СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р3 - 8795

В.К.Игнатович, В.И.Лущиков

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ СРЕДЫ И ШЕРОХОВАТОСТИ ПОВЕРХНОСТИ НА ОТРАЖЕНИЕ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ

1975

P3 - 8795

В.К.Игнатович, В.И.Лущиков

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ СРЕДЫ И ШЕРОХОВАТОСТИ ПОВЕРХНОСТИ НА ОТРАЖЕНИЕ УЛЬТРАХОЛОДНЫХ НЕЙТРОНОВ

В настоящей работе рассмотрено два вопроса: а/упругое отражение ультрахолодных нейтронов от кристалла; б/ влияние шероховатостей на коэффициент поглощения ультрахолодных нейтронов /УХН/. Первый вопрос возник в связи с тем, что эксперименты по хранению УХН [1] показали приблизительно одинаковое время хранения независимо от материала стенок ловушек, причем соответствующий этому времени коэффициент поглощения при однократном соударении УХН со стенкой составляет 3.10^{-4}, что по порядку величины примерно совпадает с параметром $d^2/\lambda^2_{гр}$ $/d_0$ - межатомное расстояние, $\lambda_{гр}$ - минимальная длина волны УХН/. Такого рода поправки могут возникнуть при более строгом рассмотрении отражения УХН от кристаллической среды и означают просачивание УХН сквозь кристалл.

Второй вопрос уже однажды рассматривался [2]; была получена интерполяционная формула для коэффициента поглощения в широкой области изменения параметров шероховатой поверхности, однако, как заметил А.В.Степанов [3], в работе [2] не была учтена часть поглощения, связанная с экспоненциально затухающими волнами. Этот недостаток исправляется в данной работе.

В первом пункте работы рассмотрено отражение плоской скалярной волны УХН от одной кристаллической плоскости. Рассмотрение проводится на основе теории многократного рассеяния волн /МРВ/ /см., напр., [4,5] /. В теории МРВ рассеяние плоской волны $\psi_0(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r})$ на объекте, состоящем из точечных рассеивателей /ядер/, описывается волновой функцией:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) - \tilde{b} \sum_j \frac{e^{ik|\vec{r}_j - \vec{r}|}}{|\vec{r}_j - \vec{r}|} \psi_j(\vec{r}_j), \qquad /1/$$

где $\tilde{b}$ - амплитуда рассеяния на одном ядре /предполагается, что все ядра имеют одинаковую амплитуду/, сумма берется по всем ядрам и $\psi_j(\vec{r}_j)$ - волновая функция на j -м ядре. Функция ψ_j складывается из падающей волны и из волн, идущих от всех других ядер, т.е. ψ_j подчиняется уравнению:

$$\psi_j = \psi_0(\vec{r}_j) - \tilde{b} \sum_{\ell \neq j} \frac{e^{ik|\vec{r}_j - \vec{r}_\ell|}}{|\vec{r}_j - \vec{r}_\ell|} \psi_\ell , \qquad /2/$$

где сумма в правой части берется по всем ядрам, кроме j -го.

Из результатов первого пункта следует, что кристаллическая плоскость с главными векторами решетки $\vec{e}_x d_0$ и $\vec{e}_y d_0$, где $\vec{e}_x$ и $\vec{e}_y$ - единичные вектора, преобразует падающую волну в волны, расс.янные по обе стороны от плоскости, причем одна из этих волн - распространяющаяся, а другие - экспоненциально затухающие. Коэффициенты при этих волнах зависят не от $\tilde{b}$, а от $b = \tilde{b}/(1 - ik\tilde{b})$, здесь b действительна для чисто упругого рассеяния. При наличии поглощения на ядрах b содержит мнимую часть. Это приводит к коэффициенту поглощения на кристаллической плоскости $\mu = \mu_0[1 + O(b/d_0)]$, где μ_0 - коэффициент поглощения, определяемый для случая рассеяния на сплошной плоскости с потенциалом $u = 4\pi n_0 b$ / n_0 - плотность ядер на плоскости /потенциал выражен в единицах $\hbar^2/2m$ //.

Во втором пункте работы рассматривается отражение от бесконечного кристаллического полупространства, с целью выявить, не увеличивается ли глубина проникновения УХН внутрь вещества и не происходит ли диффузия УХН по межатомным промежуткам, что привело бы к изменению коэффициента отражения или поглощения.

Из результатов этого пункта следует, что кристалличность среды приводит лишь к изменению фазы отраженной волны на величину $\sim d^2/\lambda^2_{гр}$ по сравнению со случаем отражения от сплошного полупространства с потенциалом $u_0 = 4\pi N b$, где N - число ядер в единице объема. Указанный факт свидетельствует о том, что утечка УХН внутрь среды не имеет места. Более того, поскольку фаза отраженной волны меняется незначительно, то и глубина проникновения меняется незначительно, т.е. коэффициент поглощения μ увеличивается благодаря кристалличности лишь на величину порядка $\mu_0 d_0^2/\lambda_{\text{гр}}^2$, / μ_0 - коэффициент поглощения при отражении от сплошной среды с потенциалом u_0 /.

В третьем пункте мы рассматриваем прохождение УХН через слой конечной толщины и показываем, что коэффициент прохождения экспоненциально мал, т.е. просачивание $\sim d_0^2/\lambda_{\text{гр}}^2$ не имеет места.

В четвертом пункте рассматривается влияние экспоненциально затухающих волн на коэффициент поглощения в случае отражения от шероховатой поверхности и выводится интерполяционная формула для всей области изменения параметров шероховатой поверхности. В качестве параметров принимается среднеквадратичная высота шероховатостей σ и их средний горизонтальный размер или корреляционная длина T. При этом интерполяционная формула для коэффициента поглощения принимает вид:

$$\mu = \mu_0 \sqrt{1 + \frac{2u_0\sigma^2}{1 + C_1\sqrt{u_0}\,T + u_0 T^2}}, \qquad /3/$$

где $C_1 \approx 0{,}6$; $u_0 = u_0' - i u_0'' = 4\pi N b$; $\mu_0 = \frac{\pi}{2}\frac{u_0''}{u_0'}$.

При $u_0\sigma^2 \ll 1$ и $u_0 T^2 \ll 1$ выражение /3/ дает $\mu \approx \mu_0 \left(1 + \frac{u_0'\sigma^2}{1 + C_1\sqrt{u_0'}\,T}\right)$, легко получающееся по теории возмущений; при $u_0'\sigma^2 \gg 1$ и $T = 0$ получаем $\mu \approx \mu_0\sqrt{2u_0'}\,\sigma$, согласующееся с коэффициентом поглощения при отражении от размытого края; при $u_0'\sigma^2 \gg 1$, $u_0' T^2 \gg 1$ получаем естественное увеличение коэффициента поглощения за счет увеличения поверхности: $\mu \approx \mu_0\sqrt{1 + 2\sigma^2/T^2}$.

1. Рассеяние на кристаллической плоскости

В правой части уравнения /2/ сумма берется не по всем ядрам, и это затрудняет его решение. Чтобы обойти эту трудность, воспользуемся следующим приемом.

