



Neutron Scattering

in Condensed Matter Physics

中子散射 在凝聚态物理中的应用

[瑞士] Albert Furrer Joël Mesot Thierry Strässle 著

刘本琼 孙光爱 龚建 彭先觉 译



国防工业出版社

National Defense Industry Press



World Scientific

Connecting Great Minds



装备科技译著出版基金

中子散射在凝聚态 物理中的应用

Neutron Scattering in Condensed Matter Physics

[瑞士] Albert Furrer Joël Mesot Thierry Strässle 著
刘春琼 孙光爱 龚建 彭先觉 译



国防工业出版社

· 北京 ·

著作权合同登记 图字:军-2015-104号

图书在版编目(CIP)数据

中子散射在凝聚态物理中的应用/(瑞士)艾伯特·富勒(Albert Furrer),(瑞士)乔艾尔·美卓(Joel Mesot),(瑞士)蒂埃里·斯卓斯(Thierry Strassle)著;刘本琼等译. —北京:国防工业出版社,2017.12

书名原文:Neutron Scattering in Condensed Matter Physics

ISBN 978-7-118-11379-2

I. ①中... II. ①艾... ②乔... ③蒂... ④刘... III. ①中子衍射-应用-凝聚态-物理学-研究 IV. ①O571.56②O469

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 238791 号

Copyright © 2009 by World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. All rights reserved. This book, or parts thereof, may not be reproduced in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or any information storage and retrieval system now known or to be invented, without written permission from the publisher.

Simplified Chinese translation arranged with World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore.

本书简体中文版由 World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. 授权国防工业出版社独家出版发行。版权所有,侵权必究。

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路23号 邮政编码100048)

天津嘉恒印务有限公司

新华书店经售

※

开本 710 × 1000 1/16 印张 15 3/4 字数 300 千字

2017 年 12 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—2000 册 定价 79.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

前 言

本书源于作者在苏黎世联邦理工学院(ETH Zurich)为凝聚态物理专业的研究生最后一年的学习中做的讲义。第一作者于1979年开始授课,第二作者于2003年接任,第三作者于2007年开始协助至今。最初,这些讲义主要是基于G. L. Squires的优秀著作*Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering*(1978年剑桥大学出版社)。这些年来,讲义的内容针对学生的反馈逐步得到完善,包含了中子散射技术的新进展,并且关于实验的介绍也将中子散射在凝聚态物理新领域中的应用的快速发展考虑在内。经过不断的完善,现今的讲义涵盖了众多利用中子散射技术来研究凝聚态物理的相关专题,而这些专题在现有的教科书里几乎是很难找到的。为此,作者感谢世界科技出版社提出将现有的讲义笔记整理成一本综合性专著的建议,并定名为《中子散射在凝聚态物理中的应用》。

我们强调本书是由对理论比较感兴趣的实验工作者写的,因此主要面向实验人员,以及对实验感兴趣的理论学者。它将帮助读者在凝聚态物理这一广阔领域中设计并分析中子散射实验。阅读本书,不需要具备中子散射理论基础,但是熟悉凝聚态物理和量子力学的基本概念对于理解书中的内容是必要的。此书仅限于凝聚态物理学(不包括软凝聚态物质)的主要范畴,不能涵盖所有的应用。但是,我们相信读者能够应用书中相应章节所描述思想和步骤去处理一些本书未谈及的专题。总之,本书是一本综合性指南,面向讲师以及处于毕业阶段和研究生阶段的学生作为他们的入门课程。此外,它对所有刚开始利用中子散射技术来研究凝聚态物理的科研人员,以及在这个领域中已经很活跃的科研人员来说都将是很有帮助的。

本书的前3章介绍了中子散射的概况、理论基础和仪器组成,接下来的12章则介绍了凝聚态物理学领域里中子散射提供重要信息的那些最重要的专题。但凡可能,专题章节都包含了从海量的文献数据中挑选出来的解说性的实验结果,按照是否具有作为一本教科书的教学可适性来进行挑选。因此,实验结果不仅包括中子散射开创时期的“历史”数据,也有当前研究的数据。一些专题章节的最后有习题,旨在阐明概念以及加深对内容的理解。因此,这些习题是本书不可或缺的一部分。我们鼓励读者去解答这些问题,或者是参考相关章节后面的

