# КОРРЕКЦИЯ КОНЦЕПЦИИ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА ФЕРМИ В ТЕОРИИ ДИНАМИЧЕСКОГО РАССЕЯНИЯ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ

© 2020 г. Ф. С. Джепаров<sup>1),2)\*</sup>, Д. В. Львов<sup>1),2)</sup>

Поступила в редакцию 05.12.2019 г.; после доработки 05.12.2019 г.; принята к публикации 05.12.2019 г.

Рассмотрено прохождение тепловых нейтронов через среды с разной степенью упорядоченности. Выявлена необходимость изменения стандартной концепции псевдопотенциала Ферми для получения единообразного описания распространения тепловых нейтронов в кристаллических и аморфных средах. Показано, что к удовлетворительным результатам приводит такой псевдопотенциал, который правильно воспроизводит амплитуду рассеяния на одном центре не в первом, а во втором порядке теории возмущений. Получены общие формулы, описывающие прохождение тепловых нейтронов при произвольной степени упорядоченности вещества.

#### DOI: 10.31857/S004400272003006X

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Под динамическим рассеянием нейтронов обычно подразумевается многократное рассеяние при превалирующем значении интерференционных эффектов. Этот круг явлений называется также нейтронной оптикой. В современной формулировке [1—7] псевдопотенциал Ферми [8] применяется для описания взаимодействия тепловых нейтронов с конденсированными средами и заменяет подлинное сильное взаимодействие V(r) нейтрона с ядром, закрепленным в начале координат, на такое малое взаимодействие  $V_{\varepsilon}^{0}(r)$ , которое дает правильную амплитуду s-рассеяния в первом борновском приближении:

$$V_{\varepsilon}^{0}(\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{m} f \delta_{\varepsilon}(\mathbf{r}), \tag{1}$$

$$\delta_{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\varepsilon^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2\varepsilon^2}\right).$$

Здесь f — амплитуда рассеяния, а  $\varepsilon$  — радиус действия псевдопотенциала, на который налагается условие

$$|f| \ll \varepsilon \ll \lambda,$$
 (2)

хорошо выполненное для типичных значений  $|f|\sim \sim 10^{-12}\,$  см и длин волн нейтронов  $\lambda\gtrsim 10^{-9}\,$  см. Здесь и далее полагаем постоянную Планка  $\hbar=1.$ 

Считается, что если выполнено условие (2), то поправки к амплитуде f в высших порядках по

 $V_{\varepsilon}^{0}(r)$  не превосходят  $|f|/\varepsilon$  по порядку величины, и поэтому уравнение Шредингера с потенциалом (1) применяется для описания движения нейтрона в более сложных условиях, когда невозможно ограничиться первым борновским приближением. В частности, в так называемом одноволновом приближении [1, 2, 5], когда нейтрон в диамагнитном веществе с плотностью n описывается плоской волной  $\exp(i\mathbf{kr})$ , этот подход приводит к выводу о том, что  $k^2=k_0^2-4\pi nf$ , где  $\mathbf{k}_0$  — волновой вектор нейтрона в вакууме. При этом в типичных условиях с  $k_0^2\gg 4\pi nf$  и в пренебрежении тепловыми движениями в среде получается, что пропускание пластины с толщиной l определяется полным сечением  $\sigma_{\mathrm{tot}}$ , причем

$$I = I_0 \exp(-n\sigma_{\text{tot}}l),\tag{3}$$

где  $I_0$  и I — входной и прошедший потоки нейтронов соответственно. Здесь предполагается, что толщина пластины не слишком велика, и поэтому можно пренебречь учетом перерассеянных нейтронов, выбывших из первичного пучка. Полное сечение рассеяния нейтрона на одном ядре  $\sigma_{\rm tot}$  связано с мнимой частью амплитуды рассеяния оптической теоремой

$$Im f = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}, \tag{4}$$

где

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_a, \quad \sigma_{\text{el}} = \sigma_c + \sigma_{\text{inc}}.$$
 (5)

Здесь  $\sigma_a$  — сечение поглощения нейтрона, а сечение упругого рассеяния  $\sigma_{\rm el}$  складывается из сечений когерентного  $\sigma_c$  и некогерентного  $\sigma_{\rm inc}$  рассеяния. При учете тепловых движений среды, по-

 $<sup>^{1)}</sup>$ НИЦ "Курчатовский институт" — ИТ $\Theta\Phi$ , Москва, Россия.

 $<sup>^{2)}</sup>$ НИЯУ "МИФИ", Москва, Россия.

<sup>\*</sup>E-mail: dzheparov@itep.ru

рождающих дополнительное рассеяние с сечением  $\sigma_T$ , соотношение (3) должно оставаться справедливым при замене  $\sigma_{\mathrm{tot}} \to \sigma_{\mathrm{eff}} = \sigma_{\mathrm{tot}} + \sigma_T$ . Далее мы ограничимся обсуждением ситуаций, в которых  $\sigma_T$  пренебрежимо мало.

По построению формулы (3) и (4) должны быть верны и для кристалла вдали от условий брэгговского отражения. Ясно, однако, что в идеальной кристаллической решетке нейтрон движется в поле периодического потенциала, и поэтому упругое когерентное рассеяние приводит к образованию блоховских волн (хорошо известных в общей теории твердого тела [9, 10]), а вовсе не к выбыванию нейтронов из пучка. Т.е. при изучении пропускания кристалла правильнее принять, что  $\sigma_{\rm el} = \sigma_{\rm inc}$ . Қ такому же выводу привел и анализ статьи [11], где показано, что если в псевдопотенциал вместо fподставить  $f_0 = \mathrm{Re} f + i \frac{k}{4\pi} \sigma_a$  и вычислить в первом порядке по псевдопотенциалу фазу рассеяния  $\eta$ , то получится правильное полное сечение однократного рассеяния  $\sigma_{\rm tot}=4\pi({\rm Re}f)^2+\sigma_a$ , а решение уравнения Шредингера для кристалла не будет содержать вышеуказанного затухания волны, обусловленного упругим рассеянием. Данный подход содержит противоречие, состоящее в том, что  $\eta$  определяется в первом порядке по псевдопотенциалу, а далее расчеты ведутся с учетом до  $\eta^2$  включительно. Поэтому более последовательно было бы и  $\eta$  определить с точностью до второго порядка по псевдопотенциалу. Можно показать, однако, что для кристаллов в рассмотренном в [11] круге вопросов работает не амплитуда f, а соотношение f/(1+ikf), поэтому использование  $f=f_0$ или более точного значения f, но в комбинации f/(1+ikf) приводит к практически одинаковому результату. Это и определяет достаточность расчета  $\eta$  лишь в первом порядке по псевдопотенциалу для случая, когда положения ядер в кристалле фиксированы.

