

Le principali proprietà dei neutroni



Neutrons are **NEUTRAL** particles. They

- are highly penetrating,
- can be used as nondestructive probes, and
- can be used to study samples in severe environments.

Interazione nucleare a corto raggio ($\sim 10^{-13}$ cm)



Neutrons have a **MAGNETIC** moment. They can be used to

- study microscopic magnetic structure,
- study magnetic fluctuations, and
- develop magnetic materials.



Neutrons have **SPIN**. They can be

- formed into polarized neutron beams,
- used to study nuclear (atomic) orientation,
- used for coherent and incoherent scattering.

$$V_{Fermi}^{pseudo} \propto b \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

$$b \sim 5 \times 10^{-13} \text{ cm} = 5 \times 10^{-5} \text{ \AA}$$

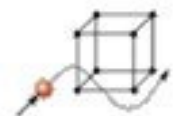
$$\ll \lambda \text{ neutroni termici}$$



The **ENERGIES** of thermal neutrons are similar to the energies of elementary excitations in solids.

Neutroni termici hanno $E \sim 25$ meV

- molecular vibrations,
- lattice modes, and
- dynamics of atomic motion.



The **WAVELENGTHS** of neutrons are similar to atomic spacings. They can determine

- structural sensitivity,
- structural information from 10^{-13} to 10^{-4} cm, and
- crystal structures and atomic spacings.

Neutroni termici hanno $\lambda \sim 2$ \AA



Neutrons "see" **NUCLEI**. They

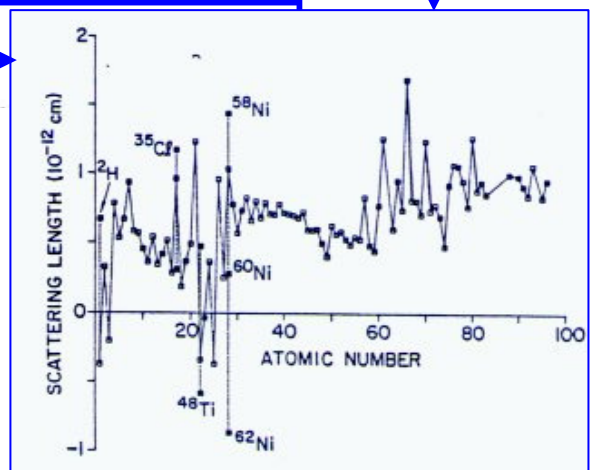
- are sensitive to light atoms,
- can exploit isotopic substitution,

$$b = b(Z, \text{isotopo})$$

$$b = b(\sigma, \mathbf{I})$$

$$b = b_{coh} + \frac{b_{inc}}{\sqrt{I(I+1)}} \sigma \cdot \mathbf{I}$$

b



Anticipando qualcosa sullo scattering

coerente e incoerente

$$G(\mathbf{r}, t) = G_d(\mathbf{r}, t) + G_s(\mathbf{r}, t)$$

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} [G(\mathbf{r}, t) - \rho]$$

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = S_d(\mathbf{Q}, \omega) + S_s(\mathbf{Q}, \omega) \left[-\rho (2\pi)^3 \delta(\mathbf{Q}) \delta(\omega) \right]$$

Lo scattering incoerente sonda esclusivamente la parte *self* di $S(\mathbf{Q}, \omega)$

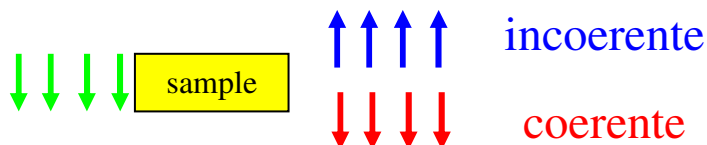
Quello coerente è invece proporzionale alla $S(\mathbf{Q}, \omega)$ complessiva. Ciò è generalmente un problema, a meno che una delle due componenti nello scattering (*coh* o *incoh*) non sia dominante.

