Журнал технической физики, 2005, том 75, вып. 5

01;05

Адиабатическая инвариантность дифракционных процессов в случае регулярных искажений кристаллической решетки

© М.Б. Шевченко, О.В. Побидайло

Институт металлофизики НАН Украины,
03680 Киев, Украина
e-mail: sh_m@list.ru

(Поступило в Редакцию 4 февраля 2004 г.)

Адиабатические инварианты, сохраняющиеся при динамической лауэ-дифракции рентгеновских лучей, быстрых электронов, а также тепловых нейтронов, вычислены в случае асимметричного рассеяния регулярно деформированными кристаллами. С помощью обобщенной маятниковой аналогии установлен критерий, определяющий адиабатически плавные изменения деформации. Сделан вывод о концептуальной эквивалентности адиабатического и лучевого режимов распространения блоховских волн в деформированных кристаллах.

Введение

Как известно, концепция адиабатической инвариантности, изначально развитая в рамках классической механики, была впоследствии распространена на различные области современных физических исследований [1–4]. Ее использование было особенно эффективным в квантовомеханических приложениях, а также в ядерной физике, при создании магнитных захватывающих устройств, получивших название „магнитных ловушек“. В то же время применительно к задачам динамической дифракции рентгеновских лучей и электронов (как, впрочем, и нейтронов) регулярно деформированными кристаллами эта концепция ранее не разрабатывалась. Однако стабильно высокий интерес к таким задачам стимулирует дальнейшее совершенствование соответствующих теоретических методов, учитывающих многократный характер рассеяния на искажениях кристаллической решетки. Таким образом, изучение адиабатической инвариантности данных процессов представляется перспективным направлением для развития новых аналитических подходов к решению подобных задач.

В настоящей работе адиабатические инварианты динамической теории были определены в асимметричном случае дифракции на прохождение. Причем ввиду эквивалентности соответствующих уравнений рассеяния вычисленные инварианты будут сохраняться при дифракции рентгеновских лучей, быстрых электронов, а также тепловых нейтронов в случае пренебрежимо малого спин-зависимого взаимодействия. Необходимо отметить, что полученные результаты являются корректными при достаточно медленном изменении с расстоянием поля смещений. В этой связи с учетом асимметричных условий дифракции был установлен критерий, определяющий адиабатически плавные искажения решетки. Думается, что вычисленные инварианты будут вызывать значительный интерес для решения уравнений динамической теории, представленных в нелинейном виде. Знание в данном случае соответствующих адиабатических констант может существенно продвинуть проблему интегрируемости этих уравнений. С этой точки зрения следует обратить внимание на нелинейное уравнение типа Рикати, полученное относительно коэффициента отражения [5], для решения которого уместным будет использование концепции адиабатической инвариантности.

Адиабатические инварианты в случае асимметричной лауэ-дифракции

Полагая деформации решетки достаточно плавными, найдем решение проблемы адиабатической инвариантности при асимметричных, наиболее общих условиях дифракции на прохождение. Тогда для амплитуд $\Phi_{0,h}$ волновых полей проходящей и дифрагированной волн в регулярно деформированном кристалле можно записать следующие уравнения Такаги–Топена [6], справедливые для рентгеновского излучения, быстрых электронов и тепловых нейтронов в случае сильного ядерного рассеяния

$$\begin{cases} \gamma_0 \dfrac{d\Phi_0}{dz} = i\pi\sigma_h \exp\{i\mathbf{hu} + isz\}\Phi_h + i\pi\sigma_0\Phi_0, & (1) \\[2ex] \gamma_h \dfrac{d\Phi_h}{dz} = i\pi\sigma_h \exp\{-i\mathbf{hu} - isz\}\Phi_0 + i\pi\sigma_0\Phi_h. & (2) \end{cases}$$

Здесь величины $\Phi_{0,h}$ могут описывать соответствующие амплитуды волнового поля электрической индукции для рентгеновского излучения либо координатной части волновой функции электронов, либо нейтронов. В данных уравнениях $\sigma_{0,h} = \sqrt{\gamma_0\gamma_h}/\Lambda_{0,h}$, где $\Lambda_{0,h}$ — экстинкционные длины в направлениях, задаваемых проходящим и дифрагированным пучками: γ_0, γ_h — косинусы углов между нормалью к поверхности кристалла и направлениями распространения этих волн соответственно; s — отклонение от брэгговского отражающего положения; $\mathbf{u}$ — поле деформации, которое будем считать одномерным и изменяющимся вдоль оси Z, направленной нормально к поверхности кристалла. Причем поле $\mathbf{u}$ соответствует регулярным искажениям кристаллической решетки, вызванным, например, изгибом, единичной дислокацией, ультразвуковой волной и т. п. Заметим, что в случае электронной дифракции систему (1), (2) также называют уравнениями Такаги–Хови–Уэлана, соответствующими колонковому приближению теории рассеяния [7].

