

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

99-80

P14-99-80

В.В.Скадоров, С.И.Тютюнников

ЭЛЕКТРОДИНАМИКА  
КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКИХ СРЕД

1999

Рассматривается взаимодействие электромагнитных полей с квазипериодическими средами. Под квазипериодическими средами понимаются среды, которые могут быть получены некоторой гладкой деформацией сред с идеальной периодической структурой. Получены уравнения, описывающие динамическую дифракцию электромагнитных полей на таких средах. Из первых принципов получен тензор поляризуемости деформированных кристаллов. Получена простая формула для коэффициента отражения Брэгга для рентгеновских квантов от изогнутого брэгговского зеркала. Рассмотрена фокусировка рентгеновских квантов изогнутым брэгговским зеркалом.

Работа выполнена в Лаборатории физики частиц ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1999

### Перевод авторов

Skadorov V.V., Tiutiunnikov S.I.  
Electrodynamics of Quasiperiodic Media

P14-99-80

We consider the interaction of electromagnetic fields with quasiperiodic media. Under quasiperiodic media we understands the media, which can produced under the smooth deformation of media with ideal periodic structure. There are equations which describe the dynamic diffraction of electromagnetic fields on these media. The polarizability tensor of deformed crystals is obtained from the first principles. We've got simple formula for X-ray Brag reflection coefficient of curved Brag mirrors. Considered focusing X-ray by curved Brag mirrors.

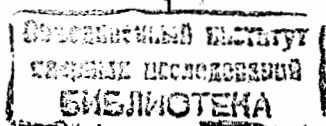
The investigation has been performed at the Laboratory of Particle Physics, JINR.

## Введение

Квазипериодическими средами мы будем называть среды, которые могут быть получены некоторой гладкой деформацией сред с идеальной периодической структурой. В общем случае под словом "гладкая деформация" будем понимать взаимно однозначное и гладкое отображение рассматриваемой среды на среду с идеальной периодической структурой. Вовсе не обязательно, чтобы такая среда с идеальной периодической структурой существовала в реальности. Достаточно, чтобы такая среда существовала как идеальный математический объект.

Основная цель предлагаемой работы - показать, что если квазипериодическую среду рассматривать как римановое многообразие с фундаментальным метрическим тензором  $g_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + 2\epsilon_{\alpha\beta}$ , где  $\delta_{\alpha\beta}$  - символ Кронекера, а  $\epsilon_{\alpha\beta}$  - тензор деформации, то электродинамика квазипериодических сред является по существу электродинамикой сред с идеальной периодической структурой, с её богатейшим арсеналом методов описания взаимодействия электромагнитного поля со средой. Для того чтобы пояснить это утверждение, напомним, что в механике сплошных сред существуют два метода описания процесса деформации: метод Эйлера и метод Лагранжа. В методе Эйлера система координат совпадает с системой отсчёта наблюдателя. В методе Лагранжа система координат "вморожена" в среду и в процессе деформации среды координатные линии деформируются вместе со средой. Следует особо подчеркнуть, что если в системе координат Эйлера координаты некоторой выбранной точки среды изменяются в течение процесса деформации, то в лагранжевой системе координат координаты этой точки остаются неизменными. В частности, координаты узлов решётки Браве среды с идеальной периодической структурой как определялись набором из трёх целых чисел  $n = \{n_1, n_2, n_3\}$  до начала процесса деформации, так и будут определяться этим набором как во время процесса деформации, так и после окончания этого процесса. Следовательно, в лагранжевой системе координат решётка Браве деформированной (квазипериодической) среды будет выглядеть так же, как решётка Браве среды с идеальной периодической структурой в системе координат Эйлера. Необходимо только помнить, что в лагранжевой системе координат область, занятая квазипериодической средой, является римановым многообразием с фундаментальным метрическим тензором, который меняется от точки к точке.

Приведём несколько примеров, для которых при описании взаимодействия электромагнитного поля со средами может быть использован развитый в настоящей работе формализм. В общем случае даже совершенные кристаллы можно отнести скорее к квазипериодическим средам, чем к средам с идеальной периодической структурой - всегда присутствуют хотя бы температурные поля деформаций. Электродинамика полупроводников с классическими и квантовыми сверхрешётками при необходимости учёта полей деформаций, которые всегда присутствуют в таких структурах, также может быть отнесена к электродинамике квазипериодических сред. В настоящее время публикуется большое количество работ по электродинамике карбоновых нанотрубок. В основном рассматриваются идеально прямые нанотрубки с идеальной периодической структурой. В реальности всегда присутствует та или иная деформация (изгиб) нанотрубки. Электродинамику таких нанотрубок, а тем более электродинамику ансамбля нанотрубок в некоторой матрице с полным основанием



можно отнести к электродинамике квазипериодических сред. В сильно легированных полупроводниках конфигурация (расположение) примесей и дефектов является случайной и поле деформаций, создаваемое статистическим ансамблем примесей и дефектов, также является случайным полем. Тогда проблему взаимодействия электромагнитного поля с такой средой можно решать, пользуясь методами оптики рассеивающих сред, в которой тензор поляризуемости (тензор диэлектрической проницаемости) разбивается на два слагаемых, где первое слагаемое является тензором поляризуемости среды, усреднённым по случайному ансамблю примесей и дефектов сильно легированного полупроводника, а второе учитывает флуктуации конфигурации примесей возле среднего значения и описывает рассеяние электромагнитного поля этими флуктуациями. Если считать усреднённое по статистическому ансамблю примесей поле деформаций гладким векторным полем, то электродинамика среды с тензором поляризуемости, усреднённым по ансамблю примесей и дефектов, является электродинамикой квазипериодической среды.

Последним примером, который мы здесь приведём, является рентгеновская дифракционная оптика упруго деформированных совершенных кристаллов, которые очевидным образом подпадают под приведенное выше определение квазипериодических сред. С точки зрения общей электродинамики рентгеновская дифракционная оптика относится к области геометрической оптики в её самом простом варианте. Единственное усложнение возникает из-за динамической дифракции - внутри кристалла появляются несколько связанных волн. Несмотря на то, что изогнутое брэгговское зеркало является одним из самых важных элементов почти любой рентгенооптической схемы, нам не известны работы, следуя которым можно было бы корректно описать динамическую дифракцию рентгеновского излучения на упруго деформированных кристаллах. Начатая работами [1-3] и продолжающаяся по сей день (см. библиографию в [4]) серия статей, претендующая на описание двухволновой динамической дифракции на упруго деформированных кристаллах, основана на двух базисных предположениях:

1) связь между вектором поляризации  $\vec{P}(\vec{r}, \omega)$  и электрическим вектором  $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$  в рентгеновском диапазоне частот локальна  $\vec{P}(\vec{r}, \omega) = \chi^d(\vec{r}; \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega)$ ;

2) поляризуемость  $\chi^d(\vec{r}; \omega)$  упруго деформированного кристалла в рентгеновском диапазоне частот определяется соотношением  $\chi^d(\vec{r}; \omega) = \chi(\vec{r} - \vec{y}(\vec{r}), \omega)$ , где  $\chi(\vec{r}, \omega)$  - поляризуемость идеального кристалла, а  $\vec{y}(\vec{r})$  - поле деформаций кристалла.

Приведенное ниже соотношение (30) для тензора поляризуемости деформированного кристалла в рентгеновском диапазоне частот, полученное из первых принципов совместным решением уравнений Максвелла и уравнения фон Неймана для матрицы плотности деформированного кристалла, позволяет утверждать, что первые два предположения, лежащие в основе этой серии работ, являются неверными. Кроме того, в этих работах, а также в работах [5], совершенно не различаются два вышеупомянутых способа описания деформации кристалла (эйлеров и лагранжевы методы) и игнорируется тот факт, что в лагранжевой системе координат деформированный кристалл является римановым многообразием с фундаментальным метрическим тензором, который меняется от точки к точке кристалла. Такое игнорирование приводит к парадоксальному утверждению, что в эксперименте по простому прохождению рентгеновских лучей (кристалл выведен из условий дифракции) через кристалл принципиально нельзя различить совершенный и

деформированный кристаллы, что противоречит как повседневной практике применения рентгеновских лучей, так и общей электродинамике - деформированный кристалл является неоднородной средой, в которой показатели преломления и поглощения зависят от координат.

Первый раздел этой работы, посвящённый электродинамике сред с идеальной периодической структурой, является вспомогательным. Так как среда с периодической структурой является средой с пространственной дисперсией и связь между вектором поляризации и электрическим вектором не локальна, то волновое уравнение является интегродифференциальным уравнением, с которым достаточно трудно работать. Для сред с идеальной периодической структурой в этом случае обычно переходят в  $(\mathbf{k}, \omega)$ -представление, в котором интегродифференциальное волновое уравнение заменяется системой алгебраических уравнений. Из дисперсионного уравнения находят собственные моды среды и получают все принципиальные результаты электродинамики сред с идеальной периодической структурой. Такой алгоритм почти не поддаётся обобщению на квазипериодические среды, поэтому в первом разделе мы излагаем, на первый взгляд кажущийся громоздким и неудобным, малоизвестный метод, который позволяет заменить интегродифференциальное волновое уравнение эквивалентной ему системой дифференциальных уравнений, которая и описывает динамическую дифракцию электромагнитного поля на средах с идеальной периодической структурой. Этот метод уже естественно обобщается на квазипериодические среды.

Второй раздел посвящён электродинамике квазипериодических сред. Переход в лагранжеву систему координат позволяет почти без изменений перенести формализм, развитый в первом разделе для сред с идеальной периодической структурой, на квазипериодические среды (конечно, с учётом того обстоятельства, что в лагранжевой системе координат квазипериодическая среда является римановым многообразием).

В третьем разделе мы из первых принципов совместным решением уравнений Максвелла и уравнения фон Неймана для матрицы плотности кристалла получаем тензор поляризуемости деформированного кристалла в рентгеновском диапазоне частот. Здесь следует подчеркнуть, что, если игнорировать зависимость фактора Дебая-Валлера от координат, то фурье-компоненты тензора поляризуемости деформированного кристалла по форме совпадают с фурье-компонентами тензора поляризуемости совершенного кристалла только в лагранжевой системе координат. В системе наблюдателя (в эйлеровой системе координат) эти компоненты становятся чрезвычайно сложными функциями координат.

В четвёртом разделе мы получаем уравнения двухволновой дифракции для рентгеновского излучения на деформированных кристаллах, показываем, что из этих уравнений после ряда упрощающих приближений можно получить систему уравнений Такаги-Тайпина [1-2], которые оказываются применимыми только для деформаций кристаллов со средним радиусом кривизны более 40м.

Наконец, в последнем, пятом разделе мы, используя принцип локальности геометрической оптики, предлагаем простую формулу для коэффициента отражения Брэгга от изогнутого брэгговского зеркала и рассматриваем фокусировку рентгеновских квантов этим зеркалом.

# 1. Среды с идеальной периодической структурой

Вначале рассмотрим взаимодействие электромагнитного поля со средами с идеальной периодической структурой. Начнём с уравнений Максвелла

$$\begin{aligned} \text{rot} \vec{E}(\vec{r}, t) &= -\frac{1}{c} \partial_t \vec{H}(\vec{r}, t), \\ \text{rot} \vec{H}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{c} \partial_t \vec{E}(\vec{r}, t) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{r}, t) + \frac{4\pi}{c} \vec{j}^{(e)}(\vec{r}, t), \\ \text{div} \vec{E}(\vec{r}, t) &= 4\pi \rho(\vec{r}, t) + 4\pi \rho^{(e)}(\vec{r}, t), \\ \text{div} \vec{H}(\vec{r}, t) &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  и  $\rho(\vec{r}, t)$  - плотность тока и заряда, индуцированные электромагнитным полем в среде,  $\vec{j}^{(e)}(\vec{r}, t)$  и  $\rho^{(e)}(\vec{r}, t)$  - внешние по отношению к среде плотность тока и заряда. Плотность тока  $\vec{j}(\vec{r}, t) = Sp(\vec{j}(\vec{r})\hat{\rho}(t))$ , индуцированная в среде электромагнитным полем, где  $\vec{j}(\vec{r})$  - оператор плотности тока, а  $\hat{\rho}(t)$  - матрица плотности среды, определяемая совместным решением уравнений Максвелла и уравнением фон Неймана для матрицы плотности [6], в линейном приближении связана с электрическим вектором  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  соотношением

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d^3\vec{r}' \hat{\sigma}(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') \vec{E}(\vec{r}', t').$$

Тензор проводимости  $\hat{\sigma}(\vec{r}, \vec{r}'; t, t')$  для стационарных сред удовлетворяет соотношению  $\hat{\sigma}(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') = \hat{\sigma}(\vec{r}, \vec{r}'; t - t')$ . Из первых двух уравнений (1) в  $\omega$ -представлении получаем

$$\text{rotrot} \vec{E}(\vec{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}, \omega) + \frac{4\pi\omega i}{c^2} \int d^3\vec{r}' \hat{\sigma}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) \vec{E}(\vec{r}', \omega) + \frac{4\pi\omega i}{c^2} \vec{j}^{(e)}(\vec{r}, \omega),$$

где  $\chi = \frac{\omega}{c}$  - волновое число. Тензор поляризуемости среды связан с тензором проводимости соотношением  $\hat{\chi}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = \frac{4\pi i}{\omega} \hat{\sigma}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega)$ . Тогда имеем

$$\text{rotrot} \vec{E}(\vec{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\vec{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \int d^3\vec{r}' \hat{\chi}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) \vec{E}(\vec{r}', \omega) + \frac{4\pi\omega i}{c^2} \vec{j}^{(e)}(\vec{r}, \omega) \quad (2)$$

Для идеальных периодических сред в силу трансляционной инвариантности имеет место равенство

$$\hat{\chi}(\vec{r}, \vec{r}'; \omega) = \hat{\chi}(\vec{r} + \vec{R}_n, \vec{r}' + \vec{R}_n; \omega) = \hat{\chi}(\vec{r} - \vec{r}', \vec{r}'; \omega) = \sum_{\vec{l}} \hat{\chi}^l(\vec{r} - \vec{r}'; \omega) \exp\{-i\langle \vec{\tau}(\vec{l}), \vec{r}' \rangle\}, \quad (3)$$

где  $\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$  - вектор решётки Браве,  $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ ,  $\mathbf{l} = (l_1, l_2, l_3)$  - тройки целых чисел,  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  - базисные периоды среды,  $\vec{\tau}(\mathbf{l}) = l_1 \vec{b}_1 + l_2 \vec{b}_2 + l_3 \vec{b}_3$  - векторы обратной решётки,  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  - базисные векторы обратной решётки.

Вначале рассмотрим ситуацию, когда длина волны падающего на среду электромагнитного поля - порядка линейного размера элементарной ячейки среды. Если на среду падает электромагнитное поле с несущим волновым вектором  $\vec{k}$ , то

естественно искать поле в среде в следующем виде:

$$\vec{E}(\vec{r}, \omega) = \sum_{\vec{l}} \vec{E}_l(\vec{r}, \omega) e^{i(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}))\vec{r}}, \quad (4)$$

где амплитуды  $\vec{E}_l(\vec{r}, \omega)$  медленно меняются в области с линейными размерами меньше, чем длина волны падающего на среду электромагнитного поля, и  $(\vec{k})^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$ . Подставляя (3)-(4) в (2), получим

$$\sum_{\vec{l}} e^{i\vec{r}(\vec{l})\vec{r}} \{ \hat{L}[(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l})), \nabla] \vec{E}_l(\vec{r}, \omega) + k^2 \sum_{\vec{l}'} \int d^3\vec{r}' \hat{\chi}^l(\vec{r}', \omega) e^{-i(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}))\vec{r}'} \vec{E}_{l'}(\vec{r}' - \vec{r}', \omega) \} = 0, \quad (5)$$

где мы положили  $\vec{j}^{(e)}(\vec{r}, \omega) = 0$ , а дифференциальный оператор  $\hat{L}[(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l})), \nabla]$  определяется формулой

$$\hat{L}[(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l})), \nabla] = -\text{rotrot} + 2i[(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l})) \cdot \nabla] - i[(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l})) \otimes \nabla + \nabla \otimes (\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}))] + [(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l})) \otimes (\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}))] - k^2 \alpha_{(l)},$$

где  $\alpha_{(l)} = \frac{(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}))^2 - k^2}{k^2}$  - параметр отклонения от точного условия Брэгга.

Раскладывая амплитуду  $\vec{E}_{l+1}(\vec{r} - \vec{r}', \omega)$  в ряд Тэйлора  $\vec{E}_{l+1}(\vec{r} - \vec{r}', \omega) = \vec{E}_{l+1}(\vec{r}, \omega) - x^i \frac{\partial \vec{E}_{l+1}(\vec{r}, \omega)}{\partial x^i} + \frac{1}{2} x^i x^j \frac{\partial^2 \vec{E}_{l+1}(\vec{r}, \omega)}{\partial x^i \partial x^j} + \dots$  и подставляя это разложение в интеграл в выражении (5), получим

$$\int d^3\vec{r}' \hat{\chi}^l(\vec{r}', \omega) e^{-i(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}))\vec{r}'} \vec{E}_{l+1}(\vec{r} - \vec{r}', \omega) = \hat{\chi}^l(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}), \omega) \vec{E}_{l+1}(\vec{r}, \omega) + i \frac{\partial}{\partial k_i} \hat{\chi}^l(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}), \omega) \frac{\partial \vec{E}_{l+1}(\vec{r}, \omega)}{\partial x^i} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial k_i \partial k_j} \hat{\chi}^l(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}), \omega) \frac{\partial^2 \vec{E}_{l+1}(\vec{r}, \omega)}{\partial x^i \partial x^j} + \dots$$

Так как  $\chi'_{\alpha, \beta} = O(\frac{1}{k^2})$ , то  $\frac{\partial \chi'_{\alpha, \beta}}{\partial k_i} / \chi'_{\alpha, \beta} = O(\frac{1}{k})$  и, начиная с частот инфракрасного

диапазона,  $\frac{\partial \chi'_{\alpha, \beta}}{\partial k_i} = o(\chi'_{\alpha, \beta})$ . Тогда с учётом того, что амплитуды  $\vec{E}_{l+1}(\vec{r}, \omega)$  слабо меняются в области с линейными размерами порядка длины волны, в последнем выражении можно пренебречь всеми слагаемыми, кроме первого. Следовательно, интегриродифференциальное уравнение (5) с хорошей точностью аппроксимируется уравнением

$$\sum_{\vec{l}} e^{i\vec{r}(\vec{l})\vec{r}} \{ \hat{L}[(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l})), \nabla] \vec{E}_l(\vec{r}, \omega) + k^2 \sum_{\vec{l}'} \hat{\chi}^l(\vec{k} + \vec{\tau}(\vec{l}), \omega) \vec{E}_{l'}(\vec{r}, \omega) \} = 0. \quad (6)$$

Пусть  $\vec{r}_0$  - радиус-вектор центра элементарной ячейки среды, в которую попадает точка с радиус-вектором  $\vec{r}$ . Тогда  $\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{\eta}$ . Умножим последнее уравнение на  $e^{-i\vec{r}(\vec{l})\vec{r}}$  и проинтегрируем по объёму этой элементарной ячейки

$$\sum_{l'} e^{i(\vec{r}(l') - \vec{r}(l)) \cdot \vec{\eta}} \left\{ \int_{\Omega} e^{i(\vec{r}(l') - \vec{r}(l)) \cdot \vec{\eta}} \hat{L}[(\vec{k} + \vec{\tau}(l')), \nabla] \vec{E}_{l'}(\vec{r}_0 + \vec{\eta}, \omega) d^3 \vec{\eta} + k^2 \sum_{l''} \hat{\chi}^{l''}(\vec{k} + \vec{\tau}(l'), \omega) \int_{\Omega} e^{i(\vec{r}(l') - \vec{r}(l)) \cdot \vec{\eta}} \vec{E}_{l''}(\vec{r}_0 + \vec{\eta}, \omega) d^3 \vec{\eta} \right\} = 0.$$

Как уже упоминалось выше, величины  $\hat{L}[(\vec{k} + \vec{\tau}(l')), \nabla] \vec{E}_{l'}(\vec{r}_0 + \vec{\eta}, \omega)$  и  $\vec{E}_{l''}(\vec{r}_0 + \vec{\eta}, \omega)$  можно считать постоянными в области с линейными размерами порядка длины волны, которая здесь по условию является величиной порядка линейных размеров элементарной ячейки среды, поэтому их можно вынести из под знака интеграла. Так как

$$\int_{\Omega} e^{i(\vec{r}(l') - \vec{r}(l)) \cdot \vec{\eta}} d^3 \vec{\eta} = \Omega \delta_{l'l'},$$

то уравнение (6) эквивалентно системе уравнений

$$\hat{L}[(\vec{k} + \vec{\tau}(l)), \nabla] \vec{E}_l(\vec{r}, \omega) + k^2 \sum_{l'} \hat{\chi}^{l'}(\vec{k} + \vec{\tau}(l), \omega) \vec{E}_{l'}(\vec{r}, \omega) = 0, \quad (7)$$

которая вместе с формулой (4) описывает динамическую дифракцию электромагнитного поля на средах с идеальной периодической структурой.