Тот факт, что пропускание кристаллов превосходит значение, предписываемое формулами (3) и (4), давно известен, см. например, [12, 13]. Поэтому и на основе результатов [11] замена  $f \to f_0$  производится без разъяснений в нейтронной оптике идеальных кристаллов [14, 15].

Другой способ анализа был предложен для аморфных сред в работе [16] (см. также [17]). Он основан на использовании так называемой системы уравнений многократного рассеяния [4–7], в которой в качестве исходного элемента используется не псевдопотенциал, а полная амплитуда рассеяния f. В [16] получено, что корреляции в расположении рассеивателей аморфной среды приводят к существенному изменению соотношения (3), которое справедливо только при их отсутствии.

Вышесказанное показывает необходимость такой формулировки метода псевдопотенциала, который одинаково успешно опишет динамическое рассеяние тепловых нейтронов в средах произвольной упорядоченности. Данная проблема давно известна [18], но никакого ее общего решения до сих пор не предложено. В частности, желательно получение общей формулы, описывающей переход от идеального кристалла к идеально некоррелированной аморфной среде по мере изменения корреляций в расположении ядер. Формулировка такого общего решения на базе уравнения Шредингера и концепции псевдопотенциала является целью данной работы.

Основной вывод нашей работы будет состоять в том, что псевдопотенциал должен строиться так, чтобы правильная амплитуда рассеяния на одном ядре получалась не в главном, а в двух первых порядках теории возмущений. При этом появляется возможность с такой же точностью рассчитывать всю картину динамического рассеяния нейтронов. При этом далее будет показано, что учет тепловых колебаний, приводящий к пространственной делокализации псевдопотенциала, приводит к большему изменению закона дисперсии нейтрона в среде, чем учет коррекции Лэкса—Сирса [16, 17], на желательность наблюдения которой указывалось, например, в работе [19].

### 2. РАССЕЯНИЕ НА ОДНОМ ЯДРЕ

Отсутствие члена  $\sim k\sigma_{\rm el}$  в мнимой части псевдопотенциала вполне оправдано при изучении эффектов главного порядка по псевдопотенциалу, как, например, в [20], но в более общем случае оно требует специального исследования. Существенно, что псевдопотенциал вводится не для описания отдельного акта рассеяния или формулировки системы уравнений многократного рассеяния, а для получения возможности описания движения нейтрона в среде на основе уравнения Шредингера с потенциалом, допускающим применение теории возмущений. При этом нет никакой необходимости в том, чтобы правильная амплитуда рассеяния на одном ядре получалась в первом борновском приближении. Более того, использование в (1) полной амплитуды рассеяния при таком подходе является просто ошибкой.

Действительно, введем по аналогии c (1) псевдопотенциал

$$V_{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \frac{2\pi}{m} b \delta_{\varepsilon}(\mathbf{r}), \tag{6}$$

константу b в котором определим далее. С точностью до второго порядка по  $V_{\varepsilon}(r)$  амплитуда рассеяния

$$f\left(\mathbf{k}_{0}, \mathbf{k}'\right) = -\frac{m}{2\pi} \int d^{3}r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V_{\varepsilon}(\mathbf{r}) - \tag{7}$$

$$-\frac{m}{2\pi} \int d^3r \int d^3r_1 e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V_{\varepsilon}(\mathbf{r}) G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \times V_{\varepsilon}(\mathbf{r}_1) e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}_1} = f^{(1)} + f^{(2)},$$

где  $\mathbf{k}_0$ ,  $\mathbf{k}'$  — волновые векторы падающей и рассеянной волн, а  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  — вектор рассеяния,

$$G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) = \langle \mathbf{r} | G_0(E_0) | \mathbf{r}_1 \rangle =$$

$$= -\frac{m}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \exp(ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|), \quad E_0 = \frac{k_0^2}{2m},$$

$$G_0(E_0) = \left(E_0 - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i\eta\right)^{-1}, \quad \eta \to +0.$$

Здесь  ${f p}$  — оператор импульса нейтрона. При  $q \varepsilon \sim k_0 \varepsilon = \varepsilon/\lambda \ll 1$  первое слагаемое

$$f^{(1)}(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi} \int d^3 r e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} V_{\varepsilon}(\mathbf{r}) =$$

$$= -b(1 + O((k_0 \varepsilon)^2)).$$
(8)

С той же точностью второе слагаемое в (7) не зависит от q и в нем можно положить  $\exp(ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) = 1 + ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|$ . Поэтому

$$f^{(2)} = (f_1^{(2)} + f_2^{(2)})(1 + O((k_0 \varepsilon)^2)), \tag{9}$$

$$f_1^{(2)} = b^2 \int d^3r \int d^3r_1 \delta_{\varepsilon}(\mathbf{r}) |\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^{-1} \times (10)$$
$$\times \delta_{\varepsilon}(\mathbf{r}_1) = \frac{b^2}{\varepsilon \sqrt{\pi}},$$

$$f_2^{(2)} = ik_0b. (11)$$

Требование малости  $\left|f_1^{(2)}\right|$  в сравнении с  $\left|f^{(1)}\right|$  приводит к фигурирующему в (2) условию  $\left|f\right| \approx$   $\approx |b| \ll \varepsilon$ . Но вклад  $f_2^{(2)}$  хотя и мал в сравнении с  $f^{(1)}$  по параметру  $k_0 \left|b\right| \ll 1$ , но он содержит именно то, что предписывается оптической теоремой. Поэтому, если мы выберем, как в [1-7], b=-f, то учет  $f_2^{(2)}$  приведет к удвоению вклада упругого сечения в мнимую часть амплитуды рассеяния, что неверно.

