

Введение

Оптика – наука о распространении и преобразовании, т. е. рассеянии электромагнитных волн. Нейтронная оптика изучает рассеяние нейтронов. Однако такое определение слишком широко. Оно включает в себя всю нейтронографию, и чуть позже мы его сузим, перечислив те явления, которые будем рассматривать.

В каждом из процессов рассеяния существенную роль играет первичная падающая волна. С нее мы и начнем.

Плоская волна

Нейтрон в квантовой механике — тоже волна и, как всякая волна, описывается такими характеристиками, как длина волны λ и частота ω . Свободный нейтрон описывается плоской волной

$$\psi_0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t), \quad (1)$$

где вектор \mathbf{k} называется волновым вектором. Его длина $k = |\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$.

Функция (1) описывает волновые свойства не только нейтрона, но и множества других объектов, и различаются эти объекты зависимостью $\omega(\mathbf{k})$, которая называется дисперсионным соотношением¹. Например, для нейтрона $\omega(\mathbf{k}) = (1/\hbar)(\hbar^2/2m)\mathbf{k}^2$, где $\hbar = h/2\pi = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — приведенная постоянная Планка, $m = 1.675 \cdot 10^{-27}$ кг — масса нейтрона, $\hbar\omega = E$ — его энергия. Мы выделили скобками отношение $\hbar^2/2m = 3.3 \cdot 10^{-42}$ Дж·м², которое часто встречается в нейтронной физике и от которого мы будем в дальнейшем избавляться. Для фотона $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$, где $c \approx 3 \cdot 10^8$ м/с — скорость света в вакууме. Для фонона $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$, где c — скорость звука, разная для разных физических сред.

Особенность дисперсионного соотношения для нейтрона состоит в том, что фазовая скорость частицы $v_p = \omega/k$ равна только половине ее скорости v . Со скоростью нейтрона v совпадает групповая скорость $v_g = d\omega/dk$. Заметим, что для вычисления групповой скорости совсем необязательно вводить группу волн, т. е. волновой пакет. Достаточно знать дисперсионное соотношение.

Приведенные функции $\omega(\mathbf{k})$ для нейтрона и фотона справедливы только в вакууме. В среде дисперсионные соотношения иные. Что касается фонона, то он существует только в среде.

Дисперсионные соотношения для частиц находят экспериментально. В среде дисперсионное соотношение для нейтронов имеет вид $\omega(\mathbf{k}) = (1/\hbar)(\hbar^2/2m)(\mathbf{k}^2 - u)$, а для фотонов $\omega(\mathbf{k}) = (c/\sqrt{\epsilon})|\mathbf{k}|$, где u — так называемый оптический потенциал, а ϵ — диэлектрическая проницаемость. Оптический потенциал и диэлектрическая проницаемость — характеристики конкретной среды; что они собой представляют, мы исследуем позже, а пока будем принимать их как данность.

При помощи дисперсионных соотношений составляются квантовомеханические уравнения, которым удовлетворяет плоская волна. Для нейтрона такое уравнение имеет вид

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \omega(-i\nabla)\psi = -\frac{1}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi, \quad (2)$$

¹Заметим, что словосочетание «дисперсионное соотношение» многозначно и применяется не только к $\omega(\mathbf{k})$.

а для фотона

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = -\omega^2(-i\nabla)\psi = c^2\Delta\psi, \quad (3)$$

где оператор $-i\nabla$ заменяет \mathbf{k} в дисперсионном соотношении $\omega(\mathbf{k})$, $\Delta = d^2/dx^2 + d^2/dy^2 + d^2/dz^2$.

Уравнения имеют такой простой вид и их решение описывается плоской волной (1) только в случае однородного пространства — либо пустого, либо заполненного средой. Если пространство неоднородно, т. е. в каких-то частях оно пустое, а в каких-то заполнено средой, и при этом среда меняется со временем, то, во-первых, меняются уравнения:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}[-\Delta + u(\mathbf{r}, t)]\psi, \quad (2a)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = \frac{c^2}{\epsilon(\mathbf{r}, t)}\Delta\psi, \quad (3a)$$

и, во-вторых, решение становится более сложной функцией координат и времени.

Явления, которые мы будем изучать

Перечислим теперь процессы рассеяния, которые мы будем изучать в этой книге. Если первичная волновая функция совпадает с волновой функцией плоской волны $\psi_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ (1), то после рассеяния она может быть функцией самого общего вида $\psi(\mathbf{r}, t)$. Однако, как мы увидим в последней главе, она обязательно должна быть суперпозицией (суммой или интегралом) плоских волн. Если рассеяние происходит с изменением частоты первоначальной (падающей) плоской волны, то оно называется неупругим, если без изменения частоты, то — упругим. В последнем случае $\psi(\mathbf{r}, t)$ можно представить в виде произведения $\psi(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$. Мы будем рассматривать в основном упругие процессы, что позволит нам исключить множитель $\exp(-i\omega t)$ и работать со стационарными уравнениями для нейтронов:

$$[\Delta - u\Theta(\mathbf{r} \in V) + 2m\omega/\hbar]\psi(\mathbf{r}) \equiv [\Delta - u\Theta(\mathbf{r} \in V) + k^2]\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (4)$$

и фотонов:

$$\left[\Delta - \frac{\omega^2}{c^2}(1-\epsilon)\Theta(\mathbf{r} \in V) + \frac{\omega^2}{c^2}\right]\psi(\mathbf{r}) \equiv [\Delta - k^2(1-\epsilon)\Theta(\mathbf{r} \in V) + k^2]\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (5)$$

где V — область, занятая средой, $\omega = \omega(\mathbf{k})$ и \mathbf{k} — волновой вектор в вакууме. В уравнение (5) для удобства введена ступенчатая функция $\Theta(x)$, равная единице, когда условие в ее аргументе выполнено, и нулю в противном случае.

Из всевозможных вариантов упругого рассеяния мы в первую очередь будем изучать отражение и пропускание нейтронов полупрозрачными зеркалами конечной толщины и одномерными многослойными системами (т. е. системами, состоящими из нескольких параллельных друг другу полупрозрачных зеркал с различными свойствами), полагая, что нейtron — это скалярная частица. Одномерные системы позволяют детально изучить множество явлений. Мы увидим, как проявляются² и распадаются резонансные состояния (это позволит лучше понять α -распад радиоактивных ядер), как происходит дифракция Брэгга и возникают разрешенные и запрещенные зоны в периодических системах. При этом мы будем применять главным образом простые математические методы, зачастую на уровне элементарной алгебры. Тем не менее этот простой подход во многих случаях позволяет получать точные аналитические выражения, неизвестные ранее. В качестве примера приведем здесь амплитуду отражения R от произвольного периодического потенциала,

²появляются ?

в котором каждый отдельно взятый период характеризуется амплитудами отражения r и пропускания t :

$$R = \frac{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} - \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} + \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}.$$

Во второй главе мы учтем спин нейтрона и посмотрим, как изменится наш подход к одномерным системам при учете магнитного взаимодействия с веществом. При этом мы не будем автоматически обобщать все результаты, полученные в первой главе, на магнитные системы, полагая, что читатель сумеет проделать это самостоятельно. Вместо этого мы уделим внимание некоторым явлениям, специфичным для спинорной частицы, — таким, как тройное лучеотражение от магнитных зеркал, прецессия магнитной стрелки нейтрона и спиновое эхо, и постараемся показать, сколь тонка грань, разделяющая квантовые и классические явления. Здесь нам понадобится нестационарное уравнение Шредингера и встретятся нейтроны с неопределенной энергией, т. е. нейтроны, описываемые суперпозицией плоских волн с различными энергиями.

В третьей главе мы воспользуемся алгебраическим формализмом, развитым для частицы со спином, и перейдем к трехмерным периодическим средам. Это позволит нам сформулировать новый подход к динамической теории дифракции на монокристаллах и с новой точки зрения взглянуть на дифракцию Брэгга и Лауэ, более точно рассчитать положение и форму дифракционных пиков, а также поставить и решить вопрос о том, как происходит дифракция при одновременном выполнении условий и Брэгга и Лауэ.

В четвертой главе алгебраический формализм, развитый для трехмерных упорядоченных сред, обобщается на случай неупорядоченных сред. Здесь рассматривается когерентное отражение и преломление неупорядоченными средами и рассеяние, обусловленное неупорядоченностью. Рассеяние различными объектами, магнитными и немагнитными, — главное содержание нейтронной физики конденсированных сред, и в четвертой главе мы узнаем, как описывается рассеяние с учетом границы раздела. Здесь же будет показано, как формализм, развитый для волновой оптики, может быть с успехом применен к классическим диффузионным задачам, например к задаче об альбедном отражении нейтронов от стенок.

Последняя, пятая глава посвящена критическому разбору современной квантовой теории рассеяния, рассмотрению ее недостатков и возможных путей их преодоления. Эта глава занимает в книге особое место и адресована тем, кто хочет глубже разобраться в фундаментальных вопросах квантовой механики.

Глава 1

Рассеяние скалярной частицы на одномерных системах

Эту главу мы начнем с рассмотрения простейших задач, хорошо известных из курса квантовой механики: отражение от прямоугольной потенциальной ступеньки и прямоугольного потенциального барьера. В случае барьера будет продемонстрирован метод, который будет использоваться на протяжении всей книги. С его помощью легко решаются задачи рассеяния частиц в периодических потенциалах, отражения и пропускания резонансными системами и многие другие. В этой же главе мы обсудим понятие оптического потенциала среды и рассмотрим отражение волновых пакетов, которое связано с известным оптическим эффектом смещения Гооса–Хенхен.

Сначала, однако, уточним, с каким уравнением мы будем иметь дело. Самое общее уравнение Шредингера для волновой функции нейтрана $\Psi(\mathbf{r}, t)$, зависящей и от координат \mathbf{r} и времени t , имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.1)$$

где m — масса нейтрана, $U(\mathbf{r}, t)$ — потенциальная энергия взаимодействия нейтрана с окружающими объектами.

Если потенциал $U(\mathbf{r}, t)$ не зависит от времени t (а мы будем рассматривать по большей части именно такие задачи), то, представив $\Psi(\mathbf{r}, t)$ в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int dE \Phi(\mathbf{r}, E) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

и подставив его в уравнение (1.1), получим стационарное уравнение для $\Phi(\mathbf{r}, E)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) - E \right] \Phi(\mathbf{r}, E) = 0.$$

Разделим уравнение на множитель $\hbar^2/2m$ и введем обозначения $2mE/\hbar^2 = k^2$, $2mU(\mathbf{r})/\hbar^2 = u(\mathbf{r})$. В результате придем к более простому уравнению

$$[\Delta - u(\mathbf{r}) + k^2] \Phi(\mathbf{r}, k) = 0, \quad (1.2)$$

из которого удалены все несущественные множители. Заметим, что потенциальная энергия $u(\mathbf{r})$ теперь имеет размерность см^{-2} , а энергия E представлена квадратом волнового вектора $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

Если потенциальная энергия зависит только от одной координаты: $u(\mathbf{r}) = u(x)$, то, представив $\Phi(\mathbf{r}, k)$ в виде

$$\Phi(\mathbf{r}, k) = \int dE \psi(x, \mathbf{k}_{\parallel}) \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}) d^2k_{\parallel},$$

где вектор \mathbf{r}_{\parallel} описывает координаты в плоскости (y, z) , а волновой вектор \mathbf{k}_{\parallel} параллелен этой плоскости, и подставив $\Phi(\mathbf{r}, k)$ в уравнение (1.2), получим одномерное уравнение

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - u(x) + k_{\perp}^2 \right] \psi(x, \mathbf{k}_{\parallel}) = 0,$$

где $k_{\perp}^2 = k^2 - \mathbf{k}_{\parallel}^2$ характеризует энергию движения нейтрона перпендикулярно плоскости (y, z) , т. е. параллельно оси x .

Именно таким уравнением мы в основном и будем пользоваться на протяжении всей этой главы, и потому простоты ради в дальнейшем, если только не оговорено иное, символ нормальной составляющей u и аргумент \mathbf{k}_{\parallel} в функции $\psi(x, \mathbf{k}_{\parallel})$ будут опускаться. Таким образом, окончательно, нашим основным уравнением будет уравнение Шредингера в виде

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - u(x) + k^2 \right] \psi(x) = 0, \quad (1.3)$$

и рассматриваемые задачи в основном будут различаться только видом потенциала $u(x)$.

1.1 Отражение и преломление потенциальной ступенькой

Рассмотрим отражение от плоской стенки бесконечной толщины. Пусть внутренняя нормаль к стенке направлена по оси x , а взаимодействие с нейтроном описывается потенциалом u_0 , не зависящим от x . Такая стенка графически изображается потенциальной ступенькой (рис. 1.1). Отражение от нее падающей слева плоской волны e^{ikx} описывается решением уравнения Шредингера

$$[d^2/dx^2 - u_0 \Theta(x > 0) + k^2] \psi(x) = 0. \quad (1.4)$$

Здесь введена ступенчатая Θ -функция, равная единице, если неравенство в ее аргументе выполнено, и нулю в противном случае.

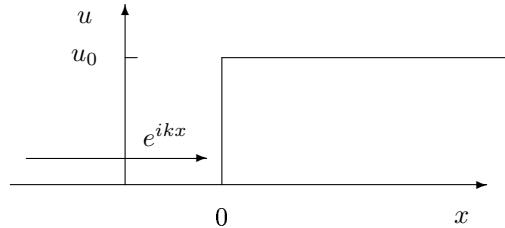


Рис. 1.1: Потенциальная ступенька высоты u_0 в точке $x = 0$

Слева от барьера ($x < 0$) решение будем искать в виде $e^{ikx} + \vec{r}_0 e^{-ikx}$, содержащем свободные падающую и отраженную волны с неизвестной пока амплитудой отражения \vec{r}_0 . Справа от ступеньки ($x > 0$) решение будем искать в виде $\vec{t}_0 e^{ik'x}$, где \vec{t}_0 — амплитуда пропускания (преломления) ступенькой, k' — волновое число внутри потенциала. Подстановка преломленной волны в (1.4) приводит к уравнению

$$-k'^2 - u_0 + k^2 = 0,$$

которое определяет волновое число k' внутри среды: $k' = \sqrt{k^2 - u_0}$. Полное решение уравнения (1.4) можно представить в виде

$$\vec{\psi}(x) = \Theta(x \leq 0) [e^{ikx} + \vec{r}_0 e^{-ikx}] + \Theta(x > 0) \vec{t}_0 e^{ik'x}, \quad (1.5)$$

где Θ -функция была введена ранее в уравнении (1.4), и стрелка над r и t показывает, что первичная волна падает на ступеньку слева. Если бы волна падала справа, изнутри вещества, то решение следовало бы искать в виде

$$\overleftarrow{\psi}(x) = \Theta(x \leq 0) \overleftarrow{t}_0 e^{-ikx} + \Theta(x > 0) \left[e^{-ik'x} + \overleftarrow{r}_0 e^{ik'x} \right]. \quad (1.6)$$

Для того чтобы найти неизвестные коэффициенты в решении (1.5), необходимо сплить волновую функцию в точке $x = 0$, т. е. добиться непрерывности и функции и ее первой производной. Эти требования приводят к уравнениям

$$1 + \overrightarrow{r}_0 = \overrightarrow{t}_0, \quad k[1 - \overrightarrow{r}_0] = k' \overrightarrow{t}_0 \quad (1.7)$$

с решениями

$$\overrightarrow{r}_0 = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad \overrightarrow{t}_0 = \frac{2k}{k + k'}. \quad (1.8)$$

Аналогичную процедуру спливаия можно проделать с решением (1.6), однако результат очевиден из соображений симметрии:

$$\overleftarrow{r}_0 = \frac{k' - k}{k' + k} = -\overrightarrow{r}_0, \quad \overleftarrow{t}_0 = \frac{2k'}{k' + k}. \quad (1.9)$$

Мы рассмотрели случай, когда слева от ступеньки был вакуум, т. е. потенциал слева равен нулю. Но можно рассмотреть и более общий случай, когда все пространство разделено на две части, и слева, при $x < 0$ потенциал равен u_i , а справа u_f .

Если первичная волна приходит со стороны u_i , то отражение и преломление ступенькой от потенциала u_i к потенциальному u_f описываются амплитудами

$$r_{if} = \frac{k_i - k_f}{k_i + k_f}, \quad t_{if} = \frac{2k_i}{k_i + k_f}, \quad (1.10)$$

где $k_{i,f} = \sqrt{k^2 - u_{i,f}}$.

1.1.1 Аналогия с упругим столкновением двух частиц в классической механике

Формулы (1.8), (1.9) очень похожи на те, что встречаются в механике столкновения двух частиц. Если частица массы m налетает со скоростью v на покоящуюся частицу массы m' , то скорости v_1 и v_2 первой и второй частиц после упругого соударения вычисляются по формулам

$$\frac{v_1}{v} = \frac{m - m'}{m + m'}, \quad \frac{v_2}{v} = \frac{2m}{m + m'}. \quad (1.11)$$

1.1.2 Условие унитарности

Здесь уместно поговорить об условии унитарности. В квантовой механике оно формулируется по-разному, в зависимости от того имеем ли мы дело с нормированными или ненормированными волновыми функциями. В случае нормированных функций условие унитарности, эквивалентное условию сохранения числа частиц, требует сохранения нормы волновой функции. В случае ненормируемых волновых функций условие унитарности — это условие сохранения потока. Для отражения и преломления плоских волн на границе раздела сред условие унитарности означает, что сумма потоков отраженных и преломленных волн должна быть равна падающему потоку:

$$k = k|\overrightarrow{r}_0|^2 + k'|\overrightarrow{t}_0|^2. \quad (1.12)$$

Из этого соотношения определяем вероятность преломления $w = (k'/k)|\vec{t}_0|^2$, которая с учетом (1.8) приводится к виду

$$w = \frac{4kk'}{(k+k')^2}. \quad (1.13)$$

1.1.3 Полное отражение

Обратимся снова к амплитуде отражения \vec{r}_0 (1.8). Поскольку $k' = \sqrt{k^2 - u_0}$, то при $k^2 < u_0$ волновой вектор k' внутри среды становится мнимым: $k' = ik''$, где $k'' = \sqrt{u_0 - k^2}$. При этом амплитуда отражения оказывается единичным комплексным числом (т. е. числом, модуль которого равен единице)

$$\vec{r}_0 = \frac{k - ik''}{k + ik''} = \exp(-2i\gamma_0), \quad \gamma_0 = \arctg\left(\frac{k''}{k}\right) = \arccos\left(\frac{k}{\sqrt{u_0}}\right). \quad (1.14)$$

Это означает, что при $k^2 < u_0$ коэффициент отражения $|\vec{r}_0|^2$ равен единице, т. е. имеет место полное отражение.

Вспомним, что k во всех наших выражениях на самом деле обозначает нормальную компоненту k_\perp полного волнового вектора \mathbf{k} падающего нейтрона. Условие $k_\perp^2 < u_0$ означает полное отражение нейтрона от стенки. Если же удовлетворяется условие $|\mathbf{k}|^2 < u_0$, то нейtron полностью отражается от стенки при любых углах падения. Нейтроны с энергией $k^2 < u_0$ можно хранить в замкнутых сосудах, и их называют ультрахолодными (УХН) [1–3].

1.2 Оптический потенциал и УХН

Выше мы рассматривали отражение и преломление абстрактной потенциальной ступенькой. Покажем теперь, с какими потенциалами нам в действительности приходится иметь дело.

Взаимодействие вещества с нейtronами описывается оптическим потенциалом

$$U = \frac{\hbar^2}{2m} 4\pi N_0 b, \quad (1.15)$$

где $\hbar = h/2\pi = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — приведенная постоянная Планка, $m = 1.675 \cdot 10^{-27}$ кг — масса нейтрона, $N_0 \approx 10^{23}$ см⁻³ — число атомов в единице объема вещества, и b — средняя (когерентная) амплитуда рассеяния нейтрона на одном ядре вещества. Таким образом, величина u_0 , которой мы пользовались раньше, равна $4\pi N_0 b$.

Амплитуда рассеяния b , различная для разных веществ [4], может быть как положительной, так и отрицательной, но по порядку величины ее можно принять равной $|b| \approx 10^{-12}$ см. После подстановки численных значений параметров получаем оценку величины потенциала: она должна быть порядка 10^{-7} эВ. Соответственно ультрахолодные нейтроны имеют энергии $E = \hbar^2 k^2 / 2m \leq U \approx 10^{-7}$ эВ и скорости $v \leq 5$ м/с.

Строгое обоснование выражения для потенциала отложим до третьей главы, а сейчас покажем, как к нему пришли исторически.

1.2.1 Рассеяние нейтрона на фиксированном ядре

Первичным понятием, из которого проистекает все остальное, — это рассеяние на атоме. Атом состоит из ядра и электронов, и нейtron взаимодействует и с тем и с другими. С электронами он взаимодействует главным образом через посредство электромагнитных полей, благодаря тому что обладает магнитным моментом, а с ядрами — главным образом через посредство сильных взаимодействий. В этой главе мы сосредоточимся только

на сильном взаимодействии нейтрона с ядром, потенциал которого обозначим $V(r)$. Это сильный притягивающий потенциал, который связывает нейтроны с протонами в ядре. Будем считать, что ядро атома фиксировано в пространстве, а его центр совпадает с точкой $r = 0$. Для описания поведения нейтрона в присутствие ядра достаточно решить стационарное уравнение Шредингера, аналогичное (1.1):

$$[\Delta - v(r) + k^2]\Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (1.16)$$

где $v(r) = (2m/\hbar^2)V(r)$. Если $k^2 < 0$, и мы требуем, чтобы волновая функция обращалась в нуль при $r \rightarrow \infty$, то решение уравнения (1.16) характеризует связанное состояние нейтрона в ядре. Нас будет интересовать задача рассеяния, когда $k^2 > 0$. В этом случае для решения уравнения (1.16) необходимо также задать асимптотическое условие, т. е. вид волновой функции падающего нейтрона вдали от рассеивающего центра. Обычно в качестве нее берут плоскую волну

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \quad (1.17)$$

которая содержит вектор \mathbf{k} ($|\mathbf{k}| = k$), характеризующий импульс $\hbar\mathbf{k}$ падающего нейтрона.

Сильные взаимодействия являются короткодействующими, т. е. потенциал $v(r)$ отличен от нуля только при $r < r_0$, где радиус взаимодействия r_0 имеет величину порядка 10^{-12} см. Если мы интересуемся рассеянием нейронов с длиной волны $\lambda = 2\pi/k \gg r_0$ (а нас действительно будут интересовать главным образом нейтроны с длиной волны $\lambda > 1 \text{ \AA} = 10^{-8}$ см), то для таких нейронов волновая функция вдали от ядра имеет вид¹

$$\Psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \frac{b}{r} \exp(ikr), \quad (1.18)$$

т. е. она содержит падающую волну и сферически симметричную расходящуюся рассеянную волну, в которой параметр b , называемый амплитудой рассеяния, определяется потенциалом $v(r)$. Именно амплитуда b является самым существенным параметром в определении оптического потенциала (1.15). Покажем, как с ее помощью можно ввести коэффициент преломления (см., напр., [4, с. 65]).

1.2.2 Коэффициент преломления

Представим себе тонкую бесконечно протяженную пластинку вещества толщины d , на которую перпендикулярно к ее поверхности падает плоская волна $\exp(ikx)$, как показано на рис. 1.2. Пластина состоит из атомов с амплитудой рассеяния b . Число атомов в единице объема N_0 .

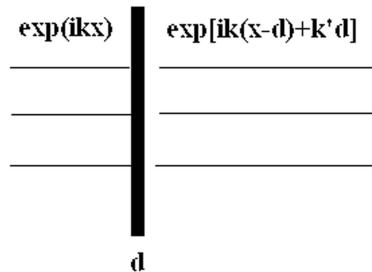


Рис. 1.2: К выводу коэффициента преломления. Плоская волна, падающая перпендикулярно на пластинку толщины d , после пластины остается плоской волной, но ее фаза внутри пластины изменилась на величину $(k' - k)d$, где $k' = nk$

¹Мы не учитываем здесь однушку тонкость, обсуждение которой откладываем до последней главы.

На атом, находящийся в точке \mathbf{r}' , падает волна $\exp(ikx')$, и от него распространяется рассеянная волна

$$-\exp(ikx') \frac{b}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|).$$

После прохождения сквозь пластинку распространяется совокупность волн

$$e^{ikx} - b \sum_j e^{ikx_j} \frac{b}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) = e^{ikx} - \int_{0 < x < d} N_0 d^3 r' e^{ikx'} \frac{b}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (1.19)$$

Здесь сумма по дискретным рассеивателям внутри вещества преобразована в интеграл.

Сферическая волна и ее свойства

В дальнейшем нам придется часто манипулировать сферической волной, поэтому рассмотрим подробно ее Фурье-представления.

Трехмерное Фурье-представление. Покажем, что $\exp(ikr)/r$ может быть представлена трехмерным интегралом Фурье:

$$\frac{\exp(ikr)}{r} = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p \exp(ipr)}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} \quad (1.20)$$

(ε — сколь угодно малая величина). Действительно, $d^3 p = d\phi d\cos\theta p^2 dp$, $\mathbf{pr} = pr \cos\theta$, поэтому после интегрирования правой части равенства по $d\phi d\cos\theta$ получим

$$\frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} = \frac{1}{i\pi r} \int_0^\infty \frac{p dp}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} (e^{ipr} - e^{-ipr}) = \frac{1}{2\pi ir} \int_{-\infty}^\infty \frac{2p dp}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} e^{ipr}.$$

Путь интегрирования можно замкнуть полуокружностью в верхней полуплоскости комплексной переменной p . При этом нужно учесть, что подынтегральное выражение содержит два полюса:

$$\frac{2p}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} = \frac{1}{p - k - i\varepsilon} + \frac{1}{p + k + i\varepsilon}.$$

Один из них, $p = k + i\varepsilon$, попадает внутрь контура интегрирования и вычет в нем дает вклад в интеграл

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{2p dp}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} e^{ipr} = \int_{-\infty}^\infty \frac{dp}{p - k - i\varepsilon} e^{ipr} = 2\pi i \exp(ikr),$$

другой находится вне контура интегрирования, и его вклад равен нулю. Отсюда и следует справедливость (1.20).

Уравнение, которому удовлетворяет сферическая волна. Подействуем на сферическую волну (1.20) оператором $\Delta + k^2$. В результате под интегралом Фурье-разложения появится множитель $k^2 - p^2$, который сократит знаменатель, после чего интеграл превращается в δ -функцию $-(2\pi)^3 \delta(\mathbf{r})$. Таким образом,

$$[\Delta + k^2] \frac{\exp(ikr)}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

Волновую функцию (1.18) можно считать найденным в первом порядке теории возмущений решением уравнения

$$[\Delta + k^2 - 4\pi b \delta(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (1.22)$$

где величина

$$u_1(\mathbf{r}) = 4\pi b\delta(\mathbf{r}) \quad (1.23)$$

играет роль потенциала. Этот потенциал был введен Э. Ферми и назван псевдопотенциалом. Он не имеет ничего общего с реальным ядерным потенциалом, но в первом порядке теории возмущений дает такое же решение вдали от ядра, как и ядерный. Точного решения уравнения с таким потенциалом не существует, потому что произведение $\delta(r)$ на $\exp(ikr)/r$ не имеет смысла. Однако при необходимости можно δ -функцию представить в виде узкого сферически симметричного прямоугольного барьера конечной высоты, а для такого барьера можно найти строгое решение, которое вдали от потенциала имеет вид (1.18). При положительном b псевдопотенциал положителен, т. е. становится отталкивающим, и это особенно сильно отличает его от реального притягивающего ядерного потенциала.

Двумерное Фурье-представление. Вернемся к задаче вычисления коэффициента преломления. Для этого нам понадобится двумерное Фурье-разложение сферической функции. Чтобы получить его из (1.20), подставим в интеграл выражения, соответствующие двумерному случаю: $d^3p = dp_x d^2p_{\parallel}$, $p^2 - k^2 - i\varepsilon = p_x^2 - p_{\perp}^2 - i\varepsilon$ и $\mathbf{pr} = p_x \mathbf{r}_x + p_{\parallel} \mathbf{r}_{\parallel}$, где p_x , \mathbf{p}_{\parallel} — перпендикулярная и параллельная плоскости (y, z) компоненты вектора \mathbf{p} ; $p_{\perp} = \sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}$. Проинтегрируем полученный интеграл (1.20) по dp_x . При положительных x интеграл замкнем полуокружностью в верхней полуплоскости комплексной переменной p_x , а при отрицательных x — в нижней полуплоскости. В обоих случаях внутрь контура интегрирования попадает один из полюсов подынтегрального выражения

$$\frac{1}{p_x^2 - p_{\perp}^2 - i\varepsilon} = \frac{1}{2p_{\perp}} \left(\frac{1}{p_x - p_{\perp} - i\varepsilon} - \frac{1}{p_x + p_{\perp} + i\varepsilon} \right).$$

Интегрирование методом вычетов дает:

$$\begin{aligned} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int \frac{d^2p_{\parallel}}{2p_{\perp}} \exp(i\mathbf{p}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}) \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \exp(ip_x x) \left(\frac{1}{p_x - p_{\perp} - i\varepsilon} - \frac{1}{p_x + p_{\perp} + i\varepsilon} \right) = \\ = \frac{i}{2\pi} \int \int \frac{d^2p_{\parallel}}{p_{\perp}} \exp(i\mathbf{p}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + ip_{\perp}|x|). \end{aligned}$$

Таким образом, выражение (1.20) представляется также и двумерным интегралом Фурье

$$\frac{\exp(ikr)}{r} = \frac{i}{2\pi} \int \frac{d^2p_{\parallel}}{p_{\perp}} \exp(i\mathbf{p}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + ip_{\perp}|x|), \quad (1.24)$$

где $p_{\perp} = \sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}$.

Вычисление коэффициента преломления

Теперь мы готовы перейти к выводу формулы для коэффициента преломления нейтронов в среде. Подставим (1.24) в (1.19) и для $x > x' > 0$ получим

$$\Theta(x > d)\psi(\mathbf{r}) = e^{ikx} - \int_{0 < x < d} N_0 b d^3r' e^{ikx'} \int \frac{i d^2p_{\parallel}}{(2\pi)p_{\perp}} \exp[i\mathbf{p}_{\parallel}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')_{\parallel} + ip_{\perp}(x - x')]. \quad (1.25)$$

Интегрирование по $d^2r'_{\parallel}$ приводит к появлению под интегралом δ -функции $(2\pi)^2\delta(\mathbf{p}_{\parallel})$, а интегрирование по d^2p_{\parallel} снимает ее и приводит к $p_{\perp} = k$. После этого интегрирование по dx

дает толщину пластинки d , и окончательно получаем

$$\Theta(x > d)\psi(\mathbf{r}) = e^{ikx} \left(1 - id\frac{4\pi N_0 b}{2k} \right). \quad (1.26)$$

Будем считать, что d достаточно мало, так что выражение в скобках $(1 - idu_0/2k)$ можно представить как $\exp(-idu_0/2k)$. Запишем kx в показателе экспоненты как $k(x - d) + kd$ и объединим kd с $-(u_0/2k)d$. Тогда (1.26) перепишется в виде

$$\Theta(x > d)\psi(\mathbf{r}) = \exp[ik(x - d) + ik'd], \quad (1.27)$$

где $k' = nk$ и

$$n = 1 - \frac{u_0}{2k^2}. \quad (1.28)$$

Величина n есть коэффициент преломления.

