объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P4-88-693

В.К.Игнатович

НОВЫЙ ПОДХОД К ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ДИФРАКЦИИ НА ИДЕАЛЬНОМ ТРЕХМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ

Направлено в "Журнал экспериментальной и теоретической физики"

1988

1. Введение

В существующей теории динамической дифракции чрезвычайно большую роль играет представление об обратном трехмерном пространстве векторов решетки. В ней вводятся такие понятия, как дисперсионная поверхность, сферы Лауэ, Эвальда и различные соотношения между ними. Все эти атрибуты делают язык динамической теории дифракции очень абстрактным и трудным для восприятия. Наиболее хорошо в существующей теории разработано двухволновое приближение. Выход за рамки двухволнового приближения приводит к резкому возрастанию вычислительных трудностей, которые усугубляются излишней абстрактностью. Мы покажем, и это является целью данной работы, что динамическую теорию дифракции можно сформулировать в более наглядных терминах. Причем общая формулировка нисколько не ограничивается двухволновым приближением. Разумеется, конкретные расчеты оказываются тем сложнее, чем большее число волн участвует в дифракции, но алгоритм решения одинаков при любом количестве волн и легко осуществляется на скромных компьютерах.

Основным в новой формулировке теории является представление о дифракции на одной бесконечной кристаллической плоскости, параллельной входной поверхности. Плоская волна проходит через эту плоскость и отражается от нее, испытывая только дискретные изменения волнового вектора, определяемые двумерной обратной решеткой плоскости. Добавление других плоскостей, которые составляют трехмерный кристалл, приводит только к изменению интенсивностей рефлексов одной плоскости, но не меняет направлений рефлексов. Таким образом, направления дифракции определяются только поверхностной дифракционной решеткой, глубинная же структура кристалла фильтрует некоторые из этих направлений, усиливая их интенсивность.

Расчет интенсивностей здесь производится методом рекуррентных соотношений. Это значит следующее: 1) амплитуды рассеяния на одной плоскости считаются известными, 2) амплитуды волн Ψ_n, падающих на n-ю от входной поверхности плоскость, выражаются через амплитуды волн, падающих на n-1-ю плоскость. Применяя соответствующее соотношение рекуррентным образом n раз, можно Ψ_n выразить через амплитуду плоской волны Ψ_1, падающей на первую плоскость. Амплитуду же Ψ_1 без ущерба для общности можно считать равной единице. Следует, однако, отметить, что многократное применение рекуррентной процедуры оказывается ненужным, если воспользоваться приемом мысленного разрезания бесконечного кристалла на отдельные периоды.

Во втором пункте мы сформулируем все основные уравнения, а в третьем приведем решение некоторых конкретных задач динамической теории дифракции для точечных рассеивателей в случае тетрагонального моноатомного кристалла с тетрагональной осью, перпендикулярной входной поверхности. Для простоты и в чисто иллюстративных целях мы ограничимся только рассеянием скалярных волн и для конкретности будем иметь в виду задачу о дифракции нейтронов. В заключение статьи для демонстрации перспективности метода рассмотрен эффект двухволнового брэгговского отражения, в котором сочетаются геометрия Лауэ и Брэгга. В существующей теории соответствующие расчеты требуют применения четырехволнового приближения.

Заметим, что задача о дифракции волн на точечных рассеивателях исследовалась во многих работах (см., например, монографию[1] и ссылки в ней). Для некоторых структур удается

найти точное решение. Например, точно решается задача о дифракции на кристаллической нити и плоскости. (Здесь к ссылкам упомянутой монографии[1] необходимо добавить работы[2] и[3].) Задача об отражении от полубесконечного трехмерного кристалла решена в работе[4], но,на наш взгляд, это решение не очень удобно для практических расчетов. Задача о дифракции на кристалле конечной толщины строго решена впервые в настоящей работе.

Метод рекуррентных соотношений для одномерных задач развивался во многих работах. Среди самых ранних[5-7] из известных автору работа[6] наиболее близка к той идеологии, которая используется здесь. В более поздних работах, например в книге[8], развивались в основном методы, изложенные в монографии[7], где так же, как в публикации[5], рекуррентный метод применялся для последовательного учета граничных условий на поверхностях раздела соседних слоев. В работах[3,9-11] был сделан новый шаг в развитии метода, а именно, при рассмотрении многослойных систем оказалось удобным ввести воображаемые вакуумные щели между слоями. Эти щели, будучи бесконечно узкими, никак не влияют на физику процесса, но сильно упрощают математическое решение задачи. Основным объектом исследования в указанных работах было рассеяние бесспиновых нейтронов, однако в работах[3,9] было отмечено, что метод применим не только к рассеянию скалярных волн, но и в более сложных случаях. Это позволяет сделать переход от одномерного пространства к трехмерному, поскольку дифрагированную волну можно представить в виде бесконечномерного вектора, каждая компонента которого соответствует одному из направлений дифракции. Именно этот прием и используется в данной работе.

