Известия НАН Армении, Физика, т.48, №1, с.68-74 (2013)

УДК 548.732

ТРАНСПОРТНЫЕ УРАВНЕНИЯ АМПЛИТУД В ЭЙКОНАЛЬНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ УРАВНЕНИЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ

М.К. БАЛЯН

Ереванский государственный университет, Армения
e-mail: mbalyan@ysu.am

(Поступила в редакцию 20 июня 2012 г.)

Рассмотрено эйкональное приближение уравнений динамической дифракции рентгеновских волн в деформированных кристаллах на основе уравнений второго порядка для амплитуд пройденной и дифрагированной волн. По аналогии с традиционной оптикой это позволяет не только получить уравнение эйконала и изучить поведение амплитуд нулевого приближения, что обычно делается в теории эйконального приближения динамической дифракции, но и для всех порядков асимптотического разложения амплитуд установить соответствующие транспортные уравнения и их решение представить в виде интеграла по траектории распространения амплитуд. Суммированием транспортных уравнений установлено уравнение для полной амплитуды, соответствующее параболическому уравнению дифракции оптики.

1. Введение

Эйкональное приближение уравнений динамической дифракции [1-6] дает возможность определить амплитуды и эйконал и построить решение для плавно меняющихся полей. Исходя из системы уравнений динамической дифракции [5] получаются уравнение эйконала и транспортные уравнения для амплитуд. Однако транспортные уравнения для амплитуд высших порядков асимптотического разложения приводятся в абстрактном виде, и явно обсуждается только уравнение для нулевого приближения амплитуды.

В настоящей работе эйкональное приближение излагается, переходя из системы уравнений динамической дифракции к уравнениям второго порядка в частных производных для каждой амплитуды в отдельности. Это позволяет написать транспортные уравнения и их решения для всех членов асимптотического разложения амплитуд в компактном виде, что дает возможность суммировать весь ряд последовательных приближений и написать уравнение для амплитуды в целом.

2. Основные формулы эйконального приближения

Здесь, в отличие от общепринятого подхода, мы дадим вывод уравнений эйконального приближения, переходя от системы уравнений динамической дифракции к отдельным уравнениям второго порядка для амплитуд.

В двухволновом режиме дифракции, когда в кристалле присутствуют две динамически взаимодействующие волны, связанные с узлами обратной решетки 0 и $\mathbf{h}$, достаточно плавно меняющееся волновое поле в кристалле представляется в виде

$$E=\left(E_0 e^{iK_0 r}+E_h e^{iK_h r}e^{-ihu}\right)e^{i\Phi}e^{ik\chi_0 z/2\cos\theta}, \tag{1}$$

где E_0, E_h – медленно меняющиеся амплитуды, $\mathbf{K}_0$ и $\mathbf{K}_h=\mathbf{K}_0+\mathbf{h}$ – волновые векторы проходящей и дифрагированной волны, соответственно, удовлетворяющие точному условию Брэгга $\mathbf{K}_0^2=\mathbf{K}_h^2=k^2=(2\pi/\lambda)^2$, λ – длина волны излучения в вакууме, $\mathbf{u}$ – вектор смещения атомов из своих равновесных положений в идеальном кристалле, Φ – эйконал, χ_0 – нулевая фурье-компонента поляризуемости кристалла, θ – угол Брэгга, координата z направлена вдоль отражающих плоскостей, а координата x направлена перпендикулярно к отражающим плоскостям и антипараллельна вектору дифракции. Из системы уравнений динамической дифракции [7], переходя к уравнениям для отдельных амплитуд и используя (1), приходим к уравнениям

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial^2 E_0}{\partial s_0\partial s_h}+i\frac{\partial E_0}{\partial s_h}P_0+i\frac{\partial E_0}{\partial s_0}P_h+iE_{0,h}\frac{\partial P_0}{\partial s_h}+\left(\sigma^2-P_0P_h\right)E_0=0,\\
&\frac{\partial^2 E_h}{\partial s_0\partial s_h}+i\frac{\partial E_h}{\partial s_h}P_0+i\frac{\partial E_h}{\partial s_0}P_h+iE_h\frac{\partial P_h}{\partial s_0}+\left(\sigma^2-P_0P_h\right)E_h=0,
\end{aligned} \tag{2}$$

