中性子散乱断面積

$r_0 = \frac{\gamma e^2}{m_e c^2}$

$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 (2\gamma\mu_N\mu_B)^2 (4\pi)^2 \frac{k'}{k} \sum_{\lambda\lambda'\sigma\sigma'} p_\lambda p_\sigma$$

（$\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 (2\gamma\mu_N\mu_B)^2 = r_0^2$）　：これが基本式

$$\times \langle\lambda\sigma|(\hat{\sigma}\cdot\hat{Q}_\perp)^\dagger|\lambda'\sigma'\rangle\langle\lambda'\sigma'|\hat{\sigma}\cdot\hat{Q}_\perp|\lambda\sigma\rangle\,\delta(\hbar\omega + E_\lambda - E_{\lambda'}) \quad ①$$

中性子スピン　$\sigma \to \sigma'$
波数　$\vec{k} \to \vec{k}'$
ターゲット　$\lambda \to \lambda'$

散乱ベクトル　$\vec{\kappa} = \vec{k} - \vec{k}'$

$$\hat{Q}_\perp = \sum_i e^{i\vec{\kappa}\cdot\vec{r}_i}\left\{\underbrace{\tilde{\kappa}\times(\hat{s}_i\times\tilde{\kappa})}_{spin} - \underbrace{\frac{i}{\hbar\kappa}\tilde{\kappa}\times p_i}_{orbital}\right\} \quad ②$$

非偏極中性子に対しては、

$$\sum_\sigma p_\sigma\langle\sigma|\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta|\sigma\rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad \text{より}\quad \left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right) = r_0^2\frac{k'}{k}S(\vec{\kappa},\omega) \quad ③$$

$$S(\vec{\kappa},\omega) = \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda\langle\lambda|\hat{Q}_\perp^\dagger|\lambda'\rangle\langle\lambda'|\hat{Q}_\perp|\lambda\rangle\,\delta(\hbar\omega + E_\lambda - E_{\lambda'})$$

$$= \sum_{\alpha\beta}(\delta_{\alpha\beta} - \tilde{\kappa}_\alpha\tilde{\kappa}_\beta)\sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda\langle\lambda|\hat{Q}_\alpha^\dagger|\lambda'\rangle\langle\lambda'|\hat{Q}_\beta|\lambda\rangle\,\delta(\hbar\omega + E_{\lambda'} - E_\lambda) \quad ④$$

①の計算は $\langle\lambda|\hat{Q}_\perp|\lambda'\rangle$ が計算できればよい。 f電子（基底J多重項）では、

$|\lambda\rangle = \sum_i c_i|JM_i\rangle \quad (i = 1 \sim 2J+1)$

の形に表されているので、 $\langle JM|\hat{Q}_\perp|JM'\rangle$ が計算できればよい

$$\langle JM|\hat{Q}_{\perp,q}|JM'\rangle = \sqrt{4\pi}\sum_{K,K'}\{A(K,K') + B(K,K')\}$$

← Loveseyの教科書 (11.87a)

$$\times\sum_{QQ'} Y_Q^K(\tilde{\kappa})\langle KQ'JM'|JM\rangle\langle KQK'Q'|1q\rangle \quad ⑤$$

$q = 1, 0, -1$
球テンソル形式
rank-1

$K = 0, 2, 4, 6$
$K' = 1, 3, 5, 7$

$K = 0, 2$、$K' = 1$ だけ考えるのが双極子近似 (dipole approximation)

プログラムでは①の＝部分を計算する

参考文献

[1] E. Balcar and S. W. Lovesey, "Theory of Magnetic Neutron and Photon Scattering" (Oxford).
[2] S. W. Lovesey, "Theory of Neutron Scattering from Condensed Matter" vol. 2, (Oxford).
[3] International Tables for Crystallography, Vol. C, ed. A. J. C. Wilson and E. Prince, (1999).