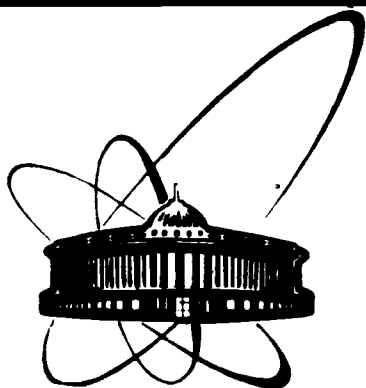


89-671



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

И 265

P4-89-671

В. К. Игнатович

**АЛГЕБРАИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ
ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ
НА МНОГОАТОМНЫХ ИДЕАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Направлено в "Журнал экспериментальной
и теоретической физики"

1989

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе^{/1/} были получены формулы для амплитуд отражения и пропускания произвольного одномерного периодического потенциала в предположении, что амплитуды отражения r и пропускания t одного отдельно взятого периода известны. Согласно этим формулам, амплитуды отражения R_N и пропускания T_N периодической цепочки длиной $L=Nl$, где l - период, а N - число периодов в цепочке, равны:

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

$$R_N = [R - \exp(iqL) R \exp(iqL)] [1 - R \exp(iqL) R \exp(iqL)]^{-1}. \quad (2)$$

Здесь R - амплитуда отражения от полубесконечной цепочки, q - брэгговское волновое число. Для R и q в работе^{/1/} были получены уравнения

$$R = r + tR(1 - rR)^{-1}t, \quad (3)$$

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

В случае рассеяния скалярных частиц уравнение (3) имеет очень простое решение, которое приведено в работе^{/1/}. В случае рассеяния спинорных или иных частиц все амплитуды и число q являются матрицами, а уравнение (3) представляет собой систему уравнений, которую не всегда можно решить аналитически (в спинорном случае такое решение возможно в общем виде).

Уравнения (1-4) обобщены^{/2/} на трехмерный случай. В работе^{/2/} рассмотрена дифракция нейтронов на трехмерном одноатомном идеальном кристалле с тетрагональной элементарной ячейкой, одна из осей которой перпендикулярна плоскости входной поверхности. Кристалл был мысленно разбит на отдельные кристаллические монослои толщиной в одну элементарную ячейку, параллельные плоскости входной поверхности, которая считается бесконечной. Амплитуды отражения r и пропускания t каждого слоя представляют собой бесконечномерные матрицы. Матричные элементы r_{ij} и t_{ij} представляют собой амплитуды отражения и пропускания отдельного монослоя с изменением компоненты волнового вектора k_{\perp} параллельной плоскости входной поверхности от $k_{0\perp} + \tau_{\perp}$ до $k_{0\perp} + \tau_{\perp}$, где $k_{0\perp}$ - компонента волнового вектора первичного нейтрона, параллельная монослою, а τ_{\perp} - вектор обратной решетки внутри кристаллической плоскости, параллельный входной поверхности.

Было показано^{/2/}, что

$$r_{ij} = -2\pi i b e_i e_j / k_{\perp i}, \quad (5)$$

$$t_{ij} = e_i^2 \delta_{ij} + r_{ij}, \quad (6)$$

где b - амплитуда когерентного рассеяния нейтрона на ядре,

$k_{\perp i}^2 = k_0^2 - (k_{0\perp} + \tau_{\perp})^2$, и введено обозначение

$$e_i = \exp(ik_{\perp i} l / 2). \quad (7)$$

При этом матричный элемент R_{ij} амплитуды отражения от полубесконечного в направлении нормали кристалла представляется в виде

$$R_{ij} = s_i r_{ij} s_j / (1 - e_i e_j), \quad (8)$$

очень похожем на (5), в котором дополнительные коэффициенты s_i удовлетворяют бесконечной системе уравнений

$$s_i = 1 + s_j \Gamma_{ij} s_j / (1 - e_i e_j). \quad (9)$$

Эту систему легко оборвать, поскольку множители e_i , начиная с некоторого номера, экспоненциально убывают, в результате чего получается конечная система уравнений, которая легко решается. В тех случаях, когда знаменатели в (9) малы, выполняются условия Брэгга, и уравнения приобретают особенно простой вид. Тогда же, когда знаменатели не малы, коэффициенты s_i благодаря малости амплитуд b (что характерно для нейтронной физики), близки к единице.

В данной работе делается обобщение на случай многоатомного кристалла с произвольной ячейкой, когда выражения (5), (6) имеют более сложный вид, и при этом находится решение, которое оказывается аналогичным выражениям (8), (9).