Адиабатические инварианты, отвечающие поставленной дифракционной задаче, можно определить, не прибегая к решению уравнений Такаги–Топена. Для этого следует воспользоваться подходом, предложенным в [8], который основан на нахождении адиабатических инвариантов аналогичной маятниковой модели. Обобщая эти рассуждения на асимметричные условия дифракции, сделаем в уравнениях (1) и (2) следующую замену переменных:

$$\Phi_{0,h} = \frac{\widetilde{\Phi}_{0,h}}{\sqrt{\gamma_{0,h}}} \exp\left\{ i \frac{\gamma_0}{2\Lambda_0}\left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_h}\right)\right\} \times \exp\{\pm i\mathbf{hu}/2 \pm isz/2\}. \tag{3}$$

Тогда после подстановки (3) в (1) и (2) будем иметь

$$\frac{d\widetilde{\Phi}_{0,h}}{dz} = \frac{2i}{\gamma_0}\sqrt{\xi_0^{(1)}\xi_0^{(2)}}\,\widetilde{\Phi}_{h,0} \mp \frac{i}{\gamma_0}\left(\xi_0^{(1)} - \xi_0^{(2)}\right)\widetilde{\Phi}_{0,h}, \tag{4}$$

где коэффициенты $\xi_0^{(1)}$ и $\xi_0^{(2)}$ имеют следующий вид:

$$\xi_0^{(1,2)} = \left[\pm\frac{k}{4}\frac{\gamma_0}{\gamma_h}\beta + \sqrt{\left(\frac{k}{4}\frac{\gamma_0}{\gamma_h}\beta\right)^2 + \frac{\gamma_0^2}{4\Lambda_h^2}}\,\right]. \tag{5}$$

В выражении (5) используются стандартные обозначения для угловой переменной $\beta = (\mathbf{h}d\mathbf{u}/dz + s)/k + \gamma_0(1-\gamma_h/\gamma_0)/(k\Lambda_0)$ и величины волнового вектора $\mathbf{k}$ падающей волны. Интересно также отметить, что коэффициенты $\xi_0^{(1,2)}$ соответствуют переменным динамической теории, которые в обратном пространстве определяют расстояние от точек возбуждения на дисперсионной поверхности до асимптоты падающего пучка, проходящей через точку Лорентца. При этом точке возбуждения на нижней ветви отвечает переменная $\xi_0^{(1)}$, а на верхней ветви — $\xi_0^{(2)}$.

Уравнения Такаги–Топена, представленные в виде (4), позволяют перейти от дифракционной задачи к эквивалентной механической с известными адиабатическими инвариантами. В данном случае таким аналогом будет являться механическая система, состоящая из двух слабосвязанных маятников с различными массами, для которых на достаточно малом временнóм интервале Δt будут справедливы следующие уравнения движения:

$$\dot{\varphi}_{1,2} = \frac{i\omega_1\omega_2}{2\omega_0}\varphi_{2,1} \mp \frac{i(\omega_1^2 - \omega_2^2)}{4\omega_0}\varphi_{1,2}. \tag{6}$$

Здесь частоты $\omega_{1,2} = (\kappa/m_{1,2})^{1/2}$ и $\omega_0 = (g/l)^{1/2}$, где $m_{1,2}$, κ, g, l — массы маятников, коэффициент упругости, ускорение свободного падения, длина нити соответственно. Уравнения (6), записанные относительно „медленных“ угловых переменных $\varphi_{1,2}$, отличаются от обычных уравнений Ньютона отсутствием вторых производных. Эти члены будут пренебрежимо малыми величинами вследствие разделения колебаний на „медленные“ и „быстрые“ с высокой частотой $\omega_H = \omega_0 + \omega_B/2$, где ω_B — частота биений. На рассматриваемом интервале Δt массы маятников $m_{1,2}$, а стало быть и частоты $\omega_{1,2}$, считаются постоянными, так что оказывается возможным установить локальные соотношения эквивалентности между параметрами дифракционной и механической задач. Как следует из эквивалентных друг другу уравнений (4) и (6), эти соотношения имеют вид

$$\varphi_{1,2} \to \widetilde{\Phi}_{0,h} \quad \text{и} \quad \omega_{1,2} \to 2\sqrt{\xi_0^{(1,2)}}, \quad \omega_0 \to \gamma_0. \tag{7}$$

