
Einführung in die Neutronenstreuung

Robert Georgii

Forschungsneutronenquelle Hans Maier-Leibnitz

TU München

Literatur

- Sehr empfehlenswert:

Neutron scattering: A Primer by Roger Pynn
Los Alamos Science (1990)

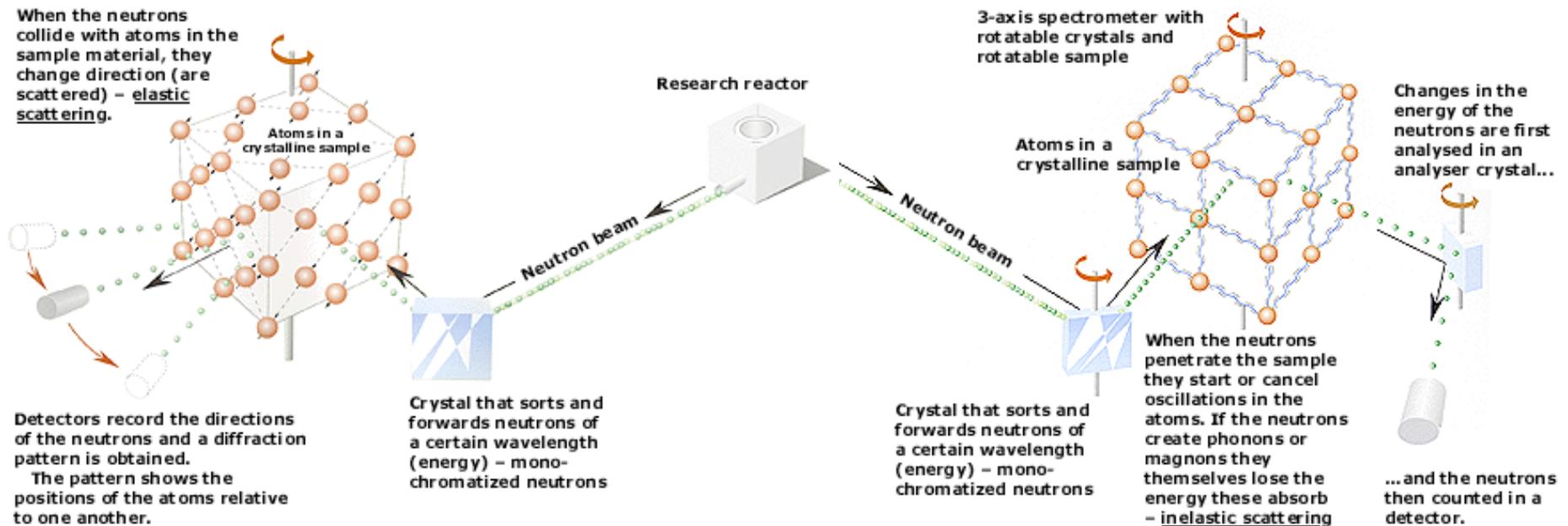
http://neutrons.ornl.gov/science/ns_primer.pdf

Nobelpreis 1994 an Shull and Brockhouse

Neutronen sehen

wo die Atome sind

wie die Atome sich bewegen



Eigenschaften des Neutrons

- Masse: $m_n = 1.675 \times 10^{-27}$ kg; Ladung = 0; Spin = 1/2
Magnetisches Dipol Moment: $\mu_n = -1.913 \mu_N$
- Geschwindigkeit v , Kinetische Energie E , Wellenlänge λ ,
Wellenvektor k , Moderatortemperatur T

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = k_B T = \left(\frac{hk}{2\pi}\right)^2 / 2m \quad k = 2\pi/\lambda = mv/h/2\pi$$

	Energie (meV)	Temperatur (K)	Wellenlänge (Å)
Kalt	0.1 – 10	1 – 120	4 – 30
Thermisch	5 – 100	60 – 1000	1 – 4
Heiß	100 – 500	1000 – 6000	0.4 – 1

