/r$ به دست می‌آید. فرمول (۱–۱۱) می‌تواند به صورت زیر نیز نوشته شود:

$$\psi(\boldsymbol{r}) \approx e^{\mathrm{i}q\hat{\mathrm{i}}\cdot\boldsymbol{r}} + f(\hat{\mathrm{i}},\hat{\mathrm{o}})\, e^{\mathrm{i}qr}/r \qquad (۱–۱۲)$$

$$f(\hat{\mathrm{i}},\hat{\mathrm{o}}) \equiv -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_{\Omega} dv' V(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\, e^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\hat{\mathrm{o}}\cdot\boldsymbol{r}'} \qquad (۱–۱۳)$$

با توجه به رابطه‌های (۱–۱) ، (۱–۴) و (۱–۱۲) خواهیم داشت:

$$\psi_s(\boldsymbol{r}) \approx f(\hat{\mathrm{i}},\hat{\mathrm{o}})\, e^{\mathrm{i}qr}/r \qquad (۱–۱۴)$$

که در آن $f(\hat{\mathrm{i}},\hat{\mathrm{o}})$، دامنه‌ی موج کروی پراکنده شده می‌باشد و به "دامنه‌ی پراکندگی" معروف است. توزیع زاویه-ای نوترون‌های پراکنده شده که توسط سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی هسته توصیف می‌شود، از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\frac{d\sigma_s}{d\Omega} = \frac{|\psi_s|^2\boldsymbol{r}^2}{|\psi_{\mathrm{i}}|^2} = |f(\hat{\mathrm{i}},\hat{\mathrm{o}})|^2 \qquad (۱–۱۵)$$

قابلیت پراکنندگی نهایی پتانسیل $V(\boldsymbol{r})$ توسط سطح مقطع پراکندگی کل داده می‌شود که از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_s = \int_{4\pi} \frac{d\sigma_s}{d\Omega} d\Omega = \int_{4\pi} |f(\hat{\imath}, \hat{o})|^2 \, d\Omega \qquad (۱-۱۶)$$

۱-۱-۲. طول پراکندگی نوترون

برای نوترون‌های کند که دارای طول موجی از مرتبه‌ی آنگستروم هستند، هسته با شعاع از مرتبه‌ی یک فرمی همانند یک نقطه به نظر می‌رسد. بنابراین، $f(\hat{\imath}, \hat{o}) = f(\theta)$ تقریباً دارای خواصی برابر در تمام جهات[1] است $(cos\,\theta = \hat{\imath} \cdot \hat{o})$؛ چرا که پراکندگی توسط پراکندگی موج $\boldsymbol{s}$ کنترل می شود. چنین شرایطی معادل در نظر گرفتن حد انرژی‌های پایین ($\text{limq} \to 0$) برای رابطه‌ی (۱-۱۵) است:

$$\lim_{q\to 0} |f(\hat{\imath}, \hat{o})|^2 = |a|^2 \qquad (۱-۱۷)$$

در اصول اپتیکی نوترونی، ثابت a در رابطه‌ی (۱-۱۷) به صورت زیر تعریف می‌شود و از آن به عنوان طول پراکندگی[2] نوترون از هسته‌های آزاد یاد می‌شود:

$$a \equiv -\lim_{q\to 0} f(\theta) \qquad (۱-۱۸)$$

و در نتیجه رابطه‌ی (۱-۱۶) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\sigma_s = 4\pi |a|^2 \qquad (۱-۱۹)$$

پارامتر a برای بسیاری از هسته‌ها دارای مقادیر مثبت است و تنها برای برخی از هسته‌ها از جمله هیدروژن، مقادیر منفی به خود می‌گیرد [۲]. با ترکیب رابطه‌های (۱-۱۳) و (۱-۱۸)، برای a رابطه‌ی جدیدی به دست می‌آید:

$$a = \lim_{q\to 0} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_{\Omega} dv\, V(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r}) \qquad (۱-۲۰)$$

