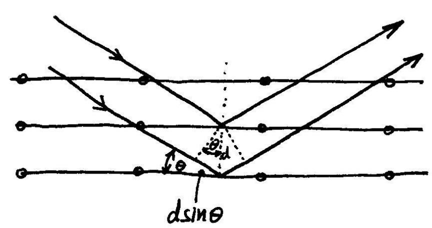
עד כה הנחנו קיומו של מבנה מחזורי ובדקנו את תוצאות הדינמיקה של האטומים סביב מצבי שווי המשקל שלהם. כעת ננסה לבחון את השאלה הבאה:

כיצד ניתן להבחין נסיונית בקיום של סדר בצורת שריג?

מכיון שהמרחקים הטיפוסיים בין אטומים בגביש הינם מסדר גודל של מספר אנגסטרומים ($\mathring{A} = 10^{-8}\,cm$) עלינו להשתמש ב"מיקרוסקופ" הרגיש לאורכי גל אלה. "מיקרוסקופ" מסוג זה הינו קרני רנטגן שלהן אורכי גל מסדר גודל של $1\mathring{A}$ ולכן לפי הקשר $\hbar\omega = \frac{hc}{\lambda}$ אנרגיה של $\sim 10^4\,eV$.

הדרך לגלות את הסדר הזה באמצעות פיזור קרני X על הגביש. דרך זו הומצאה על ידי וויליאם הנרי בראג (Bragg) ובנו לורנס בראג בראשית המאה ה-20 ואלה קיבלו השניים את פרס הנובל לפיסיקה ב 1915.

השניים גילו כי כאשר מפזרים קרני X על גביש מתקבלת תבנית התאבכות המורכבת משיאים חדים (Bragg peaks) בעוצמת הקרינה המפוזרת עקב כיוון מסוים של הקרינה הפוגעת. הם ניסחו תנאי הקובע את קיומם שיאים אלה. לצורך כך הניחו כי השריג בנוי ממשפחה של מישורי שריג המרוחקים מרחק d זה מזה והמפזרים את הקרינה בצורה ספקולרית (כמו מראות). השיאים מתקבלים כאשר הקרינה המפוזרת ממישורים שונים מתאבכת התאבכות בונה



הפרש הדרכים האופטיות בין קרניים המפוזרות ממישורים סמוכים הינו

$2d\sin\theta$

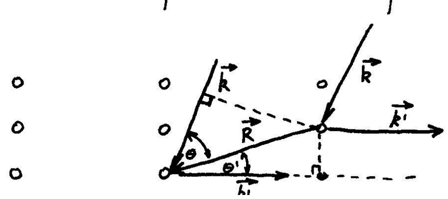
וכדי שההתאבכות תהיה בונה נדרוש כי הוא כפולה שלמה של אורך גל של הקרינה

אנו מניחים פיזור אלסטי (אורך הגל לא משתנה בפיזור).

$$\Rightarrow\ 2d\sin\theta = n\lambda$$

↑ order of refraction.

von Laue הלך צעד אחד קדימה והניח כי הקרינה מפוזרת מכל נקודות השריג בצורה איזוטרופית



הפרש הדרכים האופטיות לקרינה המפוזרת מאטומים המופרדים בוקטור שריג $\vec{R}$:

$$|\vec{R}|\cos\theta + |\vec{R}|\cos\theta' = \vec{R}\cdot\left[\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} - \frac{\vec{k'}}{|\vec{k'}|}\right]$$

מכיון ש $|\vec{k}| = |\vec{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda}$ נקבל את התנאי:

$$\frac{\lambda}{2\pi}\vec{R}\cdot(\vec{k}-\vec{k}') = n\lambda$$

$$\Rightarrow \quad \vec{R}(\vec{k}-\vec{k}') = 2\pi n$$

תנאי זה צריך להתקיים בין כל שני מוקדים בשריג כלומר לכל $\vec{R}$ בסריג או באופן שקול