Warum wir Neutronenstrahlung nutzen

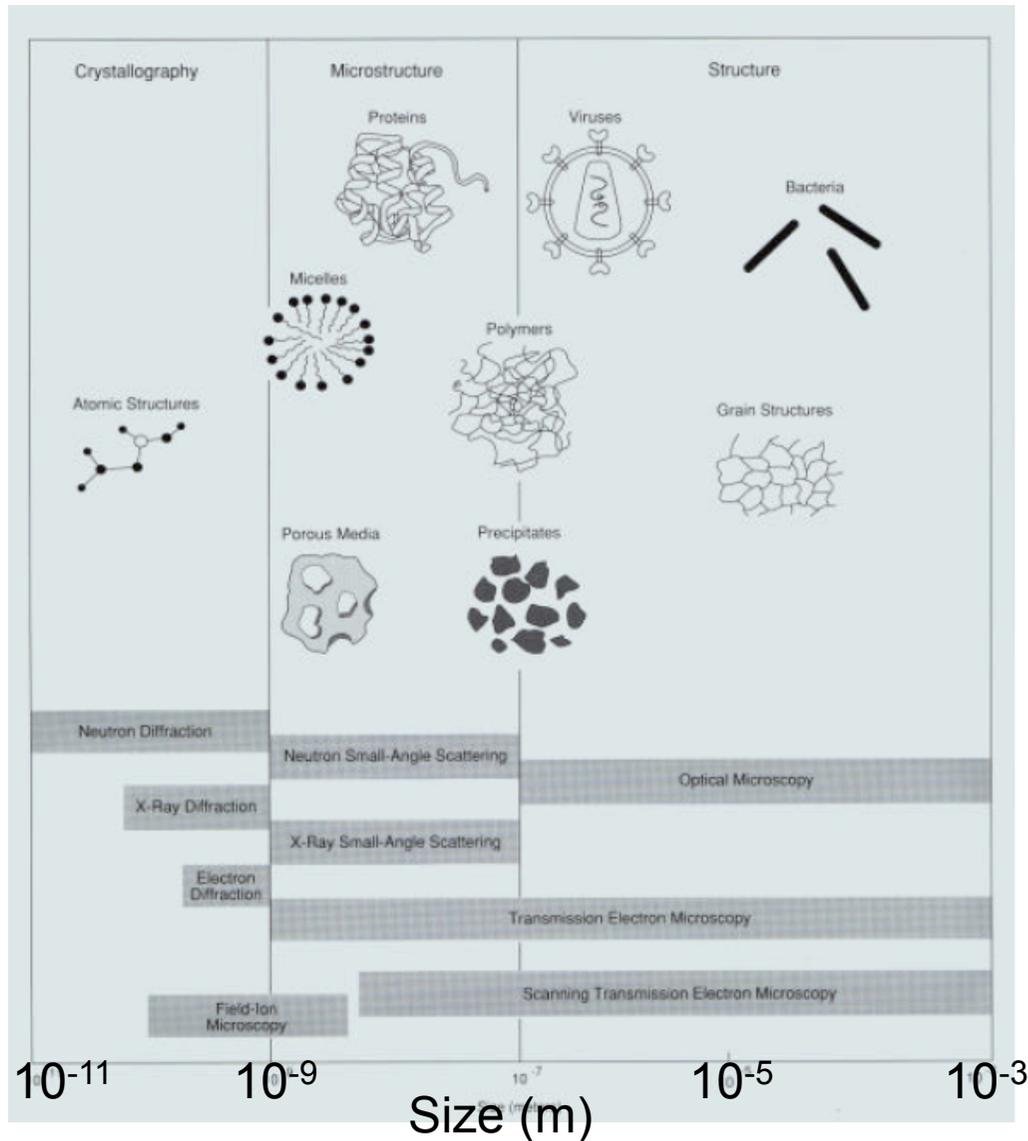
■ Vorteile:

- **Wellenlänge** ist in der Größenordnung der **Atomabstände** ($\approx 1\text{\AA} = 10^{-10}\text{ m}$)
- **Kinetische Energie** ist in der Größenordnung der **Bewegungsenergie der Atome** ($\approx \text{meV}$) und viel kleiner als die Bindungsenergie ($\approx \text{eV}$)
- **Sehr durchdringend**, da ungeladene Teilchen
- Absorptionseigenschaften sind **isotopenabhängig**
- Neutronen haben ein magnetisches Moment, “**sehen**” also **B-Felder**

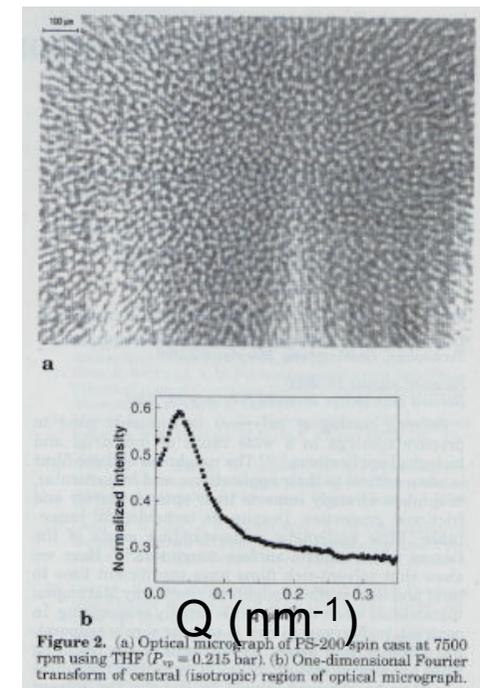
■ Nachteile:

- Neutronenquellen haben sehr niedrige Brillanz
- Neutronen sind schwer nachzuweisen und abzuschirmen

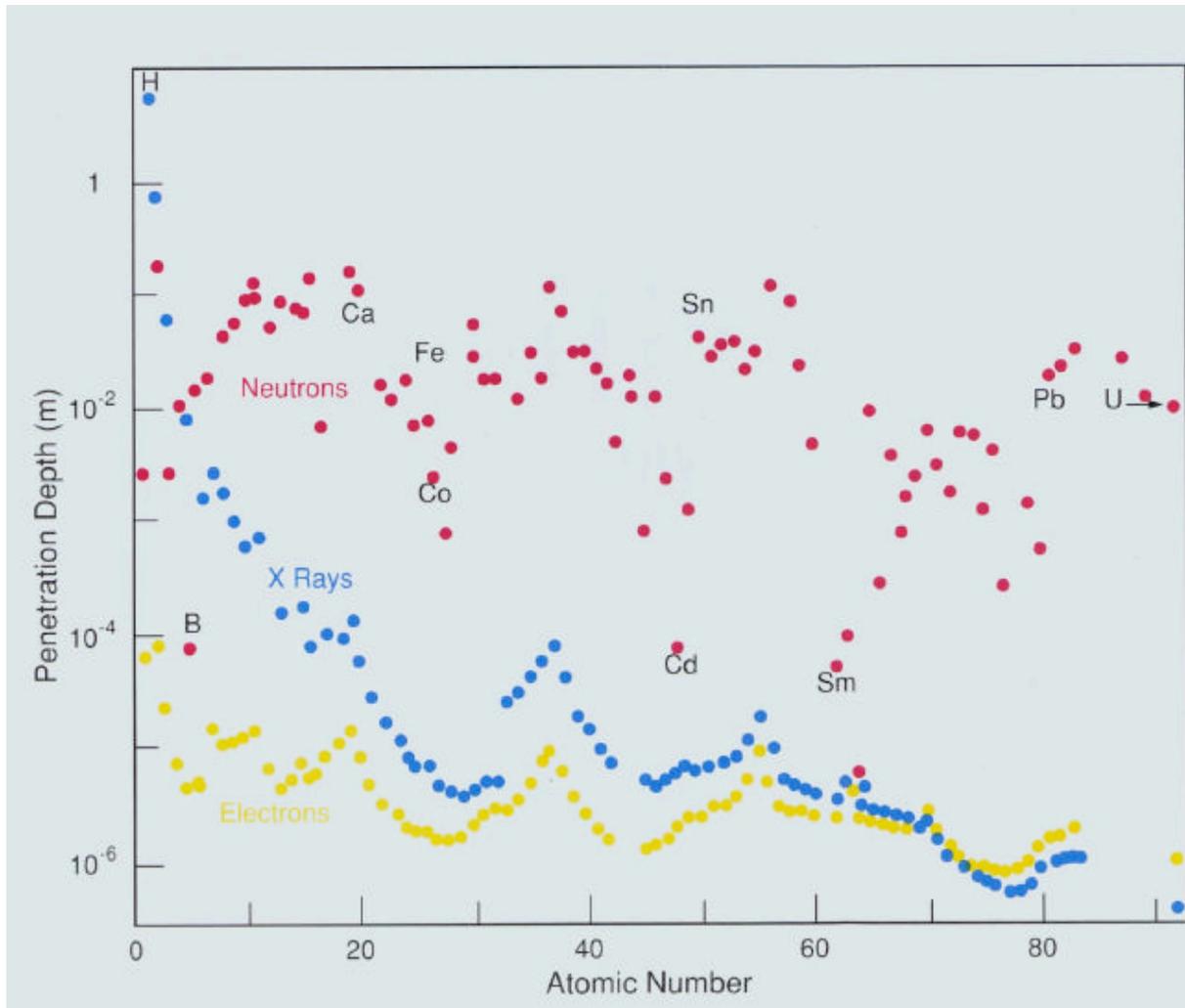
Vergleich mit anderen Sonden



- **Streumethoden** geben Informationen
 - im reziproken Raum
 - über ein statistisches Ensemble
- **Direkte Methoden** geben Information
 - im Bildraum
 - über einzelne lokale Objekte