Полное отражение

Преломление световых лучей и нейтронов подчиняется закону Снеллиуса

$$\sin \theta = n \sin \theta', \quad (1.29)$$

где θ — угол падения, т. е. угол между падающим лучом и нормалью к поверхности раздела сред, а θ' — угол преломления, т. е. угол между преломленным лучом и нормалью. Этот закон вытекает из того факта, что компоненты волновых векторов $k \sin \theta$ и $k' \sin \theta' = kn \sin \theta'$, параллельные поверхности раздела, вне и внутри среды одинаковы.

Заметим, что при положительных b коэффициент преломления меньше единицы, значит $\sin \theta' = \sin \theta/n > \sin \theta$, т. е. после преломления луч сильнее отклоняется от нормали. При некотором $\theta = \theta_c$, при котором $\sin \theta_c/n = 1$, угол $\theta' = \pi/2$, т. е. преломленный луч скользит вдоль поверхности. При $\theta > \theta_c$ преломление невозможно, и происходит полное отражение.

Амплитуда отражения от поверхности раздела определяется стандартной формулой (1.8) и зависит от нормальных компонент волновых векторов $k \cos \theta$ и $k' \cos \theta' = kn \cos \theta'$ вне и внутри среды:

$$r_0 = \frac{k \cos \theta - k' \cos \theta'}{k \cos \theta + k' \cos \theta'} = \frac{\cos \theta - n \cos \theta'}{\cos \theta + n \cos \theta'} = \frac{\cos \theta - \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta}}{\cos \theta + \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta}} = \frac{\cos \theta - \sqrt{\cos^2 \theta - (1 - n^2)}}{\cos \theta + \sqrt{\cos^2 \theta - (1 - n^2)}}, \quad (1.30)$$

где в предпоследнем равенстве мы воспользовались законом Снеллиуса (1.29) и заменили $n^2 \sin^2 \theta'$ на $\sin^2 \theta$.

Если $u_0/2k^2$ в выражении (1.28) мало, то можно записать:

$$n^2 = 1 - \frac{u_0}{k^2}, \quad (1.31)$$

и амплитуда отражения (1.30) приводится к виду

$$r_0 = \frac{k_\perp - \sqrt{k_\perp^2 - u_0}}{k_\perp + \sqrt{k_\perp^2 - u_0}}. \quad (1.32)$$

Тем самым мы получили выражение, полностью соответствующее отражению нейтронов от потенциальной ступеньки высоты u_0 .

1.2.3 Оптический потенциал

Мы привели довольно длинный вывод выражения (1.32), чтобы показать, каким образом на основе представления о такой феноменологической величине, как коэффициент преломления, складывалось представление об отражении от потенциальной ступеньки. Энрико Ферми постоянно пользовался коэффициентом преломления в виде (1.28) [5, гл. VIII], и полное отражение называл по аналогии с оптикой полным внутренним отражением, хотя в действительности оно внешнее, а в литературе уже можно было найти строгий вывод выражения (1.31) без требования малости $u_0/2k^2$ [6].

Коэффициент преломления вовсе не нужен, если пользоваться понятием псевдопотенциала (1.23) и ввести усредненный псевдопотенциал среды

$$u_0 = \sum_j u_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \int N_0 d^3 r' u_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int N_0 d^3 r' 4\pi b\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 4\pi N_0 b. \quad (1.33)$$

Приведенный вывод, конечно, не строг. Более полный вывод будет представлен в главе 3.

Дальнодействие оптического потенциала

Заметим, что потенциал сильного взаимодействия — короткодействующий, т. е. отличен от нуля только на расстояниях порядка 10 фм, а псевдопотенциал (1.23) — и вовсе нулевого радиуса действия. Тем не менее потенциал (1.33) оказался дальнодействующим и даже макроскопическим. Он проявляется в обыденных экспериментах, проводимых на нейтронных рефлектометрах. Ферми прекрасно понимал, что (1.23) — не настоящий потенциал. Настоящий ядерный потенциал — притягивающий, т. е. отрицательный, и если усреднять по всему объему вещества именно его, получить можно только отрицательное значение, тогда как знак амплитуды b может меняться. А поскольку в большинстве случаев он положителен, то потенциал (1.33) — отталкивающий. Именно благодаря этому обстоятельству и возможно полное зеркальное отражение, а также хранение нейтронов в сосудах.

Однако Ферми, даже после того как вместе с Цинном наблюдал полное отражение нейтронов от вещества [7], считал, что хранение их невозможно. Он прямо писал [5, с. 92]: «Не существует, к сожалению, сосудов, способных удерживать нейтроны», потому что нейtron должен диффундировать между ядрами и «может свободно проходить через вещество». При этом он ссылался на Резерфорда [8], который задолго до открытия нейтрона представлял его себе в виде компактного атома водорода, химически не взаимодействующего с другими атомами. Только в 1959 г. Я. Б. Зельдович впервые обратил внимание на возможность хранения ультрахолодных нейтронов в сосудах [9]. Впервые такие нейтроны наблюдались в 1968 г. [10], а их хранение — в 1971 г. в экспериментах, выполненных под руководством Ф. Л. Шапиро [11].

Аномалия УХН

После работ Шапиро было поставлено множество других экспериментов (см., напр., [1–3]), в которых проявился интересный феномен, до сих пор не получивший объяснения. Оказалось, что при соударении УХН со стенками хорошо очищенного сосуда с малым поглощением ядрами и малым неупругим рассеянием вероятность потерять почти на два порядка выше теоретических предсказаний. Этот феномен получил название аномалии УХН.

Потери УХН можно описать мнимой частью u_0'' потенциала (1.33), которая обусловлена мнимой частью b'' амплитуды рассеяния $b = b' - ib''$. В случае $b'' = 0$ амплитуда \vec{r}_0 (1.8) при изменении энергии k^2 от нуля до u_0 изменяется в нижней комплексной плоскости вдоль полуокружности единичного радиуса от -1 до $+1$, т. е. ее фаза γ_0 меняется от $-\pi$ до нуля. Далее, при увеличении k^2 от u_0 до ∞ амплитуда \vec{r}_0 уменьшается от единицы до

нуля вдоль вещественной оси. При наличии у потенциала u_0 мнимой части $-iu''$ амплитуда \vec{r}_0 при изменении энергии в интервале $0 < k^2 < \infty$ изменяется по кривой лежащей внутри нижнего полукруга, как показано на рис. 1.3.

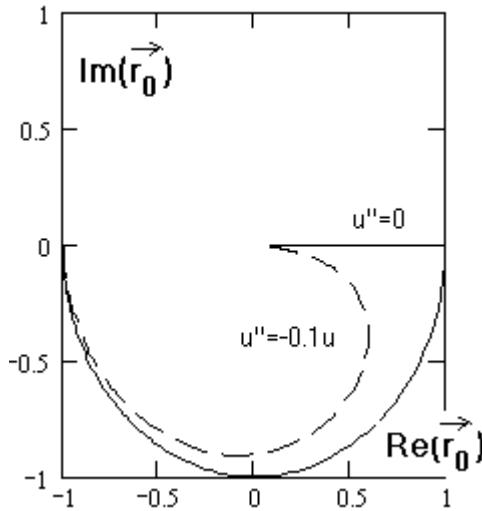


Рис. 1.3: Траектория изменения \vec{r}_0 в комплексной плоскости при изменении k^2 от 0 до ∞ : сплошная кривая — при вещественном потенциале, пунктирная — при комплексном. Траектория начинается в точке -1 , далее при вещественном потенциале проходит по дуге полуокружности единичного радиуса до точки $+1$, которой она достигает при $k^2 = u$, и стремится к нулю вдоль вещественной оси, когда k^2 возрастает от u до $+\infty$. При наличии у потенциала u мнимой части $-iu''$ траектория лежит на кривой, находящейся целиком внутри полуокружности. Представленная кривая рассчитана для $u'' = -0.1u$

Если бы потенциал был вещественной величиной, то коэффициент отражения УХН $|\vec{r}_0|^2$ равнялся бы единице. При наличии же u_0'' он отличается от единицы на величину потерь

$$\mu = 1 - |\vec{r}_0|^2 = 2 \frac{u_0''}{u_0'} \frac{k}{\sqrt{u_0' - k^2}},$$

где $u_0' = 4\pi N_0 b'$. В наиболее благоприятных случаях коэффициент потерь теоретически может достигать величины $\approx 3 \cdot 10^{-7}$, но экспериментально наблюдаемые потери выше: $\mu \approx 3 \cdot 10^{-5}$. Это и называется аномалией УХН².

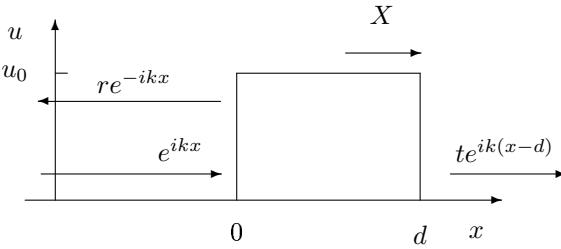
1.3 Рассеяние на прямоугольном потенциальном барьере

Рассмотрим теперь отражение и пропускание потенциального барьера, показанного на рис. 1.4. Обычно для вычисления амплитуд отражения r и пропускания t решается уравнение Шредингера с потенциалом $u_0 \Theta(0 < x < d)$, и решение ищется в виде

$$\psi(x) = \Theta(x < 0) [e^{ikx} + re^{-ikx}] + \Theta(0 < x < d) [Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}] + \Theta(x > d) te^{ik(x-d)}. \quad (1.34)$$

Заметим, что волновую функцию справа от барьера мы представили в виде $t \exp(ik(x-d))$, а не как обычно, $t_{\text{us}} \exp(ikx)$ (us — сокр. от англ. usual — обычный). Это, однако, не принципиально. Фактически мы переопределели амплитуду пропускания, выделив из нее фазовый множитель: $t \exp(-ikd) = t_{\text{us}}$.

²В настоящее время найдены вещества типа фтористого масла фомблин, для которых коэффициент потерь при низких температурах оказался порядка $2 \cdot 10^{-6}$ [12].

Рис. 1.4: Прямоугольный потенциальный барьер высоты u_0 и ширины d

Сшивка функции (1.34) в точках $x = 0$ и $x = d$ дает систему четырех уравнений с четырьмя неизвестными r , A , B и t :

$$1 + r = A + B, \quad k(1 - r) = k'(A - B), \quad A e^{ik'd} + B e^{-ik'd} = t, \quad k' (A e^{ik'd} - B e^{-ik'd}) = k t, \quad (1.35)$$

решение которой (довольно скучная процедура) и дает искомые амплитуды. Однако найти все неизвестные можно и несколько иначе.

1.3.1 Геометрическая прогрессия многократных переотражений [13]

Отраженная волна $r \exp(-ikx)$, которая в точке $x = 0$ равна r , на самом деле представляет собой бесконечную сумму многих волн:

$$r = \vec{r}_0 + \overleftarrow{t}_0 e^{ik'd} (-\vec{r}_0) e^{ik'd} \vec{t}_0 + \overleftarrow{t}_0 \left[\sum_{n=1}^{\infty} \left(\vec{r}_0 e^{ik'd} \vec{r}_d e^{ik'd} \right)^n \right] e^{ik'd} \vec{r}_d e^{ik'd} \vec{t}_0. \quad (1.36)$$

Здесь первое слагаемое \vec{r}_0 отвечает волне, сразу отраженной от потенциального скачка. Второе слагаемое отвечает волне, которая входит внутрь барьера с амплитудой \vec{t}_0 (эту часть формулы нужно читать справа налево), распространяется до правого конца барьера (при этом набегает фазовый множитель $e^{ik'd}$), отражается от правого конца (амплитуда отражения здесь равна \vec{r}_d), возвращается к левому концу (опять набегает фазовый множитель $e^{ik'd}$) и возвращается через потенциальный скачок в вакуум.

Третье слагаемое представляет собой сумму, n -й член которой соответствует волне, совершающей n дополнительных пробегов между левым и правым краями потенциала перед тем как вернуться через левый потенциальный скачок в вакуум. Объединив второе и третье слагаемые, можно записать (1.36) в виде

$$r = \vec{r}_0 + \overleftarrow{t}_0 \left[\sum_{n=0}^{\infty} q^n \right] e^{ik'd} \vec{r}_d e^{ik'd} \vec{t}_0, \quad (1.37)$$

где $q = \vec{r}_0 e^{ik'd} \vec{r}_d e^{ik'd} = \vec{r}_0^2 e^{2ik'd}$. Сумма, выделенная квадратными скобками, — это сумма членов геометрической прогрессии. Она равна $1/(1 - q)$. Таким образом,

$$r = \vec{r}_0 - \overleftarrow{t}_0 \vec{t}_0 \frac{\exp(2ik'd) \vec{r}_0}{1 - \exp(2ik'd) \vec{r}_0 \vec{r}_d} = r_0 \frac{1 - \exp(2ik'd)}{1 - \exp(2ik'd) r_0^2}, \quad (1.38)$$

где в последнем равенстве

$$r_0 \equiv \vec{r}_0 = -\overleftarrow{t}_0 = -\vec{r}_d = \frac{k - k'}{k + k'} \quad (1.39)$$

и использовано легко проверяемое соотношение $\overleftarrow{t}_0 \vec{t}_0 = 1 - r_0^2$.

1.3.2 Другой способ

Метод геометрической прогрессии достаточно нагляден, но несколько громоздок. Его можно упростить. Покажем другой, менее громоздкий способ, который приводит к тому же результату и будет применяться на протяжении всей книги.

Обозначим через X амплитуду волны $X \exp(ik'(x - d))$, падающей на правый скачок потенциала. Для этой амплитуды можно записать самосогласованное уравнение

$$X = \exp(ik'd) \vec{t}_0 + \exp(ik'd) \vec{r}_0 \exp(ik'd) \vec{r}_d X. \quad (1.40)$$

Здесь первое слагаемое справа соответствует первичной падающей волне, которая вошла внутрь барьера и добежала до правого его края. Второе слагаемое соответствует волне X , которая, отразившись от правого края, добежала до левого, отразилась и вернулась к правому краю. Две волны, представленные в правой части (1.40), складываются и дают результирующую амплитуду у правого края. Но мы обозначили амплитуду волны, падающей на правый край, через X , поэтому сумму в правой части (1.40) мы должны приравнять к X . В результате получилось уравнение (1.40), для которого легко находится решение

$$X = \frac{\vec{t}_0 \exp(ik'd)}{1 - r_0^2 \exp(2ik'd)}. \quad (1.41)$$

При помощи решения X можно сразу вычислить амплитуды r и t :

$$r = r_0 + \vec{t}_0 \exp(ik'd) \vec{r}_d X, \quad t = \vec{t}_d X, \quad (1.42)$$

где $\vec{t}_d = \vec{t}_0$.

Подстановка (1.41) в (1.42) дает

$$r = r_0 \frac{1 - \exp(2ik'd)}{1 - r_0^2 \exp(2ik'd)}, \quad t = e^{ik'd} \frac{1 - r_0^2}{1 - r_0^2 \exp(2ik'd)}. \quad (1.43)$$

Выражения (1.43) обнаруживают интересную симметрию: амплитуда r переходит в t и наоборот при взаимной перестановке r_0 и $\exp(ik'd)$.

Отметим, что когда $u_0 = 0$, т. е. барьер отсутствует, амплитуда пропускания оказывается равной $\exp(ikd)$. Интересное соотношение для амплитуды отражения от прямоугольного барьера нашел в 2003 г. А. Осипов, студент кафедры нейтронографии МГУ. Если представить r в виде $r = |r|e^{i\phi}$, то

$$|r| = \frac{2r_0}{1 + r_0^2} \cos \phi. \quad (1.44)$$

Эту формулу нетрудно проверить, и к тому же она изящно выводится. Вывод мы приведем ниже, после рассмотрения периодических потенциалов.

1.3.3 Волновая функция внутри барьера

С учетом выражения для амплитуды X волны, падающей на правый край барьера, можно сразу записать волновую функцию внутри барьера:

$$\psi(0 < x < d) = [\exp(ik'(x - d)) + \exp(-ik'(x - d)) \vec{r}_d] X. \quad (1.45)$$

Действительно, волна, бегущая вправо, $X \exp(ik'(x - d))$, должна у края барьера совпадать с X . Волна же, бегущая влево, $\vec{r}_d X \exp(-ik'(x - d))$, получается в результате отражения волны X от края барьера изнутри. Подстановка (1.41) в (1.45) дает

$$\psi(0 < x < d) = \frac{\vec{t}_0}{1 - r_0^2 \exp(2ikd)} \left[\exp(ik'x) - r_0 e^{2ik'd} \exp(-ik'x) \right]. \quad (1.46)$$

1.3.4 Простейший рефлектометрический эксперимент

Формулы (1.43) для прямоугольного барьера можно проверить экспериментально на рефлектометрах. Схема эксперимента показана на рис. 1.5. Зеркало представляется прямоугольным потенциалом $u_0\Theta(0 < x < d)$. Поскольку потенциал зависит только от x , решение уравнения Шредингера

$$[\Delta - u_0\Theta(0 < x < d) + k^2] \Psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.47)$$

записывается в виде произведения $\Psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel})\psi(x)$, где \mathbf{k}_{\parallel} — компоненты волнового вектора нейтрона, параллельные зеркалу. Подставив эту функцию в (1.47), получим одномерное уравнение

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - u_0\Theta(0 < x < d) + k_{\perp}^2 \right] \psi(x) = 0, \quad (1.48)$$

где $k_{\perp}^2 = k^2 - k_{\parallel}^2 = k^2 \cos^2 \theta$. Решение этого уравнения приводит к результатам, указанным выше, в которых k следует заменить на k_{\perp} .

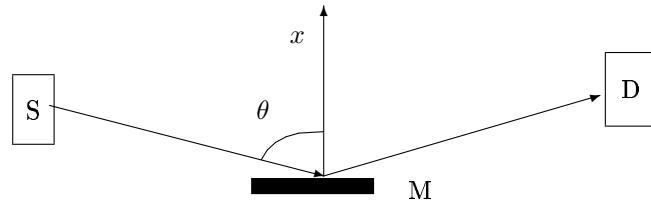


Рис. 1.5: Схема рефлектометрического эксперимента. Нейтроны от источника S зеркально отражаются под углом θ от зеркала M и регистрируются детектором D

В эксперименте измеряется коэффициент отражения $|r(k_{\perp})|^2$ в зависимости от k_{\perp} или, при фиксированном угле θ , от k . Пример такой кривой, рассчитанной с амплитудой отражения r из (1.43), показан на рис. 1.6. Значения функции представлены в логарифмическом масштабе, а значение аргумента — в линейном. При малых $k_{\perp}^2 < u_0$ наблюдается полное отражение. Затем кривая отражения, периодически осциллируя, убывает. Минимумы соответствуют $\sqrt{k_{\perp}^2 - u_0}d = \pi n$ с целым n . В этих точках $r = 0$. Огибающая максимумов с ростом k_{\perp} убывает $\sim 4|r_0|^2 \approx u_0^2/4k_{\perp}^4$, когда $k_{\perp}^2 \gg u_0$. Из измеренной кривой отражения можно определить толщину зеркала и высоту оптического потенциала u_0 .

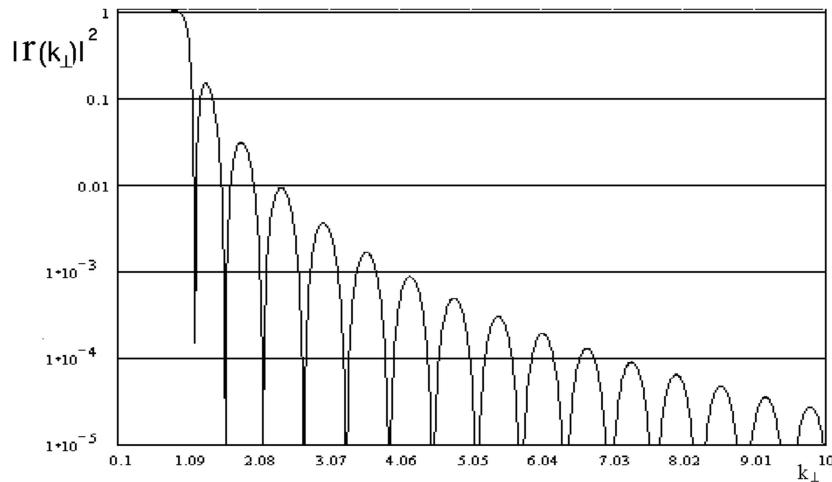


Рис. 1.6: Коэффициент отражения от пленки в зависимости от k_{\perp}

Однако ход экспериментальной кривой обычно отличается от показанного на рис. 1.6. Примером может служить кривая отражения, измеренная для медной пленки, напыленной на стекло [14] (рис. 1.7).

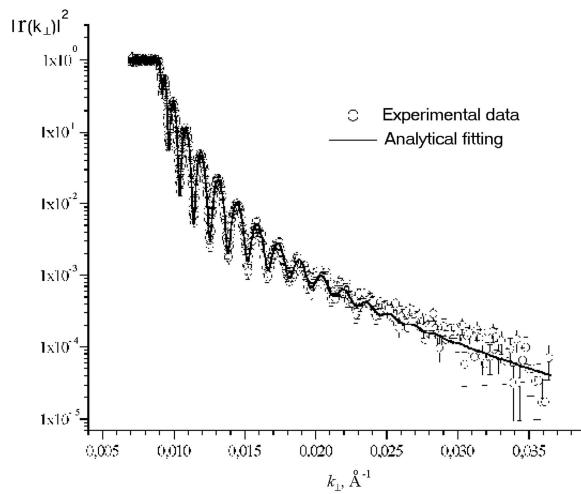


Рис. 1.7: Экспериментально измеренная кривая отражения пленки и ее теоретическая подгонка [14]

Различие кривых на рис. 1.7 и 1.6 означает, что форма потенциала отличается от прямоугольного барьера (рис. 1.4), и необходимо выяснить, каким потенциалом описывается пленка в действительности. Впрочем, может оказаться, что дело вовсе не в пленке, и разобраться в этом — задача науки.

1.4 Алгебра рассеяния на полуупрозрачных зеркалах

Для того чтобы иметь возможность исследовать отражение и пропускание более сложными потенциалами, чем прямоугольный барьер, рассмотрим два произвольных полупрозрачных зеркала 1 и 2 (рис. 1.8), разнесенных на расстояние l [15]. Каждое из зеркал описывается некоторым потенциалом u_i ($i = 1, 2$). Рассеяние на каждом потенциале по отдельности характеризуется амплитудой отражения r_i и пропускания t_i ($i = 1, 2$). Требуется найти амплитуды совместного отражения R_{12} и пропускания T_{12} обоими зеркалами.

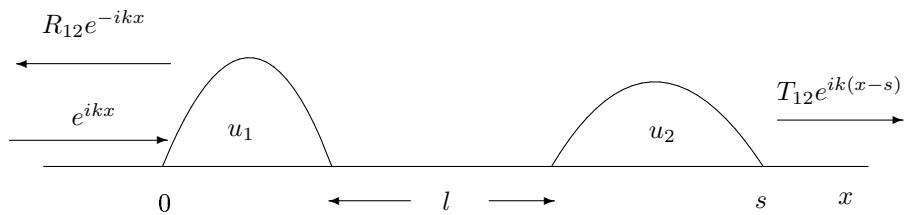


Рис. 1.8: Два полуупрозрачных зеркала представлены двумя одномерными потенциалами, разделенными промежутком длины l

Мы будем решать эту задачу так же, как в случае прямоугольного барьера. Слева на первое зеркало падает плоская волна $\exp(ikx)$. На поверхности первого зеркала она равна единице. Обозначим через X амплитуду волны, падающей на второе зеркало, как показано на рис. 1.9. Для X можно составить уравнение, аналогичное (1.40),

$$X = \exp(ikl)t_1 + \exp(ikl)r_1 \exp(ikl)r_2 X, \quad (1.49)$$

которое означает самосогласованное определение X как суммы волны, прошедшей сквозь первый потенциал до второго, и волны, созданной самим X . Вторая волна с амплитудой X отражается от второго зеркала, доходит до первого, отражается от него и возвращается ко второму. Сумма амплитуд двух волн равна X по определению.

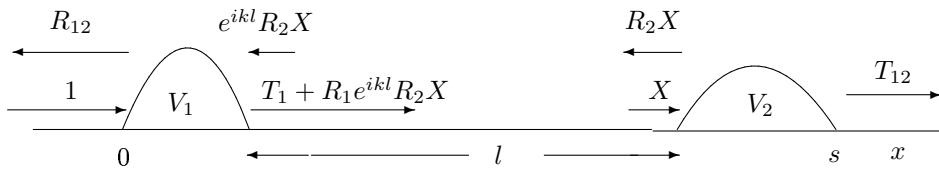


Рис. 1.9: Два полупрозрачных зеркала представлены двумя одномерными потенциалами, разделенными промежутком длины l

Из уравнения (1.49) следует, что

$$X = \frac{t_1 \exp(ikl)}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}. \quad (1.50)$$

Амплитуды отражения и пропускания всей системой теперь легко выражаются через X :

$$R_{12} = r_1 + t_1 \exp(ikl) r_2 X, \quad T_{12} = t_2 X. \quad (1.51)$$

Подстановка сюда вместо X выражения (1.50) приводит к формулам

$$R_{12} = r_1 + t_1^2 \frac{\exp(2ikl)r_2}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}, \quad T_{12} = \frac{t_2 \exp(ikl)t_1}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}. \quad (1.52)$$

1.4.1 Сближение зеркал

Мы рассмотрели случай, когда зеркала разделены промежутком l . Очевидно, что l может быть произвольным. В частности, его длина может быть нулевой. Тогда уравнения (1.49), (1.51) приводятся к виду

$$X = t_1 + r_1 r_2 X, \quad R_{12} = r_1 + t_1 r_2 X, \quad T_{12} = t_2 X, \quad (1.53)$$

и амплитуды отражения и пропускания суммарным потенциалом выражаются через амплитуды отражения и пропускания каждой его частью при помощи простых формул

$$R_{12} = r_1 + t_1^2 \frac{r_2}{1 - r_1 r_2}, \quad T_{12} = \frac{t_2 t_1}{1 - r_1 r_2}, \quad (1.54)$$

которые получаются из (1.52) подстановкой $l = 0$.

Мы сделали простейший шаг, но он привел нас к открытию. Мы обнаружили, что любой потенциал можно мысленно разделить в любом месте на две части и выразить амплитуды отражения и пропускания всем потенциалом через амплитуды, вычисленные для его частей. Правда, выше мы молчаливо предполагали зеркала (и соответственно их потенциалы) симметричными. В общем же случае и сам потенциал, и его части могут быть несимметричными, как показано на рис. 1.10. Для несимметричных потенциалов амплитуды отражения r_i и t_i слева и справа различны, и формулы (1.54) должны быть переписаны следующим образом:

$$\overrightarrow{R}_{12} = \overrightarrow{r}_1 + \overleftarrow{t}_1 \frac{\overrightarrow{r}_2}{1 - \overleftarrow{r}_1 \overrightarrow{r}_2} \overrightarrow{t}_1, \quad \overleftarrow{R}_{21} = \overleftarrow{r}_2 + \overrightarrow{t}_2 \frac{\overleftarrow{r}_1}{1 - \overleftarrow{r}_1 \overrightarrow{r}_2} \overleftarrow{t}_2, \quad (1.55)$$

и

$$\overrightarrow{T}_{12} = \frac{\overrightarrow{t}_2 \overrightarrow{t}_1}{1 - \overleftarrow{r}_1 \overrightarrow{r}_2}, \quad \overleftarrow{T}_{21} = \frac{\overleftarrow{t}_1 \overleftarrow{t}_2}{1 - \overleftarrow{r}_1 \overrightarrow{r}_2}, \quad (1.56)$$

где стрелка указывает направление волны, падающей на соответствующий потенциал.

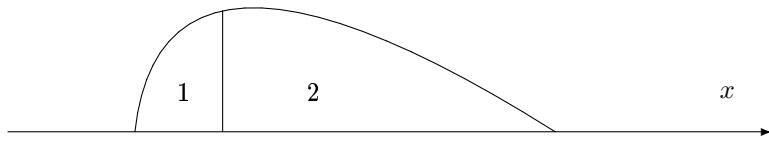


Рис. 1.10: Любой потенциал может быть разделен на две произвольные части. Амплитуды отражения и пропускания всем потенциалом выражаются через соответствующие амплитуды его частей формулами (1.55), (1.56)

1.4.2 Расщепление прямоугольных барьера

То, что потенциал можно в любом месте расщепить на две части и выразить амплитуды отражения и пропускания через соответствующие амплитуды для его частей, можно проверить на прямоугольном барьеере. Если разбить барьер ширины d на два барьера с ширинами d_1 и $d_2 = d - d_1$ (рис. 1.11), то

$$r(d_1 + d_2) = \frac{r(d_1) - [r^2(d_1) - t^2(d_1)]r(d_2)}{1 - r(d_1)r(d_2)}, \quad t(d_1 + d_2) = \frac{t(d_1)t(d_2)}{1 - r(d_1)r(d_2)}. \quad (1.57)$$

Подстановка сюда формул (1.43) показывает, что левая и правая части формул (1.57) тождественны.

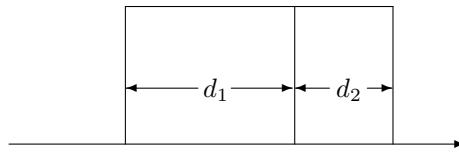


Рис. 1.11: Потенциальный барьер ширины $d = d_1 + d_2$ можно расщепить на два

1.5 Свойства амплитуд отражения и пропускания одномерными потенциалами

1.5.1 Несимметричные потенциалы

Посмотрим, чем отличаются амплитуды справа и слева для произвольного несимметричного потенциала. Для этого достаточно рассмотреть какой-нибудь один несимметричный потенциал. Самым простым является потенциал, состоящий из двух симметричных частей, как показано на рис. 1.12.