Esempi:

Campione monoisotopico ma con $I = 0$ (come ^{36}Ar , ^{86}Kr ...) è TOTALMENTE coerente

L'idrogeno (ma non il deuterio!) ha $b_{coh} \ll b_{inc}$ ed è quindi PREVALENTEMENTE incoerente

Lo scattering incoerente è una peculiarità dei neutroni e in certi casi rappresenta un *vantaggio* perché permette di misurare $S_s(\mathbf{Q}, \omega)$. Ci sono poi metodi che consentono di accedere separatamente ai due contributi di $S(\mathbf{Q}, \omega)$: *sostituzione isotopica*; *neutroni polarizzati*



Vantaggi/svantaggi dei neutroni

Advantages

- 1) $\lambda_n \sim$ Interatomic Spacing
- 2) Penetrates Bulk Matter (neutral particle)
- 3) Strong Contrasts Possible (e.g. H/D)
- 4) $E_n \sim$ Elementary Excitations (phonons, magnons, etc.)
- 5) Scattered Strongly by Magnetic Moments

6) Self structure-related properties are accessible (kinetic properties: momentum distribution, velocity correlations,...)

Disadvantages

- 1) Low Brilliance of Neutron Sources-~~Low Resolution~~ or Intensities; Large Samples; Low Coherence; Surfaces Difficult
- 2) Some Elements Strongly Absorb (e.g. Cd, Gd, B)
- 3) Kinematic Restriction on Q for Large E Transfers
- 4) Restricted to Excitations ≤ 100 meV

Il confronto con altre sonde (I)

Grandezza	Neutroni				X	Luce (vis.)
	Freddi	Termici	Caldi	Epitermici		
E (meV)	1	25	150	1000	12400000	2480
T (K)	12	290	1740	12000		
λ (Å)	9.0	1.8	0.7	0.29	1	5000
k (Å ⁻¹)	0.7	3.5	9	22	6.3	0.00126
v (m s ⁻¹)	440	2200	5400	14000		

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m}$$

$$\lambda = 2\pi/k = h/\sqrt{2mE}$$

$$E = \frac{h c}{\lambda} = \hbar c k$$

$$\lambda = 2\pi/k = \frac{h c}{E}$$

Il confronto con altre sonde (II)

Synchrotron X-rays

Advantages

- 1) λ_n - Interatomic Spacing (as with neutrons)
- 2) High Brilliance of X-ray Sources - ~~High Resolution~~; Small Samples; High Degree of Coherence
- 3) No Kinematic Restrictions (E,Q uncoupled)
- 4) No Restriction on Energy Transfer that Can Be Studied

Disadvantages

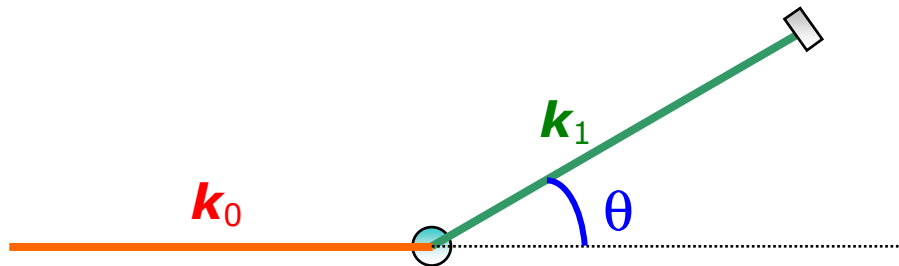
- 0) **Intrinsic unsuitability to studies on excitations (few tens of meV) in matter, overcome by new X-HRS**
- 1) Strong Absorption for Lower Energy Photons
- 2) Little Contrast for Hydrocarbons or Similar Elements
- 3) Weak Scattering from Light Elements
- 4) Radiation Damage to Samples
- 5) **NULL possibility of measuring *Self* structure-related properties**

X-rays **High Resolution**
Spectrometers

$$\Delta E \sim 3 \div 5 \text{ meV}$$

$$\Delta E / E \sim 10^{-6} - 10^{-7}$$

La tipica geometria dello scattering



La sonda scambia, in generale, sia *energia* che *impulso* con il campione.