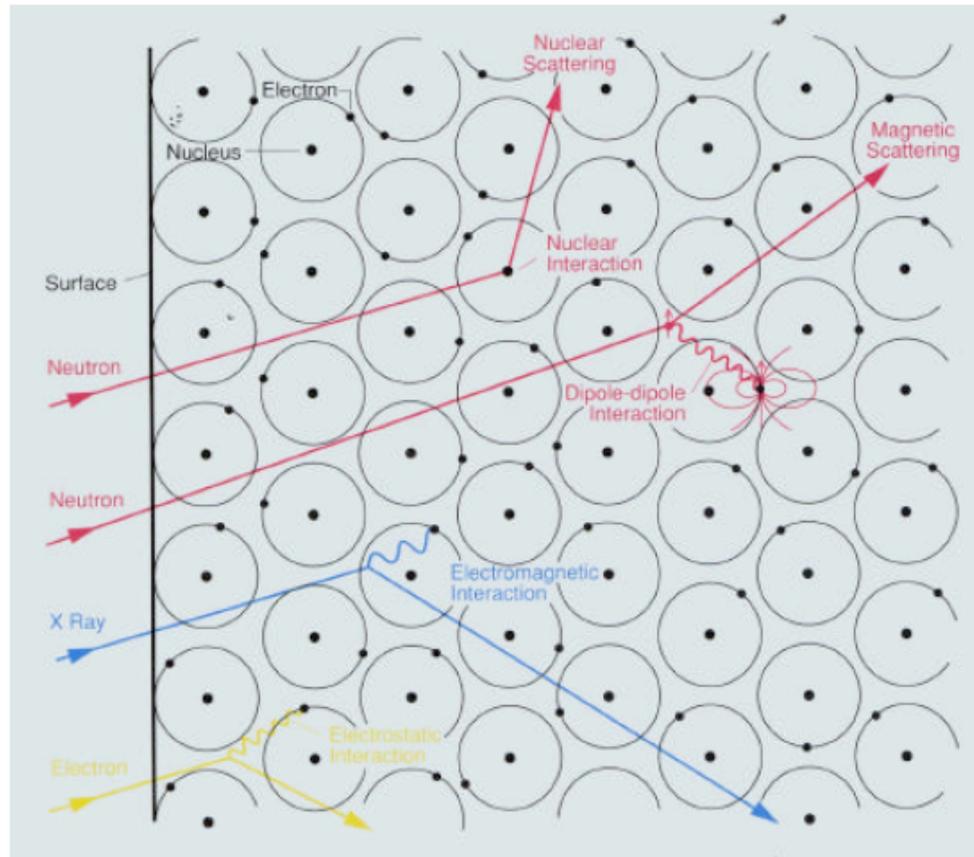
Vergleich Neutronen-, Röntgen- und Elektronenstreuung



Neutronen:

- Keine systematische **A-Abhängigkeit**
- Spezielle stark absorbierende Isotope: **B, Cd, Sm, Gd**
- Großer Unterschied zwischen **H/D**

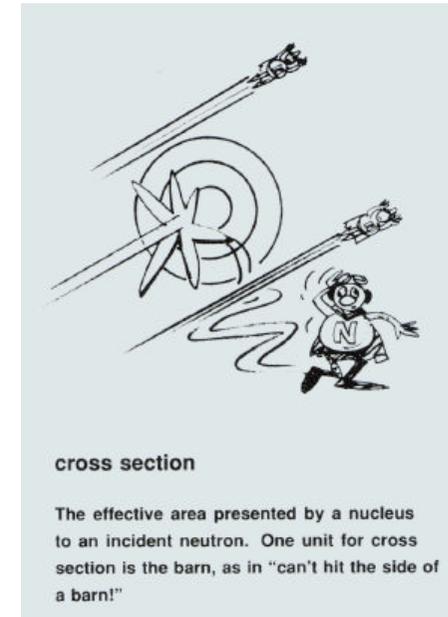
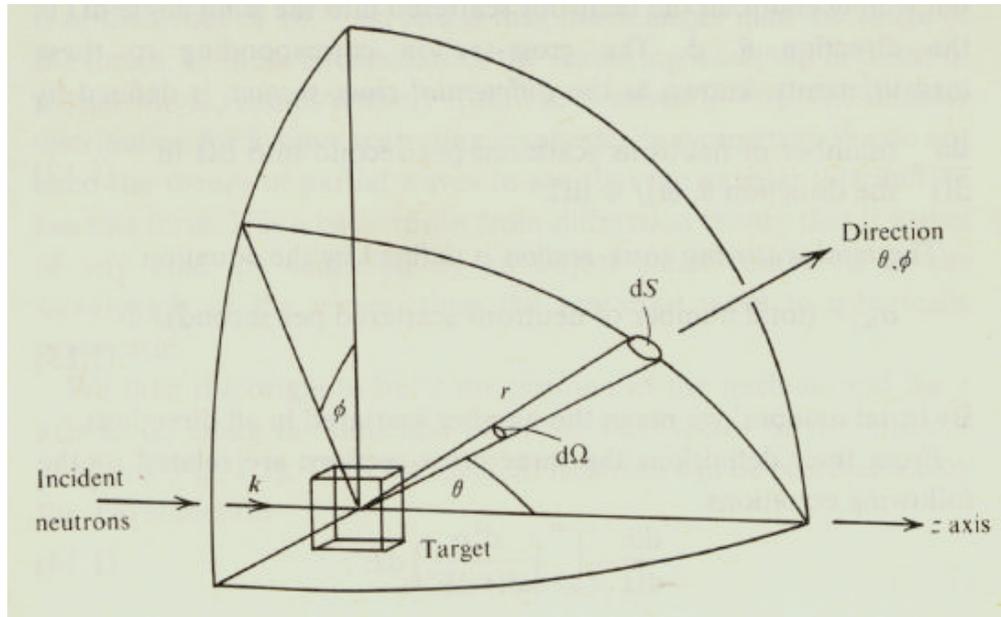
Wechselwirkungsmechanismen