где s_0, s_h – координаты вдоль проходящей и дифрагированной волн, соответственно, $P_0=\partial\Phi/\partial s_0$, $P_h=\partial\Phi/\partial s_h+k\alpha/2$, $\alpha=-(2/k)\partial\mathbf{hu}/\partial s_h$ – параметр локального отклонения от условия Брэгга, $\sigma^2=k^2\chi_h\chi_{\bar h}C^2/4$, $k=2\pi/\lambda$ – волновое число, $C=1$ для σ-поляризации и $\cos 2\theta$ для π-поляризации.

В уравнениях (2) роль большого параметра играет σ^2. Полагая, что деформации достаточно плавные ($\left|(k/2)\partial\alpha/\partial s_0\right|=\left|\partial^2\mathbf{hu}/\partial s_0\partial s_h\right|\ll\left|\sigma^2\right|$) и деля уравнение (2) на $|\sigma|^2$, находим, что после деления первое слагаемое в (2) будет порядка $|\sigma|^{-2}$, последующие три члена порядка $|\sigma|^{-1}$, а последний член – порядка $|\sigma|^0$. В соответствии с этим амплитуды ищем в виде асимптотических рядов

$$E_{0,h}=\sum_{n=0}^{\infty}E_{0,h}^{(n)}. \tag{3}$$

Здесь и далее, чтобы избежать громоздких формул, примем, что во всех формулах с обозначением индексов $0,h$ или $h,0$ первому индексу во всей формуле соответствует первый индекс всех членов формулы и второму индексу соответствует второй индекс во всех членах формулы. Таким образом, такие формулы являются сокращенным обозначением двух отдельных формул для каждого из индексов – первые индексы берутся с первыми индексами, а вторые – со вторыми. Подставляя выражение (3) в (2) и приравнивая члены одного порядка, приходим как к уравнению эйконала

$$P_0 P_h - \sigma^2 = 0, \tag{4}$$

так и к уравнениям для амплитуд нулевого приближения

$$\begin{gathered}\frac{\partial E_0^{(0)}}{\partial s_0} P_h + \frac{\partial E_0^{(0)}}{\partial s_h} P_0 + E_0^{(0)} \frac{\partial P_0}{\partial s_{h,0}} = 0,\\ \frac{\partial E_h^{(0)}}{\partial s_0} P_h + \frac{\partial E_h^{(0)}}{\partial s_h} P_0 + E_h^{(0)} \frac{\partial P_h}{\partial s_0} = 0\end{gathered} \tag{5}$$

и для членов высших порядков разложения

$$\begin{gathered} i\frac{\partial E_0^{(n)}}{\partial s_0} P_h + i\frac{\partial E_0^{(n)}}{\partial s_h} P_0 + iE_0^{(n)} \frac{\partial P_0}{\partial s_h} + \frac{\partial^2 E_0^{(n-1)}}{\partial s_0 \partial s_h} = 0,\\ i\frac{\partial E_h^{(n)}}{\partial s_0} P_h + i\frac{\partial E_h^{(n)}}{\partial s_h} P_0 + iE_h^{(n)} \frac{\partial P_h}{\partial s_0} + \frac{\partial^2 E_h^{(n-1)}}{\partial s_0 \partial s_h} = 0, \quad n = 1, 2, \ldots\end{gathered} \tag{6}$$

Уравнение (4) дает возможность определить эйконал независимо от амплитуд. Характеристическая система уравнений для (4) будет иметь вид [9]

$$\begin{gathered} ds_0/ds = P_h; \;\; ds_h/ds = P_0,\\ dp_0/ds = -p_0 (k/2)\partial\alpha/\partial s_0; \;\; dp_h/ds = -p_0 (k/2)\partial\alpha/\partial s_h,\\ d\Phi/ds = \sigma^2 + p_0 p_h,\end{gathered} \tag{7}$$

где $p_0 = P_0$, $p_h = \partial\Phi/\partial s_h$. После определения траекторий по уравнениям (7), по известной процедуре определяется эйконал [9]. На этом мы не останавливаемся, так как эта процедура многократно обсуждалась в литературе.