答案。为了控制专题章节的长度,一些数学推导及列表从正文中移出,并收集在附录里面。

从专业综述的角度来说,每章中引用的参考文献并不齐全,它们仅仅作为特定专题的代表。事实上,我们尝试缩短参考文献清单,以便于正文的顺畅阅读,因而参考文献主要用于指明实验结果的出处。尽管如此,我们在每个章节的扩展阅读部分加了一些参考文献,以便那些有兴趣从不同角度来切入这些专题的读者。

我们深深受益于与同事和学生的讨论,他们的正面评论有助于正文成型。在很多问题上,通过与同事们的讨论,我们得到了很多建议,也很受启发。在此,我们感谢所有提供帮助以及同意我们展示其出版物中图片的人。

最后,作者感激世界科技出版社为本书的迅速面世及专业出版所付出的宝贵努力。

Albert Furrer, Joël Mesot, Thierry Strässle
Villigen, 2009 年 3 月

关于作者

Albert Furrer, 毕业于(瑞士)苏黎世联邦理工学院, 获得实验物理硕士学位和博士学位。曾在丹麦瑞索国家实验室(Risø National Laboratory)从事博士后研究, 并在美国橡树岭国家实验室做过研究科学家(research scientist)。1984年, 他成为中子散射实验室的主管, 该实验室为苏黎世联邦理工学院与保罗谢尔研究所(Paul Scherrer Institute)联合建立。其主要研究领域为磁性和超导电性的中子散射研究, 发表了400余篇学术论文, 并编著了7本书。鉴于其在磁性分子化合物和自旋二聚体的中子散射研究方面的开创性工作, 他与 H. U. Güdel 一起获得了2005年欧洲中子散射协会的 Walter Häg 奖。目前为苏黎世联邦理工学院的荣誉教授, 同时也是 SwissNeutronics 公司的常务董事之一。

Joël Mesot, 毕业于(瑞士)苏黎世联邦理工学院, 获得实验物理硕士学位和博士学位。1992—1997年, 其在保罗谢尔研究所的散裂中子源 SINQ 搭建了一台飞行时间谱仪 FOCUS。随后的两年, 他在美国阿贡国家实验室(Argonne National Laboratory)开展角分辨光电子能谱实验。2004—2008年, 他成为中子散射实验室的主管, 该实验室为苏黎世联邦理工学院与保罗谢尔研究所联合建立。自2008年开始, 他担任保罗谢尔研究所的所长。其研究兴趣是金属氧化物的奇异电子行为以及磁性质。2002年, 他获得了苏黎世联邦理工学院的 Latsis 奖。2003—2008年期间担任 *Neutron News* 的主编。

Thierry Strässle, 毕业于(瑞士)苏黎世联邦理工学院, 获得实验物理硕士学位和博士学位。在法国巴黎第六大学(又称皮埃尔与玛丽·居里大学, Université Pierre & Marie Curie)从事博士后工作期间, 他在高压中子散射领域积累了丰富的专业知识。2005年, 他加入保罗谢尔研究所的中子散射实验室, 并负责瑞士散裂中子源的飞行时间谱仪 FOCUS。其研究领域包括多铁性材料、非传统超导体, 磁团簇以及分子固体的高压中子散射研究。

目 录

第1章 绪论	1
1.1 为何用中子散射?	1
1.2 中子的基本性质	3
第2章 中子散射的基本原理	5
2.1 中子散射实验的目的	5
2.2 中子散射截面	6
2.3 关联函数	8
2.4 相干散射和非相干散射	9
2.5 细致平衡原理	11
2.6 磁散射	13
2.7 极化中子	15
2.8 动力学中子散射	16
2.9 扩展阅读	18
第3章 仪器	20
3.1 中子源	20
3.1.1 中子源的历史演变	20
3.1.2 中子源的实际需求	21
3.1.3 裂变源	21
3.1.4 散裂源	22
3.1.5 中子的慢化	22
3.2 仪器部件	23
3.2.1 束流管道与静态准直器	23
3.2.2 中子导管	24
3.2.3 飞行时间单色器	26
3.2.4 单色器(分析器)晶体	27
3.2.5 中子束流过滤器	29
3.2.6 自旋极化器(自旋分析器)	29
3.2.7 引导场和自旋翻转器	30