2. Уравнение дифракции волн на произвольном трехмерном кристалле

Рассмотрим сначала бесконечный кристалл, состоящий из одинаковых параллельных друг другу плоскостей. Мысленно разобьем его бесконечно узкими вакуумными промежутками на отдельные периоды, причем разбиения проведем посередине между атомными плоскостями. Без ущерба для общности будем считать потенциалы атомов симметричными относительно плоскости.

Выберем какой-нибудь вакуумный промежуток. Обозначим в нем волну, распространяющуюся в сторону плоскостей, лежащих справа от выбранного промежутка, через $\vec{\Psi}_o$, а волну, распространяющуюся в сторону плоскостей, лежащих слева от выбранного промежутка, через $\overleftarrow{\Psi}_o$. Заметим, что обе эти волны являются бесконечномерными векторами, поскольку содержат компоненты, соответствующие всем возможным направлениям дифракции, причем даже тем, которые приводят к виртуальным, т.е. экспоненциально затухающим по направлению от плоскости, волнам. Волна $\overleftarrow{\Psi}_o$ связана с $\vec{\Psi}_o$ очевидным соотношением

$$\overleftarrow{\Psi}_o=R\vec{\Psi}_o, \tag{1}$$

где R - амплитуда отражения от полубесконечного кристалла, которая, естественно, представляет собой бесконечномерную матрицу.

Рассмотрим теперь следующий справа вакуумный промежуток. В нем имеются аналогичные волны $\vec{\Psi}_1$ и $\overleftarrow{\Psi}_1$, причем в силу периодичности кристалла имеет место соотношение

$$\vec{\Psi}_1=\exp(iql)\vec{\Psi}_o, \tag{2}$$

где l - ширина периода, а q - блоховский волновой вектор, который тоже представляет собой бесконечномерную матрицу.

Рассмотрим теперь период, заключенный между двумя указанными промежутками. Волна $\vec{\Psi}_o$, дифрагируя на нем, отражается с амплитудой

r и проходит с амплитудой t в следующий вакуумный промежуток. Амплитуды r и t являются бесконечномерными матрицами, и мы будем полагать, что они известны. Для волны $\vec{\Psi}_1$ можно написать самосогласованное выражение

$$\vec{\Psi}_1=t\vec{\Psi}_o+r\overleftarrow{\Psi}_1, \tag{3}$$

которое означает, что $\vec{\Psi}_1$ складывается из волны, прошедшей из предыдущего промежутка, и волны $\overleftarrow{\Psi}_1$ этого же промежутка, отраженной от одного периода слева.

Подставим $\overleftarrow{\Psi}_1=R\vec{\Psi}_1$ и (2) в (3), получим соотношение

$$\exp(iql)=(1-rR)^{-1}t. \tag{4}$$

Рассмотрим теперь волну $\overleftarrow{\Psi}_o$, ее можно представить в виде суммы

$$\overleftarrow{\Psi}_o=r\vec{\Psi}_o+t\overleftarrow{\Psi}_1, \tag{5}$$

в которой интерпретация каждого слагаемого вполне очевидна. Подставив сюда (1) и (2), получим еще одно соотношение

$$R=r+tR\exp(iql). \tag{6}$$

Подставим (4) в (6), в результате получим уравнение для R

$$R=r+tR(1-rR)^{-1}t, \tag{7}$$

которое можно также записать в виде

$$(R-r)t^{-1}(1-rR)=tR. \tag{8}$$

Заметим, что если в кристалле волна распространяется направо, то отражение от левой полубесконечной половины бесконечного кристалла описывается амплитудой R^{-1}, которая, как нетрудно показать, удовлетворяет тому же уравнению (7).

Решив уравнение (8) и подставив его в (4), найдем блоховский фазовый множитель. Для полного решения задачи о движении частицы в бесконечном кристалле необходимо еще найти вектор $\vec{\Psi}_o$, который в этом случае является собственной функцией блоховского вектора q.

Задача рассеяния на полубесконечном кристалле при этом оказывается тоже решенной, поскольку R и $\exp(iql)$ уже найдены. Единственное отличие от бесконечного кристалла состоит в том, что в качестве Ψ_o можно задать произвольный вектор, например вектор с одной единственной компонентой, отвечающей заданной падающей плоской волне.

