Список литературы

1. Вул Б. М., Котельникова Н. В., Заварицкая Э. И., Воронова И. Д.// Физика и техника полупроводников. 1977. Т. 11. № 3. С. 573.
2. Kamara M. S., Lukashevich M. G., Stelmakh V. F.// Phys. Stat. Sol. (a). 1984. V. 84. № 2. P. 613.
3. Заварицкая Э. М.// Труды ордена Ленина Физического института имени П. Н. Лебедева АН СССР. 1966. Т. 37. С. 41.
4. Матвеев Г. А., Соколов В. И., Цидильковский И. М., Шелутинина Н. Г.// Физика и техника полупроводников. 1975. Т. 9. № 9. С. 1674.
5. Киреев П. С. Физика полупроводников. М., 1975. С. 583.
6. Fritzsche H.// J. Phys. Chem. Sol. 1958. V. 6. P. 69.

Поступила в редакцию 25.02.85.

УДК 539.1

В. Г. БАРЫШЕВСКИЙ, С. В. ЧЕРЕПИЦА

АНОМАЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ В ПРИСУТСТВИИ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Рассмотрим влияние внешнего постоянного магнитного поля напряженностью $\vec{H}$ на дифракцию нейтронов в аномальном случае, когда дифрагировавшая волна составляет угол с поверхностью кристалла, сравнимый с углом полного внешнего отражения. Система динамических уравнений, описывающая дифракцию нейтронов в кристалле, в двухволновом приближении имеет следующий вид [1—3]:

$$\begin{pmatrix} \frac{k^2}{k_0^2} - 1 - g_\sigma(0) & -g(-\tau) \\ -g(\tau) & \frac{(\vec{k}+2\pi\vec{\tau})}{k_0^2} - 1 - g_\sigma(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_\sigma(\vec{k}) \\ \varphi_\sigma(\vec{k}+2\pi\vec{\tau}) \end{pmatrix} = 0, \tag{1}$$

$$g_\sigma(0) = g(0) + (\sigma)\frac{2m\mu}{\hbar^2 k_0^2} H, \tag{2}$$

где $\vec{k}$ и $\vec{k}+2\pi\vec{\tau}$, $\varphi(\vec{k})$ и $\varphi(\vec{k}+2\pi\vec{\tau})$ — волновые векторы и спектральные амплитуды первичной и дифрагировавшей волны; $2\pi\vec{\tau}$ — вектор обратной решетки кристалла; $g(\tau)$ — структурная амплитуда; $\vec{k}_0$ — волновой вектор падающих нейтронов; m и μ — масса и магнитный момент нейтрона соответственно; $\sigma = +(-)$ (знак $+(-)$ соответствует поляризационному состоянию нейтрона со спином, параллельным (антипараллельным) магнитному полю).

Дисперсионное уравнение, которое получается приравниванием детерминанта (1) к нулю с учетом условий непрерывности тангенциальных компонент волновых векторов на поверхности кристалла,

$$\vec{k} = \vec{k}_0 + k_0\varepsilon\vec{n} \text{ и } \vec{k}_\tau = \vec{k}_0 + 2\pi\vec{\tau} + k_0\varepsilon\vec{n}, \tag{3}$$

может быть представлено в следующем виде:

$$\varepsilon^4 + B\varepsilon^3 + C\varepsilon^2 + D\varepsilon + E = 0, \tag{4}$$

где

$$B = 2\gamma_0,\ C = 4\gamma_0\gamma_1,\ D = 2\gamma_0(\alpha - g_\sigma(0)), \tag{5}$$

$$E = g_\sigma^2(0) - \alpha g_\sigma(0) - g(\tau)\,g(-\tau), \tag{6}$$

$$\gamma_0 = \frac{\vec{k}_0\cdot\vec{n}}{k_0},\quad \gamma_1 = \frac{(\vec{k}_0 + 2\pi\vec{\tau})\cdot\vec{n}}{k_0},\quad \alpha = \frac{2\pi\vec{\tau}\cdot(2\pi\vec{\tau} + 2\vec{k}_0)}{k_0^2} \tag{7}$$

и $\vec{n}$ — единичный вектор нормали к поверхности кристалла.