Из вышеизложенного ясно, что псевдопотенциал будет пригоден для расчетов по теории возмущений, если принять, что

$$b = b_1 + ib_2, (12)$$

где действительные  $b_1$  и  $b_2$  описывают упругое рассеяние и поглощение нейтронов соответственно, т.е.

$$\sigma_{\rm el} = 4\pi b_1^2,\tag{13}$$

$$b_2 = -\frac{k_0}{4\pi}\sigma_a. \tag{14}$$

При этом, опуская зависящие от радиуса псевдопотенциала  $\varepsilon$  вклады из (8) и (10), для амплитуды рассеяния получаем

$$f = -b + ik_0b^2 = -b_1(1 + 2k_0b_2) + (15)$$

$$+ i\left(\frac{k_0}{4\pi}\sigma_{\text{tot}} - k_0b_2^2\right) =$$

$$= -b_1 + i\frac{k_0}{4\pi}\sigma_{\text{tot}} + f' + if'',$$

где  $\sigma_{\rm tot} = \sigma_{\rm el} + \sigma_a$ . Слагаемые  $f' = -2k_0b_1b_2$  и  $f'' = -k_0b_2^2$  пренебрежимо малы в сравнении с  $b_1$  и  $\frac{k_0}{4\pi}\sigma_{\rm tot}$  соответственно и далее не учитываются.

Соотношения (6) и (12)—(15) дают более правильное определение псевдопотенциала, чем исходное (1). При этом стандартные уравнения теории многократного рассеяния остаются неизменными, а псевдопотенциал, применяемый в нейтронной оптике идеальных кристаллов [14, 15], непосредственно следует из нашего нового определения. Существенно, что все члены, зависящие от  $\varepsilon$ , не должны приниматься во внимание как нефизические.

В вышеприведенных расчетах мы для краткости опустили спиновую часть амплитуды. Ее учет производится стандартно, как и в исходной версии теории псевдопотенциала. При этом сохраняется основной вывод о том, что параметры псевдопотенциала должны быть выбраны так, чтобы правильная амплитуда рассеяния воспроизводилась не в главном приближении теории возмущений, а в ее первых двух членах.

#### 3. НЕЙТРОН В СТАТИЧЕСКОЙ СРЕДЕ

Покажем, что в новой версии теории псевдопотенциала естественно получается такое описание прохождения нейтронов через образец, образованный статическим массивом одинаковых рассеивателей, которое воспроизводит формулу (3) при полном отсутствии корреляций в расположении рассеивателей, обобщает ее на случай наличия корреляций и приводит к полному отсутствию вклада упругого рассеяния в поглощение нейтронов в случае правильной кристаллической решетки.

Пусть гамильтониан взаимодействия нейтрона со средой имеет вид:

$$H = H_0 + \hat{V}, \quad H_0 = \frac{p^2}{2m},$$

$$\hat{V} = \sum_{R \in \Omega} n_{\mathbf{R}} \hat{V}_{\varepsilon}(\mathbf{R}),$$
(16)

где  $\left\langle \mathbf{r}|\hat{V}|\mathbf{r}'\right\rangle = V(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \quad \left\langle \mathbf{r}|\widehat{V}_{\varepsilon}(\mathbf{R})|\mathbf{r}'\right\rangle =$  $=V_{arepsilon}(\mathbf{r}-\mathbf{R})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),\Omega$  — объем образца, а  $\delta\left(\mathbf{r}
ight)$  дельта-функция. Здесь, как и в [21], предполагается, что ядра расположены в некоторой совокупности узлов правильной решетки, для которых числа заполнения  $n_{\mathbf{R}}=1$ , а в прочих узлах этой решетки  $n_{\mathbf{R}}=0$ . Мы ограничимся простейшим случаем, когда внутри образца все узлы заполнены равновероятно и концентрация заполненных узлов  $\langle n_{\mathbf{R}} \rangle_c = c$ . Здесь и далее символ  $\langle \cdots \rangle_c$  означает усреднение по конфигурациям примесей, т.е. усреднение по распределению чисел заполнения. Рассматриваемая решетка может быть реальной в случае кристалла, или фиктивной, как в случае аморфной среды, когда объем элементарной ячейки решетки  $\Omega_0 o 0$  вместе с концентрацией c o 0при конечном значении плотности ядер  $n = c/\Omega_0$ .

Далее нам понадобится корреляционная функпия

$$W\left(\mathbf{R}, \mathbf{R}'\right) = \frac{1}{\Omega_0^2} \left\langle \left(n_{\mathbf{R}} - c\right) \left(n_{\mathbf{R}'} - c\right) \right\rangle_c = (17)$$
$$= \frac{1}{\Omega_0^2} \left[ c \left(1 - c\right) \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'} + \left(1 - \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}\right) c^2 \chi \left(\mathbf{R}, \mathbf{R}'\right) \right].$$

Если рассеяние происходит на идеальном кристалле, то все  $n_{\bf R}=1$ , и поэтому c=1, а  $W\left({\bf R},{\bf R}'\right)=0$ . В противоположном случае аморфной среды  $W\left({\bf R},{\bf R}'\right)=n\delta\left({\bf R}-{\bf R}'\right)+n^2\chi\left({\bf R},{\bf R}'\right)$ , а корреляции в расположении ядер проявляются в том, что  $\chi\left({\bf R},{\bf R}'\right)\neq0$ .