Wechselwirkung von Neutronen

- nur mit den **Atomkern** (Punktwechselwirkung \sim fm)
- mit **ungepaarten Elektronen** (magnetische Dipol-Dipol WW)

Wirkungsquerschnitt



- $\Phi = \text{Zahl der einfallenden } n / (\text{s cm}^2)$
- $\sigma = \text{Zahl gestreuten } n / \text{s} / \Phi$
- $d\sigma/d\Omega = \text{Zahl gestreuten } n / \text{s} / \Phi d\Omega$

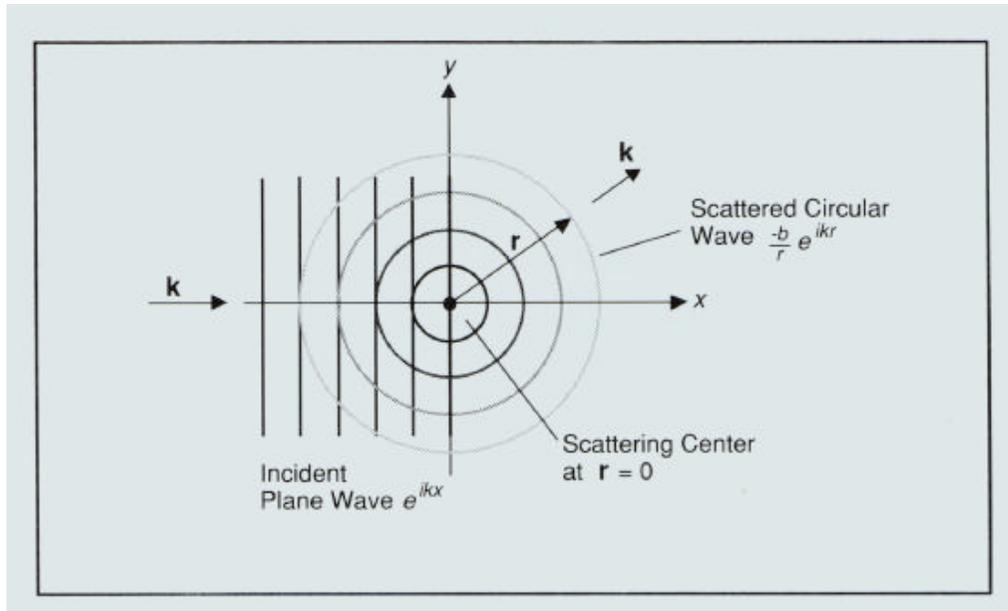
σ in barn: 1 barn = 10^{-24} cm^2

Abschwächung = $e^{-N\sigma d}$

$N = \text{Atome/Einheitszelle}$

$d = \text{Dicke}$

Streuung an einem einzelnen Kern



- Reichweite der starken WW ($\sim 1\text{fm}$) \ll Neutronenwellenlänge, so dass die Streuung **“punktförmig”** ist.
- Energie der Neutronen ist klein gegenüber Kernanregungen \Rightarrow **elastische Streuung**
- **keine Absorption**