Дисперсионное уравнение (4) имеет четыре решения, которые соответствуют четырем блоховским волнам в кристалле. В случае скользящих углов распространения дифрагировавшего пучка относительно поверхности кристалла, т. е. при $\gamma_1 \approx \sqrt{|g(0)|}$, необходимо учитывать при рассмотрении три из четырех корней дисперсионного уравнения, отвечающих возбуждению в кристалле трех сильных волн. В обычной же динамической теории дифракции учитываются только два корня и, таким образом, рассматриваются две возбуждаемые в кристалле волны. Малость параметра g $(g(0) \approx g(\tau) \approx 10^{-6})$ позволяет непосредственно разделить корни дисперсионного уравнения (4), различающиеся по порядку величины. Так как магнитный вклад в $g_\sigma(0)$ не превосходит по порядку величины $g(0)$ и $g(\tau)$, то для нахождения корней уравнения (4) можно воспользоваться методом решения, приведенным в [4]. Один корень уравнения (4) находится вблизи величины g, и для его нахождения необходимо решить уравнение $D\varepsilon + E = 0$, из которого следует, что

$$\varepsilon_1^\sigma = \frac{g_\sigma(0)}{2\gamma_0} + \frac{g^2(\tau)}{2\gamma_0(\alpha - g_\sigma(0))}. \tag{8}$$

Два других корня уравнения (4) порядка $\sqrt{g}$ и определяются уравнением

$$B\varepsilon^2 + C\varepsilon + D = 0, \tag{9}$$

так что

$$\varepsilon_{2(3)}^\sigma = -\gamma_1 \pm \sqrt{\gamma_1^2 + g_\sigma(0) - \alpha}. \tag{10}$$

Четвертый корень уравнения (4) порядка единицы получаем из решения уравнения $\varepsilon + B = 0$, т. е.

$$\varepsilon_4 = -2\gamma_0. \tag{11}$$

Так как этот корень находится очень далеко от дифракционной области, то волновое поле 4 в кристалле крайне слабо возбуждается и его можно не учитывать.

Если α достигает величины $g_\sigma(0)$, значения корней 1 и 3 сближаются и выражения (8)—(11) становятся некорректными.

При $\gamma_1 = 0$ все три корня уравнения (4) порядка $g^{2/3}$ находим из решения уравнения $B\varepsilon^3 + E = 0$:

$$\varepsilon_1^\sigma = \sqrt{\frac{g(\tau)\,g(-\tau))}{2\gamma_0}},\quad \varepsilon_{2(3)}^\sigma = -\frac{1 \mp i\sqrt{3}}{2}\sqrt[3]{\frac{g(\tau)\,g(-\tau)}{2\gamma_0}} \quad \text{при } \gamma_1 = 0. \tag{12.а}$$

При $|\gamma_1| \approx \sqrt{g}$ уравнение (4) имеет один корень порядка $\sqrt{g}$, определяемый уравнением $B\varepsilon + C = 0$, и два корня порядка $g^{3/4}$, определяемые уравнением $C\varepsilon^2 + E = 0$:

$$\varepsilon_{1(2)}^\sigma = \pm\frac{|g(\tau)|}{2\sqrt{\gamma_0\gamma_1}},\quad \varepsilon_3^\sigma = 2\gamma_1 \quad \text{при } \gamma_1 > 0; \tag{12.б}$$

$$\varepsilon_1^\sigma = -2\gamma_1,\ \varepsilon_{2(3)}^\sigma = \pm i\frac{g(\tau)}{2\sqrt{\gamma_0|\gamma_1|}} \quad \text{при } \gamma_1 < 0. \tag{12.в}$$

Система граничных условий для нахождения амплитуд волн в кристалле, занимающем полупространство $z > 0$, и волн, отраженных назад в вакуум, имеет следующий вид:

$$\varphi_\sigma(\vec{k}_1) + \varphi_\sigma(\vec{k}_2) = \Psi_\sigma + \Psi'_\sigma, \tag{13.а}$$

$$\varphi_\sigma(\vec{k}_1 + 2\pi\vec{\tau}) + \varphi_\sigma(\vec{k}_2 + 2\pi\vec{\tau}) = \Psi'_{(\tau)\sigma}, \tag{13.б}$$

$$[\vec{k}_1\varphi_\sigma(\vec{k}_1) + \vec{k}_2\varphi_\sigma(\vec{k}_2)]\,\vec{n} = \vec{k}_0\cdot\vec{n}(\Psi_\sigma - \Psi'_\sigma), \tag{13.в}$$

$$[(\vec{k}_1 + 2\pi\vec{\tau})\,\varphi_\sigma(\vec{k}_1 + 2\pi\vec{\tau}) + (\vec{k}_2 + 2\pi\vec{\tau})\,\varphi_\sigma(\vec{k}_2 + 2\pi\vec{\tau})]\vec{n} = (\vec{k}'_0 + 2\pi\vec{\tau})\,\vec{n}\Psi_{(\tau)\sigma}, \tag{13.г}$$

где Ψ_σ, Ψ'_σ и $\Psi'_{(\tau)\sigma}$— амплитуды падающей, зеркально отраженной волны и волны, отраженной в вакуум в направлении дифракции. Из уравнений

(13.а) и (13.в) сразу следует выражение для амплитуды зеркально отраженной волны:

$$\Psi'_\sigma = -\frac{1}{2\gamma_0}\left[\varepsilon_1^\sigma \varphi_\sigma(\vec{k}_1) + \varepsilon_2^\sigma \varphi_\sigma(\vec{k}_2)\right]. \tag{14}$$

Так как $\gamma_0 \sim 1$ и ε_1, $\varepsilon_2 \ll 1$, то амплитуда зеркально отраженной волны Ψ'_σ будет значительно меньше амплитуды падающей волны Ψ_σ, и амплитуду Ψ'_σ в дальнейшем можно не учитывать.