Рассмотрим вместо уравнения /2/ несколько иное уравнение:

$$\psi_j^{\Lambda} = \psi_0(\vec{r}_j) - \tilde{b} \sum_{\rho} \frac{e^{ik(\vec{r}_j - \vec{r}_\rho)}}{|\vec{r}_j - \vec{r}_\rho|} \left(1 - e^{-\Lambda|\vec{r}_j - \vec{r}_\rho|}\right) \psi_\rho^{\Lambda} + \tilde{b} \Lambda \psi_j^{\Lambda} \qquad /4/$$

в котором суммирование уже проводится по всем ядрам. Нетрудно видеть, что

$$\psi_j = \lim_{\Lambda \to \infty} \psi_j^{\Lambda} . \qquad /5/$$

Как следует из симметрии задачи, при смещении от ядра к ядру, ψ_j^{Λ} может приобретать только фазу. Поскольку эта фаза должна соответствовать падающей волне, то можно заключить, что

$$\psi_j^{\Lambda} = \tilde{A}_{\Lambda} \psi_0(\vec{r}_j), \qquad /6/$$

где $\tilde{A}_{\Lambda}$ - постоянная, для которой получается простое алгебраическое уравнение:

$$\tilde{A}_{\Lambda} = 1 - \tilde{b} \tilde{A}_{\Lambda} \cdot \tilde{C}_{\Lambda}, \qquad /7/$$

здесь

$$\tilde{C}_{\Lambda} = \sum_{\rho} \frac{e^{ikr_\rho}}{r_\rho} \left(1 - e^{-\Lambda r_\rho}\right) e^{i\vec{k}\vec{r}_\rho} - \Lambda . \qquad /8/$$

Суммирование в /8/ можно выполнить с помощью тождества /см. приложение А/:

$$\sum_{N_1}^{N_2} f(n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{N_1}^{N_2} e^{2\pi imx} f(x)dx \qquad /9/$$

/ $f(n)$ - произвольная функция/.

Выполнив суммирование с точностью до членов линейных по d_0 /см. приложение Б/, получаем

$$\tilde{C} = \lim_{\Lambda \to \infty} \tilde{C}_{\Lambda} = -ik + \frac{2\pi i}{d_0^2 k_z} + \frac{c_0}{d_0} + c_1 (3k^2 - k_z^2)\, d_0 \, . \qquad /10/$$

Численные значения коэффициентов c_0 и c_1 найдены в приложении В:

$$c_0 = -4$$

$$c_1 = 0{,}055. \qquad /11/$$

Обозначив $C = \tilde{C} + ik - \dfrac{2\pi i}{d_0^2 k_z}$, находим решение /7/ при $\Lambda \to \infty$ в виде

$$\tilde{A} = \lim_{\Lambda \to \infty} \tilde{A}_{\Lambda} = \frac{1}{1 - ik\tilde{b} + \tilde{b}\left(C + \dfrac{2\pi i}{d_0^2 k_z}\right)} \, . \qquad /12/$$

Подставив полученное значение $\tilde{A}$ или/с учетом /6-5// ψ_j в выражение /1/, представив сферические волны, входящие в /1/, в виде фурье-разложения по плоским волнам и выполнив суммирование с помощью тождества /9/, получим волновую функцию нейтрона при наличии рассеивающей кристаллической плоскости $z = z_0$ в виде

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} - \frac{2\pi i \tilde{b}\tilde{A}}{d_0^2} \sum_{\vec{\tau}} \frac{1}{p_z(\vec{\tau})}\, e^{i p_z(\vec{\tau})|z - z_0| + i k_z z_0 + i(\vec{k}_\rho + \vec{\tau})\vec{\rho}} \, , \qquad /13/$$

где

$$\vec{\tau} = \frac{2\pi}{d_0}(\vec{e}_x m + \vec{e}_y n), \quad p_z(\vec{\tau}) = \sqrt{k^2 - (\vec{k}_\rho + \vec{\tau})^2} + i\sqrt{(\vec{k}_\rho + \vec{\tau})^2 - k^2},$$

$$\vec{k}_\rho = (k_x, k_y)$$

Для дальнейшего удобно ввести некоторые обозначения:

$$b = \frac{\tilde{b}}{1 - ik\tilde{b}}, \quad b_1 = \frac{b}{1 + b\cdot C} = b\,(1 + O(b/d_0)). \qquad /14/$$

Далее, удобно ввести $u_0 = 4\pi b_1 / d_0^3 = 4\pi N_0 b_1$. Предположим вначале, что u_0 действительно. Заметим, что если устремить d_0 к нулю, но при этом устремить и b к нулю так, чтобы $b/d_0^2 = \mathrm{const}$, тем самым будет произведен переход к сплошной плоскости с потенциалом $4\pi n b_1$, и $b_1 = b$, $n = d_0^{-2}$. С помощью u_0 и d_0^2 можно составить безразмерный малый параметр $\alpha = d_0 \sqrt{u_0}$ и чтобы его выделить всюду, где только возможно, необходимо перейти к безразмерным величинам $k \to k/\sqrt{u_0}$ и $r \to r/d_0$, т.е. всюду в дальнейшем, за исключением специально оговоренных случаев, k будет измеряться в единицах $\sqrt{u_0}$, а r - в единицах d_0. Чтобы выделить d_0 из $\vec{\tau}$, удобно под $\vec{\tau}$ в дальнейшем понимать $2\pi(\vec{e}_x m + \vec{e}_y n)$. С учетом всего вышесказанного перепишем выражение /13/, выделив из суммы член с $\tau = 0$ в виде:

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}\alpha} - \frac{i\alpha A}{2k_z} \exp[ik|z - z_0|\alpha + ik_z z_0\alpha + i\vec{k}_\rho\vec{\rho}\alpha] - \qquad /15/$$

$$- \frac{\alpha^2 A}{2} \sum_{\tau \neq 0} \frac{1}{p_\tau} \exp[-p_\tau |z - z_0| + ik_z z_0\alpha + i(\vec{\tau} + \alpha\vec{k}_\rho)\vec{\rho}]$$

где

$$p_\tau = \sqrt{(\vec{\tau} + \alpha\vec{k}_\rho)^2 - \alpha^2 k^2}, \quad A = 1/(1 + \frac{i\alpha}{2k_z}).$$

Первые два члена в /15/ соответствуют распространяющимся волнам, тогда как сумма - экспоненциально затухающим /напомним, что z_0 – координата местонахождения плоскости/. При $\mathrm{Im}\,u_0 = 0$, т.е. α действительно, никаких потерь при рассеянии не должно быть, т.е. сумма интенсивностей прошедшей $|1 - \frac{i\alpha A}{2k_z}|^2$ и отраженной $|\frac{i\alpha A}{2k_z}|^2$ волн должна равняться единице - интенсивности падающей волны. Нетрудно видеть, что это действительно имеет место. При наличии поглощения в системе $(u_0'' \neq 0)$ можно ввести параметр $\eta = b''/b' = u_0''/u_0'$, тогда коэффициент поглощения оказывается равен

$$\mu = 1 - \left|1 - \frac{i a A}{2k_z}\right|^2 - \left|\frac{i a A}{2k_z}\right|^2 - \frac{\eta a}{k_z}(1 + O(a^2)) = \mu_0(1 + O(a^2)) \qquad /16/$$

/μ_0 - поглощение на сплошной плоскости/. Отсюда следует, что кристалличность плоскости изменяет μ_0 на сотые доли процента /поскольку для УХН $a^2 \sim 10^{-4}$ /.