Conservazione dell'energia

$$E = E_0 - E_1 =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} (k_0^2 - k_1^2)$$

energia *scambiata*

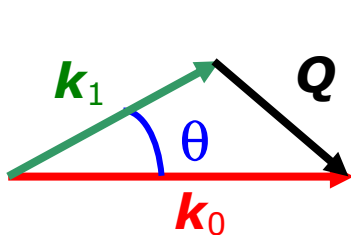
Conservazione dell'impulso

$$Q = k_0 - k_1$$

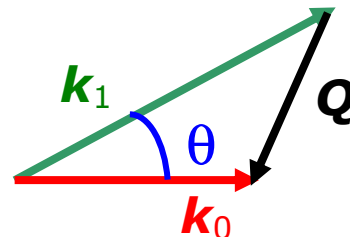
vettore d'onda *scambiato*

Scattering anelastico e elastico

Un evento di scattering caratterizzato da scambio di energia ($E \neq 0$) e impulso è detto *ANELASTICO*. Ciò significa che il vettore d'onda k del neutrone cambia sia in modulo che in direzione, a seguito del processo di diffusione.

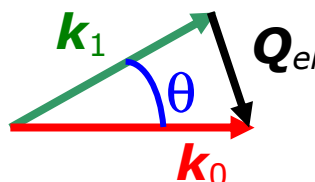


$k_0 > k_1 \Rightarrow E_0 > E_1 \Rightarrow E > 0$
il neutrone CEDE energia al campione



$k_0 < k_1 \Rightarrow E_0 < E_1 \Rightarrow E < 0$
il neutrone ACQUISTA energia dal campione

Nel caso particolare in cui k cambia solo in direzione ma non in modulo (cioè $k_0 = k_1$), l'energia scambiata è zero ($E = 0$) e l'evento è detto *ELASTICO*.



$$Q_{el} = 2 k_0 \sin \frac{\theta}{2}$$

Regione cinematica accessibile

$$Q = k_0 - k_1 \Rightarrow Q^2 = k_0^2 + k_1^2 - 2 k_1 k_0 \cos\theta \Rightarrow$$

$$\frac{Q}{k_0} = \sqrt{1 + \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0}\right) - 2 \cos\theta \sqrt{1 - \frac{\omega}{\omega_0}}}$$

dove $\omega = \frac{E}{\hbar}$, $\omega_0 = \frac{E_0}{\hbar}$ e, dalla

conservazione dell'energia, $k_1^2 = k_0^2 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0}\right)$.

Diversamente, per un'onda elettromagnetica (fotoni: luce, raggi X $\Rightarrow E = \hbar c k$, $\omega = c k$):

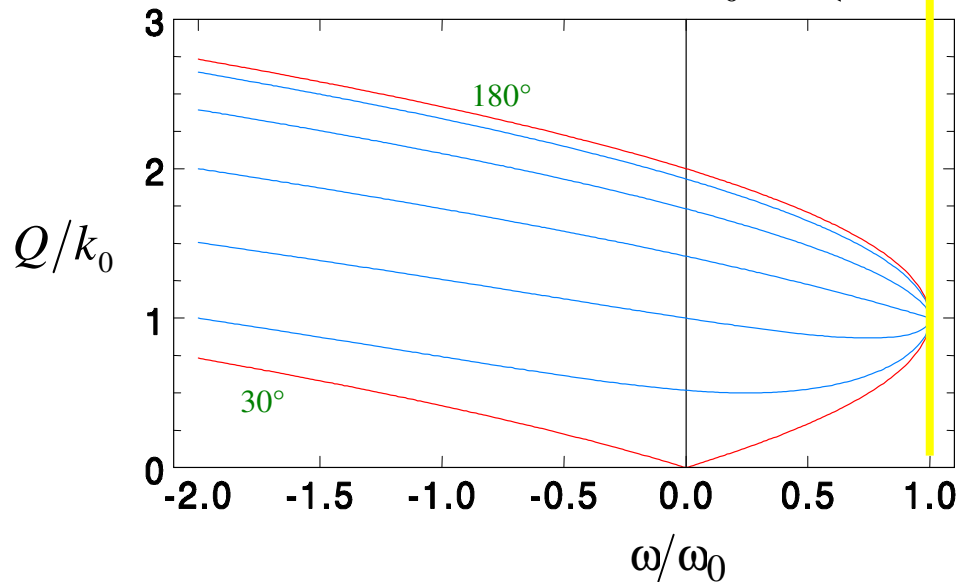
$$k_1 = k_0 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0}\right)$$

$$\frac{Q}{k_0} = \sqrt{1 + \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0}\right)^2 - 2 \cos\theta \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0}\right)}$$

Come prima, $\omega < \omega_0$... ma solo per una limitazione *fisica*.