Из полученных соотношений следует, что в данной механической модели угловое отклонение от точного брэгговского условия, вызываемое регулярной деформацией или асимметрией рассеяния, может моделироваться варьированием маятниковых масс. Тогда как для идеального кристалла при симметричных условиях дифракции и $s = 0$ необходимо положить $m_1 = m_2$. Следует отметить также, что предложенная маятниковая аналогия остается корректной и в случае предельно сильных деформаций, когда точки возбуждения выходят из двухволновой области локальной дисперсионной поверхности. Это, как известно, приводит к остановке обмена энергией между проходящей и дифрагированной волнами и к наступлению режима рефракции. Очевидно, в данном случае аналогичный процесс будет иметь место и в рамках маятниковой модели. В самом деле, положив для определенности $\beta > 0$ и считая $\xi_0^{(1)} \gg \xi_0^{(2)}$, из (7) нетрудно получить эквивалентное условие $m_2 \gg m_1$, при котором, как известно [9], перекачка энергии между маятниками прекращается. Естественно, что развитая в работе обобщенная маятниковая аналогия асимметричной дифракции может быть применима как для рентгеновского излучения, так и быстрых электронов, а также тепловых нейтронов. При этом адиабатическими инвариантами описанной механической системы в случае достаточно медленного изменения со временем масс будут являться переменные действия $I_{1,2}$, имеющие вид

$$I_{1,2} = \frac{\langle E\rangle_{1,2}}{\Omega_{1,2}}. \tag{8}$$

Здесь $\langle E\rangle_{1,2}$ — энергии маятников, усредненные по периоду $T_{1,2} = 2\pi/\Omega_{1,2}$, где $\Omega_{1,2}$ — частоты нормальных маятниковых колебаний. Понятно, что для вычисления $\langle E\rangle_{1,2}$ следует диагонализировать функцию Лагранжа, соответствующую колебаниям связанных маятников с перменными массами. В результате, переходя к переменным $\varphi_{1,2}$ и считая частоты $\omega_{1,2}$ зависящими от времени, из (8) будем иметь следующие выражения для $I_{1,2}$:

$$I_{1,2} = (1 + \omega_{1,2}^2/\omega_{2,1}^2)\,|\varphi_1^{\pm}|^2, \tag{9}$$

где $\varphi_1^{\pm}$ — амплитуды мод соответственно с большей и меньшей частотой колебаний, на которые расщепляются „медленные“ колебания первого маятника.

Тогда, принимая во внимание (7) и используя (9), легко определить искомые адиабатические инварианты $C_{1,2}$ дифракционной задачи

$$C_{1,2} = (1 + \xi_0^{(1,2)}/\xi_0^{(2,1)})\,|\Phi_0^{\pm}|^2, \tag{10}$$

где $\Phi_0^{\pm}$ — амплитуды проходящей волны, соответствующие верхней и нижней ветвям локальной дисперсионной поверхности.

Стоит заметить, что адиабатические инварианты динамической теории могут быть представлены различным образом. Для этого преобразуем амплитуды волновых полей $\Phi_0^{\pm}$, воспользовавшись очевидными соотношениями $\widetilde{\Phi}_h^{\pm}/\widetilde{\Phi}_0^{\pm} = \pm\sqrt{\xi_0^{(1,2)}/\xi_0^{(2,1)}}$. Учитывая эти выражения, справедливые в малой окрестности произвольной точки z, из (10) можно получить адиабатические инварианты $P_{1,2}$ и $R_{1,2}$ следующего вида:

$$P_{1,2} = \sqrt{\frac{\xi_0^{(1,2)}}{\xi_0^{(2,1)}}}\,\frac{|\Phi_{0,h}^{+}|}{|\Phi_{0,h}^{-}|}, \quad R_{1,2} = \frac{|\Phi_{0,h}^{+}|}{|\Phi_{h,0}^{-}|}. \tag{11}$$

В выражениях (10) и (11) адиабатические инварианты, как обычно, приведены с точностью до постоянного, не зависящего от переменной множителя. Причем инвариантам $C_{1,2}$ можно придать простой физический смысл. Нетрудно показать, что эти константы совпадают с нормальными компонентами $S_n^{\pm}$ и $J_n^{\pm}$ трижды усредненных векторов Умова–Пойтинга и плотности потока вероятности для соответствующих блоховских волн (здесь имеется в виду усреднение по времени, периоду решетки и длине экстинкции).