Чрезвычайно просто также найти дифракцию на кристалле конечной толщины, т.е. кристалле, состоящем из конечного числа бесконечно протяженных кристаллических плоскостей. Действительно, пусть кристалл состоит из N таких плоскостей. Вернемся опять к бесконечному кристаллу и отметим, что он периодичен также с периодом $L=Nl$. Введем две вакуумные щели на расстоянии L друг от друга и проведем все те же рассуждения, что и раньше, но теперь в качестве амплитуд r и t будут фигурировать амплитуды R_N и T_N отражения и пропускания N периодов, которые тоже являются бесконечномерными матрицами. Выражения (4) и (6) теперь будут иметь вид

$$\text{a)}\ \exp(iqL)=(1-R_N R)^{-1}T_N, \qquad \text{b)}\ R=R_N+T_N R\exp(iqL). \tag{9}$$

Выражение (9a) удобно представить в виде

$$\exp(iqL)=T_N+R_N R\exp(iqL). \tag{10}$$

Разрешая линейную систему уравнений (9b) и (10) относительно R_N и T_N, получаем

$$T_N=(1-R^2)\exp(iqL)[1-R\exp(iqL)R\exp(iqL)]^{-1}, \tag{11}$$

$$R_N=[R-\exp(iqL)R\exp(iqL)][1-R\exp(iqL)R\exp(iqL)]^{-1}. \tag{12}$$

Подставив сюда R и q из (8) и (4), выразим R_N и T_N через заданные параметры r и t. Формула (11) содержит в себе все хорошо известные результаты, касающиеся маятниковых колебаний интенсивности на выходной поверхности кристалла при дифракции Лауэ.

Итак, ключевыми выражениями являются (7), (4), (11) и (12),

которые справедливы для рассеяния произвольных волн на произвольном кристалле, при призвольном взаимодействии волн с атомами кристалла. Причем под атомом может подразумеваться целая кристаллическа ячейка. Принятое ранее условие симметрии потенциала взаимодействия излучения с атомами относительно рассматриваемой кристаллической плоскости не является необходимым. При отсутствии симметрии, амплитуды r отражения от плоскости слева и справа различаются фазами, которые целиком наследуются амплитудами R и R_N, при этом амплитуды пропускания остаются одинаковыми при пропускании в обоих направлениях.

Наша задача теперь состоит в том, чтобы показать, как применяются эти выражения для практических расчетов. С этой целью мы ограничимся рассмотрением дифракции безспиновых нейтронов на одноатомном тетрагональном кристалле, тетрагональная ось которого направлена перпендикулярно поверхности.

3. Дифракция нейтронов на тетрагональном кристалле

а). Дифракция на бесконечной кристаллической плоскости

Сначала, чтобы получить необходимые нам матрицы r и t, напомним коротко, как решается задача о дифракции на бесконечной кристаллической плоскости. При этом мы будем следовать изложению, приведенному в книге/3/.

Рассмотрим бесконечную кристаллическую плоскость с одноатомной квадратной ячейкой со стороной d и расположим ее для конкретности перпендикулярно оси z. В дальнейшем мы все длины будем выражать в единицах d и потому будем сторону d полагать равной единице. Амплитуды рассеяния всех атомов будем считать одинаковыми и равными b. Это значит, что волновая функция нейтрона при рассеянии на одном единственном атоме, расположенном в точке

r_i равна

$$\psi(\vec r)=\exp(i\vec k_o\vec r)-\exp(i\vec k_o\vec r_i)(b/|\vec r-\vec r_i|)\exp(ik|\vec r-\vec r_i|), \tag{13}$$

где первое слагаемое отвечает падающей волне, а второе - рассеянной ($k=|\vec k_o|$). Амплитуда b в силу условия унитарности представляется в виде комплексного числа

$$b=b_o/(1+ikb_o), \tag{14}$$

причем величина b_o, которая при отсутствии неупругих ядерных процессов является чисто вещественной, называется длиной рассеяния.

Волновая функция нейтрона при рассеянии на совокупности ядер может быть представлена в виде

$$\psi(\vec r)=\exp(i\vec k_o\vec r)-\sum_n\psi(\vec r_n)(b/|\vec r-\vec r_n|)\exp(ik|\vec r-\vec r_n|), \tag{15}$$

где $\psi(\vec r_n)$ - амплитуда волновой функции, падающей на i-е ядро. Коэффициенты $\psi(\vec r_n)$ удовлетворяют следующим уравнениям:

$$\psi(\vec r_j)=\exp(i\vec k_o\vec r_j)-\sum_{n\neq j}\psi(\vec r_n)(b/|\vec r_j-\vec r_n|)\exp(ik|\vec r_j-\vec r_n|), \tag{16}$$

которые вместе с (15) образуют систему уравнений теории многократного рассеяния волн (МРВ).