Limitazione matematica e fisica

$\omega < \omega_0$!!



A ciascun angolo di scattering θ è associato un set di valori di Q e ω determinato dalla relazione scritta sopra.

Definizione fenomenologica delle sezioni d'urto differenziali

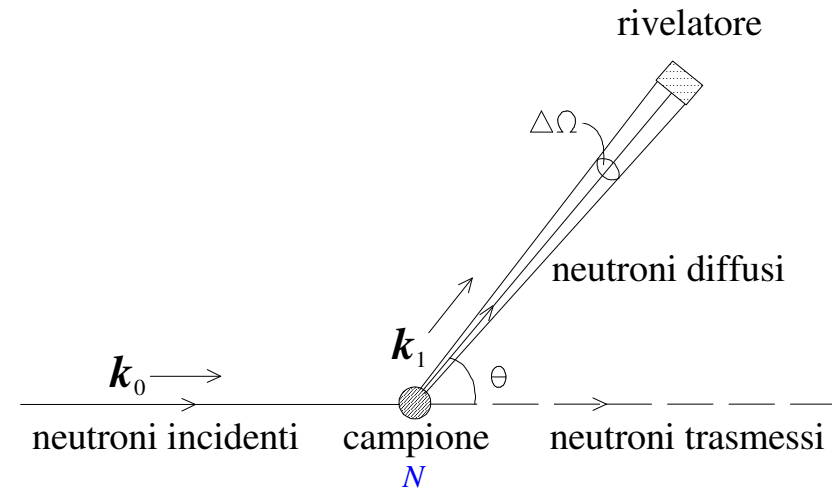
In generale, in un esperimento di scattering anelastico in cui un fascio di neutroni caratterizzato da un flusso Φ uniforme incide su un campione di N atomi identici, l'*intensità* (numero di conteggi nell'unità di tempo) misurata nell'intervallo di frequenza $\Delta\omega$ da un rivelatore di efficienza ε che sottende l'angolo solido $\Delta\Omega$ intorno alla direzione $\Omega(\theta, \varphi)$ è, di fatto, proporzionale alle quantità menzionate.

La costante di proporzionalità è la *sezione d'urto differenziale doppia* ed è una proprietà del campione in studio:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega}(\theta, \omega) = \frac{I(\theta, \omega)}{\Phi N \varepsilon \Delta\Omega \Delta\omega}$$

Il suo integrale su tutti i possibili valori di ω , ad un k_0 fissato e per un angolo θ fissato, è la *sezione d'urto differenziale*:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \int_{-\infty}^{\omega_0} d\omega \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \approx \frac{I(\theta)}{\Phi N \varepsilon \Delta\Omega}$$



La sezione d'urto di scattering *totale* è

$$\sigma_s = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \iint \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} d\Omega d\omega$$

La sezione d'urto *totale* è

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_a$$

scattering

assorbimento

Connessione fra sezioni d'urto differenziali e proprietà strutturali (I)

La sezione d'urto differenziale doppia misura la probabilità (per unità di tempo) di un qualsiasi processo di scattering in cui il vettore d'onda neutronico subisce la transizione $\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_1$, indipendentemente da Φ , dallo stato del sistema atomico e dallo stato di spin del neutrone, rispettando la conservazione dell'energia.

