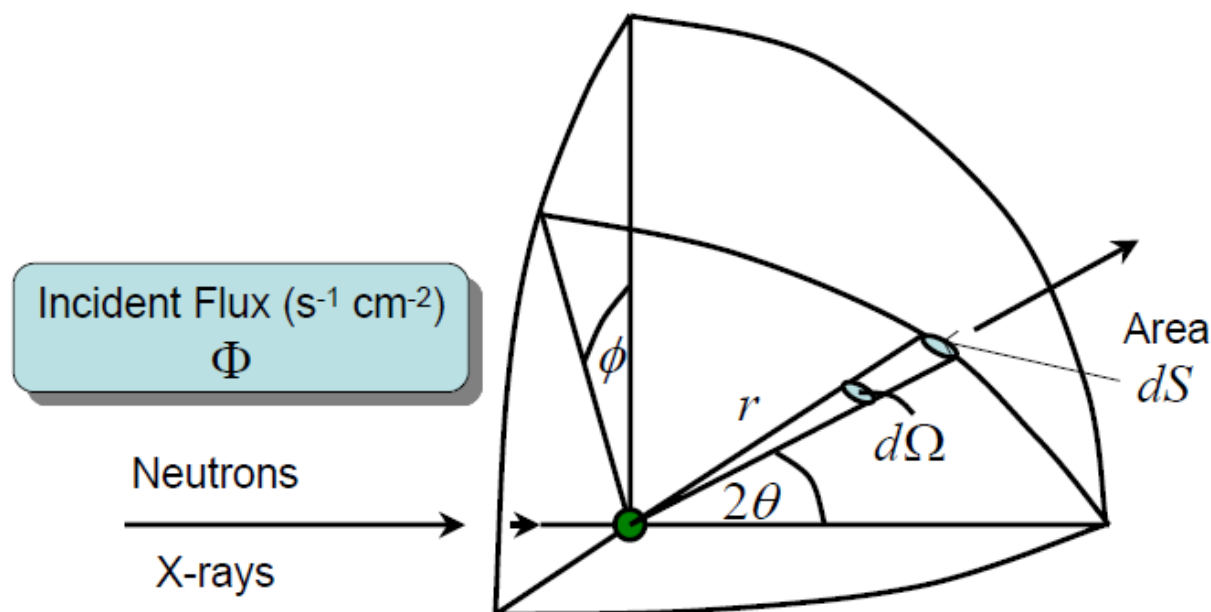


scattering coerente ed incoerente

SEZIONE D'URTO DI SCATTERING (NUCLEARE)

La sezione d'urto differenziale misura l'efficienza con cui un nucleo rimuove neutroni da un fascio (collimato) inviandoli in altre direzioni rispetto a quella di incidenza.



$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{neutroni scatterati / s in } d\Omega = dS / r^2}{\Phi d\Omega}$$

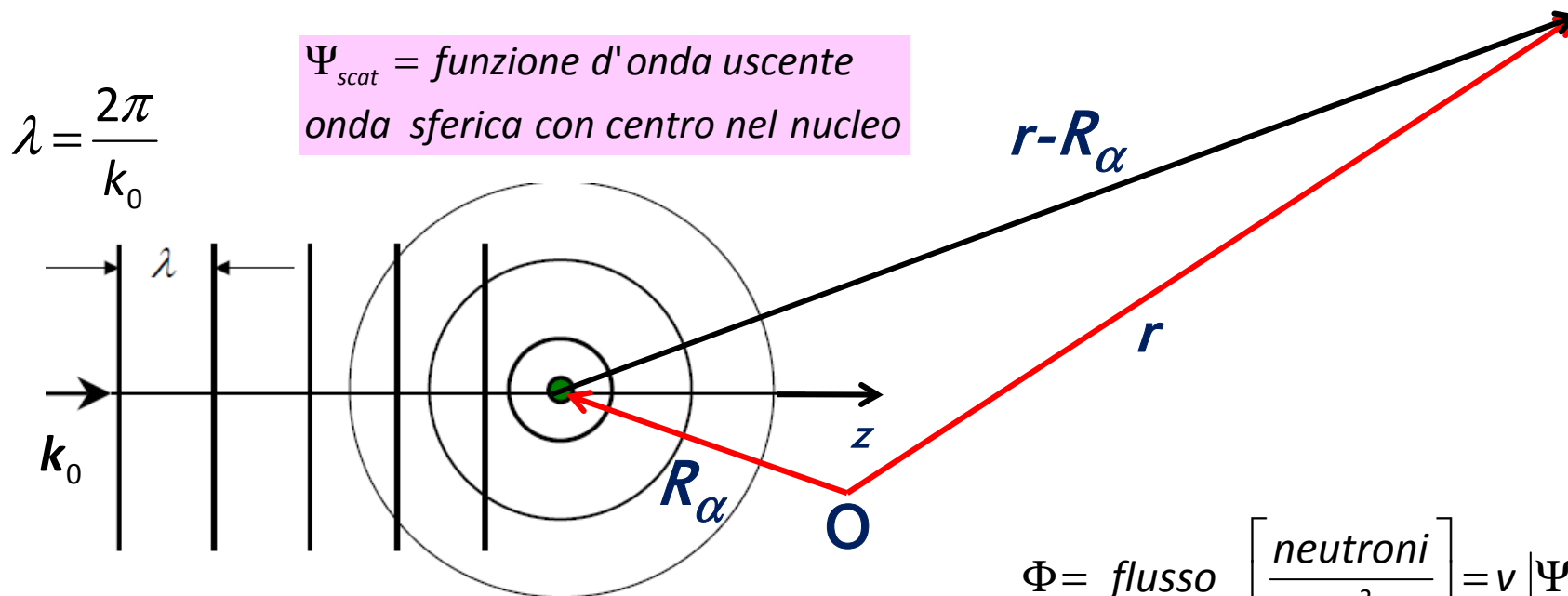
sezione d'urto differenziale
[unità barn/steradiante]