Решение задачи основывается на методе рекуррентных соотношений, т.е. кристалл мысленно с помощью бесконечно узких вакуумных промежутков разбивается на отдельные слои, параллельные входной поверхности. Волновое поле в одном промежутке между периодами кристалла выражается через волновое поле в соседнем промежутке. Этот метод довольно эффективен и позволяет решать множество задач математической физики. В частности, в работе^{/3/} показано, что метод рекуррентных соотношений дает новый подход к численному решению уравнения Шредингера при произвольном потенциале. В работе^{/4/} этот метод используется для решения диффузионной задачи.

Нужно отметить, что сам по себе метод рекуррентных соотношений

известен давно. Он использовался еще Дарвиним^{5,6/} в 1914 г. при описании дифракции на слоистой системе и под названием принципа инвариантности фигурировал в работах Амбарцумяна^{7/} и Чандрасекара^{8/} в 40-е годы при исследовании диффузии света. Енгисбарян и Мнацаканян^{9/} в 1974 г. сформулировали систему уравнений, которая позволяет отражение и пропускание произвольного излучения средой конечной толщины выразить через отражение полубесконечной среды. Однако эта система не была ими решена. По-видимому, по этой причине в дальнейшем рассеяние на слое конечной толщины описывалось с помощью интегро-дифференциальных уравнений^{10,11/}, которые также были сформулированы в^{7-9/}. При получении этих уравнений рассеяние на монослое считалось бесконечно малым и учитывалось только в первом порядке по теории возмущений^{9,11/}. При этом сразу терялось из виду, что рассеяние полубесконечной средой выражается одинаковым образом (формулы (3,4)) и через параметры элементарных слоев и через параметры слоев конечной толщины. Только после отказа от дифференциального подхода удалось^{1/} решить (формулы (1,2)) те уравнения, которые не были решены в^{9/}.

В п.2 настоящей работы получены матрицы рассеяния r и t для слоя, параллельного входной поверхности толщиной в один период кристалла. Здесь для простоты используется теория возмущений, которая для одного слоя вполне применима. В п.3 составляются уравнения для R и находится их решение. В п.4 обсуждаются некоторые частные случаи. Среди них определенный интерес вызывает один важный результат, касающийся проблемы n -е взаимодействия^{12,13/}.

2. РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ НА МОНОСЛОЕ

Рассмотрим слой, параллельный входной поверхности (плоскость x, y), по толщине которого помещается одна элементарная ячейка. Этот слой будем считать расположенным в вакууме. Матрицы r и t для него можно найти по теории возмущений. Падающий нейтрон будем описывать плоской волной

$$\vec{\Psi}_0(r) = \exp(i\vec{k}_0 r), \quad (10)$$

где стрелка характеризует не векторность, а указывает на то, что волна падает на слой слева. Рассеянный нейтрон описывается функцией

$$\vec{\Psi}(r) = -\sum_{\alpha} b_{\alpha} \phi_{\alpha i} \eta(r - r_{\alpha i}), \quad (11)$$

где $r_{\alpha i}$ - координата ядра с номером α в ячейке с номером i , b_{α} - когерентная амплитуда рассеяния этого ядра, $\phi_{\alpha i}$ - амплитуда волны,

освещающей ядро, а $\eta(r) = \exp(|r|)/|r|$. В дальнейшем рассеянные волны, идущие направо, т.е. прошедшие слой, и волны, идущие налево, т.е. отраженные от слоя, нужно будет рассматривать отдельно. Обозначения этих двух типов волн различаются направлением стрелок над ϕ . Действуя по теории возмущений, положим $\phi_{\alpha i} = \vec{\phi}_0(r_{\alpha i})$.

Воспользуемся представлением

$$\eta(r) = \int d^3 p \exp(ipr) / (2\pi^2)(p^2 - k^2 - i\epsilon) = i \int d^2 p_{\perp} \exp(ip_{\parallel} r_{\parallel} + ip_{\perp} |z|) / 2\pi p_{\perp},$$

$$p_{\perp} = (k^2 - p_{\parallel}^2)^{1/2} \quad (12)$$

и правилом суммирования

$$\sum_n f(n) = \int_m^{\infty} f(x) \exp(2\pi i m x) dx. \quad (13)$$

Тогда

$$\vec{\Psi} = -2\pi i N_2 \sum_{\tau} \exp(i\vec{k}_{\tau} r) \sum_{\alpha} (b_{\alpha} / k_{\tau\perp}) \exp[i(\vec{k}_0 - \vec{k}_{\tau}) r_{\alpha}], \quad (14)$$

где $N_2 = 1/|d_1 d_2|$ - двумерная плотность элементарных ячеек в слое, $d_{1,2}$ - периоды двумерной решетки,

$$\vec{k}_{\tau} = (k_{\tau\parallel}, \pm k_{\tau\perp}), \quad k_{\tau\parallel} = k_{0\parallel} + \tau_{\parallel}, \quad k_{\tau\perp} = (k_0^2 - k_{\tau\parallel}^2)^{1/2}, \quad (15)$$

и τ_{\parallel} - векторы обратной двумерной решетки. Значок \pm отмечает компоненты вектора, параллельные слою, а \perp - перпендикулярные ему.