Решая совместно уравнения (13), с учетом (1), (3), (8), (10) и (13), получаем следующие выражения для амплитуд $\varphi_\sigma(\vec{k}_1)$, $\varphi_\sigma(\vec{k}_2)$ проходящей волны и $\Psi'_{(\tau)\sigma}$ — волны, дифрагировавшей в вакуум:

$$\varphi_\sigma(\vec{k}_1) = \frac{(\varepsilon_2^\sigma - \Gamma)\left[2\gamma_0\varepsilon_2^\sigma - g_\sigma(0)\right]\Psi_\sigma}{(\varepsilon_2^\sigma - \varepsilon_1^\sigma)\left[2\gamma_0(\varepsilon_2^\sigma + \varepsilon_1^\sigma) - g_\sigma(0) - 2\gamma_0\Gamma\right]}, \tag{15}$$

$$\varphi_\sigma(\vec{k}_2) = -\frac{(\varepsilon_1^\sigma - \Gamma)\left[2\gamma_0\varepsilon_1^\sigma - g_\sigma(0)\right]\Psi_\sigma}{(\varepsilon_2^\sigma - \varepsilon_1^\sigma)\left[2\gamma_0(\varepsilon_2^\sigma + \varepsilon_1^\sigma) - g_\sigma(0) - 2\gamma_0\Gamma\right]}, \tag{16}$$

$$\Psi'_{(\tau)\sigma} = \frac{\left[2\gamma_0\varepsilon_2^\sigma - g_\sigma(0)\right]\left[2\gamma_0\varepsilon_1^\sigma - g_\sigma(0)\right]\Psi_\sigma}{g(\tau)\left[2\gamma_0(\varepsilon_2^\sigma + \varepsilon_1^\sigma) - g_\sigma(0) - 2\gamma_0\Gamma\right]}, \quad \Gamma = \gamma_1 + \sqrt{\gamma_1^2 - \alpha}. \tag{17)—(18}$$

Предположим, что на кристалл падает плоская нейтронная волна

$$\Psi_\sigma = \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}}, \tag{19}$$

где $\begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix}$ — спиновая волновая функция падающих на кристалл нейтронов. Используя (15) и (16), запишем выражения для интенсивности дифрагировавшей в вакуум нейтронной волны

$$I'_r = |c_+|^2 \left|\frac{\left[2\gamma_0\varepsilon_2^+ - g_+(0)\right]\left[2\gamma_0\varepsilon_1^+ - g_+(0)\right]}{g(\tau)\left[2\gamma_0(\varepsilon_2^+ + \varepsilon_1^+) - g_+(0) - 2\gamma_0\Gamma\right]}\right|^2 + $$

$$+ |c_-|^2 \left|\frac{\left[2\gamma_0\varepsilon_2^- - g_-(0)\right]\left[2\gamma_0\varepsilon_1^- - g_-(0)\right]}{g(\tau)\left[2\gamma_0(\varepsilon_2^+ + \varepsilon_1^+) - g_-(0) - 2\gamma_0\Gamma\right]}\right|^2. \tag{20}$$

Так как величины $\varepsilon_{1(2)}^\sigma$ и $g_\sigma(0)$ зависят от ориентации спина нейтронов относительно направления внешнего магнитного поля, то и интенсивность дифрагировавших в вакуум нейтронов с различным поляризационным состоянием будет различна.

В качестве наглядного примера рассмотрим случай, когда падающий монохроматический неполяризованный пучок нейтронов ($|c_+|^2 = |c_-|^2 = 1/2$) находится в динамической области отражения, причем $\alpha = g_-(0) = 2g(0)$, и дифрагировавший пучок в кристалле составляет с входной поверхностью нулевой угол ($\gamma_1 = 0$). Тогда, как следует из выражений (12) и (20), интенсивность дифракционно отраженных в вакуум нейтронов со спином, ориентированным вдоль поля, будет пропорциональна единице, в то время как для нейтронов с противоположным направлением спина интенсивность будет пропорциональна $g^{-1/3}$. Так как типичное значение структурной амплитуды $g \approx 10^{-6}$, то степень поляризации отраженного в вакуум пучка будет близка к единице.