В ситуации, когда длины волн намного больше, чем линейные размеры элементарной ячейки среды, обычно рассматриваются электромагнитные поля, усреднённые по элементарному объёму. После такого усреднения идеальная периодическая среда может рассматриваться как пространственно однородная среда, для которой связь вектора поляризации с электрическим вектором определяется соотношением  $\vec{P}_{avg}(\vec{r}, \omega) = \hat{\chi}_{avg} \vec{E}_{avg}(\vec{r}, \omega)$ , где  $\hat{\chi}_{avg}$  - тензор поляризуемости, описывающий линейный отклик среды на усреднённые по элементарному объёму электромагнитные поля. Для того чтобы найти связь между средним тензором поляризуемости  $\hat{\chi}_{avg}$  и микроскопическим тензором поляризуемости (3), используем процедуру усреднения, разработанную для искусственных диэлектриков в [7]. Следуя этому алгоритму, нетрудно для  $\hat{\chi}_{avg}(\vec{k}; \omega)$  получить формулу

$$\hat{\chi}_{avg}(\vec{k}; \omega) = \hat{\chi}^0(\vec{k}; \omega) \frac{1}{1 + \hat{N} \hat{\chi}^0(\vec{k}; \omega)}, \quad (8)$$

Тензор  $\hat{N}$  определяется формулой

$$\hat{N} = \lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{R}_m} (\text{grad div} + \chi^2) \int_{\Omega} d^3 \vec{\eta}' \frac{e^{-i\chi |\vec{r} - \vec{R}_m - \vec{\eta}'|}}{|\vec{r} - \vec{R}_m - \vec{\eta}'|} \varphi(\vec{\eta}') \approx \lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{R}_m} \text{grad div} \int_{\Omega} d^3 \vec{\eta}' \frac{\varphi(\vec{\eta}')}{|\vec{r} - \vec{R}_m - \vec{\eta}'|} \quad (9)$$

и зависит только от геометрии элементарной ячейки среды. Функция  $\varphi(\vec{\eta})$  является чётной функцией координат и для элементарных ячеек с центром симметрии

определяется своими моментами

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3 \vec{\eta} \varphi(\vec{\eta}) = 1, \quad \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3 \vec{\eta} \eta^i \varphi(\vec{\eta}) = 0, \quad \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3 \vec{\eta} \eta^i \eta^j \varphi(\vec{\eta}) = \delta^{ij}, \dots \quad (9a)$$

Тензор  $\hat{N}$  вычислен почти для всех видов элементарных ячеек [7].

## 2. Среда с квазипериодической структурой

Основным элементом, на который опиралась процедура вывода уравнений (7)-(8) электродинамики сред с идеальной периодической структурой, является соотношение (3), т.е. инвариантность тензора поляризуемости среды относительно трансляции на вектор решётки Браве среды. При деформации среды эта инвариантность нарушается и алгоритм вывода уравнений, использованный выше, перестаёт работать. Для того чтобы обойти эту трудность, напомним, что в механике сплошных сред, в рамках которой будем рассматривать деформацию, существуют два метода описания процесса деформаций: метод Эйлера и метод Лагранжа. В методе Эйлера система координат совпадает с системой отсчёта наблюдателя. В методе Лагранжа система координат "вморожена" в среду и в процессе деформации среды координатные линии деформируются вместе со средой. Следует особо подчеркнуть, что если в системе координат Эйлера координаты некоторой выбранной точки среды изменяются в течение процесса деформации, то в лагранжевой системе координат координаты этой точки остаются неизменными. В частности, если в качестве координатных орт выбрать единичные векторы  $\vec{e}_i = \frac{\vec{a}_i}{a_i}$ ,  $i = 1, 2, 3$ , где  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  - базисные периоды среды, то координаты узлов решётки Браве как определялись набором из трёх чисел  $(n_1 a_1, n_2 a_2, n_3 a_3)$  до начала процесса деформации, так и будут определяться этим набором как во время процесса деформации, так и после окончания этого процесса. Следовательно, в лагранжевой системе координат решётка Браве деформированной среды будет выглядеть так же, как решётка Браве среды с идеальной периодической структурой в системе координат Эйлера. Если для лагранжевых координат ввести обозначения  $\xi = (\xi^1, \xi^2, \xi^3)$ , то связь между эйлеровыми и лагранжевыми координатами определяется формулой

$$x^i = \xi^i + u^i(\xi^1, \xi^2, \xi^3); \quad i = 1, 2, 3, \quad (10)$$

где  $u^i(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$  - компоненты поля деформаций.

Тогда, как уже упоминалось выше, координаты узлов решётки Браве деформированной среды в лагранжевой системе координат определяются выражением  $\xi_n = (n_1 a_1, n_2 a_2, n_3 a_3)$ . Коль скоро решётка Браве деформированной среды в лагранжевой системе координат подобна решётке Браве среды с идеальной периодической структурой, то следует ожидать, что для тензора поляризуемости деформированной среды имеет место соотношение



$$\hat{\chi}(\xi, \xi'; \omega) = \hat{\chi}(\xi + \xi_n, \xi' + \xi_n; \omega) = \hat{\chi}(\xi - \xi', \xi'; \omega) = \sum_1 \hat{\chi}^1(\xi - \xi'; \omega) \exp\{-i\langle \vec{\tau}^{(0)}, \xi' \rangle\}, \quad (11)$$

где  $\vec{\tau}^{(0)} = (\frac{2\pi l_1}{a_1}, \frac{2\pi l_2}{a_2}, \frac{2\pi l_3}{a_3})$  - ковектор обратной решетки в лагранжевой системе координат. Компоненты этого ковектора в эйлеровой системе координат определяются выражением  $\tau_i^{(0)}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \xi_j}{\partial x^i} \frac{2\pi l_j}{a_j}$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Особо следует подчеркнуть, что с математической точки зрения деформированная среда является римановым многообразием с фундаментальным метрическим тензором

$$g_{ij}(\xi^1, \xi^2, \xi^3) = g_{ij}^0 + 2\varepsilon_{ij}(\xi^1, \xi^2, \xi^3), \quad (12)$$

где  $\varepsilon_{ij}(\xi^1, \xi^2, \xi^3)$  - тензор деформации среды:

$$\varepsilon_{ij}(\xi^1, \xi^2, \xi^3) = \frac{1}{2}(g_{ik}^0 \frac{\partial u^k}{\partial \xi^j} + g_{jk}^0 \frac{\partial u^k}{\partial \xi^i} + g_{ik}^0 \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} \frac{\partial u^k}{\partial \xi^l}). \quad (12a)$$

Здесь  $g_{ij}^0 = (\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j)$  - метрический тензор элементарной ячейки среды с идеальной периодической структурой. Тогда формула (10) определяет диффеоморфизм риманового многообразия на карту, которой в нашей ситуации является среда с идеальной периодической структурой. Это замечание позволяет нам рассматривать среды, которые вовсе не обязательно получены деформированием среды с идеальной периодической структурой. Для того чтобы имело место соотношение (11), необходимо и достаточно, чтобы существовало взаимоднозначное гладкое отображение (10) исследуемой среды на среду с идеальной периодической структурой. Такие среды мы будем называть средами с квазипериодической структурой.

Волновое уравнение (2) для сред с квазипериодической структурой в лагранжевой системе координат принимает следующий вид:

$$[e_n(\xi) \otimes g^{kh} \frac{\partial}{\partial \xi^k} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi^l} \sqrt{g} e^l(\xi) - \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi^l} \sqrt{g} g^{kl} \frac{\partial}{\partial \xi^k}] \vec{E}(\xi, \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\xi, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_1 \int d^3 \xi' \sqrt{|g(\xi')|} \hat{\chi}^1(\xi - \xi'; \omega) e^{-i\tau_i(\xi) \xi^i} \vec{E}(\xi', \omega) + \frac{4\pi\omega i}{c^2} \vec{j}^{(e)}(\xi, \omega), \quad (13)$$

где  $g^{ij}(\xi)$  - тензор, обратный метрическому тензору  $g_{ij}(\xi)$ , определенному формулой (12) ( $g^{ij}(\xi)g_{jk}(\xi) = \delta_i^k$ );  $g(\xi) = \det \|g_{ij}(\xi)\|$  - якобиан перехода от эйлеровых к лагранжевым координатам, и по повторяющимся индексам предполагается суммирование (правило Эйнштейна). Если на квазипериодическую среду падает электромагнитное поле с несущим волновым вектором  $\vec{k}$  ( $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$ ) и длиной волны  $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$  порядка линейных размеров элементарной ячейки, то естественно искать электромагнитное поле в среде в виде разложения

$$\vec{E}(\xi, \omega) = \sum_1 \vec{E}_1(\xi, \omega) e^{i(k_i + \tau_i^{(0)})\xi^i + ik_u u^u(\xi)}, \quad (14)$$

где  $k_i$  - компоненты волнового вектора  $\vec{k}$  в эйлеровой системе координат. Следует особо подчеркнуть, что это разложение в отличие от (4) не является разложением по квазиплоским волнам, так как фазы  $\Phi_1(\vec{k}, \xi) = \Phi_1(\vec{k}, \vec{r}) = (k_i + \tau_i^{(0)})\xi^i + k_j u^j(\xi) = k_j x^j + \frac{\partial \xi_j(\vec{r})}{\partial x^i} \tau_j^{(0)} \xi^i(\vec{r})$  являются сложными функциями координат как в лагранжевой, так и в эйлеровой системах координат.

Полагая в (13)  $\vec{j}^{(e)}(\xi, \omega) = 0$  и подставляя (14) в (13), получим

$$\sum_1 \{ e^{i(k_i(\xi) + \tau_i^{(0)})\xi^i} [-e_n(\xi) \otimes \hat{L}_i^1(\mathbf{k}(\xi) + \tau^{(0)}, \frac{\partial}{\partial \xi}) e^i(\xi) + \hat{L}(\mathbf{k}(\xi) + \tau^{(0)}, \frac{\partial}{\partial \xi}) + k^2] \vec{E}_1(\xi, \omega) + k^2 \sum_1 \int d^3 \xi' \sqrt{|g(\xi - \xi')|} \hat{\chi}^1(\xi' - \xi; \omega) e^{i(k_i + \tau_i^{(0)})\xi^i - i(k_i + \tau_i^{(0)})\xi'^i} \vec{E}_{1+1}'(\xi - \xi', \omega) \} = 0, \quad (15)$$

где  $k_i(\xi) = k_i + k_j \frac{\partial u^j(\xi)}{\partial \xi^i}$  - компоненты волнового вектора  $\vec{k}$  в лагранжевой системе координат,  $\mathbf{k}(\xi) + \tau^{(0)} = (k_1(\xi) + \tau_1^{(0)}, k_2(\xi) + \tau_2^{(0)}, k_3(\xi) + \tau_3^{(0)})$ ,  $\frac{\partial}{\partial \xi} = (\frac{\partial}{\partial \xi^1}, \frac{\partial}{\partial \xi^2}, \frac{\partial}{\partial \xi^3})$  и дифференциальные операторы  $\hat{L}_i^1(\mathbf{k}(\xi) + \tau^{(0)}, \frac{\partial}{\partial \xi})$ ,  $\hat{L}(\mathbf{k}(\xi) + \tau^{(0)}, \frac{\partial}{\partial \xi})$  определяются формулами

$$\hat{L}_i^1(\mathbf{k}(\xi) + \tau^{(0)}, \frac{\partial}{\partial \xi}) = g^{hj} \{ \frac{\partial}{\partial \xi^j} + i[k_j(\xi) + \tau_j^{(0)}] \} \frac{1}{\sqrt{g}} \{ \frac{\partial}{\partial \xi^i} + i[k_i(\xi) + \tau_i^{(0)}] \} \sqrt{g} \quad (15a)$$

$$\hat{L}(\mathbf{k}(\xi) + \tau^{(0)}, \frac{\partial}{\partial \xi}) = \frac{1}{\sqrt{g}} \{ \frac{\partial}{\partial \xi^i} + i[k_i(\xi) + \tau_i^{(0)}] \} \sqrt{g} g^{hj} \{ \frac{\partial}{\partial \xi^j} + i[k_j(\xi) + \tau_j^{(0)}] \}.$$

Рассмотрим интеграл в (15). Выше уже отмечалось, что  $\hat{\chi}^1(\vec{k}; \omega)$  пропорциональна амплитуде рассеяния электромагнитного поля элементарной ячейкой среды. Тогда  $\hat{\chi}^1(\xi'; \omega)$ , как функция  $\xi'$ , быстро падает на расстояниях больших, чем линейные размеры элементарной ячейки среды. Это замечание означает, что в разложении  $u^i(\xi - \xi') = u^i(\xi) + \xi^j \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} + \dots$  можно оставить в интеграле уравнения (15) только первое слагаемое и вторые слагаемые. Тогда имеем:

$$\int d^3\xi' \sqrt{|g(\xi - \xi')|} \hat{\chi}'(\xi'; \omega) e^{-i\mathbf{k}(\xi) \cdot \tau(\xi')} \vec{E}_{\mathbf{H}1}'(\xi - \xi', \omega) = \\ \sqrt{|g(\xi)|} \hat{\chi}'(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0); \omega) \vec{E}_{\mathbf{H}1}'(\xi, \omega) + \\ + i \sqrt{|g(\xi)|} \frac{\partial}{\partial k_i} \hat{\chi}'(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0); \omega) \frac{\partial \vec{E}_{\mathbf{H}1}'(\xi, \omega)}{\partial \xi^i} + \\ + i \frac{\partial \sqrt{|g(\xi)|}}{\partial \xi^i} \frac{\partial}{\partial k_i} \hat{\chi}'(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0); \omega) \vec{E}_{\mathbf{H}1}'(\xi, \omega) + \dots$$

Следовательно, интегродифференциальное уравнение (15) с хорошей точностью аппроксимируется дифференциальным уравнением

$$\sum_I \{ e^{i\tau^0 \xi^i} \{ [-e_h(\xi) \otimes \hat{L}_I^h(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0), \frac{\partial}{\partial \xi}) e'(\xi) + \hat{L}(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0), \frac{\partial}{\partial \xi}) + k^2] \vec{E}_I(\xi, \omega) + \\ + k^2 \sum_I \sqrt{|g(\xi)|} \hat{\chi}'(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0); \omega) \vec{E}_{\mathbf{H}1}'(\xi, \omega) \} = 0.$$

Совершенно так же, как и для сред с идеальной периодической структурой, доказывается, что это уравнение эквивалентно системе дифференциальных уравнений

$$[-e_h(\xi) \otimes \hat{L}_I^h(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0), \frac{\partial}{\partial \xi}) e'(\xi) + \hat{L}(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0), \frac{\partial}{\partial \xi}) + k^2] \vec{E}_I(\xi, \omega) + \\ + k^2 \sum_I \sqrt{|g(\xi)|} \hat{\chi}'(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0); \omega) \vec{E}_{\mathbf{H}1}'(\xi, \omega) = 0, \quad (16)$$

описывающей динамическую дифракцию электромагнитного поля на средах с квазипериодической структурой. Дифференциальные операторы  $\hat{L}_I^h(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0), \frac{\partial}{\partial \xi})$ ,  $\hat{L}(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0), \frac{\partial}{\partial \xi})$  определены формулами (15а).

Если длина волны падающего на квазипериодическую среду электромагнитного поля намного больше, чем линейные размеры элементарной ячейки среды, то процедура усреднения электромагнитного поля по элементарному объёму квазипериодической среды в лагранжевой системе координат идентична процедуре усреднения для сред с идеальной периодической структурой и приводит к соотношению

$$\hat{\chi}^{avg}(\xi, \mathbf{k}(\xi); \omega) = \sqrt{|g(\xi)|} \hat{\chi}^0(\mathbf{k}(\xi); \omega) \frac{1}{1 + \sqrt{|g(\xi)|} \hat{N}(\xi) \hat{\chi}^0(\mathbf{k}(\xi); \omega)}. \quad (17)$$

Тензор деполаризации  $\hat{N}(\xi)$  определяется формулой

$$\hat{N}(\xi) = \lim_{\xi \rightarrow \xi'} e_h(\xi) \otimes \hat{L}_I^h(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0), \frac{\partial}{\partial \xi}) \times \\ \times \int_{\Omega} d^3\eta \sqrt{|g(\xi' + \eta)|} \frac{e^{-i\mathbf{k}(\xi - \xi' + \vec{u}(\xi) - \vec{u}(\xi' + \eta))}}{|\xi - \xi' + \vec{u}(\xi) - \vec{u}(\xi' + \eta) - \eta|} \varphi(\eta) e'(\xi) \approx \\ \lim_{\xi \rightarrow \xi'} e_h(\xi) \otimes \hat{L}_I^h(\mathbf{k}(\xi) + \tau(0), \frac{\partial}{\partial \xi}) \int_{\Omega} d^3\eta \sqrt{|g(\xi' + \eta)|} \frac{\varphi(\eta)}{|\xi - \xi' + \vec{u}(\xi) - \vec{u}(\xi' + \eta) - \eta|} e'(\xi), \quad (18)$$

где интегрирование проводится по элементарной ячейке среды с идеальной периодической структурой, а функция  $\varphi(\eta)$  определена соотношениями (9а). Соотношения (17-18) вместе с уравнением

$$[e_h(\xi) \otimes g^{kh} \frac{\partial}{\partial \xi^k} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi^i} \sqrt{g} e'(\xi) - \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi^i} \sqrt{g} g^{kl} \frac{\partial}{\partial \xi^k} \vec{E}(\xi, \omega) = \\ = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}(\xi, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \hat{\chi}^{avg}(\xi, \mathbf{k}(\xi); \omega) \vec{E}(\xi, \omega) + \frac{4\pi\omega i}{c^2} \vec{j}^{(e)}(\xi, \omega) \quad (19)$$

определяют электродинамику квазипериодической среды в этой области частот.