Воспользовавшись маятниковой аналогией, можно также найти условие применимости концепции адиабатической инвариантности к процессам динамической дифракции. Для этого необходимо рассмотреть условие медленного изменения со временем некоего характерного параметра механической задачи, в качестве которого удобно выбрать частоту биений ω_B. Используя затем локальные соотношения (7), можно установить следующий критерий, определяющий адиабатически плавные деформации кристаллической решетки,

$$k\,\frac{d\beta}{dz} \ll \Lambda_h^{-2}. \tag{12}$$

Как показано в [10], неравенство (12) совпадает с условием применимости лучевой теории Като [11]. Таким образом, есть основания утверждать, что концепция адиабатической инвариантности соответствует лучевому (геометрическому) представлению о характере распространения блоховских волн в кристаллах с регулярно искаженной решеткой. Можно полагать, что этот результат будет интересен для поиска новых фундаментальных закономерностей динамической дифракции рентгеновских лучей и элементарных частиц в неидеальных кристаллах.

Заключение

Введение в динамическую теорию дифракции концепции об адиабатической инвариантности представляется заслуживающим внимания подходом. Действительно, учитывая адиабатический характер внутриветвевого рассеяния, межветвевой переход можно рассматривть как процесс переходных биений, резонансно усиливающихся при достаточно сильных деформациях [12]. Кроме того, вычисленные в работе адиабатические инварианты были выражены с помощью универсальных параметров динамической теории. В свою очередь это дает возможность унифицировать определение адиабатических констант в случаях применения методов рентгеновской, электронной и нейтронной дифракции. Указанное обстоятельство заслуживает особого внимания при проведении нейтроноструктурных исследований, которые обычно сочетают с рентгено- и электроноструктурными. Следует отметить, что ввиду возросших технических возможностей для реализации подобных исследований теоретическое изучение динамической дифракции тепловых нейтронов на толстых монокристаллах вызывает в последнее время большой интерес [13,14]. В этой связи стоит указать на возможность построения динамического подхода с помощью асимптотических методов теории нелинейных колебаний [15]. Очевидно, что развитая в работе маятниковая аналогия асимметричной лауэ-дифракции могла бы послужить хорошей основой для такого подхода.

Список литературы

[1] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика, М.: Наука, 1988. 216 с.
[2] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1989. 768 с.
[3] *Крускал М.* Адиабатические инварианты. М.: ИЛ, 1962. 91 с.
[4] *Игнатович В.К.* Физика ультрахолодных нейтронов. М.: Наука, 1986. 272 с.
[5] *Taupin D.* // Bull. Soc. Fr. Mineral. Cryst. 1964. Vol. 87. P. 469–511.
[6] *Пинскер З.Г.* Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982. 390 с.
[7] *Хирш П., Хови А., Николсон Р.* и др. Электронная микроскопия тонких кристаллов. М.: Мир, 1968. 574 с.
[8] *Shevchenko M.B., Pobydaylo O.V.* // Acta Cryst. 2003. Vol. A59. P. 45–47.
[9] *Ольховский И.И.* Курс теоретической механики для физиков. М.: Изд-во Московского ун-та, 1978. 575 с.
[10] *Authier A.* Dynamical Theory of X-Ray Diffraction. Oxford University Press, 2001. 680 p.

[11] *Kato N.* // J. Phys. Soc. Jap. 1963. Vol. 18. P. 1785–1791.
[12] *Shevchenko M.B.* // Acta Cryst. 2003. Vol. A59. P. 481–486.
[13] *Shlenker M., Guigay J.P.* // *X*-Ray and Neutron Dynamical Diffraction. Theory and Applications / Ed. A. Authier, S. Lagomarsino, B.K. Tanner. New York; London: Plenum Press, 1996. P. 63–73.
[14] *Носик В.Л., Ковальчук М.В.* // Поверхность. 2001. № 1. С. 120–128.
[15] *Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А.* Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Госиздат, 1958. 408 с.