В случае рассеяния на плоскости решение уравнений (16) можно из соображений симметрии искать в виде

$$\psi(\vec r_n)=C\exp(i\vec k_o\vec r_n). \tag{17}$$

Подставив (17) в (16) и воспользовавшись фурье-разложением для сферической волны и правилом суммирования по дискретной решетке, найдем величину C:

$$\text{a) } C=1/(1-ikb-\varkappa), \qquad \text{b) } \varkappa=-\sum_n 2\pi ib/k_{n\perp}, \tag{18}$$

где

$$\text{a) } k_{i\perp}=\sqrt{k^2-\vec k_{i\parallel}^2}, \qquad \text{b) } \vec k_{i\parallel}=\vec k_{o\parallel}+\vec\tau_i, \qquad \text{c) } \vec\tau_i=2\pi(m_i,n_i,0), \tag{19}$$

$\vec k_{o\parallel}$ - компонента волнового вектора $\vec k_o$, параллельная кристаллической плоскости, а m_i, n_i - произвольные целые числа, как положительные, так и отрицательные. Подставив (18а) в (17) и (17) в (15), получим для волновой функции нейтрона при рассеянии на кристаллической плоскости, расположенной в точке z', выражение

$$\psi(\vec r)=\exp(i\vec k_o\vec r)+$$
$$+\sum_n(-2\pi ib_p/k_{n\perp})\exp(i\vec k_{n\parallel}\vec r_\parallel)\exp(ik_{n\perp}|z-z'|+ik_{o\perp}z'), \tag{20}$$

где b_p - амплитуда рассеяния атомов, расположенных регулярно в плоскости. Амплитуду b_p с учетом (14) можно записать в виде

$$\text{a) } b_p=bC=b_o/(1-\mathcal{K}), \qquad \text{b) } \mathcal{K}=\varkappa/(1-ikb)=-\sum_n 2\pi ib_o/k_{n\perp}. \tag{21}$$

Заметим, что часть суммы в (21b) с вещественными $k_{n\perp}$ - чисто мнимая, и она позволяет удовлетворить условию унитарности при рассеянии на кристаллической плоскости. Остальная часть суммы при больших τ_n - чисто вещественная. Она имеет расходящийся вид, но на самом деле представляет вполне конечную функцию (см., например, книгу[3]), поэтому мы будем обращаться с ней как с нормальным рядом. Удобство представления хорошей функции в таком виде состоит в том, что оно дает возможность сразу видеть, как изменяется мнимая часть амплитуды b_p при изменении $\vec k_o$ и, соответственно, при возникновении новых каналов дифракции.

Из вида волновой функции (20) следует, что ее можно представить в виде бесконечномерного вектора, разложенного по базису $\vec\varphi_n=\exp(i\vec k_{n\parallel}\vec r_\parallel)$. Вектор ψ волны, отраженной от плоскости, можно представить в виде $\psi_r=r\psi_o$, где ψ_o отвечает падающей волне и соответствует вектору, направленному вдоль единственного базисного орта $\vec\varphi_o$. Компоненты векторов ψ_r и ψ_o связаны друг с другом элементами матрицы отражения r. Аналогичным образом волна ψ_t, пропущенная плоскостью, имеет компоненты, связанные с компонентой вектора ψ_0 элементами матрицы пропускания t. Матричные элементы матриц r и t периода длиной l с кристаллической плоскостью посередине равны соответственно:

$$a)\ r_{fn}=-2\pi i b_p e_f e_n/k_{f\perp},\qquad b)\ t_{fn}=e_f(\delta_{fn}-2\pi i b_p/k_{f\perp})e_n,\tag{22}$$

где $e_f=\exp(ik_{f\perp}l/2)$, а δ_{fn} - символ Кронекера, равный 1 при $n=f$ и нулю при $n\neq f$.

б)Решение уравнений дифракции

Запишем матрицы (22) в виде произведения матриц

$$a)\ r=\mathbb{E}\mathbb{K}\mathbb{N}\mathbb{E},\qquad b)\ t=\mathbb{E}(\mathbb{I}+\mathbb{K}\mathbb{N})\mathbb{E},\tag{23}$$

где матрица $\mathbb{I}$ - единичная, $\mathbb{E}$, $\mathbb{K}$-диагональные, а матричные элементы матриц $\mathbb{E}$, $\mathbb{K}$, $\mathbb{N}$ равны

$$a)\ \mathbb{E}_{fi}=e_f\delta_{fi},\quad b)\ \mathbb{K}_{fi}=K_f\delta_{fi},\quad c)\ K_f=-2\pi i b_p/k_{f\perp},\quad d)\ \mathbb{N}_{fi}=1.\tag{24}$$

Из условия детального равновесия (см., например, книгу/3/), и из сопоставления с (23а) следует, что искомую матрицу R можно искать в виде

$$a)\ R=\mathbb{E}\mathbb{K}\mathbb{R}\mathbb{E},\qquad b)\ \mathbb{R}_{fi}=\mathbb{R}_{if}.\tag{25}$$