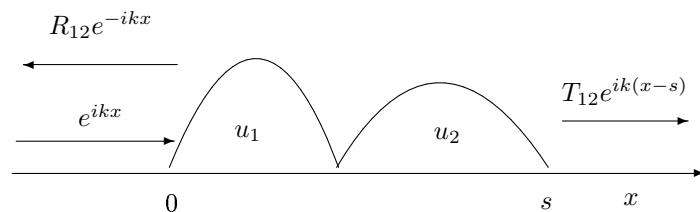


Рис. 1.12: Несимметричный потенциал, образованный двумя симметричными

Рассмотрим отражение и пропускание двумя потенциалами (рис. 1.12). Пропускание и отражение совместным потенциалом даются формулами (1.54). Из них сразу видно, что $T_{12} = T_{21}$, а значит, и вообще

$$\overleftarrow{t} = \overrightarrow{t} \quad (1.58)$$

для любого потенциала. Что же касается отражения, то $R_{12} \neq R_{21}$, а значит, и вообще $\overleftarrow{r} \neq \overrightarrow{r}$. Таким образом, формулы (1.55), (1.56) представимы в виде

$$\overrightarrow{R_{12}} = \overrightarrow{r_1} + \frac{t_1^2 \overrightarrow{r_2}}{1 - \overleftarrow{r_1} \overrightarrow{r_2}}, \quad \overleftarrow{R_{21}} = \overleftarrow{r_2} + \frac{t_2^2 \overleftarrow{r_1}}{1 - \overleftarrow{r_1} \overrightarrow{r_2}}, \quad T_{12} = \frac{t_2 t_1}{1 - \overleftarrow{r_1} \overrightarrow{r_2}} = T_{21}. \quad (1.59)$$

Очевидно, что амплитуды \overleftarrow{r} и \overrightarrow{r} могут различаться только фазовым множителем, т. е.

$$\overleftarrow{r} = \exp(i\chi) \overrightarrow{r}, \quad (1.60)$$

где χ — вещественное число.

Действительно, исходя из соображений унитарности (число отраженных и прошедших частиц должно быть равно числу падающих), имеем

$$|\overleftarrow{r}|^2 + |\overleftarrow{t}|^2 = |\overrightarrow{r}|^2 + |\overrightarrow{t}|^2 = 1. \quad (1.61)$$

Но отсюда в силу (1.58) немедленно вытекает, что $|\overleftarrow{r}| = |\overrightarrow{r}|$, следовательно, различаться эти амплитуды могут только фазовым множителем, что и приводит к (1.60). Естественно, симметричный потенциал есть частный случай несимметричного, для которого $\chi = 0$.

Заметим, однако, что соотношение (1.61) справедливо только при отсутствии потерь в потенциалах, т. е. когда потенциалы *и* вещественны. Если мнимая часть потенциала отлична от нуля, то отлична от нуля и мнимая часть фазы. При этом становятся различными друг от друга абсолютные значения амплитуд отражения слева и справа, а значит и коэффициенты отражения слева и справа. Коэффициенты же пропускания остаются одинаковыми и при наличии потерь.

1.5.2 Соотношение между фазами r и t

Покажем, что в случае действительных симметричных потенциалов фазы амплитуд отражения и пропускания различаются на $\pi/2$. Чтобы доказать это, поставим мысленный эксперимент, схема которого изображена на рис. 1.13.

Используем произвольный симметричный потенциал в качестве полупрозрачного зеркала M1. Падающий пучок на нем расщепляется, и обе компоненты расщепленного пучка после полного отражения от двух других, вообще говоря, необязательно тождественных, зеркал M2 и M3 сводятся вместе на полупрозрачном зеркале M4, тождественном M1. Общее число частиц должно сохраняться, поэтому счетчики двух детекторов после зеркала M4 должны в сумме давать количество падающих нейтронов. Это значит, что

$$|rt|^2 |e^{i\phi} + e^{i\psi}|^2 + |r^2 e^{i\phi} + t^2 e^{i\psi}|^2 = 1. \quad (1.62)$$

Если ввести представления $r = |r| \exp(i\chi_r)$ и $t = |t| \exp(i\chi_t)$ и для простоты принять, что $\phi = \psi = 0$, то это соотношение преобразуется к виду

$$(|r|^2 + |t|^2)^2 + 2|rt|^2 [1 + \cos(2\chi_r - 2\chi_t)] = 1. \quad (1.63)$$

Поскольку при отсутствии потерь первое слагаемое равно единице, то второе должно равняться нулю. Отсюда следует, что

$$2\chi_r - 2\chi_t = \pm\pi, \quad (1.64)$$

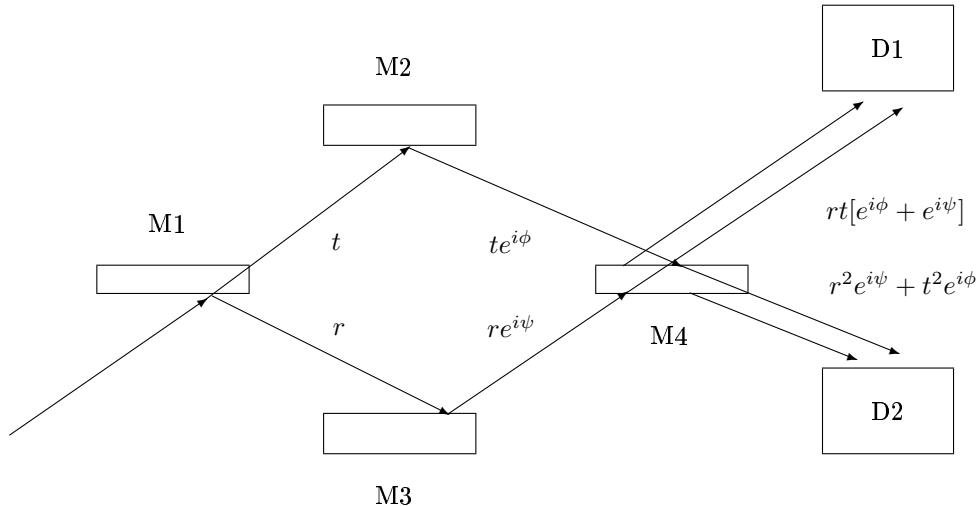


Рис. 1.13: Схема мысленного эксперимента для определения соотношения между фазами r и t . Полупрозрачные зеркала M_1 и M_4 тождественны. Зеркала M_2 и M_3 отражают полностью, но в общем случае с различными фазами. Фазы, набегающие при распространении частиц по двум различным путям от зеркала M_1 к зеркалу M_4 , обозначены как ϕ и ψ . Сумма показаний счетчиков двух детекторов D_1 и D_2 на выходе должна быть равна количеству нейтронов, падающих на M_1

и $\chi_r = \chi_t \pm \pi/2$, что и требовалось доказать. Читатель может легко проверить, что результат будет тем же и при произвольных фазах ϕ и ψ .

Теперь ясно, что если представить t в виде $t = |t|e^{i\phi_t}$, то мы автоматически получим $r = \pm i|r|e^{i\phi_t}$, и потому комбинации $t \pm r$ представляют собой единичные комплексные числа $\exp(i\xi_{\pm})$, где $\xi_{\pm} = \phi_t \pm \arcsin(|r|)$, $t^2 - r^2 = \exp(2i\phi_t)$. Следовательно, выражение (1.54) для амплитуды отражения от двух симметричных потенциалов можно переписать в виде

$$R_{12} = \frac{r_1 + (t_1^2 - r_1^2)r_2}{1 - r_1 r_2} = \frac{r_1 + \exp(2i\phi_{t1})r_2}{1 - r_1 r_2} = \frac{r_1 - \exp(2i\phi_{r1})r_2}{1 - r_1 r_2}, \quad (1.65)$$

где $\phi_{r,t1}$ — фазы амплитуд отражения r_1 и пропускания t_1 соответственно.

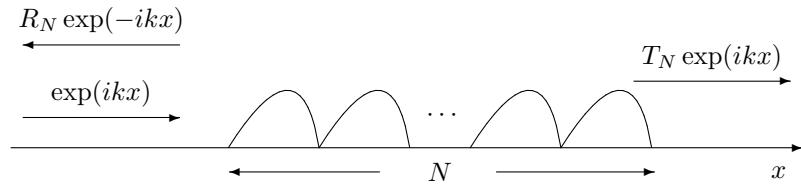
Отсюда сразу видно, что если один из потенциалов отражает полностью, т. е. $r_j = \exp(i\chi_j)$, где $j = 1$ или 2 , то и составной потенциал будет отражать полностью.

Приведенное соотношение (1.64) для фаз легко обобщается на случай несимметричного потенциала. Если представить \vec{r} и \vec{r}' как $\vec{r} = |\vec{r}| \exp(i\vec{\chi}_r)$ и $\vec{r}' = |\vec{r}'| \exp(i\vec{\chi}_{r'})$, то вместо (1.64) получим

$$\frac{1}{2}(\vec{\chi}_r + \vec{\chi}_{r'}) = \chi_t \pm \frac{\pi}{2}. \quad (1.66)$$

1.6 Периодические системы

Метод расщепления наиболее эффективен применительно к периодическим системам. Можно представить себе периодический потенциал с N произвольными периодами, как показано на рис. 1.14, и поставить задачу нахождения амплитуд отражения R_N и пропускания T_N этой системой. Оказывается, эту задачу проще всего решить, если сначала рассмотреть полубесконечный потенциал с $N \rightarrow \infty$ и найти для него амплитуду отражения R_∞ . Для того чтобы читатель мог оценить изящество такого подхода, напомним стандартные методы решения задач с периодическими потенциалами.

Рис. 1.14: Периодический потенциал, содержащий N периодов.

1.6.1 Стандартный подход к периодическим средам

Для исследования взаимодействия нейтронов с периодической средой последнюю представляют в виде потенциала

$$u(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_F(n) \exp(i2\pi nx/a), \quad (1.67)$$

где a — период системы. Решение уравнения Шредингера с этим потенциалом

$$[d^2/dx^2 - u(x) + k^2] \psi(x) = 0 \quad (1.68)$$

внутри среды представляется в виде

$$\psi(x) = \exp(iqx) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi_F(n) \exp(i2\pi nx/a), \quad (1.69)$$

и спивается с волновой функцией вне среды

$$\psi(x) = \Theta(x < 0)[\exp(ikx) + R_N \exp(-ikx)] + \Theta(x > Na)T_N \exp(ik(x - Na)) \quad (1.70)$$

на границах $x = 0$ и $x = Na$.

Обратим внимание, что, хотя потенциал (1.67) периодичен, функция (1.69) не совсем периодична. При сдвиге на период a она умножается на фазовый множитель $\exp(iqa)$, в который входит величина q , называемая волновым вектором Блоха.

Подставим (1.67) и (1.69) в (1.68). Уравнение (1.68) преобразуется в систему уравнений бесконечного порядка для коэффициентов $\psi_F(n)$:

$$[(q + k_n)^2 - k^2]\psi_F(n) + \sum_m u_F(n - m)\psi_F(m) = 0. \quad (1.71)$$

Система уравнений однородна, и она разрешима, если детерминант матрицы ее коэффициентов равен нулю. Это условие представляет собой алгебраическое уравнение бесконечной степени, определяющее блоховский волновой вектор q , и имеющее бесконечное множество решений. Подставив каждое из решений q_j в систему (1.71) и положив один из коэффициентов (например $\psi_F(0)$) равным произвольной постоянной C_j , решим новую, уже неоднородную, систему по обычным правилам. В результате получим набор коэффициентов $\psi_F^j(n) = \alpha(n, q_j)C_j$. Сшивая сумму функций

$$\sum_{j=0}^{\infty} \exp(iq_j x)C_j \sum_{n=-\infty}^{\infty} \alpha(n, q_j) \exp(2\pi i n x/a)$$

с волновой функцией (1.70) вне среды, придем, вообще говоря, к бесконечной системе неоднородных уравнений для C_j , R_N и T_N .

На практике бесконечные системы уравнений аппроксимируют с некоторой не совсем ясной погрешностью конечными системами. Простейшим является одноволновое приближение, когда вся сумма заменяется единственной экспонентой $C \exp(iqx)$. Это приближение достаточно хорошо при k , далеких от брэгговских значений.

Следующее приближение — двухволновое, когда в Фурье-разложении (1.70) ограничиваются двумя наиболее существенными членами. Это приближение достаточно хорошо при k , близких к брэгговским.

Вернемся к стандартному описанию позже, а сейчас продемонстрируем другой подход к периодическим системам.

1.6.2 Алгебраический подход

Для того чтобы найти R_N и T_N , изучим сначала полубесконечный периодический потенциал, показанный на рис. 1.15 [16–20]. Здесь стрелками слева изображены падающая и отраженная волны, причем амплитуда отражения обозначена через R , и волна, падающая на второй период, обозначенная X . По аналогии с (1.53) можно сразу написать систему уравнений для X и R :

$$X = t + rRX, \quad R = r + tRX, \quad (1.72)$$

где r и t — амплитуды отражения и пропускания одного отдельно взятого периода (для простоты считаем его симметричным) и учтено, что полубесконечный потенциал не меняется при удалении из него одного периода. Получилась простая и симметричная система уравнений. Второе уравнение переходит в первое при перестановке r и t .

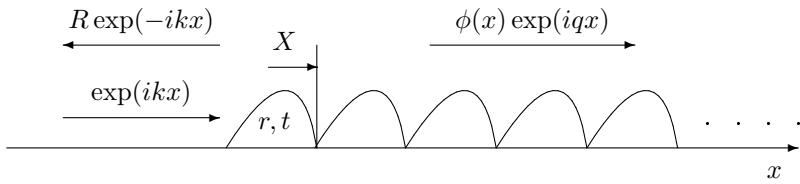


Рис. 1.15: Полубесконечная периодическая система

Решим эту систему. Для этого выразим X из первого уравнения и подставим во второе. В результате получим

$$R = r + \frac{t^2 R}{1 - rR}. \quad (1.73)$$

Это квадратное уравнение, которое приводится к виду $y^2 - 2py + 1 = 0$, где $y = R$ и $p = (r^2 + 1 - t^2)/2r$. Решение уравнения тривиально: $y = p - \sqrt{p^2 - 1}$, но его также можно представить в виде

$$y = \frac{\sqrt{p+1} - \sqrt{p-1}}{\sqrt{p+1} + \sqrt{p-1}}, \quad (1.74)$$

из которого тотчас же следует формула [17–20]

$$R = \frac{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} - \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} + \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}. \quad (1.75)$$

Ее нетрудно запомнить и проверить. Вот два способа проверки.

1. Допустим, никакого потенциала нет. Однако пустое пространство всегда можно представить себе периодическим. В этом случае период ничего не отражает, но, значит, и вся полубесконечная система не должна ничего отражать, т. е. при $r = 0$ мы должны получить $R = 0$. Легко видеть, что это равенство будет выполнено³.

2. С другой стороны, если допустить, что потенциал одного периода очень велик, а пропускание t равно нулю, то отражение R от всего потенциала должно быть равно r , поскольку остальные периоды фактически в отражении не участвуют. Легко убедиться, что справедлив и этот вывод.

³Заметим, что приведенные соображения неверны при $t^2 = 1$, поскольку в этом случае при $r = 0$ возникает неопределенность вида $0/0$.

Вспомним, что волновая функция внутри периодического потенциала (см. (1.69) и рис. 1.15) представляется в виде произведения периодической функции $\phi(x)$ на фазовый множитель с вектором Блоха q . Поэтому, если амплитуда волны, падающей на первый период, равна единице, то у волны, падающей на второй период, она будет равна $\exp(iqa)$, где a — период. Мы обозначили ее X . Следовательно, $X = \exp(iqa)$!

Найдем X из системы уравнений (1.72). Для этого можно выразить R из второго уравнения и подставить в первое. В результате мы снова получим квадратное уравнение, но теперь для X . Однако можно сразу написать решение, если учесть симметрию уравнений: они переходят друг в друга при взаимной перестановке $r \leftrightarrow t$. Соответственно должны переходить друг в друга и их решения. Поэтому

$$X \equiv e^{iqa} = \frac{\sqrt{(1+t)^2 - r^2} - \sqrt{(1-t)^2 - r^2}}{\sqrt{(1+t)^2 - r^2} + \sqrt{(1-t)^2 - r^2}}. \quad (1.76)$$

Эту формулу, как и (1.75), легко проверить.

1. Допустим, что никакого потенциала нет. Считаем пустое пространство периодическим. Тогда $r = 0$, и $t = \exp(ika)$. Подставим эти значения в (1.76). Получим $\exp(iqa) = \exp(ika)$, т. е. $q = k$, как и следовало ожидать.

2. С другой стороны, если положить потенциал одного периода столь большим, что пропускание t равно нулю, то подстановка $t = 0$ в (1.76) дает $\exp(iqa) = 0$, т. е. $\text{Im } q = i\infty$, и, действительно, ко второму периоду волна не проходит.

Полученные формулы можно преобразовать несколькими способами.

1. Положим, $r = |r| \exp(i\phi_r)$, и учтем, что $t = \pm i|t| \exp(i\phi_r)$. Тогда $t^2 - r^2 = -\exp(2i\phi_r)$. Соответственно $(1 \pm r)^2 - t^2 = 1 \pm 2r + \exp(2i\phi_r)$, а $(1 \pm t)^2 - r^2 = 1 \pm 2t - \exp(2i\phi_r)$. Подстановка этих выражений в формулы (1.75), (1.76) приводит их к виду

$$R = \frac{\sqrt{\cos \phi_r + |r|} - \sqrt{\cos \phi_r - |r|}}{\sqrt{\cos \phi_r + |r|} + \sqrt{\cos \phi_r - |r|}}, \quad e^{iqa} = \mp \frac{\sqrt{\sin \phi_r + |t|} - \sqrt{\sin \phi_r - |t|}}{\sqrt{\sin \phi_r + |t|} + \sqrt{\sin \phi_r - |t|}} \quad (1.77)$$

или, если учесть, что $|r| \cos \phi_r = \text{Re } r$, а $\mp |t| \sin \phi_r = \text{Re } t$, где $\text{Re } x$ — вещественная часть x ,

$$R = \frac{\sqrt{\text{Re } r + |r|^2} - \sqrt{\text{Re } r - |r|^2}}{\sqrt{\text{Re } r + |r|^2} + \sqrt{\text{Re } r - |r|^2}}, \quad e^{iqa} = \frac{\sqrt{\text{Re } t + |t|^2} - \sqrt{\text{Re } t - |t|^2}}{\sqrt{\text{Re } t + |t|^2} + \sqrt{\text{Re } t - |t|^2}}. \quad (1.78)$$

Амплитуды r и t зависят от энергии, и, согласно (1.77), при тех ее значениях, когда $\cos^2 \phi_r - |r|^2 < 0$, амплитуда R представляет собой единичное комплексное число, т. е. $|R| = 1$. При этих значениях энергии происходит полное отражение от полубесконечного потенциала; такое полное отражение называется дифракцией Брэгга.

2. Учтем, что $(1 \pm r)^2 - t^2 = (1 \pm r - t)(1 \pm r + t)$. Разделим числитель и знаменатель выражения (1.75) на $(1 - r - t)(1 + r - t)$, а числитель и знаменатель (1.76) — на $(1 - r - t)(1 - r + t)$. В результате получим

$$R = \frac{\sqrt{\frac{1+r+t}{1-r-t}} - \sqrt{\frac{1-r+t}{1+r-t}}}{\sqrt{\frac{1+r+t}{1-r-t}} + \sqrt{\frac{1-r+t}{1+r-t}}}, \quad e^{iqa} = \frac{\sqrt{\frac{1+r+t}{1-r-t}} - \sqrt{\frac{1-t+r}{1+t-r}}}{\sqrt{\frac{1+r+t}{1-r-t}} + \sqrt{\frac{1-t+r}{1+t-r}}}, \quad (1.79)$$

где вторая формула получается из первой простой перестановкой r и t . Интересно, что эта перестановка эквивалентна опрокидыванию дроби второго радикала первой формулы. Полезно иметь в виду эту симметрию для проверки правильности формул, получаемых в результате различных преобразований.

3. Учтем, что

$$t = |t|e^{i\phi}, \quad r = \pm i|r|e^{i\phi}, \quad t \pm r = \exp(i\xi_{\pm}), \quad \xi_{\pm} = \phi \pm \chi, \quad \chi = \pm \arcsin(|r|), \quad (1.80)$$

и подставим эти выражения в (1.79). Получим

$$R = \frac{\sqrt{\operatorname{ctg}(\xi_+/2)} - \sqrt{\operatorname{ctg}(\xi_-/2)}}{\sqrt{\operatorname{ctg}(\xi_+/2)} + \sqrt{\operatorname{ctg}(\xi_-/2)}}, \quad e^{iqa} = \frac{\sqrt{\operatorname{ctg}(\xi_+/2)} + i\sqrt{\operatorname{tg}(\xi_-/2)}}{\sqrt{\operatorname{ctg}(\xi_+/2)} - i\sqrt{\operatorname{tg}(\xi_-/2)}}. \quad (1.81)$$

Для действительных потенциалов фазы ξ_{\pm} действительны. Отсюда сразу вытекает, что если оба значения $\operatorname{ctg}(\xi_{\pm})$ имеют одинаковый знак, то амплитуда R и волновое число q действительны. При этом $|R| < 1$, $|\exp(iqa)| = 1$. Если же $\operatorname{ctg}(\xi_{\pm})$ имеют разные знаки, то R оказывается единичным комплексным числом ($|R| = 1$), т. е. имеет место полное отражение (дифракция Брэгга), и q может быть только комплексным числом вида $q = \pi n + iq''$, где n — целое, а q'' — вещественное положительное число, т. е. $|\exp(iqa)| < 1$.

4. Воспользуемся известным соотношением для пропорций

$$\frac{A}{B} = \frac{C}{D} \Rightarrow \frac{\alpha A + \beta B}{\gamma A + \delta B} = \frac{\alpha C + \beta D}{\gamma C + \delta D}$$

и преобразуем формулы (1.76), (1.75) следующим образом:

$$\frac{1 - \exp(iqa)}{1 + \exp(iqa)} = \frac{\sqrt{(1-t)^2 - r^2}}{\sqrt{(1+t)^2 - r^2}} = \left(\frac{1-t+r}{1-r+t} \right) \frac{\sqrt{(1-r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2}} = \left(\frac{1-t+r}{1-r+t} \right) \frac{1-R}{1+R}. \quad (1.82)$$

Учитывая, что $t - r = \exp(i\xi_-)$, получим

$$\frac{1-R}{1+R} = \frac{\sin(qa/2) \cos(\xi_-/2)}{\cos(qa/2) \sin(\xi_-/2)}, \quad (1.83)$$

откуда следует, что

$$R = \frac{\cos(qa/2) \sin(\xi_-/2) - \sin(qa/2) \cos(\xi_-/2)}{\cos(qa/2) \sin(\xi_-/2) + \sin(qa/2) \cos(\xi_-/2)} = \frac{\sin((\xi_- - qa)/2)}{\cos((\xi_- + qa)/2)}. \quad (1.84)$$

1.6.3 Конечное число периодов

Для нахождения амплитуд R_N и T_N отражения и пропускания потенциалами с конечным числом периодов N достаточно учесть, что полубесконечный периодический потенциал с периодом a периодичен также и с периодом Na . При этом волновой вектор Блоха остается тем же, но фазовый множитель $X^N = \exp(iqNa)$. Перепишем соотношения (1.72) в виде

$$X^N = T_N + R_N RX^N, \quad R = R_N + T_N RX^N, \quad (1.85)$$

где мы заменили амплитуды для одного периода на амплитуды для N периодов. Систему (1.85) можно разрешить относительно R_N и T_N . Получим

$$R_N = R \frac{1 - \exp(2iqNa)}{1 - R^2 \exp(2iqNa)}, \quad T_N = \exp(iqNa) \frac{1 - R^2}{1 - R^2 \exp(2iqNa)}. \quad (1.86)$$

Видно, что полученные формулы имеют ту же структуру, что амплитуды отражения и пропускания прямоугольным потенциалом (1.43). Для R_N , например, также справедлива формула (1.44), найденная А. Осиповым для прямоугольного потенциала. В данном случае она принимает вид

$$|R_N| = \frac{2R}{1 + R^2} \cos(\phi_{R_N}), \quad (1.87)$$

где ϕ_N — фаза амплитуды $R_N = |R_N| \exp(i\phi_{R_N})$.

Вывод формул (1.87) и (1.44). Рассмотрим уравнение (1.73) и перепишем его в виде

$$r(1 + R^2) = R(1 + r^2 - t^2). \quad (1.88)$$

Обозначим $r = |r|e^{i\phi_r}$ и учтем, что тогда $t = \pm i|t|e^{i\phi_r}$. Подставив r и t в уравнение (1.88), получим равенство

$$|r|e^{i\phi_r}(1 + R^2) = R(1 + e^{2i\phi_r}), \quad (1.89)$$

откуда немедленно следует, что

$$|r| = \frac{2R}{1 + R^2} \cos(\phi_r). \quad (1.90)$$

Учтем теперь, что периодический потенциал с периодом a периодичен также с периодом Na . Для периода Na роль r играет R_N , поэтому (1.90) преобразуется к виду (1.87).

Рассмотрим теперь прямоугольный потенциальный барьер. Из множества таких барьёров, если их сблизить вплотную друг к другу, можно составить полубесконечный периодический потенциал, который есть не что иное, как потенциальная ступенька. Поэтому для такого периодического потенциала $R = r_0$, и формула (1.90) преобразуется в формулу (1.44).

Если обозначить $t = |t|e^{i\phi_t}$ и учесть, что тогда $r = \pm i|r|e^{i\phi_t}$, то уравнение (1.88) приведет к выражению

$$|r| = \pm \frac{2R}{1 + R^2} \sin(\phi_t). \quad (1.91)$$

Обратим внимание на выражение (1.77) для R . Брэгговское отражение имеет место всегда, когда $\sin^2 \phi_t \leq |r|^2$. Подставив сюда (1.91), получаем условие

$$\left| \frac{2R}{1 + R^2} \right|^2 \geq 1.$$

Это неравенство выполняется, когда R — единичное комплексное число $\exp(i\chi)$, поскольку левая часть при этом становится равной $1/\cos^2 \chi$.

1.6.4 Несимметричный период

Если период несимметричен, то нужно различать отражения слева и справа, которые мы будем соответственно обозначать стрелками \rightarrow, \leftarrow над буквами. Уравнения (1.72) для бесконечной периодической цепочки теперь выглядят следующим образом:

$$\vec{X} = t + \leftarrow \vec{R} \vec{X}, \quad \vec{R} = \vec{r} + t \vec{R} \vec{X}. \quad (1.92)$$

Решив первое уравнение относительно \vec{X} и подставив решение во второе, получим уравнение для \vec{R} , которое мы представим в следующем виде:

$$\vec{R}^2 - 2 \frac{\vec{r}}{2r^2} (1 + r^2 - t^2) \vec{R} + \frac{\vec{r}^2}{r^2} = 0,$$

где введено обозначение $r^2 = \vec{r}^\top \vec{r}$ для симметризованной амплитуды отражения. Обозначим $\vec{R} = (\vec{r}/r)R$ и получим для R уравнение

$$R^2 - 2 \frac{1}{2r} (1 + r^2 - t^2) R + 1 = 0,$$

решение которого совпадает с (1.75). Отсюда сразу следует, что несимметрия r наследуются амплитудой R :

$$\overleftarrow{R} = \frac{\overleftarrow{r}}{r} R, \quad \overrightarrow{R} = \frac{\overrightarrow{r}}{r} R, \quad R = \frac{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} - \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} + \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}, \quad (1.93)$$

где R — симметризованная амплитуда $R = \sqrt{\overrightarrow{R} \overleftarrow{R}}$,

$$\overleftarrow{X} = \overrightarrow{X} = X = \frac{t}{1 - \overleftarrow{r} \overrightarrow{R}} = \frac{t}{1 - rR},$$

т. е. блоховская экспонента симметрична.

Аналогичным образом несимметрия \overleftarrow{r} и \overrightarrow{r} наследуется и амплитудами \overleftarrow{R}_N и \overrightarrow{R}_N .

1.6.5 Примеры периодических потенциалов

Покажем на конкретных примерах, как работают полученные формулы для периодических потенциалов.

Потенциал Кроннига–Пенни

Рассмотрим идеальный кристалл, состоящий из периодически расположенных бесконечно тонких атомных плоскостей, показанный на рис. 1.16, *a*.

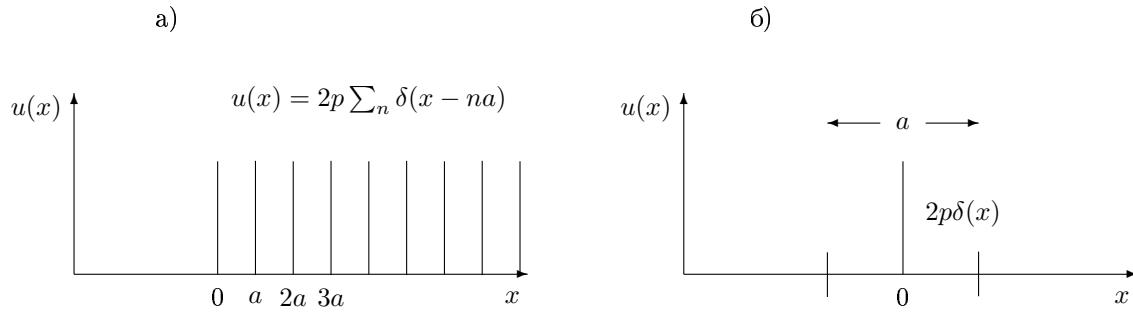


Рис. 1.16: Одномерный периодический потенциал, образованный системой плоскостей, параллельных входной поверхности (*a*), и симметричный потенциал одного периода, состоящий из одной плоскости и двух промежутков по половине периода с обеих сторон (*b*).

Взаимодействие нейтронов с каждой плоскостью представляется δ -образным потенциалом $u(x) = 2p\delta(x)$. Множитель 2 введен здесь для удобства, а параметр p можно связать с реальными параметрами кристалла. Если усреднить потенциал плоскости по всему периоду a кристалла, то получим средний потенциал взаимодействия нейтрона со средой, который должен быть равен $u_0 = 4\pi N_0 b$, где N_0 — число атомов в единице объема, а b — когерентная амплитуда взаимодействия с одним атомом. Действительно, имеем

$$\frac{1}{a} \int_0^a u(x) dx = \frac{1}{a} \int_0^a 2p\delta(x) dx = \frac{2p}{a} = u_0 = 4\pi N_0 b, \quad (1.94)$$

откуда следует, что $p = u_0 a / 2 = 2\pi b N_s$, где $N_s = N_0 a$ — число атомов на единице поверхности одной атомной плоскости.

Оценим параметр p . Величина p , согласно (1.94), равна $u_0 a / 2 = 2\pi b / a^2$. Амплитуда рассеяния b имеет величину порядка 10^{-12} см, а постоянная решетки $a = 3 \cdot 10^{-8}$ см. Поэтому $p \approx 3 \cdot 10^{-5} (2\pi/a)$, что на 5 порядков меньше волнового вектора $k = 2\pi/\lambda$ теплового нейтрона с длиной волны $\lambda = 1.8$ Å.

Полный потенциал равен, как показано на рис. 1.16, *a*,

$$u(x) = 2p \sum_n \delta(x - na), \quad (1.95)$$

а его период может быть выбран симметричным, с потенциалом

$$u_1(x) = 2p\Theta(-a/2 \leq x \leq a/2)\delta(x), \quad (1.96)$$

показанным на рис. 1.16, б.