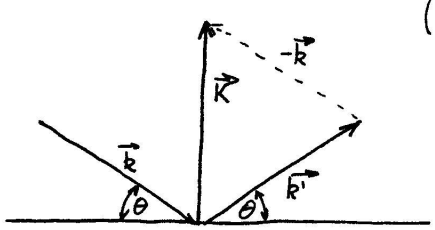
לכל $\vec{R}$ בשריג:

$$e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{R}} = 1$$

אבל זהו בדיוק התנאי ש $\vec{k}'-\vec{k}$ הוא וקטור בשריג ההפכי: $\vec{K}$

$$\vec{k}'-\vec{k} = \vec{K}$$

התנאי של Von Laue שקול לתנאי של Bragg מהנימוק הבא:
מכיון ש $\vec{k}'-\vec{k}$ הוא וקטור בשריג ההפכי קיימת משפחה של מישורי שריג הניצבת לו (אלו הם בדיוק המישורים המופיעים בדרך בה הגענו לתנאי Bragg)



מכיון ש $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$ הדרך היחידה לקיים את תנאי Von Laue (הוא) אם זוית הפגיעה של $\vec{k}$ ביחס למישורי השריג שווה לזוית ההחזרה של $\vec{k}'$

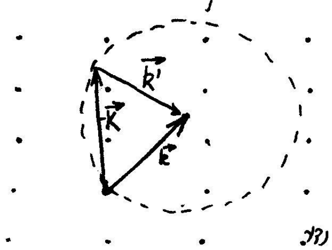
נקבל לכן ש:

$$|\vec{K}| = 2|\vec{k}|\sin\theta$$

אבל $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ ואנו יודעים כי $\vec{K}$ הוא כפולה שלמה של וקטור השריג ההפכי הקצר ביותר בכיוון זה שגודלו $\frac{2\pi}{d}$ כאשר d המרחק בין מישורי השריג

$$\Rightarrow \quad n\cdot\frac{2\pi}{d} = 2\cdot\frac{2\pi}{\lambda}\sin\theta \quad \rightarrow \quad 2d\sin\theta = n\lambda$$

דרך אלגנטית לבחון מתי תנאי Von Laue מתקיים נבנתה ע"י Ewald:
מתחילים בשריג ההפכי ונמתח מהראשית את הוקטור $\vec{k}$ המתאר את הקרינה הפוגעת.
ונבנה ספירה עם רדיוס $k=|\vec{k}|$ מכיון ש $|\vec{k}'|=|\vec{k}|$
הנקודות על הכדור מתארות את כל הנקודות שאליהן יכול לשאת הוקטור $-\vec{K} = \vec{k}-\vec{k}'$

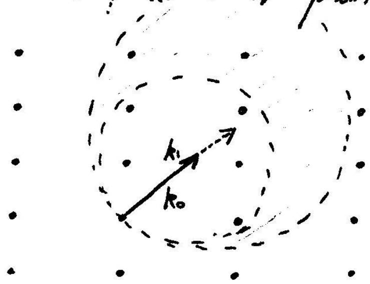


כדי שתנאי Von Laue יתקיים צריכה להיות נקודה שריג ההפכי על הכדור של Ewald. ניתן לראות כי אבחנה זו הנה די נדירה.

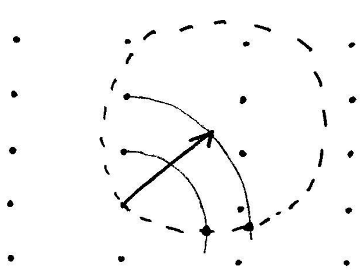
אם $-\vec{K}$ בשריג ההפכי אזי גם $\vec{K}$ בשריג ההפכי

קיימות שלוש דרכים לבצע ניסוי עקיפה:

1. שיטת Laue: בשיטה זו הגביש וכיוון הקרן הנכנסת קבועים אך משתמשים במקור קרינה שאינו מונוכרומטי אלא ברצף $k_0 < k < k_1$. בתמונת Ewald השטח הנוגע כעת הוא השטח הכלוא בין הכדורים המוגדרים ע"י k_0 ו- k_1



2. גביש מסתובב: כיוון אורך הגל וכיוון הקרן הנכנסת קבועים אך הגביש מסתובב (ולכן גם השריג ההופכי). עיגול Ewald קבוע אך נקודות השריג ההופכי מסתובבות סביב הראשית.
תנאי העקיפה מתקיימים כאשר לפחות אחת נקודות השריג ההופכי חוצות את עיגול Ewald.