برای محاسبه بهتر این کمیت تابع موج $\psi(\boldsymbol{r})$ را باید در داخل هسته تقریب بزنیم. از این رو اولین گزینه، استفاده از تقریب اول بورن[3] است. ولی در رابطه‌ی پتانسیل $V(\boldsymbol{r})$ دارای مقدار میانگین تقریبی $-۴۰\ MeV$ و محدوده‌ی اثر چندین فرمی است جمله‌ی دوم از جمله‌ی اول خیلی کوچکتر نیست؛ به همین دلیل نمی‌توان از تقریب اول بورن استفاده کرد. برای حل این مشکل؛ فرمی[4] پیشنهاد داد پتانسیل $V(\boldsymbol{r})$ در رابطه‌ی را با یک پتانسیل ساختگی

[1] Isotropic
[2] Scattering Length
[3] First Born Approximation
[4] Fermi

$\tilde{V}(\boldsymbol{r}) = 10^{-6} \times V(10^{-2}r)$ جایگزین کنیم. این پتانسیل ساختگی، تابع موج $\psi(\boldsymbol{r})$ را به یک تابع موج ساختگی $\tilde{\psi}(r)$ تبدیل می‌کند در حالی که رابطه‌ی (۱–۲۰) را تغییر نمی‌دهد:

$$a = \lim_{\mathrm{q}\to 0} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_{\Omega} \, dv \, V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = \lim_{\mathrm{q}\to 0} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_{\widetilde{\Omega}} \, dv \, \tilde{V}(\boldsymbol{r})\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}) \qquad (۱–۲۱)$$

که در آن $\widetilde{\Omega}$ محدوده‌ی پتانسیل $\tilde{V}(\boldsymbol{r})$ را تعریف می‌کند. تابع موج ساختگی $\tilde{\psi}(\boldsymbol{r})$، حل معادله‌ی شرودینگر با این پتانسیل ساختگی است:

$$(\nabla^2 + \mathrm{q}^2)\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}) = (2\mu/\hbar^2)\tilde{\psi}(\boldsymbol{r})\tilde{V}(\boldsymbol{r}) \qquad (۱–۲۲)$$

همانند رابطه‌ی (۱–۷)، جواب عمومی معادله‌ی عبارت است از:

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}) = e^{\mathrm{i}\mathrm{q}\hat{\mathrm{i}}\cdot r} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_{\widetilde{\Omega}} \, dv' g(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\tilde{V}(\boldsymbol{r}')\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}') \qquad (۱–۲۳)$$

می توان نشان داد که جمله‌ی دوم در رابطه‌ی (۱–۲۳) خیلی خیلی کوچکتر از جمله‌ی اول است و به این دلیل تقرب بورن در محدوده‌ی پتانسیل $\tilde{V}(\boldsymbol{r}')$ برقرار است:

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{r}) \approx e^{\mathrm{i}\mathrm{q}\hat{\mathrm{i}}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad inside \ \widetilde{\boldsymbol{\Omega}} \qquad (۱–۲۴)$$

با جایگزین کردن رابطه‌ی (۱–۲۴) در رابطه‌ی (۱–۲۱)، خواهیم داشت:

$$a = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_{\widetilde{\Omega}} \, dv \, \tilde{V}(\boldsymbol{r}) \qquad (۱–۲۵)$$

تقریب استفاده شده در بالا، تقریب فرمی[1] نام دارد.

از آنجا که طول موج نوترون‌های فرودی هنوز هم از ابعاد محدوده‌ی جدید $\widetilde{\boldsymbol{\Omega}}$ بزرگتر است، این پتانسیل ساختگی برای نوترون‌های فرودی همانند یک نقطه به نظر می رسد. از این رو فرمی پیشنهاد داد که از جزئیات فضایی پتانسیل ساختگی $\tilde{V}(\boldsymbol{r})$ چشم پوشی کنیم. او سپس پتانسیل نقطه مانند $V_f(\boldsymbol{r})$ را تعریف کرد تا در محاسبات ریاضی جایگزین $\tilde{V}(\boldsymbol{r})$ شود به گونه‌ای که دارای سطح مقطع پراکندگی یکسانی در محاسبات کوانتوم مکانیکی پراکندگی باشد:

$$V_f(\boldsymbol{r}) = (2\pi\hbar^2/\mu)a\delta(\boldsymbol{r}) \qquad (۱–۲۶)$$

این پتانسیل نقطه‌ای، شبه پتانسیل فرمی[2] نامیده می‌شود؛ و همچنین به تقریب آنی نیز معروف است. با استفاده از این پتانسیل جدید، رابطه‌ی (۱–۲۵) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$a = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \, dv \, V_f(\boldsymbol{r}) \qquad (۱–۲۷)$$