Для того чтобы найти амплитуды отражения r и пропускания t одним периодом, найдем сначала амплитуды отражения r_1 и пропускания t_1 одной плоскостью. Для этого нужно решить уравнение Шредингера

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2 - 2p\delta(x) \right] \psi(x) = 0 \quad (1.97)$$

при условии, что слева ($x < 0$) имеется падающая плоская волна $\exp(ikx)$. Решение записывается в виде

$$\psi(x) = \Theta(x < 0)[\exp(ikx) + r_1 \exp(-ikx)] + \Theta(x > 0)t_1 \exp(ikx). \quad (1.98)$$

Неизвестные коэффициенты r_1 и t_1 определяются спивкой функции в точке $x = 0$. Волновая функция должна быть непрерывна в ней, а производная меняется скачком, поскольку вторая производная содержит δ -функцию. Величину скачка можно получить, проинтегрировав уравнение (1.97) по бесконечно узкому интервалу $(-0, +0)$. В результате интегрирования получим

$$\left[\frac{d}{dx} \psi(x) \Big|_{+0} - \frac{d}{dx} \psi(x) \Big|_{-0} \right] - 2p\psi(0) = 0. \quad (1.99)$$

Таким образом, для определения r_1 и t_1 имеем систему уравнений

$$1 + r_1 = t_1, \quad ikt_1 - ik(1 - r_1) = 2p(1 + r_1). \quad (1.100)$$

Решение этой системы

$$r_1 = \frac{-ip}{k + ip} = \mp i|r_1|e^{-i\gamma_1}, \quad |r_1| = \frac{|p|}{\sqrt{k^2 + p^2}}, \quad t_1 = \frac{k}{k + ip} = |t_1|e^{-i\gamma_1}, \quad |t_1| = \frac{k}{\sqrt{k^2 + p^2}}, \quad (1.101)$$

$$\gamma_1 = \arcsin \left(p / \sqrt{k^2 + p^2} \right) = \pm \arcsin(|r_1|), \quad (1.102)$$

где знак \pm соответствует положительному и отрицательному p соответственно.

Амплитуды r и t отличаются от r_1 и t_1 только фазовым множителем $\exp(ika)$, который описывает распространение нейтрона по пустым промежуткам ширины $a/2$ до δ -функции и после нее. Таким образом, амплитуды r и t для одного периода равны

$$r = \exp(ika) \frac{-ip}{k + ip} = \mp i|r_1|e^{i\phi}, \quad t = \exp(ika) \frac{k}{k + ip} = |t_1|e^{i\phi}, \quad \phi = ka - \gamma_1. \quad (1.103)$$

Выражения (1.101) и (1.103) в явном виде демонстрируют справедливость всех соотношений между r и t , доказанных выше. В частности, видно, что $t + r = \exp(-2i\gamma_1 + ika)$ и $t - r = \exp(ika)$ представляют собой единичные комплексные числа. Разумеется, это справедливо только в том случае, когда p — чисто вещественное число, т. е. рассеяние на потенциале не сопровождается потерями. Влияние потерь учитывается тривиально.

Если передвинуть δ -функцию, например, к началу периода, то получим несимметричный период. Для такого несимметричного периода амплитуда пропускания остается прежней: $t = \exp(ika)t_1$, амплитуды отражения:

$$\overrightarrow{r} = r_1 = \frac{-ip}{k + ip}, \quad \overleftarrow{r} = e^{2ika}r_1 = e^{2ika}\overrightarrow{r}, \quad (1.104)$$

что хорошо демонстрирует справедливость всех соотношений, полученных ранее для несимметричных потенциалов.

Подставив r и t (1.103) для одного периода в (1.75) и (1.76), найдем все величины для периодического потенциала.

При $ka = 2\pi n$, где n — целое число, получаем $r = r_1$ и $t = t_1$. При этом первый радикал в (1.75) и второй в (1.76) (они содержат множитель $1 + r_1 - t_1$ под радикалами) равны нулю. Это значит, что $R = -1$ и $q = k = 2\pi n/a$. При $ka = \pi(2n + 1)$ получаем $r = -r_1$ и $t = -t_1$. При этом другие радикалы обращаются в нуль. Это означает, что $R = 1$, а $q = k = \pi(2n + 1)/a$. Таким образом, при $ka = \pi n$, где n — целое, получаем полное отражение. Отражение при $n \neq 0$ называется брэгговской дифракцией порядка n . Соответственно величины $k = \pi n/a \equiv k_{Bn}$ называются брэгговскими волновыми числами порядка n .

Подставив r и t из (1.103) в (1.75), после некоторых преобразований получим

$$R = \frac{\sqrt{k + p \operatorname{tg}(ka/2)} - \sqrt{k - p \operatorname{ctg}(ka/2)}}{\sqrt{k + p \operatorname{tg}(ka/2)} + \sqrt{k - p \operatorname{ctg}(ka/2)}}, \quad (1.105)$$

$$\exp(iqa) = \frac{\sqrt{p + k \operatorname{ctg}(ka/2)} - \sqrt{p - k \operatorname{tg}(ka/2)}}{\sqrt{p + k \operatorname{ctg}(ka/2)} + \sqrt{p - k \operatorname{tg}(ka/2)}}. \quad (1.106)$$

Проверим, не противоречат ли структуре формул (1.79) выражения (1.105), (1.106). Умножим числитель и знаменатель (1.105) на

$$\sqrt{i \cos(ka/2) / [k \sin(ka/2) - p \cos(ka/2)]},$$

а числитель и знаменатель (1.106) — на

$$\sqrt{i \sin(ka/2) / [k \sin(ka/2) - p \cos(ka/2)]}.$$

В результате получим

$$R = \frac{\sqrt{i \frac{k \cos(ka/2) + p \sin(ka/2)}{k \sin(ka/2) - p \cos(ka/2)}} - \sqrt{\frac{i \cos(ka/2)}{\sin(ka/2)}}}{\sqrt{i \frac{k \cos(ka/2) + p \sin(ka/2)}{k \sin(ka/2) - p \cos(ka/2)}} + \sqrt{\frac{i \cos(ka/2)}{\sin(ka/2)}}}, \quad (1.107)$$

$$e^{iqa} = \frac{\sqrt{i \frac{k \cos(ka/2) + p \sin(ka/2)}{k \sin(ka/2) - p \cos(ka/2)}} - \sqrt{\frac{\sin(ka/2)}{i \cos(ka/2)}}}{\sqrt{i \frac{k \cos(ka/2) + p \sin(ka/2)}{k \sin(ka/2) - p \cos(ka/2)}} + \sqrt{\frac{\sin(ka/2)}{i \cos(ka/2)}}}, \quad (1.108)$$

откуда следует, что выражения (1.105), (1.106) действительно приводятся к виду

$$R = \frac{a - b}{a + b}, \quad \exp(iqa) = \frac{a - 1/b}{a + 1/b}.$$

Соотношения (1.105), (1.106) легко проанализировать. При малых $pa = u_0 a^2/2 \ll 1$ (эта величина пропорциональна $2\pi b/a \approx 10^{-3}$ и всегда мала) и малых $ka/2 \ll 1$ имеем приближенные соотношения

$$\sqrt{k + p \operatorname{tg}(ka/2)} \approx \sqrt{k} \sqrt{1 + pa/2} \approx \sqrt{k},$$

$$\sqrt{k - p \operatorname{ctg}(ka/2)} = \sqrt{k - 2p/a + pka/6} \approx \sqrt{k^2 - u_0} / \sqrt{k}.$$

Подстановка их в (1.105), (1.106) дает

$$R = \frac{k - \sqrt{k^2 - u_0}}{k + \sqrt{k^2 - u_0}}, \quad e^{iqa} = \frac{1 + ia\sqrt{k^2 - u_0}/2}{1 - ia\sqrt{k^2 - u_0}/2} \approx e^{ia\sqrt{k^2 - u_0}}, \quad u_0 = 4\pi N_0 b, \quad (1.109)$$

что хорошо согласуется с представлениями об оптическом потенциале. В частности, из второй формулы следует, что $q \approx \sqrt{k^2 - u_0}$, и при $k^2 < u_0$ имеет место полное отражение, так как

$$R = \frac{k - i\sqrt{u_0 - k^2}}{k + i\sqrt{u_0 - k^2}}, \quad q \approx i\sqrt{u_0 - k^2}.$$

Полное отражение — это дифракция Брэгга нулевого порядка. Оно является полным не в одной точке, а в некотором диапазоне $0 < k^2 < u_0$. Отметим, что точные формулы (1.105), (1.106) позволяют найти поправки к оптическому потенциалу u_0 с любой степенью точности по степеням малых параметров $u_0 a^2$ и $k^2 a^2$.

Из формулы (1.106) следует, что при дифракции Брэгга n -го порядка отражение является полным не в одной точке $k = \pi n/a$, а в интервале $k_{Bn} \leq k \leq k_{Bn} + \delta k_{Bn}$, который называется шириной «столика» Дарвина. Слово столик означает, что коэффициент отражения в интервале δk_{Bn} постоянен. На рис. 1.17 показан коэффициент отражения в зависимости от энергии $E = k^2$. Видно, что в интервале $k_{Bn}^2 < E < k_{Bn}^2 + 2u_0$ коэффициент отражения равен единице. Энергетическая ширина столика Дарвина при каждом отражении Брэгга порядка $n \neq 0$ — одна и та же и равна $2u_0$, где $u_0 = 4\pi N_0 b$ — высота потенциального барьера для данного вещества.

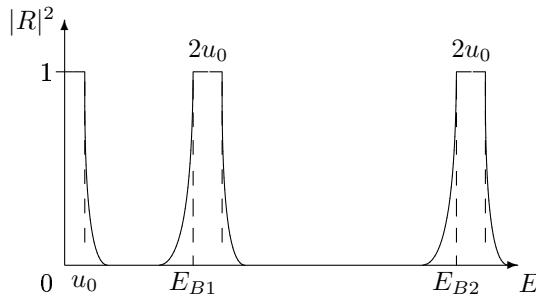


Рис. 1.17: Коэффициент отражения от кристалла в зависимости от энергии падающего нейтрона. Видно, что в интервалах $k_{Bn}^2 \leq k^2 \leq k_{Bn}^2 + 2u_0$ имеет место полное, брэгговское отражение

Нужно, правда, иметь в виду, что такое простое выражение для ширины столика Дарвина справедливо лишь для простейшего потенциала Кроннига–Пенни, который содержит лишь одну кристаллическую плоскость в периоде. Для более сложных периодов с несколькими кристаллическими плоскостями ширина столика Дарвина содержит структурный фактор, о котором речь пойдет ниже.

Нетрудно видеть, что на столике Дарвина блоховский волновой вектор $q = k_{Bn} + iq_n''$, где q_n'' — мнимая часть q . Таким образом, на столике Дарвина $\exp(iqa) = \exp(-q_n''a) < 1$.

Легко прослеживается следующая закономерность. Каждый раз, когда R становится единичным комплексным числом: $R = \exp(i\phi)$, волновое число q приобретает мнимую часть q_n'' , при этом вещественная его часть совпадает с k_{Bn} .

Эту закономерность можно увидеть непосредственно, если переписать соотношения (1.105), (1.106) несколько иначе. Заметим, что из (1.105) следует, что

$$\frac{1 - R}{1 + R} = \frac{\sqrt{k - p \operatorname{ctg}(ka/2)}}{\sqrt{k + p \operatorname{tg}(ka/2)}}, \quad (1.110)$$

а из (1.106) — соотношение

$$\frac{1 - \exp(iqa)}{1 + \exp(iqa)} \equiv -i \operatorname{tg}(qa/2) = \frac{\sqrt{p - k \operatorname{tg}(ka/2)}}{\sqrt{p + k \operatorname{ctg}(ka/2)}} \equiv -i \operatorname{tg}(ka/2) \frac{\sqrt{k - p \operatorname{ctg}(ka/2)}}{\sqrt{k + p \operatorname{tg}(ka/2)}}. \quad (1.111)$$

Сопоставляя его с (1.110), немедленно получаем

$$\frac{1-R}{1+R} = \frac{\operatorname{tg}(qa/2)}{\operatorname{tg}(ka/2)} \Rightarrow R = \frac{\sin[(k-q)a/2]}{\sin[(k+q)a/2]} \quad (1.112)$$

и видим, что на каждом столике Дарвина $0 \leq \delta k < \delta k_{Bn}$ амплитуда отражения

$$R = \frac{\delta k - iq_n''}{\delta k + iq_n''} = e^{i\phi} \quad (1.113)$$

с вещественной фазой ϕ . При малых k получаем, что $R = (k-q)/(k+q)$, откуда следует, что $q = \sqrt{k^2 - u_0}$, и при $k^2 < u_0$ имеем полное отражение с $q''_0 = \sqrt{u_0 - k^2}$.

Рассмотрим теперь случай потенциала с конечным числом периодов. Согласно формуле (1.86),

$$R_N = R \frac{1 - \exp(2iqNa)}{1 - R^2 \exp(2iqNa)}. \quad (1.114)$$

На столике Дарвина фазовый множитель $\exp(iqNa)$ равен $\exp(-q''Na)$, и благодаря множителю $1 - \exp(-2q''Na)$ столик перестает быть плоским. По бокам от столика, где величины q и R вещественны коэффициент отражения убывает, но на монотонное убывание накладываются осцилляции, обращающие коэффициент отражения в нуль каждый раз, как $q = \pi m/Na$ с целым m .

Очень полезно проверить, что при $N = 1$ формулы для R_N и T_N приводят к амплитудам r и t для одного периода.

Потенциал Кроннига–Пенни с запрещенными рефлексами

Выше мы рассмотрели простейшую модель периодического потенциала, период которого содержит единственную кристаллическую плоскость. Рассмотрим теперь потенциал, показанный на рис. 1.18, период которого содержит две одинаковые кристаллические плоскости, отстоящие друг от друга на расстояние $d < a/2$.

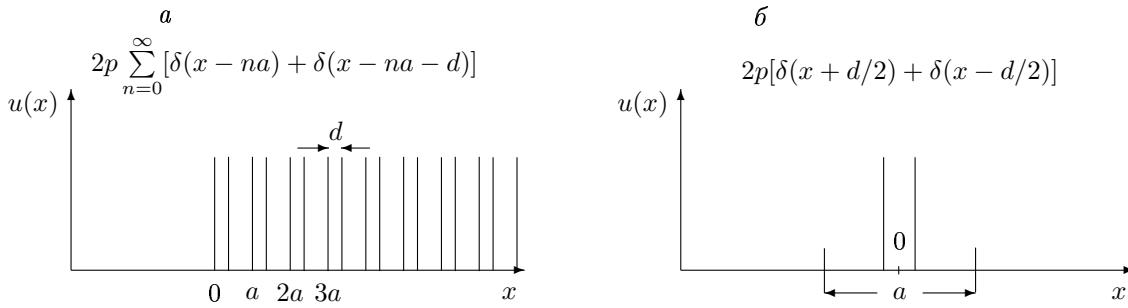


Рис. 1.18: Одномерный периодический потенциал, образованный системой плоскостей, параллельных входной поверхности и содержащей две одинаковые плоскости в периоде (a), и симметричный потенциал одного периода, состоящий из двух плоскостей на расстоянии d друг от друга и двух промежутков $(a-d)/2$ с обеих сторон (b)

Амплитуды отражения r_2 и пропускания t_2 двумя плоскостями, разделенными промежутком d , равны

$$r_2 = r_1 \left[1 + \frac{t_1^2 e^{2ikd}}{1 - r_1^2 e^{2ikd}} \right] = r_1 \frac{1 + (t_1^2 - r_1^2) e^{2ikd}}{1 - r_1^2 e^{2ikd}}, \quad t_2 = e^{ikd} \frac{t_1^2}{1 - r_1^2 e^{2ikd}}. \quad (1.115)$$

Эти формулы легко проверить в предельном случае. При $d \rightarrow 0$ амплитуды r_2, t_2 должны совпадать с r_1, t_1 , но с удвоенным параметром $2p$. Элементарная проверка показывает, что так оно и есть:

$$r_2(d=0) = r_1(2p) = \frac{-2ip}{k + 2ip}, \quad t_2(d=0) = t_1(2p) = \frac{k}{k + 2ip}. \quad (1.116)$$

Амплитуды r и t для одного периода получаются умножением (1.115) на фазовый множитель $\exp(ik(a-d))$:

$$r = e^{ik(a-d)} r_2 = \mp i e^{i\phi} \frac{2|r_1| \cos(kd - \gamma_1)}{\sqrt{(1 - |r_1|^2)^2 + 4|r_1|^2 \cos^2(kd - \gamma_1)}}, \quad (1.117)$$

$$t = e^{ik(a-d)} t_2 = e^{2i\phi} \frac{|t_1|^2}{\sqrt{(1 - |r_1|^2)^2 + 4|r_1|^2 \cos^2(kd - \gamma_1)}}, \quad (1.118)$$

где

$$\phi = ka - 2\gamma_1 - \gamma_2, \quad \gamma_1 = \pm \arcsin(|r_1|), \quad \gamma_2 = \arcsin\left(\frac{|r_1|^2 \sin(2kd - 2\gamma_1)}{\sqrt{(1 - |r_1|^2)^2 + 4|r_1|^2 \cos^2(kd - \gamma_1)}}\right). \quad (1.119)$$

Воспользуемся выражением (1.77) для R и учтем, что брэгговское отражение возникает при $\sin^2 \phi < |r|^2$. Центры брэгговских пиков расположены в точках $\phi = \pi n$ с целыми n , что соответствует

$$k_{Bn} = \frac{\pi n}{a} + \frac{2\gamma_1 + \gamma_2}{a}. \quad (1.120)$$

Ширины брэгговских пиков (иногда далее будем называть их рефлексами) определяются условием $\delta\phi = 2|r|$ или

$$\delta k_{Bn} = \frac{2|r|}{a - 2\gamma'_1 - \gamma'_2} \approx \frac{u_0}{k_{Bn}} \cos(k_{Bn}d),$$

где $\gamma' = d\gamma/dk|_{k=k_{Bn}}$. Множитель $\cos(k_{Bn}d)$ есть тот структурный фактор, который был упомянут на с. 30. Благодаря этому фактору энергетическая ширина столика Дарвина $\delta E_{Bn} = \delta k_{Bn}^2 = 2u_0 \cos(k_{Bn}d)$ меняется от рефлекса к рефлексу и в некоторых рефлексах обращается в нуль. Рефлексы с нулевой шириной фактически отсутствуют. Их называют запрещенными. В них $|r| = 0$, т. е.

$$k_{Bn}d - \gamma_1 = \pi(m + 1/2) \quad (1.121)$$

с целым m . Подставляя (1.120) в (1.121) и учитывая, что при выполнении условия (1.121) $\gamma_2 = 0$, получаем соотношение

$$\frac{\pi n d}{a} + \gamma_1 \left(\frac{2d}{a} - 1 \right) = \frac{\pi}{2}(2m + 1),$$

которое показывает, какие порядки отражения запрещены при заданном значении d , или представляет собой уравнение для d , если известен порядок n запрещенного рефлекса:

$$d = \frac{a}{2} \frac{\pi(2m + 1) + 2\gamma_1}{\pi n + 2\gamma_1}. \quad (1.122)$$

Поскольку $d < a/2$, то $2m + 1 < n$. Отсюда следует, что рефлексы первого порядка ($n = 1$) не могут быть запрещены. Рефлексы второго порядка могут быть запрещены, если $m = 0$, т. е.

$$d = \frac{a}{4} \frac{\pi + 2\gamma_1}{\pi + \gamma_1} \approx \frac{a}{4} (1 + \gamma_1/\pi).$$

Обычно запрещенные рефлексы определяются условием $d = a/4$, однако при таком значении d величина $|r| \approx 2|r_1|^2$ не равна нулю, т. е. рефлекс не запрещен [21, 22], а имеет ширину $\delta k^2 \approx 2u_0|r_1|$, которая в $|r_1|$ раз, т. е. на 4–5 порядков меньше, чем ширины незапрещенных рефлексов.

«Ферромагнитные» и «антиферромагнитные» отражения

Мы знаем, что периодический потенциал с периодом a периодичен также с периодом Na . Спрашивается, почему тогда не происходят отражения с волновым числом Брэгга $\pi n/Na$? Ответ на этот вопрос прост: эти отражения запрещены, т. е. их ширины равны нулю.

Допустим, однако, что в потенциале Кроннига–Пенни два соседних периода имеют разные p . Тогда, строго говоря, периодом является система из двух плоскостей с потенциалом $2p_1\delta(x - a/2) + 2p_2\delta(x - 3a/2)$, и ширина периода равна $2a$.

Отражения Брэгга увеличенного периода соответствуют значениям $k_{Bn} = \pi n/2a$. При четных $n = 2m$ волновые числа Брэгга $k_{B2m} = \pi m/a$ совпадают с брэгговскими точками k_{Bm} потенциала с периодом a , а нечетным $n = 2m + 1$ соответствуют брэгговские пики, которые при $p_1 = p_2$ были запрещены. Естественно ожидать (читатель может проверить это сам), что ширины четных пиков (будем называть их «ферромагнитными») пропорциональны $|p_1 + p_2|/2$, а ширины нечетных пиков (будем называть их «антиферромагнитными») пропорциональны $|p_1 - p_2|$. Термины «ферромагнитный» и «антиферромагнитный» заимствованы из физики магнитных кристаллов. Если соседние плоскости кристалла имеют разнонаправленную намагниченность, то взаимодействие поляризованного нейтрона с соседними плоскостями описывается разными p_1 и p_2 . При этом ширина брэгговских пиков четного порядка $n = 2m$ пропорциональна средней, т. е. ферромагнитной намагниченности, а ширина пиков нечетного порядка пропорциональна разности намагниченности соседних плоскостей, которая характеризует антиферромагнетизм кристалла.

1.6.6 Суперзеркала

Итак, мы знаем, что периодическому потенциалу свойственно отражение Брэгга, т. е. в некотором интервале энергии, называемом столиком Дарвина, потенциал полностью отражает нейтроны. Положение столика и его ширина определяются свойствами потенциала. Этим можно воспользоваться, чтобы создавать зеркала с желаемыми свойствами [22, 23]. Например, можно создавать зеркала с более высокой критической энергией нежели оптический потенциал u_0 . Такие зеркала называются суперзеркалами. Они получаются путем напыления слоев с различными оптическими потенциалами на какую-нибудь подложку.

Рассмотрим реальные периодические системы, которые изготавливают в лабораториях методом напыления. Пусть имеется два материала с двумя разными потенциалами. Один характеризуется высоким потенциалом u_b (назовем его барьером), а другой — низким потенциалом u_w (назовем его ямой). Напыляя попеременно эти материалы на подложку, мы получим периодическую структуру, период которой содержит потенциальный барьер высотой u_b и потенциальную яму глубиной u_w , как показано на рис. 1.19, а. Найдем отражение от такого потенциала.

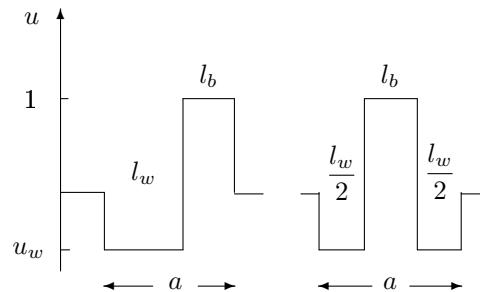


Рис. 1.19: Потенциал одного периода периодической многослойной системы, состоящей из двух пленок разных веществ. Одна имеет оптический потенциал типа потенциального барьера высоты u_b (принимаем ее равной единице) и ширины l_b , а другая — типа ямы с потенциалом u_w ширины l_w (a). Период можно мысленно симметризовать (б).

Потенциал на рис. 1.19, *a* несимметричен. Для упрощения формулы симметризуем его, мысленно передвинув барьер в середину периода, как показано на рис. 1.19, *б*. Сначала найдем отражение и пропускание одним периодом, полагая для простоты, что потенциал u_w равен нулю. Принимая во внимание выражения (1.43) для амплитуд отражения и пропускания одним прямоугольным потенциалом, получим следующие формулы для одного периода:

$$r = e^{ik_w l_w} r_b, \quad t = e^{ik_w l_w} t_b, \quad (1.123)$$

где введены обозначения

$$r_b = r_{wb} \frac{1 - \exp(2ik_b l_b)}{1 - r_{wb}^2 \exp(2ik_b l_b)}, \quad t_b = e^{ik_b l_b} \frac{1 - r_{bw}^2}{1 - r_{bw}^2 \exp(2ik_b l_b)}, \quad r_{wb} = \frac{k_w - k_b}{k_w + k_b}, \quad (1.124)$$

$k_{w,b} = \sqrt{k^2 - u_{w,b}}$. С помощью (1.123), (1.124) можно найти $\operatorname{Re} r$ и $|r|^2$. Подставив их в (1.78), получим аналитические выражения для R , и сможем изучить все особенности отражения, в частности положения и ширины брэгговских пиков.

С помощью варианта (1.78) формулу для отражения от полу бесконечной цепочки с периодом, показанным на рис. 1.19, *б*, при $k^2 > u_b$ удается привести к виду

$$\begin{aligned} R &= \frac{\sqrt{\frac{k_b \operatorname{tg}(k_w l_w/2) - k_w \operatorname{ctg}(k_b l_b/2)}{k_w \operatorname{tg}(k_w l_w/2) - k_b \operatorname{ctg}(k_b l_b/2)}} - \sqrt{\frac{k_w \operatorname{tg}(k_w l_w/2) + k_b \operatorname{tg}(k_b l_b/2)}{k_b \operatorname{tg}(k_w l_w/2) + k_w \operatorname{tg}(k_b l_b/2)}}}{\sqrt{\frac{k_b \operatorname{tg}(k_w l_w/2) - k_w \operatorname{ctg}(k_b l_b/2)}{k_w \operatorname{tg}(k_w l_w/2) - k_b \operatorname{ctg}(k_b l_b/2)}} + \sqrt{\frac{k_w \operatorname{tg}(k_w l_w/2) + k_b \operatorname{tg}(k_b l_b/2)}{k_b \operatorname{tg}(k_w l_w/2) + k_w \operatorname{tg}(k_b l_b/2)}}} = \\ &= \frac{\sqrt{\frac{\cos \phi_+ + r_{wb} \cos \phi_-}{\cos \phi_+ - r_{wb} \cos \phi_-}} - \sqrt{\frac{\sin \phi_+ + r_{wb} \sin \phi_-}{\sin \phi_+ - r_{wb} \sin \phi_-}}}{\sqrt{\frac{\cos \phi_+ + r_{wb} \cos \phi_-}{\cos \phi_+ - r_{wb} \cos \phi_-}} + \sqrt{\frac{\sin \phi_+ + r_{wb} \sin \phi_-}{\sin \phi_+ - r_{wb} \sin \phi_-}}}, \end{aligned} \quad (1.125)$$

где $\phi_{\pm} = (k_w l_w \pm k_b l_b)/2$. Аналогично преобразуется выражение для $\exp(iqa)$:

$$e^{iqa} = \frac{\sqrt{\operatorname{Re} t + |t|^2} - \sqrt{\operatorname{Re} t - |t|^2}}{\sqrt{\operatorname{Re} t + |t|^2} + \sqrt{\operatorname{Re} t - |t|^2}} = \frac{\sqrt{\cos^2 \phi_- - r_{wb}^2 \cos^2 \phi_+} + i \sqrt{\sin^2 \phi_- - r_{wb}^2 \sin^2 \phi_+}}{\sqrt{\cos^2 \phi_- - r_{wb}^2 \cos^2 \phi_+} - i \sqrt{\sin^2 \phi_- - r_{wb}^2 \sin^2 \phi_+}}. \quad (1.126)$$

Проверим выполнение в (1.126) симметрии, присущей формулам (1.79). Для этого разделим числитель и знаменатель правой дроби в (1.126) на $\sqrt{-i(\sin \phi_+ - r_{wb} \sin \phi_-)(\cos \phi_+ - r_{wb} \cos \phi_-)}$. После этого опрокинем дробь под вторым корнем и в получившемся выражении умножим и числитель и знаменатель на $\sqrt{-i(\sin \phi_+ - r_{wb} \sin \phi_-)/(\cos \phi_+ - r_{wb} \cos \phi_-)}$. В результате получается выражение (1.125).

Так же просто проверить, что в пределе $l_w \rightarrow 0$ выражения (1.125), (1.126) переходят в r_{wb} и $\exp(ik_b a)$ (т. е. $q = k_b$) соответственно, а при $l_b \rightarrow 0$ они переходят в нуль и $\exp(ik_w a)$ (т. е. $q = k_w$), как и следовало ожидать.

При $k^2 < u_b$ формулы (1.125), (1.126) приводятся к виду

$$R = \frac{\sqrt{\cos^2 \xi_- - \exp(-2k'_b l_b) \cos^2 \xi_+} - i \sqrt{\sin^2 \xi_- - \exp(-2k'_b l_b) \sin^2 \xi_+}}{\sqrt{\cos^2 \xi_- - \exp(-2k'_b l_b) \cos^2 \xi_+} + i \sqrt{\sin^2 \xi_- - \exp(-2k'_b l_b) \sin^2 \xi_+}}, \quad (1.127)$$

$$e^{iqa} = \frac{\sqrt{\frac{\sin \xi_- - \exp(-k'_b l_b) \sin \xi_+}{\sin \xi_- + \exp(-k'_b l_b) \sin \xi_+}} - \sqrt{\frac{\cos \xi_- - \exp(-k'_b l_b) \cos \xi_+}{\cos \xi_- + \exp(-k'_b l_b) \cos \xi_+}}}{\sqrt{\frac{\sin \xi_- - \exp(-k'_b l_b) \sin \xi_+}{\sin \xi_- + \exp(-k'_b l_b) \sin \xi_+}} + \sqrt{\frac{\cos \xi_- - \exp(-k'_b l_b) \cos \xi_+}{\cos \xi_- + \exp(-k'_b l_b) \cos \xi_+}}}, \quad (1.128)$$

где $\xi_{\pm} = k_w l_w / 2 \pm \phi_0$, $\phi_0 = \arccos(k_w / \sqrt{u_b - u_w})$ и $k'_b = \sqrt{u_b - k^2}$.

Снова легко проверить, что в предельных случаях $l_w \rightarrow 0$ и $l_b \rightarrow 0$ получится вполне ожидаемый результат: в первом случае — скачок потенциала, при котором $R \rightarrow r_{wb} = \exp(-2i\phi_0)$, $q = ik'_b$, а во втором — пустое пространство с $R = 0$ и $q = k_w$.