В типичных условиях  $E_0=k_0^2/(2m)\gg V_0=\frac{1}{\Omega}\int_\Omega d^3r V(\mathbf{r})=\frac{N}{\Omega}\int_\Omega d^3r V_\varepsilon(\mathbf{r})$ , где N— число ядер в образце. Поэтому в главном приближении волновая функция нейтрона  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=\langle\mathbf{r}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$  представляет собой плоскую волну  $\phi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})=\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}_0\rangle==\Omega^{-1/2}\exp{(i\mathbf{k}_0\mathbf{r})}$ . Для вычисления коэффициента прохождения нейтрона через образец надо уточнить ее на основе уравнения Липпмана—Швингера

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r}) + \int d^3r G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_1)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1)$$

или уравнения Шредингера в форме

$$\left(E_0 + i\eta - H_0 - \widehat{V}\right)|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = 0.$$
 (18)

Для построения теории возмущений удобно применить проекционную технику [22], введя проекторы  $\pi_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|$  и  $\bar{\pi}_{\mathbf{k}} = 1 - \pi_{\mathbf{k}}$ . Здесь  $\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle = Z^{-1/2}\exp\left(i\mathbf{k}\mathbf{r}\right),\ Z = \int_{\Omega}d^3r\exp(-2\mathbf{r}\mathrm{Im}\mathbf{k}),$  причем, в силу граничных условий,  $\mathbf{k}\approx\mathbf{k}_0$ . Отметим, что именно функция  $\langle\mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle$  должна сшиваться с падающей и рассеянной волнами на границе

образца. Подставим в (18) разложение  $|\psi_{\bf k}\rangle = \pi_{\bf k}|\psi_{\bf k}\rangle + \bar{\pi}_{\bf k}|\psi_{\bf k}\rangle$ , составим уравнения на  $\pi_{\bf k}|\psi_{\bf k}\rangle$  и  $\bar{\pi}_{\bf k}|\psi_{\bf k}\rangle$  и исключим уравнение на  $\bar{\pi}_{\bf k}|\psi_{\bf k}\rangle$ . В результате получается, что

$$\pi_{\mathbf{k}}(E_{0} + i\eta - H_{0} - \widehat{V})\pi_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle =$$
(19)
$$= \pi_{\mathbf{k}}\widehat{V}\bar{\pi}_{\mathbf{k}}(E_{0} + i\eta - H_{0} - \bar{\pi}_{\mathbf{k}}\widehat{V}\bar{\pi}_{\mathbf{k}})^{-1}\bar{\pi}_{\mathbf{k}}\widehat{V}\pi_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle,$$

$$\bar{\pi}_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle = (E + i\eta - H_{0} -$$

$$- \bar{\pi}_{\mathbf{k}}\widehat{V}\bar{\pi}_{\mathbf{k}})^{-1}\bar{\pi}_{\mathbf{k}}\widehat{V}\pi_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle.$$

Здесь учтено, что  $[H_0, \bar{\pi}_{\mathbf{k}}] = 0$ . Первое из этих соотношений является уравнением на  $E = \frac{k^2}{2m} =$  $= \langle \mathbf{k} \, | H_0 | \, \mathbf{k} \rangle$ , второе определяет поправку  $\bar{\pi}_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$  к главному приближению  $\pi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \xi | \mathbf{k} \rangle$ , а константа  $\xi$  определяется из условия нормировки  $\langle \psi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = 1$  в объеме образца.

Если мнимая часть E пренебрежимо мала, то  $\left\langle \mathbf{k} \left| \hat{V} \right| \mathbf{k} \right\rangle = V_0$ . Покажем, что это равенство остается в силе и когда мнимая часть  $k_2$  длины вектора  $\mathbf{k}$  удовлетворяет условию  $k_2 r_c = k_2 n^{-1/3} \ll 1$ . Действительно, пусть  $\operatorname{Im} E \neq 0$ . В этом случае

$$\left\langle \mathbf{k} \left| \widehat{V} \right| \mathbf{k} \right\rangle = \int_{\Omega} d^3 r \exp(-2\mathbf{r} \mathrm{Im} \mathbf{k}) V(\mathbf{r}) / Z = (21)$$

$$= \sum_{\mathbf{R} \in \Omega} n_{\mathbf{R}} \int_{\Omega} d^3 r \exp(-2\mathbf{r} \mathrm{Im} \mathbf{k}) V_{\varepsilon}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) / Z \approx$$

$$\approx V_0 \Omega_0 \sum_{\mathbf{R} \in \Omega} n_{\mathbf{R}} \exp(-2\mathbf{R} \mathrm{Im} \mathbf{k}) / Z c.$$

Здесь учтено, что  $\int d^3r V_{\varepsilon}(\mathbf{r}) = V_0 \Omega_0/c$  и  $\varepsilon \, |\mathrm{Im}\mathbf{k}| \ll \varepsilon \, |k| \ll 1$ . Сумма в (21) содержит много приблизительно одинаковых слагаемых и является самоусредняющейся. Поэтому

$$\left\langle \mathbf{k} \left| \widehat{V} \right| \mathbf{k} \right\rangle \approx V_0 \Omega_0 \sum_{\mathbf{R} \in \Omega} \exp(-2\mathbf{R} \operatorname{Im} \mathbf{k}) / Z \approx (22)$$
  
  $\approx V_0 \int_{\Omega} d^3 r \exp(-2\mathbf{r} \operatorname{Im} \mathbf{k}) / Z = V_0.$ 

Уравнение (19) можно записать в более компактной форме:

$$E = E_0 + i\eta - \left\langle \mathbf{k} | \widehat{V} | \mathbf{k} \right\rangle -$$

$$- \left\langle \mathbf{k} | \widehat{V} \bar{\pi}_{\mathbf{k}} (E_0 + i\eta - H_0 - \bar{\pi}_{\mathbf{k}} \widehat{V} \bar{\pi}_{\mathbf{k}})^{-1} \bar{\pi}_{\mathbf{k}} \widehat{V} | \mathbf{k} \right\rangle \approx$$

$$\approx E_0 + i\eta - V_0 -$$

$$- \left\langle \mathbf{k} | (\widehat{V} - V_0) G_0(E_0) (\widehat{V} - V_0) | \mathbf{k} \right\rangle + O(\widehat{V}^3).$$
(23)

В последнем преобразовании учтено соотношение (22) и удержаны члены не выше квадратичных по псевдопотенциалу V.