Удобно ввести полную амплитуду рассеяния элементарной ячейки $b_c = \sum_{\alpha} b_{\alpha}$ и все длины выразить в единицах $\lambda = 1/2\pi N_2 b_c$. (В случае рассеяния нейтронов λ имеет величину $\approx 10^{-4}$ см.) Тогда выражение (14) запишется в более простом виде:

$$\vec{\Psi} = \sum_{\tau} (-i/k_{\tau\perp}) \exp(i\vec{k}_{\tau} r) \sum_{\alpha} b_{\alpha} \exp[i(\vec{k}_0 - \vec{k}_{\tau}) r_{\alpha}], \quad (16)$$

где b_{α} - амплитуда рассеяния, отнесенная к полной амплитуде рассеяния ячейки b_c .

Введем обозначения

$$|\vec{\tau}\rangle_l = \exp(i\vec{k}_{\tau} r), \quad |\vec{\tau}\rangle_r = \exp[i\vec{k}_{\tau} (r - l)], \quad \vec{\phi}_0 = |\vec{0}\rangle_l. \quad (17)$$

Тогда волновая функция нейтронов, отраженных от слоя и прошедших через него, запишется в виде:

$$\vec{\Phi} = |\vec{r}'\rangle_{\tau} \vec{r}^{-1} \langle \vec{t} | \vec{\Phi}_0, \quad \vec{\Phi} = |\vec{t}'\rangle_{\tau} \vec{t}^{-1} \langle \vec{r} | \vec{\Phi}_0. \quad (18)$$

Стрелки над матрицами r и t указывают направление распространения падающей волны. Поскольку элементарная ячейка может быть несимметрична, рассеяние зависит от этого направления.

Сравнивая (18) с (16), легко находим те основные элементы, из которых строятся матрицы r и t . Этими элементами являются: множитель $K_{\tau} = 1/k_{\tau\perp}$ и формфактор

$$\vec{F}_{t,r}^{\tau\tau'} = \sum_{\alpha} b_{\alpha} \exp(i(\vec{k}_{\tau} - \vec{k}_{\tau'}) \cdot r_{\alpha}). \quad (19)$$

С их помощью матрицы \vec{r} и \vec{t} представляются следующим образом:

$$\vec{r} = -iK\vec{F}_r, \quad \vec{t} = \vec{E}(1 - iK\vec{F}_t), \quad (20)$$

где матрица \vec{F} состоит из матричных элементов (19), а матрицы K и \vec{E} диагональны с матричными элементами K_{τ} и

$$\vec{E}_{\tau} = \exp(i\vec{k}_{\tau} \cdot l) \quad (21)$$

соответственно.

Чтобы найти отражение и пропускание справа, нужно \vec{k} в формуле (19) заменить на \vec{k}_{τ} , и r_{α} на $r_{\alpha} - l$, т.е. формфактор (19) в случае падения плоской волны на монослой слева, должен быть заменен на

$$\vec{F}_{t,r}^{\tau\tau'} = \sum_{\alpha} b_{\alpha} \exp(i(\vec{k}_{\tau} - \vec{k}_{\tau'}) \cdot (r_{\alpha} - l)). \quad (22)$$

Выражения (20) теперь приобретают вид:

$$\vec{r} = -iK\vec{F}_r, \quad \vec{t} = \vec{E}^{-1}(1 - iK\vec{F}_t). \quad (23)$$

Для дальнейшего удобно ввести обозначения:

$$\vec{e}_{\tau\alpha} = \exp(i\vec{k}_{\tau} \cdot r_{\alpha}), \quad (24)$$

тогда выражения (20) и (23) можно записать в виде:

$$\vec{r} = -iK\vec{e}^{-1}B \cdot N\vec{e}, \quad \vec{t} = \vec{E}(1 - iK\vec{e}^{-1}B \cdot N\vec{e}), \quad (25)$$

$$\vec{r} = -iK\vec{E}\vec{e}^{-1}B \cdot N\vec{e}\vec{E}^{-1} \quad \vec{t} = (1 - iK\vec{e}^{-1}B \cdot N\vec{e})\vec{E}^{-1}, \quad (26)$$

где матрица B диагональна, ее элементами являются амплитуды b_{α} , и она действует только в пространстве параметров α . Матрица N действует в пространстве параметров τ и имеет все элементы равными 1, а матрица e диагональна и в пространстве τ и в пространстве α , и имеет матричные элементы (24).