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

sezione d'urto totale
[unità barn]

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$$

SCATTERING NUCLEARE



Ψ_{scat} = funzione d'onda uscente
onda sferica con centro nel nucleo

$$\lambda = \frac{2\pi}{k_0}$$

Ψ_{inc} = funzione d'onda incidente = $e^{ik_0 \cdot R_\alpha}$
onda piana

$$\Phi = \text{flusso} \left[\frac{\text{neutroni}}{\text{cm}^2 \text{ s}} \right] = v |\Psi_{inc}|^2$$

$$\text{neutroni / s attraverso } dS = v dS |\Psi_{scat}|^2$$

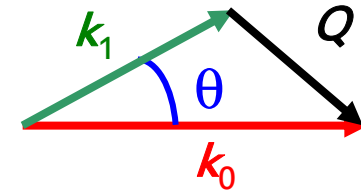
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{v dS |\Psi_{scat}|^2}{v |\Psi_{inc}|^2 d\Omega} = \frac{dS}{d\Omega} \left| e^{ik_1 \cdot r} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \frac{e^{i(k_0 - k_1) \cdot R_{\alpha}}}{|r - R_{\alpha}|} \right|^2$$

b lunghezza di scattering

$$Q = k_0 - k_1$$

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

Facciamo il modulo quadro....



$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dS}{d\Omega} \left(e^{-ik_1 \cdot r} \sum_{\beta} b_{\beta} \frac{e^{-iQ \cdot R_{\beta}}}{|r - R_{\beta}|} \right) \left(e^{ik_1 \cdot r} \sum_{\alpha} b_{\alpha} \frac{e^{iQ \cdot R_{\alpha}}}{|r - R_{\alpha}|} \right)$$

$$Q = k_0 - k_1$$

vettore d'onda scambiato

Se $r \gg R_{\alpha} \Rightarrow |r - R_{\alpha}| \cong |r - R_{\beta}| \cong r$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dS}{d\Omega} \left(\sum_{\beta} b_{\beta} \frac{e^{-iQ \cdot R_{\beta}}}{|r - R_{\beta}|} \right) \left(\sum_{\alpha} b_{\alpha} \frac{e^{iQ \cdot R_{\alpha}}}{|r - R_{\alpha}|} \right) \cong \frac{r^2 d\Omega}{d\Omega} \sum_{\alpha, \beta} b_{\alpha} b_{\beta} \frac{e^{iQ \cdot (R_{\alpha} - R_{\beta})}}{r^2}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \cong \sum_{\alpha, \beta} b_{\alpha} b_{\beta} e^{iQ \cdot (R_{\alpha} - R_{\beta})}$$

Porta informazioni sulle posizioni degli atomi...

SEMPRE?

Mediando su tutte le possibili configurazioni microscopiche:

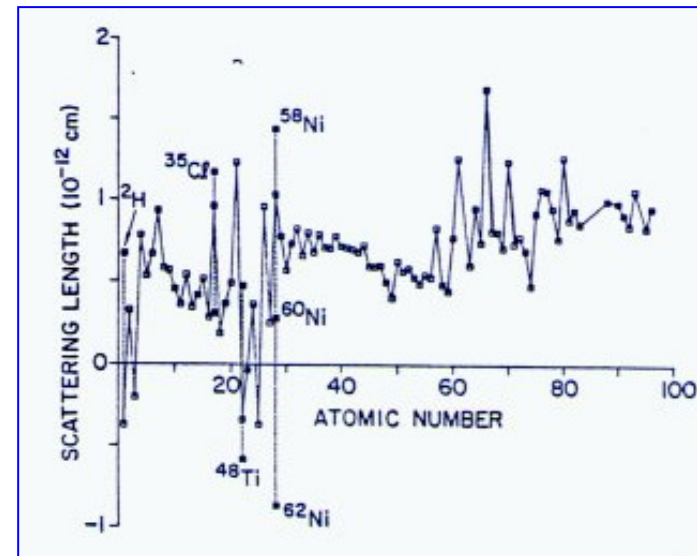
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \cong \left\langle \sum_{\alpha, \beta} b_{\alpha} b_{\beta} e^{iQ \cdot (R_{\alpha} - R_{\beta})} \right\rangle$$

ELEMENTI CHIMICI, ISOTOPI E LUNGHEZZA DI SCATTERING

Isotopi dello stesso elemento chimico hanno nuclei diversi

Le lunghezze di scattering variano da isotopo ad isotopo e in modo piuttosto irregolare al variare del numero atomico Z