3. שיטת האבקה: אם נפגע את הקרינה על אבקה המורכבת מגרגרים שכל אחד מהם מורכב מגבישים הנמצאים באוריינטציה אקראית נקבל למעשה את שיטת הגביש המסתובב אלא שכעת כל האוריינטציות האפשריות מופיעות בו זמנית. תבנית העקיפה היא לכן סכום תבניות הפיזור המתקבלות משיטת הגביש המסתובב לכל הזוויות האפשריות.

הדרכים כאן קבעו את תנאי העקיפה של Bragg ו von Laue הן דרכים קלאסיות.
נרצה לקבל מודל טיפול קוונטי בבעיית הפיזור. לצורך כך עלינו להשתמש בכלל הזהב של פרמי הנגזר מתורת ההפרעות התלויה בזמן עליה אדבר כאן.

יש מוטיבציה לפתח תורת הפרעות עבור המילטוניאן מהצורה $H = H_0 + V(t)$

כאשר H_0 אינו תלוי בזמן ו $V(t)$ מטופל כהפרעה.

בתוך תורת ההפרעות הנ"ל פשוט לעבוד <u>בתמונת האינטראקציה</u>

נניח כי בתמונת שרדינגר המערכת מתוארת ע"י המצב (ket): $|\psi(t)\rangle_S$

נגדיר את המצב בתמונת האינטראקציה

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t)\rangle_S$$

נשים לב כי ב $t=0$ $|\psi(0)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_S$.

בעוד שבתמונת שרדינגר האופרטורים אינם מתפתחים בזמן (פרט לתלות מפורשת בזמן שאולי יש להם) הרי שבתמונת האינטראקציה הם מתפתחים בזמן לפי H_0:

$$A_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} A_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$$

נמצא כעת את המשוואה המתארת את התפתחות המצב בזמן בתמונת האינטראקציה:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I = -H_0 e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t)\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}(H_0 + V(t))|\psi(t)\rangle_S$$

השתמשנו בכך ש $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_S = (H_0+V)|\psi\rangle_S$

$$= e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t)\rangle_S$$

$$= V_I(t)|\psi(t)\rangle_I$$

ניתן לפתור משוואה זו בפרטורבציה ב V ע"י אינטגרציה שלה מ $t=0$ ל t, שימוש בתנאי ההתחלה

$$|\psi(t)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_I + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\, V_I(t')|\psi(t')\rangle_I$$

והצבה חוזרת ונשנית של צד שמאל של המשוואה בצד ימין תתן טור לפי חזקות ב V:

$$|\psi(t)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_I + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\, V_I(t')|\psi(0)\rangle_I + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt'\int_0^{t'} dt''\, V_I(t')V_I(t'')|\psi(0)\rangle_I + \cdots$$

סידרה זו ידועה כסידרת דייסון (Dyson series).

נניח בהתחלה לשם פשטות כי ל H_0 ספקטרום דיסקרטי $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$

וכי ב $t=0$ $|\Psi(0)\rangle_I = |\Psi(0)\rangle_S = |i\rangle$

בזמן מאוחר יותר נפתח את $|\Psi(t)\rangle_I$ במצבים העצמיים של H_0: $|\Psi(t)\rangle_I = \sum_n C_n(t)|n\rangle$

כדי למצוא את מקדמי הפיתוח $C_n(t)$ נציב את צורה זו של $|\Psi(t)\rangle_I$ בסדרת דייסון ונפעיל משמאל עם הברה $\langle n|$ לקבל

$$C_n(t) = \delta_{ni} + C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \cdots$$

כאשר

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \langle n|V_I(t')|i\rangle$$

$$C_n^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t dt'\int_0^{t'} dt'' \langle n|V_I(t')V_I(t'')|i\rangle$$

נשתמש בהגדרת $V_I(t)$ בתמונת האינטרקציה לקבל

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt' \langle n|e^{\frac{i}{\hbar}H_0t'}V(t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t'}|i\rangle$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int_0^t dt'\, e^{i\omega_{ni}t'}\langle n|V(t')|i\rangle$$