3. ОТРАЖЕНИЕ ОТ ПОЛУПРОСТРАНСТВА

Уравнения для матрицы \vec{R} отражения от полупространства и для блоховского волнового вектора \vec{q} , характеризующего распространение волны внутри кристалла от входной поверхности (стрелка указывает направление распространения, в данном случае слева направо), полностью аналогичны уравнениям (3), (4) (см. /1/):

$$\vec{R} = \vec{r} + \vec{t}\vec{R}(1 - \vec{r}\vec{R})^{-1}\vec{t}, \quad (27)$$

$$\exp(i\vec{q}l) = (1 - \vec{r}\vec{R})^{-1}\vec{t}. \quad (28)$$

Перепишем уравнение (27) в виде

$$(\vec{R} - \vec{r})\vec{t}^{-1}(1 - \vec{r}\vec{R}) = \vec{t}\vec{R}. \quad (29)$$

Из (25) следует, что матрица \vec{t}^{-1} равна

$$\vec{t}^{-1} = (1 + iK\vec{e}^{-1}B \cdot N\vec{e})\vec{E}^{-1}, \quad (30)$$

где матрица B определяется из условия $\vec{t}^{-1}\vec{t} = 1$:

$$B = B / (1 - iQB), \quad (31)$$

и матрица Q состоит из элементов

$$Q_{\alpha\alpha'} = \sum_{\tau} \vec{e}_{\tau\alpha} \vec{e}_{\tau\alpha'}^{-1} / k_{\tau\perp}. \quad (32)$$

Матрицы B и Q определены только в пространстве параметров α . В этом пространстве они недиагональны.

Будем искать решение уравнения (29) в виде: $\vec{R} = K\vec{R}$. Подставим его, а также (25), (26) и (30) в (29). Воспользуемся тем обстоятельством, что

$$NAN = N \sum_{\tau\tau'} A_{\tau\tau'}$$

при любой матрице A , тогда нетрудно получить, что

$$\vec{r}\vec{t}^{-1} = -iK\vec{e}^{-1}B \cdot N\vec{e}\vec{E}^{-1}, \quad (33)$$

$$\vec{t}^{-1}\vec{r} = -iK\vec{e}^{-1}B \cdot N\vec{e}\vec{E}^{-1}, \quad (34)$$

$$\vec{r}\vec{t}^{-1}\vec{r} = -iK\vec{e}^{-1}(B - G) \cdot N\vec{e}\vec{E}^{-1}. \quad (35)$$

При этом уравнение (29) после деления слева на K и умножения справа на $\vec{E} = \vec{E}$ приобретает вид:

$$R - \vec{E}^{-1}R\vec{E} = -i(RK\vec{e}^{-1} + \vec{e}^{-1})G \cdot N(\vec{e} + \vec{e}K\vec{E}^{-1}R\vec{E}), \quad (36)$$

и его можно также переписать несколько иначе:

$$(R - \tilde{E}^{-1} R \tilde{E}) [1 + i k \tilde{E}^{-1} G * N (\tilde{e} + \tilde{e} k \tilde{E}^{-1} R \tilde{E})] = -i (\tilde{E}^{-1} R \tilde{E} k \tilde{E}^{-1} + \tilde{e}^{-1}) G * N (\tilde{e} + \tilde{e} k \tilde{E}^{-1} R \tilde{E}),$$

откуда следует

$$(R - \tilde{E}^{-1} R \tilde{E}) = -i (\tilde{E}^{-1} R \tilde{E} k \tilde{E}^{-1} + \tilde{e}^{-1}) G * N (\tilde{e} + \tilde{e} k \tilde{E}^{-1} R \tilde{E}) [1 + i k \tilde{E}^{-1} G * N (\tilde{e} + \tilde{e} k \tilde{E}^{-1} R \tilde{E})]^{-1} = -i (\tilde{E}^{-1} R \tilde{E} k \tilde{E}^{-1} + \tilde{e}^{-1}) S * N (\tilde{e} + \tilde{e} k \tilde{E}^{-1} R \tilde{E}), \quad (37)$$

где матрица S действует в пространстве индексов α и определяется уравнением

$$S - G = -i S T G = -i G U S, \quad S = (1 + i G U)^{-1} G = G (1 + i U G)^{-1}, \quad (38)$$

а матрица U тоже действует в пространстве индексов α и состоит из элементов

$$U_{\alpha\alpha'} = \sum_{\tau\tau'} (\tilde{e}_{\tau\alpha} \delta_{\tau\tau'} + \tilde{e}_{\tau\alpha} K_{\tau} \tilde{E}^{-1} R_{\tau\tau'} \tilde{E}_{\tau'} \cdot K_{\tau'} \tilde{e}_{\tau'}^{-1}) \cdot \quad (39)$$

Ее можно записать в виде: $U = D + Q$, где матрица Q определена в (32), а матрица D состоит из элементов

$$D_{\alpha\alpha'} = \sum_{\tau\tau'} \tilde{e}_{\tau\alpha} K_{\tau} \tilde{E}^{-1} R_{\tau\tau'} \tilde{E}_{\tau'} \cdot K_{\tau'} \tilde{e}_{\tau'}^{-1} \cdot \quad (40)$$

Но $G(1 + iQG)^{-1} = B$, как это следует из (31), поэтому

$$S = B(1 + iDB)^{-1}. \quad (41)$$

Обычно рассеяние на монослое мало, поэтому элементы матрицы DB малы, и можно принять, что $S = B$.