Die Zahl der n/s, die nach der Streuung eine Fläche dS mit der Geschwindigkeit v passieren ist:

$$v \cdot dS \cdot |\Psi_{scat}|^2 = v \cdot dS \cdot b^2 / r^2 = v \cdot b^2 \cdot d\Omega, \text{ wobei } b \text{ die Streulängen ist.}$$

Da die Zahl der einfallenden n/s pro cm^2 $\Phi = v |\Psi_{inc}|^2 = v$ ist, gilt:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{v \cdot b^2 \cdot d\Omega}{\Phi \cdot d\Omega} = b^2 \text{ und damit } \sigma = 4\pi b^2$$

Addition der Streuung von vielen Kernen

Für einen Kern an der Position \vec{R}_i ist die einfallende Welle $e^{i\vec{k}_0 \vec{R}_i}$

Für die gestreute Welle gilt dann $\Psi_{Scat} = \sum e^{i\vec{k}_0 \vec{R}_i} \left[\frac{-b_i}{|\vec{r} - \vec{R}_i|} e^{i\vec{k}' (\vec{r} - \vec{R}_i)} \right]$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{vdS |\Psi_{scat}|^2}{vd\Omega} = \frac{dS}{d\Omega} \left| b_i e^{i\vec{k}' \vec{r}} \sum \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_i|} e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}') \vec{R}_i} \right|^2$$

Wenn man **weit genug entfernt misst** ($r \gg R_i$), so gilt, mit $d\Omega = dS/r^2$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{i,j} b_i b_j e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}') \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} = \sum_{i,j} b_i b_j e^{i\vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)}$$

Wobei $\vec{Q} = \vec{k}' - \vec{k}_0$ der **Wellenvektorsübertrag** ist.

Kohärente und inkohärente Streuung

Die Streulänge hängt von dem Isotop und dem Spin ab.

Für einen einzelnen Kern gilt:

$$b_i = \langle b \rangle + \delta b_i$$

Einsetzen:

$$b_i b_j = \langle b \rangle^2 + \langle b \rangle \left(\overbrace{\delta b_i}^{\langle b_i \rangle = 0} + \overbrace{\delta b_j}^{\langle b_j \rangle = 0} \right) + \overbrace{\delta b_i \delta b_j}^{0 \text{ für } i \neq j}$$

$$\langle \delta b_i^2 \rangle = \langle b_i - \langle b \rangle \rangle^2 = \langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2$$

Zahl der Atome

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \langle b \rangle^2 \sum_{i,j} e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} + \left(\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2 \right) N$$

kohärente Streuung
(abhängig von Q)

inkohärente Streuung
(in alle Richtungen)

Werte für σ_{coh} und σ_{inc}

Nuclide	σ_{coh}	σ_{inc}	Nuclide	σ_{coh}	σ_{inc}
^1H	1.8	80.2	V	0.02	5.0
^2H	5.6	2.0	Fe	11.5	0.4
C	5.6	0.0	Co	1.0	5.2
O	4.2	0.0	Cu	7.5	0.5
Al	1.5	0.0	^{36}Ar	24.9	0.0

- Unterschied für H/D wird zur Kontrastvariation benutzt
- Al wird für Strahlfenster benutzt
- V wird als Standardstreuer für inelastische Streuung genutzt

Kohärente Streuung an Kristallen

Kohärenter Wirkungsquerschnitt: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \langle b \rangle^2 \sum_{i,j} e^{-i\vec{Q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)} = \langle b \rangle^2 N \cdot S(\vec{Q})$
 $S(\vec{Q})$ nennt man man die **Streuungsfunktion**.