Матричный элемент  $\langle \mathbf{k} | (\widehat{V} - V_0) G_0(E_0) (\widehat{V} - V_0) | \mathbf{k} \rangle$  является самоусредняющимся по числам заполнения по тем же причинам, которые были описаны при выводе (22). Поэтому, полагая

$$\begin{split} \widehat{V} - V_0 &= \Delta \widehat{V}_c + \Delta \widehat{V}_0, \\ \Delta V_c(\mathbf{r}) &= V(\mathbf{r}) - \langle V(\mathbf{r}) \rangle_c = \\ &= \sum_{\mathbf{R} \in \Omega} (n_\mathbf{R} - c) V_\varepsilon(\mathbf{r} - \mathbf{R}), \\ \Delta V_0(\mathbf{r}) &= \langle V(\mathbf{r}) \rangle_c - V_0 = \\ &= \sum_{\mathbf{R} \in \Omega} c[V_\varepsilon(\mathbf{r} - \mathbf{R}) - V_0/(cN)], \end{split}$$

получаем, что квадратичная по потенциалу поправ-ка к энергии равна

$$\left\langle \mathbf{k} | (\widehat{V} - V_0) G_0(E_0) (\widehat{V} - V_0) | \mathbf{k} \right\rangle =$$

$$= \left\langle \mathbf{k} \middle| \left\langle (\Delta \widehat{V}_c + \Delta \widehat{V}_0) G_0(E_0) (\Delta \widehat{V}_c + \Delta \widehat{V}_0) \right\rangle_c \middle| \mathbf{k} \right\rangle =$$

$$= \Delta E_c + \Delta E_0,$$

где

$$\Delta E_{c} = \left\langle \mathbf{k} \left| \left\langle \Delta \widehat{V}_{c} G_{0}(E_{0}) \Delta \widehat{V}_{c} \right\rangle_{c} \right| \mathbf{k} \right\rangle, \qquad (24)$$

$$\Delta E_{0} = \left\langle \mathbf{k} \left| \Delta \widehat{V}_{0} G_{0}(E_{0}) \Delta \widehat{V}_{0} \right| \mathbf{k} \right\rangle.$$

В итоге существуют две поправки второго порядка к энергии:  $\Delta E_c$ , связанная с отличием потенциала от среднего по различным конфигурациям расположения ядер, и  $\Delta E_0$ , связанная с отличием среднего по конфигурациям потенциала от среднего по объему

$$E = \frac{k^2}{2m} = E_0 + i\eta - V_0 - \Delta E_0 - \Delta E_c.$$
 (25)

Потенциал  $\Delta V_0({f r})$  периодичен и может быть представлен разложением

$$\Delta V_0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g} \neq 0} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} U_{\mathbf{g}},$$

где  $\mathbf{g}$  — вектор обратной решетки. Подставляя это разложение в (24), получаем

$$\Delta E_0 = \sum_{\mathbf{g}\mathbf{g'}} U_{\mathbf{g}} U_{\mathbf{g'}} \langle \mathbf{k} | e^{i\mathbf{g'r}} G_0(E_0) e^{i\mathbf{gr}} | \mathbf{k} \rangle.$$

Для большого кристалла с объемом  $\Omega \to \infty$  при чисто действительном  $\Delta V_0({\bf r})$  (т.е. при  $b_1=0$ ) имеем

$$\Delta E_0 = \sum_{\mathbf{g} \neq 0} |U_{\mathbf{g}}|^2 \left( E_0 - \frac{(\mathbf{g} + \mathbf{k})^2}{2m} + i\eta \right)^{-1}. (26)$$

Одноволновое приближение применимо, если  $E_0 \neq (\mathbf{k} + \mathbf{g})^2/(2m)$ , поэтому  $i\eta$  в (26) можно опустить; в результате  $\Delta E_0$  является действительным и не приводит к затуханию нейтронной волны.

В случае прохождения нейтронов через пластину конечной толщины D вычисления показывают,

что 
$${\rm Im}\Delta E_0 \sim {V_0^2 \over m k_0^2} {1 \over D k_0}$$
. Порождаемое этим сдви-

гом затухание волновой функции в кристалле равно  $\exp{(-D\Delta k)}$ , где  $D\Delta k \sim Dk_0 {\rm Im} E_0/E_0 \sim V_0^2/E_0^2$ , что пренебрежимо мало для тепловых нейтронов.

Сумма в (26) расходится при  $\varepsilon \to 0$ , поскольку при этом  $U_{\bf g} = \frac{2\pi b_1 c}{m\Omega_0} \tilde{\delta}_{\varepsilon} \left( {\bf g} \right) \to \frac{2\pi b_1 c}{m\Omega_0}$  и не зависит от  ${\bf g}$ . Здесь  $\tilde{\delta}_{\varepsilon} \left( {\bf g} \right) = \int d^3 r \delta_{\varepsilon} \left( {\bf r} \right) \exp (-i {\bf g} {\bf r})$ . Конечное в этом пределе выражение получится, если произвести следующее преобразование:

$$\Delta E_0 = \sum_{\mathbf{g} \neq 0} \frac{|U_{\mathbf{g}}|^2}{E_0 - (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2 / 2m} = (27)$$

$$= \left(\sum_{\mathbf{g} \neq 0} -\frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d^3 g P\right) \times \frac{|U_{\mathbf{g}}|^2}{E_0 - (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2 / 2m} + \Delta E_0'(\varepsilon).$$