כאשר $\omega_{ni} = \frac{E_n-E_i}{\hbar}$. באופן דומה ע"י הכנסת האחדה $1=\sum_m|m\rangle\langle m|$

$$C_n^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2}\sum_m\int_0^t dt'\int_0^{t'} dt''\, e^{i\omega_{nm}t'}\langle n|V(t')|m\rangle e^{i\omega_{mi}t''}\langle m|V(t')|i\rangle$$

נבחן כעת את המקרה בו ההפרעה V אינה תלויה בזמן. כאן נקבל

$$C_n^{(1)}(t) = \frac{2}{i\hbar}V_{ni}\, e^{i\frac{\omega_{ni}t}{2}}\frac{\sin\left(\frac{\omega_{ni}t}{2}\right)}{\omega_{ni}}$$

$V_{ni} = \langle n|V|i\rangle$:

נרצה לחשב את ההסתברות למעבר מהמצב ההתחלתי $|i\rangle$ למצב $|n\rangle$ כעבור זמן t:

$$P_{i\to n}(t) = |C_n(t)|^2 = \left|\delta_{ni} + C_n^{(1)}(t) + C_n^{(2)}(t) + \cdots\right|^2$$

$$P_{i\to n}(t) = \left|C_n^{(1)}(t)\right|^2$$

עבור $n \neq i$ ונקבל בסדר הנמוך ביותר

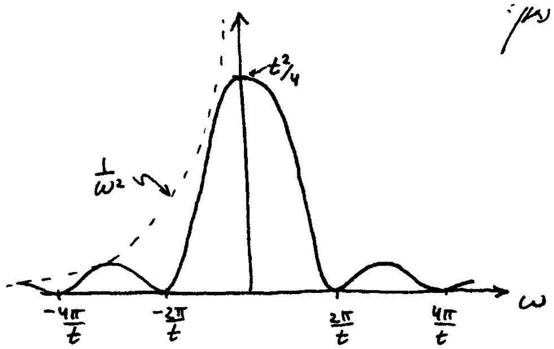
$$= \frac{4}{\hbar^2}\left|V_{ni}\right|^2 \frac{\sin^2\frac{\omega_{ni}t}{2}}{\omega_{ni}^2}$$

$$= \frac{2\pi t}{\hbar^2}\left|V_{ni}\right|^2 \Delta_t(\omega_{ni})$$

כשהגדרנו את הפונקציה

$$\Delta_t(\omega) = \frac{2}{\pi t}\frac{\sin^2\frac{\omega t}{2}}{\omega^2}$$

נתבונן בפונקציה $\frac{\sin^2\frac{\omega t}{2}}{\omega^2}$ כפונקציה של ω בזמן נתון:



אנו רואים כי הסתברות המעבר היא משמעותית רק עבור מצבים סופיים שמרחקם האנרגטי מהמצב ההתחלתי $\Delta E = \hbar\omega_{ni}$ מקיים

$$\Delta E \leq \frac{2\pi\hbar}{\Delta t} \Rightarrow$$

$$\Delta E\,\Delta t \leq h$$

בגבול $t\to\infty$ הפונקציה מרוכזת מאוד סביב $\omega=0$ עם שטח הולך ומתאים השווה ל

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \frac{\sin^2\frac{\omega t}{2}}{\omega^2} = \frac{\pi t}{2}$$

(רוחב השיא מתנהג כ $\frac{1}{t}$ וגובהו כ t^2):

מסיבה זו נרמלנו את $\Delta_t(\omega)$ כך שהאינטגרל שלה שווה ל 1 והיא מקיימת $\Delta_t(\omega) \xrightarrow{t\to\infty} \delta(\omega)$

שימו לב כי ככל ש ω_{ni} קטנה יותר הסתברות המעבר $P_{i\to n}$ עוברת תנודות איטיות יותר בזמן עם ערך שיא המתנהג כמו t^2 עבור $t < \frac{1}{\omega_{ni}}$. ברור לכן כי עבור ω_{ni} קטן מאוד הנוסחה שמצאנו להסתברות המעבר נכונה רק לזמנים לא ארוכים מדי אחרת נקבל $P_{ni} > 1$. הבעיה היא כמובן בעובדה שמצאנו את התוצאה מסדר ראשון בתורת ההפרעות. הסדרים הגבוהים יותר [illegible], ויש לקחת אותם בחשבון ליד רזוננס: $\omega_{ni}\to 0$.