3. Транспортные уравнения для $E_{0,h}^{(0)}$

Используя уравнения траектории (7), а также (5), для изменения амплитуд $E_{0,h}^{(0)}$ вдоль траектории имеем

$$\begin{gathered}\frac{dE_0^{(0)}}{ds} = \frac{\partial E_0^{(0)}}{\partial s_0}\frac{ds_0}{ds} + \frac{\partial E_0^{(0)}}{\partial s_h}\frac{ds_h}{ds} = -E_0^{(0)} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial s_0 \partial s_h},\\ \frac{dE_h^{(0)}}{ds} = \frac{\partial E_h^{(0)}}{\partial s_0}\frac{ds_0}{ds} + \frac{\partial E_h^{(0)}}{\partial s_h}\frac{ds_h}{ds} = -E_h^{(0)} \frac{\partial}{\partial s_0}\left(\frac{\partial \Phi}{\partial s_h} + k\frac{\alpha}{2}\right).\end{gathered} \tag{8}$$

Интегрируя (8) вдоль траектории, находим

$$\begin{gathered} E_0^{(0)}(s) = E_0^{(0)}(0)\exp\left(-\int_0^s \frac{\partial^2\Phi}{\partial s_0 \partial s_h} ds'\right),\\ E_h^{(0)}(s) = E_h^{(0)}(0)\exp\left(-\int_0^s \frac{\partial}{\partial s_0}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial s_h} + k\frac{\alpha}{2}\right) ds'\right).\end{gathered} \tag{9}$$

Уравнения (9) аналогичны соответствующим выражениям, известным из оптики [8], но роль лапласиана здесь играют $\partial^2\Phi/\partial s_0\partial s_h$ и $(\partial/\partial s_0)\left(\partial\Phi/\partial s_h + k(\alpha/2)\right)$. Из (9) можно сделать вывод, что поля имеют особенность при $\partial^2\Phi/\partial s_0\partial s_h = -\infty$ и $(\partial/\partial s_0)\left(\partial\Phi/\partial s_h + k(\alpha/2)\right) = -\infty$. Геометрическое место таких точек соответствует каустике.

Отметим, что исходя из уравнений (5) можно написать уравнения для некоторой сохраняющейся величины. Действительно, согласно (5) имеем

$$\begin{gathered}\sigma^2\frac{\partial E_0^{(0)2}}{\partial s_0} + \frac{\partial}{\partial s_h}\left(E_0^{(0)}\frac{\partial\Phi}{\partial s_0}\right)^2 = 0,\\ \sigma^2\frac{\partial E_h^{(0)2}}{\partial s_h} + \frac{\partial}{\partial s_0}\left(E_h^{(0)}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial s_h} + k\frac{\alpha}{2}\right)\right)^2 = 0.\end{gathered} \tag{10}$$

Уравнения (10) в переменных (x,z) имеют общеизвестный вид [1,4,5], равный нулю дивергенции от вектора Пойнтинга:

$$\begin{gathered}\cos\theta\frac{\partial}{\partial z}\left[\left(\sigma^2 + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial s_0}\right)^2\right)E_0^{(0)2}\right] + \sin\theta\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\sigma^2 - \left(\frac{\partial\Phi}{\partial s_0}\right)^2\right)E_0^{(0)2}\right] = 0,\\ \cos\theta\frac{\partial}{\partial z}\left[\left(\sigma^2 + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial s_h} + k\frac{\alpha}{2}\right)^2\right)E_h^{(0)2}\right] + \sin\theta\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\left(\frac{\partial\Phi}{\partial s_h} + k\frac{\alpha}{2}\right)^2 - \sigma^2\right)E_h^{(0)2}\right] = 0.\end{gathered} \tag{11}$$

Уравнения (11) соответствуют сохранению потока энергии вдоль трубки лучей в кристалле.