Найдем положения и ширины брэгговских пиков. Брэгговские отражения происходят всякий раз, когда фазы подкоренных выражений двух радикалов в (1.125) различаются на π . Поскольку при $k^2 > u_b$ величины r_{wb} вещественны, положительны и меньше единицы, то, согласно (1.125), положение брэгговских пиков определяется из условий

$$|\cos \phi_+| < r_{wb} \cos \phi_- \quad \text{и} \quad |\sin \phi_+| < r_{wb} \sin \phi_-.$$

При этом ширины пиков равны $r_{wb} \cos \phi_-$ и $r_{wb} \sin \phi_-$. Для получения наибольшей ширины, равной $2r_{wb}$, нужно потребовать выполнения условий $\phi_- = 0$ в первом случае и $\phi_- = \pi/2$ во втором. Первый случай приводит к равенству $k_w l_w = k_b l_b$; при этом середина брэгговского пика приходится на точку $k_w l_w + k_b l_b = 2k_w l_w = \pi(2n + 1)$. Таким образом, если мы хотим получить брэгговский пик в некоторой точке k_w , необходимо выбрать, например, $l_w = \pi/2k_w$ и $l_b = \pi/2k_b$. Или $k_w l_w = k_b l_b + \pi$, $l_w = 3\pi/2k_w$, $l_b = \pi/2k_b$. Разумеется, чем больше период, тем меньше ширина брэгговского пика. На практике задача состоит в том, чтобы подобрать ширины l_w и l_b так, чтобы получить отражение в заданной области энергий. Таким способом изготавливают монохроматоры и фильтры.

Одна из важных практических задач — построение суперзеркала, а именно такой многослойной системы, которая отражает как можно больше, т. е. имеет как можно более высокий эффективный потенциальный барьер. Если напылить на подложку одну пленку с барьером u_b и большой шириной l_b , то такая пленка будет полностью отражать все нейтроны с энергией $k^2 < k_c^2 = u_b$. Используя отражение Брэгга, можно эффективно повысить k_c . Для этого нужно построить цепочки периодических потенциалов, которые дают перекрывающиеся брэгговские пики с ширинами D_i (рис. 1.20). В результате мы получим полное отражение при k выше критического $k_c = \sqrt{u_b}$, которое на рисунке обозначено единицей.

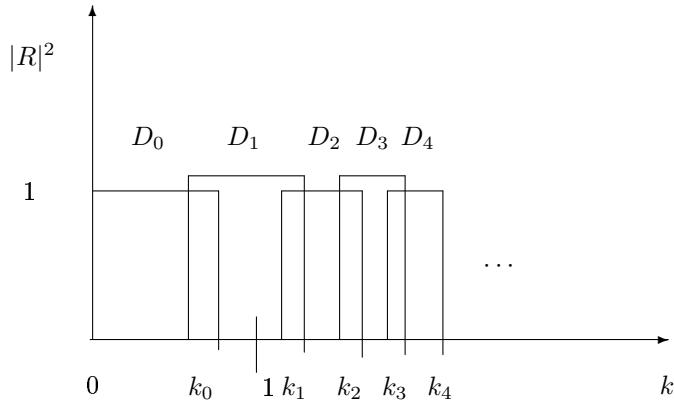


Рис. 1.20: Система периодических потенциалов с перекрывающимися пиками Брэгга с ширинами D_i позволяет получить полное отражение при энергиях k^2 , значительно более высоких, чем $k_c^2 = u_b$

На рис. 1.21 показан коэффициент отражения для реальной системы, состоящей из FeCo (барьер) и Si (яма). Эта система содержит 12 цепочек с постепенно сокращающимся периодом и растущим числом периодов. Всего система содержит 353 слоя. Число слоев нечетно, потому что система должна представлять собой один широкий барьер, который обеспечивает полное отражение вплоть до $k^2 = 1$, где за единицу принимается u_b .

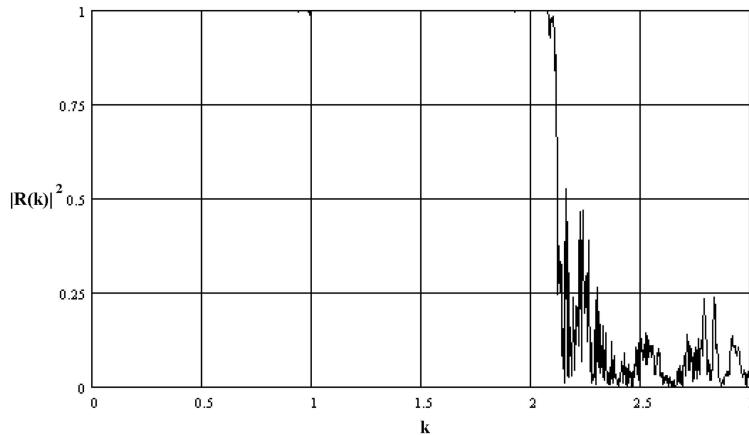


Рис. 1.21: Зависимость от k теоретически рассчитанного коэффициента отражения $|R|^2$ от многослойной системы FeCo–Si. Система состоит из широкого барьера и 12 периодических цепочек. Критическое значение k_c для FeCo принято равным единице. В потенциал не включены мнимые части

1.7 Примеры применения алгебры

Рассматривая периодические потенциалы, мы уже убедились в плодотворности алгебраического подхода. Рассмотрим теперь другие виды потенциалов, получим явные выражения амплитуд r и t и исследуем протекающие в них физические процессы.

1.7.1 Резонансное рассеяние

Начнем с оптического потенциала, изображенного на рис. 1.22. Это «сандвич» из двух одинаковых пленок, каждая из которых создает высокий отражающий потенциал u и между которыми расположена пленка с низким потенциалом. Для простоты будем считать, что потенциал промежуточной пленки равен нулю, как будто между пленками имеется пустая прослойка.

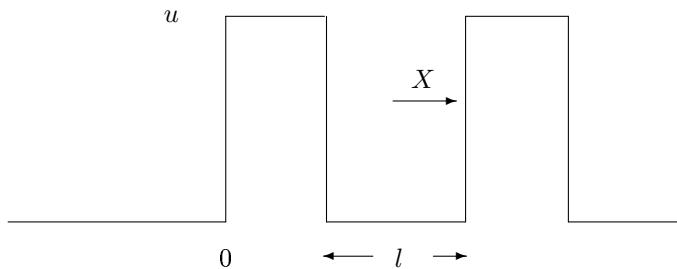


Рис. 1.22: Резонансная система из двух барьеров, разделенных промежутком ширины l

В такой системе может наблюдаться резонанс. Это означает, что при некоторых значениях энергии система двух барьеров оказывается прозрачной [24]. Действительно, амплитуда пропускания такой системой

$$T = \exp(ikl) \frac{t^2}{1 - r^2 \exp(2ikl)} = e^{2i\chi + ikl} \frac{|t|^2}{1 + |r|^2 \exp(2i\chi + 2ikl)}, \quad (1.129)$$

где мы воспользовались обозначениями $t = |t| \exp(i\chi)$ и $r = \pm i|r| \exp(i\chi)$. Фаза $\phi = 2\chi + 2kl$ в знаменателе зависит от k и при некоторых k_n она оказывается равной $\pi(2n + 1)$, где n — целое число. При этих значениях фазы амплитуда пропускания равна по абсолютной величине $|T| = |t|^2 / (1 - |r|^2) = 1$, поскольку $|r|^2 = 1 - |t|^2$. С другой стороны, амплитуда отражения

$$R = r \frac{1 + (t^2 - r^2) \exp(2ikl)}{1 - r^2 \exp(2ikl)} = r \frac{1 + \exp(2i\chi + 2ikl)}{1 + |r|^2 \exp(2i\chi + 2ikl)} \quad (1.130)$$

при этих значениях k равна нулю.

Резонансное пропускание может показаться удивительным явлением, если учесть, что при $k = k_n$ пропускание одним барьером $|r|$ может быть экспоненциально малым. По сути же это эффект накопления. Благодаря малому пропусканию в обе стороны амплитуда волны X , падающей изнутри на второй барьер вырастает настолько, что даже при малом $|t|$ величина $|Xt| = 1$. Отсюда следует, что амплитуда волновой функции между барьерами равна $1/|t|$. Легко показать, что это действительно так. Согласно (1.50) имеем

$$X = \frac{t \exp(ikl)}{1 - r^2 \exp(2ikl)} = \exp(i\chi + ikl) \frac{|t|}{1 + |r|^2 \exp(2i\chi + 2ikl)}, \quad (1.131)$$

и при $2\chi + 2kl = \pi(2n + 1)$ получаем $|X| = 1/|t|$.

При выводе формул отражения и пропускания мы нигде не пользовались понятием времени, считая систему стационарной. Потому слово «накопление» представляется неуместным. Однако, возможно, что стационарный подход — это приближенное описание системы, в котором не рассматриваются переходные процессы. Если же они имеют место, то было бы интересно их наблюдать. В случае резонансных систем можно было бы ожидать что по мере приближения энергии падающей частицы к резонансной система становится прозрачной, но при этом возрастаёт задержка частицы на пути к детектору, вызванная тем, что для увеличения амплитуды волновой функции между барьерами требуется время, так же как требуется время для раскачки маятника под действием резонансной силы. Было бы очень интересно проверить, действительно ли происходит задержка нейтрона при росте вероятности пропускания резонансной системы.

1.7.2 Резонанс в системе двух неодинаковых барьеров

Мы рассмотрели резонанс, возникающий в системе двух одинаковых симметричных прямоугольных барьеров. Рассмотрим теперь пропускание двумя произвольными несимметричными барьерами, разделенными промежутком длины l . Воспользуемся для амплитуды пропускания T_{12} выражением

$$T_{12} = \exp(ikl) \frac{t_2 t_1}{1 - r_1 r_2 \exp(2ikl)}, \quad (1.132)$$

модуль которого в резонансе (при минимальном значении знаменателя) равен

$$|T_{12}| = \frac{|t_2||t_1|}{1 - |r_1||r_2|}. \quad (1.133)$$

Резонанс имеет резко выраженную форму, т. е. достаточно высок и узок, если амплитуды пропускания $|t_1|$ и $|t_2|$ малы. В этом случае $|r_i| = \sqrt{1 - t_i^2} \approx 1 - t_i^2/2$, и

$$|T_{12}| < \frac{2|t_2||t_1|}{|t_1|^2 + |t_2|^2} < 1. \quad (1.134)$$

Это значит, что при неравных потенциалах пропускание в резонансе неполное.

1.7.3 Формула Брейта–Вигнера

В научной литературе все резонансные системы описываются формулой Брейта–Вигнера

$$F \sim \frac{1}{E - E_r + i\Gamma}, \quad (1.135)$$

где E_r — положение резонанса (резонансная энергия), Γ — его ширина. Покажем, как получить ее в нашем случае.

Согласно (1.130), (1.131) резонанс имеет место при энергиях $E = E_n$, при которых фаза $\phi(E) = 2\chi + 2kl = \pi(2n + 1)$, где n — целое число. При энергиях $E \approx E_n$ фазу $\phi(E)$ можно представить в виде

$$\phi(E) = \phi(E_n) + \phi'(E_n)(E - E_n) = \pi(2n + 1) + \phi'(E_n)(E - E_n), \quad (1.136)$$

где $\phi'(E) = d\phi(E)/dE$. Если $|t|^2 \ll 1$, то $|r| \approx 1$, и амплитуда отражения вблизи резонанса

$$R = r \frac{-i\phi'(E_n)(E - E_n)}{1 - |r|^2 - i|r|^2\phi'(E_n)(E - E_n)} \approx \exp(i\chi) \frac{E - E_n}{E - E_n + i\Gamma/2}, \quad (1.137)$$

где

$$\Gamma = 2 \frac{1 - |r|^2}{|r|^2\phi'(E_n)} \approx 2 \frac{|t|^2}{\phi'(E_n)} \quad (1.138)$$

— ширина резонанса. Для оценки величины Γ положим, что $\phi'(E_n) \approx d(2k_nl)/dE_n = l/k_n$ и $k_n \approx \pi/l$. Подстановка этих выражений в (1.138) дает $\Gamma \approx 2\pi|t|^2/l^2$.

Для существования резонансов (их энергия всегда ниже высоты потенциала u) необходимо, чтобы выполнялось условие $l\sqrt{u} > \pi$. Отсюда следует, что $\Gamma = 2\pi|t|^2/l^2 < 2|t|^2u/\pi$. Поэтому если $|t| \approx 0.1$, то $\Gamma < 0.01u$.

Амплитуду пропускания при $E \approx E_n$, согласно (1.129), равна

$$T = e^{2i\chi} \frac{i\Gamma/2}{E - E_n + i\Gamma/2}. \quad (1.139)$$

Из (1.137) и (1.138) следует, что при $E = E_n$ амплитуда отражения R обращается в нуль, а коэффициент пропускания $|T|^2$ становится равным единице.

1.7.4 Распад квазисвязанной системы

Потенциалу на рис. 1.22 свойственно не только резонансное рассеяние. Между двумя барьерами может возникать также метастабильное квазисвязанное состояние. Распад этого состояния можно описывать двумя способами: стационарным и нестационарным.

При нестационарном подходе ищется решение уравнения Шредингера

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} - u(x) \right] \Psi(x, t) = 0 \quad (1.140)$$

с начальным значением $\Psi(x, 0) = A\Theta(x \in l)[\exp(ikx) + \exp(-ikx)]$, где A — нормировочная постоянная, и Θ -функция показывает, что начальная функция сосредоточена между потенциальными барьерами. Решение уравнения (1.140) записывается с помощью функции Грина $G(x, t)$:

$$\Psi(x, t) = \int_0^l G(x - x', t) \Psi(x', 0) dx', \quad (1.141)$$

и требуется найти такую функцию Грина, которая при $t \rightarrow 0$ обращается в δ -функцию: $\lim_{t \rightarrow 0} G(x - x', t) = \delta(x - x')$.

При стационарном подходе волновая функция записывается в виде

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-ik^2 t),$$

где $\psi(x)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - u(x) + k^2 \right] \psi(x) = 0. \quad (1.142)$$

Волновое число k в этом уравнении должно быть комплексным: $k = k' - ik''$ с отрицательной мнимой частью, поскольку только при этом условии можно обеспечить стационарность волновой функции между барьерами.

Действительно, рассмотрим волну, идущую вправо. Допустим, что около правого барьера она равна единице. От правого барьера волна отражается с амплитудой $r = \pm i|r| \exp(i\chi)$ и распространяется влево. Около левого барьера она равна $r \exp(ikl)$. После отражения от левого барьера волна распространяется вправо и около правого барьера становится равной $r^2 \exp(2ikl)$. Но если состояние стационарно, то амплитуда около правого барьера должна быть такой же, как и вначале, т. е. равной единице. Отсюда следует условие стационарности: $|r|^2 \exp(2i\chi + i\pi + 2ikl) = 1$. Но $|r|^2 < 1$, поэтому

$$\exp(2i\chi + i\pi + 2ikl) = 1/|r|^2 > 1, \quad (1.143)$$

т. е. фаза $\phi(k) = 2\chi + 2kl$ должна иметь вид $\pi(2n + 1) - i\phi''$, и ее мнимая часть должна быть отрицательной, а вещественная — принимать резонансное значение. Для выполнения условия (1.143) величина ϕ'' должна быть равна

$$\phi'' = -\ln |r|^2 = -\ln(1 - |t|^2) \approx |t|^2, \quad (1.144)$$

где последнее приближение тем точнее, чем меньше $|t|^2$.

Мнимая добавка $-i\phi''$ возможна только при комплексном $k = k_n - ik''$ или при комплексной энергии $E = E_n - iE''$. Но если энергия содержит мнимую часть, это означает, что вероятность нахождения частицы на резонансном уровне, пропорциональная

$$\int dx |\psi(x)|^2 \exp(-2E''t),$$

убывает со временем, и время жизни частицы на этом уровне определяется величиной $\tau = 1/2E''$.

Для определения E'' представим $\phi(E)$ в виде разложения (1.136). Подставим в него $E = E_n - iE''$. В результате получим $\phi'' = E''\phi'(E_n)$. Подстановка ϕ'' в (1.144) дает $E'' = |t|^2/\phi'(E_n) = \Gamma/2$, где Γ совпадает с шириной резонансного уровня, которая определена формулой (1.138). Значит, время жизни $\tau = 1/2E'' = 1/\Gamma$ полностью определяется шириной Γ , как и следовало ожидать.

Так теория резонансного рассеяния связана с теорией α -распада.

1.7.5 Резонансы при полном отражении

Мы рассмотрели пропускание системой, изображенной на рис. 1.22. Можно представить себе, что правый барьер бесконечно широк, как показано на рис. 1.23. Например, это может быть потенциальный барьер подложки. Тогда при любых значениях энергии ниже барьера отражение всегда полное. Тем не менее при некоторых значениях k система имеет резонанс. Этот резонанс соответствует максимуму амплитуды волновой функции между барьерами

$$X = \frac{t \exp(ikl)}{1 - rr_0 \exp(2ikl)} = \frac{t \exp(ikl)}{1 - |r| \exp(i\chi_r + i\chi_0 + 2ikl)}, \quad (1.145)$$

где $r_0 = \exp(i\chi_0)$ — амплитуда полного отражения от правой ступеньки, $r = |r| \exp(i\chi_r)$ — амплитуда отражения от левого барьера. В резонансе, когда $\chi_r + \chi_0 + 2kl = 2\pi n$, получаем

$$|X| = \frac{|t|}{1 - |r|} \approx \frac{2}{|t|}, \quad (1.146)$$

поскольку при малых t имеем $|r| = \sqrt{1 - |t|^2} \approx 1 - |t|^2/2$.

В случае полного отражения резонансы можно заметить только если между барьерами находится поглотитель с коэффициентом поглощения, пропорциональным $|X|^2$, в результате чего отражение при резонансе сильно понижается.

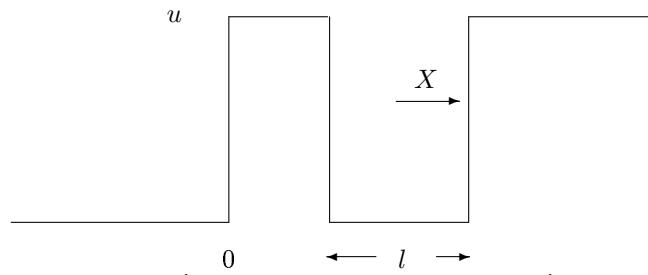


Рис. 1.23: Резонансная система с бесконечно широким правым барьером

1.8 Канализование

Рассмотрим многослойную систему с оптическим потенциалом, показанным на рис. 1.24. Он отвечает изображенной на рис. 1.25, вполне реальной системе пленок, напыленных на подложку. Часть системы закрыта кадмievым поглотителем (Cd). Можно поставить мысленный эксперимент, в котором часть системы слева от Cd облучается нейтронным пучком. Пучок проходит в резонансный слой 2 (Ti), распространяется в этом слое под Cd и выходит наружу с другой стороны Cd-покрытия. Наша задача — описать прохождение пучка под Cd и оценить интенсивность выходящего пучка [25].

Для этого рассмотрим сначала более простую систему (рис. 1.26), в которой Cd-пластиинка создает тень на пленке. В этом случае нужно описать канализование в пленке не под Cd а под неосвещенной поверхностью, при этом потенциал оказывается под ней таким же, как и под освещенной. Если бы кадмий лежал на поверхности, то необходимо было бы учитывать также и его потенциал.

1.8.1 Волновая функция внутри канала

Наличие кадмievых экранов приводит к разделению канала на две части. Обозначим продольную координату зеркала через x , а поперечную — через z . Поскольку координаты независимы, волновая функция представляется в виде произведения $\psi(x, z) = \psi_x(x)\psi_z(z)$. Полная волновая функция удовлетворяет уравнению Шредингера

$$[\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial z^2 - u(z) + E_x + E_z]\psi(x, z) = 0, \quad (1.147)$$

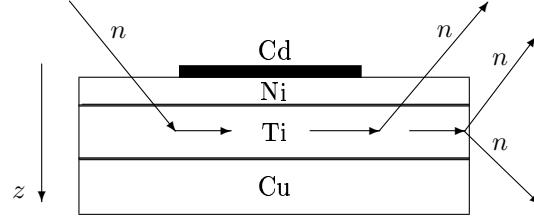
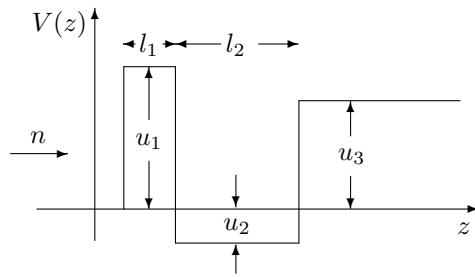
где $E = E_x + E_z$ — полная энергия нейтрана одинаковая как под освещенной, так и под неосвещенной частью. Однако разложить ее на два слагаемых E_x и E_z можно по-разному. Это связано с тем, что, хотя в среднем слое (потенциал u_2), который мы будем называть каналом, волновая функция всюду представима в виде

$$\psi(x, z) = \psi(z) \exp(ik_x x), \quad (1.148)$$

под частью поверхности зеркала, освещенной падающей плоской волной $\exp(ik_x x + ik_z z)$, компонента $k_{x<} \equiv k_x = \sqrt{E_x}$ волнового вектора в (1.148) такая же, как в падающей плоской волне, а под неосвещенной частью $k_{x>} — другая, так как из-за утечки через неосвещенную поверхность волна вдоль канала ослабевает, и потому компонента $k_{x>} = k_x + ik''_x$ должна содержать положительную мнимую добавку ik''_x .$

Нормальная же к поверхности канала компонента волнового вектора внутри канала равна $k_{2z} = \sqrt{E - E_x + u_2}$. Под освещенной частью она равна $\sqrt{k_z^2 + u_2}$, где k_z — компонента волнового вектора падающего нейтрана, а под неосвещенной частью содержит отрицательную мнимую добавку $-ik''_{2z}$, которая вследствие закона сохранения энергии $E = E_x + E_z = k_x^2 + k_z^2$ естественным образом связана с ik''_x .

Наша задача состоит в том, чтобы найти затухание нейтранной волны в канале k''_x и предсказать скорость счета детектора, регистрирующего частицы, вышедшие с поверхности за кадмievым поглотителем (рис. 1.26, справа), в зависимости от положения этого



поглотителя. Для этого нужно найти волновую функцию $\psi_>(z)$ под неосвещенной областью. Функция должна быть стационарной, т. е. одной и той же всюду под неосвещенной областью, и непрерывно переходить в волновую функцию $\psi_<(z)$ под освещенной областью:

$$\psi_<(z) = X(k_z)[\exp(ik_{2z}(z - l_2)) + \exp(-ik_{2z}(z - l_2))r_{23}(k_z)], \quad (1.149)$$

где l_2 — толщина канала, $r_{23}(k_{2z})$ — амплитуда полного отражения от подложки с потенциалом u_3 изнутри канала u_2 , а множитель $X(k_z)$ равен

$$X(k_z) = \frac{t_{02} \exp(ik_{2z}l_2)}{1 - r_{21}r_{23} \exp(2ik_{2z}l_2)}. \quad (1.150)$$

Здесь t_{02} — амплитуда проникновения волны из вакуума в канал через преграждающий слой с потенциалом u_1 , r_{21} — амплитуда отражения от слоя u_1 изнутри канала. Множитель (1.150) определяет резонансное поведение амплитуды волновой функции в канале. Его абсолютное значение в резонансе

$$|X| = \left| \frac{t_{12} \exp(ik_{2z}l_2)}{1 - |r_{21}| \exp(i\chi_{23} + i\chi_{21} + 2ik_{2z}l_2)} \right| = \frac{|t_{12}|}{1 - |r_{21}|} \approx \frac{2}{|t_{12}|}. \quad (1.151)$$

Справа от точки $x = 0$ волновая функция $\psi_>(z)$ должна по всему сечению совпадать с $\psi_<(z)$, поэтому возьмем ее тоже в виде (1.149). Разумеется, полного совпадения быть не может. Если мы захотим добиться полного совпадения, то должны будем ввести волну, отраженную от сечения канала в точке $x = 0$, и рассеянные на этом сечении волны. Здесь мы ими пренебрежем.

Волновая функция $\psi_>(z)$, совпадающая по форме с (1.149), должна быть стационарной. Это возможно только если волны, распространяющиеся вверх и вниз, согласуются друг с другом, т. е. волна

$$\exp(-ik_{2z}(z - l_2))r_{23}(k_z)$$

после отражения с амплитудой r_{21} изнутри канала от верхнего слоя переходит в волну $\exp(ik_{2z}(z - l_2))$. Если подпитки снаружи нет, то равенство

$$r_{21} \exp(-ik_{2z}(z - l_2))r_{23}(k_z) = \exp(ik_{2z}(z - l_2))$$

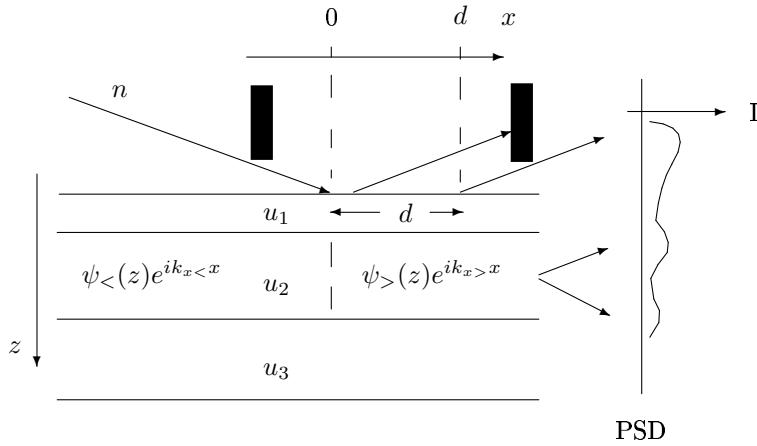


Рис. 1.26: Упрощенная система для канализации. В канале существует граница между освещенной и неосвещенной частями, создаваемая левым поглотителем. Правый поглотитель ограничивает область, видимую детектором

выполняется только при

$$r_{23}r_{21}\exp(2ik_{2z}l)=1. \quad (1.152)$$

Пренебрежем поглощением и примем во внимание, что отражение от слоя u_3 — полное. Тогда (1.152) эквивалентно соотношению

$$\exp(i\chi_{23}+i\chi_{21}+2ik_{2z}l)=\frac{1}{|r_{21}|}>0. \quad (1.153)$$

Это возможно только при

$$\phi(E_{2z>})=\chi_{23}+\chi_{21}+2k_{2z}l=2\pi n-i\phi'', \quad (1.154)$$

т. е. когда фаза имеет резонансное значение и отрицательную мнимую добавку. Эту добавку можно представить как $-i\phi''=(E_{2z>}-E_n)\phi'(E_n)$, где $\phi'(E)=d\phi(E)/dE$. Отсюда естественно следует, что $E_{2z>}=E_n-iE''$, т. е. компонента волнового вектора $k_{z>}$ имеет комплексное значение с отрицательной мнимой частью.

Согласно (1.153) и (1.154) $\phi''=-\ln|r_{21}|\approx|t_{21}|^2/2$, поэтому

$$E''=\frac{|t_{21}|^2}{2\phi'(E_n)}\approx\frac{|t_{21}|^2k_{2z}}{2l_2}, \quad (1.155)$$

где в последнем приближенном равенстве мы вместо полной производной ϕ' подставили производную ее части $(2k_{2z}l)'=l/k_{2z}$.

Теперь можно определить затухание вдоль канала k_x'' . Действительно, поскольку $k_{x>}=\sqrt{E-E_{2z}}=\sqrt{k_x^2+iE''}$, то при малых E'' , что, конечно, и предполагается, имеем

$$k_x''=\frac{E''}{2k_x}\approx\frac{|t_{21}|^2}{4l}\frac{k_{2z}}{k_x}. \quad (1.156)$$

1.8.2 Волновая функция над неосвещенной поверхностью

Зная амплитуду волновой функции в канале и ее затухание вдоль канала, можно рассчитать интенсивность нейтронов, выходящих через неосвещенную часть верхней поверхности правее правого поглотителя (см. рис. 1.26) и через торец, и предсказать распределение нейтронов на детекторе, показанное кривой справа. Для этого нужно найти волновую функцию вне зеркала над той частью его поверхности, которая не освещена падающим пучком.

Эта волновая функция, согласно теореме Кирхгофа, представима в виде интеграла по неосвещенной части поверхности ($\mathbf{r}' = (x' > 0, y', z' = 0)$):

$$4\pi\psi(\mathbf{r}) = \int_{x>0} dx' \left[\psi(\mathbf{r}') \frac{d}{dz'} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{d}{dz'} \psi(\mathbf{r}') \right], \quad (1.157)$$

где функция Грина $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ является решением неоднородного уравнения

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \right] G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.158)$$

и представляется в виде двумерного интеграла Фурье (1.24)

$$\frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{i}{2\pi} \int \frac{d^2 p_{\parallel}}{p_{\perp}} \exp(ip_{\parallel}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')_{\parallel} + ip_{\perp}(z - z')), \quad (1.159)$$

где $p_{\perp} = \sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}$, а компоненты с индексом \parallel параллельны плоскости зеркала (x, y) .

Проверим, что, если зеркало отсутствует, а на плоскость $z = 0$ падает снизу плоская волна $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, то формула (1.157) воспроизведет эту волну и при $z > 0$.

Действительно, на плоскости $z = 0$ волновая функция и ее нормальная производная равны $\exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel})$ и $ik_z \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel})$ соответственно. Если подставить эти значения в интеграл (1.157) с функцией Грина (1.159) и распространить интегрирование на всю плоскость $z = 0$, то получим волновую функцию при $z > 0$:

$$\frac{1}{2\pi} \int d^2 r'_{\parallel} \int d^2 p_{\parallel} \left[1 + \frac{k_z}{p_{\perp}} \right] \exp(i\mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}'_{\parallel}) = 4\pi \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (1.160)$$

Найдем теперь $\psi(\mathbf{r}')$ и $d\psi(\mathbf{r}')/dz'$ в нашем случае резонансной системы. Для этого учтем, что на слой u_1 изнутри резонансного канала падает волна $X(k_z) \exp(-ik_{2z>}(z - l_2))r_{23}$. Эта волна проходит через слой u_1 с амплитудой $t_{21}(k_{z>})$. В результате на поверхности зеркала имеем

$$\psi(x', z' = 0) = t_{21}(k_{z>})X(k_z) \exp(ik_{2z>}l_2)r_{23} \exp(ik_{x>}x), \quad (1.161)$$

$$\frac{d}{dz'} \psi(x', z')|_{z'=0} = ik_{2z>}t_{21}(k_{z>})X(k_z) \exp(ik_{2z>}l_2)r_{23} \exp(ik_{x>}x), \quad (1.162)$$

и во всех амплитудах, кроме X , волновой вектор k_z следует заменить на $k_{z>} = k_z - ik''_z$.

Подстановка граничных значений в (1.157) с учетом (1.159) после интегрирования по $d^2 r_{\parallel}$ и dp_y приводит к выражению

$$\psi(\mathbf{r}) = -i \frac{t_{21}(k_{z>})}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{X(k_z) dp_x}{p_x - k_x - ik''_x} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) \left[1 + \frac{k_{z>}}{p_z} \right] \exp(i(k_{x>} - p_x)b), \quad (1.163)$$

где b — расстояние вдоль поверхности в плоскости падения, затененное поглотителем, $\mathbf{p} = (p_x, p_z)$ и $p_z = \sqrt{k^2 - p_x^2}$.