במקרה בו קיים רצף של מצבים אליהם יכולה המערכת לעבור מעברים אנו מעוניינים בדרך כלל בהסתברות הכוללת ליחידת זמן למעבר לאוסף מצבים מסוים זה.
לדוגמא בפיזור של קרני X נהיה מעוניינים לחשב את ההסתברות שהפוטון המגיע עם וקטור גל $\vec{k}_i$ יתפזר ויהפוך לפוטון הנע עם וקטור גל הנמצא באלמנט Δk סביב $\vec{k}_f$.
ההסתברות המעבר ליחידת זמן מוגדרת אז כ:

$$W_{i\to\{n\}} = \frac{1}{t}\sum_{\{n\}} P_{i\to n}(t)$$

$\{n\}$: אוסף המצבים הסופיים.

גודל זה נחשב שימושי אם הוא אינו תלוי בזמן. נשתמש בתוצאה שקיבלנו ל $P_{i\to n}(t)$:

$$W_{i\to\{n\}} = \frac{2\pi}{\hbar^2}\sum_{\{n\}} |V_{in}|^2 \Delta_t(\omega_{ni})$$

נגדיר את צפיפות המצבים $\rho(E)$ כך ש $\rho(E)dE$ הינו מספר המצבים הסופיים עם אנרגיה בתחום $[E, E+dE]$ כך ש:

$$= \frac{2\pi}{\hbar^2}\int dE\, \rho(E)\, \overline{|V_{in}|^2}\, \Delta_t\left(\frac{E-E_i}{\hbar}\right)$$

כאשר $\overline{|V_{in}|^2}$ הוא הממוצע של $|V_{in}|^2$ על פני המצבים הסופיים לגבי בחלון האנרגיה סביב E.
בגבול של t גדול $\Delta_t\left(\frac{E-E_i}{\hbar}\right) \to \hbar\,\delta(E-E_i)$ ואז מקבלים

$$\longrightarrow \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{in}|^2}\,\rho(E_n)\Big|_{E_n=E_i}$$

זהו כלל הזהב של פרמי: (Fermi golden rule)

נפנה כעת לשימוש בכלל הזהב במקרה של פיזור מגביש. נבחן פיזור ניוטרונים.

בפיזור נייטרונים המערכת מורכבת מהגביש המתואר ע"י ההמילטוניאן שקיבלנו בקירוב ההרמוני ומהנייטרון המתואר ע"י ההמילטוניאן החופשי $-\frac{\hbar^2}{2m}\vec\nabla^2$. סכום ההמילטוניאנים הנ"ל מהווה את ההמילטוניאן H_0 אשר אנו יודעים לפתור.
הנייטרון עובר מהפוטנציאל המושרה ע"י האטומים המרכיבים את הגביש. פוטנציאל זה הינו סכום הפוטנציאלים האטומיים. ההפרעה V בה אנו עוסקים ניתן לרישום כך:

$$\hat V = \sum_{\vec R} U\left[\vec r - \left(\vec R + \vec u(\vec R)\right)\right]$$

$U(\vec r)$ הינו הפוטנציאל האטומי המפזר את הנייטרון.
$\vec r$ הינו מיקום הנייטרון
$\vec R + \vec u(\vec R)$ הינו מיקום האטום שנקודת שיווי המשקל של הגביש נמצאת בנקודת השריג $\vec R$.

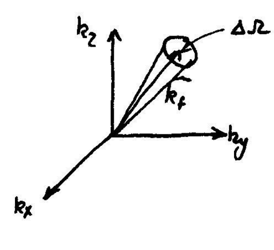
המצב ההתחלתי מאופיין ע"י התנע ההתחלתי (הוקטור) של הנייטרון הפוגע $\vec k_i$ וע"י מספרי האכלוס של הפונונים השונים בגביש $\{n_i\}$: $|\vec k_i, \{n_i\}\rangle$

המצב הסופי מתואר ע"י התנע הסופי של הנייטרון $\vec k_f$ ומספרי האכלוס הסופיים של הפונונים בגביש $\{n_f\}$: $|\vec k_f, \{n_f\}\rangle$