2. *Отражение от кристаллического полупространства*

Выражение /15/ можно интерпретировать так, что плоскость, находящаяся в точке $z = z_0$, возбуждается волной $e^{ik_z z_0 a}$ и дает рассеяние волны с коэффициентом рассеяния - $iaA/2k_z$ и экспоненциальные волны с коэффициентами - $a^2A/2p_\tau$. В случае полупространства функция, возбуждающая плоскость, не равна $\exp(ik_z z_0 a)$, а имеет общий вид $\phi(z_0)$. Положим, что полупространство занимает область $z > 0$ и запишем уравнение для функции $\phi(z_j)$, возбуждающей ядра плоскости $z = z_j$

$$\phi(z_j) = e^{ik_z z_j a} - \frac{iaA}{2} \sum_{\tau, \ell}{}' \frac{1}{p_z(\tau)} e^{ip_z(\tau)|z_j - z_\ell|} \phi(z_\ell), \qquad /17/$$

$(\ell \neq j)$

Будем искать решение этого уравнения в виде:

$$\phi(z_j) = \sum_Q B(Q) e^{-Qz_j}. \qquad /18/$$

Подставив /18/ в /17/ и приравняв соответствующие коэффициенты, получим /см. *Приложение 1*/, во-первых, уравнение для определения Q:

$$1 - \frac{iaA}{2k_z}\left[1 + \frac{1}{1 - \exp(Q - ik_z a)} - \frac{1}{1 - \exp(Q + ik_z a)}\right] -$$
$$- \frac{a^2 A}{2} \sum_{\tau \neq 0} \frac{1}{p_\tau}\left[(1 - \exp(p_\tau - Q))^{-1} + (1 - \exp(p_\tau + Q))^{-1}\right] \qquad /19/$$

и, во-вторых, систему уравнений для определения коэффициентов B(Q):

$$1 - \frac{i a A}{2k_z} \sum_Q B(Q)\left[1-\exp(-Q-ik_z a)\right]^{-1} = 0 \qquad \nu = 0$$

$$\sum_Q B(Q)\left[1-\exp(p_\nu - Q)\right]^{-1} = 0 \qquad \nu \neq 0 . \qquad /20/$$

В уравнении /19/ учтем, что, согласно выражению для A ,

$$A\left(1 - iaA/2k_z\right) = 1 . \qquad /21/$$

После этого уравнение /19/ приводится к виду:

$$1 + \frac{a}{2k_z}\,\frac{\sin k_z a}{\operatorname{ch}Q - \cos k_z a} - \frac{a^2}{2}\sum_{\nu\neq 0}\frac{1}{p_\nu}\left(1 + \frac{\operatorname{ch}p_\nu}{\operatorname{ch}Q - \operatorname{ch}p_\nu}\right) = 0 . \qquad /22/$$

Корнями этого уравнения служат $x_i = \operatorname{ch}Q_i$, которые действительны при действительных a /т.е. действительном a_0 /, поскольку левая часть уравнения /22/ имеет мнимую часть, совпадающую по знаку с мнимой частью $\operatorname{ch}Q$, т.е. может обращаться в нуль только при $\operatorname{Im}(\operatorname{ch}Q) = 0$. Отсюда следует, что $\operatorname{Im}(Q)$ может быть только вида $2\pi i n$. Корни уравнения удобно обозначить индексом ν. Их нетрудно найти разложением по a /см. *Приложение Д*/. С точностью до a^2

$$Q_0 \approx k_z \qquad a\sqrt{1-k_z^2}$$

$$Q_\nu = p_\nu + \frac{a^2}{2p_\nu} = p_\nu + \Delta_\nu . \qquad /23/$$

Теперь найдем коэффициенты B(Q) из системы /20/. Решение облегчается тем фактом, что каждое из уравнений системы содержит только два сравнительно больших слагаемых. В первом уравнении - это единица и член с Q_0, а в уравнении с номером ν - это слагаемые с Q_0 и с Q_ν . Выразим $B(Q_\nu)$ через $B(Q_0)$:

$$B(Q_\tau) = \Lambda_\tau e^{-p_\tau} B(Q_0). \qquad /24/$$

Подставим в первое уравнение системы /2O/ и решим его относительно $B(Q_0)$:

$$B(Q_0) = \frac{2k_z}{i a A}(Q_0 + ik_z a) / [1 + (Q_0 + ik_z a) \sum_{\tau \neq 0} \Lambda_\tau e^{-p_\tau}]. \qquad /25/$$

Найденные коэффициенты позволяют с помощью /15/ найти сумму волн, отраженных каждой плоскостью, а значит и всем полупространством:

$$\psi(\vec r) = e^{i\vec k \vec r a} - \frac{i a A}{2k_z} e^{-ik_z z a + i\vec k_\rho \vec\rho_a} \sum_j \psi(z_j) e^{ik_z z_j a}. \qquad /26/$$

Отсюда определяется коэффициент отражения R:

$$R = -i a \frac{A}{2k_z} \sum_j e^{ik_z z_j a} \sum_Q B(Q) e^{-Q z_j}. \qquad /27/$$

Выполнив суммирование и подставив $B(Q)$, из /24-25/ найдем

$$R = \frac{a k_z - i Q_0}{a k_z + i Q_0} (1 - 2ik_z a \sum_{\tau \neq 0} \Lambda_\tau e^{-p_\tau}). \qquad /28/$$

Поскольку, согласно /23/, $\Lambda_\tau \sim a^2$ и $Q_0 = a k_z'(1 + 0(a^2))$, причем при $u_0'' = 0$ Q_1 действительно, то с точностью до a^3 имеем $|R| = 1$. Это означает, что никакой утечки порядка a^2 – нет. Более того, поскольку амплитуда b_1, как это следует из /14/, отличается от амплитуды b, характерной для сплошной отражающей среды, на величину порядка a^2, то влияние кристалличности на глубину проникновения УХН внутрь среды имеет тот же порядок малости, поэтому изменение коэффициента поглощения, обусловленное дискретностью среды, также можно охарактеризовать параметром a^2:

$$\mu = \mu_0 (1 + 0(a^2)), \qquad /29/$$

где μ_0 - коэффициент поглощения при отражении от сплошной среды.

Рассмотрение задачи для некубической решетки приводит к аналогичным результатам.

3. Прохождение через слой

Уравнение для функции $\phi(z_j)$, возбуждающей ядра плоскости z_j, имеет тот же вид/17/, что и для полупространства, однако решение необходимо теперь искать в ином виде:

$$\phi(z_j) = \sum_Q [B_-(Q) e^{-Qz_j} + B_+(Q) e^{Qz_j}]. \qquad /30/$$

Подстановка /30/ в /17/ приводит /см. *Приложение Е*/ к уравнению /19/ для определения Q и к следующей системе уравнений для нахождения $B_{\pm}(Q)$:

$$1 - \frac{i a A}{2 k_z} \sum_Q [B_-(Q)/(1-\exp(-Q - ik_z a)) + B_+(Q)/(1-\exp(Q - ik_z a))] = 0$$

$$\sum_Q [B_-(Q) e^{-LQ}/(1-\exp(Q - ik_z a)) + B_+(Q) e^{LQ}/(1-\exp(-Q - ik_z a))] = 0$$

$$\sum_Q [B_-(Q)/(1-\exp(p_\tau - Q)) + B_+(Q)/(1-\exp(p_\tau + Q))] = 0 \qquad /31/$$

$$\sum_Q [B_-(Q) e^{-LQ}/(1-\exp(p_\tau + Q)) + B_+(Q) e^{LQ}/(1-\exp(p_\tau - Q))] = 0$$

где L - толщина слоя.