Dalla teoria delle perturbazioni al primo ordine, si trova:

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} \right]_{\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_1} = \frac{1}{N} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{k_1}{k_0} \left(\sum_{\lambda_0 s_0} p_{\lambda_0} p_{s_0} \sum_{\lambda_1 s_1} \right) \left| \langle \mathbf{k}_1 s_1 \lambda_1 | V | \mathbf{k}_0 s_0 \lambda_0 \rangle \right|^2 \times \delta [E + E_{\lambda_0} - E_{\lambda_1}]$$

Potenziale di interazione neutrone-nucleo
(a corto range $\sim 10^{-13}$ cm)

Inserendo allora lo pseudopotenziale di Fermi per un sistema di N atomi $[V_{Fermi}^{pseudo} \propto \sum_{\alpha} b_{\alpha} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha})]$,

usando la rappresentazione integrale della δ e facendo il cambiamento di variabile $E = \hbar\omega$, si

arriva a scrivere:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{1}{2\pi N} \frac{k_1}{k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{\alpha, \beta} \langle b_{\alpha}^* b_{\beta} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{\beta}(t)} \rangle$$

$$\sum_{\lambda_0, s_0} p_{\lambda_0} p_{s_0} \langle \lambda_0 s_0 | b_{\alpha}^* b_{\beta} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{\beta}(t)} | \lambda_0 s_0 \rangle$$

Connessione fra sezioni d'urto differenziali e proprietà strutturali (II)

Avevamo trovato dalla teoria delle funzioni di correlazione

$$S(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} F(\mathbf{Q}, t) \approx \frac{1}{2\pi} \int dt e^{-i\omega t} \frac{1}{N} \langle \rho_{-\mathbf{Q}}(0) \rho_{\mathbf{Q}}(t) \rangle = \frac{1}{2\pi N} \int dt e^{-i\omega t} \sum_{\alpha, \beta} \langle e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(t)} \rangle$$

Adesso, dalla teoria dello scattering di neutroni, abbiamo:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{1}{2\pi N} \frac{k_1}{k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{\alpha, \beta} \langle b_{\alpha}^* b_{\beta} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(t)} \rangle$$

Si somigliano molto!!

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k_1}{k_0} \tilde{S}(\mathbf{Q}, \omega)$$

$$\tilde{S}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{\alpha, \beta} \langle b_{\alpha}^* b_{\beta} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(t)} \rangle$$

Se la sonda che sto utilizzando (neutroni) non apparisse esplicitamente attraverso le lunghezze di scattering, questo sarebbe il fattore di struttura dinamico

Connessione fra sezioni d'urto differenziali e proprietà strutturali (III)

Avevamo trovato dalla teoria delle funzioni di correlazione nel caso statico:

$$S(\mathbf{Q}) \approx \frac{1}{N} \langle \rho_{-\mathbf{Q}} \rho_{\mathbf{Q}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\alpha, \beta} \langle e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(0)} \rangle = \int_{\mathbf{Q} \text{ costante}} d\omega S(\mathbf{Q}, \omega)$$

Adesso, dalla teoria dello scattering di neutroni, abbiamo:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_{\substack{-\infty \\ \theta = \text{costante}}}^{\omega_0} d\omega \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \int_{\substack{-\infty \\ \theta = \text{costante}}}^{\omega_0} d\omega \frac{k_1}{k_0} \tilde{S}(\mathbf{Q}, \omega) \neq \int_{\substack{-\infty \\ \mathbf{Q} = \text{costante}}}^{+\infty} d\omega \tilde{S}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha, \beta} \langle b_{\alpha}^* b_{\beta} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(0)} \rangle$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \neq \tilde{S}(\mathbf{Q})$$

$$\tilde{S}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha, \beta} \langle b_{\alpha}^* b_{\beta} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(0)} \rangle$$

Se la sonda che sto utilizzando (neutroni) non apparisse esplicitamente attraverso le lunghezze di scattering, questo sarebbe il fattore di struttura statico

Al di là delle ulteriori difficoltà che si incontrano nel caso statico per ottenere la relazione fra sezioni d'urto misurate e quantità strutturali, sia nel caso statico che in quello dinamico si presenta il problema comune di trovare la relazione che intercorre fra \tilde{S} e S .

Si ricorda che le lunghezze di scattering b dipendono dall'orientazione relativa fra lo spin del nucleo e quello del neutrone, e dal particolare isotopo.