כעת מעוניינים לחשב את ההסתברות ליחידת זמן לכך שהנייטרון הפוגע יפוזר לתוך אלמנט זווית מרחבית $\Delta\Omega$ סביב הכיוון המוגדר ע"י $\vec k_f$.
עלינו לסכם לכן על כל המצבים הסופיים בהם מספרי האכלוס של הפונונים הינם מספרים כלשהם - (אינו מגבילים את המצב הסופי של הגביש מכיוון שאין אנו מודדים אותו אנו מודדים רק את הנייטרונים המפוזרים) והנייטרון המפוזר הינו בעל תנע $\vec k_f$ הנמצא בתוך הזווית המרחבית $\Delta\Omega$
מכיוון שאנו גם לא מודדים את מצבו ההתחלתי של הגביש נסכם על המצבים ההתחלתיים שלו עם המשקלות $P_{\{n_i\}} = \frac{e^{-\beta E_{\{n_i\}}}}{Z}$

$$W_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\substack{\{n_i\}\\ \{n_f\}}} P_{\{n_i\}} \sum_{\vec k_f \in \Delta\Omega} \left|\langle \{n_f\}, \vec k_f | \hat V | \{n_i\}, \vec k_i \rangle\right|^2 \delta\left(\frac{E_{\{n_f\}} + \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} - E_{\{n_i\}} - \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}}{\hbar}\right)$$

$$\sum_{\vec k \in \Delta\Omega} \to \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\vec k \in \Delta\Omega} d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} \Delta\Omega \int_0^\infty dk\, k^2$$



נגדיר את הסתברות המעבר ליחידת זמן ליחידת זוית מרחבית (עבור $\Delta\Omega\to 0$) $\frac{dW}{d\Omega}=\frac{W}{\Delta\Omega}$

נקבל

$$\frac{dW}{d\Omega}=\frac{2\pi}{\hbar^2}\frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\{n_i\}\{n_f\}}P_{\{n_i\}}\int_0^\infty dk_f\,k_f^2\,\left|\langle\{n_f\},\vec{k}_f|\hat{V}|\{n_i\},\vec{k}_i\rangle\right|^2\delta\left(\frac{E_{\{n_f\}}+\frac{\hbar^2k_f^2}{2m}-E_{\{n_i\}}-\frac{\hbar^2k_i^2}{2m}}{\hbar}\right)$$

נגדיר את חתך הפעולה הדיפרנציאלי כהסתברות המעבר ליחידת זמן ליחידת זוית מרחבית ליחידת שטף פוגע

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{1}{\rho_i v_i}\frac{dW}{d\Omega}$$

השטף הפוגע הנתון מנורמל אחד הפוגע בדגמה היא מכפלת הצפיפות של החלקיק הפוגע $\rho_i=\frac{1}{V}$
(מכיון שהחלקיקים הפוגעים מתוארים ע"י גלים מישוריים) והמהירות $v_i=\frac{P_i}{m}=\frac{\hbar k_i}{m}$ לכן:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{mV}{\hbar k_i}\frac{dW}{d\Omega}$$

נחשב האלמנט המטריצי של $\hat{V}$:

$$\langle\{n_f\}\vec{k}_f|\hat{V}|\{n_i\}\vec{k}_i\rangle=\frac{1}{V}\int d^3r\,e^{-i(\vec{k}_f-\vec{k}_i)\vec{r}}\langle\{n_f\}|\sum_{\vec{R}}U[\vec{r}-(\vec{R}+\vec{u}(\vec{R}))]|\{n_i\}\rangle$$

$$=\frac{1}{V}\int d^3r\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\langle\{n_f\}|\sum_{\vec{R}}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3q'\,e^{i\vec{q}'[\vec{r}-(\vec{R}+\vec{u}(\vec{R}))]}U(\vec{q}')|\{n_i\}\rangle$$

כאשר סימנו $\vec{q}=\vec{k}_f-\vec{k}_i$ והשתמשנו בפורייה של U: $U(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3q\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}U(\vec{q})$

$U(\vec{q})=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3r\,e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}U(\vec{r})$ $\quad\int d^3r\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}=(2\pi)^3\delta(\vec{q})\,,\ \int d^3q\,e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}=(2\pi)^3\delta(\vec{r})$

$$=\frac{(2\pi)^{3/2}}{V}U(\vec{q})\sum_{\vec{R}}e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}}\langle\{n_f\}|e^{-i\vec{q}\cdot\vec{u}(\vec{R})}|\{n_i\}\rangle$$