4. Транспортные уравнения для $E_{0,h}^{(n)}$

Перейдем к интегрированию уравнений (6) для членов высших порядков асимптотического разложения амплитуды (3). Опять же, используя уравнения траектории (7), можно уравнение (6) написать в виде

$$\begin{gathered}i\frac{dE_0^{(n)}}{ds} + iE_0^{(n)}\frac{\partial^2\Phi}{\partial s_0\partial s_h} = -\frac{\partial^2 E_0^{(n-1)}}{\partial s_0\partial s_h},\\ i\frac{dE_h^{(n)}}{ds} + iE_h^{(n)}\frac{\partial}{\partial s_0}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial s_h} + k\frac{\alpha}{2}\right) = -\frac{\partial^2 E_h^{(n-1)}}{\partial s_0\partial s_h},\end{gathered} \tag{12}$$

причем $n = 1,2,\ldots$, а амплитуды удовлетворяют нулевым граничным условиям. В уравнениях (12), сделав подстановку

$$E_0^{(n)} = E_0^{(n)'}\exp\left(-\int_0^s\frac{\partial^2\Phi}{\partial s_0\partial s_h}ds'\right),\quad E_h^{(n)} = E_h^{(n)'}\exp\left(-\int_0^s\frac{\partial}{\partial s_0}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial s_h} + k\frac{\alpha}{2}\right)ds'\right), \tag{13}$$

и используя (9), получим уравнение

$$\frac{dE_{0,h}^{(n)}}{ds}=i\frac{E_{0,h}^{(0)}(0)}{E_{0,h}^{(0)}(s)}\frac{\partial^2 E_{0,h}^{(n-1)}}{\partial s_0 \partial s_h}. \tag{14}$$

Интегрируя выражение (14) и подставляя в формулу (13), находим

$$E_{0,h}^{(n)}(s)=iE_{0,h}^{(0)}(s)\int_0^s \frac{1}{E_{0,h}^{(0)}(s')}\frac{\partial^2 E_{0,h}^{(n-1)}(s')}{\partial s_0 \partial s_h}ds'. \tag{15}$$

Суммируя уравнения (14) по n от 1 до ∞ как для индекса 0, так и для индекса h, получаем интегральные уравнения для полных амплитуд:

$$E_{0,h}(s)=E_{0,h}^{(0)}(s)+iE_{0,h}^{(0)}(s)\int_0^s \frac{1}{E_{0,h}^{(0)}(s')}\frac{\partial^2 E_{0,h}(s')}{\partial s_0 \partial s_h}ds'. \tag{16}$$

Из этих интегральных уравнений с помощью дифференцирования по s получаем дифференциальные уравнения для амплитуд

$$\frac{d}{ds}\frac{E_{0,h}(s)}{E_{0,h}^{(0)}(s)}=\frac{i}{E_{0,h}^{(0)}(s)}\frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial s_0 \partial s_h}. \tag{17}$$

Решения (9), (15), (16), а также дифференциальное уравнение (17) аналогичны соответствующим выражениям оптики [8]. Роль лапласиана здесь играет оператор $\partial^2/\partial s_0\partial s_h=\cos^2\theta\,\partial^2/\partial z^2-\sin^2\theta\,\partial^2/\partial x^2$. Кроме того, имеем два уравнения для каждого из полей, соответствующие двум листам дисперсионной поверхности.