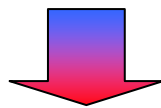
$$b = b_{coh} + \frac{b_{inc}}{\sqrt{I(I+1)}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{I}$$

Si assume:

- $\langle b_{\alpha}^* b_{\beta} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(0)} \rangle \approx \langle b_{\alpha}^* b_{\beta} \rangle \langle e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(0)} \rangle$
- che i possibili diversi valori delle lunghezze di scattering (a causa dello stato di spin e/o della specie isotopica) siano distribuiti in modo casuale fra i vari atomi

Si assume, di fatto, di avere a che fare con una distribuzione casuale di spin e isotopi (assenza di correlazione fra le lunghezze di scattering associate a siti diversi) e di utilizzare neutroni non polarizzati.

$$\langle b_{\alpha}^* b_{\beta} \rangle = \begin{cases} \alpha \neq \beta & \langle b_{\alpha}^* \rangle \langle b_{\beta} \rangle = \bar{b}^* \bar{b} = |\bar{b}|^2 = \left| b_{coh} + \frac{b_{inc}}{\sqrt{I(I+1)}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{I} \right|^2 = b_{coh}^2 \\ \alpha = \beta & \langle |b_{\alpha}|^2 \rangle = \overline{|b|^2} = \overline{\left| b_{coh} + \frac{b_{inc}}{\sqrt{I(I+1)}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{I} \right|^2} = b_{coh}^2 + b_{inc}^2 \end{cases}$$



$$\langle b_{\alpha}^* b_{\beta} \rangle = |\bar{b}|^2 + \delta_{\alpha\beta} \left(\overline{|b|^2} - |\bar{b}|^2 \right) = b_{coh}^2 + \delta_{\alpha\beta} b_{inc}^2$$

Parte uguale per tutti gli atomi. Hanno importanza, allora, solo le relazioni di fase fra le onde scatterate (posizioni degli atomi) e quindi la struttura. Per questo è detta *coerente*.

L'*incoerente* nasce dalle fluttuazioni della lunghezza di scattering attorno al valor medio. Tali fluttuazioni sono dovute sia alla distribuzione degli isotopi (*incoerenza isotopica*), sia alla orientazione degli spin nucleari rispetto allo spin del neutrone (*incoerenza di spin*), e sono distribuite casualmente. Non porta informazioni strutturali

Connessione fra sezioni d'urto differenziali e proprietà strutturali (IV)

$$\tilde{S}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \left[\sum_{\beta, \alpha \neq \beta} \langle b_{\alpha}^* b_{\beta} \rangle_{\alpha \neq \beta} \langle e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(t)} \rangle + \sum_{\alpha} \langle |b_{\alpha}|^2 \rangle \langle e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(t)} \rangle \right]$$

$$\tilde{S}(\mathbf{Q}, \omega) = b_{coh}^2 \underbrace{\frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{\alpha, \beta \neq \alpha} \langle e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\beta}(t)} \rangle}_{S_d(\mathbf{Q}, \omega)} + (b_{coh}^2 + b_{inc}^2) \underbrace{\frac{1}{2\pi N} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \sum_{\alpha} \langle e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(0)} e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}(t)} \rangle}_{S_s(\mathbf{Q}, \omega)}$$

Alternativamente, dato che $S(\mathbf{Q}, \omega) = S_d(\mathbf{Q}, \omega) + S_s(\mathbf{Q}, \omega)$, si ha:

$$\tilde{S}(\mathbf{Q}, \omega) = b_{coh}^2 S(\mathbf{Q}, \omega) + b_{inc}^2 S_s(\mathbf{Q}, \omega)$$

Entrambi i contributi, coerente e incoerente, possono portare informazioni di interesse.

Da cui anche:

$$\tilde{S}(\mathbf{Q}) = b_{coh}^2 S(\mathbf{Q}) + b_{inc}^2$$

L'unica componente di interesse è lo scattering coerente

Il problema del caso statico

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_{\substack{-\infty \\ \theta=\text{costante}}}^{\omega_0} d\omega \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \int_{\substack{-\infty \\ \theta=\text{costante}}}^{\omega_0} d\omega \frac{k_1}{k_0} \tilde{S}(Q, \omega) \neq \int_{\substack{-\infty \\ Q=\text{costante}}}^{+\infty} d\omega \tilde{S}(Q, \omega) \equiv \tilde{S}(Q) = b_{coh}^2 S(Q) + b_{inc}^2$$

$\frac{d\sigma}{d\Omega} \neq \tilde{S}(Q)$ perché dipende dalla *dinamica* del sistema, seppur attraverso un integrale.