נפתח לפי $\vec{u}$ קטן:

$$=\frac{(2\pi)^{3/2}}{V}U(\vec{q})\sum_{\vec{R}}e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}}\langle\{n_f\}|1-i\vec{q}\cdot\vec{u}(\vec{R})-\frac{1}{2}(\vec{q}\cdot\vec{u}(\vec{R}))^2+\cdots|\{n_i\}\rangle$$

נחשב תחילה פיזור אלסטי בו מצב הגביש אינו משתנה: $\{n_f\}=\{n_i\}$

מכיון ש $\vec{u} \sim \sum \vec{\epsilon}\,(a+a^{\dagger})$ $\quad \langle\{n_i\}|\vec{q}\cdot\vec{u}(\vec{R})|\{n_i\}\rangle=0$ ונוכל לקרב את אלמנט המטריצה הנותר בביטוי
$\langle\{n_i\}|\,1-\frac{1}{2}q^2\vec{u}^2(\vec{R})\,|\{n_i\}\rangle$ כשהשתמשנו בכך ש $\langle\{n_i\}|u^i u^j|\{n_i\}\rangle=0$ עבור $i\neq j$.

כמו כן בפיזור אלסטי בוודאי הגבול של שימור אנרגיה נאמר לנרמה כ: $\delta\left(\frac{\hbar}{2m}(k_f^2-k_i^2)\right)=\frac{m}{\hbar k_i}\delta(k_f-k_i)$
לכן נקבל במקרה זה

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}_{elastic} = 2\pi\frac{m^2}{\hbar^4}|U(\vec{q})|^2\sum_{\{n_i\}}P_{\{n_i\}}\left|\sum_{\vec{R}}e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}}\langle\{n_i\}|\,1-\frac{1}{2}q^2\vec{u}^2(\vec{R})\,|\{n_i\}\rangle\right|^2$$

מכיון ש $\langle\{n_i\}|\vec{u}^2(\vec{R})|\{n_i\}\rangle$ אינו תלוי ב $\vec{R}$ (הגביש נאה באופן מחזורי) נוכל להוציאו מהסכום על $\vec{R}$
אולם כבר הוכחנו בעבר:

$$\sum_{\vec{R}}e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} = N\sum_{\vec{K}\in \text{Reciprocal Lattice}}\delta_{\vec{K},\vec{q}}$$

N: מספר תאי היחידה בגביש

בסדר שני ב u נקבל בקירוב:

$$\sum_{\{n_i\}}P_{\{n_i\}}\left|\langle\{n_i\}|\,1-\frac{1}{2}q^2\vec{u}^2(\vec{R})\,|\{n_i\}\rangle\right|^2 = e^{-2W}$$

הגדרנו את ה Debye Weller factor

$$W=\frac{q^2}{2}\sum_{\{n_i\}}P_{\{n_i\}}\langle\{n_i\}|\vec{u}^2(0)|\{n_i\}\rangle$$

$$\Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega}_{elastic} = 2\pi N^2\frac{m^2}{\hbar^4}|U(\vec{q})|^2 e^{-2W}\sum_{\vec{K}\in R.L}\delta_{\vec{q},\vec{K}}$$

נשים לב למסקנות הבאות:

1. קיבלנו את תנאי Bragg לפיזור (בניסוח von Laue) $\quad \vec{k}_f-\vec{k}_i=\vec{K}\in R.L.$

2. ממדידת עוצמת השיאים ב $\vec{q}$ שונים ניתן לקבל אינפורמציה על $U(\vec{q})$: טרנספורם פוריה של הפוטנציאל המפזר.