Здесь  $\int d^3 g P$  понимается как интеграл в смысле главного значения, а

$$\Delta E_0'(\varepsilon) = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \times$$

$$\times \int d^3g P \frac{|U_{\mathbf{g}}|^2}{E_0 - (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2 / 2m} =$$

$$= \frac{1}{\Omega_0} \int d^3r d^3r' V_{\varepsilon}(r) V_{\varepsilon}(r') \times$$

$$\times \int \frac{d^3g}{(2\pi)^3} P \frac{\exp[i\mathbf{g}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]}{E_0 - (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2 / 2m} =$$

$$= -\frac{m}{2\pi\Omega_0} \int d^3r d^3r' V_{\varepsilon}(r) V_{\varepsilon}(r') \frac{\cos(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} =$$

$$= -\frac{2\pi b^2 c^2}{m\Omega_0} \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} \left(1 + O(k^2 \varepsilon^2)\right).$$
(28)

Здесь в последнем равенстве использовано соотношение (10). Видно, что  $\Delta E_0'(\varepsilon)/V_0 \sim b/\varepsilon$ , и, в

соответствии с общим правилом работы с псевдопотенциалом Ферми, этот вклад должен быть отброшен как нефизический. Т.е. в рассматриваемом приближении и для статической среды  $\Delta E_0'(\varepsilon) = 0$ . В (28), как и в (26), (27), принято, что Imb=0.

## 4. ВКЛАД КОЛЕБАНИЙ СРЕДЫ

Вывод о том, что энергетическое слагаемое (28) не должно учитываться, правилен для рассеяния на неподвижных ядрах. Однако при анализе динамической дифракции с учетом тепловых колебаний гамильтониан (16) должен быть усреднен по состоянию кристалла. При этом

$$V_{\varepsilon}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \to V_{T}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) =$$

$$= \langle V_{\varepsilon}(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{u}_{\mathbf{R}}) \rangle_{T} = \frac{2\pi b}{m} \delta_{\varepsilon_{T}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}),$$

$$\varepsilon_{T} = \sqrt{\varepsilon^{2} + \varepsilon_{u}^{2}}, \quad \varepsilon_{u}^{2} = \frac{1}{3} \langle \mathbf{u}_{\mathbf{R}}^{2} \rangle_{T}.$$
(29)

Здесь  $\mathbf{u_R}$  — смещение ядра из его среднего положения в узле  $\mathbf{R}$ , а усреднение  $\langle \cdots \rangle_T$  производится по равновесному распределению колебаний в кристалле. При выводе формулы (29) учтено, что в гармоническом приближении распределение смещений — гауссово [9], т.е.  $\langle \delta(\mathbf{r}-\mathbf{u_R}) \rangle_T = \delta_{\varepsilon_u}(\mathbf{r})$ . Фурье-образ этой функции дает фактор Дебая—Валлера в теории упругого однократного рассеяния.

Известно, что даже амплитуда нулевых колебаний соизмерима с атомными масштабами [9] и много больше, чем типичные значения амплитуды рассеяния f. Поэтому в формуле (28) с  $\varepsilon \to \varepsilon_T = \sqrt{\varepsilon^2 + \varepsilon_u^2}$  уже возможен переход к пределу  $\varepsilon \to 0$ . При этом остается  $\varepsilon_T = \varepsilon_u$ , а радиус псевдопотенциала  $\varepsilon$  исключается из всех связанных с (28) величин.

В этой ситуации соотношение (28) с  $\Delta E_0'(\varepsilon = \varepsilon_T = \varepsilon_u)$  дает реальный ненулевой вклад в  $\Delta E_0$  и в динамику нейтрона. Отметим, что этот вклад  $\sim (b/\varepsilon_u)V_0$  и он существенно больше, чем первый член в (27), который имеет порядок  $\sim (b/\Omega_0^{1/3})V_0$ .

Обычно в теории неупругого рассеяния усреднение производится по начальной волновой функции рассеивающего объекта. При этом дальнейшему усреднению по гиббсову ансамблю состояний кристалла подлежат уже непосредственно наблюдаемые величины, такие, например, как поток нейтронов. Такой подход тоже приведет к появлению

вклада  $\sim \frac{b^2c^2}{m\Omega_0\varepsilon_T}$  в энергетических параметрах (и в законе дисперсии  $k(E_0)$ ), но возможно отличие в численных коэффициентах. Мы в данной работе

применяем своеобразную "эргодическую гипотезу", согласно которой эту двухступенчатую процедуру заменяем прямым усреднением гамильтониана (16) по ансамблю состояний кристалла. Степень ее адекватности следует выяснить в последующих исследованиях. В настоящий момент существенно, что в предшествующих работах по нейтрон-

ной оптике влияние вклада  $\sim \frac{b^2c^2}{m\Omega_0\varepsilon_T}$  было совсем не отражено, тогда как, например для кристаллов, меньший первый член из (27) фактически содержится уже в уравнении (25) статьи Голдбергера и Зейтца [11]. В целом в данном вопросе мы сталкиваемся с неформализованной проблемой об оптимальном выборе проекционного оператора Накаджима—Цванцига P при выводе кинетических уравнений для физических подсистем (в нашем случае для подсистемы нейтрона в системе нейтрон + кристалл). В общем случае, если существенная часть  $\rho_1$  матрицы плотности, достаточная для описания кинетики подсистемы, определяется соотношением  $\rho_1 = P\rho$ , где  $\rho$  — матрица плотности всей системы с гамильтонианом  $H_S$ , то кинетика подсистемы описывается уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{1} = -iPLP\rho_{1} -$$

$$-\int_{0}^{t} d\tau PL\bar{P}\exp\left(-iL\bar{P}L\bar{P}\tau\right)\bar{P}LP\rho_{1}(t-\tau) =$$

$$= -i\hat{\Omega}\rho_{1} - \int_{0}^{t} d\tau \hat{M}(\tau)\rho_{1}(t-\tau).$$
(30)