Per ciascun angolo di scattering θ , eventi di scattering *con tutti i possibili valori dell'energia scambiata* contribuiscono al valore di $d\sigma / d\Omega \Rightarrow$ gli eventi *anelastici* influenzano la sezione d'urto differenziale misurata.

Se fosse $\omega \ll \omega_0$, si avrebbe

$$Q = k_0 \sqrt{1 + \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0}\right) - 2 \cos \theta \sqrt{1 - \frac{\omega}{\omega_0}}} \rightarrow 2k_0 \sin \frac{\theta}{2} = Q_{el} \quad \Rightarrow \quad \int_{\substack{-\infty \\ \theta \text{ costante}}}^{\omega_0} \sim \int_{\substack{-\infty \\ Q \text{ costante} = Q_{el}}}^{+\infty}$$

$$k_1^2 = k_0^2 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_0}\right) \rightarrow k_0^2 \quad \Rightarrow \quad k_1 = k_0$$

Da cui:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\omega \ll \omega_0} = \int_{\substack{-\infty \\ Q \text{ costante} = Q_{el}}}^{\omega_0} \frac{k_1}{k_0} \tilde{S}(Q, \omega) d\omega = \tilde{S}(Q)$$

Caso ideale in cui gli eventi di scattering sono tutti ELASTICI

Il problema del caso statico: correzione anelastica

Nel caso ideale in cui tutti gli eventi fossero, di fatto, *elastici* avremmo relazione diretta fra sezione d'urto misurata e fattore di struttura statico.

Ma lo scattering da liquidi è in generale *anelastico*. Si deve allora trovare un modo per estrarre dalla $d\sigma / d\Omega$ effettivamente misurata (e affetta dai processi anelastici) il comportamento limite (legato a $S(Q)$) che si avrebbe se lo scattering fosse elastico. Tale procedura è nota come correzione anelastica.

Si può individuare immediatamente una correzione anelastica *additiva* come quella quantità per cui la $d\sigma / d\Omega$ misurata differisce da $(d\sigma / d\Omega)_{\omega \ll \omega_0}$, cioè:

$$P = \left[\frac{d\sigma}{d\Omega} - \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\omega \ll \omega_0} \right] = \left[\frac{d\sigma}{d\Omega} - \tilde{S}(Q) \right] \longrightarrow \text{Viene calcolata tramite l'uso di modelli, ad esempio il gas perfetto}$$

di modo che:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \tilde{S}(Q) + P$$

$$\Rightarrow S(Q) = \frac{1}{b_{coh}^2} \left[\frac{d\sigma}{d\Omega}^{exp} - \underbrace{P}_{\text{calcolata}} - b_{inc}^2 \right]$$

$$P_{g.p.} = \left[\frac{d\sigma}{d\Omega} - \tilde{S}(Q) \right]_{g.p.} = \left[\int_{\theta=\cos \tan t e}^{\omega_0} d\omega \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} - \tilde{S}(Q) \right]_{g.p.} = \left[\int_{\theta=\cos \tan t e}^{\omega_0} \frac{k_1}{k_0} \tilde{S}(Q, \omega)_{g.p.} d\omega - \tilde{S}(Q)_{g.p.} \right]$$

$$\tilde{S}(Q, \omega)_{g.p.} = (b_{coh}^2 + b_{inc}^2) S_s(Q, \omega)_{g.p.} = (b_{coh}^2 + b_{inc}^2) \frac{1}{Q} \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi}} \exp \left[-\frac{M\beta}{2Q^2} \left(\omega - \frac{\hbar Q^2}{2M} \right)^2 \right]$$

$$\tilde{S}(Q)_{g.p.} = (b_{coh}^2 + b_{inc}^2) = \frac{\sigma_s}{4\pi}$$