Матрица $\mathbb{N}$ обладает тем свойством, что для произвольной матрицы A справедливы соотношения

$$a)\ \mathbb{N}A\mathbb{N}=\mathbb{N}\mathcal{A},\quad b)\ \mathcal{A}=\sum_{i,j}A_{ij},\quad c)\ \mathbb{N}A=\mathbb{N}A^R,\quad d)\ A^R_{fi}=\delta_{fi}\sum_j A_{ji},$$

$$e)\ A\mathbb{N}=A^L\mathbb{N},\qquad f)\ A^L_{fi}=\delta_{fi}\sum_j A_{fj}.\tag{26}$$

Это позволяет представить матрицу t^{-1} в виде

$$a)\ t^{-1}=\mathbb{E}^{-1}(1-\beta\mathbb{K}\mathbb{N})\mathbb{E}^{-1},\qquad b)\ \beta=1/(1+\mathcal{K}),\qquad c)\ \mathcal{K}=-\sum_i 2\pi i b_p/k_{i\perp}.\tag{27}$$

В справедливости соотношений (27) можно убедиться непосредственной проверкой, вычислив произведение (27а) и (23b).

Подставим (23), (25) и (27) в (8). Воспользовавшись

соотношениями (26), приведем уравнение (8) к виду

$$a)\ \mathbb{R}-\mathbb{E}^2\mathbb{R}\mathbb{E}^2=\beta(\rho^L+\mathbb{I})\mathbb{N}(\rho^R\mathbb{E}^2+\mathbb{I}),$$

$$b)\ \rho^L_{fi}=\delta_{fi}\sum_j\mathbb{R}_{fj}K_j,\qquad c)\ \rho^R_{fi}=\delta_{fi}\sum_j\mathbb{R}_{ji}K_j e_j^2.\tag{28}$$

Из (28а) следует, что

$$a)\ \mathbb{R}_{fi}=\beta s_f v_i/(1-e_f^2e_i^2),\qquad b)\ s_f=1+\beta s_f\sum_i v_i K_i/(1-e_f^2e_i^2),$$

$$c)\ v_i=1+\beta v_i e_i^2\sum_f s_f K_f e_f^2/(1-e_i^2e_f^2)=1+\beta v_i\sum_f s_f K_f/(1-e_i^2e_f^2)-v_i\beta\sum_f s_f K_f.\tag{29}$$

Сравнивая (29с) с (29b), видим, что уравнения (29с) имеют решение

$$a)\ v_i=s_i\mu,\qquad b)\ \mu=1/(1+\zeta),\qquad c)\ \zeta=\beta\sum_f s_f K_f.\tag{30}$$

Заметим, что множитель β все время входит вместе с K_i, или, если учесть (24с), - вместе с b_p. Из (21а) следует, что $b_p\beta=b_o$. Таким образом, множитель β исправляет амплитуду b в соответствии с новыми требованиями унитарности, и в дальнейшем мы можем опустить β, положив

$$\beta K_i=\bar{K}_i=-2\pi i b_o/k_{i\perp}.\tag{31}$$

Аналогичную роль играет и множитель μ в (30b), но его удобнее выделять в явном виде.

Подставив (30), (31) в (29а) и далее в (25а), получим окончательное выражение для матрицы R

$$R_{fi}=\mu s_f e_f\bar{K}_f s_i e_i/(1-e_f^2e_i^2),\tag{32}$$

$$s_f=1+\sum_i s_i\bar{K}_i+e_f^2 s_f\sum_i s_i\bar{K}_i e_i^2/(1-e_f^2e_i^2).\tag{33}$$

Рассмотрим теперь выражение (4). Подставим в него (23) и (25а). Воспользуемся свойствами матрицы $\mathbb{N}$ (26), из которых следует (см. аналогичные соотношения (27)), что

$$a)\ (1-rR)^{-1}=1+\alpha rR,\qquad b)\ \alpha=1/(1-\gamma),\qquad c)\ \gamma=\sum K_i e_i e_f R_{fi}.\tag{34}$$

Подставив (32) в (34с), после элементарных преобразований с учетом уравнений (33) получим $\alpha=\beta/\mu$. Подставив (34а) в (4) и снова воспользовавшись свойствами матрицы $\mathbb{N}$, получим

a) $\exp(iql)=\mathbb{E}(\mathbb{I}+\bar{\mathbb{K}}\mathbb{N}\mathbb{S})\mathbb{E}$, b) $\mathbb{S}_{fi}=s_f\delta_{fi}$. (35)

Найдем собственные функции и собственные значения матрицы $\exp(iql)$:

$\exp(iql)\Psi=\mathbb{E}^2\Psi+\nu\mathbb{E}\bar{\mathbb{K}}n=\lambda\Psi$, (36)

где n - вектор со всеми координатами, равными единице, а постоянная ν равна

$\nu=\langle n|\mathbb{S}\mathbb{E}\Psi\rangle=\sum_i s_i e_i \Psi_i$. (37)

Угловые скобки здесь обозначают скалярное произведение векторов. Из уравнения (36) следует

$\Psi=\nu(\lambda\mathbb{I}-\mathbb{E}^2)^{-1}\mathbb{E}\bar{\mathbb{K}}n$. (38)

Подставив (38) в (37), получим окончательное уравнение для λ:

$\sum_i s_i e_i^2 \bar{K}_i/(\lambda-e_i^2)=1$.