Последние две группы уравнений позволяют выразить $B_{\pm}(Q)$ через $B_{\pm}(Q_0)$:

$$B_-(Q_\tau) = \Lambda_\tau e^{-p_\tau}[B_-(Q_0) + B_+(Q_0)]$$

$$B_+(Q_\tau) = \Lambda_\tau e^{-p_\tau} e^{-Lp_\tau}[B_-(Q_0)e^{-LQ_0} + B_+(Q_0)e^{LQ_0}]. \qquad /32/$$

Подстановка этих значений в первые два уравнения системы /31/ позволяет найти $B_\pm(Q_0)$. Мы не будем выписывать здесь соответствующих громоздких выражений, отметим только, что $B_-(Q_0)$ зависит от L слабо, а $B_+(Q_0) \sim \exp(-2Q_0 L)$. Подставив найденные значения $B_+(Q)$ в /30/ и в /26/, получим амплитуду прошедшей волны:

$$\Gamma = -\frac{ia A}{2k_z} e^{ik_z a(L+1)} \sum_Q \left[\frac{B_-(Q)e^{-QL}}{1-\exp(Q+ik_z a)} + \frac{B_+(Q)e^{QL}}{1-\exp(-Q+ik_z a)}\right]. \qquad /33/$$

Как следует из /32/ и из зависимости $B_\pm(Q_0)$ от L, каждый член суммы в /33/ убывает с L по меньшей мере как $\exp(-Q_0 L)$. Это означает, что и вся сумма зависит от L экспоненциально, т.е. $T \sim e^{-Q_0 L}$, и никакое просачивание порядка a^2 не имеет места.

Все предыдущее рассмотрение относилось только к рассеянию падающей плоской однородной волны. Однако можно показать, что и волны других типов с энергиями меньше $4\pi N_0 b$ не просачиваются сквозь кристаллическую структуру, т.е. их коэффициент прохождения кристаллического слоя конечной толщины экспоненциально мал.

Рассмотрим для примера сферическую волну.

$$\frac{e^{ikr}}{r} = \frac{i}{2\pi} \int \frac{d^2 p_\rho}{p_z} \exp(i\vec{p}_\rho \vec{\rho} + ip_z |z|)$$

где $p_z = \sqrt{k^2 - p_\rho^2}$. Эта сферическая волна представлена здесь в виде фурье-разложения по плоским волнам, часть из которых однородна ($p_z^2 > 0$), а часть - неоднородна ($p_z^2 < 0$). Отметим сразу же, что любая плоская волна с волновым вектором $\vec{p}_\rho$, будь то однородная или неоднородная, порождает после рассеяния на кристаллической плоскости с постоянной решеткой d_0, совокупность плоских волн с волновым вектором $\vec{p}_\rho + \vec{\tau}$:

$$\vec{\tau} = (2\pi / d_0)(\vec{e}_x n + \vec{e}_y m),$$

поэтому достаточно рассматривать плоские волны с

$$p_\rho \le \frac{\pi}{d_0},$$

т.е. принадлежащие как бы первой зоне Бриллюэна, поскольку прохождение волн с большими $\vec{p}_\rho$ тождественно прохождению первых. Если просмотреть все формулы статьи, то можно увидеть, что при мнимом k_z мало что изменится. Никакого просачивания не будет. Мало того, что коэффициент прохождения через кристаллический слой конечной толщины будет экспоненциально мал, но и сама прошедшая волна, будучи неоднородной, в свою очередь экспоненциально затухает, причем она никак не может перейти в распространяющуюся волну, поскольку вектор $\vec{p}_\rho$, принадлежащий первой зоне Бриллюэна, не совпадает ни с каким $\vec{\tau}$. Если обратиться к формулам /23/, то из них можно увидеть, что при мнимом k_z, $Q_0 \propto \sqrt{1 + k_z^2}$, т.е. глубина проникновения неоднородной плоской волны меньше, чем однородной. Это и естественно, поскольку неоднородная волна имеет собственное затухание.

Таким образом, как плоские волны, так и волны других конфигураций не могут просачиваться через кристаллический слой, т.е. имеют коэффициент проникновения экспоненциального вида.

4. Влияние шероховатостей на коэффициент поглощения

Настоящий раздел имеет самостоятельное значение и в нем будут приняты иные единицы, чем в предыдущих, а именно: в качестве единицы длины выберем $l = \lambda_{гр} = 1/\sqrt{u_0}$. В этих единицах уравнение Шредингера для волновой функции, описывающей отражение плоской волны $\exp(i\vec{k}_0\vec{r})$

от полупространства $z > 0$, ограниченного шероховатой поверхностью $z = \zeta(\vec\rho)$, имеет вид:

$$[\Delta + k^2 - \theta(z-\zeta(\vec\rho))]\psi = 0, \qquad /34/$$

где $\theta(x)$ - ступенчатая функция, равная единице при $x > 0$ и нулю при $x < 0$. Функция $\zeta(\vec\rho)$ считается случайной с параметрами $\overline{\zeta} = 0$, $\overline{\zeta^2} = \sigma^2$, $\overline{\zeta(\vec\rho)\zeta(\vec\rho\,')} = \sigma^2\exp(-(\vec\rho-\vec\rho\,')^2/T^2)$, черта обозначает усреднение по реализациям. В случае идеально ровной поверхности $\zeta = 0$, и решение уравнения /34/ в области $z > 0$ имеет вид:

$$\psi = \psi_0 = \exp(i\vec k_{0}\vec r) + A_{k_{0z}}\exp(i\vec k_{0-}\vec r)$$

$$\vec k_\pm = (\vec k_\rho, \pm k_z), \quad \vec k_\rho = (k_x, k_y), \quad k_z = \sqrt{k^2 - k_\rho^2} \qquad /35/$$

$$A_k = (k - ik')/(k + ik'), \quad k' = \sqrt{1-k^2}.$$

В случае малых шероховатостей /34/ можно решать по теории возмущений, взяв в качестве возмущения величину $\delta u = \theta(z-\zeta(\vec\rho)) - \theta(z)$, тогда

$$\psi = \psi_0 + G_0\cdot\delta u\cdot\psi_0 + G_0\cdot\delta u\cdot G_0\cdot\delta u\cdot\psi_0 + \dots \qquad /36/$$

где символическая запись $G_0\cdot\delta u\, f$ означает:

$$G_0\cdot\delta u\cdot f = \int G_0(\vec r,\vec r\,')\,\delta u(\vec r\,')f(\vec r\,')\,d^3r',$$

а функция Грина $G_0(\vec r,\vec r\,')$ подчиняется однородному уравнению

$$[\Delta + k^2 - \theta(z)]G_0(\vec r,\vec r\,') = \delta(\vec r-\vec r\,')$$

и благодаря однородности пространства в направлениях x и y может быть представлена в виде [2]:

$$G_0(\vec r,\vec r\,') = \int\frac{d^2k_\rho}{(2\pi)^2}e^{i\vec k_\rho(\vec\rho-\vec\rho\,')}\,G_{k_z}(z,z'); \quad \vec\rho = (x,y);\ k_z = \sqrt{k^2-k_\rho^2}. \qquad /37/$$