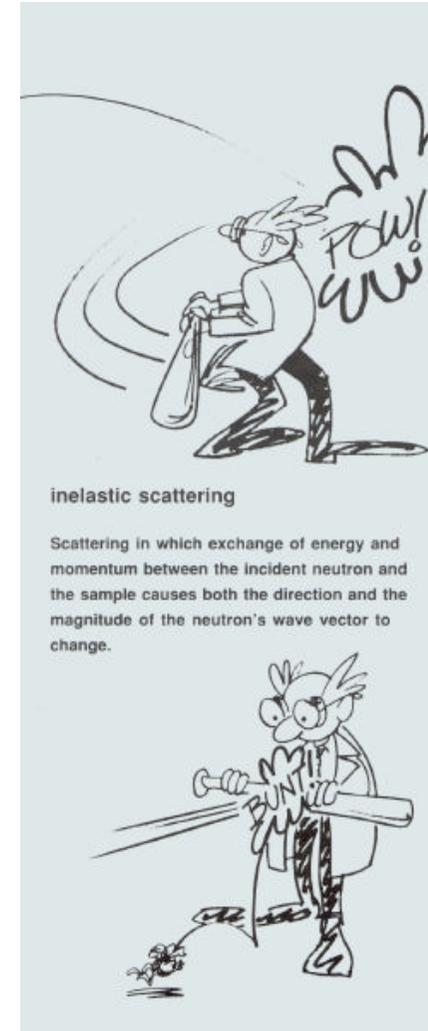
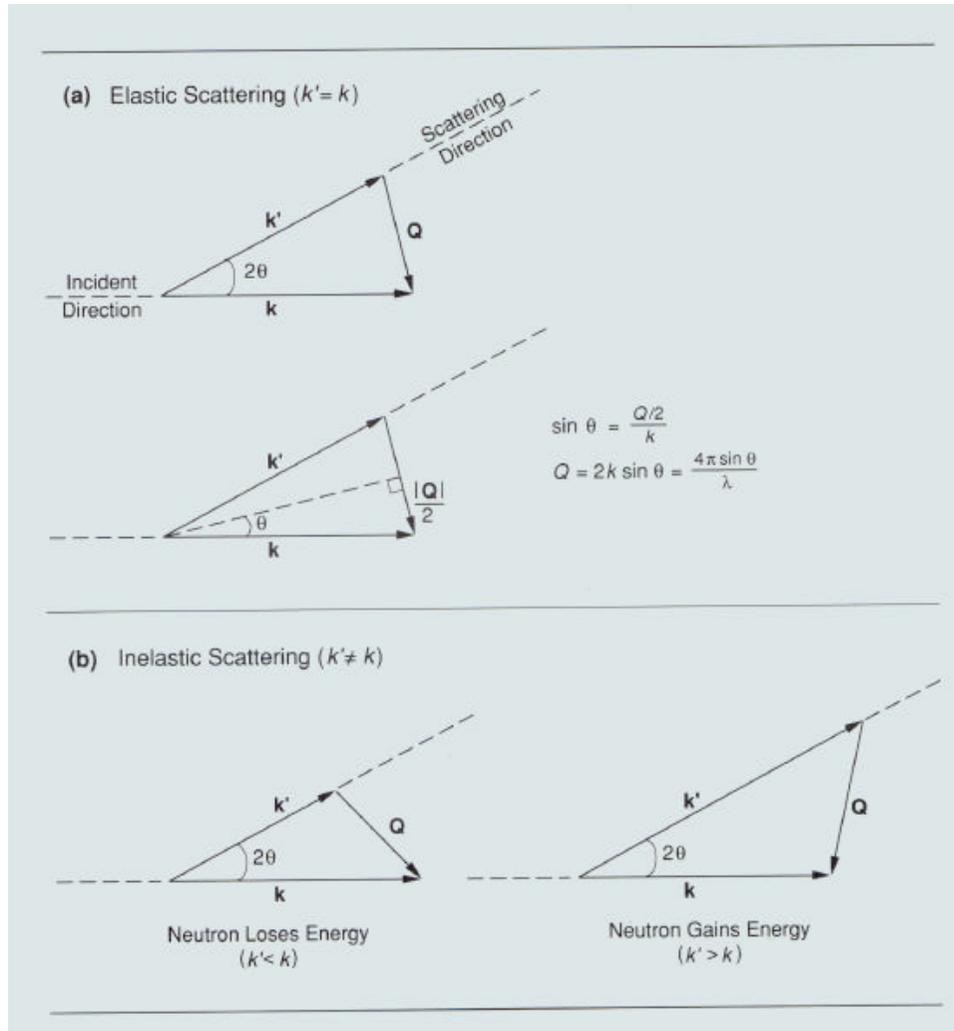
$\vec{R}_i = \vec{i} + \vec{u}_i$ Auslenkung um die Gleichgewichtsposition

$S(Q)$ ist nur für Q s ungleich 0, für die gilt: $\vec{Q} \cdot (\vec{i} - \vec{j}) = 2\pi M$

In einem Bravais-Gitter gilt: $\vec{G}_{hkl} = h\vec{a}_1 + k\vec{a}_2 + l\vec{a}_3$, $\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$

In einem Kristallgitter gibt es nur Streuung, wenn der Impulsübertrag mit dem reziproken Gittervektor übereinstimmt.