3.2.8	探测器	31
3.3	中子散射谱仪	32
3.3.1	绪论	32
3.3.2	粉末衍射谱仪	32
3.3.3	单晶衍射谱仪	33
3.3.4	小角散射谱仪	35
3.3.5	反射谱仪	35
3.3.6	飞行时间谱仪	37
3.3.7	三轴谱仪	38
3.3.8	背散射谱仪	39
3.3.9	自旋回波谱仪	40
3.4	样品环境	41
3.4.1	温度	41
3.4.2	磁场	43
3.4.3	压力	43
3.5	扩展阅读	46
第4章	结构测定	48
4.1	截面	48
4.2	结构因子的实例	50
4.3	多晶材料	51
4.4	单晶	53
4.4.1	旋转晶体法	53
4.4.2	劳厄法	54
4.5	消光和吸收	54
4.6	残余应力的表征	56
4.7	扩展阅读	57
4.8	习题	58
4.9	答案	60
第5章	晶格动力学	65
5.1	单声子散射截面	65
5.2	声子色散关系和声子极化矢量	68
5.2.1	单原子线性链	68
5.2.2	一维双原子线性链	70
5.2.3	实验	71

5.3	非相干散射:声子态密度	73
5.4	多声子过程:相干散射	75
5.5	扩展阅读	76
5.6	习题	76
5.7	答案	78
第6章	液体及非晶材料	81
6.1	绪论	81
6.2	静态结构因子	82
6.3	扩散	87
6.4	扩展阅读	92
6.5	习题	92
6.6	答案	93
第7章	磁结构	96
7.1	总截面	96
7.2	顺磁体	96
7.3	铁磁体	96
7.4	反铁磁体	97
7.5	螺旋自旋结构(螺旋磁结构)	99
7.6	磁有序波矢	101
7.7	零场磁化强度	102
7.8	自旋密度	102
7.9	扩展阅读	103
7.10	习题	104
7.11	答案	106
第8章	磁激发	108
8.1	磁团簇激发	108
8.1.1	二聚体	108
8.1.2	三聚体	110
8.1.3	四聚体	112
8.1.4	N 聚体	113
8.2	自旋波	115
8.2.1	铁磁体	115
8.2.2	反铁磁体	117
8.2.3	随机相近似	119
8.3	孤子	121

8.4	扩展阅读	123
8.5	习题	124
8.6	答案	126
第9章	晶体场跃迁	129
9.1	晶体场的基本概念	129
9.2	f 电子体系中的晶体场相互作用	131
9.3	中子截面	134
9.4	晶体场劈裂离子的相互作用	136
9.5	多重态之间的晶体场跃迁	138
9.6	热力学磁性质的计算	138
9.7	扩展阅读	139
9.8	习题	140
9.9	答案	141
第10章	相变	144
10.1	绪论	144
10.2	结构相变	145
10.3	冰的相变	147
10.4	磁相变	151
10.5	量子相变	154
10.6	扩展阅读	156
第11章	超导电性	158
11.1	绪论	158
11.2	磁通线晶格	160
11.3	声子态密度	162
11.4	声子能量和线宽	163
11.5	晶体场跃迁的弛豫效应	165
11.6	高温超导体中的自旋涨落	166
11.7	扩展阅读	169
第12章	超流态	170
12.1	绪论	170
12.2	液体 ⁴ He	170
12.2.1	相图	170
12.2.2	元激发	171
12.2.3	凝聚分数	173
12.2.4	静态结构因子	173

12.3	液体 ^3He	175
12.3.1	相图	175
12.3.2	元激发	175
12.4	扩展阅读	177
第13章	固体中的缺陷	178
13.1	绪论	178
13.2	点缺陷的短程有序	179
13.3	宏观缺陷	181
13.4	三角测量法	183
13.5	共振模式和局域模式	184
13.6	扩展阅读	186
第14章	表面与界面	188
14.1	绪论	188
14.2	镜反射	190
14.3	非镜反射	194
14.4	掠入射散射	195
14.5	扩展阅读	196
第15章	氢动力学	198
15.1	绪论	198
15.2	氢键动力学	198
15.3	氢隧穿效应	203
15.4	扩展阅读	206
15.5	习题	207
15.6	答案	208
附录A	狄拉克 δ 函数与晶格求和	210
附录B	中子散射长度和截面	212
附录C	泡利自旋算符	221
附录D	磁中子散射截面	222
附录E	晶格与倒易晶格	225
附录F	$3-j$ 和 $6-j$ 符号	227
附录G	冲量近似	229
符号列表		231
参考文献		236

第 1 章 绪 论

1.1 为何用中子散射?