3. ראינו כי $\quad \sum_{\{n_i\}}P_{\{n_i\}}\langle\{n_i\}|\vec{u}^2(0)|\{n_i\}\rangle \sim a+bT$

תרומת הפלוקטואציות התרמיות והקוונטיות

לכן פלוקטואציות תרמיות וקוונטיות <u>מנמיכות</u> את שיאי Bragg דרך ה Debye Waller factor
<u>אך לא מרחיבות</u> אותם (הם עדיין פונקציית דלתא)

4. עד כה עסקנו בגביש מונואטומי. במקרה בו קיים לגביש בסיס הפוטנציאל המפזר הינו

$$\hat V = \sum_{\vec R}\sum_{\vec b} U_{\vec b}\left[\vec r - \left(\vec R + \vec b + \vec u(\vec R + \vec b)\right)\right]$$

וכתוצאה מכך

$$\left|\langle\{n_f\}\vec k_f|\hat V|\{n_i\}\vec k_i\rangle\right|^2 = \left|\frac{(2\pi)^{3/2}}{V}\sum_{\vec R} e^{-i\vec q\cdot\vec R}\sum_{\vec b} e^{-i\vec q\cdot\vec b}\,U_{\vec b}(\vec q)\,\langle\{n_f\}|e^{-i\vec q\,\vec u(\vec R+\vec b)}|\{n_i\}\rangle\right|^2$$

השאלה, במקרה האלסטי ?

$$= \frac{N^2}{V^2}(2\pi)^3 S(\vec q)\, e^{-2W}\sum_{\vec K\in R.L}\delta_{\vec q,\vec K}$$

כשהגדרנו את ה structure factor

$$S(\vec q) = \sum_{\vec b} e^{-i\vec q\vec b}\,U_{\vec b}(\vec q)$$

$$\hookrightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3r\, e^{-i\vec q\cdot\vec r}\,U_{\vec b}(\vec r)$$

: atomic structure factor

$\hookrightarrow$ התפלגות המטען האטומי סביב היון ה $\vec b$.

המשמעות של $S(\vec q)$ יכולה לגרום לכך שחלק משיאי Bragg יעלמו. לא לכל $\vec q\in R.L.$ יהיה שיא. יחסי העוצמות בין שיאי Bragg שונים, בהזנחת ה Debye Weller factor, ינתנו ע"י יחסי $|S(\vec q)|^2$ ב $\vec q$ המתאימים לשיאים השונים:

$$\frac{I(\vec q)}{I(\vec q')} = \frac{|S(\vec q)|^2}{|S(\vec q')|^2}$$

5. בפיזור אי אלסטי חלק מאנרגית הניטרון הפוגע מנוצלת ליצור פונון אחד או יותר בגביש. נתבונן במקרה בו נוצר פונון אחד כלומר $\{n_f\}=\{n_i\}$ פרט ל $\vec k,s$ מספר עבורו $n^f_{\vec k,s} = n^i_{\vec k,s}+1$. תרומות מאופני פיזור כאלה יבואו מהאיבר הלינארי בפיתוח $e^{-i\vec q\vec u(\vec R)}$

מכיון ש $\vec u(\vec R) = \sum_{\vec k,s}\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_{\vec k,s}}}\,\vec\epsilon_s\left(a_{\vec k,s}+a^{+}_{-\vec k,s}\right)e^{i\vec k\cdot\vec R}$ אלמנט המטריצה של $-i\vec q\cdot\vec u(\vec R)$ בין $|\{n_i\}\rangle$ ל $\langle\{n_f\}|$ הוא

$$-i\,\vec q\cdot\vec\epsilon_s\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V\omega_{\vec k s}}}\,e^{-i\vec k\cdot\vec R}$$

הסכימה על $\vec R$ תתן לנו כעת

$$\sum_{\vec R} e^{-i(\vec q+\vec k)\cdot\vec R} = N\sum_{\vec K\in RL}\delta_{\vec q+\vec k,\vec K}$$

פונקצית הדלתא הזו מבטאת את שימור התנע בפיזור עד כדי וקטור שריג הופכי $\vec k_f+\vec k = \vec k_i+\vec K$ התנע לא נשמר ממש כי המערכת שוברת סימטרית הזזה, במקומו נשמר תנע הגביש - התנע עד כדי וקטור שריג הופכי. זו דוגמה בולטת לתופעה כללית שראינו כמובן.

פונקצית-δ של שימור אנרגיה תתן $\frac{\hbar^2k_f^2}{2M}+\hbar\omega_{\vec k s} = \frac{\hbar^2k_i^2}{2M}$, מדידת פיזור אי אלסטי מאפשרת לכן לקבל אינפורמציה על יחס הנפיצה של הפונונים.