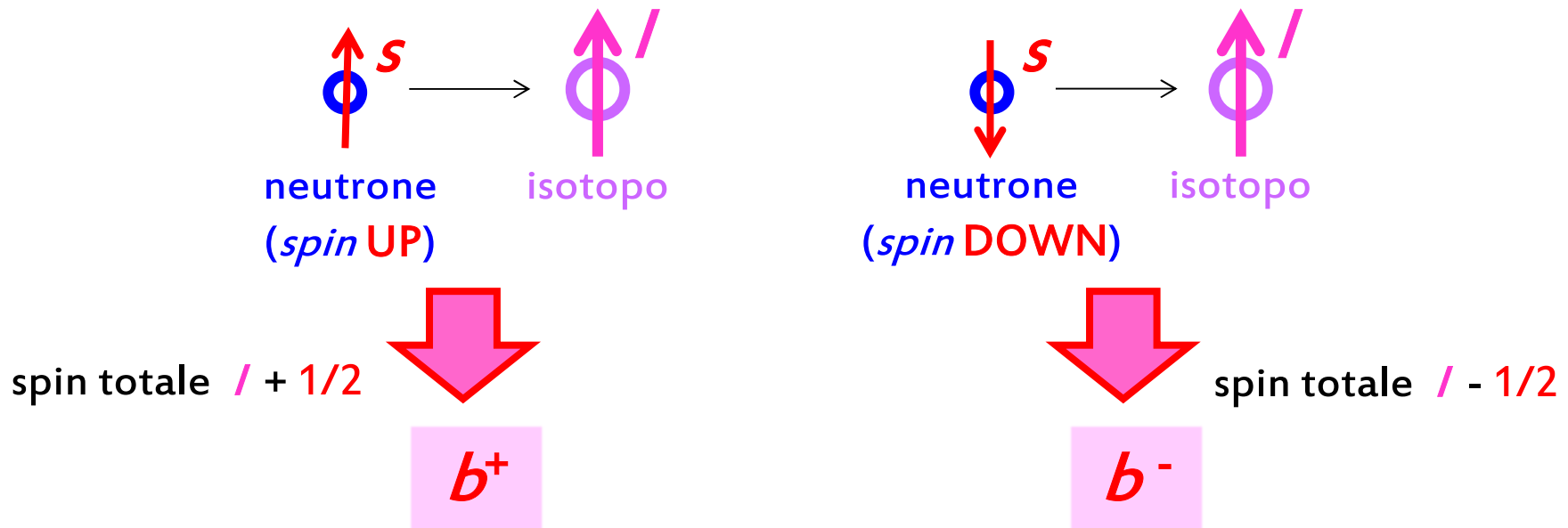
Per esempio, l'idrogeno ^1H e il suo isotopo deuterio ^2H (o D) hanno b molto diverse e questo è molto utile per individuarne la posizione in composti chimici o per differenziare per es. segnali provenienti da parti diverse di una stessa molecola (sostituzione isotopica).



IL CASO PIÙ SEMPLICE: CAMPIONE MONOISOTOPICO

Consideriamo il caso di un campione costituito da nuclei di uno stesso isotopo (per es. deuterio puro). Conoscere la lunghezza di scattering b di quel determinato isotopo non è sufficiente per predire come i neutroni verranno scatterati da ciascuno di tali nuclei.

Infatti l'ampiezza dell'onda scatterata da un nucleo dipende dall'isotopo in considerazione MA ANCHE dall'orientazione relativa fra spin del nucleo I e spin del neutrone s ($s = 1/2$). Esistono dunque *due* possibili valori di b anche a parità di isotopo considerato:

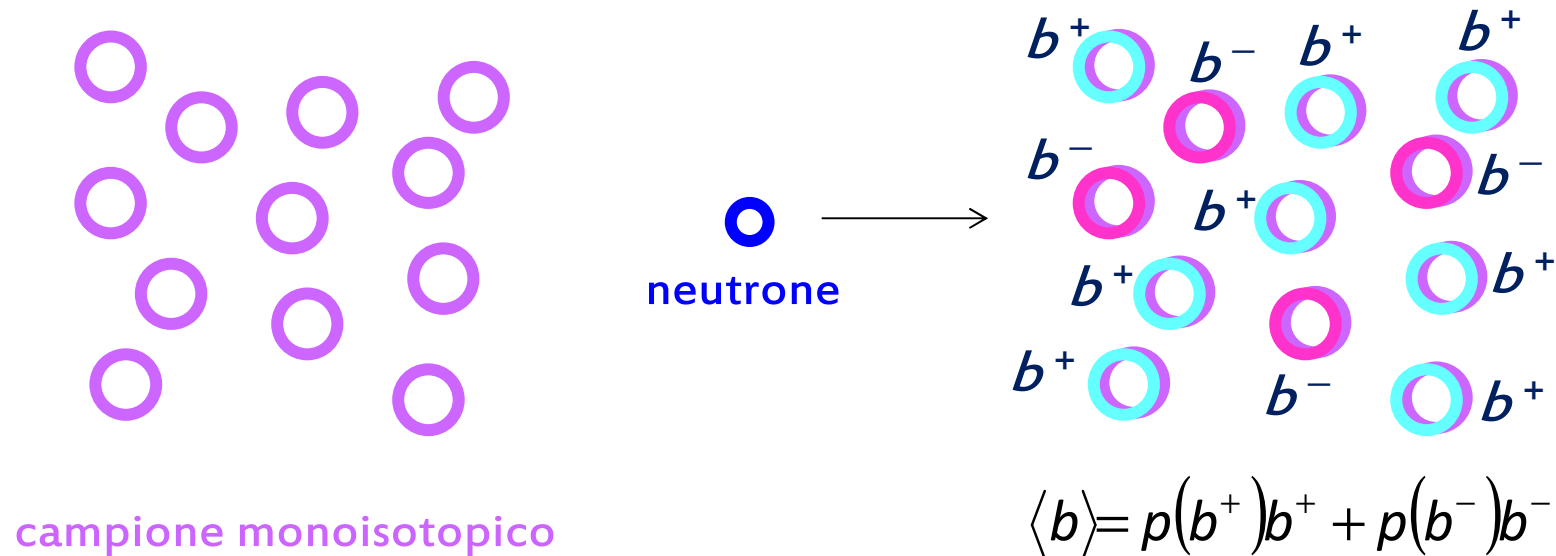


IL CASO PIÙ SEMPLICE: CAMPIONE MONOISOTOPICO

Se il fascio è non polarizzato (probabilità neutroni UP o DOWN = $\frac{1}{2}$), la probabilità che i nuclei scatterino con ampiezza b^+ è maggiore che con ampiezza b^- .

$$p(b^+) = \frac{2(l+1)}{2(l+1)+2l} \quad p(b^-) = \frac{2l}{2(l+1)+2l}$$

In altri termini, è come se il fascio incontrasse un campione costituito da due tipi di scatteratori (distribuiti con una certa probabilità), anche a parità di isotopo.



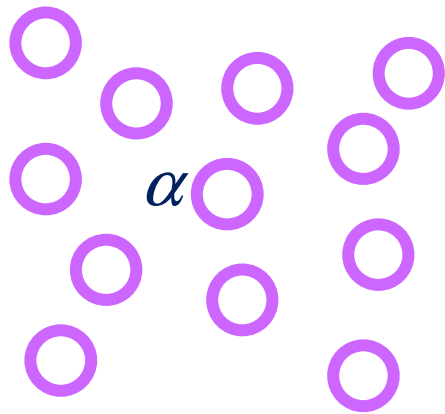
valor medio

IL CASO PIÙ SEMPLICE: CAMPIONE MONOISOTOPICO

E' possibile definire la lunghezza di scattering b di un certo campione monoisotopico come data da:

una parte (vista dai neutroni come) uguale per tutti i nuclei = $\langle b \rangle$ = **valor medio** della distribuzione di b^+ e b^-

più una parte che invece tiene conto delle deviazioni (sito per sito) dal valor medio



campione monoisotopico

$$b_{\alpha} = \langle b \rangle + \delta b_{\alpha}$$

È la stessa per tutti i siti del campione monoisotopico

Varia da sito a sito. Solo qui entra l'effetto delle orientazioni di spin

con $\delta b_{\alpha} = b_{\alpha} - \langle b \rangle =$ *fluttuazione tale che* $\langle \delta b_{\alpha} \rangle = 0$

IL CASO PIÙ SEMPLICE: CAMPIONE MONOISOTOPICO

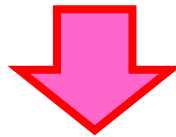
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \cong \left\langle \sum_{\alpha, \beta} b_{\alpha} b_{\beta} e^{iQ \cdot (R_{\alpha} - R_{\beta})} \right\rangle$$

$$b_{\alpha} b_{\beta} = (\langle b \rangle + \delta b_{\alpha}) (\langle b \rangle + \delta b_{\beta}) = \langle b \rangle^2 + \langle b \rangle \delta b_{\alpha} + \langle b \rangle \delta b_{\beta} + \delta b_{\alpha} \delta b_{\beta}$$

Facciamone il valor medio sui vari nuclei :

$$\langle b_{\alpha} b_{\beta} \rangle = \langle b \rangle^2 + 0 + 0 + \langle \delta b_{\alpha} \delta b_{\beta} \rangle$$

$\alpha \neq \beta \rightarrow \langle b \rangle^2$ perché non c'è correlazione in media fra le orientazioni di spin di nuclei in siti diversi a temperature superiori al mK
 $\alpha = \beta \rightarrow \langle b \rangle^2 + \langle \delta b_{\alpha}^2 \rangle = \langle b \rangle^2 + \langle (b_{\alpha} - \langle b \rangle)^2 \rangle = \langle b^2 \rangle$



$$\langle b_{\alpha} b_{\beta} \rangle = \langle b \rangle^2 + \delta_{\alpha\beta} (\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2)$$

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 0 & \text{per } \alpha \neq \beta \\ 1 & \text{per } \alpha = \beta \end{cases}$$