Функция $G_{k_z}(z,z')$ выражается с помощью линейно независимых решений уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + k_z^2 - \theta(z)\right]\psi(z) = 0.$$

Если обозначить их $\mathcal{Y}_{k_z}$ и $\mathcal{H}_{k_z}$ и выбрать таким образом, чтобы $\mathcal{Y}_{k_z}$ содержала падающую волну $\exp(ik_z z)$ в области $z<0$, а $\mathcal{H}_{k_z}$ только рассеянную волну $\exp(-ik_z z)$ в той же области, то

$$G_{k_z}(z,z') = \frac{-1}{2ik_z}\left[\mathcal{Y}_{k_z}(z)\mathcal{H}_{k_z}(z')\theta(z-z') + \mathcal{Y}_{k_z}(z')\mathcal{H}_{k_z}(z)\theta(z'-z)\right]. \quad /38/$$

Подстановка /37/ в /36/ показывает, что оператор $G\delta u$ порождает рассеянные волны с вектором k_ρ и амплитудой, зависящей от выражения

$$\int e^{-i(\vec{k}_\rho - \vec{k}_{0\rho})\vec{\rho}}\,\delta u(\vec{r})\, d^2\rho. \qquad /39/$$

Величина k_ρ в выражении /39/ может принимать любое значение, даже больше полного k. В этом случае $k_z = i\sqrt{k_\rho^2 - k^2}$ - чисто мнимая величина, и порождаемые волны являются экспоненциально затухающими. Эти волны, однако, необходимо учитывать при расчетах с точностью до второго порядка теории возмущений, поскольку в третьем слагаемом выражения /36/ первый оператор $G\cdot\delta u$, действуя на ψ_0, порождает экспоненциально затухающие волны из ψ_0, а второй оператор $G\cdot\delta u$ порождает из этих волн распространяющиеся рассеянные волны. Суммарное выражение для волновой функции /36/ может быть, согласно /2/, представлено в виде:

$$\psi = e^{i\vec{k}_{0+}\vec{r}} + A_{k_{0z}}\left[1 - \sigma^2(\beta_1 + \beta_2)\right] e^{i\vec{k}_{0-}\vec{r}} +$$

$$+ \int \frac{d^2 k_\rho}{(2\pi)^2}\, e^{i\vec{k}_-\vec{\rho}}\, Q(\vec{k}_-, \vec{k}_{0+}) \qquad /40/$$

$$Q(\vec{k}_-, \vec{k}_{0+}) = i[(k_{0z} - ik'_{0z})/(k_z + ik'_z)] \cdot \int \zeta(\vec{\rho}) e^{i(\vec{k}_{0\rho} - \vec{k}_\rho)\vec{\rho}} d^2\rho$$

$$\beta_1 = 2ik_{0z}k'_{0z}, \quad \beta_2 = \frac{k_{0z}}{2\pi} T^2 \int (k_z - ik'_z) d^2k_\rho \exp(-(k_{0\rho} - k_\rho)^2 T^2/4).$$

При отсутствии поглощения действительная часть β_2 описывает уменьшение амплитуды зеркальной волны, обусловленное возникновением волн, рассеянных в незеркальные направления. Эта часть отвечает векторам $k_\rho < k$ и правильно учтена в выражении /21/ работы [2], однако при наличии поглощения возникает дополнительное изменение зеркальной амплитуды, обусловленное тем, что экспоненциально затухающие волны испытывают действие мнимой части потенциала прежде, чем снова преобразуются в рассеянные волны. Эта часть не была учтена в работе [2], она может быть описана величиной

$$\gamma = \lambda \cdot \mathrm{Re}\beta_2 = -\frac{\eta k_{0z}}{2\pi} \cdot \frac{T^2}{2} \int_{k_\rho^2 > k^2} \frac{d^2k_\rho}{k'_z} e^{-(k_{0\rho} - k_\rho)^2 T^2/4} \approx \qquad /41/$$

$$\approx -\frac{\sqrt{\pi}}{2} k_{0z} \eta T \qquad (\eta = u''_0/u'_0)$$

при $T \ll 1$. С учетом этого члена коэффициент поглощения, усредненный по углам падения и спектру, при малых T и σ равен

$$\mu = \mu_0 [1 + \sigma^2 (1 - C_1 T)], \quad \mu_0 = \frac{\pi}{2} n, \quad C_1 = \frac{16}{15\sqrt{\pi}} \approx 0{,}6. \qquad /42/$$

Напомним, что при $\sigma \gg 1$ и $T = 0$ из работы [2] следует

$$\bar{\mu} = \bar{\mu}_0 \cdot c \cdot \sigma, \quad c = 2\sqrt{3}/\pi \approx 1{,}1. \qquad /43/$$

Кроме двух предельных значений /42-43/ можно найти коэффициент поглощения для случая $\sigma \gg 1$ и $T \gg 1$, поскольку при этих значениях параметров

$$\bar{\bar{\mu}} = \bar{\bar{\mu}}_0 \cdot S/S_0 \,, \qquad /44/$$

где S - истинная поверхность, а S_0 - видимая. Из аналитической геометрии следует, что

$$\frac{S}{S_0} = \frac{1}{\cos\vartheta} = \sqrt{1+(\vec{\nabla}_\rho \zeta(\rho))^2} = \sqrt{1+2\,\frac{\sigma^2}{T^2}}\,. \qquad /45/$$

Принимая во внимание/42-45/, запишем единую формулу для всех значений параметров:

$$\bar{\mu} = \bar{\mu}_0 \sqrt{1+\frac{2\sigma^2}{1+0{,}6\,T+T^2}} \qquad /46/$$

или, переходя к размерным величинам:

$$\mu = \frac{\pi}{2}\,\eta \sqrt{1+\frac{2\sigma^2 u_0}{1+0{,}6\sqrt{u_0}\,T+u_0 T^2}}\,. \qquad /47/$$

Полученное выражение позволяет оценить параметры поверхности при наличии сильного увеличения коэффициента поглощения.

Авторы искренне благодарны В.В.Голикову и И.М.Франку за полезные замечания.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Сумма $\sum\limits_{n=N_1}^{N_2} f(n)$ может быть с помощью теоремы о вычетах представлена в интегральной форме

$$\sum_{n=N_1}^{N_2} f(n) = \frac{1}{2i}\int_C \operatorname{ctg}(\pi z)\, f(z)\,dz\,, \qquad /A1/$$

где интегрирование производится по контуру, указанному на *рис. 1*. На верхней части контура

$$\frac{1}{2i}\operatorname{ctg}(\pi z) = \frac{1}{2}\,\frac{e^{i\pi(x+i\epsilon)}+e^{-i\pi(x+i\epsilon)}}{e^{i\pi(x+i\epsilon)}-e^{-i\pi(x-i\epsilon)}} = \qquad /A2/$$

$$= -\frac{1}{2}\left(1+e^{2\pi i(x+i\epsilon)}\right)\sum_{m=0}^{\infty} e^{2\pi i m(x+i\epsilon)}\,.$$