### 3. Тензор поляризуемости упруго деформированных кристаллов для рентгеновского излучения

После того как получены основные уравнения электродинамики квазипериодических сред, в этом разделе совместным решением уравнений Максвелла и уравнения фон Неймана для матрицы плотности получим тензор поляризуемости для важного класса квазипериодических сред - деформированных кристаллов. В силу того, что линейные размеры элементарной ячейки кристаллов порядка нескольких ангстрем, мы попадаем в рентгеновский диапазон частот. Раз деформированный кристалл согласно обсуждению, проведенному в предыдущем разделе, в лагранжевой системе координат подобен идеальному кристаллу, то имеет смысл проводить вычисление тензора поляризуемости именно в лагранжевой системе координат.

Плотность тока, индуцированная рентгеновскими квантами в электронной подсистеме кристалла в точке с координатами  $\xi = (\xi^1, \xi^2, \xi^3)$ , определяется соотношением  $j^\beta(\xi, t) = \langle j^\beta(\xi, t) \rangle = Sp(j^\beta(\xi, t) \hat{\rho}(t))$ ,  $\beta = 1, 2, 3$ , где  $\hat{\rho}(t)$  - матрица плотности кристалла,  $j^\beta(\xi, t) = \sum_s j^\beta(\xi - \xi_s, t)$  -  $\beta$ -я компонента оператора плотности тока электронной подсистемы - суммирование ведётся по всем электронам кристалла. Из уравнения Дирака в нерелятивистском приближении можно получить оператор плотности тока  $j^\beta(\xi - \xi_s, t)$  электрона [8]:

$$j^\beta(\xi - \xi_s, t) = -\frac{e^2}{mc} \hat{n}(\xi - \xi_s) A^\beta(\xi, t) + j^\beta(\xi - \xi_s), \quad (20)$$

$$j^\beta(\xi - \xi_s) = e [g^{\beta\mu} + \frac{i}{2} g^{\beta k} g^{\mu l} \epsilon_{kl\gamma} \sigma^\gamma] [\delta(\xi - \xi_s) \frac{\hat{p}_\mu}{2m} + \frac{\hat{p}_\mu}{2m} \delta(\xi - \xi_s)].$$

Здесь величина  $-\frac{e^2}{mc} \hat{n}(\xi - \xi_s) A^\beta(\xi, t)$  является потенциальной (рэлеевской) частью оператора тока, где  $\hat{n}(\xi - \xi_s) = \delta(\xi - \xi_s)$  - оператор плотности  $s$ -го электрона,  $A^\beta(\xi, t)$



$\beta$ -ая компонента вектора-потенциала электромагнитного поля;  $j^\beta(\xi - \xi_s)$  - сумма операторов тока резонансного и магнитного переходов,  $\varepsilon_{kl\gamma}$  - антисимметричный тензор ( $\varepsilon_{123} = 1$ ),  $\hat{p}_\mu = -i\hbar\nabla_\mu$  - оператор импульса в лагранжевых координатах ( $\nabla_\mu$  - ковариантная производная),  $\sigma^\gamma, \gamma = 1, 2, 3$  - матрицы Паули.

Уравнение фон Неймана для матрицы плотности кристалла, взаимодействующего с полем рентгеновского излучения, в представлении взаимодействия имеет следующий вид

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t), \hat{\rho}(t)] \quad (21)$$

$$\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t) = e^{\pm i\hat{H}_0 t} \hat{H}_{\sigma\gamma}(t) e^{-\pm i\hat{H}_0 t},$$

где  $\hat{H}_{\sigma\gamma}(t)$  - гамильтониан взаимодействия рентгеновских квантов с кристаллом

$$\hat{H}_{\sigma\gamma}(t) = -\frac{1}{c} \int d^3\xi \sqrt{g(\xi)} j_\beta(\xi, t) A^\beta(\xi, t),$$

$\hat{H}_0$  - гамильтониан кристалла в отсутствие рентгеновских квантов. Решение уравнения фон Неймана будем искать по теории возмущений, т.е. в виде ряда  $\hat{\rho}(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \hat{\rho}^{(k)}(t)$ , где  $\hat{\rho}^{(k)}(t) \sim (\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t))^k \sim (E)^k$  пропорциональна  $k$ -й степени поля рентгеновского излучения. Подставляя этот ряд в (21) и приравнявая члены одного порядка по  $\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t)$ , получим

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}^{(k)}(t)}{\partial t} = [\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t), \hat{\rho}^{(k-1)}(t)].$$

В отсутствие рентгеновских квантов  $\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t) = 0$  и  $\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = 0$ , т.е.  $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0$ , где  $\hat{\rho}_0$  матрица плотности кристалла в отсутствие внешних полей. Чаще всего полагают, что  $\hat{\rho}_0$  - равновесная (гиббсовская) матрица плотности  $\hat{\rho}_0 = e^{-\frac{F-\hat{H}_0}{kT}}$ , где  $F$  - свободная энергия, а  $T$  - температура кристалла. Решение уравнения фон Неймана для матрицы плотности можно представить в следующем виде:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n [\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t_1), [\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t_2), \dots, [\hat{H}'_{\sigma\gamma}(t_n), \hat{\rho}_0] \dots]].$$

Тогда среднее значение оператора плотности тока в представлении взаимодействия можно получить из формулы

$$j^\beta(\xi, t) = Sp(e^{\pm i\hat{H}_0 t} j^\beta(\xi, t) e^{-\pm i\hat{H}_0 t} \hat{\rho}(t)) = Sp(j_H^\beta(\xi, t) \hat{\rho}_0),$$

где  $j_H^\beta(\xi, t)$  - оператор тока в представлении Гайзенберга, определяемый соотношением

$$j_H^\beta(\xi, t) = e^{\pm i\hat{H}_0 t} j^\beta(\xi, t) e^{-\pm i\hat{H}_0 t} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(i\hbar)^n} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n [\dots [e^{\pm i\hat{H}_0 t} j^\beta(\xi, t) e^{-\pm i\hat{H}_0 t}, \hat{H}'_{\sigma\gamma}(t_1)], \dots, \hat{H}'_{\sigma\gamma}(t_n)].$$

В приведенных выше формулах подразумевается, что моменты времени упорядочены:  $t_n \leq t_{n-1} \leq \dots \leq t_1 \leq t$ .

В линейном по полю рентгеновских квантов приближении из этих соотношений следует

$$j^\beta(\xi, t) = -\frac{e^2}{mc} \sum_s Sp(e^{\pm i\hat{H}_0 t} \hat{n}(\xi - \xi_s) e^{-\pm i\hat{H}_0 t} \hat{\rho}_0) A^\beta(\xi, t) + \frac{i}{\hbar c} \sum_s \sum_{s'} \int_{-\infty}^t dt_1 \int d^3\xi' \sqrt{g(\xi')} \{ Sp[e^{\pm i\hat{H}_0(t-t_1)} j^\beta(\xi - \xi_s) e^{-\pm i\hat{H}_0(t-t_1)} j_\mu(\xi' - \xi_{s'}) \hat{\rho}_0] - Sp j_\mu(\xi' - \xi_{s'}) e^{\pm i\hat{H}_0(t-t_1)} j^\beta(\xi - \xi_s) e^{-\pm i\hat{H}_0(t-t_1)} \hat{\rho}_0 \} A^\mu(\xi', t_1),$$

где суммирование проводится по всем электронам кристалла. Запишем координаты  $s$ -го электрона в следующем виде:  $\xi_s = \xi_n + \xi_l + \xi_k + \eta(\mathbf{n}, l)$ , где  $\xi_n$  - координаты элементарной ячейки кристалла, которой принадлежит  $s$ -ый электрон,  $\xi_l$  - координаты  $l$ -го атома относительного узла элементарной ячейки,  $\xi_k$  - координаты электрона относительно  $l$ -го атома и, наконец,  $\eta(\mathbf{n}, l)$  - координаты смещения  $l$ -го атома от своего положения равновесия в результате теплового движения. Тогда сумму  $\sum_s$  по всем электронам кристалла можно записать как  $\sum_s = \sum_n \sum_l \sum_k$ , а плотность тока, индуцированную рентгеновскими квантами в кристалле,

$$j^\beta(\xi, t) = -\frac{e^2}{mc} \sum_n \sum_l Sp(e^{\pm i\hat{H}_0 t} \hat{n}_l(\xi - \xi_n - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) e^{-\pm i\hat{H}_0 t} \hat{\rho}_0) A^\beta(\xi, t) + \frac{i}{\hbar c} \sum_n \sum_l \int_0^\infty dt' \int d^3\xi' \sqrt{g(\xi')} \{ Sp[e^{\pm i\hat{H}_0 t'} j_l^\beta(\xi - \xi_n - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) e^{-\pm i\hat{H}_0 t'} j_{l,\mu}(\xi' - \xi_n - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) \hat{\rho}_0] - Sp[j_{l,\mu}(\xi' - \xi_n - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) e^{\pm i\hat{H}_0 t'} j_l^\beta(\xi - \xi_n - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) e^{-\pm i\hat{H}_0 t'} \hat{\rho}_0] \} A^\mu(\xi', t - t').$$

Здесь  $\hat{n}_l(\xi - \xi_n - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) = \sum_k \hat{n}(\xi - \xi_n - \xi_l - \xi_k - \eta(\mathbf{n}, l))$  - оператор плотности электронов в  $l$ -ом атоме элементарной ячейки кристалла, а  $j_l^\beta(\xi - \xi_n - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) = \sum_k j^\beta(\xi - \xi_n - \xi_l - \xi_k - \eta(\mathbf{n}, l))$  - оператор плотности тока  $l$ -го атома.

Следует отметить, что в этом выражении для тока мы опустили слагаемые типа  $Sp\{[j_l^\beta(\mathbf{n}, t'), j_{l',\mu}(\mathbf{n}', 0)] \hat{\rho}_0\}$ ,  $\mathbf{n} \neq \mathbf{n}'$  или  $l \neq l'$ , которые описывают безрадиационную миграцию возбуждения от  $l$ -го к  $l'$ -ому атому, т.е. мы пренебрегли делокализацией экситонов в кристалле. Кроме того, мы опускаем особенности взаимодействия рентгеновских квантов с зонными электронами в кристалле, предполагая, что все электроны в кристалле локализованы на атомах, образующих кристалл. Эти приближения, принимающиеся без обсуждения почти во всех работах по рентгеновской оптике кристаллов, оправданы для ситуации, когда энергия падающих на кристалл рентгеновских квантов больше, чем энергия любого резонансного перехода в кристалле. Действительно, рассеяние рентгеновских квантов с энергией большей, чем энергия связи любого электрона в кристалле, можно рассматривать в импульсном приближении[9], с позиции которого отличим энергетического спектра

зонных электронов и электронов, локализованных вблизи ядер, можно пренебречь - важна лишь периодичность плотности электронов в кристалле. Поэтому при описании взаимодействия рентгеновских квантов этого частотного диапазона с кристаллом используется терминология, соответствующая больше изолированным атомам, периодически расположенным в пространстве, чем кристаллу. Так как нас в этой работе интересует дифракционная рентгеновская оптика, для которой обычно считается, что энергии рентгеновских квантов намного больше, чем энергия связи любого электрона в кристалле, то и мы в дальнейшем будем использовать эту терминологию. В рентгеновской спектроскопии эти приближения уже не верны, и необходимо учитывать как особенности взаимодействия рентгеновских квантов с зонными электронами, так и делокализацию экситонов, но эта тема для отдельной работы, и здесь рассматриваться не будет.

Сделанные выше замечания, позволяют записать гамильтониан кристалла  $\hat{H}_0$  в следующем виде:  $\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{n}} \sum_l \hat{H}_l + \hat{H}_{ph}$ , где  $\hat{H}_{ph}$  - гамильтониан фононной подсистемы кристалла, а  $\hat{H}_l$  - гамильтониан  $l$ -го атома в элементарной ячейке кристалла. Причём для основного состояния атома в кристалле можно пренебречь влиянием на это состояние взаимодействия с элементарными возбуждениями кристалла (в том числе и влиянием на основное состояние взаимодействия с фононами). Это приближение позволяет записать матрицу плотности кристалла  $\hat{\rho}_0$  в виде  $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_0^{(e)} \hat{\rho}_0^{(ph)}$  произведения матрицы плотности электронной подсистемы кристалла  $\hat{\rho}_0^{(e)} = e^{\beta(F^{(e)} - \sum_l \hat{H}_l)}$  и матрицы плотности фононной подсистемы кристалла  $\hat{\rho}_0^{(ph)} = e^{\beta(F^{(ph)} - \hat{H}_{ph})}$ , где  $\beta = \frac{1}{kT}$ , а  $F^{(e)}, F^{(ph)}$  - свободные энергии электронной и фононной подсистем кристалла. Влиянием взаимодействия с элементарными возбуждениями кристалла на возбуждённое состояние атомов пренебрегать уже нельзя. Учёт этих взаимодействий необходим из-за того, что они приводят к появлению новых каналов распада возбуждённого состояния атома и поэтому увеличивают  $\Gamma$  - ширину возбуждённого состояния. Следовательно, мы будем считать, что гамильтониан атома в кристалле в основном и возбуждённом состояниях различаются.

Рассмотрим вкратце, как изменяется фононный спектр кристалла под действием деформации. В гармоническом приближении гамильтониан фононной подсистемы деформированного кристалла в лагранжевых координатах принимает следующий вид:

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{n}} \sum_l \left\{ g^{\alpha\beta}(\mathbf{n}, l) \frac{p_{\alpha}(\mathbf{n}, l) p_{\beta}(\mathbf{n}, l)}{M_l} + \sum_{\mathbf{n}'} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{n}, \mathbf{n}'; l, l') \eta^{\alpha}(\mathbf{n}, l) \eta^{\beta}(\mathbf{n}', l') \right\}, \quad (22)$$

где  $p_{\alpha}(\mathbf{n}, l)$  -  $\alpha$ -я компонента коектора импульса  $l$ -го атома в  $\mathbf{n}$ -ой ячейке в лагранжевых координатах (в квантовой механике  $p_{\alpha}(\mathbf{n}, l) = -i\hbar \nabla_{\alpha}$ , где  $\nabla_{\alpha}$  - ковариантная производная). Будем полагать тензор деформации в области с линейными размерами порядка линейных размеров элементарной ячейки величиной постоянной. Тогда  $g^{\alpha\beta}(\mathbf{n}, l) = \delta^{\alpha\beta} + \varepsilon^{\alpha\beta}(\mathbf{n}, l) \approx g^{\alpha\beta}(\mathbf{n})$ , и если принять  $\eta^{\alpha}(\mathbf{n}, l) = \frac{B^{\alpha}(\mathbf{n}, l)}{\sqrt{M_l}} e^{-i\omega l}$ , то канонические уравнения Гамильтона приводят к уравнению для  $B^{\alpha}(\mathbf{n}, l)$ :

$$\omega^2 B^{\alpha}(\mathbf{n}, l) = g^{\alpha\beta}(\mathbf{n}) \sum_{\mathbf{n}'} \sum_{l'} D_{\alpha\beta}(\mathbf{n}, \mathbf{n}'; l, l') B^{\beta}(\mathbf{n}', l'),$$

где  $D_{\alpha\beta}(\mathbf{n}, \mathbf{n}'; l, l') = \frac{\Phi_{\alpha\beta}(\mathbf{n}, \mathbf{n}'; l, l')}{\sqrt{M_l M_{l'}}} = D_{\alpha\beta}(\mathbf{n} - \mathbf{n}'; l, l')$  - динамическая матрица кристалла в лагранжевых координатах. Запишем это уравнение в следующем виде:

$$\omega^2 B^{\alpha}(\mathbf{n}, l) = (\delta^{\alpha\beta} + \varepsilon^{\alpha\beta}) \sum_{\mathbf{n}'} \sum_{l'} D_{\alpha\beta}(\mathbf{n} - \mathbf{n}'; l, l') B^{\beta}(\mathbf{n}', l'),$$

и будем рассматривать тензор деформации  $\varepsilon^{\alpha\beta}$  как некоторый параметр. Тогда инвариантность гамильтониана (22) относительно трансляции на  $\xi_{\mathbf{n}_0}$  позволяет нам записать  $B^{\beta}(\mathbf{n}', l'; \hat{\varepsilon}) = e^{-ik \cdot \xi(\mathbf{n} - \mathbf{n}')} B^{\beta}(\mathbf{n}, l'; \hat{\varepsilon})$ , что приводит нас к уравнению

$$\omega^2 B^{\alpha}(\mathbf{n}, l; \hat{\varepsilon}) = (\delta^{\alpha\gamma} + \varepsilon^{\alpha\gamma}) \sum_{\mathbf{q}} D_{\gamma\beta}(\mathbf{q}; l, l') B^{\beta}(\mathbf{n}, l'; \hat{\varepsilon}),$$

где  $D_{\gamma\beta}(\mathbf{q}; l, l') = \sum_{\mathbf{n}} D_{\gamma\beta}(\mathbf{n}; l, l') e^{-iq \cdot \xi(\mathbf{n})}$  - динамическая матрица кристаллической решётки в представлении Фурье. Отсюда немедленно получаем дисперсионное уравнение

$$\det \left\| \omega^2 \delta^{\alpha\beta} \delta_{ll'} - \delta^{\alpha\gamma} \sum_{\mathbf{q}} D_{\gamma\beta}(\mathbf{q}; l, l') - \varepsilon^{\alpha\gamma} \sum_{\mathbf{q}} D_{\gamma\beta}(\mathbf{q}; l, l') \right\| = 0. \quad (23)$$

Когда скоро решётка Браве деформированного кристалла в лагранжевой системе координат совпадает с решёткой Браве идеального кристалла в эйлеровой системе координат, то матрица  $\|D_{\gamma\beta}(\mathbf{q}; l, l')\|$  совпадает с динамической матрицей идеального кристалла. Таким образом, все величины в дисперсионном уравнении (23) определены, и корни этого уравнения  $\omega_j(\mathbf{q}, \hat{\varepsilon}), j = 1, \dots, 3r$ , где  $r$  - число атомов в элементарной ячейке кристалла, являются действительными величинами, так как матрица  $\|(\delta^{\alpha\gamma} + \varepsilon^{\alpha\gamma}) D_{\gamma\beta}(\mathbf{q}; l, l')\|$  - эрмитова. В силу эрмитовости этой матрицы её собственные векторы, соответствующие этим корням, удовлетворяют условиям ортонормированности и полноты

$$\begin{aligned} \sum_j e^{*a}(\mathbf{q}, j; l; \hat{\varepsilon}) e_{\beta}(\mathbf{q}, j; l'; \hat{\varepsilon}) &= \delta_{\beta}^a \delta_{ll'}, \\ \sum_l e^{*a}(\mathbf{q}, j; l; \hat{\varepsilon}) e_a(\mathbf{q}, j'; l'; \hat{\varepsilon}) &= \delta_{jj'}, \end{aligned}$$

что позволяет нам ввести нормальные моды кристалла  $e^{\alpha}(\mathbf{q}, j; \mathbf{n}, l; \hat{\varepsilon}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{\alpha}(\mathbf{q}, j; l; \hat{\varepsilon}) e^{ik \cdot \xi(\mathbf{n})}$ , для которых имеет место

$$\sum_{q,j} e^{*a}(\mathbf{q}, j; \mathbf{n}, l; \hat{\varepsilon}) e_{\beta}(\mathbf{q}, j; \mathbf{n}', l'; \hat{\varepsilon}) = \delta_{\beta}^{\alpha} \delta_{l,l'} \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'},$$

$$\sum_{\mathbf{n}, l} e^{*a}(\mathbf{q}, j; \mathbf{n}, l; \hat{\varepsilon}) e_{\alpha}(\mathbf{q}', j'; \mathbf{n}, l; \hat{\varepsilon}) = \delta_{j,j'} \Delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'),$$

где  $\Delta(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{l}} \delta_{\mathbf{q}, \tau(\mathbf{l})}$  и  $\tau(\mathbf{l}) = (\frac{2\pi l_1}{a_1}, \frac{2\pi l_2}{a_2}, \frac{2\pi l_3}{a_3})$  - вектор обратной решётки кристалла.