为了认识世界上自然存在的以及利用现代技术加工而成的材料,需要在原子尺度上对它们的性质进行详细的研究。这些信息是物理、化学、生物及材料科学等所有研究的基础。在各种实验方法中,中子和 X 射线(光子)散射已成为备选的关键技术。这两种技术是高度互补的。慢中子最重要、最独特的性质是其他任何实验技术都难以匹敌的,可以归纳如下:

(1) 中子与原子核相互作用,而光子与电子相互作用。因此,中子对轻原子(如氢、氧)的响应比 X 射线强得多,中子能够轻易地区分原子数相近的原子。此外,中子很容易区分同位素,因此可以通过将大分子(或生物物质)的特定部分进行氘代,以便关注其原子排列的具体特征。图 1.1 比较了若干原子及其同位素的 X 射线和中子散射长度。

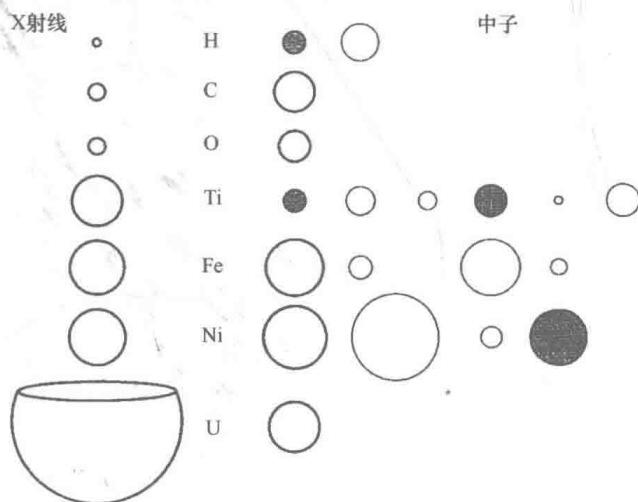


图 1.1 若干元素及其同位素的 X 射线和中子散射长度。对于中子,只考虑相干散射截面。粗线圈和细线圈分别表示元素的自然丰度及其同位素。阴影表示同位素有显著的非相干散射

(2) 与硬 X 射线同波长的中子,其能量要低很多,并与物质中元激发的能量相当。因此,中子不仅可以测定静态平均化学结构,还可以研究原子排列的动

力学性质,其与材料的物理性质直接相关。

(3) 由于中子呈电中性,它与物质的相互作用非常弱,因此:

① 中子对样品性质的扰动非常小,可被视为平衡态附近的小涨落,因而线性响应理论是一个非常好的近似,用于从实验数据中提取散射律。该条件在 X 射线实验中并不总成立。

② 中子具有很深的穿透深度,可以研究材料的块体性质。

③ 中子的穿透力强,这一特性有益于极端条件下的材料研究,如极低温和极高温、高压、强磁场和强电场,或者某些环境的耦合。在这些情况下,所研究的样品总是被各种屏蔽所包围,极大地阻碍了 X 射线的应用。