Далее рассмотрим прецессию спина нейтронов, проходящих кристалл в условиях аномальной дифракции. Пройти кристалл и выйти из него на противоположной стороне может только волновое поле 1, так как волновое поле 2 всегда распространяется под малыми углами к входной поверхности.

Поперечная направлению магнитного поля компонента вектора поляризации прошедших нейтронов через кристалл толщиной l запишется в следующем виде:

$$P_x = 2\,\mathrm{Re}\,\varphi_+^*(\vec{k}_1)\,\varphi_-(\vec{k}_1) = 2\,|A_+A_-|\cos[k_0\mathrm{Re}(\varepsilon_1^+ - \varepsilon_1^-)\,l + \delta]\times$$
$$\times\exp[-k_0\,\mathrm{Im}(\varepsilon_1^+ + \varepsilon_1^-)\,l],$$

где введены обозначения:

$$\frac{[2\gamma_0\varepsilon_2^\sigma - g_\sigma(0)]\,(\varepsilon_2^\sigma - \Gamma)}{(\varepsilon_2^\sigma - \varepsilon_1^\sigma)\,[2\gamma_0(\varepsilon_2^\sigma + \varepsilon_1^\sigma) - g_\sigma(0) - 2\gamma_0\Gamma]} = |A_\sigma|\,e^{i\delta_\pm},\ \ \delta = \delta_+ - \delta_-.$$

Компоненту P_y получаем из P_x заменой cos на —sin. Из выражений (8) и (12) следует, что при изменении параметра от $\alpha = g_-(0) = 2g(0)$ до $\alpha = g(0)$ величина разности $(\varepsilon_1^+ - \varepsilon_1^-)$ изменяется в пределах от $g^{2/3}$ до g при $\gamma_1 = 0$. Следовательно, при толщине кристалла 1 мм, длине волны падающих нейтронов $\lambda = 0{,}2$ нм и напряженности магнитного поля 10^4 эрстед изменение ориентации кристалла относительно падающего пучка нейтронов всего на единицы угловой секунды приводит к изменению угла поворота спина прошедших нейтронов на несколько десятков градусов.

Список литературы

1. Барышевский В. Г.// Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 33. С. 78.
2. Baryshevskii V. G., Cherepitsa S. V.// Phys. Lett. 1982. V. A 90. P. 267.
3. Барышевский В. Г. Каналирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях. Минск, 1982. С. 253.
4. Kaganer V. M., Indenbom V. L., Vrana M., Chalupa B.// Phys. St. Sol. 1982. V. A 71. P. 371.

Поступила в редакцию 06.05.85.

УДК 621.315.422

Н. Н. ДОРОЖКИН, А. В. ЛЕОНТЬЕВ, Ю. С. ЛЕОНТЬЕВА

ПРИМЕНЕНИЕ КУБИЧЕСКИХ СПЛАЙНОВ К РАСЧЕТУ ОПТИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ПО СООТНОШЕНИЮ КРАМЕРСА — КРОНИГА

В настоящее время существуют два основных метода расчета оптических функций кристаллов. Первый основан на применении дисперсионного соотношения Крамерса — Кронига (К-К), второй — на дисперсионном анализе (ДА). Каждому из них свойственны свои недостатки [1]. Комбинацией двух основных методов является метод последовательного анализа (ДА — К-К). Последний лишен принципиальных недостатков, свойственных ДА и К-К методам, примененным независимо, и точность расчета оптических функций будет в основном определяться точностью вычислений соответствующих интегралов в К-К, чему и посвящена настоящая работа.

На практике для расчета оптических функций используют соотношение К-К, связывающее $\ln R(x)$, где $R(x)$ — квадрат амплитуды коэффициента отражения с фазой отраженной волны $\varphi(x)$. Экспериментально определяют $R(x)$ в некотором интервале частот (a, b), фазу отраженной волны $\varphi(x)$ находят по соотношению К-К:

$$\varphi(x_k) = \frac{x_k}{\pi}\int_0^\infty \frac{\ln R(x)\,dx}{x_k^2 - x^2}. \tag{1}$$

Зная фазу отраженной волны $\varphi(x)$, оптические функции кристаллов рассчитывают по известным формулам [2]. Обычно интеграл (1) представляют в виде суммы трех интегралов:

$$\varphi(x_k) = \frac{x_k}{\pi}\left[\int_0^a \frac{\ln R(x)\,dx}{x_k^2 - x^2} + \int_a^b \frac{\ln R(x)\,dx}{x_k^2 - x^2} + \int_b^\infty \frac{\ln R(x)\,dx}{x_k^2 - x^2}\right] =$$
$$= \varphi_1(x_k) + \varphi_2(x_k) + \varphi_3(x_k), \tag{2}$$