[1] Fermi Approximation
[2] Fermi pseudo-potential

در این جا محدوده‌ی برهمکنش تمام فضا است. در حد $A \to \infty$ (A عدد جرمی هسته)، رابطه‌ی بالا به طول پراکندگی در دستگاه آزمایشگاه تبدیل می‌شود:

$$b = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int dv\, V_f(\boldsymbol{r}) \qquad (۲۸-۱)$$

در این جا b به طول پراکندگی مقید[1] هسته معروف است. طول‌های پراکندگی در دستگاه آزمایشگاه و مرکز جرم طبق رابطه‌ی زیر به هم مرتبط می‌شوند:

$$b/a = m/\mu = (1+A)/A \qquad (۲۹-۱)$$

در نهایت با توجه به رابطه‌های (۱-۱۹) و (۱-۲۹)، سطح مقطع پراکندگی مقید به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\sigma_s(bound) = 4\pi|b|^2 = ((1+A)/A)^2\sigma_s(free) \qquad (۳۰-۱)$$

که $\sigma_s(free)$ همان σ_s در رابطه‌ی (۱-۱۹) است. شبه پتانسیل فرمی برای یک هسته‌ی مقید با جایگذاری رابطه‌ی (۱-۲۹) در رابطه‌ی (۱-۲۶) به دست می‌آید:

$$V_{\mathrm{f}}(\boldsymbol{r}) = (2\pi\hbar^2/m)b\delta(\boldsymbol{r}) \qquad (۳۱-۱)$$

با استفاده از رابطه‌ی (۱-۲۶) یا (۱-۳۱)، پراکندگی نوترون از یک تک هسته توسط معادله‌های شرودینگر زیر توصیف می‌شود:

$$(\nabla^2 + \mathrm{q}^2)\psi(\boldsymbol{r}) = 4\pi a\psi(\boldsymbol{r})\sigma(\boldsymbol{r}) \qquad (۳۲-۱) \text{ در دستگاه مرکز جرم}$$

$$(\nabla^2 + \mathrm{q}_0^2)\psi(\boldsymbol{r}) = 4\pi b\psi(\boldsymbol{r})\sigma(\boldsymbol{r}) \qquad (۳۳-۱) \text{ در دستگاه آزمایشگاه}$$

که در آن q_0 عدد موج نوترون در دستگاه آزمایشگاه است و از جایگزین کردن μ با m در رابطه‌ی (۱-۲) به دست می‌آید.

۱-۱-۳. بر همکنش بین نوترون و اسپین‌های هسته‌ای

از آنجائیکه هسته‌های زیادی اسپین‌های هسته‌ای $\boldsymbol{I}$ غیر صفر دارند، با اسپین نوترون $\boldsymbol{S}$ برهمکنش خواهند کرد. این برهمکنش موجب تصحیحی در طول پراکندگی معادله‌ی (۱-۲۷) یا (۱-۲۸) و سطح مقطع پراکندگی معادله(۱-۱۹) یا (۱-۳۰) می‌شود. مخصوصاً، انرژی برهمکنش اسپین-اسپین که متناسب با $2\boldsymbol{I}.\boldsymbol{s}$ است، باید به پتانسیل فرمی

[1] Bound Scattering Length

$V_f(\boldsymbol{r})$ در معادله‌ی (۱–۲۷) و (۱–۲۸) اضافه گردد. مجموع پتانسیل فرمی هسته‌ای و پتانسیل برهمکنش اسپینی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$V_s(\boldsymbol{r}) = V_f(\boldsymbol{r}) + \Delta 2\boldsymbol{I}.\boldsymbol{s}\ \delta\ (\boldsymbol{r}) \qquad (۱–۳۴)$$

که $\boldsymbol{I}$ و $\boldsymbol{S}$ عملگرهای اسپین هستند و Δ یک ثابت است.