④ 由于中子与样品的相互作用较弱,因此对所研究的物体(如活的生物体)几乎没有辐射损伤。

(4) 中子有磁矩,因此在测定物质的静态及动力学磁性质(磁有序现象、磁激发、自旋涨落)时,是一种极好的探针。

图 1.2 归纳了凝聚态物质研究领域内中子散射技术所覆盖的理想波矢 - 能量范围(Q, ω)。

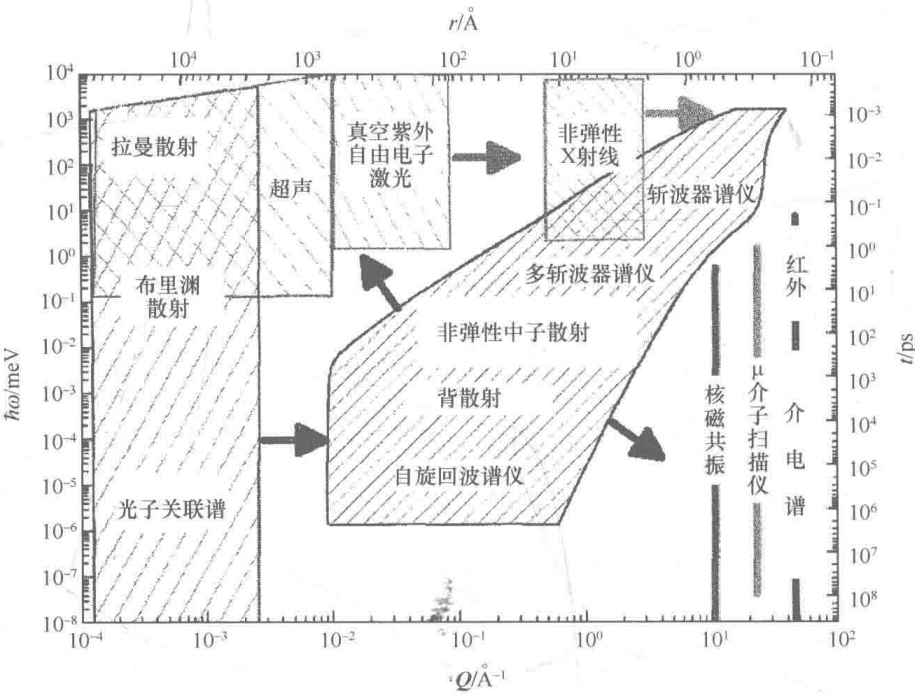


图 1.2 在凝聚态物质的研究中,中子及其他探测技术在实空间和倒易空间中的动力学范围(r, t), (Q, ω)。变量 Q 和 ω 分别由式(2.1)和式(2.2)定义

(参考 *The ESS Project*, Vol. II, ed. by D. Richter
(FZ Jülich, 2002), p. 5 - 4)

1.2 中子的基本性质

自由中子的能量跨越好几个量级。对于中子散射,我们只对慢中子感兴趣。表 1.1 对不同能量段的中子进行了分类。速度为 v 的慢中子,其动能为

$$E = \frac{mv^2}{2} \quad (1.1)$$

式中: $m = 1.675 \times 10^{-27} \text{ kg}$ 为中子质量。

中子的德布罗意波长 λ 定义为

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (1.2)$$

式中: $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 为普朗克常量。

中子的波矢 k 为

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.3)$$

其方向为速度 v 的方向。

由式(1.1)~式(1.3)可以得到中子的动量 p 和能量 E :

$$p = \hbar k \quad (1.4)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.5)$$

式中: $\hbar = h/(2\pi)$ 。

通常,中子的能量 E 与温度 T 的关系为

$$E = k_B T \quad (1.6)$$

式中: $k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ 是玻耳兹曼常数。

联合式(1.1)~式(1.6)得

$$E = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{mv^2}{2} = k_B T \quad (1.7)$$

将基本常量代入上面的方程可以得到中子的能量与波长、波矢、速度及温度之间的关系,即

$$E = 81.81 \cdot \frac{1}{\lambda^2} = 2.072 \cdot k^2 = 5.227 \cdot v^2 = 0.08617 \cdot T \quad (1.8)$$

式中: E 的单位是 meV; λ 的单位是 $\text{\AA}$ ^①; k 的单位是 $\text{\AA}^{-1}$; v 的单位是 km/s; T 的

① $1\text{\AA} = 0.1\text{ nm}$ 。

单位是 K。在中子散射中,能量单位一般采用 meV。另一种常用的能量单位是太赫 (THz),其他的光谱学技术常用波数 cm^{-1} 为单位。因此,有以下换算关系:

$$1\text{meV} = 0.242\text{THz} = 8.07\text{cm}^{-1} = 11.6\text{K} = 17.3\text{T} \tag{1.9}$$

出于完备性的考虑,这里包含了与温度 (K) 和磁场 (特斯拉) 单位的换算。

表 1.1 中子能量段的近似界限 (以名字分类)

能量范围	分类		能量范围
	核物理	中子散射	中子散射
小于 1keV	慢中子	超冷中子	小于 0.1meV
		极冷中子	0.1 ~ 0.5meV
		冷中子	0.5 ~ 5meV
		热中子	5 ~ 100meV
		超热或烫中子	0.1 ~ 1eV
		共振中子	1 ~ 100eV
1keV ~ 0.5MeV	中能中子		
0.5 ~ 10MeV	快中子		
10 ~ 50MeV	极快中子		
0.05 ~ 10GeV	高能或超快中子		
大于 10GeV	相对论性中子		

第2章 中子散射的基本原理

2.1 中子散射实验的目的

中子散射实验的主要目的是测定波矢为 k 的入射中子被样品散射后出射波矢为 k' 的概率。散射中子的强度是动量转移的函数：

$$\hbar Q = \hbar(k - k') \quad (2.1)$$

式中： Q 为散射矢量，相应的能量转移为

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k'^2) \quad (2.2)$$

式(2.1)和式(2.2)分别描述了中子散射过程中动量守恒和能量守恒。图 2.1 是动量守恒的示意图。当 $k = k'$ 时，由式(2.2)可知 $\hbar\omega = 0$ ，也即是弹性散射。图 2.1(a) 是满足布拉格定律(相干弹性散射式(4.8))的情况，即

$$Q = k - k' = \tau \quad (2.3)$$

如果 Q 不等于倒易晶格矢量 τ ，则为非弹性中子散射。对于图 2.1(b) 所示的非弹性散射，散射矢量可以分解为 $Q = \tau + q$ ，其中 q 为某个特定元激发的波矢。中