IL CASO PIÙ SEMPLICE: CAMPIONE MONOISOTOPICO

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \cong \underbrace{\sum_{\alpha, \beta} \langle b \rangle^2 e^{iQ \cdot (R_\alpha - R_\beta)}}_{\text{dipende da } Q \text{ e dalla struttura}} + N \underbrace{\left(\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2 \right)}_{\text{lo scattering elastico è isotropo e indipendente dalla struttura}}$$

dipende da Q e dalla **struttura**
(interferenza costruttiva di onde scatterate
dai vari nuclei con ampiezza uguale per tutti)

lo scattering elastico è **isotropo** e indipendente dalla
struttura
(è legato alla varianza della distribuzione dei b)

Vengono di conseguenza definite:

$$b_{coh} = \langle b \rangle \text{ lunghezza di scattering}$$

COERENTE

$$\sigma_{coh} = 4 \pi \langle b \rangle^2 \text{ sezione d'urto (di scattering)}$$

COERENTE

$$b = b_{coh} + \frac{2b_{inc}}{\sqrt{l(l+1)}} s \cdot l$$

$$\sigma_s = 4 \pi \langle b^2 \rangle \text{ sezione d'urto (di scattering)}$$

TOTALE

$$b_{inc} = (\sigma_{inc} / 4 \pi)^{1/2} \text{ lunghezza di scattering}$$

INCOERENTE

$$\sigma_{inc} = \sigma_s - \sigma_{coh} \text{ sezione d'urto (di scattering)}$$

INCOERENTE

RIASSUMENDO CIRCA L'INCOERENZA DI *SPIN*

La cosiddetta **incoerenza di spin** è sempre presente. Fanno eccezione esclusivamente i campioni costituiti da isotopi con spin nucleare $I = 0$. Solo tali campioni scatterano i neutroni in modo completamente coerente.

La presenza di scattering incoerente è una proprietà esclusiva dei neutroni

In studi di tipo strutturale (i.e. mirati alla determinazione della sezione d'urto differenziale e, da questa, del fattore di struttura statico $S(Q)$) lo scattering incoerente dà luogo ad un background e rappresenta uno "svantaggio".

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \cong \sum_{\alpha, \beta} \langle b \rangle^2 e^{iQ \cdot (R_\alpha - R_\beta)} + N \left(\langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2 \right)$$

In studi di tipo *dinamico* (i.e. mirati alla determinazione della sezione d'urto differenziale **doppia** e, da questa, del fattore di struttura *dinamico* $S(Q, E)$) lo scattering incoerente dà luogo ad un segnale dipendente dall'energia scambiata E e rappresenta in alcuni casi un grosso "vantaggio".

INCOERENZA ISOTOPICA

Il fenomeno della “incoerenza” nasce dal fatto che i neutroni, essendo dotati di spin, possono interagire con uno stesso nucleo (di spin non nullo) in due modi diversi.

Ovviamente, se un campione, anche di uno stesso elemento chimico, ha una composizione isotopica mista, questo darà luogo ad uno scattering (coerente ed incoerente) che dipende anche dal fatto che sono presenti nuclei di vario tipo.

Si parla in tali casi di “incoerenza isotopica” per distinguerla da quella (intrinseca ed ineliminabile) dovuta allo spin.

Table 1. Neutron scattering lengths and cross sections of the elements and their isotopes.



VF Sears, Neutron News, 3(3), 1992

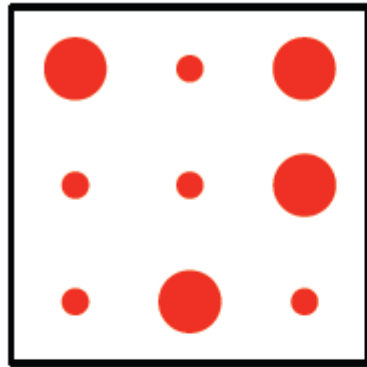
Column	Symbol	Unit	Quantity
1			element
2	Z		atomic number
3	A		mass number
4	$I(p)$		spin (parity) of the nuclear ground state
5	c	%	natural abundance (For radioisotopes the half-life is given instead.)
6	b_c	fm	bound coherent scattering length
7	b_i	fm	bound incoherent scattering length
8	s_c	barn ¹	bound coherent scattering cross section
9	s_i	barn	bound incoherent scattering cross section
10	s_s	barn	total bound scattering cross section
11	s_a	barn	absorption cross section for 2200 m/s neutrons ²

(1) 1 barn = 100 fm²
 (2) E = 25.30 meV, k = 3.494 Å⁻¹, l = 1.798 Å

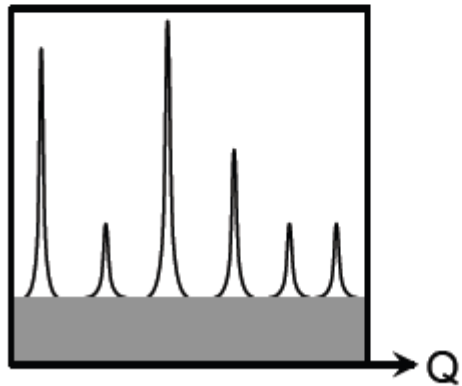
Z	A	$I(\pi)$	c	b_c	b_i	σ_c	σ_i	σ_s	σ_a
H	1			-3.7390(11)		1.7568(10)	80.26(6)	82.02(6)	0.3326(7)
	1	1/2(+)	99.985	-3.7406(11)	25.274(9)	1.7583(10)	80.27(6)	82.03(6)	0.3326(7)
	2	1(+)	0.015	6.671(4)	4.04(3)	5.592(7)	2.05(3)	7.64(3)	0.000519(7)
	3	1/2(+)	(12.32 a)	4.792(27)	-1.04(17)	2.89(3)	0.14(4)	3.03(5)	0
He	2			3.26(3)		1.34(2)	0	1.34(2)	0.00747(1)
	3	1/2(+)	0.00014	5.74(7)	-2.5(6)	4.42(10)	1.6(4)	6.0(4)	5333.(7.)
	4	0(+)	99.99986	-1.483(2) <i>i</i>	+2.568(3) <i>i</i>				
	4	0(+)	99.99986	3.26(3)	0	1.34(2)	0	1.34(2)	0