در ادامه، ویژه مقادیرهای معادله‌ی (۱–۳۴) را ارزیابی می‌کنیم. سیستم اسپین نوترون–هسته دارای دو حالت است: حالت $+$ و حالت $-$ ، که به ترتیب متناظر با اسپین بالا و پایین هستند. این دو حالت، ویژه حالت‌های $\boldsymbol{J^2}$ ، $\boldsymbol{I^2}$ و $\boldsymbol{s^2}$ ، با ویژه مقادیر $J(J+1)$ ، $I(I+1)$ و $\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)$ هستند. با توجه به اینکه $J = J_{\pm} = I \pm \frac{1}{2}$ ، ویژه مقادیر $\boldsymbol{J^2}$ برای حالت‌های $+$ و $-$ به دست می‌آیند:

$$J_+(J_+ + 1) = \left(I + \tfrac{1}{2}\right)\left(I + \tfrac{3}{2}\right) \qquad (۱–۳۵) \text{ برای حالت } +$$

$$J_-(J_- + 1) = \left(I - \tfrac{1}{2}\right)\left(I - \tfrac{1}{2}\right) \qquad (۱–۳۶) \text{ برای حالت } -$$

رابطه‌ی بین $2\boldsymbol{I}.\boldsymbol{s}$ و $\boldsymbol{J}$ به صورت زیر است:

$$2\boldsymbol{I}.\boldsymbol{s} = \boldsymbol{J^2} - \boldsymbol{I^2} - \boldsymbol{s^2} \qquad (۱–۳۷)$$

با استفاده از رابطه‌های (۱–۳۵)–(۱–۳۷) ، ویژه مقادیر $2\boldsymbol{I}.\boldsymbol{s}$ به دست می‌آید:

$$J_+(J_+ + 1) - I(I+1) - \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}+1\right) = I \qquad (۱–۳۸)$$

$$J_-(J_- + 1) - I(I+1) - \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}+1\right) = -(I+1) \qquad (۱–۳۹)$$

در نتیجه،

$$V_s(\boldsymbol{r}) = V_{\pm}(\boldsymbol{r}) \equiv V_f(\boldsymbol{r}) + \begin{bmatrix} I \\ -I-1 \end{bmatrix} \Delta\delta(\boldsymbol{r}) \qquad (۱–۴۰)$$

با جایگذاری پتانسیل تصحیح شده‌ی اسپینی $V_s(\boldsymbol{r}) = V_{\pm}(\boldsymbol{r})$ با $V_f(\boldsymbol{r})$ در رابطه‌های (۱–۲۷) و (۱–۲۸) خواهیم داشت:

$$a_{\pm} = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int dv\ V_{\pm}(\boldsymbol{r})\ \ ,\ \ b_{\pm} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int dv\ V_{\pm}(\boldsymbol{r}) \qquad (۱–۴۱)$$

با جایگذاری رابطه‌ی (۱–۴۰) در رابطه‌ی (۱–۴۱) به دست می‌آوریم:

$$b_{\pm} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int dv\ V_f(\boldsymbol{r}) + \frac{m}{2\pi\hbar^2}\Delta\begin{bmatrix} I \\ -I-1 \end{bmatrix} \qquad (۱–۴۲)$$

جمله‌ی اول از برهمکنش هسته‌ای قوی حاصل می‌شود و طول پراکندگی همدوس[1] نامیده می‌شود و با b_c نشان داده می‌شود:

$$b_c = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int dv\ V_f(\boldsymbol{r}) \qquad (۴۳-۱)$$

که با معادله (۱-۲۸) یکسان است. جمله‌ی دوم ناشی از برهمکنش اسپین-اسپین است. از آنجائیکه تبهگنی‌ها[2] برای دو حالت $J = J_{\pm} = I \pm \frac{1}{2}$ به ترتیب $2I + 2$ و $2I$ می‌باشند، می‌توان نشان داد که متوسط طول پراکندگی b روی این چندتایگی‌ها با b_c برابر است، یعنی $\langle b\rangle = b_c$. انحراف استاندارد مقدار b را با b_i نشان می‌دهند که به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$b_i^2 \equiv \langle b\rangle - \langle b\rangle^2 = (I+1)I\left(\left(m/2\pi\hbar^2\right)\Delta\right)^2 \qquad (۴۴-۱)$$

با استفاده از معادله‌ی (۱-۴۴)، Δ را از معادله‌ی (۱-۴۲) حذف می‌کنیم و با در نظر گرفتن معادله‌ی (۱-۴۳) به دست می‌آوریم:

$$b = b_{\pm} = b_c + \frac{b_i}{\sqrt{I(I+1)}}\begin{bmatrix} I \\ -I-1 \end{bmatrix} \qquad (۴۵-۱)$$