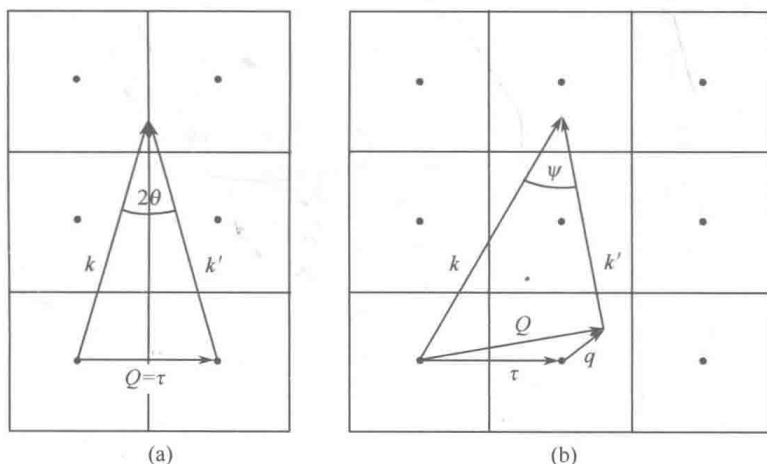


图 2.1 式(2.1)在倒易空间的示意图

(a) 弹性中子散射；(b) 非弹性中子散射。

$2\theta, \psi$ —布拉格散射角和一般散射角；实线给出了布里渊区的边界；点代表布里渊区的中心。

子散射是可以测量倒易空间中任一预设点的色散关系 $\hbar\omega(\mathbf{q})$ 的最精确的实验技术。

2.2 中子散射截面

中子散射截面定义为每秒钟被散射到一个(小的)立体角 $d\Omega$ 内并且能量转移在 $\hbar\omega$ 到 $\hbar(\omega + d\omega)$ 范围内的中子数目,再除以入射中子注量。散射截面的理论表达式通常以费米黄金定律为出发点,即

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\lambda',\sigma'} \sum_{\lambda,\sigma} p_\lambda p_{\sigma'} |\langle \mathbf{k}', \boldsymbol{\sigma}', \lambda' | \hat{U} | \mathbf{k}, \boldsymbol{\sigma}, \lambda \rangle|^2 \times \delta(\hbar\omega + E_\lambda - E_{\lambda'}) \quad (2.4)$$

式中: $|\lambda\rangle$ 为散射体的初态,其能量为 E_λ ; p_λ 为热布居因子,终态为 $|\lambda'\rangle$; $\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}'$ 分别为入射中子和散射中子的自旋态; p_σ 为极化率; δ 函数描述了能量守恒定律(关于 δ 函数的定义及相关性质,见附录 A); $\hat{U}$ 为中子与样品的相互作用算符,它与特定的散射过程有关。例如,中子被位于固定位置 $\mathbf{R}_j$ 的原子核散射, $\hat{U}$ 可以近似为费米赝势

$$\hat{U}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_j b_j \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{R}}_j) \quad (2.5)$$

式中: b_j 为散射长度, b_j 的量级为 10^{-12} cm, 即, 对于核散射来说, 截面式(2.4)约为 1 barn^①。原则上, 散射长度是一个复数, 实部描述与能量无关的散射, 虚部表示与能量有关的吸收。如果复合核(=核+中子)的能量与一个原子核激发态的能量相近, 那么虚部会很大。然而, 对于热中子来说只有很少数的原子核满足这样的性质, 最典型的例子有 ^{113}Cd 和 ^{157}Gd 。接下来只考虑附录 B 所列出的若干原子核的散射长度的实部。

用平面波来描述入射中子和出射中子(此处忽略了自旋态 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}'$, 在 2.6 节和 2.7 节将会考虑到):

$$|\mathbf{k}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad |\mathbf{k}'\rangle = e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \quad (2.6)$$

将式(2.5)和式(2.6)代入式(2.4)的矩阵元, 得

① 1 barn = 10^{-24} cm²。