Далее, стандартным способом получаем гамильтониан фононной подсистемы кристалла в гармоническом приближении

$$\hat{H}_{ph}(\varepsilon) = \sum_{q,j} \hbar \omega_j(\mathbf{q}, \hat{\varepsilon}) [b_{q,j}^{\dagger}(\hat{\varepsilon}) b_{q,j}(\hat{\varepsilon}) + \frac{1}{2}], \quad (24)$$

где  $b_{q,j}^{\dagger}(\hat{\varepsilon})$  и  $b_{q,j}(\hat{\varepsilon})$  - операторы рождения и уничтожения фононов. Нетрудно проверить, что предлагаемый алгоритм учёта влияния деформации на фононный спектр кристалл проходит и для ангармонических колебаний кристаллической решётки. В конце сделаем два замечания. Первое - в силу того, что тензор деформации  $\varepsilon^{\alpha\beta} = \varepsilon^{\alpha\beta}(\xi)$  есть гладкая функция координат, соотношения (23)-(24) являются локальными. Причём рассмотренный выше способ учёта влияния деформации на фононный спектр кристалла, конечно же, является приближением, которое можно считать достаточно точным только в том случае, когда длина свободного пробега фонона в кристалле меньше, чем линейные размеры области, в которой заметно изменение тензора деформации. Второе замечание касается того обстоятельства, что предлагаемый параметрический способ учёта деформаций на фононный спектр отнюдь не является чем-то особенно новым в физике твёрдого тела - именно такой способ является стандартным при учёте влияния деформации на энергетический спектр зонных электронов (см., например, [10]).

После проведенного выше обсуждения продолжим вычисление тока, индуцированного рентгеновскими квантами в деформированных кристаллах. Вначале рассмотрим рэлеевскую составляющую тока

$$j_{Rl}^{\beta}(\xi, t) = -\frac{e^2}{mc} \sum_{\mathbf{n}} \sum_l Sp(e^{\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{n}_l(\xi - \xi_{\mathbf{n}} - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{\rho}_0) A^{\beta}(\xi, t),$$

которая вносит основной вклад в ток, индуцированный рентгеновскими квантами в кристалле. Так как  $e^{-\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 t} \hat{\rho}_0 e^{\frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 t} = \hat{\rho}_0$  и  $\vec{E}(\xi, \omega) = \frac{i\omega}{c} \vec{A}(\xi, \omega)$  в кулоновской калибровке, то, используя фурье-разложение  $\hat{n}_l(\xi - \xi_{\mathbf{n}} - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) = \int d^3 k \hat{n}_l(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}, \xi_l} e^{-i\mathbf{k}, \xi'(\mathbf{n})} e^{-i\mathbf{k}, \xi_l} e^{-i\mathbf{k}, \eta'(\mathbf{n}, l)}$ , для рэлеевской составляющей тока получаем формулу

$$j_{Rl}^{\beta}(\xi, \omega) = \frac{ie^2}{m\omega} \int d^3 k e^{i\mathbf{k}, \xi_l} \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}, \xi'(\mathbf{n})} \sum_l e^{-i\mathbf{k}, \xi_l} Sp(\hat{n}_l(\mathbf{k}) \hat{\rho}_0^{(e)}) Sp(e^{-i\mathbf{k}, \eta'(\mathbf{n}, l)} \hat{\rho}_0^{(ph)}) E^{\beta}(\xi, \omega).$$

Величина  $Sp(e^{-i\mathbf{k}, \eta'(\mathbf{n}, l)} \hat{\rho}_0^{(ph)}) = e^{-W_l(\mathbf{k}, \xi)}$  является ничем иным как фактором Дебая - Валлера, где  $W_l(\mathbf{k}, \xi)$  определяется выражением

$$W_l(\mathbf{k}, \xi) = \frac{\hbar}{2M_l N} \sum_{q,j} \frac{|k_{\alpha} e^{\alpha}(\mathbf{q}, j; l; \hat{\varepsilon})|^2}{\omega_l(\mathbf{q}, \hat{\varepsilon})} \coth \frac{\hbar \omega_l(\mathbf{q}, \hat{\varepsilon})}{2k_B T}. \quad (25)$$

Таким образом, фактор Дебая - Валлера в деформированных кристаллах является функцией тензора деформации и, следовательно, функцией координат, которая определена соотношениями (23)-(24). Так как  $Sp(\hat{n}_l(\mathbf{k}) \hat{\rho}_0^{(e)}) = f_l(\mathbf{k})$  - формфактор  $l$ -го атома в элементарной ячейке кристалла, то стандартная формула  $\sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}, \xi'(\mathbf{n})} = N_{cell} \sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{k} - \tau(\mathbf{l}))$ , где  $N_{cell}$  - число элементарных ячеек в единице объёма, позволяет получить окончательную формулу для рэлеевской составляющей тока

$$j_{Rl}^{\beta}(\xi, \omega) = \frac{ie^2 N_{cell}}{m\omega} \sum_{\mathbf{l}} \left( \sum_{\mathbf{l}'} e^{-W_l(\tau(\mathbf{l}'), \xi)} f_l(\tau(\mathbf{l}')) e^{-i\tau(\mathbf{l}'), \xi_l} \right) e^{-i\tau(\mathbf{l}'), \xi_l} E^{\beta}(\xi, \omega)$$

или формулу для рэлеевской составляющей тензора поляризуемости деформированного кристалла в рентгеновском диапазоне частот

$$\chi_{Rl}(\xi, \xi', \omega) = -\frac{4\pi e^2 N_{cell}}{m\omega^2} \sum_{\mathbf{l}} \left( \sum_{\mathbf{l}'} e^{-W_l(\tau(\mathbf{l}'), \xi)} f_l(\tau(\mathbf{l}')) e^{-i\tau(\mathbf{l}'), \xi_l} \right) e^{-i\tau(\mathbf{l}'), \xi_l} \delta(\xi - \xi'). \quad (26)$$

В той области частот, для которой энергия рентгеновских квантов больше, чем энергия связи любого электрона в кристалле, составляющая тока, описывающая поглощение квантов атомами и последующий распад возбуждённого состояния, в который атом перешёл, поглотив квант, обычно на порядок меньше, чем рэлеевская составляющая (в рентгеновской оптике её называют дисперсионной поправкой). Тем не менее учёт этой составляющей очень важен, так как она определяет поглощение рентгеновских квантов в кристалле. Если использовать фурье-разложение  $j_{Rl}^{\beta}(\xi - \xi_{\mathbf{n}} - \xi_l - \eta(\mathbf{n}, l)) = \int d^3 k j_{Rl}^{\beta}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}, \xi_l} e^{-i\mathbf{k}, \xi'(\mathbf{n})} e^{-i\mathbf{k}, \xi_l} e^{-i\mathbf{k}, \eta'(\mathbf{n}, l)}$ , то эту составляющую тока можно записать в следующем виде:

$$j_{disp}^{\beta}(\xi, \omega) = \frac{1}{\hbar \omega} \int d^3 \xi' \sqrt{g(\xi')} \sum_{\mathbf{n}} \sum_l \int_0^{\infty} dt' \int d^3 k' \int d^3 k'' e^{i\mathbf{k}', \xi_l} e^{i\mathbf{k}'', \xi_l} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}'') \xi'(\mathbf{n})} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \xi_l} \times$$

$$\{ Sp[e^{\frac{1}{\hbar} (\hat{H}_l + \hat{H}_{ph}(\xi)) t'} e^{-i\mathbf{k}, \eta'(\mathbf{n}, l)} j_l^{\beta}(\mathbf{k}) e^{-\frac{1}{\hbar} (\hat{H}_l + \hat{H}_{ph}(\xi)) t'} j_{l,\mu}(\mathbf{k}'') e^{-i\mathbf{k}', \eta'(\mathbf{n}, l)} \rho_0^{(e)}(l) \hat{\rho}_0^{(ph)}(\xi) ] -$$

$$Sp[j_{l,\mu}(\mathbf{k}') e^{-i\mathbf{k}', \eta'(\mathbf{n}, l)} e^{\frac{1}{\hbar} (\hat{H}_l + \hat{H}_{ph}(\xi)) t'} e^{-i\mathbf{k}, \eta'(\mathbf{n}, l)} j_l^{\beta}(\mathbf{k}) e^{-\frac{1}{\hbar} (\hat{H}_l + \hat{H}_{ph}(\xi)) t'} \rho_0^{(e)}(l) \hat{\rho}_0^{(ph)}(\xi) ] \} e^{i\omega t'} E^{\beta}(\xi', \omega).$$

В том диапазоне рентгеновских частот, который мы здесь рассматриваем,  $\Gamma$  - ширина возбуждённого состояния атома в кристалле порядка  $10^{16} \frac{1}{сек}$ , поэтому в дифракционной рентгеновской оптике обычно принимают приближение  $\hat{H}_l + \hat{H}_{ph}(\xi) \approx \hat{H}_l$ , которое означает, что мы пренебрегаем влиянием рамановского рассеяния рентгеновских квантов на фононах. Если принять это приближение, то, используя стандартные формулы  $\sum_{\mathbf{n}} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \xi'(\mathbf{n})} = N_{cell} \sum_{\mathbf{l}} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}' - \tau(\mathbf{l}))$  и  $Sp(e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \eta'(\mathbf{n}, l)} \hat{\rho}_0^{(ph)}(\xi)) = e^{-W_l(\mathbf{k} + \mathbf{k}', \xi)}$ , получим для  $j_{disp}^{\beta}(\xi, \omega)$  соотношение

$$j_{disp}^{\beta}(\xi, \omega) = \frac{N_{cell}}{\hbar\omega} \sum_l e^{-W_l(\tau^0, \xi)} \sum_l e^{-i\tau_l^0 \xi_l} \int d^3\xi' \sqrt{g(\xi')} e^{-i\tau_l^0 \xi_l'} \int d^3k e^{ik(\xi' - \xi')} \frac{1}{2J_a(l) + 1} \sum_{M_a = -J_a(l)}^{J_a(l)} \sum_{\lambda(a)} \rho(\lambda(a)) \langle a(l); J_a(l), M_a | j_l^{\beta}(\mathbf{k}) \rangle \int_0^{\infty} dt' e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_l - E_a - \hbar\omega)t'} j_{l,\mu}(-\mathbf{k} - \tau^0) | a(l); J_a(l), M_a \rangle - \langle a(l); J_a(l), M_a | j_{l,\mu}(-\mathbf{k} - \tau^0) \rangle \int_0^{\infty} dt' e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_l - E_a + \hbar\omega)t'} j_l^{\beta}(\mathbf{k}) | a(l); J_a(l), M_a \rangle E^{\mu}(\xi', \omega),$$

где  $|a(l); J_a(l), M_a\rangle$  - вектор основного состояния  $l$ -го атома;  $\rho(\lambda(a))$  - статистический вес основного состояния с полным набором квантовых чисел  $\lambda(a)$ , кроме углового момента;  $E_a$  - энергия этого состояния;  $J_a(l)$  - полный угловой момент атома,  $M_a$  - его проекция на ось квантования.

Если использовать формализм развитый в [9] для описания времён жизни и распада виртуальных состояний квантовых систем для случая, когда спектр гамильтониана системы непрерывен, то получим следующую формулу:

$$\langle a(l); J_a(l), M_a | j_l^{\beta}(\mathbf{k}) \rangle \int_0^{\infty} dt' e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_l - E_a - \hbar\omega)t'} j_{l,\mu}(-\mathbf{k} - \tau^0) | a(l); J_a(l), M_a \rangle - \langle a(l); J_a(l), M_a | j_{l,\mu}(-\mathbf{k} - \tau^0) \rangle \int_0^{\infty} dt' e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_l - E_a + \hbar\omega)t'} j_l^{\beta}(\mathbf{k}) | a(l); J_a(l), M_a \rangle = \frac{\hbar}{2i} \sum_{J_b, M_b} \int \rho(E_b) dE_b \langle a(l); J_a(l), M_a | j_l^{\beta}(\mathbf{k}) | b(l); J_b(l), M_b \rangle \langle a(l); J_a(l), M_a | j_{l,\mu}(\mathbf{k} + \tau^0) | b(l); J_b(l), M_b \rangle^* \times \frac{1}{E_a + \hbar\omega - E_b + R_b^{(+)}(E_a + \hbar\omega)} + \frac{\hbar}{2i} \sum_{J_b, M_b, J_c, M_c} \int \rho(E_b) dE_b \int \rho(E_c) \delta(E_c - \hbar\omega - E_a) dE_c \times \langle a(l); J_a(l), M_a | j_l^{\beta}(\mathbf{k}) | c(l); J_c(l), M_c \rangle \langle a(l); J_a(l), M_a | j_{l,\mu}(\mathbf{k} + \tau^0) | b(l); J_b(l), M_b \rangle^* \times R_{cb}^{(+)}(E_c) \frac{1}{E_a + \hbar\omega - E_b + R_b^{(+)}(E_a + \hbar\omega)}.$$

Здесь  $\rho(E_b)$  и  $\rho(E_c)$  - плотности возбуждённых состояний атома с энергиями  $E_b$  и  $E_c$ , соответственно;  $R_b^{(+)}(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \langle b(l); J_b(l), M_b | \hat{R}(E + i\epsilon) | b(l); J_b(l), M_b \rangle = D_b(E) - iI_b(E)$  - диагональный матричный элемент оператора сдвига уровня, определяемого уравнением [9]

$$\hat{R}(E) = \hat{V}_{int} + \hat{V}_{int} \frac{1 - \hat{P}_b}{E - \hat{H}_l} \hat{R}(E),$$

где  $\hat{V}_{int}$  - гамильтониан взаимодействия  $l$ -го атома в возбуждённом состоянии с кристаллом,  $\hat{P}_b = |b(l); J_b(l), M_b\rangle \langle b(l); J_b(l), M_b|$  - оператор проектирования на состояние  $|b(l); J_b(l), M_b\rangle$ . Мнимая часть матричного элемента  $R_b^{(+)}(E)$  определяется формулой

$$\text{Im} R_b^{(+)}(E) = I_b(E) = \frac{\hbar\Gamma}{2} = \pi \sum_c \int \rho(E_c) | \langle c(l); J_c(l), M_c | \hat{R}^{(+)}(E_c) | b(l); J_b(l), M_b \rangle |^2,$$

где суммирование ведётся по всем каналам распада возбуждённого состояния атома, и является ничем иным как  $\Gamma$  - шириной возбуждённого состояния атома в кристалле. Слагаемое в правой части формулы (27), пропорциональное  $R_{cb}^{(+)}(E_a + \hbar\omega)$ , описывает влияние взаимодействия атома в возбуждённом состоянии с кристаллом и, в частности, позволяет учесть в тензоре поляризуемости кристалла такой эффект, как EXAFS. Для этого достаточно положить  $R_{cb}^{(+)}(E_c) = \langle c(l); J_c(l), M_c | \hat{V} | b(l); J_b(l), M_b \rangle$ , где  $\hat{V}$  - псевдопотенциал Watson's, который определяется соотношением [9]:

$$\hat{V} = \sum_{l' \neq l} \langle 0 | \hat{T}_{l'} | 0 \rangle + \sum_{l' \neq l} \langle 0 | \hat{T}_{l'} \frac{1 - \hat{P}_0}{\hat{d}} \hat{T}_{l'} | 0 \rangle + \dots,$$

где  $\hat{T}_{l'}$  - матрица рассеяния  $l'$ -м атомом кристалла,  $|0\rangle$  - вектор основного состояния кристалла,  $\hat{P}_0 = |0\rangle \langle 0|$  - оператор проектирования на основное состояние кристалла,  $\frac{1}{\hat{d}}$  - пропагатор (подробности см. в [9]). Здесь мы ограничимся только первым слагаемым в правой части формулы (27), так как описание вклада взаимодействия атома в возбуждённом состоянии с кристаллом в тензор поляризуемости кристалла является темой для отдельной статьи.