Если использовать лучи в центральной области треугольника Бормана для идеального кристалла или же рассматривать слабодеформированные кристаллы, то эйконал в симметричном случае Лауэ можно выбрать в виде

$$\Phi=\pm\sigma\frac{z}{\cos\theta}. \tag{18}$$

Тогда из уравнений (7) находим $dz=\pm 2\sigma\cos\theta ds$, и из (9) следует, что $E_{0,h}^{(0)}(s)= = E_{0,h}^{(0)}(0)$ постоянны вдоль траекторий. Так как амплитуды медленно меняются вдоль лучей, то в уравнениях (17), в правых частях, можно оставить только производные по x, отбрасывая вторые производные по z, после чего (17) приобретает вид

$$\pm\frac{2i\sigma}{\cos\theta}\frac{\partial E_{0,h}}{\partial z}=\tan^2\theta\frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial x^2}, \tag{19}$$

т.е. получаем уравнения, аналогичные параболическому уравнению дифракции в вакууме.

В общем случае от переменных (x,z) или (s_0,s_h) можно перейти к переменным (s,τ) криволинейной системы координат вдоль и поперек лучей. В правых частях вновь можно отбросить вторые производные по s, причем криволинейную систему координат можно выбрать так, чтобы не входили смешанные вторые производные типа $\partial^2/\partial s\partial\tau$. Можно проверить, что такое условие равносильно условию

$$\frac{dx}{ds}\frac{dx}{d\tau}-\tan^2\theta\frac{dz}{ds}\frac{dz}{d\tau}=0, \qquad (20)$$

или в переменных (s_0, s_h)

$$\frac{\partial s_0}{\partial\tau}\frac{\partial s_h}{\partial s}+\frac{\partial s_0}{\partial s}\frac{\partial s_h}{\partial\tau}=0. \qquad (21)$$

Условие (20) является условием ортогональности криволинейной системы координат (s,τ) в псевдоевклидовом пространстве (x,z). Заметим, что в евклидовом пространстве в (20) должен был стоять знак "+" в левой части, что соответствовало бы ортогональности в евклидовом пространстве. В оптике в правой части (17) стоит лапласиан, т.е. сумма вторых производных, а в кристалле в (17) в правой части стоит разность вторых производных, что соответствует псевдоевклидовой геометрии. Условием (20) (или (21)) определяются ортогональные к траекториям линии изменения переменной τ, а также сама переменная τ. Выражая (x,z) или же (s_0,s_h) через (s,τ), переходя в уравнении (17) к ортогональным координатам по (20) (или по (21)), отбрасывая в правой части (17) вторые производные по s, приходим к параболическому уравнению для амплитуд в общем виде:

$$\frac{\partial}{\partial s}\frac{E_{0,h}(s,\tau)}{E_{0,h}^{(0)}(s,\tau)}=\frac{i}{E_{0,h}^{(0)}(s,\tau)}\left(\frac{\partial\tau}{\partial s_0}\frac{\partial\tau}{\partial s_h}\frac{\partial^2 E_{0,h}}{\partial\tau^2}+\frac{\partial^2\tau}{\partial s_0\partial s_h}\frac{\partial E_{0,h}}{\partial\tau}+\frac{\partial^2 s}{\partial s_0\partial s_h}\frac{\partial E_{0,h}}{\partial s}\right), \qquad (22)$$

где $\partial^2\tau/\partial s_0\partial s_h=\left((\partial s/\partial s_h)\partial/\partial s(\partial\tau/\partial s_0)+(\partial\tau/\partial s_h)\partial/\partial\tau(\partial\tau/\partial s_0)\right)$, а $\partial^2 s/\partial s_0\partial s_h=$ $=\left((\partial s/\partial s_h)\partial/\partial s(\partial s/\partial s_0)+(\partial\tau/\partial s_h)\partial/\partial\tau(\partial s/\partial s_0)\right)$.

5. Заключение

Нами рассмотрено эйкональное приближение уравнений динамической двухволновой дифракции исходя из уравнений второго порядка для амплитуд проходящей и дифрагированной волн. Напомним, что обычно такое приближение исследуется на основе системы уравнений динамической дифракции. Излагаемый подход дает возможность не только получить уравнение эйконала и изучить поведение амплитуд нулевого приближения, как обычно делается, но и получить транспортные уравнения и их решения в виде интегралов по траектории для всех порядков асимптотического разложения амплитуд. Последующее суммирование полученных транспортных уравнений приводит к параболическому уравнению для полной амплитуды.