На нижней части контура

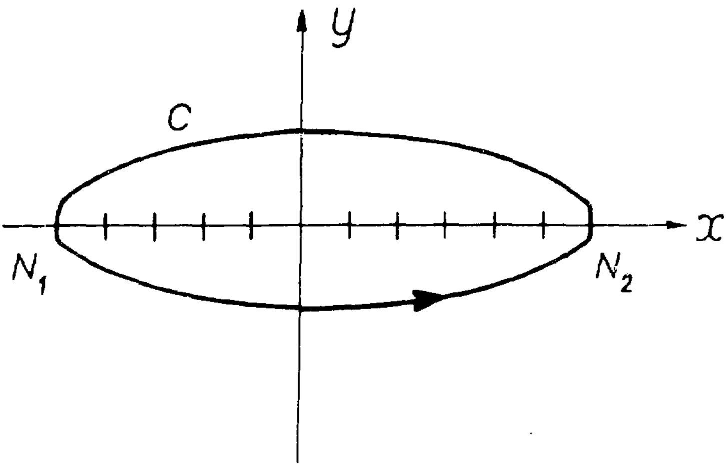
$$\frac{1}{2i}\,\mathrm{ctg}\,(\pi z) = \frac{1}{2i}\,\mathrm{ctg}(\pi(x - i\epsilon)) = \frac{1}{2}\,(1 + e^{-2\pi i(x - i\epsilon)}\quad) =$$

/А3/

$$= \frac{1}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} e^{-2\pi i m(x - i\epsilon)} .$$

Складывая обе части и устремляя $\epsilon \to 0$, получаем

$$\sum_{n=N_1}^{N_2} f(n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{N_1}^{N_2} f(x)\, e^{2\pi i m x}\, dx .$$ /А4/



ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Воспользуемся представлением:

$$\frac{e^{ikr}}{r} = \frac{i}{2\pi}\int \frac{d^2 p_\rho}{p_z}\, e^{i p_\rho \rho + i p_z |z|} = \frac{i}{2\pi}\int \frac{d^2 p_\rho}{p_z}\, e^{i p_\rho \rho} \qquad z = 0 .$$ /Б1/

Аналогично

$$\frac{e^{ikr}}{r}e^{-\Lambda r}\Big|_{z=0} = \frac{e^{i(k+i\Lambda)r}}{r}\Big|_{z=0} = \frac{i}{2\pi}\int \frac{d^2p_\rho}{p_{\Lambda z}} e^{i\vec{p}_\rho\vec{\rho}}, \qquad /Б2/$$

$$p_{\Lambda z} = \sqrt{(k+i\Lambda)^2 - p_\rho^2},$$

С помощью этих выражений первый член правой части /8/ можно записать в виде:

$$\tilde{C}_\Lambda + \Lambda = \frac{i}{2\pi}\int d^2p_\rho \sum_{\ell} e^{i(p_\rho+k_\rho)\rho_\ell}\left(\frac{1}{p_z} - \frac{1}{p_{\Lambda z}}\right) = \qquad /Б3/$$

$$= \frac{i}{2\pi}\sum_{\tau}\int d^2p_\rho \int d^2\rho\, e^{id_0(\vec{p}_\rho+\vec{k}_\rho)\vec{\rho} - 2\pi i\vec{\tau}\vec{\rho}}\left(\frac{1}{p_z} - \frac{1}{p_{\Lambda z}}\right)$$

$$\rho = \rho_\ell/d_0, \quad \tau = \vec{e}_x m + \vec{e}_y n, \quad e_x^2 = e_y^2 = 1, \quad \vec{e}_x\vec{e}_y = 0.$$

Здесь мы воспользовались дважды правилом суммирования /А4/. Выполним интегрирование по $d^2\rho$ и d^2p_ρ и выделим член с $\tau = 0$, тогда получим:

$$\tilde{C}_\Lambda + \Lambda = 2\pi i\sum_{\tau}\int d^2p_\rho\, \delta(d_0(\vec{p}_\rho+\vec{k}_\rho) - 2\pi\vec{\tau})\left(\frac{1}{p_z} - \frac{1}{p_{\Lambda z}}\right) =$$

$$= \frac{i}{d_0 k_{0z}\beta} + \frac{1}{d_0}\sum_{\tau\neq 0}\left(\frac{1}{p_\tau} - \frac{1}{p_{\Lambda\tau}}\right) + O\left(\frac{1}{\Lambda}\right) \qquad /Б4/$$

$$\beta = d_0/2\pi, \quad p_\tau = \sqrt{(\vec{\tau}-\vec{k}_\rho\beta)^2 - k^2\beta^2}, \quad p_{\Lambda\tau} = \sqrt{(\vec{\tau}-\vec{k}_\rho\beta)^2 + (\Lambda - ik)^2\beta^2}.$$

Заметим, что величины типа $k\cdot\beta$ малы по сравнению с единицей, поэтому правую часть можно разложить по степеням $k\cdot\beta$, воспользовавшись следующими соотношениями:

$$\frac{1}{|\vec{R}-\vec{a}|}=\frac{1}{R}-(\vec{a}\,\vec{\nabla})\frac{1}{R}+\frac{1}{2}(\vec{a}\,\vec{\nabla})^2\frac{1}{R}+\dots \qquad /Б5/$$

$$\vec{a}=(\beta\vec{k}_\rho,\ ik\beta),\quad \vec{R}=\begin{cases}(\vec{r},0)=\vec{r}\\ \vec{r}_\Lambda=(\vec{r},\Lambda\beta).\end{cases}$$

Применим эти соотношения к $1/\rho_r$ и $1/\rho_{\Lambda r}$, и оставим только члены до второго порядка по βk, которые после суммирования по $\vec{r}$ не исчезают при стремлении $\Lambda\to\infty$, и воспользуемся тем фактом, что суммирование производится по положительным и отрицательным значениям $\vec{r}$, т.е. члены, пропорциональные нечетным степеням r_x и r_y, пропадают. В результате получим:

$$\tilde{C}_\Lambda+\Lambda=\frac{2\pi i}{d_0^2k_{0z}}+\frac{1}{d_0}\sum_{r\neq 0}\Big[\Big(\frac{1}{r}-\frac{1}{r_\Lambda}\Big)-\frac{ik\beta^2\Lambda}{r_\Lambda^3}+ \qquad /Б6/$$

$$+\frac{\beta^2}{4}\frac{(3k^2-k_z^2)}{r^3}\Big]$$

$$r_\Lambda=\sqrt{r^2+\Lambda^2\beta^2}\,.$$

Переобозначим $\Lambda\beta=\lambda$ и рассмотрим коэффициент при $1/d_0$ в выражении для C_Λ. Этот коэффициент равен:

$$C_{0\Lambda}=\sum_{(m,n)\neq(0,0)}\Big[\frac{1}{\sqrt{m^2+n^2}}-\frac{1}{\sqrt{m^2+n^2+\lambda^2}}\Big]-2\pi\lambda, \qquad /Б7/$$

где суммирование проводится по всем m и n, не равным одновременно нулю. При $\Lambda\to\infty$ λ тоже стремится к ∞ и $C_{0\Lambda}\to c_0$. Вычисление c_0 дано в *Приложении В.*

Найдем теперь коэффициент при ik. С тем же переобозначением $\lambda = \beta\Lambda$ имеем

$$C_{k\Lambda} = \frac{1}{2\pi}\sum_{(m,n)\neq(0,0)} \frac{\Lambda}{(\Lambda^2+m^2+n^2)^{3/2}}. \qquad /Б8/$$