که اینجا b_i طول پراکندگی ناهمدوس مقید[3] نامیده می‌شود؛ به این خاطر که باعث ناهمدوسی در موج پراکنده شده می‌شود. b_c و b_i برای هسته‌های مختلف اندازه‌گیری و جدول بندی شده‌اند. در نهایت، سطح مقطع پراکندگی نوترون از یک هسته‌ی خاص به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\sigma_s = 4\pi\langle|b|^2\rangle \qquad (۴۶-۱)$$

که b از معادله‌ی (۱-۴۵) به دست می‌آید و میانگین $\langle\cdots\rangle$ ، روی اسپین‌های هسته‌ای و نوترون است.

۱-۱-۴.شبه پتانسیل فرمی برای یک محیط مادی

یک محیط مادی را می‌توان به صورت مجموعه‌ای از هسته‌ها که در فضا توزیع شده‌اند، تعریف کرد. با توجه به مبحث قبلی، هر هسته در ماده را می‌توان با پتانسیلی که به صورت رابطه‌ی (۱-۲۶) محاسبه می‌گردد و در آن b از رابطه‌ی (۱-۴۵) به دست می‌آید؛ تعریف کرد. بنابراین محیط مادی طبق رابطه‌ی زیر توصیف می‌شود:

$$V_P(\boldsymbol{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\sum_l b_l\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_l) \qquad (۴۷-۱)$$

[1] Coherent scattering length
[2] Multiplicity
[3] Bound incoherent scattering length

که در اصل همان شبه پتانسیل فرمی است که در آن جمع روی تمام هسته‌ها می‌باشد. در این جا $\boldsymbol{R}_l$ بردار مکان lامین هسته و b_l طول پراکندگی مقید آن است. رابطه‌ی اخیر را به این صورت نیز می‌توان نوشت:

$$V_P(\boldsymbol{r}) = (2\pi\hbar^2/m)\rho(\boldsymbol{r}) \qquad (۱-۴۸)$$

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \sum_l b_l \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_l) \qquad (۱-۴۹)$$

در این جا $\rho(\boldsymbol{r})$ چگالی طول پراکندگی (SLD) ماده است.
با توجه به اینکه رابطه‌ی (۱-۳۳) معادله‌ی موج نوترون برای یک تک هسته است، برای یک ماده‌ی ماکروسکوپی با توزیعی از هسته‌ها که با رابطه‌ی (۱-۴۸) داده می‌شود، معادله‌ی موج به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$(\nabla^2 + q^2)\psi(\boldsymbol{r}) = 4\pi\rho(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \qquad (۱-۵۰)$$

که در آن q عدد موج است و از رابطه‌ی (۱-۲) برای حالتی که μ با m جایگزین شده به دست می‌آید.

۱-۱-۵ . برهمکنش نوترون با مغناطش محیط

نوترون دارای گشتاور مغناطیسی ناشی ازتکانه‌ی زاویه‌ای ذاتی "اسپین" است، که طبق رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:

$$\boldsymbol{\mu}_m = \gamma\mu_N \qquad (۱-۵۱)$$

که در آن $\gamma = -1\cdot 9132$، $\mu_N = 5\cdot 050 \times 10^{-27}\ A\,m^2$ مگنتون هسته‌ای و $\boldsymbol{\sigma}$ عملگر پائولی است.
برای نوترونی که وارد میدان مغناطیسی $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ می‌شود، خواهیم داشت:

$$V_m(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\mu}_m \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) \qquad (۱-۵۲)$$

که برای میدان مغناطیسی القایی حاصل از یک اتم، پتانسیل رابطه‌ی (۱-۵۲) باعث پراکندگی مغناطیسی نوترون می‌شود. طول پراکندگی مغناطیسی[1] متناظر با این پتانسیل در دستگاه آزمایشگاه به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$b_m = -f(i\,,\hat{o}) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_\Omega dv' V_m(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\, e^{-iq\hat{o}\cdot\boldsymbol{r}'} \qquad (۱-۵۳)$$

که رابطه‌ی (۱-۵۳) از رابطه‌ی (۱-۱۳) برای حالتی که $\mu \to m$ به دست آمده است.با توجه به اینکه برهمکنش یک برهمکنش ضعیف با محدوده‌ی بلند است، تقریب بورن دارای اعتبار است و در نتیجه رابطه‌ی (۱-۵۳) به صورت زیر تبدیل می‌شود:

[1] Magnetic scattering length

$$b_m = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_\Omega dv' V_m(\boldsymbol{r}')\, e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}'} = \frac{m}{2\pi\hbar^2}[-\boldsymbol{\mu}_m \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{Q})] \qquad (۵۴-۱)$$

که در آن $\boldsymbol{Q} = q(\hat{\imath} - \hat{o})$ بردار موج انتقالی و $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{Q})$ تبدیل فوریه‌ی $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})$ است.