Если в интеграле мы ограничимся только теми p_x , для которых $k^2 - p_x^2 > 0$, то можно ввести скользящий угол ϑ , и представить p_x как $p_x = k \cos \vartheta$. Тогда (1.163) приведется к виду

$$\psi(\mathbf{r}) \approx -i \frac{t_{21}(k \sin \vartheta_0)}{4\pi} \int_0^{\pi/2} X(k \sin \vartheta) d\vartheta \frac{\sin \vartheta + \sin \vartheta_0 - ik''_z/k}{\cos \vartheta - \cos \vartheta_0 - ik''_x/k} \exp(i(k_{x>} - p_x)b) \exp(i\mathbf{k}_{\vartheta}\mathbf{r}), \quad (1.164)$$

где ϑ_0 — угол скольжения падающего нейтрона и \mathbf{k}_ϑ — волновой вектор длины k , направленный под скользящим углом ϑ к поверхности в плоскости падения.

Отсюда следует, что вероятность найти нейтрон, вылетающий с неосвещенной части поверхности под скользящим углом ϑ , равна

$$\frac{dw(\vartheta)}{d\vartheta} = \frac{\exp(-2bk_x'')}{(4\pi)^2} |t_{21}(k \sin \vartheta_0)X(k \sin \vartheta_0)|^2 \frac{(\sin \vartheta + \sin \vartheta_0)^2 + (k_z''/k)^2}{(\cos \vartheta - \cos \vartheta_0)^2 + (k_x''/k)^2}. \quad (1.165)$$

Учитывая (1.156) и то, что в резонансе $2k_{2z}l_2 = 2\pi n$, видим, что

$$\Gamma \equiv \frac{k_x''}{k} \approx \frac{|t_{21}|^2 k_z^2}{4\pi n k^2} \ll 1.$$

Поэтому угловое распределение имеет узкий пик вокруг ϑ_0 , и его можно приближенно представить в виде

$$\frac{dw(\vartheta)}{d\vartheta} \approx \frac{1}{\pi^2} \frac{\exp(-2bk\Gamma) \sin \vartheta_0^2}{(\cos \vartheta - \cos \vartheta_0)^2 + \Gamma^2}. \quad (1.166)$$

Эксперименты в этом направлении проводятся, и можно ожидать интересных результатов.

1.9 Связанные состояния в периодических потенциалах

В этом разделе мы воспользуемся алгебраическим методом для расчетов связанных состояний и исследования зонных структур, возникающих в периодических потенциалах. Ранее, когда исследовалось отражение от полубесконечных периодических потенциалов, было найдено, что в некоторых интервалах энергии происходит полное (брэгговское) отражение. Это значит, что, когда энергия нейтрона лежит в этих интервалах, волновая функция нейтрона внутри потенциала экспоненциально затухает. Если бы потенциал был бесконечен, а не полубесконечен, то нейтрон с энергией из брэгговских интервалов (внутри столиков Дарвина) вообще не мог бы распространяться вдоль потенциала, а мог бы находиться только в локализованных состояниях. Иными словами, если нейтрон находится в точке x , его волновая функция и вправо и влево от этой точки убывает экспоненциально. Это обстоятельство позволяет назвать брэгговские интервалы запрещенными зонами. Интервалы же между брэгговскими пиками, в которых блоховское волновое число q вещественно (поглощение и другие потери мы здесь не учитываем), называются разрешенными зонами.

Полезно рассмотреть возникновение зонных структур также и для связанных состояний. Мы воспользуемся двумя способами определения уровней энергии связанных состояний [26] и продемонстрируем их на примере прямоугольной ямы.

1.9.1 Уровни в прямоугольной потенциальной яме [26, 27]

Найдем энергию связанных уровней в потенциальной яме глубины u и ширины a , показанной на рис. 1.27. Связанные состояния должны быть стационарными, и для их определения нужно сформулировать условие стационарности. Будем отсчитывать энергию k_w^2 от дна ямы. Пусть частица стартует от левой стенки с единичной амплитудой и движется направо. Когда она достигнет правой стенки, ее волновая функция приобретет фазовый множитель $\exp(ik_w a)$. После отражения от правой стенки волновая функция приобретает амплитуду $r_0 \exp(ik_w a)$, где r_0 — амплитуда отражения от потенциального скачка высоты u :

$$r_0 = \frac{k_w - i\sqrt{u - k_w^2}}{k_w + i\sqrt{u - k_w^2}} = \exp(-2i\phi_0), \quad \phi_0 = \arccos\left(\frac{k_w}{\sqrt{u}}\right). \quad (1.167)$$

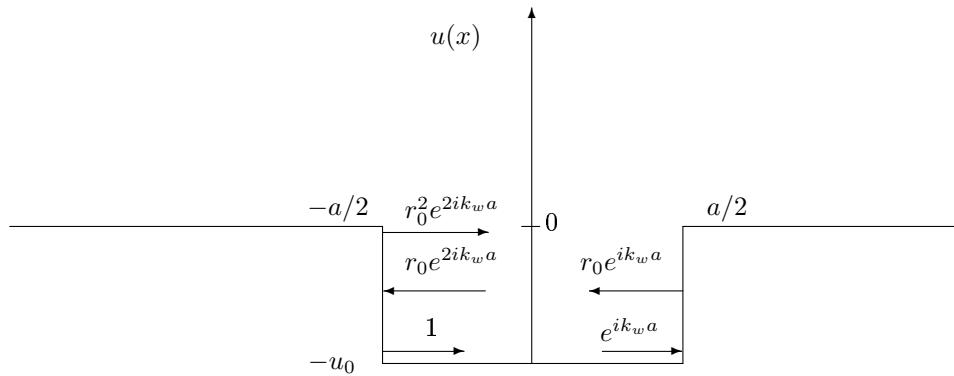


Рис. 1.27: Связанное состояние в яме определяется условием стационарности $r_0^2 \exp(2ik_w a) = 1$

После отражения частица движется влево. Достигнув левой стенки, она приобретает еще один фазовый множитель $\exp(ik_w a)$, и после отражения от левой стенки ее амплитуда станет равной $r_0^2 \exp(2ik_w a)$. Но если состояние стационарно, то после отражения от левой стенки амплитуда волновой функции должна быть такой же, как и вначале, т. е. должно выполняться равенство

$$r_0^2 \exp(2ik_w a) = 1. \quad (1.168)$$

Это и есть условие стационарности. Поскольку $r_0 = \exp(-2i\phi_0)$, условие стационарности означает, что

$$k_w a - 2\phi_0 = \pi n, \quad (1.169)$$

где n — целое число. Это условие эквивалентно уравнениям

$$\alpha z - n\pi = 2 \arccos(z), \quad (1.170)$$

где $z = k_w / \sqrt{u}$ и $\alpha = a \sqrt{u}$.

Решения уравнений (1.170) при различных n показаны на рис. 1.28 точками пересечения прямых $y = z - n\pi$ с функцией $y = 2 \arccos z$. Точкам пересечения z_n соответствуют значения энергий связанных состояний $E_n = u(z_n^2 - 1)$. Энергии связанных состояний отрицательны, поэтому при решении уравнений (1.170) следует ограничиться только такими целыми n , для которых $\pi n < \alpha$.

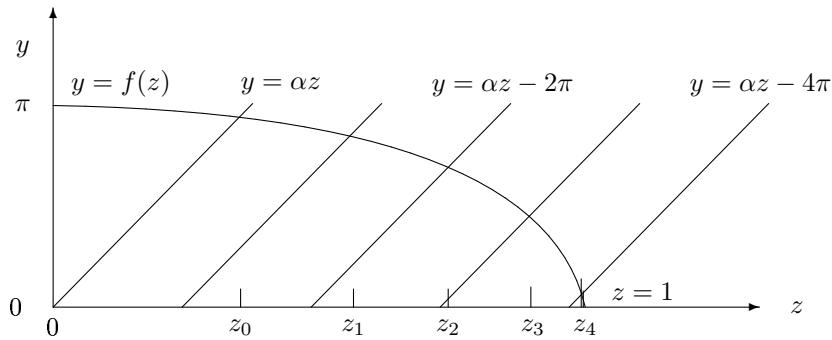


Рис. 1.28: Графическое решение уравнений для связанных состояний. Функция $y = f(z)$ представляет собой кривую $2 \arccos(z)$. Решения уравнения показаны точками z_n пересечения кривой $y = f(z)$ с прямыми $y = \alpha z - n\pi$. При данном α имеется пять связанных состояний. Чем больше ширина ямы a , тем больше параметр α и больше прямых $y = \alpha z - n\pi$ можно провести на интервале $0 < z < 1$. Соответственно больше получается и связанных состояний.

Обратим внимание еще на одно обстоятельство: связанные состояния не имеют ширины. Это означает, что они абсолютно стабильны независимо от того, является ли связанное состояние основным (т. е. самым низким) или возбужденным (т. е. более высоким). Ширины

у этих состояний появляются только тогда, когда имеется агент (поле), который вызывает переходы между уровнями. При этом ширина появляется не только у возбужденных состояний (для них естественно понятие времени жизни), но и у основного, поскольку при наличии внешних полей, вызывающих переходы между уровнями, основное состояние тоже нестабильно и его время жизни конечно.

Время жизни конечно также и при наличии у потенциала и мнимой части iu'' . В этом случае $|\exp(k_w a)| < 1$, и уравнение (1.168) имеет только комплексные решения $E_n = E'_n - i\Gamma_n$, а мнимая добавка определяет время жизни уровня. Теперь это время определяется не переходами между уровнями, а поглощением, т. е. скоростью исчезновения частицы с данного уровня.

1.9.2 Зоны в периодическом потенциале

Рассмотрим теперь бесконечный периодический потенциал, состоящий из прямоугольных барьеров высоты u и ширины d , и ям с нулевым потенциалом (энергию будем отсчитывать от дна ямы) ширины a (рис. 1.29). Выделим одну яму и запишем для нее условие стационарности аналогично (1.168):

$$R_{b\infty}^2(k_w) \exp(2ik_w a) = 1, \quad (1.171)$$

где $R_{b\infty}$ — амплитуда отражения от полубесконечных периодических потенциалов справа и слева, каждый из которых начинается с барьера, т. е. периоды обоих потенциалов несимметричны. Амплитуда r_{bw} отражения от одного периода, когда он начинается с барьера, равна r_b (1.38):

$$r_b = r_0 \frac{1 - \exp(-2k_b d)}{1 - r_0^2 \exp(-2k_b d)}, \quad (1.172)$$

где r_0 — амплитуда отражения (1.167) от потенциальной ступеньки высоты u , $k_b = \sqrt{u - k_w^2}$. Амплитуда же r_{bw} отражения от одного периода, когда он начинается с ямы, равна $\exp(2ik_w a)r_b$, поскольку перед отражением от барьера и после него частица должна пройти расстояние a . Введем симметризованную амплитуду

$$r = \sqrt{r_{bw} r_{wb}} = \exp(ik_w a) r_b \quad (1.173)$$

и представим $R_{b\infty}(k_w)$ в виде

$$R_{b\infty}(k_w) = \frac{r_{bw}}{r} R_\infty(k_w) = \exp(-ik_w a) R_\infty, \quad R_\infty = \frac{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} - \sqrt{(1+r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} + \sqrt{(1+r)^2 - t^2}}. \quad (1.174)$$

Подставив $R_{b\infty}$ из (1.174) в (1.171), получим условие стационарности

$$R_\infty^2(k_w) = 1, \quad (1.175)$$

из которого следует, что состояния стационарны только при $R_\infty(k_w) = \pm 1$. Заметим, что из выражений (1.79) следует, что в тех случаях, когда $R_\infty(k_w) = \pm 1$, блоховская экспонента $\exp(iq(a+d)) = \mp 1$, т. е. при выполнении условия стационарности $q = \pi n / (a+d)$.

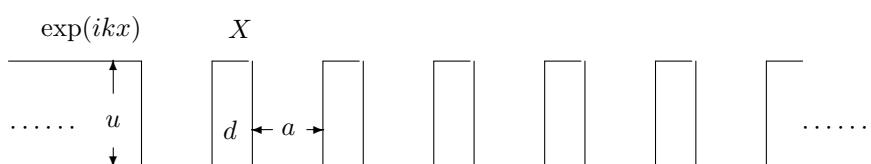


Рис. 1.29: Периодический потенциал с периодом $l = a + d$, состоящий из прямоугольных ям глубины u и разделенных барьерами ширины d

Определим, каким значениям k_w это соответствует. Подставим в R_∞ амплитуды $r = |r| \exp(i\varphi_r)$ и $t = \pm i|t| \exp(i\varphi_r)$, где, согласно (1.172) и (1.173),

$$\varphi_r = k_w a - 2\phi_0 - \gamma, \quad \gamma = \arccos \left(\frac{1 - \exp(-2k_b d) \cos(4\phi_0)}{\sqrt{1 + \exp(-4k_b d) - 2 \exp(-2k_b d) \cos(4\phi_0)}} \right). \quad (1.176)$$

После подстановки получим

$$R_\infty = \frac{\sqrt{\cos \varphi_r + |r|} - \sqrt{\cos \varphi_r - |r|}}{\sqrt{\cos \varphi_r + |r|} + \sqrt{\cos \varphi_r - |r|}}. \quad (1.177)$$

Отсюда следует, что при $\cos^2 \varphi_r < |r|^2$, или

$$\pi(n + 1/2) - \arccos(|r|) \leq \varphi_r \leq \pi(n + 1/2) + \arccos(|r|) \quad (1.178)$$

с целыми n , амплитуда R_∞ равна единичному комплексному числу $\exp(2i\chi)$. Для четных n амплитуда $R_\infty = 1$ при $\varphi_r = \pi(n + 1/2) - \arccos(|r|)$, т. е. на нижней границе столика Дарвина, и $R_\infty = -1$ на верхней границе, т. е. при $\varphi_r = \pi(n + 1/2) + \arccos(|r|)$. Для нечетных n имеем $R_\infty = -1$ на нижней и $R_\infty = 1$ на верхней границах столика Дарвина. Таким образом, условие стационарности выполняется для тех k_w , которые удовлетворяют уравнению

$$k_w a - 2\phi_0 - \gamma \pm \arccos |r| = \pi(n + 1/2), \quad (1.179)$$

или

$$k_w a - 2\phi_0 - \pi n = \pi/2 + \gamma \mp \arccos |r|. \quad (1.180)$$

Сравнивая его с условием стационарности в одной яме $k_w a - 2\phi_0 = \pi n$, видим, что каждый связанный уровень расщепился на два. Но расщепленные уровни соответствуют не связанным состояниям, а границам между разрешенными зонами, где частицы могут распространяться по потенциалу с действительным блоховским волновым вектором q , и запрещенными зонами, где частицы распространяться не могут. На самих границах, где выполняется условие стационарности, блоховское волновое число равно $\pi n/(a + d)$.

Нетрудно рассмотреть также полубесконечный периодический потенциал и, выделив в нем первую яму, написать для нее условие стационарности. Оставляем это читателю. Заранее, однако, ясно, что результат должен быть таким же, как и для бесконечного потенциала.

1.9.3 Расщепление уровней в системе из двух потенциальных ям

Покажем, как алгебраическими методами рассчитать расщепление связанных уровней в двух разделенных прямоугольных ямах. Для простоты будем считать, что две ямы одинаковы и имеют ширину a и глубину u . Промежуток между ними обозначим d . Для удобства будем снова отсчитывать энергию от дна ямы.

Для определения связанных состояний запишем условие стационарности на промежутке, который представляет собой барьер высотой u :

$$r_w^2 \exp(-2k_b d) = 1, \quad (1.181)$$

где r_w — амплитуда отражения от ямы,

$$r_w = -r_0 \frac{1 - \exp(2ik_w a)}{1 - r_0^2 \exp(2ik_w a)}, \quad r_0 = \frac{k_w - ik_b}{k_w + ik_b}, \quad k_b = \sqrt{u - k_w^2}. \quad (1.182)$$

Условие (1.181) эквивалентно выполнению равенства

$$e^{-k_b d} r_0 \frac{1 - \exp(2ik_w a)}{1 - r_0^2 \exp(2ik_w a)} = \pm 1, \quad (1.183)$$

или

$$r_0^2 \exp(2ik_w a) = \frac{1 \pm e^{-k_b d} r_0}{1 \pm e^{-k_b d} / r_0} = e^{-2i\gamma_{\pm}}, \quad (1.184)$$

где

$$\gamma_{\pm} = \operatorname{arctg} \left(\frac{\sin(2\phi_0)e^{-k_b d}}{1 \pm \cos(2\phi_0)e^{-k_b d}} \right). \quad (1.185)$$

Отсюда следует, что

$$k_w a - 2\phi_0 + \gamma_{\pm} = \pi n. \quad (1.186)$$

Обозначив k_n решение уравнения $k_w a - 2\phi_0 = \pi n$, а энергию связанных уровня $E_n = k_n^2$, величину расщепления можно приближенно представить как $\Delta k_n = (\gamma_+ + \gamma_-)/a$, а расстояние между расщепленными уровнями — как $\Delta E_n = 2k_n \Delta k_n$.

1.10 Потенциалы общего вида

До сих пор, когда речь шла о конкретных примерах, мы использовали простые прямоугольные потенциалы или потенциалы типа Кроннига–Пенни. В реальной жизни могут встречаться и более сложные потенциалы. В частности, при исследовании экспериментально измеренной кривой отражения, показанной на рис. 1.7, было ясно, что прямоугольными потенциалами описать ее невозможно. Поэтому было решено воспользоваться потенциалами с размытыми границами. На рис. 1.30 представлен пример такого потенциала, описывающего пленку на подложке. Границы у пленки размыты с обеих сторон, причем ширина размытия разная. Размытие границ может происходить из-за наличия на поверхности шероховатостей, неоднородностей, окислений или загрязнений. Для описания размытого края можно использовать, например, гауссову, или экспоненциальную функцию.

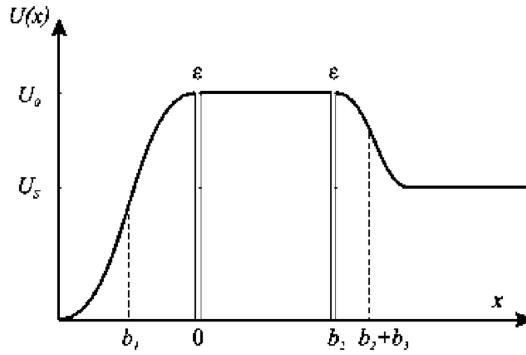


Рис. 1.30: Пленку с размытыми границами, нанесенную на подложку, можно описать тремя потенциалами: прямоугольным для самой пленки и двумя потенциалами Эккарта, описывающими размытие краев

1.10.1 Аналитическое описание отражения от комбинации прямоугольного потенциала и потенциалов Эккарта

Однако удобнее всего использовать потенциалы, для которых решение уравнения Шредингера можно представить в аналитическом виде. Примером может служить изображенный на рис. 1.31 потенциал Эккарта

$$u = \frac{u_0}{1 + \exp(-x/\sigma)},$$

который представляет собой ступеньку высоты u_0 с плавным краем ширины σ . Чтобы найти отражение от потенциала, показанного на рис. 1.30, его разбивают на три части [14].

Средняя часть представляет собой прямоугольный потенциал высоты u_0 и ширины b_2 . Отражение r_2 и пропускание t_2 для такого потенциала рассмотрено в разделе 1.1.3.

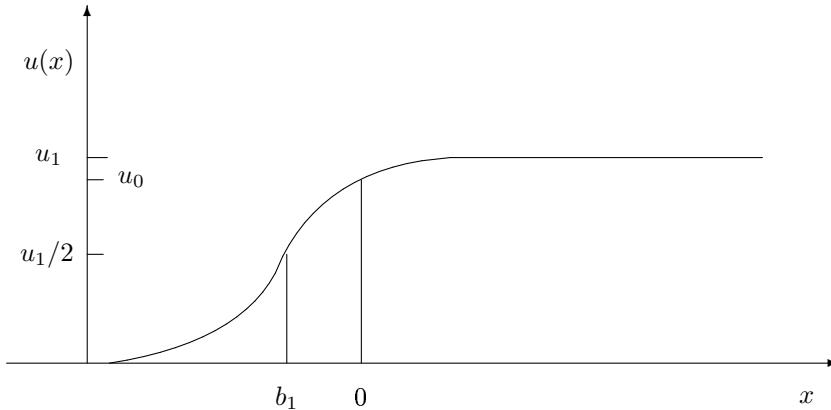


Рис. 1.31: Потенциал Эккарта (1.189)

Если мы найдем амплитуды отражения \vec{r}_1 , \vec{r}_1 и t_1 для левой части потенциала, а также \vec{r}_3 для правой части, то полной амплитудой отражения слева R_{123} для всего потенциала будет

$$R_{123} = \vec{r}_1 + \frac{t_1^2 R_{23}}{1 - \vec{r}_1 R_{23}}, \quad (1.187)$$

где

$$R_{23} = r_2 + \frac{t_2^2 \vec{r}_3}{1 - r_2 \vec{r}_3} \quad (1.188)$$

— амплитуда отражения от двух частей 2 и 3 слева.

Покажем, как рассчитываются амплитуды \vec{r}_1 , \vec{r}_1 и t_1 для левой части потенциала. При этом мы только изложим идею, не вдаваясь в подробности, которые можно найти в работе [14].

Левая часть потенциала показана на рис. 1.32. Это потенциал Эккарта (рис. 1.31), представленный в виде

$$u(x) = \frac{u_1}{1 + \exp(-(x - b_1)/\sigma)}. \quad (1.189)$$

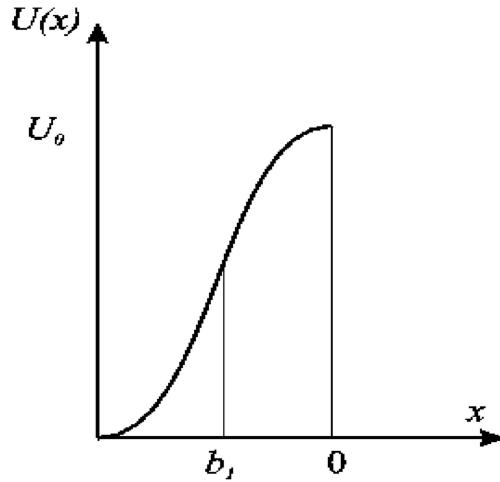


Рис. 1.32: Левая часть потенциала, показанного на рис. 1.30

Он возрастает от 0 при $x \rightarrow -\infty$ до u_1 при $x \rightarrow +\infty$. При $x = b_1$ потенциал равен $u_1/2$. Ширина переходной области от 0 до u_1 равна 2σ . Выберем u_1 так, чтобы при $x = 0$

высота потенциала была равна u_0 . Это означает, что $u_1/[1 + \exp(a/\sigma)] = u_0$, или $u_1 = [1 + \exp(a/\sigma)]u_0$.

Аналитические решения уравнения Шредингера с потенциалом (1.189) известны [28]. Выберем решение $\psi_1(x)$, которое при $x \rightarrow -\infty$ имеет асимптотику $\psi_1(x) \rightarrow \exp(ikx)$. Второе, линейно независимое по отношению к нему, решение представляется комплексно сопряженной функцией $\psi_1^*(x)$. Его асимптотикой при $x \rightarrow -\infty$ будет $\psi_1^*(x) \rightarrow \exp(-ikx)$.

Отрежем от потенциала на рис. 1.31 все, что находится справа от точки $x = 0$, т. е. положим его равным нулю при $x > 0$. В результате получится потенциал, показанный на рис. 1.32. Будем искать решение при $x < 0$ в виде $\psi_1(x) + \vec{r}_1 \psi_1^*(x)$, а при $x > 0$ — в виде $t_1 \exp(ikx)$. Сшивая эти решения при $x = 0$, находим \vec{r}_1 и t_1 .

Для того чтобы найти \vec{r}_1 , ищем при $x < 0$ решение в виде $t_1 \psi_1^*(x)$, а при $x > 0$ — в виде $\exp(-ikx) + \vec{r}_1 \exp(ikx)$. Сшивая решения при $x = 0$, находим \vec{r}_1 .

Аналогичным образом находим отражение от правого потенциала. Подгоняя результирующий коэффициент отражения $|R_{123}|^2$ к экспериментальной кривой, находим параметры задачи: высоты потенциалов пленки u_0 и подложки u_s , величину размытия σ_1, σ_2 левого и правого краев пленки, а также параметры b_1 и b_2 , которые характеризуют плавность перехода средней части потенциала u_0 на (рис. 1.30) в потенциалы Эккарта с двух сторон. Эти параметры определяют скачок первой производной в точках сшивки потенциала.

Теоретическая зависимость коэффициента отражения от скорости нейтрона k , полученная таким способом подгонки, представлена на рис. 1.7 сплошной кривой. Разумеется, если у нас есть три области, в которых решение известно, то эти решения можно спить на трех границах, не прибегая к расщеплению потенциала. Расщепление полезно тогда, когда оно упрощает алгоритм вычисления отражения или пропускания для всего потенциала.

Отметим одну особенность полного отражения от размытой границы. Поскольку при $k^2 < u_0$ отражение фактически происходит от потенциала Эккарта и асимптотически при $x \rightarrow \infty$ потенциал Эккарта выше u_0 , фаза отраженной волны размытого потенциала формируется так, как если бы отражение происходило не от потенциала u_0 , а от более высокого. Однако с приближением k^2 к u_0 высота более высокого эффективного потенциала понижается до уровня u_0 , а при дальнейшем росте $k^2 > u_0$ отражение происходит так, как если бы эффективный потенциал был ниже u_0 .

1.10.2 Метод непрерывных дробей

Известно, что площадь под любой кривой можно приближенно представить суммой прямоугольников, и это представление тем точнее, чем меньше ширина Δ прямоугольников. Предельным переходом $\Delta \rightarrow 0$ определяется интеграл. Для вычисления амплитуд отражения и пропускания произвольным потенциалом также можно воспользоваться подобным приемом [29]. Для этого разобьем потенциал на n частей, как показано на рис. 1.33. Перенумеруем границы от 1 до n слева направо. Обозначим амплитуды отражения и пропускания одним прямоугольным потенциалом правее k -й границы через r_k и t_k соответственно, а амплитуды отражения и пропускания всех прямоугольников правее k -й границы через R_k и T_k соответственно. Амплитуду отражения R_1 можно преобразовать к виду

$$R_1 = r_1 + \frac{t_1^2 R_2}{1 - r_1 R_2} = r_1 - \frac{t_1^2}{r_1 - 1/R_2}.$$

Подставив сюда аналогичное выражение для R_2 , получим непрерывную дробь

$$R_1 = r_1 + \frac{t_1^2 R_2}{1 - R_2 r_1} = r_1 - \frac{t_1^2}{r_1 - \frac{1}{R_2}} = r_1 - \frac{t_1^2}{r_1 - \frac{1}{r_2 - \frac{t_2^2}{r_2 - \frac{1}{R_3}}}} =$$

$$= r_1 - \frac{t_1^2}{r_1 - \frac{1}{r_2 - \frac{t_2^2}{r_2 - \frac{1}{r_3 - \frac{t_3^2}{r_3 - \frac{1}{R_4}}}}}}$$

Было бы интересно исследовать такие непрерывные дроби с целью найти аналитические решения для какого-то класса потенциалов. Подобные исследования пока не проводились.

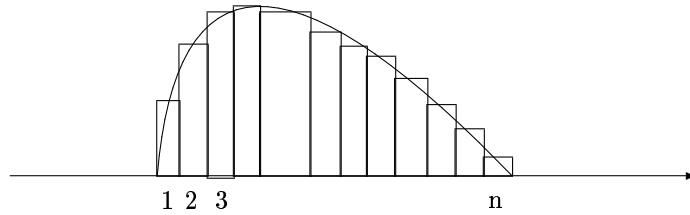


Рис. 1.33: Аппроксимация произвольного потенциала совокупностью прямоугольных

1.10.3 Матричный метод расчета рассеяния на произвольном потенциале

Аналитические методы всегда полезны для анализа и подгонки результатов эксперимента. Однако они бывают очень громоздкими, и тогда предпочтение отдается численным методам. Для численного расчета амплитуд отражения и пропускания, а также волновой функции внутри потенциала существует очень эффективный матричный метод [30], который мы сейчас и рассмотрим.

Снова разобьем произвольный потенциал на прямоугольники, но перенумеруем границы так, как показано на рис. 1.34, и будем прямоугольнику слева от j -й границы приписывать номер j . Внутри прямоугольника с номером j волновая функция равна

$$\psi_j(x) = A_j \exp(ik_j(x - x_{j+1})) + B_j \exp(-ik_j(x - x_{j+1})), \quad (1.190)$$

где x_j — координата j -й границы, $k_j = \sqrt{k_0^2 - u_j}$, u_j — потенциал j -го прямоугольника.

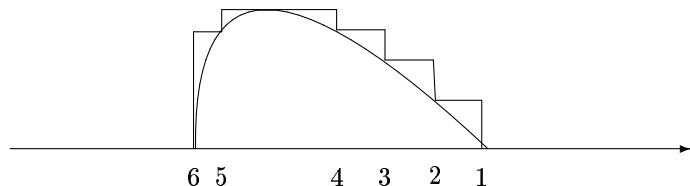


Рис. 1.34: Разбиение произвольного потенциала для расчета матричным методом. Здесь для конкретности представлено разбиение на шесть прямоугольных потенциалов

Положим, что справа от 1-й границы и слева от 6-й границы волновые функции имеют такой же вид, как (1.190):

$$\psi_0(x) = A_0 \exp(ik_0(x - x_1)) + B_0 \exp(-ik_0(x - x_1)), \quad (1.191)$$

$$\psi_6(x) = A_6 \exp(ik_6x) + B_6 \exp(-ik_6x), \quad (1.192)$$

причем $k_6 = k_0$, и мы приняли, что $x_6 = 0$. Позднее, когда нужно будет найти амплитуды отражения и пропускания, мы учтем, что $A_6 = 1$, $B_6 = r$, $A_0 = t$ и $B_0 = 0$.