INCOERENZA ISOTOPICA

$b_1 =$ 
 $b_2 =$ 

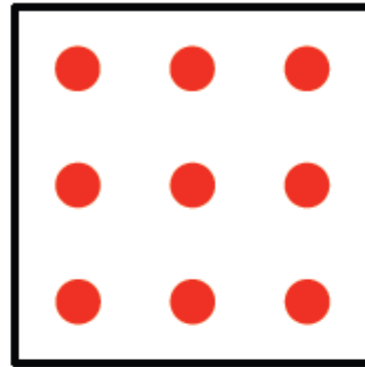


The two isotopes are randomly distributed.

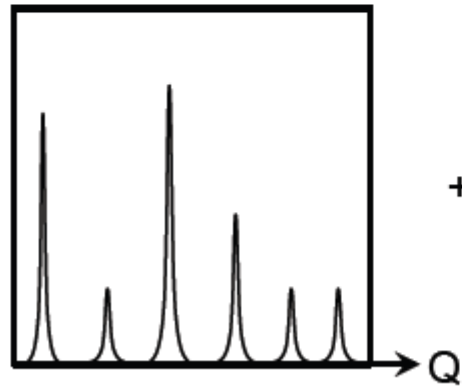


Total scattering

=

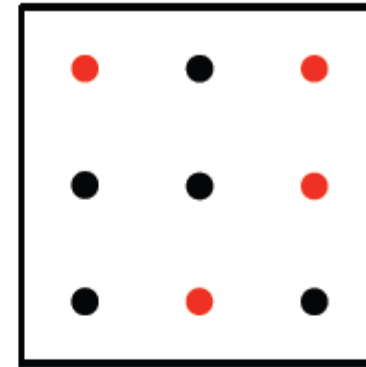


$$\frac{1}{2}(b_1 + b_2) = \bar{b}$$

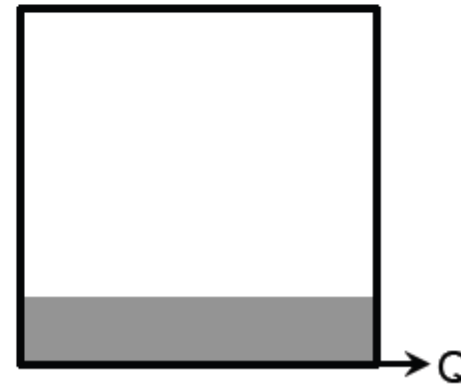


Coherent scattering

+



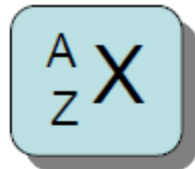
Deviations δb



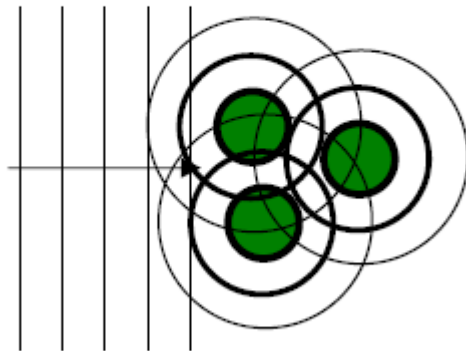
Incoherent scattering

INCOERENZA DI SPIN E DI ISOTOPI

X-rays



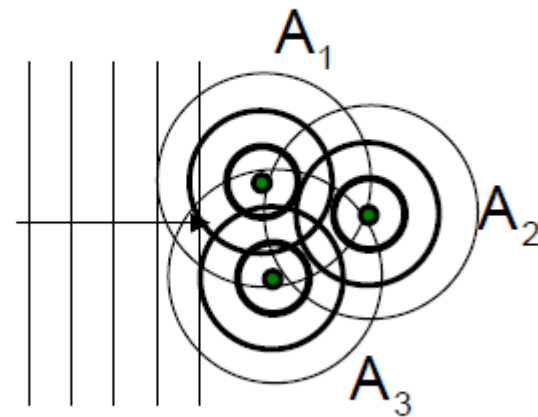
Neutrons



Scattering Length

$$z r_e f(\theta)$$

Atomic Number Electron Radius Atomic Form Factor



Scattering Lengths !



$$\begin{matrix} b_{A_1} & \begin{matrix} b_{A_1}^+ \\ b_{A_1}^- \end{matrix} \\ b_{A_2} & \begin{matrix} b_{A_2}^+ \\ b_{A_2}^- \end{matrix} \\ b_{A_3} & \begin{matrix} b_{A_3}^+ \\ b_{A_3}^- \end{matrix} \end{matrix}$$