مغناطش یک اتم عمدتاً ازگشتاورهای مغناطیسی الکترون‌های اتمی ناشی می‌شود.گشتاور مغناطیسی $\boldsymbol{\mu_i}$ ، $\boldsymbol{i}$امین الکترون در اتم، مجموع گشتاورهای مغناطیسی اسپینی $\boldsymbol{\mu_i^s}$ و مغناطیسی زاویه‌ای $\boldsymbol{\mu_i^l}$ است که به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\boldsymbol{\mu_i} = \boldsymbol{\mu_i^s} + \boldsymbol{\mu_i^l} \qquad (۵۵-۱)$$

$$\boldsymbol{\mu_i^s} = -2\mu_B \boldsymbol{s_i} \quad \text{و} \quad \boldsymbol{\mu_i^l} = -(e/2m_e)\boldsymbol{L_i} \qquad (۵۶-۱)$$

$$|\boldsymbol{\mu_i^s}| = \sqrt{3}\mu_B \quad \text{و} \quad |\boldsymbol{\mu_i^l}| = \sqrt{l(l+1)}\mu_B \qquad (۵۷-۱)$$

که در آن زیرنویس i به معنی کمیت مربوط به i امین الکترون در اتم، $\boldsymbol{s_i}$ عملگر اسپین، m_e جرم سکون الکترون، $\mu_B = 9\cdot 272 \times 10^{-24}\ A\,m^2$ مگنتون بوهر ، $\boldsymbol{L_i}$ تکانه‌ی زاویه‌ای مداری و l عدد کوانتومی زاویه‌ای است. از این رو مغناطش حاصل از اتم را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = \sum_i \boldsymbol{\mu_i}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \qquad (۵۸-۱)$$

که جمع بر روی تمام الکترون‌های اتمی است. تبدیل فوریه‌ی رابطه‌ی (۱-۵۸) طبق رابطه‌ی زیر نوشته می‌شود:

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{Q}) = \sum_i \boldsymbol{\mu_i} e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}_i} \equiv -2\mu_B \boldsymbol{C} f(\boldsymbol{Q}) \qquad (۵۹-۱)$$

$$f(\boldsymbol{Q}) \equiv \frac{\sum_i \boldsymbol{\mu_i} e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r_i}}}{\sum_i \boldsymbol{\mu_i}} \qquad (۶۰-۱)$$

$$\boldsymbol{C} \equiv \frac{1}{(-2\mu_B)}\sum_i \boldsymbol{\mu}_i$$

که $f(\boldsymbol{Q})$ عامل شکل مغناطیسی و $\boldsymbol{C}$ نسبت گشتاور مغناطیسی کل $\sum_i \boldsymbol{\mu}_i$ به $-2\mu_B$ است. برای حالتی که l تمامی الکترون‌ها برابر صفر است؛ $\boldsymbol{C} \to \boldsymbol{S} = \sum_i \boldsymbol{s}_i$.

می‌توان نشان داد که [۳]،

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{Q}) = \mu_0\left[\boldsymbol{M} - \frac{(\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{M})\boldsymbol{Q}}{\boldsymbol{Q}^2}\right] \equiv \mu_0 \boldsymbol{M}_\perp(\boldsymbol{Q}) \qquad (۶۱-۱)$$

در این جا $\boldsymbol{M}_\perp(\boldsymbol{Q})$ مولفه‌ی عمود $\boldsymbol{M}$ بر $\boldsymbol{Q}$ است.با جایگذاری معادله‌ی (۱-۶۱) و معادله‌ی (۱-۵۹) در معادله‌ی (۱-۵۴) طول پراکندگی مغناطیسی را به دست می‌آوریم