Из (37) и (41) следует, что матричные элементы опять представимы в виде, аналогичном (8). Однако при произвольной ячейке эти элементы, вообще говоря, несимметричны, поэтому в общем случае удобнее разрешать уравнение (37) сразу относительно матричных элементов $R_{\tau\tau'}$:

$$R_{\tau\tau'} = -i \sum_{\alpha} \left(\sum_{\tau''} (\tilde{E}_{\tau''}^{-1} R_{\tau\tau''} \tilde{E}_{\tau''} \cdot K_{\tau''} \tilde{e}_{\alpha\tau''}^{-1}) + \tilde{e}_{\alpha\tau}^{-1} \right) b_{\alpha} \cdot \left[\tilde{e}_{\alpha\tau'} + \sum_{\tau''} (\tilde{e}_{\alpha\tau''} K_{\tau''} \tilde{E}_{\tau''}^{-1} R_{\tau''\tau'} \tilde{E}_{\tau''} \cdot K_{\tau'} \tilde{e}_{\tau'}^{-1}) \right] / (1 - \tilde{E}_{\tau'}^{-1} \tilde{E}_{\tau'}). \quad (42)$$

Все слагаемые в правой части уравнения (42) малы, за исключением тех случаев, когда малы знаменатели. По существу только эти "резонансные" члены с малыми знаменателями и существенны. Резонансных членов немного, поэтому система уравнений оказывается конечной и легко разрешимой с любой степенью точности современными компьютерными средствами. Нерезонансные члены легко вычисляются по теории возмущений.

В первом приближении их можно положить равными:

$$R_{\tau\tau'} = -i \sum_{\alpha} \tilde{e}_{\alpha\tau}^{-1} b_{\alpha} \tilde{e}_{\alpha\tau'} / (1 - \exp[i l_{\perp} (k_{\tau\perp} + k_{\tau'\perp})]). \quad (43)$$

Если произведением DB в (41) пренебречь нельзя, как это имеет, например, место в случае сильной связи, то уравнение (42) становится немного сложнее, но все равно остается вполне разрешимым современными компьютерными средствами с любой наперед заданной точностью.

4. ПРИМЕРЫ

1). Решение уравнения (42) получается наиболее просто при наличии только одного резонансного члена. В обычной теории дифракции этому соответствует двухволновое приближение. При этом существенным оказывается только один матричный элемент $x = -i R_{\tau\tau'}$. Если амплитуды b_{α} являются скалярами, то x удовлетворяет квадратному уравнению:

$$i(1-e)x = f + ex(1/k_{2\perp} + 1/k_{1\perp}) + f^*(ex)^2/k_{1\perp}k_{2\perp}, \quad (44)$$

где введены обозначения:

$$f = \sum b_{\alpha} \exp[i(k_1 - k_2)r_{\alpha}], \quad f^* = \sum b_{\alpha} \exp[-i(k_1 - k_2)r_{\alpha}], \\ k_1 = \tilde{k}_{\tau}, \quad k_2 = \tilde{k}_{\tau'}, \quad e = \exp[i(k_1 - k_2)l]. \quad (45)$$

Решение уравнения (42) можно представить в виде

$$x = -\sqrt{k_{1\perp}k_{2\perp}} \exp(i\phi) [\sqrt{(+)} - \sqrt{(-)}] / [\sqrt{(+)} + \sqrt{(-)}], \quad (46)$$

где

$$\exp(i\phi) = \exp[-i(k_1 - k_2)l] (f/f^*)^{1/2}, \quad (47)$$

$$(\pm) = k_{1\perp} + k_{2\perp} + i k_{1\perp} k_{2\perp} \{1 - \exp[-i(k_1 - k_2)l]\} \pm 2|f| \sqrt{k_{1\perp}k_{2\perp}}. \quad (48)$$

Нетрудно видеть, что если элемент $R_{\tau\tau'}$ тоже является резонансным, то выражение для него получается того же вида (46), но в (47) и (48) следует произвести подстановку $(k_1 - k_2)_{\perp} l \rightarrow (k_1 - k_2)_{\perp} l$.