Для дальнейших вычислений используем мультипольное разложение оператора плотности тока атома [11,12]

$$j_l^{\beta}(\mathbf{k}) = 4\pi \sum_{L,M} (-i)^L \left\{ \frac{ck^L(L+1)}{(2L+1)!! \sqrt{L(L+1)}} \hat{E}_{L,M}(k) F_{L,M}^{(e)\beta}(\bar{\mathbf{k}}) + i \frac{ck^L(L+1)}{(2L+1)!! \sqrt{L(L+1)}} \hat{M}_{L,M}(k) F_{L,M}^{(m)\beta}(\bar{\mathbf{k}}) + \frac{k^L}{(2L+1)!!} \hat{Q}_{L,M}(k) F_{L,M}^{(ch)\beta}(\bar{\mathbf{k}}) \right\},$$

где  $L$  - мультипольность,  $-L \leq M \leq L$ ;  $\hat{E}_{L,M}(k)$ ,  $\hat{M}_{L,M}(k)$  и  $\hat{Q}_{L,M}(k)$  - операторы электрического, магнитного и зарядового мультипольных моментов атома;  $F_{L,M}^{(e,m,ch)}(\bar{\mathbf{k}})$  - шаровые векторы электрического, магнитного и зарядового типа [6,9],  $\bar{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}}{k}$  - единичный ковектор в направлении ковектора  $\mathbf{k}$ . Так как поле рентгеновских квантов в кристалле с большой точностью можно считать поперечным, то слагаемые с  $\hat{Q}_{L,M}(k)$  в этом разложении можно сразу отбросить. Магнитные мультипольные переходы в атомах на несколько порядков меньше, чем электрические мультипольные переходы, и поэтому мы ограничимся только электрическими мультиполями. Используя свойства шаровых векторов  $F_{L,M}^{(e)}(\bar{\mathbf{k}})$ , а также теоремы Вигнера - Экарта и Зигерта [11,13], получим соотношение

$$\frac{1}{2J_a + 1} \sum_{M_a, M_b} \langle a(l); J_a(l), M_a | j_l^{\beta}(\mathbf{k}) | b(l); J_b(l), M_b \rangle \langle a(l); J_a(l), M_a | j_{l,\mu}(\mathbf{k} + \tau^0) | b(l); J_b(l), M_b \rangle^* = \frac{2\pi}{(2J_a + 1)} \sum_L \left( \frac{(L+1)}{(2L+1)!! \sqrt{L(L+1)}} \right)^2 c^2 k^L (1)^L \langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(k) | b(l); J_b(l) \rangle \times \langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(k(1)) | b(l); J_b(l) \rangle^* \Pi_{\beta}^{\beta}(\bar{\mathbf{k}}, \bar{\mathbf{k}}(1); L),$$

где  $\langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(k) | b(l); J_b(l) \rangle$  и  $\langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(k(1)) | b(l); J_b(l) \rangle$  - приведенные матричные

элементы операторов зарядовых мультипольных моментов  $l$ -го атома в элементарной ячейке кристалла;  $\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{l}) = \frac{\mathbf{k} + \boldsymbol{\tau}^{(l)}}{k(l)}$  - единичный ковектор вдоль ковектора  $(\mathbf{k} + \boldsymbol{\tau}^{(l)})$ ,  $k = \sqrt{g^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta}$ ,  $k(\mathbf{l}) = \sqrt{g^{\alpha\beta} (k_\alpha + \tau_\alpha^{(l)}) (k_\beta + \tau_\beta^{(l)})}$  - длины этих ковекторов;  $\| \Pi_{\mu}^{\beta}(\bar{\mathbf{k}}, \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{l}); L) \|$  - поляризационная матрица, элементы которой в спиральных базисах  $\mathbf{e}^{\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{n}_1 \pm \mathbf{n}_2)$ ,  $\mathbf{e}^{\pm 1}(\mathbf{l}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{n}_1(\mathbf{l}) \pm \mathbf{n}_2(\mathbf{l}))$ , где  $\mathbf{n}_{1,2}$  и  $\mathbf{n}_{1,2}(\mathbf{l})$  - ортонормированные ковекторы в плоскостях ортогональных  $\bar{\mathbf{k}}$  и  $\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{l})$ , соответственно, выражаются через функции Вигнера

$$\Pi_{\mu}^{\beta}(\bar{\mathbf{k}}, \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{l}); L) = \sum_{M=-L}^L D_{\mu, M}^L(\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{l})) D_{\beta, M}^{L*}(\bar{\mathbf{k}}).$$

Если выбрать ось  $z$  в плоскости ковекторов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \boldsymbol{\tau}(\mathbf{l})$  и обозначить относительно оси  $z$  углы этих ковекторов  $\vartheta$  и  $\vartheta_1$ , то формулы для элементов поляризационной матрицы значительно упрощаются:

$$\Pi_{\mu}^{\beta}(\bar{\mathbf{k}}, \bar{\mathbf{k}}(\mathbf{l}); L) = \sum_{M=-L}^L D_{\mu, M}^L(\bar{\mathbf{k}}(\mathbf{l})) D_{\beta, M}^{L*}(\bar{\mathbf{k}}) = d_{\beta, \mu}^L(\vartheta - \vartheta_1). \quad (28a)$$

Подставляя формулы (27)-(28a) в выражение для  $J_{disp}^{\beta}(\xi, \omega)$ , получим

$$J_{disp}^{\beta}(\xi, \omega) = \frac{N_{cell}}{i\omega} \sum_1 e^{-W_i(\tau^{(0)}, \xi)} \sum_1 e^{-i\tau_i^{(0)} \xi'_i} \int d^3 \xi' \sqrt{g(\xi')} e^{-i\tau_i^{(0)} \xi'_i} \int d^3 \mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\xi' - \xi'_i)} \times \quad (29)$$

$$\frac{2\pi}{2J_a(l) + 1} \sum_{\lambda(a)} \rho(\lambda(a)) \sum_L \left( \frac{(L+1)}{(2L+1)!! \sqrt{L(L+1)}} \right)^2 \times$$

$$\sum_{J_b=|L-J_a|}^{|L+J_a|} \int \rho(E_b) dE_b \frac{c^2 k^L k(l)^L \langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(k) | b(l); J_b(l) \rangle \langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(k(l)) | b(l); J_b(l) \rangle^* \times$$

$$\frac{E_a + \hbar\omega - E_b + D(E_a + \hbar\omega) - i\frac{\hbar}{2} \Gamma(E_a + \hbar\omega)}{E_a + \hbar\omega - E_b + D(E_a + \hbar\omega) - i\frac{\hbar}{2} \Gamma(E_a + \hbar\omega)} \times$$

$$\times d_{\beta, \mu}^L(\vartheta - \vartheta_1) E^{\mu}(\xi', \omega).$$

Тогда тензор поляризуемости деформированного кристалла в рентгеновском диапазоне частот определяется соотношением

$$\chi_{\mu}^{\beta}(\xi, \xi', \omega) = \sum_1 \sum_l e^{-W_i(\tau^{(0)}, \xi)} e^{-i\tau_i^{(0)} \xi'_i} e^{-i\tau_i^{(0)} \xi'_i} \left\{ -\frac{4\pi e^2 N_{cell}}{m\omega^2} f_l(\tau^{(0)}) \delta(\xi - \xi') \delta_{\mu}^{\beta} + \right. \quad (30)$$

$$\left. + \frac{4\pi N_{cell}}{\omega^2} \frac{2\pi}{2J_a(l) + 1} \sum_{\lambda(a)} \rho(\lambda(a)) \sum_L \left( \frac{(L+1)}{(2L+1)!! \sqrt{L(L+1)}} \right)^2 \sum_{J_b=|L-J_a|}^{|L+J_a|} \int \rho(E_b) dE_b \times \right.$$

$$\left. \int d^3 \mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\xi' - \xi'_i)} \frac{c^2 k^L k(l)^L \langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(k) | b(l); J_b(l) \rangle \langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(k(l)) | b(l); J_b(l) \rangle^* \times \right.$$

$$\left. \frac{E_a + \hbar\omega - E_b + D(E_a + \hbar\omega) - i\frac{\hbar}{2} \Gamma(E_a + \hbar\omega)}{E_a + \hbar\omega - E_b + D(E_a + \hbar\omega) - i\frac{\hbar}{2} \Gamma(E_a + \hbar\omega)} d_{\beta, \mu}^L(\vartheta - \vartheta_1) \right\}.$$

Обсудим полученное выражение. Сразу отметим, что в (30) ковектор  $\mathbf{k}$  и частота  $\omega$  не связаны друг с другом никаким соотношением. Как следует из (26), (29) и (30), поляризуемость кристалла в рентгеновском диапазоне частот является скаляром, а связь между током, индуцируемым в кристалле рентгеновскими квантами, и электрическим вектором или между вектором поляризации и электрическим вектором локальна лишь в том случае, когда мы пренебрегаем так называемой дисперсионной поправкой, а следовательно, и поглощением рентгеновских квантов в кристалле. Если мы хотим учитывать поглощение в кристалле, то утверждения типа "вектор поляризации в рентгеновском диапазоне частот связан с электрическим вектором соотношением  $\vec{P}(\vec{r}, \omega) = \chi(\vec{r}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega)$ , где  $\chi(\vec{r}, \omega)$  - поляризуемость кристалла, которая является скалярной периодической функцией", являются просто неверными. При учёте дисперсионной поправки поляризуемость кристалла в рентгеновском диапазоне частот принципиально является тензорной, а не скалярной величиной, и связь между вектором поляризации и электрическим вектором - принципиально нелокальна. Именно поэтому процедура вывода уравнений (7) и (16) в разделах 1 и 2, описывающих динамическую дифракцию электромагнитных полей на средах с идеально периодической и квазипериодической структурой, учитывающая нелокальность отклика среды на электромагнитное поле, верна и для дифракции рентгеновских квантов на деформированных кристаллах. В уравнения (7) и (16) входит не тензор поляризуемости среды, а его фурье-компоненты  $\hat{\chi}_i(\mathbf{k}, \omega)$ , в которых связь между волновым ковектором  $\mathbf{k}$  и частотой  $\omega$  уже определена  $k^2 = k_i k^i = \frac{\omega^2}{c^2}$ . Если отметить, что электромагнитные волны с волновыми ковекторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \boldsymbol{\tau}^{(l)}$  эффективно взаимодействуют только вблизи условия Брэгга  $k^2 = k(l)^2 = (k_i + \tau_i^{(l)})(k^i + \tau^{(l)})$ , то из (30) нетрудно получить для  $\hat{\chi}_i(\mathbf{k}, \omega)$  следующую формулу

$$\chi_{(0), \mu}^{\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \sum_l e^{-W_i(\tau^{(0)}, \xi)} e^{-i\tau_i^{(0)} \xi'_i} \left\{ -\frac{4\pi e^2 N_{cell}}{m\omega^2} f_l(\tau^{(0)}) \delta_{\mu}^{\beta} + \right.$$

$$\left. \frac{4\pi N_{cell}}{\omega^2} \frac{2\pi}{2J_a(l) + 1} \sum_{\lambda(a)} \rho(\lambda(a)) \sum_L \left( \frac{(L+1)}{(2L+1)!! \sqrt{L(L+1)}} \right)^2 \sum_{J_b=|L-J_a|}^{|L+J_a|} \int \rho(E_b) dE_b \times \right.$$

$$\left. \frac{c^2 k^L \left| \langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(\omega) | b(l); J_b(l) \rangle \right|^2}{E_a + \hbar\omega - E_b + D(E_a + \hbar\omega) - i\frac{\hbar}{2} \Gamma(E_a + \hbar\omega)} d_{\beta, \mu}^L(\vartheta - \vartheta_1) \right\}.$$

Заметим, что для  $l = 0$  выполняется  $\vartheta - \vartheta_1 = 0$ , и так как  $d_{\beta, \mu}^L(0) = \delta_{\mu}^{\beta}$ , то  $\hat{\chi}_{l=0}(\mathbf{k}, \omega)$  является строго скалярной величиной. Для волновых ковекторов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \boldsymbol{\tau}^{(l)}$  вблизи условия Брэгга имеет место  $\vartheta - \vartheta_1 = \Delta\theta$ , где  $\Delta\theta$  - угловая ширина столика Брэгга, т.е. величина порядка  $10^{-4} \div 10^{-6}$ . Таким образом, для волновых ковекторов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \boldsymbol{\tau}^{(l)}$  вблизи условия Брэгга мы с большой точностью можем положить  $d_{\beta, \mu}^L(\Delta\theta) = \delta_{\mu}^{\beta}$  и считать  $\chi_{(0), \mu}^{\beta}(\mathbf{k}, \omega)$  скалярной величиной  $\chi_{(0), \mu}^{\beta}(\mathbf{k}, \omega) = \chi_{(0)}(\omega) \delta_{\mu}^{\beta}$ . Тогда для  $\chi_{(0)}(\omega)$  имеем окончательную формулу

$$\chi_{(0)}(\xi, \omega) = \sum_{l=1}^r e^{-W_l(\tau^{(0)}, \xi)} e^{-i\tau_l^{(0)} \xi_l} \left\{ -\frac{4\pi e^2 N_{cell}}{m\omega^2} f_l(\tau^{(0)}) + \right. \quad (31)$$

$$\left. \frac{4\pi N_{cell}}{k} \left[ \int \frac{d\sigma_l^{(ion)}}{dE_b} \frac{(E_a + \hbar\omega - E_b + D(E_a + \hbar\omega))}{(E_a + \hbar\omega - E_b + D(E_a + \hbar\omega))^2 + \frac{\hbar^2 \Gamma^2}{4}} dE_b + i\sigma_l^{(ion)}(\omega) \right] \right\},$$

где  $\sigma_l^{(ion)}(\omega)$  определяется выражением

$$\sigma_l^{(ion)}(\omega) = \frac{2\pi}{2J_a(l)+1} \sum_{\lambda(a)} \rho(\lambda(a)) \sum_L \left( \frac{(L+1)}{(2L+1)!! \sqrt{L(L+1)}} \right)^2 k^{2L-1} \times \quad (31a)$$

$$\sum_{J_b=|L-J_a|}^{|L+J_a|} \int \rho(E_b) |\langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(\omega) | b(l); J_b(l) \rangle|^2 \delta(E_a + \hbar\omega - E_b + D(E_a + \hbar\omega)) dE_b$$

и является ничем иным как полным сечением фотоионизации (фотопоглощения)  $l$ -го атома в элементарной ячейке кристалла, а

$$\frac{d\sigma_l^{(ion)}}{dE_b} = \frac{2\pi}{2J_a(l)+1} \sum_{\lambda(a)} \rho(\lambda(a)) \sum_L \left( \frac{(L+1)}{(2L+1)!! \sqrt{L(L+1)}} \right)^2 k^{2L-1} \times \quad (31b)$$

$$\sum_{J_b=|L-J_a|}^{|L+J_a|} \int \rho(E_b) |\langle a(l); J_a(l) | \hat{Q}_L(\omega) | b(l); J_b(l) \rangle|^2$$

есть дифференциальное сечение фотоионизации. Эти величины к настоящему времени достаточно хорошо изучены как теоретически, так и экспериментально [15]. Следует подчеркнуть, что при выводе формулы (31) мы не использовали условие длинноволнового приближения  $ka \ll 1$ , где  $a$  - линейный размер атома, которое для рентгеновского излучения с длиной волны порядка  $1 \text{ \AA}$  не выполняется.

#### 4. Двухволновая динамическая дифракция рентгеновского излучения на упруго деформированных кристаллах

В этом разделе рассмотрим двухволновую дифракцию рентгеновских квантов на упруго деформированных кристаллах. Так как поле рентгеновских квантов в кристаллах с большой точностью можно считать поперечным, то, согласно формулам (15а), (16) и (31), динамическая дифракция на деформированных кристаллах в двухволновом приближении описывается соотношениями

$$\vec{E}(\xi, \omega) = \vec{E}_0(\xi, \omega) e^{ik_x(\xi^x + u^x(\xi))} + \vec{E}_1(\xi, \omega) e^{i(k_x + \tau_x^0)\xi^x + ik_y(\xi)}; \quad (32)$$

$$\left[ \frac{1}{k^2} \hat{L}(k(\xi), \frac{\partial}{\partial \xi}) + 1 \right] \vec{E}_0(\xi, \omega) + \sqrt{|g(\xi)|} \chi_{(0)}(\xi, \omega) \vec{E}_0(\xi, \omega) + \sqrt{|g(\xi)|} \chi_{(0)}(\xi, \omega) \vec{E}_1(\xi, \omega) = 0$$

$$\left[ \frac{1}{k^2} \hat{L}(k(\xi) + \tau^0, \frac{\partial}{\partial \xi}) + 1 \right] \vec{E}_1(\xi, \omega) + \sqrt{|g(\xi)|} \chi_{(0)}(\xi, \omega) \vec{E}_1(\xi, \omega) + \sqrt{|g(\xi)|} \chi_{(-1)}(\xi, \omega) \vec{E}_0(\xi, \omega) = 0.$$

Для упруго деформированных кристаллов, по определению, имеет место  $\left| \frac{\partial u^i}{\partial \xi^j} \right| \ll 1$ . Тогда, в силу того, что  $|\chi_{(0,1)}| \sim 10^{-4} + 10^{-6}$ , в (32) можно положить  $\sqrt{|g|} \chi_{(\pm 1)} \approx \chi_{(\pm 1)}$ ,  $\sqrt{|g(\xi)|} \chi_{(0)} \approx \chi_{(0)}$ . Из формулы (15а) для дифференциальных операторов  $\hat{L}$  имеем

$$\frac{1}{k^2} \hat{L}(k(\xi), \frac{\partial}{\partial \xi}) + 1 =$$

$$\frac{1}{k^2} g^{lj} \frac{\partial^2}{\partial \xi^l \partial \xi^j} + \frac{1}{k^2} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} g^{lj})}{\partial \xi^l} \frac{\partial}{\partial \xi^j} + i \frac{1}{k^2} k_j(\xi) \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} g^{lj})}{\partial \xi^l} + 2i \frac{1}{k^2} k_j(\xi) g^{lj} \frac{\partial}{\partial \xi^l} - \frac{1}{k^2} k_l(\xi) g^{lj} k_j(\xi) + 1;$$

$$\frac{1}{k^2} \hat{L}(k(\xi) + \tau^0, \frac{\partial}{\partial \xi}) + 1 =$$

$$\frac{1}{k^2} g^{lj} \frac{\partial^2}{\partial \xi^l \partial \xi^j} + \frac{1}{k^2} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} g^{lj})}{\partial \xi^l} \frac{\partial}{\partial \xi^j} + i \frac{1}{k^2} [k_j(\xi) + \tau_j^0] \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} g^{lj})}{\partial \xi^l} + 2i \frac{1}{k^2} [k_j(\xi) + \tau_j^0] g^{lj} \frac{\partial}{\partial \xi^l} - \frac{1}{k^2} [k_l(\xi) + \tau_l^0] g^{lj} [k_j(\xi) + \tau_j^0] + 1.$$

В силу того, что поле деформаций, а следовательно, и метрический тензор  $g^{lj}$ , в области пространства с линейными размерами порядка длины волны рентгеновских квантов можно считать величинами постоянными, слагаемыми, которые содержат  $\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{1}{k} \frac{\partial(\sqrt{g} g^{lj})}{\partial \xi^l}$ , можно пренебречь. В приближении медленно меняющихся амплитуд пренебрегают также и слагаемыми  $\frac{1}{k^2} g^{lj} \frac{\partial^2}{\partial \xi^l \partial \xi^j} \vec{E}_{0,1}(\xi, \omega)$ . Если ввести обозначения  $n_i^{(0)} = \frac{k_i}{k}$  для направляющих косинусов волнового вектора  $\vec{k}$ , падающих на совершенный кристалл и  $n_i^{(0)} = \frac{k_i + \tau_i}{\sqrt{(k + \vec{\tau})^2}} = \frac{k_i + \tau_i}{k\sqrt{1 + \alpha}}$  для направляющих косинусов волнового вектора  $\vec{k} + \vec{\tau}$  дифрагированных на совершенном кристалле рентгеновских квантов, где  $\alpha = \frac{(k + \vec{\tau})^2 - k^2}{k^2}$  - параметр отклонения от точного условия Брэгга для совершенных кристаллов, то, с учётом сделанных выше



приближений и того обстоятельства, что в лагранжевой системе координат имеет место тождество  $n_i^{(0)}(\xi)g^{ij}n_j^{(0)}(\xi) = 1$ , где  $n_i^{(0)}(\xi) = n_{\mu}^{(0)}\left(\delta_i^{\mu} + \frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i}\right)$  - направляющие косинусы волнового коектора  $\vec{k}$  в лагранжевой системе координат, система уравнений (32) значительно упрощается:

$$\begin{aligned} \vec{E}(\xi, \omega) &= \vec{E}_0(\xi, \omega)e^{ik(n_i^{(0)}\xi^i + n_{\mu}^{(0)}u^{\mu}(\xi))} + \vec{E}_1(\xi, \omega)e^{ik(\sqrt{1+\alpha}n_i^{(0)}\xi^i + n_{\mu}^{(0)}u^{\mu}(\xi))}; \\ \left[2i\frac{1}{k}n_i^{(0)}(\xi)g^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j} + \chi_{(0)}(\xi, \omega)\right]\vec{E}_0(\xi, \omega) + \chi_{(0)}(\xi, \omega)\vec{E}_1(\xi, \omega) &= 0; \\ \left\{2i\frac{1}{k}[\sqrt{1+\alpha}n_i^{(0)} + n_{\mu}^{(0)}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i}]\right. &g^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j} + \chi_{(0)}(\xi, \omega) + 1 - \\ \left. [\sqrt{1+\alpha}n_i^{(0)} + n_{\mu}^{(0)}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i}]\right. &g^{ij}[\sqrt{1+\alpha}n_j^{(0)} + n_{\mu}^{(0)}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^j}]\left.\right\}\vec{E}_1(\xi, \omega) + \\ &+ \chi_{(-)}(\xi, \omega)\vec{E}_0(\xi, \omega) = 0. \end{aligned} \quad (33)$$

Эта система уравнений описывает двухволновую динамическую дифракцию рентгеновских квантов на деформированных кристаллах, и именно эту систему уравнений будем считать базовой.