Собственные значения матрицы q определяются как $\ln\lambda/il$.

Можно идти и другим путем, определив сначала приближенное выражение для самой матрицы q. Для этого заметим, что элементы $\bar{K}_i$ диагональной матрицы $\bar{\mathbb{K}}$, если перейти к естественным размерностям, можно записать в виде

a) $\bar{K}_i=-iu_0 l/2k_{i\perp}$, b) $u_0=4\pi N_0 b_0$, (39)

где u_0 - величина, характерная для взаимодействия ультрахолодных нейтронов (УХН) с веществом, а N_0 - число атомов в единице объема. Разложив обе части выражения (35a) по степеням l и приравняв линейные члены, получим выражение для матрицы q в низшем приближении по степеням l:

$q_{fi}=k_{f\perp}\delta_{fi}-u_0 s_i/k_{f\perp}$. (40)

Наше определение вектора q может вызвать возражение, поскольку полные волновые функции в двух промежутках оказываются связанными соотношением $(1+R)\Psi_1=(1+R)\exp(iql)\Psi_0$, а не соотношением

$(1+R)\Psi_1=\exp(iQl)(1+R)\Psi_0$. Однако принятое здесь определение эквивалентно, поскольку векторы Q и q связаны преобразованием подобия:

$\exp(iQl)=(1+R)\exp(iql)(1+R)^{-1}$.

Вооружившись выражениями (32), (33) и (40), приступим к исследованию различных процессов. Здесь мы ограничимся только теми, которые хорошо изучены в рамках общепринятой динамической теории дифракции тепловых нейтронов и в физике УХН.

в) Исследование различных процессов.

Полное отражение ультрахолодных нейтронов

Пусть волновой вектор k столь мал, что все дифрагированные волны экспоненциально затухают. В этом случае все слагаемые в суммах (32) и (33) малы за исключением слагаемого, в знаменателе которого стоит e_0^4. Положив все s_i при $i\neq0$ равными единице, разложив знаменатель $1-e_0^4$ по степеням $k_{0\perp}l$, в низшем приближении по степеням l для s_0 $(x=s_0)$ получим уравнение

$x=1+u_0x^2/4k_{0\perp}^2$,

решение которого равно

a) $x=2k_{0\perp}(k_{0\perp}-k'_{0\perp})/u_0$, b) $k'_{0\perp}=\sqrt{k_{0\perp}^2-u_0}$, (41)

где $k'_{0\perp}$ играет роль волнового вектора внутри среды с потенциалом u_0. Подставив (41a) в (32), получим после элементарных преобразований хорошо известное выражение для амплитуды отражения холодных нейтронов

$R=R_{00}=(k_{0\perp}-k'_{0\perp})/(k_{0\perp}+k'_{0\perp})$,

из которого видно, что при $k_{0\perp}^2<u_0$ имеет место полное внутреннее отражение. Для УХН характерно соотношение $k^2<u_0$, и потому им свойственно полное отражение при любых углах падения.

Подставив (41a) в (40), в низшем приближении по kl получим выражение для блоховского вектора q, которое совпадает с (41b).

Одноволновая дифракция Брэгга

Пусть $k_{o\perp}l$ близко к π, а остальные далеки от него и дают только экспоненциально затухающие волны, тогда опять можно оставить только один член в суммах (32) и (33). Уравнение для $x=s_o$ приобретает вид

$$\text{a) } x=1-u_o x^2/4k_{o\perp}\delta, \quad \text{b) } \delta=k_B-k_{o\perp}, \quad \text{c) } k_B=\pi/l, \tag{42}$$

где k_B - так называемый брэгговский вектор. Подставив решение уравнения (42)

$$x=2\sqrt{k_{o\perp}\delta}\left(\sqrt{k_{o\perp}\delta+u_o}-\sqrt{k_{o\perp}\delta}\right)/u_o \tag{43}$$

в (32) и заменив приближенно $k_{o\perp}$ на $(k_{o\perp}+k_B)/2$, получим выражение для амплитуды брэгговского отражения

$$R=R_{oo}=\left(\sqrt{k_B^2-k_{o\perp}^2}-\sqrt{k_B^2-k_{o\perp}^2+2u_o}\right)/\left(\sqrt{k_B^2-k_{o\perp}^2}+\sqrt{k_B^2-k_{o\perp}^2+2u_o}\right),$$

из которого видно, что в интервале $|k_B^2-k_{o\perp}^2|\le 2|u_o|$ имеет место полное или, как его называют, брэгговское отражение. Указанный интервал в динамической теории дифракции носит название дарвиновского столика.