При $\Lambda \to \infty$ сумма превращается в интегральную сумму

$$C_k = \lim_{\Lambda\to\infty} C_{k\Lambda} = \frac{1}{2\pi}\lim_{\substack{\Delta x\to 0\\ \Delta y\to 0}}\sum \frac{\Delta x\cdot\Delta y}{(x^2+y^2+1)^{3/2}},$$

где

$$x = m/\Lambda,\quad y = n/\Lambda,\quad \Delta x = 1/\Lambda,\quad \Delta y = 1/\Lambda.$$

При этом в пределе получаем

$$C_k = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx\,dy}{(x^2+y^2+1)^{3/2}} = 1. \qquad /Б9/$$

Коэффициент при $d_0(3k^2-k_z^2)$ в /Б6/ равен:

$$C_1 = \frac{1}{16\pi^2}\sum_{(m,n)\neq(0,0)}(m^2+n^2)^{-3/2}. \qquad /Б10/$$

Расчет этого коэффициента также дается в *Приложении В*. С учетом /Б7/, /Б9/ и /Б10/ получаем окончательное выражение для $\tilde C_\Lambda$ и в пределе $\Lambda\to\infty$ для $\tilde C = \lim_{\Lambda\to\infty}\tilde C_\Lambda$:

$$\tilde C = \frac{c_0}{d_0} - ik\cdot c_1(3k^2-k_{0z}^2)\,d_0 + \frac{2\pi i}{d_0^2 k_{0z}}. \qquad /Б11/$$

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Воспользуемся методом вычисления решеточных сумм, изложенным в работах [6-9]. Согласно [6],

$$\sum (m^2+n^2)^{-s} = 4\zeta(s)\beta(s), \qquad /В1/$$

где $\zeta(s)$ — ζ - функция Римана, а функция $\beta(s)$ протабулирована в работе [6]. Покажем, что коэффициент C_0 /57/ можно при $\Lambda\to\infty$ также выразить с помощью /B1/. Для этого обозначим

$$S(s)=\lim_{\Lambda\to\infty}\left\{\sum_{(m,n)\neq(0,0)}\left[(m^2+n^2)^{-s}-(m^2+n^2+\Lambda^2)^{-s}\right]-2\pi\Lambda^{2(1-s)}\right\}, \qquad /B2/$$

тогда $c_0=S(1/2)$. Но при $\mathrm{Re}\,s>1$ первый член суммы сходится, $\lim_{\Lambda\to\infty}\Lambda^{2(1-s)}=0$ и

$$\lim_{\Lambda\to\infty}\sum_{(m,n)\neq(0,0)}(\Lambda^2+m^2+n^2)^{-s}=\lim_{\Lambda\to\infty}\Lambda^{2(1-s)}\sum_{m,n}(x_n^2+y_m^2+1)^{-s}\Delta x_n\Delta y_m,$$

/B3/

где $x_n=n/\Lambda$, $y_m=m/\Lambda$, $\Delta x_n=\Delta y_m=\frac{1}{\Lambda}$. В пределе $\Lambda\to\infty$

второй сомножитель стремится к интегралу

$$\lim_{\Lambda\to\infty}\sum_{n,m}(x_n^2+y_m^2+1)^{-s}\Delta x_n\Delta y_m=\int\frac{dx\,dy}{(x^2+y^2+1)^{3/2}}=2\pi. \qquad /B4/$$

Первый же множитель в /B3/ стремится к нулю. Таким образом, доказано, что при $\mathrm{Re}\,s>1$ выражение $S(s)$ совпадает с /B1/. Для вычисления коэффициента C_0 необходимо аналитически продолжить $S(s)$ из области $\mathrm{Re}\,s>1$ в точку $s=\frac{1}{2}$. Покажем, что это продолжение однозначно. Действительно, функция $\beta(s)$, согласно [6] не имеет особенностей в области $s>0$ и ведет себя в этой области монотонно, поэтому ее особенности лежат достаточно далеко от оси $\mathrm{Im}\,s=0$. Функция $\zeta(s)$ имеет единственную особую точку [10] $s=1$, причем особенность эта является полюсом. Продолжение посредством огибания полюса - однозначно, поэтому

$$c_0=4\zeta(0{,}5)\cdot\beta(0{,}5); \qquad /B5/$$

аналогично

$$c_1=\frac{1}{4\pi^2}\zeta(1{,}5)\beta(1{,}5). \qquad /B6/$$

Поскольку $\beta(0,5) \approx 0,67$; $\beta(1,5) \approx 0,86$, $\zeta(0,5) \approx -1,46$; $\zeta(\frac{3}{2}) \approx 2,61$, то

$$c_0 = S(0,5) \approx -4, \quad c_1 = \frac{1}{16\pi^2} S(\frac{3}{2}) \approx 0,055. \qquad /В7/$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Г

Подставим в /17/ e^{-Qz_1} вместо $\phi(z_1)$ и рассмотрим сумму:

$$\sum_{(l^{\prime} z_1) \neq 0} e^{i\alpha p_z(\tau)|z_1 - z_{l^{\prime}}|} e^{-Qz_{l^{\prime}}} = \mu(Q,\tau) e^{i\alpha p_z(\tau) z_1} + \eta(Q,\tau) e^{-Qz_1}$$

$$/Г1/$$

$$\mu(Q,\tau) = -[1-\exp(-Q-i\alpha p_z(\tau))]$$

$$\eta(Q,\tau) = [1 + [1-\exp(-i\alpha p_z(\tau)-Q)] + [1-\exp(-i\alpha p_z(\tau)+Q)]],$$

где последнее равенство есть определение функций $\mu(Q,\tau)$ и $\eta(Q,\tau)$. Если теперь вместо $\phi(z_1)$ подставить в /17/ выражение /18/, то с учетом /Г1/ будем иметь:

$$\sum_Q B(Q) e^{-Qz_1} + e^{i\alpha k_z z_1} = -\frac{i\alpha A}{2} \sum_\tau \sum_Q \frac{B(Q)}{p_z(\tau)} [\mu(Q,\tau) e^{i\alpha p_z(\tau) z_1} +$$

$$+ \eta(Q,\tau) e^{-Qz_1}]. \qquad /Г2/$$

Приравнивая в этом равенстве коэффициенты при $\exp(-Qz_1)$, получаем уравнение для нахождения Q:

$$1 = -i\frac{\alpha A}{2} \sum_\tau \frac{\eta(Q,\tau)}{p_z(\tau)}. \qquad /Г3/$$

Приравнивая нулю коэффициенты при $\exp(i\alpha p_z(\tau) z_1)$, получаем уравнение для определения коэффициентов $B(Q)$:

$$\delta_{\tau,0} - \frac{i\alpha A}{2p_z(\tau)} \sum_Q B(Q)\mu(Q,\tau) = 0, \qquad /Г4/$$

где $\delta_{\tau,0}$ - символ Кронекера, равный 1 при $\tau=0$ или 0 в противном случае. Учитывая, что $p_z(\tau)=k_z$ при $\tau=0$ и $p_\tau=\tau/a$ при $\tau\neq 0$, получаем выражения /19/ и /20/, в которых для μ и η использованы их явные выражения.