В работах по рентгеновской оптике деформированных кристаллах ( см., например, [4-5] ) обычно используют систему уравнений Такаги - Тайпина [1-2]. Покажем, что уравнения Такаги-Тайпина можно получить из системы (33), если сделать ряд упрощающих приближений. Действительно, примем следующие приближения: 1)

$g_{ij} \approx \delta_{ij} + \delta_{i\mu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^j} + \delta_{j\mu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i}$ ,  $g^{ij} \approx \delta^{ij} - \delta^{i\mu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^j} - \delta^{j\mu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i}$  (напомним формулу для метрического тензора  $g_{ij} = \delta_{ij} + \delta_{i\mu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^j} + \delta_{j\mu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i} + \delta_{\mu\nu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i}\frac{\partial u^{\nu}(\xi)}{\partial \xi^j}$ , т.е.

пренебрегаем всеми величинами порядка  $\alpha\left(\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i}\frac{\partial u^{\nu}(\xi)}{\partial \xi^j}\right)$ );

2)  $n_i^{(0)}(\xi)g^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j}\vec{E}_0(\xi, \omega) \approx n_i^{(0)}\delta^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j}\vec{E}_0(\xi, \omega)$ ,  $[\sqrt{1+\alpha}n_i^{(0)} + n_{\mu}^{(0)}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i}]g^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j}\vec{E}_1(\xi, \omega) \approx$

$n_i^{(0)}\delta^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j}\vec{E}_1(\xi, \omega)$ ; 3)  $\chi_{(0,\pm)}(\xi, \omega) \approx \chi_{(0,\pm)}(\omega)$ , т. е. пренебрегаем зависимостью фактора Дебая-Валлера от координат. Подставляя эти приближённые соотношения в систему уравнений (33), получим для медленно меняющихся амплитуд

$$\begin{aligned} \left[2i\frac{1}{k}n_i^{(0)}\delta^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j} + \chi_{(0)}(\omega)\right]\vec{E}_0(\xi, \omega) + \chi_{(0)}(\omega)\vec{E}_1(\xi, \omega) &= 0; \\ \left[2i\frac{1}{k}n_i^{(0)}\delta^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j} + \frac{1}{k}\sqrt{1+\alpha}n_i^{(0)}\delta^{ij}\tau_{\mu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^j} - \alpha + \chi_{(0)}(\omega)\right]\vec{E}_1(\xi, \omega) + \\ \chi_{(-)}(\omega)\vec{E}_0(\xi, \omega) &= 0. \end{aligned}$$

Далее, введём стандартные для рентгеновской оптики векторы  $\pi$ - и  $\sigma$ -поляризации  $e_{\sigma, \pi}^{(0,1)}(\xi)$  (здесь учитывается, что мы находимся в лагранжевой системе координат, и поэтому векторы поляризации являются функциями координат). Величинами  $2i\frac{1}{k}n_i^{(0)}\delta^{ij}\Gamma_{j\nu}^{\mu}(\xi)$  и  $2i\frac{1}{k}n_i^{(0)}\delta^{ij}\Gamma_{j\nu}^{\mu}(\xi)$ , где  $\Gamma_{j\nu}^{\mu}(\xi)$  - символ Кристоффеля, которые возникают

при дифференцировании векторов поляризации, можно пренебречь в силу того, что метрический тензор в области с линейными размерами порядка длины рентгеновских квантов является величиной постоянной. Тогда, если положить во втором уравнении  $\sqrt{1+\alpha} \approx 1$ , то эти уравнения принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} \left[2i\frac{1}{k}n_i^{(0)}\delta^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j} + \chi_{(0)}(\omega)\right]E_0(\xi, \omega) + C(\xi)\chi_{(0)}(\omega)E_1(\xi, \omega) &= 0; \quad (34) \\ \left[2i\frac{1}{k}n_i^{(0)}\delta^{ij}\frac{\partial}{\partial \xi^j} + \frac{1}{k}n_i^{(0)}\delta^{ij}\tau_{\mu}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^j} - \alpha + \chi_{(0)}(\omega)\right]E_1(\xi, \omega) + \\ &+ C(\xi)\chi_{(-)}(\omega)E_0(\xi, \omega) = 0, \end{aligned}$$

где  $C(\xi)$  - поляризационный фактор:  $C_{(0)}(\xi) = 1$  для  $\sigma$ -поляризации, а для  $\pi$ -поляризации имеем достаточно громоздкую формулу

$$C_{(\pi)}(\xi) = \frac{n_i^{(0)}(\xi)g^{ij}(\sqrt{1+\alpha}n_j^{(0)} + n_{\mu}^{(0)}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^j})}{\sqrt{(\sqrt{1+\alpha}n_i^{(0)} + n_{\mu}^{(0)}\frac{\partial u^{\mu}(\xi)}{\partial \xi^i})g^{ij}(\sqrt{1+\alpha}n_j^{(0)} + n_{\nu}^{(0)}\frac{\partial u^{\nu}(\xi)}{\partial \xi^j})}}.$$

Так как  $|\chi_{(0,1)}| \sim 10^{-4} \div 10^{-6}$ , то можно положить  $C_{(\pi)}(\xi) = n_i^{(0)}\delta^{ij}n_j^{(0)}$ , т. е. принять  $C_{(\pi)}(\xi)$  таким же как и для совершенного кристалла. В этом случае уравнения (34) для медленно меняющихся амплитуд  $E_{0,1}(\xi, \omega)$  в точности совпадают с уравнениями Такаги-Тайпина. Следует подчеркнуть, что в цитированных выше работах в формуле для поля рентгеновских квантов в кристалле

$$\vec{E}(\xi, \omega) = \vec{E}_0(\xi, \omega)e^{ik(n_i^{(0)}\xi^i + n_{\mu}^{(0)}u^{\mu}(\xi))} + \vec{E}_1(\xi, \omega)e^{ik(\sqrt{1+\alpha}n_i^{(0)}\xi^i + n_{\mu}^{(0)}u^{\mu}(\xi))}$$

почему-то опущено слагаемое  $n_i^{(0)}u^i(\xi)$  в выражении для фаз проходящей и дифрагированных волн, которое и определяет фокусировку рентгеновских квантов изогнутым кристаллом, как в геометрии Лауэ, так и в геометрии Брэгга.

Для того чтобы определить область применимости сделанных выше упрощающих приближений, а следовательно, и область применимости уравнений Такаги - Тайпина, рассмотрим плоскопараллельную прямоугольную кремниевую пластинку толщиной  $h$ . Пусть эта пластинка деформируется изгибающими моментами  $M_1$  и  $M_2$ , равномерно распределёнными по сторонам этой пластинки. Тогда поле деформаций можно представить в следующем виде [16]:

$$\begin{aligned}
u^1(\xi) &= -\frac{1}{\rho_1} \left[ b_{15}(\xi^3 + \frac{h}{2})^2 + b_{16}\xi^2(\xi^3 + \frac{h}{2}) + 2b_{11}\xi^1(\xi^3 + \frac{h}{2}) \right] - & (35) \\
&\quad \frac{1}{\rho_2} \left[ b_{25}(\xi^3 + \frac{h}{2})^2 + b_{26}\xi^2(\xi^3 + \frac{h}{2}) + 2b_{12}\xi^1(\xi^3 + \frac{h}{2}) \right]; \\
u^2(\xi) &= -\frac{1}{\rho_1} \left[ b_{14}(\xi^3 + \frac{h}{2})^2 + 2b_{12}\xi^2(\xi^3 + \frac{h}{2}) + 2b_{16}\xi^1(\xi^3 + \frac{h}{2}) \right] - \\
&\quad \frac{1}{\rho_2} \left[ b_{24}(\xi^3 + \frac{h}{2})^2 + 2b_{22}\xi^2(\xi^3 + \frac{h}{2}) + b_{26}\xi^1(\xi^3 + \frac{h}{2}) \right]; \\
u^3(\xi) &= \frac{1}{\rho_1} \left[ b_{11}(\xi^1)^2 + b_{12}(\xi^2)^2 - b_{13}(\xi^3 + \frac{h}{2})^2 + b_{16}\xi^1\xi^2 \right] + \\
&\quad \frac{1}{\rho_2} \left[ b_{12}(\xi^1)^2 + b_{22}(\xi^2)^2 - b_{23}(\xi^3 + \frac{h}{2})^2 + b_{26}\xi^1\xi^2 \right],
\end{aligned}$$

где  $\frac{1}{\rho_1} = \frac{M_1 c_{33}}{h^3}$ ;  $\frac{1}{\rho_2} = \frac{M_2 c_{33}}{h^3}$ ;  $b_{\mu\nu} = \frac{c_{\mu\nu}}{c_{33}}$ ;  $c_{\mu\nu}$  ( $\mu, \nu = 1, \dots, 6$ ) - упругие постоянные кристалла. На рис. 1 изображена эта деформированная кремниевая пластинка для значений параметров  $\rho_1 = 2 \times 10^2 \text{ см}$  и  $\rho_2 = 5 \times 10^2 \text{ см}$  и толщины  $h = 0.1 \text{ см}$ ,

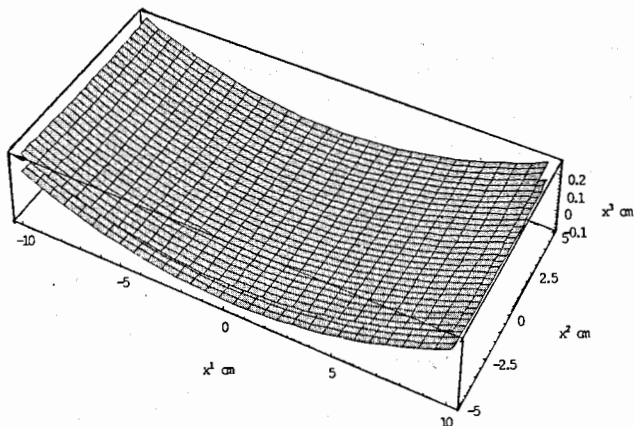


Рис.1. Профиль изогнутого брэгговского зеркала.

а на рис. 2 изображён средний радиус кривизны отражающей внешней поверхности этой пластинки.

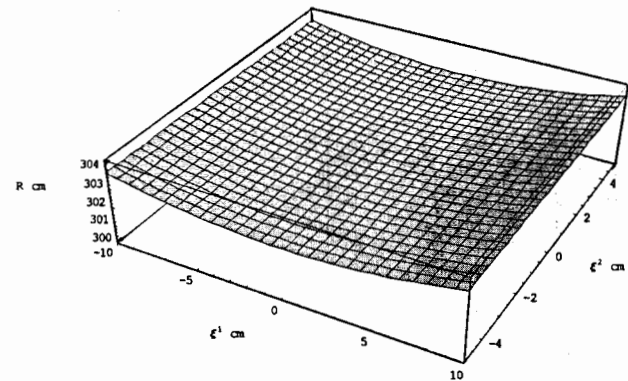


Рис.2. Средний радиус кривизны брэгговского зеркала

Из рис. 2 видно, что средний радиус кривизны изогнутой кремниевой пластинки при таком выборе параметров зависит от координат на отражающей поверхности и является величиной порядка  $3 \times 10^2 \text{ см}$ . Рассмотрим наиболее простую ситуацию - поглощение рентгеновских квантов при прохождении через деформированную кремниевую пластинку (закон Бугера). Для этой ситуации из уравнений (33) получаем

$$\left[ 2i \frac{1}{k} n_i^{(0)}(\xi) g^{ij}(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi^j} + \chi_{(0)}(\omega) \right] \vec{E}_0(\xi, \omega) = 0,$$

причём для простоты пренебрежём зависимостью фактора Дебая-Валлера от координат, а из уравнений Такаги-Гайпина (34)

$$\left[ 2i \frac{1}{k} n_i^{(0)} \delta^{ij} \frac{\partial}{\partial \xi^j} + \chi_{(0)}(\omega) \right] E_0(\xi, \omega) = 0.$$

Тогда из первого уравнения, если решать его методом характеристик, т.е. решить систему обыкновенных дифференциальных уравнений  $\frac{d\xi^j(s)}{ds} = n_i^{(0)}(\xi) g^{ij}(\xi)$  с начальными условиями  $\xi^1(0) = \xi_0^1, \xi^2(0) = \xi_0^2, \xi^3(0) = 0$ , где  $(\xi_0^1, \xi_0^2, 0)$  - входные координаты падающего на кристалл рентгеновского луча, получаем для функции пропускания соотношение

$$T(\xi_0^1, \xi_0^2, h) = e^{-k \text{Im}(\chi_{(0)}(\omega)) s(\xi_0^1, \xi_0^2, h)},$$

где  $h$  - толщина совершенного кристалла. Оптический путь рентгеновских квантов  $s(\xi_0^1, \xi_0^2, h)$  в деформированном кристалле можно получить, если решить уравнение  $\xi^3(s, \xi_0^1, \xi_0^2) = h$ , где  $\xi^3(s, \xi_0^1, \xi_0^2)$  - решение приведенной выше системы обыкновенных

дифференциальных уравнений. Для второго уравнения решение, т.е. функция пропускания, получается тривиально и ничем не отличается от плоскопараллельной пластинки из совершенного кристалла

$$T = e^{-k \operatorname{Im}(\alpha^{(0)}) \frac{h}{\sin(\theta)}},$$

где  $\theta$  - угол между волновым вектором падающих на кристалл квантов и нормалью к входной плоскости совершенного кристалла, направленной вовнутрь кристалла. На рис. 3 приведены эти функции пропускания для  $\theta = \frac{\pi}{18}$ ,  $\varphi = \frac{\pi}{4}$ ,  $h = 0.01$  см и для энергий квантов 15 кэВ

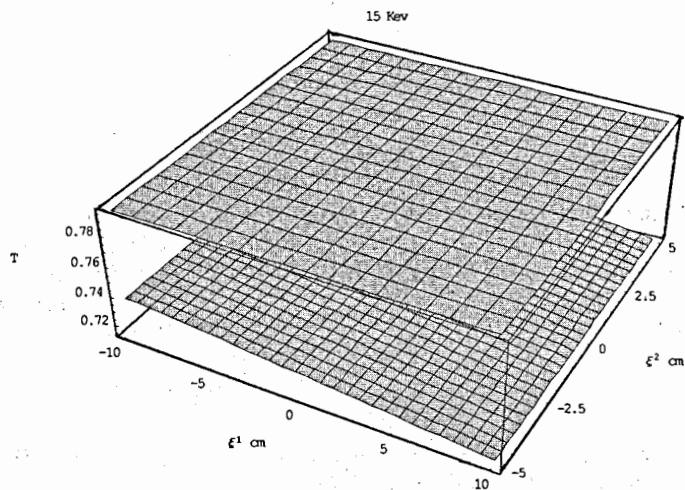


Рис.3. Функции пропускания рентгеновского излучения

Причём верхняя плоская поверхность на этом рисунке является функцией пропускания для плоскопараллельной кремниевой пластинки из совершенного кристалла, а нижняя поверхность описывает поглощение рентгеновских квантов в деформированном кристалле. Различие появляется во втором знаке после запятой и для такой тонкой пластинки является довольно значительным. Это означает, что даже в такой простой ситуации, как поглощение рентгеновских квантов при прохождении через деформированный кристалл, уравнения Такаги-Тайпина неадекватно описывают реальную экспериментальную ситуацию (только для деформаций кристалла со средним радиусом кривизны более чем 40 м этим различием уже можно пренебречь).

Для того чтобы окончательно определить область применимости уравнений Такаги-Тайпина, сравним два слагаемых: 1)  $1 - [\sqrt{1 + \alpha} n_i^{(0)} + n_\mu^{(0)} \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^i}] g^{ij} [\sqrt{1 + \alpha} n_j^{(0)} + n_\mu^{(0)} \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^j}]$  во втором уравнении системы

уравнений (33) и 2)  $\frac{1}{k} n_i^{(0)} \delta^{ij} \tau_\mu \frac{\partial u^\nu(\xi)}{\partial \xi^j} - \alpha$  - во втором уравнении системы уравнений Такаги -Тайпина (34). На рис. 4 приведена разность

$$\Delta = 1 + \alpha - [\sqrt{1 + \alpha} n_i^{(0)} + n_\mu^{(0)} \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^i}] g^{ij} [\sqrt{1 + \alpha} n_j^{(0)} + n_\mu^{(0)} \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^j}] - \frac{1}{k} n_i^{(0)} \delta^{ij} \tau_\mu \frac{\partial u^\nu(\xi)}{\partial \xi^j}$$

между этими величинами для деформированной кремниевой пластинки, изображённой на рис. 1. для энергий квантов 5кэВ, 10кэВ и 15кэВ.