Neutronen können Energie im Streuprozess Energie gewinnen oder verlieren: Die inelastische Streuung



Der inelastische Wirkungsquerschnitt

- Wichtige experimentelle Größen sind der gemessene **Impulsübertrag $h\mathbf{Q}$** und der **Energietransfer $h\omega$**
- Doppelt differentieller Wirkungsquerschnitt:

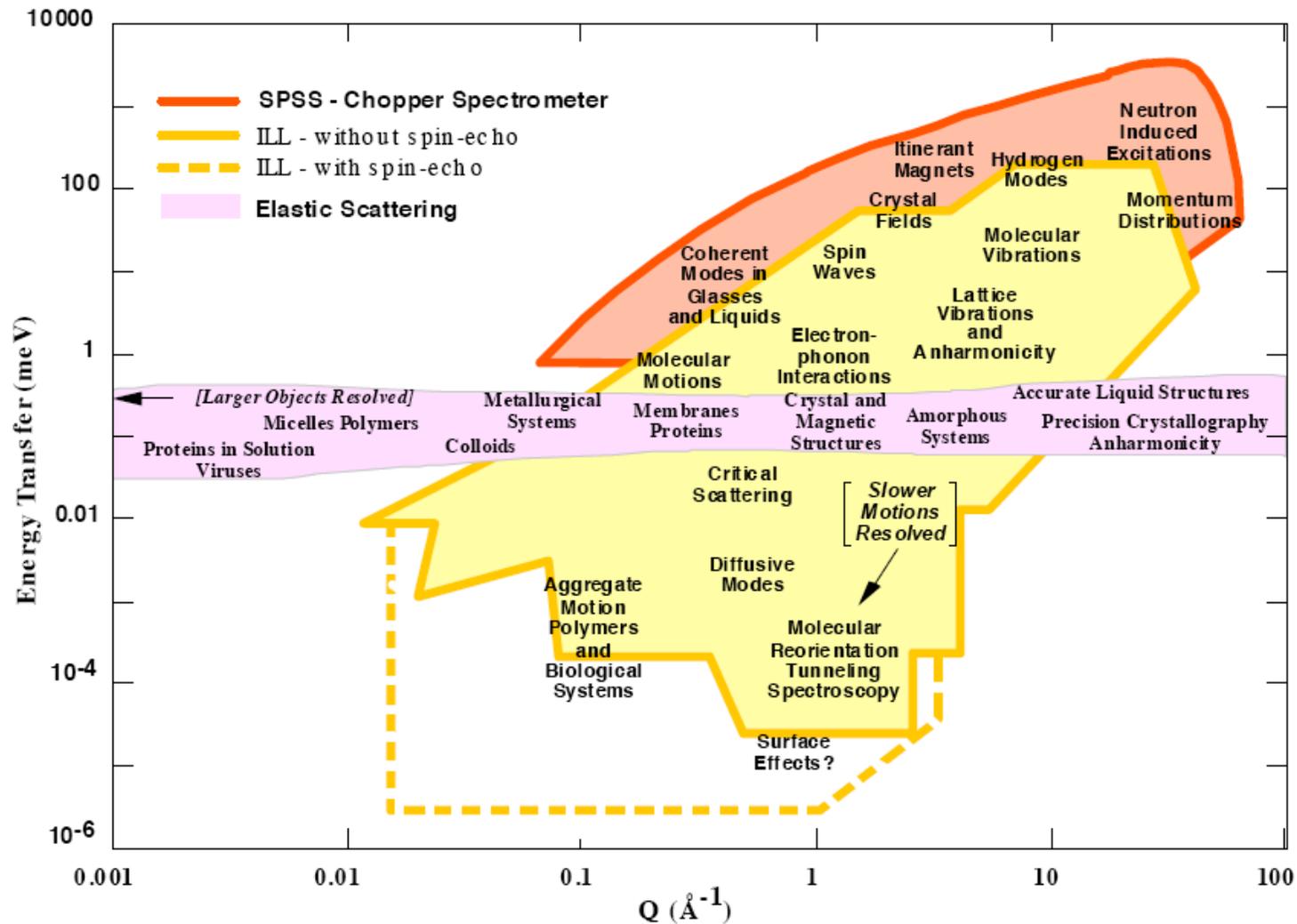
$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = b^2 \frac{k'}{k} NS(\vec{Q}, \omega)$$

- Hier lässt ebenfalls zwischen kohärenter und inkohärenter Streuung unterscheiden.

Wichtige Schlussfolgerungen

- Kohärente, elastische Streuung gibt an **wo** sich die Atome befinden.
- Inkohärente, elastische Streuung trägt zum Untergrund bei.
- Kohärente, inelastische Streuung gibt die **kollektive Bewegung** der Atome wieder.
- Inkohärente, inelastische Streuung eignet sich z.B. zur Untersuchung von Diffusionsprozessen (die Selbstkorrelation von Atomen).

Neutronen in der Festkörperphysik



Viel Spaß bei den Experimenten !