INCOERENZA DI ISOTOPI: ESEMPI INTERESSANTI

Z	A	$I(\pi)$	c	b_c	b_i	σ_c	σ_i	σ_s	σ_a
Ar 18				1.909(6)		0.458(3)	0.225(5)	0.683(4)	0.675(9)
	36	0(+)	0.337	24.90(7)	0	77.9(4)	0	77.9(4)	5.2(5)
	38	0(+)	0.063	3.5(3.5)	0	1.5(3.1)	0	1.5(3.1)	0.8(2)
	40	0(+)	99.600	1.830(6)	0	0.421(3)	0	0.421(3)	0.660(9)
Ce 58				4.84(2)		2.94(2)	0.00(10)	2.94(10)	0.63(4)
	136	0(+)	0.19	5.80(9)	0	4.23(13)	0	4.23(13)	7.3(1.5)
	138	0(+)	0.25	6.70(9)	0	5.64(15)	0	5.64(15)	1.1(3)
	140	0(+)	88.48	4.84(9)	0	2.94(11)	0	2.94(11)	0.57(4)
	142	0(+)	11.08	4.75(9)	0	2.84(11)	0	2.84(11)	0.95(5)

SCATTERING INCOERENTE E STRUTTURA *DINAMICA SELF*

Esperimenti di scattering (anelastico) di neutroni permettono di misurare la sezione d'urto differenziale doppia. La sezione d'urto differenziale doppia dipende, nel caso di campioni **monoatomici**, dalle due componenti del fattore di struttura dinamico nel seguente modo:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k_1}{k_0} \left[b_{coh}^2 S_{dist}(\mathbf{Q}, \omega) + (b_{coh}^2 + b_{inc}^2) S_{self}(\mathbf{Q}, \omega) \right]$$

Le variazioni di b rispetto al valore medio distruggono l'interferenza, quindi danno informazioni solo sui moti di atomi singoli: l'incoerente "pesa" infatti la sola dinamica **self**

La parte **coerente** dello scattering permette di accedere **globalmente** a:

$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \right|_{coh} = \frac{k_1}{k_0} b_{coh}^2 \left[S_{dist}(\mathbf{Q}, \omega) + S_{self}(\mathbf{Q}, \omega) \right] = \frac{k_1}{k_0} b_{coh}^2 S(\mathbf{Q}, \omega)$$

La parte **incoerente** dello scattering permette di accedere **specificamente** a:

$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \right|_{inc} = \frac{k_1}{k_0} b_{inc}^2 S_{self}(\mathbf{Q}, \omega)$$

Questa è una possibilità
esclusivamente fornita dai
neutroni

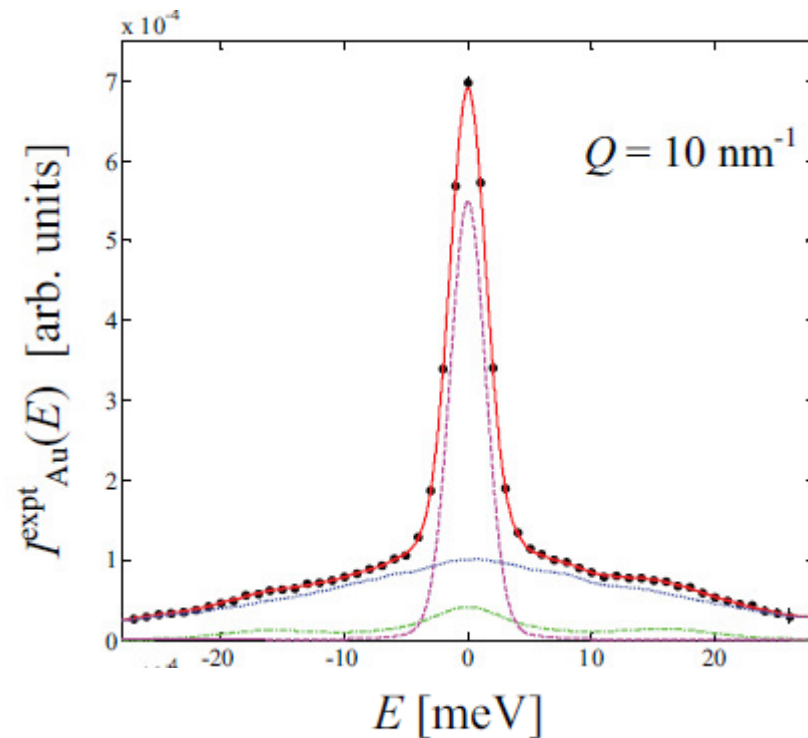
COERENTE, INCOERENTE E STRUTTURA *DINAMICA*

In generale, lo scattering di neutroni riflette entrambe le dinamiche *self* e *distinct*
(è l'unica tecnica con questa proprietà)

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \frac{k_1}{k_0} \left[b_{coh}^2 S(\mathbf{Q}, \omega) + b_{inc}^2 S_{self}(\mathbf{Q}, \omega) \right]$$

Di solito, interessa studiarne una, di cui si deve perciò massimizzare la visibilità