Начнем последовательно сшивать волновые функции на каждой границе, начиная с первой. Требование непрерывности функций и их производных приводит к уравнениям:

$$\begin{aligned} A_1 \exp(ik_1 d_1) + B_1 \exp(-ik_1 d_1) &= A_0 + B_0, \\ ik_1 [A_1 \exp(ik_1 d_1) - B_1 \exp(-ik_1 d_1)] &= ik_0 [A_0 - B_0], \end{aligned} \quad (1.193)$$

где d_j — ширина j -го прямоугольника. Из (1.193) можно выразить A_1 и B_1 через A_0 и B_0 :

$$A_1 = \exp(-ik_1 d_1) \left[\left(1 + \frac{k_0}{k_1}\right) A_0 + \left(1 - \frac{k_0}{k_1}\right) B_0 \right] \frac{1}{2}, \quad (1.194)$$

$$B_1 = \exp(ik_1 d_1) \left[\left(1 - \frac{k_0}{k_1}\right) A_0 + \left(1 + \frac{k_0}{k_1}\right) B_0 \right] \frac{1}{2}. \quad (1.195)$$

Соотношения (1.194), (1.195) удобно записать в матричном виде

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M^{(1,0)} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (1.196)$$

где матрица $M^{(1,0)}$ представляется в виде произведения двух матриц: $M^{(1,0)} = E^{(1)} K^{(1,0)}$, равных соответственно

$$E^{(1)} = \begin{pmatrix} \exp(-ik_1 d_1) & 0 \\ 0 & \exp(ik_1 d_1) \end{pmatrix}, \quad K^{(1,0)} = \frac{1}{2k_1} \begin{pmatrix} k_1 + k_0 & k_1 - k_0 \\ k_1 - k_0 & k_1 + k_0 \end{pmatrix}. \quad (1.197)$$

Ясно, что сшивка на всех последующих границах приводит к аналогичным матрицам, поэтому сразу можно записать:

$$\begin{pmatrix} A_6 \\ B_6 \end{pmatrix} = M^{(6,0)} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = K^{(6,5)} \prod_{j=1}^5 E^{(j)} K^{(j,j-1)} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}. \quad (1.198)$$

Вспомним теперь, чему равны $A_{6,0}$ и $B_{6,0}$, и получим соотношение

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = M^{(6,0)} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11}^{(6,0)} & M_{12}^{(6,0)} \\ M_{21}^{(6,0)} & M_{22}^{(6,0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.199)$$

которое эквивалентно решению

$$1 = M_{11}^{(6,0)} t, \quad r = M_{21}^{(6,0)} t \quad (1.200)$$

или

$$t = \frac{1}{M_{11}^{(6,0)}}, \quad r = \frac{M_{21}^{(6,0)}}{M_{11}^{(6,0)}}. \quad (1.201)$$

Таким образом, алгоритмически очень удобно, получив произведение всех матриц, сразу найти амплитуды отражения и пропускания в численном виде.

Найдя численные значения r и t при различных k , можно затем аппроксимировать их какой-нибудь аналитической функцией. При этом необходимо позаботиться о том, чтобы выполнялось условие унитарности и соотношение между фазами.

1.10.4 Теория возмущений

В большинстве случаев, однако, можно пользоваться теорией возмущений. Запишем уравнение Шредингера для произвольного потенциала

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 - u(x) \right) \psi(x) = 0 \quad (1.202)$$

и представим его решение в виде

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int G(x - x') u(x') \psi(x') dx', \quad (1.203)$$

где $\psi_0(x)$ — решение свободного уравнения, которое представляет собой падающую плоскую волну, а $G(x - x')$ — функция Грина, удовлетворяющая уравнению

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) G(x) = \delta(x). \quad (1.204)$$

Действительно, подставив (1.203) в (1.202) и учитывая (1.204), убеждаемся, что это решение удовлетворяет уравнению (1.202).

Покажем, как решать уравнение (1.204). Запишем функцию Грина в виде интеграла Фурье:

$$G(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(p) e^{ipx} dp. \quad (1.205)$$

Подставим ее в (1.204) и, произведя преобразование Фурье обеих частей уравнения, получим

$$(-p^2 + k^2) G(p) = 1, \quad (1.206)$$

откуда следует, что

$$G(p) = -\frac{1}{p^2 - k^2}. \quad (1.207)$$

Функция (1.207) содержит два полюса при $p = k$ и $p = -k$, поэтому интеграл (1.205) при подстановке в него (1.207) не имеет смысла, если не задать правил обхода полюсов. Правила обхода задаются однозначно, если к знаменателю в (1.207) добавить мнимое слагаемое $-i\varepsilon$ с положительным бесконечно малым ε . Знак «минус» приводит к причинной функции Грина. Это означает, что если на пути падающей волны встречается возмущение, то в решении, содержащем причинную функцию Грина, мы получим волны, уходящие от этого возмущения. Если же в знаменатель (1.207) добавить $+i\varepsilon$, то возмущение будет порождать волны, идущие по направлению к нему.

Итак, функция Грина представляется в виде

$$G(x) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp \exp(ipx)}{p^2 - k^2 - i\varepsilon}. \quad (1.208)$$

При положительных x контур интегрирования можно дополнить полуокружностью в верхней полуплоскости комплексной переменной p , а при отрицательных x — в нижней. Подынтегральное выражение содержит два полюса:

$$\frac{1}{p^2 - k^2 - i\varepsilon} = \frac{1}{2k} \left(\frac{1}{p - k - i\varepsilon} - \frac{1}{p + k + i\varepsilon} \right).$$

Один из них попадает внутрь контура интегрирования, и вычет в нем приводит к результату

$$G(x) = -\frac{i}{2k} \exp(ik|x|). \quad (1.209)$$

Подставив (1.209) в (1.203) и заменив $\psi(x')$ под интегралом на $\psi_0(x) = \exp(ikx)$, получим в области $x \rightarrow -\infty$ решение в виде

$$\psi(x) = \exp(ikx) - \frac{i}{2k} \exp(-ikx) \int_0^a u(x') \exp(2ikx') dx' \equiv \exp(ikx) - r(k) \exp(-ikx). \quad (1.210)$$

В области $x \rightarrow +\infty$ решением будет

$$\psi(x) = \exp(ika) \left(1 - \frac{i}{2k} \int_0^a u(x') dx' \right) \exp(ik[x-a]) \equiv t(k) \exp(ik[x-a]), \quad (1.211)$$

где мы приняли, что потенциал отличен от нуля только в интервале $0 \leq x \leq a$.

В качестве примера рассмотрим потенциал Кроннига–Пенни $2\rho\delta(x)$. Подстановка его в выражения (1.210), (1.211) приводит к амплитудам отражения и пропускания

$$r = \frac{-ip}{k}, \quad t = 1 - \frac{ip}{k}. \quad (1.212)$$

Эти амплитуды легко подправить до точных, потребовав, чтобы при $p \rightarrow \infty$ амплитуда r обращалась в единицу. Для этого нужно k в знаменателе заменить на $k + ip$. При малых p/k это эквивалентно поправке второго порядка $(p/k)^2$.

В случае прямоугольного барьера высоты u и ширины d , подстановка в (1.210), (1.211) приводит к амплитудам отражения и пропускания

$$r = \frac{u}{4k^2} (1 - e^{2ika}), \quad t = \exp(ika) \left(1 - i \frac{ua}{2k} \right).$$

Сравнение с точной формулой для отражения от прямоугольного барьера показывает, что, вычисляя решение по теории возмущения, мы пренебрегаем многократными переотражениями и изменением волнового вектора внутри барьера. Кроме того, амплитуда отражения от прямоугольной ступеньки заменяется приближенной формулой, справедливой при $k^2 \gg u$. Амплитуда пропускания в этом случае может быть представлена в виде

$$t = \exp(ika) \left(1 - i \frac{ua}{2k} \right) \approx \exp(ia(k - u/2k)) \approx \exp(ia\sqrt{k^2 - u}),$$

т. е. пропускание не отличается от единицы, но характеризуется измененным волновым вектором внутри барьера.

Мы видим, что амплитуды, полученные по теории возмущений, не удовлетворяют условию унитарности и разность фаз в решениях $r(k)$ и $t(k)$ не равна $\pm\pi/2$. При желании эти недостатки можно исправить, но для получения отражения R от периодической системы этого не требуется. Достаточно воспользоваться формулой (1.78), содержащей только r . Это эквивалентно подстановке в формулу (1.75) исправленных амплитуд t . Точно так же можно воспользоваться лишь амплитудой r при вычислении блоховского фазового множителя. Для этого нужно в выражение (1.77) подставить $|t| = \sqrt{1 - |r|^2}$ и $\cos \phi$ заменить на $\sin \phi$.

1.10.5 Отражение от зеркал при наличии внешнего поля

До сих пор мы рассматривали задачи, когда вне зеркал было пустое пространство и волновая функция имела вид плоской волны. Теперь рассмотрим общий случай, когда внешнее

поле искажает волновую функцию, и ее уже нельзя считать плоской волной [31]. Примером может служить гравитационное поле, когда, исследуется вертикальное движение или трехмерное движение, если выделяется радиальная составляющая (см. также [32–34]). Здесь мы изложим лишь идеи и не будем рассматривать конкретные примеры.

Уравнение Шредингера при наличии внешнего поля и зеркал имеет вид

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + k^2 - F(z) - v(z) \right) \Psi(z) = 0, \quad (1.213)$$

где $F(z)$ — внешнее поле, а $v(z)$ — потенциал, описывающий зеркала.

Представим себе для определенности, что поле — гравитационное: $F(z) = mgz$. Если зеркала отсутствуют, то волновая функция (будем обозначать ее $f(z, k)$) описывает движение, ограниченное при $z > 0$ (максимальную точку подъема, или точку поворота, обозначим $z_m(k)$) и неограниченное при $z < 0$. Функция $f(z, k)$ убывает при $z \rightarrow \infty$. Однако уравнение (1.213) имеет и другое решение (обозначим это решение $g(z, k)$), которое расходится при $z \rightarrow \infty$. При $z \rightarrow +\infty$ это решение лишено физического смысла, и его нужно отбрасывать, но при наличии зеркал оно нам необходимо.

Рассмотрим, например, горизонтальное полубесконечное зеркало с потенциалом $u_0\Theta(z > 0)$. Решение уравнения (1.213) с частицей, падающей на зеркало снизу, будем искать в виде

$$\Psi(z) = \Theta(z < 0) \left(\frac{f(z, k)}{f(0, k)} + \overrightarrow{r} \frac{g(z, k)}{g(0, k)} \right) + \Theta(z > 0) \overrightarrow{t} \frac{f(z, k')}{f(0, k')}, \quad (1.214)$$

где $k' = \sqrt{k^2 - u_0}$. Условия непрерывности функции и ее производной на границе раздела приводят к уравнениям

$$1 + \overrightarrow{r} = \overrightarrow{t}, \quad \frac{f'(z, k)}{f(0, k)} + \overrightarrow{r} \frac{g'(z, k)}{g(0, k)} = \overrightarrow{t} \frac{f'(z, k')}{f(0, k')}, \quad (1.215)$$

где штрих означает производную по переменной z . Из этих уравнений определяются амплитуды «отражения» r и «преломления» t .

Если у нас имеются два зеркала, разнесенных на расстояние l , и нам известны амплитуды r_i, t_i ($i = 1, 2$) для этих зеркал, то, действуя теми же методами, что и в разделе 1.4, определим волну, падающую на первое зеркало, как $f(z, k)/f(0, k)$, волну, падающую на второе зеркало, обозначим X и составим для X и амплитуд отражения r_{12} и пропускания t_{12} уравнения

$$\begin{aligned} X &= \overrightarrow{t} \frac{f(l+a, k)}{f(a, k)} + \frac{f(l+a, k)}{f(a, k)} \overrightarrow{r}_1 \frac{g(a, k)}{g(a+l, k)} \overrightarrow{r}_2 X, \\ \overrightarrow{r}_{12} &= \overrightarrow{r}_1 + \overrightarrow{t}_1 \frac{g(a, k)}{g(a+l, k)} \overrightarrow{r}_2 X, \quad \overrightarrow{t}_{12} = X \overrightarrow{t}_2 \end{aligned} \quad (1.216)$$

Здесь a — точка, где потенциал $v_1(z)$ обращается в нуль. Решение этих уравнений дает все интересующие нас амплитуды. Обратим внимание, что при наличии внешнего поля амплитуды пропускания в двух направлениях неодинаковы.

Изложенный подход к описанию отражения от полупрозрачных зеркал во внешнем поле может быть использован для исследования подбарьерного отражения и пропускания плавными потенциалами, когда можно применять квазиклассическое приближение, или точное решение до и после точек поворота, а точками отражения ($x = a$ и $x = b$ на рис. 1.35 соответственно) считать точки поворота (см. [28, гл. VII]).

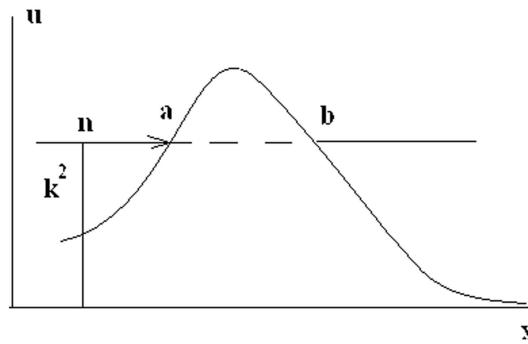


Рис. 1.35: Квазиклассическое описание отражения и пропускания. В точках поворота a и b имеем $k^2 = u(a) = u(b)$

1.11 Смещение Гооса–Хенхен

Мы закончим эту главу исследованием нейтронного эффекта, аналогичного оптическому эффекту смещения Гооса–Хенхен (ГХ). Смещение ГХ — это небольшое перемещение излучения вдоль поверхности при полном отражении. Если падающее излучение представлено лучом, то точка A падения луча на поверхность отличается от точки B выхода луча после отражения. При отражении луч как бы ныряет под поверхность (рис. 1.36). О существовании такого смещения догадывался еще Ньютона, но первыми его измерили в 1947 г. Ф. Гоос и Х. Хенхен [35, 36].

Метод измерения смещения ГХ схематически изображен показан на рис. 1.37. Узкая

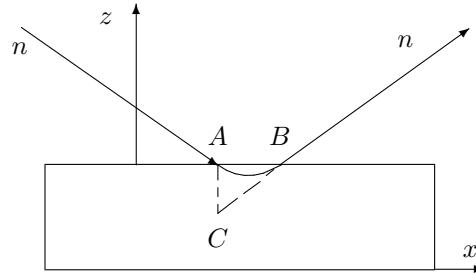


Рис. 1.36: Смещение Гооса–Хенхен

полоска света шириной 0.3 мм пропускается слева через скос внутрь тонкой ($0.5 \div 1$ мм) стеклянной пластинки (нижняя часть рисунка, вид спереди), на нижней стороне которой, вдоль осевой линии пластиинки, напылена полоска серебра толщиной 50 мкм (верхняя часть рисунка, вид снизу). В некоторых случаях такая же полоска серебра напылялась и на верхнюю поверхность пластиинки. Часть светового пучка, которая попадает на стекло, испытывает полное внутреннее отражение (луч a), а часть, попадающая на серебро (луч b), — металлическое отражение. При металлическом отражении свет из-за сильно-го поглощения проникает в серебро на глубину нескольких мкм и потому испытывает очень малый сдвиг ГХ. При полном же отражении он проникает в вакуум на глубину до 1000 мкм и испытывает сильное смещение ГХ. Свет, вышедший из пластиинки через правый скос, попадает на фотопластиинку. На фотоснимке световой луч (штрих) расщепляется (рис. 1.37, справа). Измерив полное расщепление G светового штриха, и зная полное число отражений внутри пластиинки Z , можно было найти смещение ГХ $D = G/Z$ при однократном отражении. Величина D зависит от угла падения θ и длины световой волны λ . Чем ближе θ к критическому углу полного отражения θ_0 , тем больше D . В эксперименте было найдено, что при $\theta - \theta_0 \approx 3^\circ$ смещение D составляло примерно 0.6 мкм, а при $\theta - \theta_0 \approx 0.20'$ оно увеличивалось до 3 мкм. Смещение ГХ должно зависеть от длины волны, и это тоже

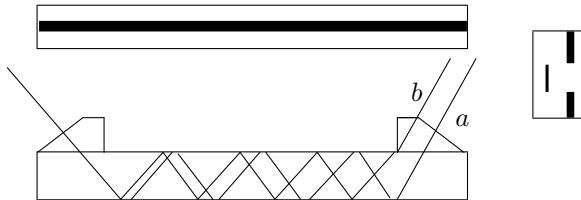


Рис. 1.37: Эксперимент Гооса и Хенхен по определению смещения света при полном внутреннем отражении

было подтверждено экспериментом.

Посмотрим теперь, как рассчитывается смещение ГХ в нейтронной оптике.

1.11.1 Плоская волна

Если мы имеем дело с плоской падающей волной

$$\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega t),$$

где $\mathbf{k}_0 = (\mathbf{k}_{||}, -k_z)$, $\mathbf{k}_{||}$ — компоненты волнового вектора, параллельные границе раздела, $\omega = k_0^2/2$ (здесь удобнее выбрать систему единиц, в которой $\hbar = m = 1$), то отраженную волну можно представить в виде

$$R \exp(ik_z z + i\mathbf{k}_{||}\mathbf{r}_{||} - i\omega t) = |R| \exp(-2i\phi(k_z) + ik_z z + i\mathbf{k}_{||}\mathbf{r}_{||} - i\omega t),$$

где амплитуда $R = |R| \exp(-2i\phi)$, причем ϕ зависит только от нормальной компоненты k_z волнового вектора падающей плоской волны.

При отсутствии потерь, т. е. когда потенциал u отражающей среды действителен, фаза $\phi = 0$ при $k_z^2 > u$ и $\phi = \arccos(k_z/\sqrt{u})$ при $k_z^2 < u$. В случае плоской волны фазу ϕ можно интерпретировать троеким образом: как сдвиг вдоль границы раздела ($2\phi = \zeta_{||} k_{||}$), перпендикулярно границе раздела ($2\phi = \zeta_z k_z$) или как сдвиг во времени ($2\phi = \omega\tau$). Однако в любом случае фаза $-2\phi + k_z z + \mathbf{k}_{||}\mathbf{r}_{||} - \omega t$ отраженной волны $|R| \exp(-2i\phi + ik_z z + i\mathbf{k}_{||}\mathbf{r}_{||} - i\omega t)$ равна фазе $k_z z + \mathbf{k}_{||}\mathbf{r}_{||} - \omega t$ падающей волны в точках $r_{||}$ вдоль границы раздела, смещенных на расстояние $\delta r_{||} = 2\phi/k_{||}$. Это и есть сдвиг ГХ. Конечно, в случае бесконечно протяженной плоской волны говорить о смещении нет смысла. Правильнее говорить просто о сдвиге фазы. О смещении ГХ можно говорить только при ограниченных в пространстве волновых функциях.

1.11.2 Ограниченнная волновая функция

Пусть стационарная волновая функция локализована гауссовой экспонентой в окрестности луча, и луч пересекает границу раздела в точке $\mathbf{r} = 0$. Следом пересечения волновой функции с границей раздела будет пятно эллиптической формы [37]

$$\psi(\mathbf{r}_{||}, z = 0, t) = \exp\left(-w^2 \left[\frac{x^2 \cos^2 \theta}{2} + \frac{y^2}{2}\right]\right) \exp(ik_x x - i\omega t), \quad (1.217)$$

где $\mathbf{r}_{||} = (x, y)$ — координаты, параллельные границе раздела, причем x — координата в плоскости падения, совпадающей с плоскостью рис. 1.36; y перпендикулярна плоскости падения; $\omega = k^2/2 = (k_x^2 + k_z^2)/2$, w определяет радиус луча $1/w$, или его половинную ширину, перпендикулярно плоскости падения; $\cos \theta = k_z/k \equiv \sqrt{k^2 - k_x^2}/k$ (θ — эффективный угол падения).

Центр пятна находится в точке максимума $\mathbf{r}_{||} = (0, 0)$, совпадающей с началом координат, и задача состоит в том, чтобы найти след отраженной волновой функции и положение

его центра. Смещение этого центра вдоль границы раздела относительно начала координат и будет смещением ГХ.

Найдем след отраженной функции. Для этого нужно по следу (1.217) найти всю волновую функцию падающей частицы. Это можно сделать, представив (1.217) в виде интеграла Фурье

$$\psi_0(\mathbf{r}_\parallel, z=0, t) = \frac{1}{2\pi w^2 \cos \theta} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 q_\parallel \exp \left(-\frac{(q_x - k_x)^2}{2w^2 \cos^2 \theta} - \frac{q_y^2}{2w^2} \right) \exp(i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{r}_\parallel - i\omega t) \quad (1.218)$$

и умножив подынтегральное выражение на $\exp(-iq_z z)$:

$$\psi_0(x, z, t) = \frac{1}{2\pi w^2 \cos \theta} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 q_\parallel \exp \left(-\frac{(q_x - k_x)^2}{2w^2 \cos^2 \theta} - \frac{q_y^2}{w^2} \right) \exp(i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{r}_\parallel - iq_z z - i\omega t), \quad (1.219)$$

причем q_z должно быть таким, чтобы функция (1.219) удовлетворяла уравнению Шредингера для свободной частицы. Последнее возможно, если $\mathbf{q}_\parallel^2 + q_z^2 = 2\omega = k^2$, и отсюда следует, что $q_z = \sqrt{k^2 - q_\parallel^2}$.

Таким образом, падающая волна представляет собой суперпозицию плоских волн, отражение которых от границы раздела известно. Суперпозиция отраженных плоских волн описывается волновой функцией

$$\psi_0(x, z, t) = \frac{1}{2\pi w^2 \cos \theta} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 q_\parallel \exp \left(-\frac{(q_x - k_x)^2}{2w^2 \cos^2 \theta} - \frac{q_y^2}{w^2} \right) R(q_z) \exp(i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{r}_\parallel + iq_z z - i\omega t), \quad (1.220)$$

где $R(q_z)$ — амплитуда отражения плоской волны $\exp(i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{r}_\parallel - iq_z z)$ от поверхности раздела. Она совпадает с \vec{r}_0' из (1.8):

$$R(q_z) = \frac{q_z - q'_z}{q_z + q'_z} = \exp(-2\chi), \quad (1.221)$$

где $\chi = \text{arcsh}(q'_z/\sqrt{u})$, а $q'_z = \sqrt{q_z^2 - u}$. Амплитуда отражения зависит от q_z , однако, поскольку q_z не является независимой переменной, а зависит от \mathbf{q}_\parallel , то и амплитуда должна быть функцией $q = |\mathbf{q}_\parallel|$: $R(q_z) = \exp(-2\chi(q))$, где

$$\chi(q) = \text{arcsh}(\sqrt{k^2 - q^2 - u}/\sqrt{u}).$$

Рассмотрим случай малых w , т. е. больших размеров $1/w$ следа волновой функции на границе раздела. Интеграл (1.220) в этом случае может быть вычислен асимптотически. Для этого разложим 2χ вокруг точки максимума $\mathbf{q} = \mathbf{k}_\parallel = (k_x, 0)$ гауссовой функции, ограничившись линейным членом: $2\chi(q) = 2\chi_0 - (\mathbf{q} - \mathbf{k}_\parallel)\xi$, где $\chi_0 = \text{arcsh}(k'_z/\sqrt{u})$, $\xi = (\xi_x, 0)$,

$$\xi_x = -2 \frac{d}{dq_x} \chi(q)|_{\mathbf{q}=\mathbf{k}_\parallel} = \frac{2k_x}{k_z k'_z}.$$

1.11.3 Полное отражение

Отметим, что при $k_z^2 < u$, когда имеет место полное отражение, число k'_z , а вместе с ним и ξ_x , становятся мнимыми: $k'_z = ik''_z = i\sqrt{u - k_z^2}$, $\xi_x = -i\xi_x = -2ik_x/k_z k''_z$. Подставив эти величины в интеграл (1.220), приведем его к виду

$$\psi_0(x, z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R(k_z) d^2 q_\parallel}{2\pi w^2 \cos \theta} \exp \left(-\frac{(q_x - k_x)^2}{2w^2 \cos^2 \theta} - \frac{q_y^2}{w^2} \right) \exp(i\mathbf{q}_\parallel \mathbf{r}_\parallel - i(q_x - k_x)\bar{\xi} + iq_z z - i\omega t). \quad (1.222)$$

Проинтегрировав правую часть по d^2q_{\parallel} в точке $z = 0$, получим выражение для следа отраженной волновой функции:

$$\psi(\mathbf{r}_{\parallel}, z = 0, t) = R(k_z) \exp \left(-w^2 \left[\frac{(x - \bar{\xi})^2 \cos^2 \theta}{2} + \frac{y^2}{2} \right] \right) \exp(ik_x x - i\omega t), \quad (1.223)$$

из которого видно, что центр следа сместился в направлении x по отношению к центру следа падающей функции на величину $\bar{\xi} = 2k_x/k_z k_z''$, и смещение тем больше, чем меньше k_z'' , т. е. чем ближе k_z к граничному импульсу $k_c = \sqrt{u}$.

Отражение при этом оказывается точно зеркальным, а фаза $k_x x$ тождественна фазе падающей волны, т. е. не содержит поправки $k_x \bar{\xi}_x$, как того можно было ожидать для смещенного следа волновой функции на границе раздела.

1.11.4 Неполное отражение

При $k_z^2 > u$ след отраженной волновой функции на границе раздела сред, согласно (1.220), описывается функцией

$$\psi_0(x, z = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R(k_z) d^2q_{\parallel}}{2\pi w^2 \cos \theta} \exp \left(-\frac{(q_x - k_x)^2}{2w^2 \cos^2 \theta} - \frac{q_y^2}{w^2} \right) \exp(i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel} + (q_x - k_x)\xi_x), \quad (1.224)$$

где для простоты опущен временной множитель $\exp(-i\omega t)$. После интегрирования по d^2q_{\parallel} получаем

$$\psi_0(x, z = 0) = R(k_z) \exp(\xi_x^2 w^2 \cos^2 \theta / 2) \exp \left(-\frac{w^2}{2} [x^2 \cos^2 \theta + y^2] \right) \exp(i(k_x + \xi w^2 \cos^2 \theta)x). \quad (1.225)$$

Видно, что никакого смещения ГХ в этом случае нет, поскольку центр следа отраженной волновой функции совпадает, как и у падающей, с началом координат, но зато отражение теперь не совсем зеркальное, и амплитуда отражения несколько превышает амплитуду зеркального отражения. Параллельная границе раздела компонента волнового вектора k_x увеличивается на $2\xi w^2 \cos^2 \theta$, и соответственно уменьшается нормальная компонента k_z . Таким образом, отраженный луч распространяется не под зеркальным углом, а отклоняется в сторону отражающей поверхности.

Выше мы ограничились линейным разложением показателя экспоненты χ из (1.221). Если бы мы продолжили разложение до квадратичного члена, то нашли бы и уширение следа волновой функции после отражения.

Разложение $2\chi(q)$ справедливо при $|k'_z| \gg w$, а при $k'_z = 0$ оно теряет смысл, поскольку ξ_x в этой точке расходится. Вблизи этой точки показатель χ можно аппроксимировать выражением $\chi(q) = \sqrt{q^2 - 2q_x k_x}$. Полученный интеграл вычисляется методом быстрейшего спуска. След волновой функции оказывается сильно деформированным, а отражение — незеркальным. Этот случай мы рассмотрим отдельно, когда станет ясно, что с помощью нейтронной рефлектометрии действительно можно анализировать свойства волновой функции отраженных частиц.

1.11.5 Смещение ГХ при отражении от слоя на подложке

Смещение при полном отражении происходит в плоскости отражения и по величине значительно меньше протяженности следа в том же направлении. Действительно,

$$\bar{\xi}_x = \frac{2k_x}{k_z k_z''} \ll \frac{2k_x}{k_z w} \approx \frac{2}{w \cos \theta}.$$

Интересно выяснить, нельзя ли получить значительно больший сдвиг, если изменить свойства зеркала.

Пусть зеркало состоит из пленки с низким потенциалом, напыленной на подложку с высоким потенциалом. Тогда, как видно из рис. 1.38, смещение луча вдоль поверхности пленки при полном отражении от подложки может быть довольно большим.

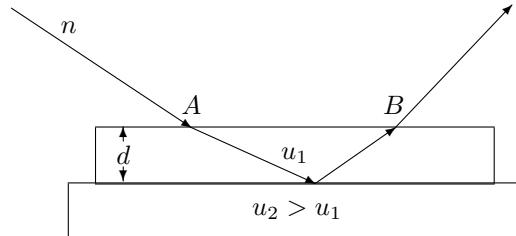


Рис. 1.38: Отражение от пленки толщины d с потенциалом u_1 , напыленной на полностью отражающую подложку с потенциалом u_2 . При достаточной толщине пленки смещение AB может быть сколь угодно большим

Проанализируем выражение (1.220) с амплитудой отражения

$$R(q_z) = r_{01} + \frac{(1 - r_{01}^2)r_{12} \exp(2iq_{z1}d)}{1 - r_{10}r_{12} \exp(2iq_{z1}d)} = \frac{r_{01} + r_{12} \exp(2iq_{z1}d)}{1 - r_{10}r_{12} \exp(2iq_{z1}d)}, \quad (1.226)$$

где

$$r_{01} = -r_{10} = \frac{q_z - q_{z1}}{q_z + q_{z1}}, \quad r_{12} = \frac{q_{z1} - q_{z2}}{q_{z1} + q_{z2}}, \quad q_{z1,2} = \sqrt{q_z^2 - u_{1,2}^2}.$$

Нас интересует случай, когда $q_z^2 - u_1^2 \gg w^2$ и одновременно $u_2 - q_z^2 \gg w^2$. При этих условиях амплитуда отражения от подложки в отсутствие потерь будет единичным комплексным числом, а значит, и амплитуда (1.226) тоже должна быть единичным комплексным числом:

$$R(q_z) = \exp(2iq_{z1}d - 2i\phi_{12}) \frac{1 + r_{01} \exp(-2iq_{z1}d + 2i\phi_{12})}{1 + r_{01} \exp(2iq_{z1}d - 2i\phi_{12})} = \exp(2iq_{z1}d - 2i\phi_{12} - 2i\phi_{02}), \quad (1.227)$$

где $\phi_{12} = \arcsin(q'_{z2}/\sqrt{u_2 - u_1})$, $q'_{z2} = \sqrt{u_2 - q_z^2}$,

$$\phi_{02} = \arcsin \left(\frac{r_{01} \sin(2q_{z1}d - 2\phi_{12})}{\sqrt{1 + r_{01}^2 + 2r_{01} \cos(2q_{z1}d - 2\phi_{12})}} \right).$$

Разлагая фазу $2q_{z1}d - 2\phi_{12} - 2\phi_{02}$ из (1.227) по $\mathbf{q}_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel}$, где $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, 0)$ и ограничиваясь линейным приближением, получаем смещение

$$\bar{\xi}_x = \left[\frac{2k_x d}{k_{z1}} + \frac{2k_x}{k_{z1} k'_{z2}} \right] \frac{1 + r_{01} \cos(2q_{z1}d - 2\phi_{12})}{1 + 2r_{01} \cos(2q_{z1}d - 2\phi_{12}) + r_{01}^2}.$$

Главный вклад в него дает первое слагаемое в скобках, пропорциональное d . Общий множитель за скобками меняется при изменении длины волны падающего нейтрона в диапазоне от $1/(1 + r_{01})$ до $1/(1 - r_{01})$.