Подставив (43) в (40), получим выражение для блоховского вектора, которое после несложных преобразований можно привести к виду

$$q=\sqrt{k_B^2-\sqrt{(k_B^2-k_{o\perp}^2)(k_B^2-k_{o\perp}^2+2u_o)}},$$

когда $k_{o\perp}^2<k_B^2$, и

$$q=\sqrt{k_B^2+\sqrt{(k_{o\perp}^2-k_B^2)(k_{o\perp}^2-k_B^2-2u_o)}}.$$

когда $k_{o\perp}^2>k_B^2$.

Двухволновая дифракция Лауэ

Допустим, что внутри кристалла могут быть только две распространяющиеся волны с $k_{o\perp}$ и $k_{1\perp}$, а остальные дифрагированные волны экспоненциально затухают. Величину $k_{i\perp}l$ для обеих распространяющихся волн будем для простоты считать далекой от π, тогда все s_i можно приближенно положить равными единице. Блоховский вектор нужно определять как собственное значение матрицы $q_{fi}=k_{f\perp}\delta_{fi}-(u_o/2k_{f\perp})s_i$:

$$\det\begin{pmatrix} k_o-1/2k_o-q, & -1/2k_o \\ -1/2k_1 & , k_1-1/k_1-q \end{pmatrix}=0, \tag{44}$$

где k_i обозначают $k_{i\perp}$. Это уравнение можно переписать в виде

$$(k_1-1/2k_1-q)(k_o-1/2k_o-q)-1/4k_ok_1=0,$$

откуда следует

$$q=[(k_o+k_1)/2](1-u_o/2k_ok_1)\pm\sqrt{(k_o-k_1)^2(1+u_o/2k_ok_1)^2/4+u_o^2/4k_ok_1}. \tag{45}$$

Введем $p=(k_o+k_1)/2$, тогда $k_i=p\pm\Delta/2p$, и с помощью этих величин выражение (45) приводится к виду

$$q=p-u_o/2p\pm\sqrt{\Delta^2+u_o^2}/2p. \tag{46}$$

Вблизи точного условия дифракции, когда $\Delta\ll u$, это выражение можно переписать в виде

$$\text{a) } q=\sqrt{p^2-u_o(1\pm\sqrt{1+y^2})}, \quad \text{b) } y=\Delta/u_o.$$

Рассмотрим кристалл конечной толщины L. При расчете пропускания кристалла в геометрии Лауэ можно R в выражении для T_N положить равным нулю. Действительно, поскольку все s_i, как уже отмечалось, близки к единице, а знаменатели в (32) не малы, то все матричные элементы матрицы отражения R пропорциональны $u_o d/k_{o\perp}$ и потому малы. В результате имеем

$$T_N=\exp(iqL),$$

и волновая функция на выходе вычисляется в соответствии с выражением

$$\Psi \simeq \exp(iqL)\psi_o. \qquad (47)$$

Поскольку распространяющийся внутри кристалла вектор Ψ имеет всего две компоненты, то для расчета пропускания мы можем использовать спинорную алгебру. Выразим матрицу q через матрицы Паули $\vec{\sigma}$, при этом будем иметь

$$\exp(iqL)=\exp(iq_o L+i\vec{q}\vec{\sigma}L), \qquad (48)$$

где q_o и $\vec{q}$ - четыре числовых параметра. Любой вектор ψ_o может быть разложен на собственные векторы матрицы (48) следующим образом:

$$\psi_o=[(1+\vec{b}\vec{\sigma})/2+(1-\vec{b}\vec{\sigma})/2]\psi_o, \qquad (49)$$

где $\vec{b}=\vec{q}/|\vec{q}|$ - единичный вектор. Подставив (49) в (47), получим

$$\Psi=\exp[i(q_o+|\vec{q}|)L][(1+\vec{b}\vec{\sigma})/2]\psi_o+\exp[i(q_o-|\vec{q}|)L][(1-\vec{b}\vec{\sigma})/2]\psi_o. \qquad (50)$$

Отсюда следует, что амплитуды прямой Ψ_o и дифрагированной Ψ_d волн равны соответственно

a) $\Psi_o=\exp(iq_o L)[\cos(|\vec{q}|L)+ib_z\sin(|\vec{q}|L)]$,

b) $\Psi_d=i(b_x+ib_y)\exp(iq_o L)\sin(|\vec{q}|L)$. (51)

Из вида матрицы q и из (46) следует, что $|\vec{q}|=u_o\sqrt{1+y^2}/2p$, кроме того,

a) $b_z^2=y^2/(1+y^2)$, b) $b_x^2+b_y^2=1/(1+y^2)$, c) $y=\Delta/u_o$,

поэтому интенсивности дифрагированной и прошедшей волн равны соответственно

a) $I_d=\sin^2(Lu_o\sqrt{1+y^2}/2p)/(1+y^2)$, b) $I_o=1-\sin^2(Lu_o\sqrt{1+y^2}/2p)/(1+y^2)$,

что хорошо согласуется с существующими представлениями.