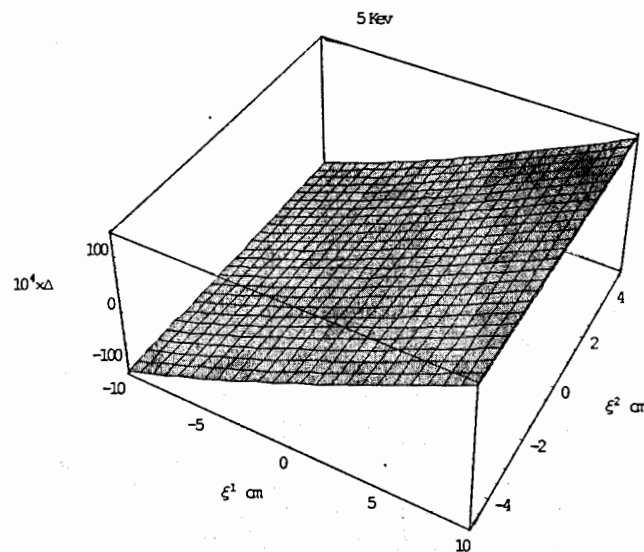


Рис 4а. Величина  $\Delta$  для квантов с энергией 5 кэВ

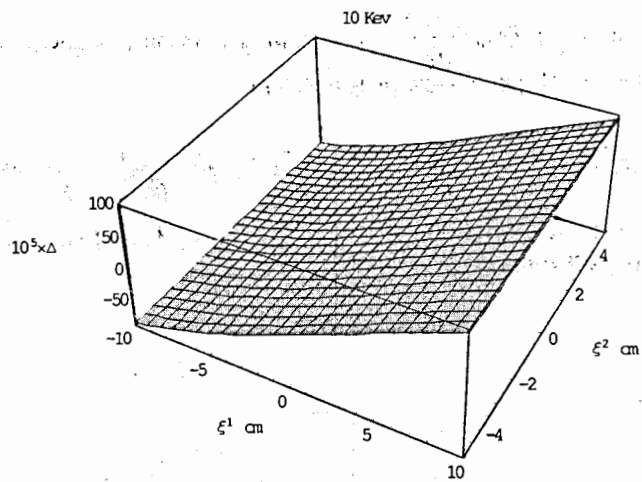


Рис. 4б. Величина Δ для квантов с энергией 10 кэВ

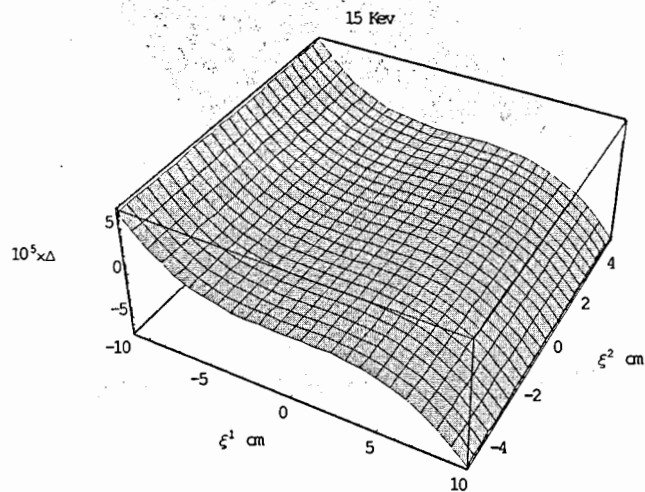


Рис. 4с. Величина Δ для квантов с энергией 15 кэВ

Если теперь заметить, что для энергий 5кэВ, 10кэВ и 15кэВ мы имеем  $\text{Re}(\chi_{(0)}(\omega)) = -0.394922 \times 10^{-4}$ ,  $-0.976232 \times 10^{-5}$  и  $-0.431670 \times 10^{-5}$  соответственно, то из этого рисунка следует, что, принимая упрощающие приближения в уравнениях (33), которые приводят к уравнениям Такаги - Тайпина, для деформированных кристаллов со средним радиусом кривизны меньше 10м, мы выбрасываем величины, которые на порядок больше, чем те, которые мы оставляем, получая эти уравнения. Эта разность, приведенная на рис.4, становится меньше, чем  $\text{Re}(\chi_{(0)}(\omega))$  для деформаций со средним радиусом кривизны больше 40м, т.е. очень слабо деформированных кристаллов. Поэтому для теоретического анализа реальных экспериментальных ситуаций следует использовать именно систему уравнений (33), которая хотя и намного сложнее, чем уравнения Такаги-Тайпина, зато пригодна для описания встречающихся на практике рентгенооптических устройств.

## 5. Изогнутое брэгговское зеркало

Уравнения (33) для медленно меняющихся амплитуд поля рентгеновских квантов в двухволновой динамической дифракции на деформированных кристаллах для произвольного поля деформаций решить в общем случае можно только численно. В этой работе мы неоднократно подчеркивали, что рентгеновскую оптику с точки зрения общей электродинамики следует считать геометрической оптикой. Поэтому для того, чтобы получить коэффициент отражения Брэгга от изогнутого брэгговского зеркала, воспользуемся принципом локальности геометрической оптики (см., например, [17]), который, по-видимому, впервые был введен в электродинамику В. А. Фоком [18], исследовавшим отражение электромагнитной волны с гладким волновым фронтом произвольной формы от гладкой поверхности произвольной формы. Согласно принципу локальности отражение волны в каждой точке поверхности зеркала происходит так, как если бы падающая волна была плоской, а криволинейная поверхность в этой точке была бы заменена касательной плоскостью - необходимо только учесть, что углы падения и отражения волны меняются от точки к точке на этой поверхности. Таким образом, принцип локальности позволяет использовать в качестве нулевого приближения коэффициенты отражения, полученные для плоских волн и плоских поверхностей и, в частности, коэффициент отражения Брэгга для дифракционной рентгеновской оптики. Коэффициент отражения Брэгга при отражении плоской волны от плоскопараллельной толстой пластинки из совершенного кристалла определяется формулой:

$$R = \frac{C\chi_{(-1)}(\omega)}{\chi_{(0)}(\omega)(1 + \beta) - \frac{\alpha}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\chi_{(0)}(\omega)}{2}(1 + \beta) - \frac{\alpha}{2}\right)^2 - C^2\beta\chi^2(\omega)}}, \quad (36)$$

где  $C$  - поляризационный фактор, введенный выше,  $\beta = -\frac{n_3^{(1)}}{n_3^{(0)}}$  - параметр асимметрии:

$\chi^2(\omega) = \chi_{(-1)}(\omega)\chi_{(0)}(\omega)$ ;  $\alpha = \frac{(\vec{k} + \vec{\tau})^2 - k^2}{k^2}$  - параметр отклонения от точного условия Брэгга.

Пусть на изогнутое брэгговское зеркало с произвольным гладким полем деформации  $\vec{y}(\xi)$  падает волновой пакет рентгеновских квантов, электрический вектор

которого в лагранжевой системе координат для квантов с частотой  $\omega$  (или энергией  $\varepsilon$ ) определяется соотношением

$$\vec{E}(\xi, \omega) = \vec{E}^{(0)}(\xi, \omega) e^{ik(n_i^{(0)}\xi^i + n_\mu^{(0)}u^\mu(\xi) + \Psi_0(\xi, \varepsilon))},$$

где  $n_i^{(0)}$  - направляющие косинусы волнового вектора, а  $\vec{E}^{(0)}(\xi, \omega)$  и  $\Psi_0(\xi, \varepsilon)$  - медленно меняющиеся амплитуда и фаза падающих на зеркало рентгеновских квантов. Тогда согласно сформулированному выше принципу локальности геометрической оптики коэффициент отражения этого волнового пакета для изогнутого брэгговского зеркала имеет такую же функциональную форму, как и для плоской волны и плоского зеркала, необходимо только учесть, что для изогнутого брэгговского зеркала величины  $\chi_{(0,\pm)}$ ,  $C$ ,  $\beta$  и  $\alpha$  меняются от точки к точке на поверхности этого зеркала. Если зависимость  $\chi_{(0,\pm)}$  от координат определяется формулой (31), то зависимости  $C$ ,  $\beta$  и  $\alpha$  от координат можно определить из следующих соображений. Компоненты волнового вектора падающих на изогнутое брэгговское зеркало рентгеновских квантов, в лагранжевой системе координат определяются соотношением

$$k_i(\xi^1, \xi^2) = k \left[ n_i^{(0)} + n_\mu^{(0)} \left( \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} \right],$$

тогда компоненты волнового вектора рентгеновских квантов в лагранжевой системе координат, дифрагировавших на этом зеркале - формулой:

$$k_i(\xi^1, \xi^2) + \tau_i = k \left[ \sqrt{1 + \alpha} n_i^{(0)} + n_\mu^{(0)} \left( \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} \right].$$

Согласно определению, для параметров  $\alpha(\xi^1, \xi^2)$ ,  $\beta(\xi^1, \xi^2)$  и  $C(\xi^1, \xi^2)$  имеем

$$\begin{aligned} \alpha(\xi^1, \xi^2) &= \\ &= \frac{2k\tau_i g^{ij}(\xi^1, \xi^2) n_j^{(0)}(\xi^1, \xi^2) + 2k\tau_i g^{ij}(\xi^1, \xi^2) \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \tau_i g^{ij}(\xi^1, \xi^2) \tau_j}{k^2 \left[ 1 + 2n_i^{(0)}(\xi^1, \xi^2) g^{ij}(\xi^1, \xi^2) \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} g^{ij}(\xi^1, \xi^2) \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^j} \right)_{\xi^3=0} \right]}; \\ \beta(\xi^1, \xi^2) &= -\frac{n_3^{(0)}(\xi^1, \xi^2)}{n_3^{(0)}(\xi^1, \xi^2)}; \end{aligned} \quad (37)$$

$$C(\xi^1, \xi^2) = n_i^{(0)}(\xi^1, \xi^2) g^{ij}(\xi^1, \xi^2) n_j^{(0)}(\xi^1, \xi^2),$$

где  $n_i^{(0)}(\xi^1, \xi^2)$  и  $n_j^{(0)}(\xi^1, \xi^2)$  - направляющие косинусы волновых векторов падающих и дифрагированных рентгеновских квантов на поверхности изогнутого брэгговского зеркала в лагранжевой системе координат:

$$\begin{aligned} n_i^{(0)}(\xi^1, \xi^2) &= n_\mu^{(0)} \left[ \delta_i^\mu + \left( \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} \right]; \\ n_i^{(0)}(\xi^1, \xi^2) &= \frac{\left[ \sqrt{1 + \alpha} n_i^{(0)} + n_\mu^{(0)} \left( \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} \right]}{l(\xi^1, \xi^2)}, \end{aligned}$$

$$l(\xi^1, \xi^2) = \sqrt{\left[ \sqrt{1 + \alpha} n_i^{(0)} + n_\mu^{(0)} \left( \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} \right] g^{ij}(\xi^1, \xi^2) \times \left[ \sqrt{1 + \alpha} n_j^{(0)} + n_\mu^{(0)} \left( \frac{\partial u^\mu(\xi)}{\partial \xi^j} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^j} \right)_{\xi^3=0} \right]}.$$

Следовательно, коэффициент отражения Брэгга от изогнутого зеркала в этом приближении имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\xi^1, \xi^2) &= \\ &= \frac{C\chi_{(-)}(\xi^1, \xi^2; \omega)}{\chi_{(0)}(\xi^1, \xi^2; \omega)(1 + \beta) - \frac{\alpha(\xi^1, \xi^2)}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{\chi_{(0)}(\xi^1, \xi^2; \omega)}{2} (1 + \beta) - \frac{\alpha(\xi^1, \xi^2)}{2} \right)^2 - C^2 \beta \chi^2(\xi^1, \xi^2; \omega)}}. \end{aligned} \quad (38)$$

Здесь  $\chi_{(0,\pm)}(\xi^1, \xi^2; \omega) = (\chi_{(0,\pm)}(\xi; \omega))_{\xi^3=0}$ ,  $\chi^2(\xi^1, \xi^2; \omega) = \chi_{(0)}(\xi^1, \xi^2; \omega) \chi_{(-)}(\xi^1, \xi^2; \omega)$ . В первом приближении параметр асимметрии  $\beta$  и поляризационный фактор, определённые формулами (37), можно считать такими же как и для плоского зеркала. Если, кроме того, пренебречь зависимостью фактора Дебая-Валлера от координат, то формула (38) для коэффициента Брэгга резко упрощается

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\xi^1, \xi^2) &= \\ &= \frac{C\chi_{(-)}(\omega)}{\chi_{(0)}(\omega)(1 + \beta) - \frac{\alpha(\xi^1, \xi^2)}{2} \pm \sqrt{\left( \frac{\chi_{(0)}(\omega)}{2} (1 + \beta) - \frac{\alpha(\xi^1, \xi^2)}{2} \right)^2 - C^2 \beta \chi^2(\omega)}}. \end{aligned} \quad (39)$$

То, что изогнутое брэгговское зеркало с достаточно большим средним радиусом кривизны можно представить себе как набор плоских брэгговских зеркал, повернутых друг относительно друга, используется при проектировании рентгенооптических схем повсеместно. Тем не менее формулы (38)-(39), которые реализуют это представление (или их аналог), нами в литературе обнаружены не были. Понятны и пределы применимости этих формул. Линейные размеры области, которая участвует в формировании дифрагированного поля в точке  $(\xi^1, \xi^2)$  на поверхности кристалла, порядка длины поглощения рентгеновских квантов в кристалле  $l_{abs} \sim 10^{-2} \div 10^{-3}$ . Если в пределах этой области поле деформаций можно считать величиной постоянной, то

формулы (38-39) вполне применимы.

Знание коэффициента отражения Брэгга позволяет определить поле дифрагированных рентгеновских квантов на отражающей поверхности изогнутого брэгговского зеркала

$$E_{\pi, \sigma}(\xi^1, \xi^2; \omega) = \mathcal{R}(\xi^1, \xi^2) E_{\pi, \sigma}^{(0)}(\xi^1, \xi^2; \omega) e^{ik\Phi_0(\xi^1, \xi^2)}; \quad (40)$$

$$\Phi_0(\xi^1, \xi^2) = \left[ \sqrt{1 + \alpha n_i^{(0)}} + n_i^{(0)} u^i(\xi) + \Psi_0(\xi, \varepsilon) \right].$$

Соотношения (38)-(39) и (40) решают задачу о двухволновой динамической дифракции рентгеновских квантов на упруго деформированном кристалле в геометрии Брэгга - изогнутом брэгговском зеркале. Нам осталось рассмотреть распространение и фокусировку рентгеновских квантов в вакууме (или воздухе), т.е. решить уравнение Гельмгольца

$$(\Delta + k^2)E(\vec{r}, \omega) = 0$$

при условии, что на поверхности изогнутого брэгговского зеркала задано поле рентгеновских квантов  $A^{(0)}(\vec{r}, \omega) e^{ikS_0(\vec{r})}$  с амплитудой  $A^{(0)}(\vec{r}, \omega) = \mathcal{R}(\xi^1, \xi^2) E^{(0)}(\xi^1, \xi^2; \omega)$  и фазой  $S_0(\vec{r}, \varepsilon) = \Phi_0(\xi^1, \xi^2, \varepsilon)$ . Вне каустик эта задача решается методами геометрической оптики [17], которые приводят к формуле

$$E(\vec{r}, \omega) = \mathcal{R}(\xi^1, \xi^2) E^0(\xi^1, \xi^2; \omega) \sqrt{\frac{R_1 R_2}{(S - R_1)(S - R_2)}} e^{ikS_0(\vec{r}) + ikS(\vec{r}, \xi^1, \xi^2)}, \quad (41)$$

где

$$S(\vec{r}, \xi^1, \xi^2) = \sqrt{(x^1 - \xi^1 - u^1(\xi^1, \xi^2, 0))^2 + (x^2 - \xi^2 - u^2(\xi^1, \xi^2, 0))^2 + (x^3 - u^3(\xi^1, \xi^2, 0))^2}, \quad (41a)$$

расстояние от точки на поверхности брэгговского зеркала с параметрами  $(\xi^1, \xi^2)$  до точки с координатами  $(x^1, x^2, x^3)$ , а  $R_1$  и  $R_2$  - радиусы кривизны волнового фронта дифрагированной волны на поверхности брэгговского зеркала, определяемые соотношениями

$$R_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a};$$

$$a = \delta^{ij} N_i(\xi^1, \xi^2) \frac{\partial N_j(\xi^1, \xi^2)}{\partial \xi^1} \frac{\partial N_i(\xi^1, \xi^2)}{\partial \xi^2}; \quad (42)$$

$$b = \delta^{ij} N_i(\xi^1, \xi^2) \frac{\partial N_j(\xi^1, \xi^2)}{\partial \xi^1} \left( \frac{\partial x_i(\xi)}{\partial \xi^2} \right)_{\xi^3=0} - \delta^{ij} N_i(\xi^1, \xi^2) \frac{\partial N_j(\xi^1, \xi^2)}{\partial \xi^2} \left( \frac{\partial x_i(\xi)}{\partial \xi^1} \right)_{\xi^3=0};$$

$$c = \delta^{ij} N_i(\xi^1, \xi^2) \left( \frac{\partial x_j(\xi)}{\partial \xi^1} \right)_{\xi^3=0} \left( \frac{\partial x_i(\xi)}{\partial \xi^2} \right)_{\xi^3=0}.$$

Здесь  $\delta^{ij}$  - полностью асимметричный тензор третьего ранга ( $\delta^{123} = 1$ ),  $N_i(\xi^1, \xi^2)$  -

компоненты вектора нормали к волновому фронту дифрагированных рентгеновских квантов на поверхности брэгговского зеркала в эйлеровой системе координат, которые определяются формулой

$$N_j(\xi^1, \xi^2) = \frac{(\mathcal{J}^{-1}(\xi^1, \xi^2))_j^i \left[ \sqrt{1 + \alpha n_i^{(0)}} + n_i^{(0)} \left( \frac{\partial u^i(\xi)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} \right]}{L(\xi^1, \xi^2)}; \quad (43)$$

$$(L(\xi^1, \xi^2))^2 = (\mathcal{J}^{-1}(\xi^1, \xi^2))_j^i \left[ \sqrt{1 + \alpha n_i^{(0)}} + n_i^{(0)} \left( \frac{\partial u^i(\xi)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} \right] \times$$

$$\delta^{jh} (\mathcal{J}^{-1}(\xi^1, \xi^2))_h^i \left[ \sqrt{1 + \alpha n_i^{(0)}} + n_i^{(0)} \left( \frac{\partial u^i(\xi)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} + \left( \frac{\partial \Psi_0(\xi, \varepsilon)}{\partial \xi^i} \right)_{\xi^3=0} \right]$$

где  $\mathcal{J}^{-1}(\xi^1, \xi^2)$  - матрица, обратная матрице Якоби  $\mathcal{J}(\xi^1, \xi^2) = \left\| \delta_j^i + \frac{\partial u^i(\xi)}{\partial \xi^j} \right\|_{\xi^3=0}$ ; а

$x_i(\xi) = \xi^i + u^i(\xi)$  - эйлеровы координаты точек деформированного кристалла.