Anche se lo scattering è solo coerente, i neutroni sondano anche la dinamica *self*, ma questa è inseparabile da quella collettiva in senso stretto (*distinct*) \Rightarrow il coerente "pesa" infatti la dinamica *totale* = *self* + *distinct*

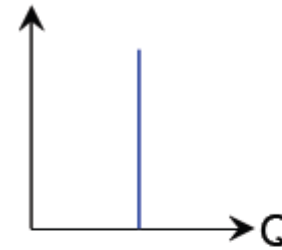


RIASSUMENDO (PER SISTEMI MONOATOMICI)

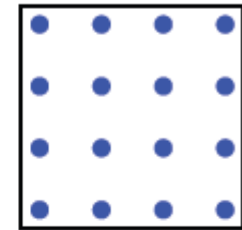
$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{coh} \cong \frac{\sigma_{coh}}{4\pi} S(\mathbf{Q})$$

Where atoms are

(Q, ω) Space

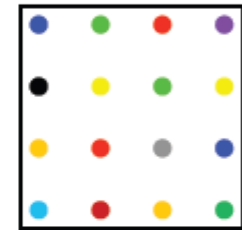
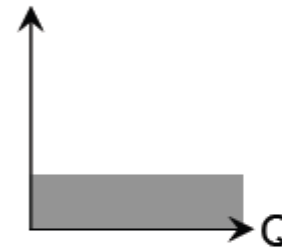


(r,t) Space



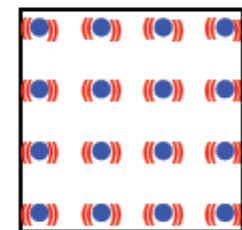
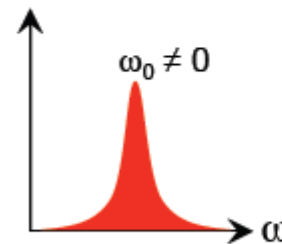
$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{inc} \cong \frac{\sigma_{inc}}{4\pi}$$

What atoms are



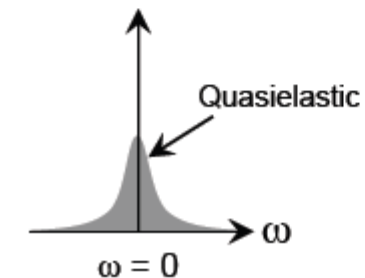
$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \right|_{coh} \cong \frac{k_1}{k_0} \frac{\sigma_{coh}}{4\pi} S(\mathbf{Q}, \omega)$$

What atoms do



$$\left. \frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} \right|_{inc} \cong \frac{k_1}{k_0} \frac{\sigma_{inc}}{4\pi} S_{self}(\mathbf{Q}, \omega)$$

What an atom does



VANTAGGI SPERIMENTALI DELLO SCATTERING INCOERENTE NEL TRATTAMENTO DI DATI NEUTRONICI

V	23			-0.3824(12)		0.01838(12)	5.08(6)	5.10(6)	5.08(4)
	50	6(+)	0.250	7.6(6)		7.3(1.1)	0.5(5) E	7.8(1.0)	60.(40.)
	51	7/2(-)	99.750	-0.402(2)	6.35(4)	0.0203(2)	5.07(6)	5.09(6)	4.9(1)

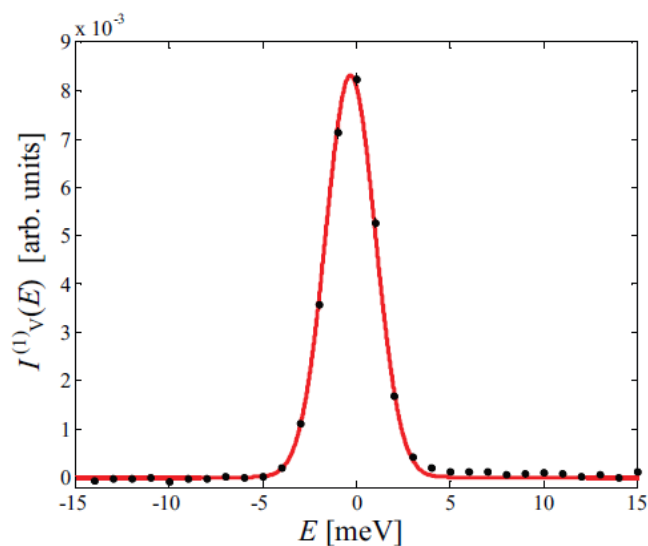


FIG. 1. (Color online) Single-scattering intensity of the vanadium sample at $Q = 6 \text{ nm}^{-1}$ (dots with error bars) and Gaussian fit curve (red line).

Un campione di riferimento ai fini della normalizzazione dei dati ad unità assolute (dipendente dall'assetto sperimentale) e della determinazione della risoluzione in energia dello strumento non deve introdurre variabilità in Q legate alla legge di scattering del campione di riferimento stesso:

l'ideale è dunque un campione **incoerente** e (per altri motivi) **elastico**



Vanadium

A stage spotlight from the top left corner illuminates a dark stage floor. The light creates a bright, circular pool of light in the center of the stage. The text "the end" is written in red in the center of this illuminated area.

the end