Приведен общий вид параболического уравнения в криволинейной ортогональной системе координат (s,τ), где линии изменения координаты s совпадают с траекториями, а линии изменения координаты τ ортогональны к траекториям в псевдоевклидовом пространстве (x, z). Приводится также вид параболического уравнения для идеальных или слабо деформированных кристаллов для лучей, находящихся в центральной области треугольника Бормана.

ЛИТЕРАТУРА

1. **N.Kato, Y.Ando.** J. Phys. Soc. Japan, **21**, 264 (1966).
2. **K.Kambe.** Z. Naturforsch, **20a**, 770 (1965).
3. **В.Л.Инденбом, Ф.Н.Чуховский.** УФН, **107**, 229 (1972).
4. **Ф.Н.Чуховский, А.А.Штольберг.** ЖЭТФ, **64**, 957 (1973).
5. **З.Г.Пинскер.** Рентгеновская кристаллооптика. М., Наука, 1982.
6. **В.Г.Кон.** Кристаллография, **52**, 625 (2007).
7. **S.Takagi.** J. Phys. Soc. Japan, **26**, 1239 (1969).
8. **С.Солимено, Б.Крозиньяни, П. Ди Порто.** Дифракция и волноводное распространение оптического излучения, М., Мир, 1989.
9. **В.И.Смирнов.** Курс высшей математики, т.4., М., Наука, 1981.

ԱՄՊԼԻՏՈՒԴՆԵՐԻ ՏԵՂԱՓՈԽՄԱՆ ՀԱՎԱՍԱՐՈՒՄՆԵՐԸ ԴԻՆԱՄԻԿ ԴԻՖՐԱԿՑԻԱՅԻ ՀԱՎԱՍԱՐՈՒՄՆԵՐԻ ԷՅԿՈՆԱԼԱՅԻՆ ՄՈՏԱՎՈՐՈՒԹՅԱՄԲ

Մ.Կ. ԲԱԼՅԱՆ

Ներկայացված է դեֆորմացված բյուրեղներում ռենտգենյան ալիքների դինամիկ դիֆրակցիայի հավասարումների էկոնալային մոտավորություն անցած և դիֆրակցված ալիքների ամպլիտուդների համար գրված երկրորդ կարգի դիֆերենցիալ հավասարումների հիման վրա: Օպտիկայի հետ համանման ձևով դա թույլ է տալիս ոչ միայն ստանալ էկոնալի հավասարումը և ուսումնասիրել ամպլիտուդի վարքը զրոյական մոտավորությամբ, ինչը սովորաբար արվում է դինամիկ տեսության էկոնալային մոտավորությամբ, այլ նաև ամպլիտուդի ասիմպտոտիկ վերլուծության բոլոր կարգի անդամների համար հաստատել համապատասխան տեղափոխման հավասարումներ և նրանց լուծումները ներկայացնել ըստ ամպլիտուդի տարածման հետագծի ինտեգրալի տեսքով: Տեղափոխման հավասարումների գումարման միջոցով հաստատված է հավասարում ամբողջ ամպլիտուդի համար, որը համապատասխանում է օպտիկայում դիֆրակցիայի պարաբոլական հավասարմանը:

AMPLITUDE TRANSPORT EQUATIONS IN THE EIKONAL APPROXIMATION OF THE DYNAMICAL DIFFRACTION EQUATIONS

M.K. BALYAN

An approach of the eikonal approximation of the dynamical diffraction theory equations of X-rays in deformed crystals, based on the second-order differential equations for the transmitted and diffracted waves, is presented. By analogy with usual optics, this approach allows one not only to obtain the eikonal equation and to study the behavior of the amplitude in zero-order approximation, which usually is performed in the standard eikonal dynamical diffraction theory, but also to establish for all orders of the amplitude asymptotic expansion the corresponding transport equations and to present their solutions as integrals along the amplitude propagation trajectory. Summarizing the transport equations, an equation for the total amplitude, analogous with the parabolic diffraction equation in optics, is established.