При $\tau = \tau'$ имеем чисто зеркальное отражение, амплитуда которого $R = x/k_{2\perp}$ определяется, как следует из (46), выражением:

$$R = -\exp[-2ik_{1\perp}l_{\perp}] (f/f^*)^{1/2} [\sqrt{(+)} - \sqrt{(-)}] / [\sqrt{(+)} + \sqrt{(-)}], \quad (49)$$

где

$$(\pm) = 1 \pm |f| + i k_{1\perp} [1 - \exp(-2ik_{1\perp}l_{\perp})] / 2. \quad (50)$$

Поскольку для "резонанса" характерно $2k_{11}l_1 \approx 2\pi n$, то, приняв $k_n = \pi n/l_1$, воспользуемся приближенным равенством

$$ik_{11}[1 - \exp(-2ik_{11}l_1)] \approx i(k_{11} + k_0)/2 + i(k_{11} - k_0)l_1 = -(k_{11}^2 - k_0^2)l_1, \quad (51)$$

после чего, вспомнив, что все длины выражаются в единицах $1/2\pi N_2 b_c$, получим амплитуду зеркального (Брегговского) отражения в виде

$$R = \exp(i\varphi) \frac{(\sqrt{E-E_0} - \sqrt{E-E_0-2u_0|f|})}{(\sqrt{E-E_0} + \sqrt{E-E_0-2u_0|f|})}, \quad (52)$$

где используются размерные величины и введены обозначения:

$$E = k_{11}^2, \quad E_0 = k_0^2 + u_0(1-|f|), \quad u_0 = 4\pi N_2 b_c, \quad N_0 = N_2/l_1. \quad (53)$$

При $k_{11}l_1 \ll 1$ получаем хорошо известную формулу для зеркального отражения медленных нейтронов

$$R = (k_{11} - \sqrt{k_{11}^2 - u_0}) / (k_{11} + \sqrt{k_{11}^2 - u_0}). \quad (54)$$

2). Рассмотрим рассеяние нейтрона на магнетике (ядерный магнетизм будем рассматривать наряду с электронным). В каждой точке внутри магнетика имеется поле $H(r)$, и амплитуда магнитного рассеяния на элементе объема d^3r равна $B^i = \mu_0 H(r_i) d^3r_i$, т.е. является спинором. Спинором же является и каждый матричный элемент $R_{\tau\tau}$. При наличии только одного резонансного члена опять имеем уравнение второго порядка, но в нем требуется тщательно соблюдать расположение сомножителей.

Если поле H внутри ячейки однородно, то, выбрав его направление в качестве оси квантования спина, мы можем расцепить уравнение для спинорной матрицы $R_{\tau\tau}$ на два скалярных уравнения для двух поляризаций нейтрона по и против поля H . Учитывая, что кроме магнитного рассеяния имеется чисто ядерное, получаем решение для дифракции спинорного нейтрона в том же виде, что и для скалярного, но в качестве когерентной амплитуды рассеяния ячейки b_c для двух разных поляризаций следует взять сумму или разность ядерных и магнитных амплитуд.

При неоднородном поле примем для простоты, что

$$\int H(r_i) d^3r_i = 0, \quad (55)$$

т.е. среднее по ячейке магнитное поле равно нулю, тогда уравнение для x с учетом магнитного рассеяния будет иметь вид:

$$i(1-e)x = f + h\sigma + ex(1/k_{21} + 1/k_{11}) + x(f^* + h^*\sigma)xe^2/k_{11}k_{21}, \quad (56)$$

где

$$h = \int H(r_i) \exp[i(k_{11} - k_2)r_i] d^3r_i, \quad h^* = \int H(r_i) \exp[-i(k_{11} - k_2)r_i] d^3r_i. \quad (57)$$

Умножив обе части уравнения (52) слева на $(f^* + h^*\sigma)$ и обозначив произведение $(f^* + h^*\sigma)x$ через y , получим для y легко разрешаемое уравнение,

$$i(1-e)y = Q^2 + ey(1/k_{21} + 1/k_{11}) + (ey)^2/k_{11}k_{21}, \quad (58)$$

в котором

$$Q^2 = (f^* + h^*\sigma)(f + h\sigma). \quad (59)$$

Из уравнений (56)-(58) вытекает, что спинорная амплитуда рассеяния R приводится к виду

$$R = -\exp[-i(k_{11} - k_2)l] (f^* + h^*\sigma)^{-1} Q \sqrt{k_{11}/k_{21}} [\sqrt{(+)} - \sqrt{(-)}] / [\sqrt{(+)} + \sqrt{(-)}], \quad (60)$$