Здесь, как обычно (см., например, [23, 24]), исполь-

зован супероператор L, определенный соотношением  $LF = [H_S, F]$  , где F - обычный квантовомеханический оператор, а  $\bar{P} = 1 - P$ . Наша процедура усреднения гамильтониана (16) по ансамблю состояний кристалла соответствует, например, проектору  $P\rho = \rho_T \text{Tr}_T \rho$ , где след вычисляется по состояниям кристалла, а  $\rho_T-$  его гиббсово равновесное распределение. При этом матрица частот  $\hat{\Omega}$  описывает нейтронную оптику, причем  $\hat{\Omega}
ho_1 =$  $=\left[H_0+\left\langle \widehat{V}
ight
angle_T,
ho_1
ight]$ . Ядро памяти  $\hat{M}( au)$  учитывает все прочие процессы, среди которых наиболее изучено некогерентное рассеяние фононами [1, 20], которое выводит нейтроны из интерференции с начальным пучком. Естественно, что ядро памяти влияет и на нейтронную оптику, например, через учет выбывания нейтронов из первичного пучка. Аналогичную роль имеют матрица частот и релаксационный супероператор в кинетических уравнениях Линдблада, контуры соответствующей теории для нейтронной оптики строились в работе [25].

# 5. ПОПРАВКИ К ЭНЕРГИИ НЕЙТРОНА В СРЕДЕ

Таким образом, с учетом колебаний среды

$$\Delta E_0 = \lim_{\mathbf{g}_m \to \infty} \left( \sum_{\mathbf{g} \neq 0} -\frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d^3 g P \right) \times \left| U_{\mathbf{g}} \right|^2 + \Delta F' \left( c \right)$$

$$\times \vartheta \left( g < g_m \right) \frac{\left| U_{\mathbf{g}} \right|^2}{E_0 - \left( \mathbf{g} + \mathbf{k} \right)^2 / 2m} + \Delta E_0' \left( \varepsilon_u \right).$$

Теперь при любом конечном  $g_m$  можно выполнить переход к  $\varepsilon=0$  и в первом слагаемом из (27). В итоге

$$\Delta E_0 = \left(\frac{2\pi bc}{m\Omega_0}\right)^2 \times \tag{31}$$

$$\times \lim_{\mathbf{g}_m \to \infty} \left(\sum_{\mathbf{g} \neq 0} -\frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d^3 g P\right) \times$$

$$\times \vartheta \left(g < g_m\right) \frac{1}{E_0 - (\mathbf{g} + \mathbf{k})^2 / 2m} - \frac{2\pi b^2 c^2}{m\Omega_0} \frac{1}{\varepsilon_u \sqrt{\pi}}.$$

В этом выражении мы уже сняли ограничение  $b=b_1$ , использованное выше для упрощения обсуждения формулы (26).

Отметим, что в аморфной среде, т.е. в пределе, когда  $c \to 0, \, c/\Omega_0 = {\rm const},$  получается, что  $\Delta E_0 = 0$ 

С точностью до квадратичных по псевдопотенциалу членов включительно

$$\Delta E_c = \Omega_0^2 \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}' \in \Omega} W(\mathbf{R}, \mathbf{R}') M_T(\mathbf{R}, \mathbf{R}'), \quad (32)$$

где, как и в (31), мы учли колебания среды заменой (29). При этом

$$M\left(\mathbf{R}, \mathbf{R}'\right) \to M_T\left(\mathbf{R}, \mathbf{R}'\right) =$$

$$= \left\langle \mathbf{k} \middle| \widehat{V}_T(\mathbf{R}) G_0(E_0) \widehat{V}_T(\mathbf{R}') \middle| \mathbf{k} \right\rangle =$$

$$= \exp\left(i\mathbf{k}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')\right) \frac{1}{Z} \int d^3r d^3r' \exp\left(i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\right) \times$$

$$\times V_T(r) G_0\left(\mathbf{R} + \mathbf{r} - \mathbf{R}' - \mathbf{r}'\right) V_T(r').$$
(33)

Если  $\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'$ , то можно пренебречь изменением  $G_0\left(\mathbf{R}+\mathbf{r}-\mathbf{R}'-\mathbf{r}'\right)$  на масштабе  $\varepsilon_u$  радиуса псевдопотенциала, и

$$M_T(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = -\frac{2\pi b^2}{mZ} \frac{\exp(ik |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|)}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} \times \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')).$$

Если  $\mathbf{R} = \mathbf{R}'$ , то интеграл уже был вычислен ранее (см. (7), (9)–(11)),

$$M_T(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = -e^{-2\mathbf{R} \operatorname{Im} \mathbf{k}} \frac{2\pi}{mZ} f^{(2)} =$$

$$= -e^{-2\mathbf{R}\mathrm{Im}\mathbf{k}}\frac{2\pi}{mZ}\left(\frac{b^2}{\varepsilon_u\sqrt{\pi}} + ikb^2\right).$$

В итоге, используя (17) и (32), получаем

$$\Delta E_c = \Delta E_c^{(0)} + \Delta E_c^{(1)},$$
 (34)

$$\Delta E_c^{(0)} = -\Omega_0^2 \sum_{\mathbf{R} \in \Omega} W(\mathbf{R}, \mathbf{R}') e^{-2\mathbf{R} \text{Im} \mathbf{k}} \times (35)$$

$$\times \frac{2\pi}{mZ} \left( \frac{b^2}{\varepsilon \sqrt{\pi}} + ikb^2 \right) =$$

$$= -c(1-c) \frac{2\pi}{m\Omega_0} \left( \frac{b^2}{\varepsilon \sqrt{\pi}} + ikb^2 \right),$$

$$\Delta E_c^{(1)} = \frac{2\pi b^2 c^2}{mZ} \sum_{\mathbf{P}, \mathbf{P}, c, c} (1 - \delta_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}) \times \tag{36}$$

$$\times \chi \left( \mathbf{R}, \mathbf{R}' \right) \frac{\exp \left( ik \left| \mathbf{R} - \mathbf{R}' \right| \right)}{\left| \mathbf{R} - \mathbf{R}' \right|} \exp \left( i\mathbf{k} \left( \mathbf{R} - \mathbf{R}' \right) \right).$$

В случае рассеяния на аморфном образце, толщина которого существенно больше радиуса корреляции функции  $\chi$  ( $\mathbf{R},\mathbf{R}'$ ), соотношение (36) совпадает с корреляционной поправкой Лэкса—Сирса [16, 17].