ПРИЛОЖЕНИЕ Д

Найдем корни уравнения /22/:

$$1=\frac{a^2}{2}\left[\frac{\sin k_z a}{k_z a(\operatorname{ch}Q-\cos k_z a)}+\sum_{\tau\neq 0}\frac{1}{p_\tau}\left(1+\frac{\operatorname{sh}p_\tau}{\operatorname{ch}Q-\operatorname{ch}p_\tau}\right)\right]; \qquad /Д1/$$

обозначим наименьшее значение Q через Q_0, а комбинацию $\operatorname{ch}Q_0-\cos k_z a$ через f_0. Умножим обе части уравнения /Д1/ на f_0 и выразим $\operatorname{ch}Q_0$ через f_0, т.е. $\operatorname{ch}Q_0=f_0+\cos k_z a$, тогда уравнение примет вид:

$$f_0=\frac{a^2}{2}\left[\frac{\sin k_z a}{k_z a}+\sum_{\tau\neq 0}\frac{f_0}{p_\tau}\left(1+\frac{\operatorname{sh}p_\tau}{f_0+\cos k_z a-\operatorname{ch}p_\tau}\right)\right]. \qquad /Д2/$$

Решение его можно находить итерационными методами. В результате получаем:

$$f_0=\frac{a^2}{2}+O(a^4). \qquad /Д3/$$

Отсюда легко найти Q_0.

$$\operatorname{ch}Q_0=g=f_0+\cos k_z a=1+\chi,\ \chi=\frac{a^2}{2}(1-k_z^2)+O(a^4)>0$$

$$Q_0=\ln(g+\sqrt{g^2-1})=\ln(1+\chi+\sqrt{2\chi+\chi^2})=\sqrt{2\chi}+O(\chi^{3/2})= \qquad /Д5/$$

$$=a k_z'+O(a^3).$$

По виду уравнения /Д1/ можно сказать, что остальные значения Q лежат вблизи p_τ. Обозначив $f_\tau = chQ_\tau - chp_\tau$, получим для f_τ уравнение:

$$f_\tau = \frac{a^2}{2}\Big[\frac{sh\,p_\tau}{p_\tau} + f_\tau\Big(\frac{\sin k_z a}{k_z a(f_\tau + ch\,p_\tau - \cos(k_z a))} + \frac{1}{p_\tau}\Big) +$$

$$+ f_\tau \sum_{\tau' \neq \tau_0, \tau}\Big(1 + \frac{sh\,p_{\tau'}}{f_\tau + ch\,p_\tau - ch\,p_{\tau'}}\Big)\frac{1}{p_{\tau'}}\Big]. \qquad /Д6/$$

итерационное решение которого есть:

$$f_\tau = \frac{a^2}{2}\frac{sh\,p_\tau}{p_\tau} + O(a^4). \qquad /Д7/$$

Обозначив $Q_\tau = p_\tau + X_\tau$, получим

$$f_\tau = chQ_\tau - ch\,p_\tau = X_\tau \cdot sh\,p_\tau, \qquad /Д8/$$

откуда сравнением с /Д7/ находим

$$X_\tau = a^2/2p_\tau. \qquad /Д9/$$

ПРИЛОЖЕНИЕ Е

В случае слоя конечной толщины вторая сумма во второй строке выражения /Г1/ будет иметь вид:

$$\sum_{l=j+1}^{L} e^{iap_z(\tau)z_j}\, e^{-(Q-iap_z(\tau))z_l} = -e^{-Qz_j}\cdot[1-\exp(Q-iap_z(\tau))] +$$

$$+ e^{-ip_z(\tau)z_j a}\,\frac{\exp(-Q+iap_z(\tau)L)}{1-\exp(Q-iap_z(\tau))}. \qquad /Е1/$$

поэтому всю сумму в правой части уравнения /17/ можно представить в виде:

$$S = \sum_{(\ell \neq j)=0}^{L} e^{i\alpha p_z(\tau)|z_j - z_\ell| - Qz_\ell} = \mu_-(Q,\tau)\, e^{i\alpha p_z(\tau) z_j} +$$

$$+\eta_+(Q,\tau)\, e^{-Qz_j} + \chi_-(Q,\tau)\, e^{-i\alpha p_z(\tau) z_j} \qquad /E2/$$

$$\mu_-(Q,\tau) = \frac{1}{1-\exp(-Q - i\alpha p_z(\tau))}\,; \quad \chi_-(Q,\tau) = \frac{\exp[(i\alpha p_z(\tau) - Q)L]}{1-\exp(Q - i\alpha p_z(\tau))}\,;$$

$$\eta_-(Q,\tau) = -[\mu_-(Q,\tau) + \mu_-(-Q,\tau)].$$

При решении уравнения /17/ в случае конечного слоя удобно решение искать в виде /30/, Постановка его в /17/ с учетом /E2/ дает

$$\Sigma\,(B_+(Q)e^{Qz_j} + B_-(Q)\,e^{-Qz_j}) = e^{i\alpha k_z z_j} - \frac{i\alpha A}{2}\sum_{\tau,Q}\frac{1}{p_\tau}\,[B_-(Q)\times$$

$$\times(\mu_-\, e^{i\alpha p_z(\tau) z_j} + \eta_- e^{-Qz_j} + \chi_- e^{-i\alpha p_z(\tau) z_j}) + \qquad /E4/$$

$$+B_+(Q)(\mu_+ e^{i\alpha p_z(\tau) z_j} + \eta_+ e^{Qz_j} + \chi_+ e^{-i\alpha p_z(\tau) z_j})],$$

где μ_+, η_+, χ_+ **получаются из** μ_-, η_-, χ_- **заменой** Q **на** $-Q$. **Очевидно, что** $\eta_+ = \eta_- = \eta$, **поэтому приравнивание коэффициентов при** e^{-Qz_j} **и** e^{Qz_j} **дает одно и то же уравнение /Г3/. Приравнивание же нулю коэффициентов при** $e^{i\alpha p_z(\tau) z_j}$ **и** $e^{-i\alpha p_z(\tau) z_j}$ **дает две системы уравнений:**

$$\delta_{\tau,0} - \frac{i a A}{2 p_z(\tau)} \sum_Q [B_-(Q)\mu_-(Q,\tau) + B_+(Q)\mu_+(Q,\tau)] = 0$$

$$\sum_Q [B_-(Q)\chi_-(Q,\tau) + B_+(Q)\chi_+(Q,\tau)] = 0. \qquad /E5/$$

/$\delta_{\tau,0}$ - символ Кронекера/. Полученные уравнения совпадают с /31/.

Литература

1. *Ф.Л.Шапиро. Сообщение ОИЯИ, Р3-7135, Дубна, 1973.*
2. *В.К.Игнатович. Сообщение ОИЯИ, Р4-7055, Дубна, 1973.*
3. *А.В.Степанов, А.В.Шелагин. Кр. сообщения по физике ФИАН, № 1, 1974.*
4. *В.Г.Барышевский, В.Л.Любошиц, М.И.Подгорецкий. Препринты ОИЯИ, Р-2111, Р-2230, Дубна, 1965.*
5. *В.К.Игнатович. Препринт ОИЯИ, Р4-6553, Дубна, 1972.*
6. *M.L.Glasser. J.Math.Phys., 14, 409 (1973).*
7. *M.L.Glasser, ibid , 14, 707 (1973).*
8. *M.L.Glasser, ibid, 15, 520 (1974).*
9. *A.Houtot, ibid , 15, 268 (1974).*
10. *Э.Т.Уиттекер, Дж.Н.Ватсон. Курс современного анализа., ч. 2, М., Физматгиз, 1963.*

Рукопись поступила в издательский отдел
16 апреля 1975 года.