где

$$(\pm) = k_{11} + k_{21} + ik_{11}k_{21}(1 - \exp[-i(k_{11} - k_2)l]) \pm 2Q \sqrt{k_{11}k_{21}}, \quad (61)$$

$$Q^2 = |f|^2 + |h|^2 + (2\text{Re}(fh) - \text{Im}(h^*h))\sigma \approx \alpha + \beta\sigma, \quad (62)$$

$$Q = \{[(\alpha + \beta^2)^{1/2}]^{1/2} + (\beta/\sigma)[(\alpha - \beta^2)^{1/2}]^{1/2}\} / 2^{1/2}. \quad (63)$$

Заметим, что, несмотря на отсутствие среднего поля, магнитное рассеяние имеет место. В частности, при отражении возможно возникновение поляризации неполяризованного пучка и деполаризации поляризованного. Кроме того, если не интересоваться поляризацией, то все равно необходимо иметь в виду, что магнитный формфактор влияет на полное рассеяние. Его необходимо учитывать, например, при измерении амплитуды n -е рассеяния^{/12,13/}. Возможно, что именно магнитным формфактором и объясняются те аномалии, которые наблюдаются при рассеянии медленных нейтронов на вольфраме.

Действительно, при отсутствии среднего поля, т.е. при выполнении условия (55), но при отличии от нуля формфактора (57) этого поля интенсивность дифракционных пиков (hkl) для неполяризованного нейтронного пучка в случае справедливости кинематического приближения может быть записана в виде^{/13/}:

$$I_{(hkl)} = K[(a + Zf_{(hkl)}a_{ne})^2 + (1 - f_{(hkl)})^2 \gamma^2 \text{ctg}^2 \theta_{(hkl)} + a^2 |h_{(hkl)}|^2] \cdot A_{(hkl)} \exp(-2W_{(hkl)}) / \sin^2 \theta_{(hkl)}, \quad (64)$$

где K постоянный для всех отражений коэффициент; a - когерентная длина рассеяния ядра вольфрама; Z - число электронов в атоме; $f_{(hkl)}$ - атомный электрический формфактор вольфрама; a_{ne} - длина рассеяния, обусловленная n -е взаимодействием; $A_{(hkl)}$ фактор поглощения; $\theta_{(hkl)}$ - угол Брэгга; $\exp(-W_{(hkl)})$ - фактор Дебая-Валлера, где $W=B(\sin\theta/\lambda)^2$, λ - длина волны нейтрона; $\gamma^2 \text{ctg}^2\theta$, где $\gamma=(\mu_n h/2mc)(Ze^2/hc)$ - учитывает швингеровское рассеяние; $|h|$ - формфактор магнитного рассеяния, приведенный к когерентной амплитуде a . Сравнивая (64) с выражением (2) работы^{/12/} видим, что $a|h|$ играет роль аномальной амплитуды p , введенной в^{/13/} для объяснения аномального рассеяния на вольфраме.

Разумеется, приведенные соображения не исключают, что аномальная амплитуда p может отчасти быть связана и с магнитными неоднородностями, обусловленными вкраплениями чужеродных магнитных атомов в матрицу вольфрама. Выделить обсуждавшийся выше эффект магнитного рассеяния можно путем исследования дифракции поляризованных нейтронов. В случае толстого кристалла, когда поляризацией отраженных нейтронов не интересуются, коэффициент отражения, согласно (60), равен

$$|R|^{2k_{21}/k_{11}} = |\sqrt{(+)} - \sqrt{(-)}| / |\sqrt{(+)} + \sqrt{(-)}|^2. \quad (65)$$

По своей величине он может достаточно заметно различаться для нейтронов поляризованных по и против вектора β , определенного в (61). Разумеется, аналогичную зависимость интенсивности рефлекса от поляризации падающих нейтронов можно записать и для случая тонкого кристалла. К сожалению, направление вектора β также необходимо находить экспериментально.

Заметим, что формфактор $|h|$, вообще говоря, немонотонно зависит от переданного импульса. В частности, это может объяснить аномальное увеличение амплитуды некоторых рефлексов, наблюдавшееся в^{/14/}.

Следует отметить, что указанное здесь рассеяние не является парамагнитным. Оно может быть обусловлено различной деформацией электронных оболочек с противоположными спинами. Измерение этой деформации с помощью нейтронов было бы очень полезно для исследования поведения атомных электронов в твердых телах.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В качестве примеров были взяты наиболее простые случаи, исследование которых не требует привлечения компьютеров. Очевидно, однако, что при использовании компьютеров можно по заданной структуре сразу представить спектр отражения от монокристалла как для

рентгеновского излучения, так и для нейтронов. Более того, при этом получается не только положение пиков, что можно найти из простейших соображений, не привлекая весь изложенный выше аппарат, но и структура каждого пика. Последнее чрезвычайно важно, так как при достаточно хорошем разрешении структуру кристалла можно определить по одному единственному пику, не прибегая к Фурье-анализу.