#### 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное исследование показывает, что для применения в естественных задачах рассеяния низкоэнергетических нейтронов псевдопотенциал должен строиться так, чтобы выполнение оптической теоремы при рассеянии на изолированном рассеивателе происходило не в первом, а во втором порядке теории возмущений. При этом обеспечивается возможность последовательного расчета более сложных процессов динамической дифракции на больших рассеивающих системах.

Полученные соотношения (25), (31) и (34)—(36) дают достаточно общее решение для поведения нейтронной волны в образце. Они показывают, что в случае идеального кристалла (т.е. при c=1, когда  $W\left(\mathbf{R},\mathbf{R}'\right)=0$ ) длина упругого рассеяния Reb не дает вклад в ImE и, соответственно, в коэффициент прохождения нейтронов. В случае аморфной среды без корреляций  $W\left(\mathbf{R},\mathbf{R}'\right)=n\delta\left(\mathbf{R}-\mathbf{R}'\right)$  и, в главном приближении по ReE, получается  $E=E_0+i\eta-V_0+i2\pi nkb^2/m$ , что приводит к классическому результату (3). При наличии же корреляций следует применять более общие формулы (25), (31) и (34)—(36).

В целом проведенное исследование показывает, что для дальнейшего повышения точности предсказаний в нейтронной оптике необходимо более обстоятельное исследование на основе кинетического уравнения (30) или его аналогов.

Благодарим за полезные обсуждения Л.Н. Богданову, А. Д. Гулько, Б.Л. Иоффе, Б.О. Кербикова, В.В. Федорова и А.И. Франка.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. И. И. Гуревич, Л. В. Тарасов, *Физика нейтронов* низких энергий (Наука, Москва, 1965).
- 2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механи-ка* (Наука, Москва, 1989).
- 3. А. Абрагам, М. Гольдман, Ядерный магнетизм: порядок и беспорядок (Мир, Москва, 1984), т. 2.
- 4. A. L. Barabanov and S. T. Belyaev, Eur. Phys. J. B **15**, 59 (2000).
- 5. В. В. Федоров, *Нейтронная физика* (Изд-во ПИЯФ, Санкт-Петербург, 2004).
- 6. M. Utsuro and V. K. Ignatovich, *Handbook of Neutron Optics* (Wiley-VCH Verlag, 2010).
- 7. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, Нейтронные исследования конденсированных сред (НИЯУ МИФИ. Москва. 2012).
- 8. E. Fermi, Ricerca Sci. 2, 13 (1936).
- 9. Дж. Займан, Принципы теории твердого тела (Мир, Москва, 1974).
- 10. О. Маделунг, *Теория твердого тела* (Наука, Москва, 1980).
- M. L. Goldberger and F. Seitz, Phys. Rev. 71, 294 (1947).

- M. D. Whitacker and H. G. Beyer, Phys. Rev. 55, 1101 (1939).
- 13. L. J. Rainwater, W. W. Havens, Jr., J. R. Dunning, and C. S. Wu, Phys. Rev. **73**, 733 (1948).
- 14. V. F. Sears, Phys. Rep. 82, 1 (1982).
- 15. H. Rauch and S. A. Werner, *Neutron Interferometry* (Oxford Univ. Press, 2015).
- 16. M. Lax, Phys. Rev. 85, 621 (1952).
- 17. V. F. Sears, Phys. B 151, 156 (1988).
- 18. H. Ekstein, Phys. Rev. 83, 721 (1951).
- 19. G. V. Kulin, A. N. Strepetov, A. I. Frank, P. Geltenbort, S. V. Goryunov, M. Jentschel, and D. V. Kustov, Phys. Lett. A **378**, 2553 (2014).
- 20. А. Ахиезер, И. Померанчук, *Некоторые вопросы теории ядра* (Гос. изд-во тех.-теор. лит., Москва—Ленинград, 1950).
- 21. Ф. С. Джепаров, Д. В. Львов, Письма в ЖЭТФ 72, 518 (2000) [JETP Lett. 72, 360 (2000)].
- 22. Н. Марч, У. Янг, С. Сампантхар, Проблема многих тел в квантовой механике (Мир, Москва, 1969).
- 23. Д. Форстер, Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции (Атомиздат, Москва, 1980).
- F. S. Dzheparov and D. V. Lvov, Appl. Magn. Reson. 48, 989 (2017).
- 25. L. Lanz and B. Vacchini, Phys. Rev. A **56**, 4826 (1997).

# CORRECTION OF THE FERMI PSEUDOPOTENTIAL CONCEPT IN THE THEORY OF DYNAMIC SCATTERING OF THERMAL NEUTRONS

F. S. Dzheparov<sup>1),2)</sup>, D. V. Lvov<sup>1),2)</sup>

1) NRC "Kurchatov Institute" — ITEP, Moscow, Russia
2) National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute),
Moscow, Russia

The passage of thermal neutrons through a crystal or disordered medium is considered. The necessity of changing the standard concept of the Fermi pseudopotential to obtain a uniform description of the interference effects in crystalline and amorphous media is revealed. It is shown that a pseudopotential, which correctly reproduces the amplitude of scattering at one center in the second order of perturbation theory, leads to satisfactory results. General relations have been obtained that describe the passage of a neutron wave at arbitrary degree of orderliness of matter.