В точках, для которых выполняются равенства  $S = R_{1,2}$ , геометрическое решение (41) обращается в бесконечность. Эти точки называются фокальными, а множество фокальных точек - каустикой. Таким образом многообразие, называемое каустикой, определяется соотношениями

$$x_{(0)1,2}^j = (\xi^j + u^j(\xi))_{\xi^3=0} + R_{1,2}(\xi^1, \xi^2) \delta^{ij} N_i(\xi^1, \xi^2). \quad (44)$$

В качестве примера, иллюстрирующего формулы (38)-(44), рассмотрим простую ситуацию, когда на плоскопараллельную пластинку кремния толщиной  $h = 0.1$  см и вектором отражения  $\vec{\tau}(1, 1, 1)$ , перпендикулярным входной плоскости этой пластинки, падает пакет плоских волн рентгеновских квантов с энергиями в интервале от 11кэВ до 17кэВ, волновые вектора которых параллельны. Будем считать, что кристаллическая пластинка ориентирована таким образом, что условие Брэгга точно выполняется для рентгеновских квантов с энергиями 15кэВ. Далее, эта пластинка деформируется изгибающими моментами  $M_1$  и  $M_2$ , равномерно распределёнными по сторонам этой пластинки, так, что поле деформаций определяется формулами (35) из предыдущего раздела, а изогнутое брэгговское зеркало, полученное в результате этой деформации, показано на рис. 1. Так как по условию на это зеркало падает пакет плоских волн, то в формулах (38)-(44) в этой ситуации следует положить  $\Psi_0(\xi, \varepsilon) = 0$ . Угол между плоскостью дифракции и координатной плоскостью  $(\xi^1, \xi^3)$  будем обозначать через  $\varphi$ . На рис. 5а,б,в,г,д показаны полученные по формуле (39) графики для модуля коэффициента отражения Брэгга от этого изогнутого зеркала для энергий рентгеновских квантов 11кэВ, 13кэВ, 15кэВ и 17кэВ при  $\varphi = 0$ .



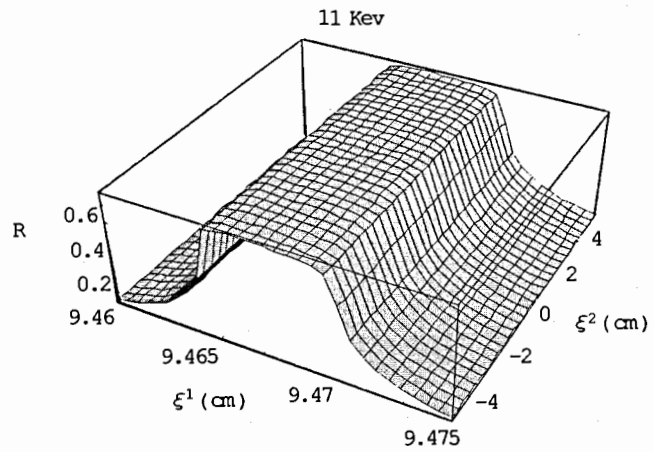


Рис. 5а. Коэффициент отражения Брэгга

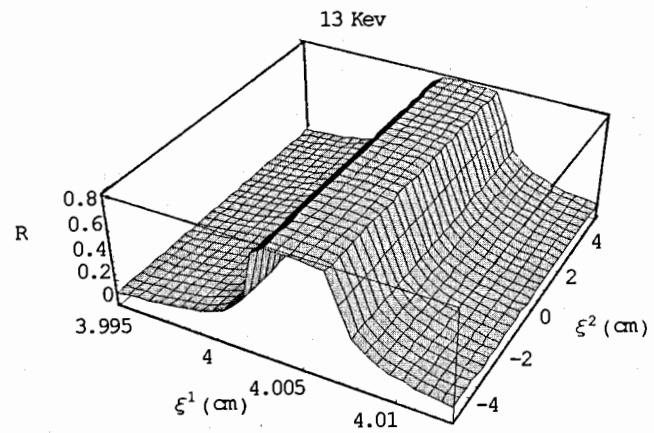


Рис 5б. Коэффициент отражения Брэгга

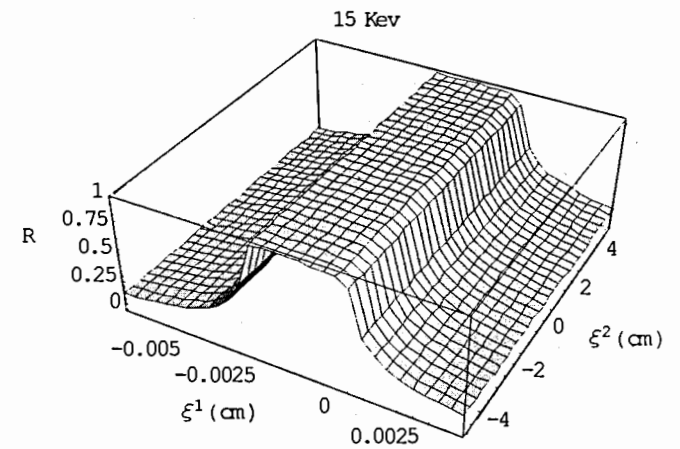


Рис 5в. Коэффициент отражения Брэгга

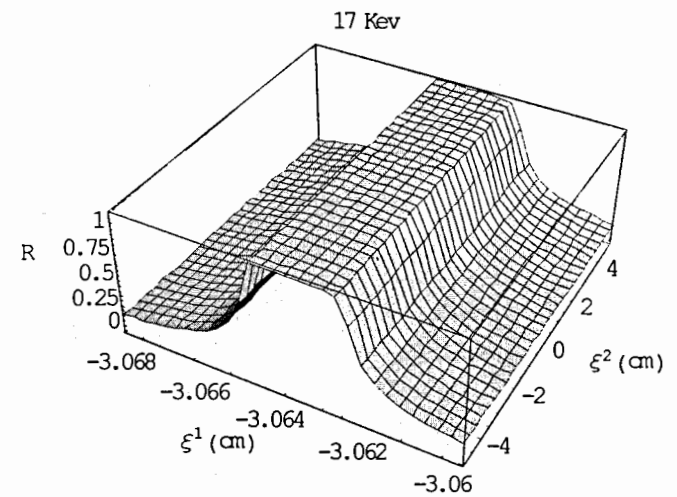


Рис 5г. Коэффициент отражения Брэгга

Напомним, что каустики (множество фокальных точек) волнового фронта рентгеновских квантов, дифрагировавших на брэгговском зеркале, определяются

исключительно фазой поля рентгеновского излучения и не зависят от распределения интенсивности (коэффициента отражения Брэгга) отражённых квантов на поверхности зеркала. На Рис. 6 мы приводим полученные по формулам (42)-(44) каустики для энергий рентгеновских квантов 11кэВ, 13кэВ, 15кэВ и 17кэВ для всего брэгговского зеркала (без учёта распределения интенсивности отражённых квантов по поверхности зеркала, т.е. без учёта зависимости коэффициента отражения Брэгга от координат на поверхности этого зеркала).

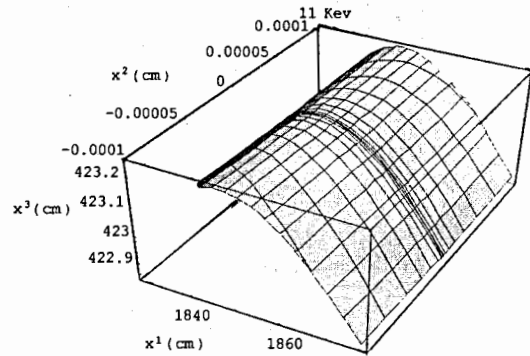


Рис ба. Каустика для дифрагированных квантов

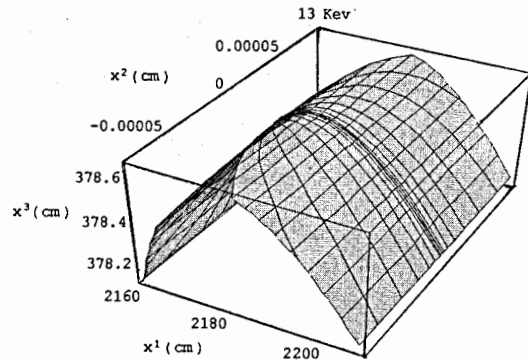


Рис бб. Каустика для дифрагированных квантов

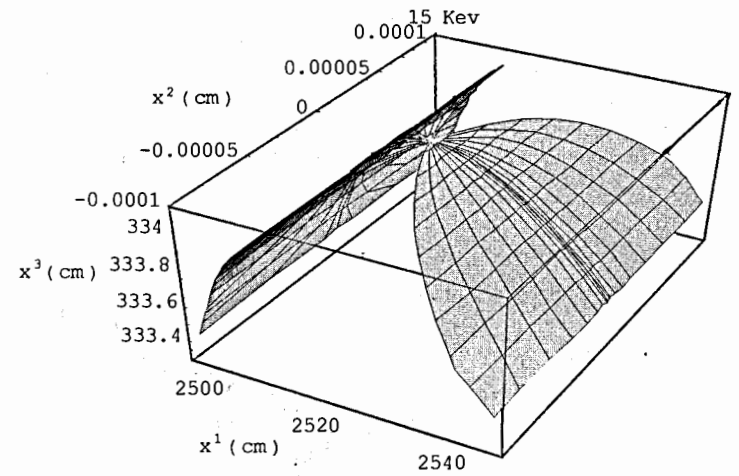


Рис бв. Каустика для дифрагированных квантов

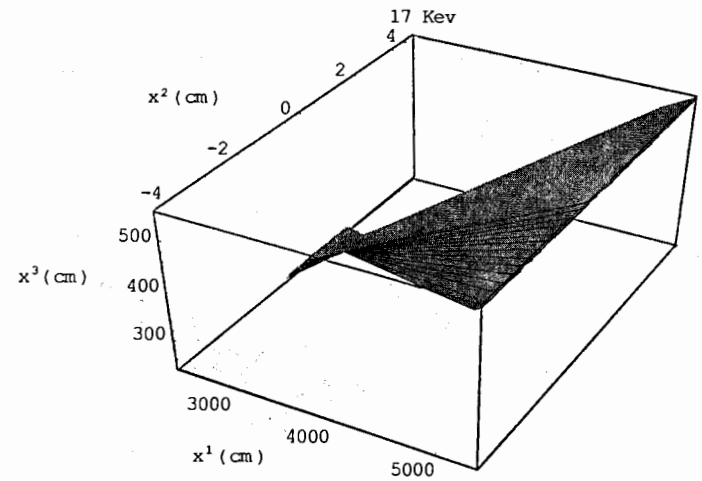


Рис бг. Каустика для дифрагированных квантов

Ясно, что в эксперименте будет наблюдаться только та часть этой каустической поверхности, в которую приходят рентгеновские кванты, отражённые от той области брэгговского зеркала, где коэффициент отражения Брэгга заметно отличен от нуля. Эти области для нашего примера изображены на рис. 5. На рис. 7 мы приводим каустики (многообразия фокальных точек), полученные опять таки по формулам (42)-(44), но уже с учётом зависимости коэффициентов отражения Брэгга от координат.

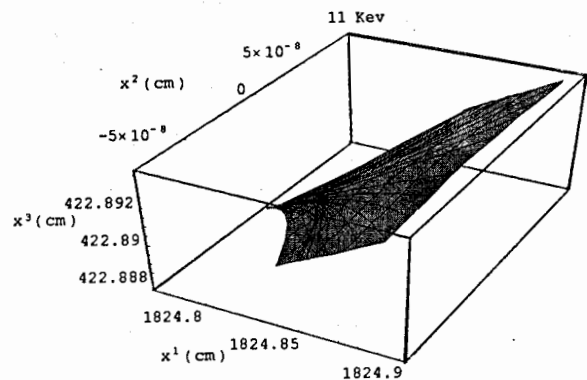


Рис 7а. Каустика при  $9.46 \leq \xi^1 \leq 9.475$ .

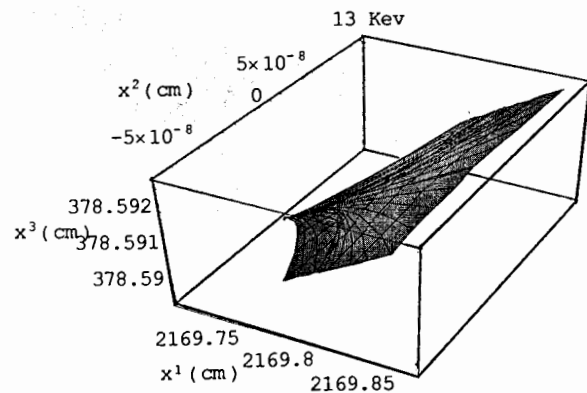


Рис 7б. Каустика при  $3.994 \leq \xi^1 \leq 4.013$

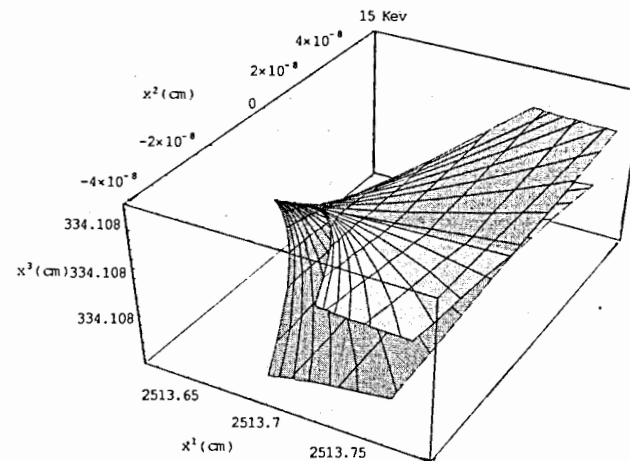


Рис 7в. Каустика при  $-0.007 \leq \xi^1 \leq 0.004$

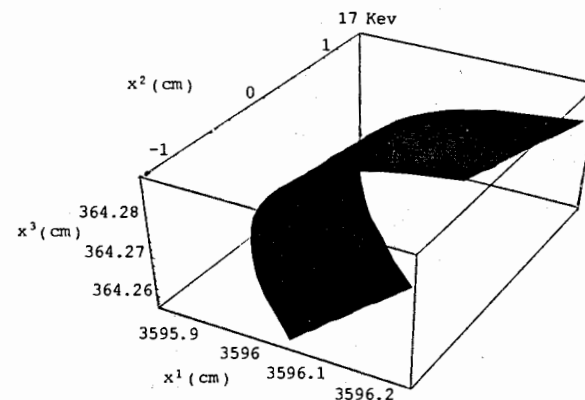


Рис 7г. Каустика при  $-3.069 \leq \xi^1 \leq -3.06$

Следует отметить, что, как видно из этих графиков, даже в этом простейшем случае мы имеем дело с довольно сложной комбинацией элементарных дифференцируемых особенностей (катастроф) фазовой функции  $\Phi_0(\xi^1, \xi^2, \epsilon) + S(\vec{r}, \xi^1, \xi^2)$ , состоящей из особенностей (катастроф)  $A_1, A_2, A_3, A_4$  и  $D_4^+$  по

классификации В.И. Арнольда [19]. Поэтому и речи быть не может о фите распределения интенсивности рентгеновских квантов в каустике (фокусе) гауссовой функцией, который часто встречается последнее время в работах по рентгеновской оптике (см. например [20]). Распределение интенсивности в каустике описывается специальными функциями катастроф, простейшими из которых являются функции Эйри и интеграл Пирси [21] и которые подробно исследованы в работах [22]. Если же моделировать распределение интенсивности гауссовыми пучками, то необходимо использовать специальный метод суммирования гауссовых пучков, рассмотренный в работе [23].

## Литература

- [1] Takagi S., Acta Cryst. 15, 1311-1312, 1962.  
[2] Tuipin D., Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr. 87, 469-511, 1969.  
[3] Chukhovskii F. N., Gabrielyan K. T., Petrashen P. V, Acta Cryst. A34, 610-621, 1978.  
[4] Chukhovskii F. N., Malgrange C., Gronkowski J, Acta Cryst. A52, 47-55, 1996.  
[5] N. Kato, Acta Cryst. A46, 672-681, 1990; Acta Cryst. A48, 829 -841, 1992; Acta Cryst. A 203-213, 1997.  
[6]. Ильинский А. С., Келдыш Л. В., Взаимодействие электромагнитного поля с веществом, Изд. Московского Университета, М., 1987.  
[7]. Хижняк Н. А., Интегральные уравнения макроскопической электродинамики, Наукова Думка Киев, 1986.  
[8]. Bjorken J.D., Drell S.D., Relativistic quantum mechanics, McGraw-Hill Company.  
[9]. Goldberger M. L., Watson K.M., Collision Theory, John Willey & Sons, Inc. 1964.  
[10]. Бир Г.Л., Пикус Г.Е., Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, Наука, Москва, 1972.  
[11]. Bohr A., Mottelson B. R., Nuclear Structure, vol. 1, W.A. Benjamin Inc., New York, Amsterdam, 1969.  
[12]. Дубовик В. М., Чешков А.А. ЭЧАЯ, 1974, т.5, стр. 791.  
[13]. Варшавович Д.А., Москалёв А. Н., Херсонский В.К, Квантовая теория углового момента, М., Наука, 1975.  
[14]. Rose M.E. Multipole fields, McGraw-Hill Company, London, 1955.  
[15]. Амусья М. Я., Атомный фотоэффект, Наука, Москва, 1987; Amusia M. Ya, Kheifets A. S., Phys. Lett., 1981, v.82A, p. 437.  
[16] Лехницкий С. Г., Теория упругости анизотропного тела, Наука, М., 1979.  
[17] Кравцов Ю. А, Орлов Ю. И., Геометрическая оптика неоднородных сред, М., Наука, 1980.  
[18]. Фок В.А., Проблемы дифракции и распространения электромагнитных волн, М., Советское радио, 1970.  
[19] Арнольд В.И., Варченко А.Н., Гуссейн-Заде С.М., Особенности дифференцируемых отображений, М., Наука, 1982.

[20] Chukhovskii F.N., Chang W. Z., Foster E., J. Appl. Phys. 77(5), p. 1843-1848.

[21] Pearcey T., Philos. Mag. 1946, 37, p. 311-317.

[22] Крюковский А. С., Лукин Д. С., Палкин Е. А., Равномерные асимптотики интегралов от быстроосциллирующих функций с вырожденными седловыми точками, АН СССР, Институт радиотехники и электроники. Препринт № 41 (413), М. 1984.

[23] Grikurov V. E., Popov M. M., Wave motion, 1983, v. 5, pp. 1181-1191.

Рукопись поступила в издательский отдел  
31 марта 1999 года.