Задача рассеяния на точечных рассеивателях решалась и раньше. В качестве примера можно привести работы^{/15-18/}. Однако применявшиеся методы были лишены ясного физического содержания, носили сугубо математический характер, и потому решение получалось в форме трудной для физической интерпретации.

Довольно часто в литературе используется и многослойное описание кристалла^{/18,19/}. Однако в этих случаях либо не учитывается дифракция на одном слое, либо эта дифракция учитывается путем задания нужной комбинации волновых полей, которая затем переотражается между слоями как единое целое. И в том и в другом случае последовательно описать дифракцию Лауэ оказывается невозможным.

Метод, используемый в данной работе является физически наглядным, замкнутым, позволяет единообразно описать и дифракцию Брэгга и дифракцию Лауэ, и дает возможность рассчитывать любое количество рефлексов с любой степенью точности.

ЛИТЕРАТУРА

1. Игнатович В.К.: Этуд об одномерном периодическом потенциале. - УФН, 1986, т. 150, с. 145
2. Игнатович В.К.: Новый подход к динамической теории дифракции на идеальном трехмерном кристалле. Препринт ОИЯИ Р4-88-693, Дубна, 1989.
3. Игнатович В.К.: Новый метод решения одномерного уравнения Шредингера. Препринт ОИЯИ Р4-87-878, Дубна, 1987.
4. Игнатович В.К.: Диффузия ультрахолодных нейтронов по нейтронному проводу в присутствии гравитационного поля. - Препринт ОИЯИ Р4-87-402, Дубна, 1987.
5. Darwin C.G. - Phil. Mag., 1914, v. 27, pp. 315, 675.
6. Айвазян А.П.: Строгий вариант дарвиновской теории рассеяния идеальными кристаллами. - в сб.: Межвузовский сборник научных трудов, Физика, Ереван: изд-во Ереванского государственного университета, 1984, вып. 3, с. 134.

7. Амбарцумян В.А. - ДАН СССР, 1943, т. 38, с. 257; Научные труды АН АрмССР, Ереван, 1960, с. 232.
8. Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. - М.: ИЛ, 1953.
9. Енгибарян Н.Б. и Мнацаканян М.А.: О линейных задачах переноса. - ДАН СССР, 1974, т. 213, № 3, с. 533.
10. Айвазян А.П.: Теория дифракции рентгеновских лучей в кристаллах, основанная на принципе инвариантности. - в сб.: Межвузовский сборник научных трудов, Физика, Ереван: изд-во Ереванского государственного университета, 1984, вып. 3, с. 144.
11. Bezirganyan P.H. and Aivazyan A.P.: Application of the Invariance Principle for the Diffraction of X-Rays in Real Crystals. - Phys. stat. sol (a), 1987, v. 100, № 2, p. 389.
12. Александров Ю.А. и др.: Рассеяние медленных нейтронов на вольфраме, обогащенном изотопом ^{186}W . - ЖЭТФ, 1985, т. 89, с. 34.
13. Alexandrov Yu.A. and Ignatovich V.K.: On some peculiarities of scattering of slow neutrons by Tungsten. - JINR, E3-6294, Dubna, 1972.
14. Alexandrov Yu.A., Brown P.J., Forsyth J.B., Vrana M. - Annual Reports of ILL, 1989.
15. Alberverio S., Fenstad J.E., Hoegh-Krohn R.: Solvable Models in Quantum Mechanics. Texts and monographs in physics. Springer Verlag, N.Y., Berlin, Heidelberg, London, Paris, Tokio, 1988.
16. Litzman O.: Dynamical Theory of Diffraction on a Periodic System of Point Scatterers. - Acta Cryst. 1986, v. A42, Part 6, p. 552.
17. Wachutka G.: General Solution Theory for Schroedinger's Equation in Arbitrary 2D-Periodic Spatial Structures. I. The Monolayer Problem. - Ann. of Phys 1988, v. 187, N. 2, p. 269.
18. Wachutka G.: General Solution Theory for Schroedinger's Equation in Arbitrary 2D-Periodic Spatial Structures. II. The Synthesis of Global Solutions by Layer Composition. - Ann. of Phys 1988, v. 187, N. 2, p. 269.
19. Haken H.: Synergetics: an Overview. - Rep. Phys. 1989, v. 52, N. 5, p. 515.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 сентября 1989 года.

Игнатович В.К.

P4-89-671

Алгебраическое описание динамической дифракции
на многоатомных идеальных кристаллах

Методом рекуррентных соотношений получено описание рассеяния нейтронов на идеальных многоатомных кристаллах с произвольной элементарной ячейкой.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод автора

Ignatovich V.K.

P4-89-671

Algebraic Approach to the Dynamical Diffraction
Theory for Polyatomic Ideal Monocrystals

Neutron diffraction on polyatomic ideal monocrystals with an arbitrary elementary cell is described with the help of recursive relations method.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989