4. Заключение

Таким образом, все формулы динамической теории дифракции полностью воспроизводятся. Очевидно, что никаких принципиальных трудностей не возникнет и при рассмотрении более сложных случаев. Нетрудно также провести обобщение на случай магнитной дифракции нейтронов и на дифракцию рентгеновских лучей. Все дифракционные явления можно считать не только в наинизшем приближении по 1, но со сколь угодно большой и контролируемой точностью, и в этом главное преимущество предлагаемого метода. Приведенные примеры носили чисто иллюстративный характер. Они отнюдь не исчерпывают области применения метода.

В качестве примера покажем, как рассчитать двухволновую дифракцию Брэгга, которая в обычной теории требует 4-волнового приближения. Здесь мы рассмотрим только простейший симметричный случай, когда

a) $k_{o\perp}=k_{1\perp}=k_B-\delta$, b) $k_B=\pi/l$.

Уравнения для $x\equiv s_o$ и $y\equiv s_1$ имеют вид

a) $x=1+x^2u_o/2k_B\delta$, b) $y=x$.

Их решение равно

$$x=y=[k_B\delta-\sqrt{k_B\delta(k_B\delta-2u_o)}]/u_o.$$

Подставив его в (32), получим амплитуды отражения

$$R_{oo}=R_{1o}=(1/2)(\sqrt{k_B\delta}-\sqrt{k_B\delta-2u_o})/(\sqrt{k_B\delta}+\sqrt{k_B\delta-2u_o}).$$

При $k_B\delta<2u_o$ имеет место полное (50%) отражение, причем половина его (т.е. всего 25%) идет в направление назад. Интересно выяснить, куда девается оставшаяся половина интенсивности. Для этого нужно найти собственные функции и собственные значения вектора q. В данном случае матрицу q можно записать в виде

$$q=k_B-\delta-[k_B\delta-\sqrt{k_B\delta(k_B\delta-2u_o)}]/2k_B-\sigma_x[k_B\delta-\sqrt{k_B\delta(k_B\delta-2u_o)}]/2k_B,$$

где σ_x - матрица Паули. Отсюда видно, что собственными функциями q являются $\Psi_1=(\psi_0,-\psi_1)$ и $\Psi_2=(\psi_0,\psi_1)$. Причем первая приводит к такому нейтронному полю, которое обращается в нуль на узлах решетки и распространяется с $q=k_{0\perp}$, как бы не замечая кристалла. Эта волновая функция создает поток через кристалл, аналогичный случаю дифракции Лауэ, но без маятниковых биений на выходе. Интенсивность этого потока и сотавлет те 50%, которых недоставало в отраженном. Отраженный же поток описывается функцией Ψ_2, которой внутри кристалла соответствует нейтронное поле, имеющее пучности на узлах решетки и потому эффективно отражающееся по законам дифракции в геометрии Брэгга.

Автор считает своим долгом выразить искреннюю благодарность В.В.Голикову за интерес к работе и ее поддержку.

Литература

1. Albeverio S., Fenstad J.E., Hoegh-Krohn R.: Solvable Models in Quantum Mechanics. Texts and monographs in physics. Springer-Verlag, N.Y., Berlin, Heidleberg, London, Paris, Tokio, 1988.

2. Каган Ю., Афанасьев А.М.: Об изменении резонансных ядерных параметров при рассеянии на регулярных системах. - ЖЭТФ, 1966, т. 50, в. 1, с. 271 - 280.

3. Игнатович В.К. Физика ультрахолодных нейтронов. М.: Наука, 1986, гл. 5.

4. Avron J., Grossmann A., Hoegh-Krohn R.: The reflection from a semi- infinite crystal of point scatterers. - Phys.Lett, 1983, v. 94A, p. 42 - 44.

5. Parrat L.G. Surface studies of solids. - Phys. Rev. 1954, v. 95, No 2, p. 359-369.

6. Godfrey G.H. Recurrence formulae for the reflectance and transmittance of multilayer films with applications. - Austr.J. of Phys., 1957, v. 10, n. 1, p. 1.

7. Бреховских Л.М. Волны в слоистых средах. - М.: АН СССР, 1957.

8. Бабе Г.Д., Гусев Е.Л. Математические методы оптимизации интерференционных фильтров. - Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1987.

9. Игнатович В.К. Этюд об одномерном периодическом потенциале. - УФН, 1986, т. 150, с. 145.

10. Игнатович В.К. Новый метод решения одномерного уравнения Шредингера. Препринт ОИЯИ Р4-87-878, Дубна, 1987.

11. Ignatovich V.K. The remarkable capabilities of recursive relations. Preprint JINR E4-87-880, Dubna, 1987.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 сентября 1988 года.