Заметим, что выражение (1.226) получено для плоских волн и содержит многократное (бесконечнократное) мгновенное переотражение плоских волн от двух границ раздела. Интересно, однако, проверить, действительно ли происходит интерференция всех волн, возникающих при многократных переотражениях, или интерференция возникает только при перекрытии следов волновых функций переотраженных частиц [38], а в случае отсутствия перекрытия прекращается и интерференция. Иными словами, не будет ли отражение при достаточной толщине пленки выглядеть, как некогерентное многократное отражение (рис. 1.39).

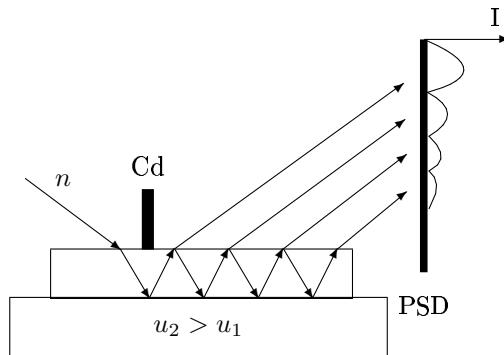


Рис. 1.39: Многократное переотражение от границ пленки достаточно большой толщины, когда следы переотраженных волновых функций не перекрываются, может быть представлено как некогерентное отражение. В этом случае распределение интенсивности на позиционно чувствительном детекторе PSD будет иметь вид дифрактограммы, каждый максимум которой соответствует месту выхода луча через внешнюю границу пленки после очередного переотражения от подложки

1.11.6 Смещение ГХ для волнового пакета

В предыдущем параграфе мы рассмотрели стационарную, но ограниченную в пространстве волновую функцию. Рассмотрим теперь случай волнового пакета. Это означает, что волновая функция теперь не стационарна, а ее Фурье-разложение представляется интегралом

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = \int a(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{qr} - i\omega_q t) d^3 q,$$

в котором все переменные $\mathbf{q} = (q_{||}, -q_z)$ независимы и $\omega_q = q^2/2$. В качестве коэффициентов $a(\mathbf{q}, \mathbf{k})$ выберем гауссову функцию

$$a(\mathbf{q}, \mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi w^2)^{3/2}} \exp(-(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2/2w^2),$$

где $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{||}, -k_z)$.

В координатном пространстве гауссовский пакет имеет вид

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(1 + iw^2 t)^{3/2}} \exp\left(-\frac{w^2}{2(1 + iw^2 t)}(\mathbf{r} - \mathbf{k}t)^2 + i\mathbf{k}_0 \mathbf{r} - i\omega_k t\right),$$

где члены $w^2 t$ характеризуют расплывание пакета. Далее мы будем считать w малым и расплыванием пренебрегать. Форма следа пересечения волновым пакетом границы раздела есть функция времени, однако всегда можно выбрать за начало отсчета $t = 0$ момент пересечения границы раздела центром падающего пакета. При этом вид волновой функции в следе ($z = 0$) упростится:

$$\psi(\mathbf{r}_{||}, z = 0, t = 0) = \exp\left(-\frac{w^2}{2}\mathbf{r}_{||}^2 + i\mathbf{k}_{||}\mathbf{r}_{||}\right).$$

Рассмотрим теперь отраженный пакет. Его волновая функция описывается интегралом

$$\psi_r(\mathbf{r}, t) = \int R(q_z) a(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{q}_r \mathbf{r} - i\omega_q t) d^3 q,$$

где $\mathbf{q}_r = (\mathbf{q}_{||}, q_z)$, q_z — независимая переменная, а $R(q_z)$ дается выражением (1.221), причем мы будем рассматривать случай полного отражения, когда $\chi = i\phi$ и $\phi = \arcsin(\sqrt{1 - q_z^2/u})$. Будем считать w малым и разложим $2\phi(q_z)$ по q_z в окрестности k_z

с точностью до линейного члена: $2\phi(q_z) = 2\phi(k_z) - \zeta_z(q_z - k_z)$, где $\zeta_z = 2/k'_z = 2/\sqrt{u - k_z^2}$. Теперь ψ_r можно переписать в виде

$$\psi_r(\mathbf{r}, t) \approx R(k_z) \int a(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{q}_r \cdot \mathbf{r} + i\zeta_z(q_z - k_z) - i\omega_q t) d^3 q.$$

Соответственно в координатном пространстве отраженная волновая функция (пренебрегаем расплыванием) имеет вид

$$\psi_r(\mathbf{r}, t) = R(k_z) \exp\left(-\frac{w^2}{2}(\mathbf{r} + \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{k}t)^2 + ik\mathbf{r} - i\omega_k t\right),$$

где $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{||}, k_z)$ и вектор z имеет компоненты $\boldsymbol{\zeta} = (0, 0, \zeta_z)$.

В момент $t = 0$, когда падающий пакет пересекает границу раздела, центр отраженного пакета находится под поверхностью раздела на глубине $z = -\zeta_z$ (рис. 1.3б, точка C). Поэтому отраженный пакет пересечет границу в момент $t = \zeta_z/k_z$ и в это время окажется в точке $\mathbf{r}_{||} = \mathbf{k}_{||}\zeta_z/k_z$, которая и определяет сдвиг ГХ.

Заметим, что в случае волнового пакета ширина следа пересечения вдоль плоскости падения и перпендикулярно ей одинакова. Линейное разложение фазы отраженной волны справедливо при $w \ll k'_z$, поэтому $\zeta_z \ll 2/w$ и соответственно $\bar{\xi}_{||} = 2k_{||}\zeta_z/k_z \ll 2k_{||}/wk_z$.

Аналогично можно оценить сдвиг ГХ волнового пакета при отражении от зеркала, изображенного на рис. 1.38, и здесь тоже уместен вопрос о некогерентном отражении, поставленный в конце предыдущего параграфа. Именно, если действительно имеет место сдвиг ГХ, не означает ли это, что многократное переотражение между границами раздела можно наблюдать в эксперименте, по схеме рис. 1.39? И нельзя ли при исследовании кривой отражения (см. рис. 1.7) заметить вклад некогерентного отражения от двух границ раздела [38]?

Заключение

Основным предметом изучения в первой главе был метод исследования одномерных задач, изложенный в разделе 1.4. Мы также увидели на нескольких примерах, сколь он продуктивен. Рассмотренные примеры, конечно, не исчерпывают всей области его применения. В то же время необходимо отметить, что остался и ряд нерешенных вопросов. В частности, с физической точки зрения неясно, каким образом процесс многократных переотражений между двумя разнесенными зеркалами протекает во времени. Исследованные решения стационарных уравнений квантовой механики не содержат ответа на этот вопрос, поскольку неявно предполагается, что процесс протекает мгновенно. В действительности это конечно же не так, и потому изучение переходных процессов может дать очень интересную информацию об отражении двумя разнесенными зеркалами, которую невозможно получить из квантовомеханического рассмотрения. Квантовая механика позволяет находить вероятности переходов из одного состояния системы в другое, но ничего не говорит о том, как переходы происходят. Интересно было бы проверить, не поможет ли в этом квазиклассический подход и представление волновой функции волновым пакетом.

Мы изучили метод раздела 1.4 в применении к нейтронной оптике, однако он работает и в обычной и в рентгеновской оптике, в акустике, в теории упругости и даже при описании неволновых процессов, например диффузии. Более того, он применим не только для одномерного, но и для многомерного рассеяния нейтронов. О многомерном рассеянии и пойдет речь в следующих главах.

*Мысль улетает вдаль!
Слова ложатся в строчку.
Но мне студентов жалъ,
И здесь я ставлю точку.*

Глава 2

Одномерное рассеяние нейтрона со спином

В первой главе мы считали нейtron скалярной частицей. На самом деле она спинорная, и в этой главе мы учтем ее спинорные свойства. Спинорная частица описывается не одной числовой функцией, а двумя:

$$|\psi(\mathbf{r})\rangle = \begin{pmatrix} \psi_u(\mathbf{r}) \\ \psi_d(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \psi_u(\mathbf{r})|\xi_u\rangle + \psi_d(\mathbf{r})|\xi_d\rangle, \quad (2.1)$$

где индексы u, d указывают на верхнюю и нижнюю компоненты соответственно, и мы ввели два единичных базисных спинора

$$|\xi_u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\xi_d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Две функции $\psi_{u,d}(\mathbf{r})$ определяют направление спиновой стрелки

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \langle \psi(\mathbf{r}) | \boldsymbol{\sigma} | \psi(\mathbf{r}) \rangle,$$

где $\boldsymbol{\sigma} = (\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z)$ — матрицы Паули:

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

и вместе с ней — направление магнитной стрелки $\boldsymbol{\mu} = \mu_n \mathbf{s} = -|\mu_n| \mathbf{s}$, где $\mu_n = -1.91 \mu_{NB}$, $\mu_{NB} = e\hbar/2mc = 5 \cdot 10^{-24}$ эрг/Гс — ядерный магнетон Бора.

Благодаря магнитному моменту нейtron взаимодействует с магнитным полем \mathbf{B} . Это взаимодействие описывается оператором $-\boldsymbol{\mu}\mathbf{B} = |\mu_n| \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}$. Уравнение Шредингера для волновой функции $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$ при наличии магнитного поля $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ и внешнего потенциала $U(\mathbf{r}, t)$, которые, вообще говоря, зависят и от координат и от времени, может быть записано в виде

$$i \frac{m}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \left(-\frac{\Delta}{2} + \frac{m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}, t) - \frac{m}{\hbar^2} \boldsymbol{\mu} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \right) |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle. \quad (2.4)$$

Если назвать временем величину $t\hbar/m$, полем величину $m|\mu_n|B/\hbar^2$ и обозначить как $u(\mathbf{r}, t)$ величину $2mU(\mathbf{r}, t)/\hbar^2$, то уравнение перепишется в более простом виде¹

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \left(\frac{1}{2} [-\Delta + u(\mathbf{r}, t)] + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \right) |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle. \quad (2.5)$$

¹Характерный для кинетической энергии множитель $1/2$ полезно сохранить.

При этом, если мы найдем какую нибудь величину f , которая будет зависеть от \mathbf{r} , t , и \mathbf{B} — допустим, $f(\mathbf{r}, t, u, \mathbf{B})$, — то при окончательных расчетах ее нужно заменить на функцию

$$f(\mathbf{r}, \hbar t/m, 2mU/\hbar^2, m|\mu_n| \mathbf{B}/\hbar^2).$$

Часто говорят, что уравнение (2.5) записано в единицах $\hbar = m = \mu_n = 1$.

В этой главе мы будем заниматься одномерными задачами. Потенциал u будет постоянен во времени и зависеть только от одной координаты x : $u = u(x)$, а магнитное поле может зависеть также и от времени: $\mathbf{B} = \mathbf{B}(x, t)$. Поэтому волновую функцию $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$ можно представить произведением

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \exp(i\mathbf{k}_\parallel \mathbf{r}_\parallel - i|\mathbf{k}_\parallel|^2 t/2) |\Psi(x, t)\rangle, \quad (2.6)$$

где $\mathbf{r}_\parallel = (0, y, z)$, а вектор \mathbf{k}_\parallel имеет только компоненты, параллельные плоскости (y, z) . Подстановка (2.6) в (2.5) приводит уравнение к виду

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)\rangle = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{u(x)}{2} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}(x, t) \right) |\Psi(x, t)\rangle. \quad (2.7)$$

В тех случаях, когда \mathbf{B} не зависит от времени, можно искать стационарное решение $|\Psi(x, t)\rangle = \exp(-ik_x^2 t/2) |\Psi(x)\rangle$. Подстановка его в (2.7) приводит к стационарному уравнению

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2 - u(x) - 2\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}(x) \right) |\Psi(x)\rangle = 0, \quad (2.8)$$

где для простоты у величины k_x^2 опущен индекс x .

Далее мы в основном будем пользоваться уравнениями (2.8) и (2.7). Стационарное уравнение позволяет описывать отражение и пропускание магнитных зеркал и магнитных слоистых сред. Нестационарное требуется для изучения взаимодействия нейтрона с высокочастотными полями, которые часто используются для поворота спина.

Сначала мы рассмотрим отражение от полубесконечного магнитного зеркала. Эта задача аналогична отражению скалярного нейтрона от потенциальной ступеньки, но амплитуды отражения и преломления описываются не числами r , t , а матрицами \hat{r} , \hat{t} , благодаря чему физическое содержание процесса отражения становится значительно богаче. Частицы испытывают многолучевое отражение и преломление.

Потом будет найдено решение для отражения от магнитного зеркала конечной толщины (аналог прямоугольного потенциала) и записаны уравнения для периодической многослойной системы. Из-за матричного вида амплитуд для одного периода уравнение для амплитуды отражения \hat{R} становится более сложным, чем для скалярных нейтронов, и в общем случае решить его в замкнутом виде не удается. Приходится прибегать к численным методам, и мы рассмотрим один из них — обобщение матричного метода, изложенного в первой главе.

Затем мы познакомимся с некоторыми методами экспериментальной техники: приготовлением пучков с заданным спиновым состоянием (поляризаторы), выделением заданного состояния (анализаторы) и изменением спиновых состояний с помощью роторов, а также с нестационарными процессами и интереснейшими фундаментальными проблемами квантовой механики. Мы их сформулируем и отчасти решим.

2.1 Отражение от магнитного зеркала

Отражение нейтрона в магнитном поле от полубесконечного намагниченного зеркала описывается аналогично отражению от потенциальной ступеньки в скалярном случае. Реша-

ется стационарное уравнение

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + u_0 \Theta(x > 0) + 2\sigma \mathbf{B}_1 \Theta(x < 0) + 2\sigma \mathbf{B}_2 \Theta(x > 0) - k^2 \right) |\Psi(x)\rangle = 0. \quad (2.9)$$

Потенциал взаимодействия содержит оптический потенциал u_0 вещества зеркала (оно занимает полупространство $x > 0$) и постоянные однородные магнитные поля: \mathbf{B}_1 вне зеркала ($x < 0$) и \mathbf{B}_2 внутри него ($x > 0$). Для того чтобы найти решение уравнения, необходимо также задать падающую волну.

2.1.1 Плоская волна в однородном магнитном поле

Падающая волна должна быть решением уравнения в пространстве вне зеркала. Однако это пространство непусто — в нем имеется магнитное поле \mathbf{B}_1 . Поэтому падающая волна должна удовлетворять уравнению

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\sigma \mathbf{B}_1 - k^2 \right) |\Psi(x)\rangle = 0. \quad (2.10)$$

Направим ось z вдоль поля \mathbf{B}_1 , тогда потенциал взаимодействия будет равен $\sigma_z B_1$. Заметим, что систему осей для описания магнитного взаимодействия в области движения нейтрона необязательно выбирать в соответствии с выбором пространственных координатных осей. Например, если нейtron движется вдоль оси x и магнитное поле тоже направлено вдоль оси x , мы тем не менее можем ось z в спиновом пространстве направить вдоль \mathbf{B}_1 . В сущности, индексы x, y, z у матриц Паули следовало бы заменить другими, но мы будем следовать установившейся традиции.

Матрица σ_z имеет собственные значения ± 1 , отвечающие двум собственным векторам (2.2): $\sigma_z |\xi_u\rangle = |\xi_u\rangle$, $\sigma_z |\xi_d\rangle = -|\xi_d\rangle$. Соответственно матрица $\sigma_z B_1$ имеет на этих векторах собственные значения $\pm B_1$. Это означает, что спинор $|\xi_u\rangle$ отвечает нейтрону, поляризованному вдоль поля \mathbf{B}_1 , а $|\xi_d\rangle$ — нейтрону, поляризованному против поля. Состояние с произвольной поляризацией $|\xi\rangle$ разлагается по базисным:

$$|\xi\rangle = \alpha_u |\xi_u\rangle + \alpha_d |\xi_d\rangle \quad (2.11)$$

с комплексными коэффициентами $\alpha_{u,d}$, удовлетворяющими условию нормировки $|\alpha_u|^2 + |\alpha_d|^2 = 1$. Такая запись означает, что нейtron в состоянии $|\xi\rangle$ с вероятностью $|\alpha_u|^2$ поляризован по полю \mathbf{B}_1 и с вероятностью $|\alpha_d|^2$ — против поля. Спинору (2.11) соответствует поляризация со спиновой стрелкой, направленной вдоль вектора s :

$$\mathbf{s} = \langle \xi | \sigma | \xi \rangle = (s_x, s_y, s_z) = (\alpha_u^* \alpha_d + \alpha_u \alpha_d^*, -i \alpha_u^* \alpha_d + i \alpha_u \alpha_d^*, |\alpha_u|^2 - |\alpha_d|^2), \quad (2.12)$$

где звездочка означает комплексное сопряжение.

Уравнение (2.10) при указанном выборе осей расщепляется на два независимых уравнения:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\sigma_z B_1 - k^2 \right) |\Psi(x)\rangle = \begin{cases} (-\partial^2/\partial x^2 + 2B_1 - k^2) \psi_u(x) = 0, \\ (-\partial^2/\partial x^2 - 2B_1 - k^2) \psi_d(x) = 0. \end{cases} \quad (2.13)$$

Решение каждого из них может быть выбрано в виде плоской волны

$$\psi_{u,d}(x) = \exp(ik_{u,d}x), \quad k_{u,d} = \sqrt{k^2 \mp 2B_1}. \quad (2.14)$$

Таким образом, полное решение

$$|\Psi(x)\rangle = \alpha_u e^{ik_u x} |\xi_u\rangle + \alpha_d e^{ik_d x} |\xi_d\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_u \exp(ik_u x) \\ \alpha_d \exp(ik_d x) \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Его можно записать в более простом виде

$$|\Psi(x)\rangle = \exp(i\hat{k}_1 x)(\alpha_u |\xi_u\rangle + \alpha_d |\xi_d\rangle) = \exp(i\hat{k}_1 x)|\xi\rangle, \quad (2.16)$$

где $\hat{k}_1 = \sqrt{k^2 - 2\sigma_z B_1}$, если учесть, что любая функция $f(\sigma_z)$ имеет те же собственные векторы $|\xi_{u,d}\rangle$, что и сама матрица σ_z , а собственные значения функции $f(\sigma_z)$ равны $f(\pm 1)$.

Более того, мы можем отказаться от специального выбора осей координат в спиновом пространстве и вместо $\sigma_z B_1$ записывать энергию магнитного взаимодействия в общем виде σB_1 . При этом запись для волновой функции (2.16) остается неизменной, но теперь $\hat{k}_1 = \sqrt{k^2 - 2\sigma B_1}$, а $|\xi_{u,d}\rangle$ станут собственными состояниями матрицы σB_1 :

$$\sigma B_1 |\xi_{u,d}\rangle = \pm B_1 |\xi_{u,d}\rangle. \quad (2.17)$$

Эти же состояния будут собственными состояниями любой функции $f(\sigma B_1)$:

$$f(\sigma B_1) |\xi_{u,d}\rangle = f(\pm B_1) |\xi_{u,d}\rangle. \quad (2.18)$$

Фундаментальные вопросы квантовой механики

Заметим, что падающая волна имеет фиксированную энергию $k^2/2$, но две ее спиновые компоненты имеют разные скорости. Нейтрон, поляризованный не параллельно полю находится в когерентной суперпозиции состояний с различными скоростями. Благодаря различию скоростей имеет место прецессия вектора поляризации в поле, но возникает вопрос: что произойдет с нейтроном, когда компоненты разойдутся на такое расстояние, на котором когерентность суперпозиции нарушится? Возможно ли такое? В случае плоских волн вопрос лишен смысла. Однако совершенно невероятно, чтобы представление о нейтроне как о бесконечной плоской волне, принятное в квантовой механике, соответствовало действительности. Если же волновая функция нейтрона имеет конечные размеры L , то можно себе представить, что n нейтронов с поляризацией (2.11) на расстоянии L от точки влета в поле разделятся на $n|\alpha_u|^2$ нейтронов, поляризованных строго по полю, и $n|\alpha_d|^2$ нейтронов, поляризованных против поля, причем последние попадут в точку L раньше первых на время

$$\Delta t = \frac{L}{k_d - k_u}. \quad (2.19)$$

Это предположение никто не проверял, и принято считать, что нейтрон с поляризацией (2.11) движется в магнитном поле со средней скоростью

$$\bar{k} = |\alpha_u|^2 \sqrt{k^2 - 2B_1} + |\alpha_d|^2 \sqrt{k^2 + 2B_1}. \quad (2.20)$$

2.1.2 Решение уравнения (2.9)

Теперь мы можем приступить к решению уравнения (2.9) с падающей волной $\exp(i\hat{k}x)|\xi_0\rangle$, где $|\xi_0\rangle$ характеризует произвольное состояние поляризации.

Будем искать решение в виде

$$|\Psi(x)\rangle = \Theta(x < 0) \left(e^{i\hat{k}_1 x} + e^{-i\hat{k}_1 x} \hat{r} \right) |\xi_0\rangle + \Theta(x > 0) e^{i\hat{k}_2(x)} \hat{t} |\xi_0\rangle, \quad (2.21)$$

где \hat{r} и \hat{t} — матрицы амплитуд отражения и преломления, а $\hat{k}_2 = \sqrt{k^2 - u - 2\sigma B_2}$ — оператор волнового вектора внутри среды. Для нахождения \hat{r} и \hat{t} нужно спить волновую функцию на границе раздела. Условия непрерывности функции и ее производной приводят к уравнениям

$$(\hat{I} + \hat{r} - \hat{t}) |\xi_0\rangle = 0, \quad [\hat{k}_1(\hat{I} - \hat{r}) - \hat{k}_2 \hat{t}] |\xi_0\rangle = 0, \quad (2.22)$$

в которые входит единичная матрица $\hat{\mathbf{I}}$. Уравнения должны быть справедливы при любых $|\xi_0\rangle$, и потому должны быть справедливы матричные равенства

$$\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{t}}, \quad \hat{k}_1(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{r}}) = \hat{k}_2\hat{\mathbf{t}}. \quad (2.23)$$

Отсюда следует, что

$$\hat{\mathbf{r}} = (\hat{k}_1 + \hat{k}_2)^{-1}(\hat{k}_1 - \hat{k}_2), \quad \hat{\mathbf{t}} = (\hat{k}_1 + \hat{k}_2)^{-1}2\hat{k}_1, \quad (2.24)$$

где

$$\hat{k}_1 = \sqrt{k^2 - 2\sigma B_1}, \quad \hat{k}_2 = \sqrt{k^2 - u - 2\sigma B_2}. \quad (2.25)$$

Используя полученные матрицы, мы можем вычислять все нужные нам величины, в частности вероятность отражения поляризованного нейтрона с переворотом поляризации. Этим мы теперь и займемся, но для удобства сначала перепишем матрицу амплитуд отражения (2.24) в несколько ином виде, указав явную зависимость волновых векторов $\hat{k}_{1,2}$ (2.25) от матриц σ и полей B_i :

$$\hat{\mathbf{r}} = (\hat{k}_1(\sigma B_1) + \hat{k}_2(\sigma B_2))^{-1}(\hat{k}_1(\sigma B_1) - \hat{k}_2(\sigma B_2)), \quad \hat{\mathbf{t}} = (\hat{k}_1(\sigma B_1) + \hat{k}_2(\sigma B_2))^{-1}2\hat{k}_1(\sigma B_1). \quad (2.26)$$

Рассмотрим отражение полностью поляризованных нейтронов, т. е. будем считать, что $|\xi_0\rangle = |\xi_u\rangle$ или $|\xi_d\rangle$, и, значит, они поляризованы по внешнему полю B_1 или против него. Диагональные элементы матрицы отражения $\langle \xi_{u,d} | \hat{\mathbf{r}} | \xi_{u,d} \rangle$ определяют амплитуды вероятности отражения без переворота спина, а недиагональные — с переворотом. Для их вычисления необходимо знать свойства матриц σ .

2.1.3 Свойства матриц Паули

Все свойства матриц Паули вытекают из следующих основных свойств:

$$\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z = i\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = i\sigma_y, \quad \sigma_{x,y,z}^2 = 1, \quad \sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i. \quad (2.27)$$

Перечислим теперь все соотношения, которые нам понадобятся в дальнейшем.

1. Для двух произвольных векторов a и b справедливо равенство

$$(\sigma a)(\sigma b) = (ab) + i\sigma[ab]. \quad (2.28)$$

где $[ab]$ — векторное произведение векторов a и b . Это соотношение легко проверяется с помощью (2.27).

2. Любая функция $f(a\sigma)$ является матрицей, собственные вектора которой совпадают с собственными векторами $|\xi_{\pm a}\rangle$ матрицы $a\sigma$, а собственные значения равны

$$f(a\sigma)\xi_{\pm a} = f(\pm a)\xi_{\pm a}. \quad (2.29)$$

3. Каждую функцию $f(a\sigma)$ можно формально разложить в ряд Тейлора:

$$f(a\sigma) = \sum_0^{\infty} c_n(a\sigma)^n, \quad (2.30)$$

и, принимая во внимание (2.28), представить в виде

$$f(a\sigma) = f_1 + \frac{(a\sigma)}{a}f_2. \quad (2.31)$$

Из выражения (2.29) следует, что $f_{1,2} = [f(a) \pm f(-a)]/2$, и (2.31) приводится к виду

$$f(a\sigma) = \frac{1}{2}[f(a) + f(-a)] + \frac{a\sigma}{2a}[f(a) - f(-a)]. \quad (2.32)$$

В частности,

$$\exp(i\mathbf{a}\sigma) = \cos a + i \frac{(\mathbf{a}\sigma)}{a} \sin a. \quad (2.33)$$

4. Для каждой функции $f(\pm a) \neq 0$ справедливо соотношение

$$f^{-1}(\mathbf{a}\sigma) = \frac{f(-\mathbf{a}\sigma)}{f(-\mathbf{a}\sigma)f(\mathbf{a}\sigma)} = \frac{f(-\mathbf{a}\sigma)}{f(a)f(-a)}, \quad (2.34)$$

потому что

$$f(\mathbf{a}\sigma)f(-\mathbf{a}\sigma) = f(a)f(-a). \quad (2.35)$$

5. Для всех $i = x, y, z \neq j$ справедливо равенство

$$\sigma_i \exp(ia\sigma_j) = \exp(-ia\sigma_j)\sigma_i. \quad (2.36)$$

В качестве примера рассмотрим, чему равна матрица $\hat{M} = 1/(1 - \sigma_x - \sigma_y)$. Эту матрицу можно представить как $1/(1 - \mathbf{a}\sigma)$, где вектор \mathbf{a} имеет компоненты $(1, 1, 0)$. Следуя формуле (2.34), получаем

$$\frac{1}{1 - \sigma_x - \sigma_y} = \frac{1 + \sigma_x + \sigma_y}{(1 - \sqrt{2})(1 + \sqrt{2})} = -1 - \sigma_x - \sigma_y.$$

2.1.4 Матричные элементы матрицы отражения

Учитывая (2.34) и (2.35), приведем $\hat{\mathbf{r}}$ из (2.26) к виду

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{r}} &= \frac{1}{N} \left(\hat{k}_1(-\sigma \mathbf{B}_1) + \hat{k}_2(-\sigma \mathbf{B}_2) \right) \left(\hat{k}_1(\sigma \mathbf{B}_1) - \hat{k}_2(\sigma \mathbf{B}_2) \right) = \\ &= \frac{1}{N} \left(k_1(-B_1)k_1(B_1) - k_2(-B_2)k_2(B_2) - \hat{k}_1(-\sigma \mathbf{B}_1)\hat{k}_2(\sigma \mathbf{B}_2) + \hat{k}_2(-\sigma \mathbf{B}_2)\hat{k}_1(\sigma \mathbf{B}_1) \right) = \\ &= \frac{1}{N} \left(k_1(-B_1)k_1(B_1) - k_2(-B_2)k_2(B_2) + \frac{\sigma \mathbf{B}_1}{2B_1}k_1^-k_2^+ - \frac{\sigma \mathbf{B}_2}{2B_2}k_1^+k_2^- + i\frac{\sigma[\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2]}{2B_1 B_2}k_1^-k_2^- \right), \end{aligned} \quad (2.37)$$

где $k_{1,2}^\pm = k_{1,2}(B_{1,2}) \pm k_{1,2}(-B_{1,2})$, $[\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2]$ — векторное произведение векторов \mathbf{B}_1 и \mathbf{B}_2 ,

$$\begin{aligned} N &= \left(\hat{k}_1(\sigma \mathbf{B}_1) + \hat{k}_2(\sigma \mathbf{B}_2) \right) \left(\hat{k}_1(-\sigma \mathbf{B}_1) + \hat{k}_2(-\sigma \mathbf{B}_2) \right) = \\ &= (k_1(B_1) + k_2(B_2))(k_1(-B_1) + k_2(-B_2)) + k_1^-k_2^- \sin^2(\theta/2), \end{aligned} \quad (2.38)$$

а θ — угол между векторами \mathbf{B}_1 и \mathbf{B}_2 . Выделим из вектора \mathbf{B}_2 компоненту, параллельную \mathbf{B}_1 , т. е. представим \mathbf{B}_2 в виде $\mathbf{B}_2 = \mathbf{B}_1(\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2)/B_1^2 + \mathbf{B}_\perp$, где \mathbf{B}_\perp — компонента вектора \mathbf{B}_2 , перпендикулярная \mathbf{B}_1 . Это позволяет сразу записать диагональные матричные элементы матрицы отражения $\hat{\mathbf{r}}$:

$$\langle \xi_{d,u} | \hat{\mathbf{r}} | \xi_{d,u} \rangle = \frac{1}{N} \left(k_1(-B_1)k_1(B_1) - k_2(-B_2)k_2(B_2) \pm \frac{1}{2}k_1^-k_2^+ \mp \frac{(\mathbf{B}_1 \mathbf{B}_2)}{2B_1 B_2}k_1^+k_2^- \right), \quad (2.39)$$

где верхние знаки $(+, -)$ относятся к диагональному матричному элементу $\langle \xi_u | \hat{\mathbf{r}} | \xi_u \rangle$, а нижние $(-, +)$ — к элементу $\langle \xi_d | \hat{\mathbf{r}} | \xi_d \rangle$.

Недиагональные матричные элементы равны

$$\langle \xi_{u,d} | \hat{\mathbf{r}} | \xi_{d,u} \rangle = -\frac{B_\perp}{2B_2 N} (k_1^+k_2^- \pm k_1^-k_2^+) = -\frac{B_\perp}{B_2 N} k_1(\pm B_1)(k_2(B_2) - k_2(-B_2)), \quad (2.40)$$

где верхние знаки относятся к элементу $\langle \xi_d | \hat{r} | \xi_u \rangle$, а нижние — к $\langle \xi_u | \hat{r} | \xi_d \rangle$. При вычислении этих матричных элементов удобно ось z в спиновом пространстве выбрать вдоль вектора \mathbf{B}_1 , а ось x — вдоль вектора \mathbf{B}_\perp .

Вероятность отражения без переворота спина равна квадрату модуля амплитуды $|\langle \xi_{u,d} | \hat{r} | \xi_{u,d} \rangle|^2$, а с переворотом содержит еще и отношение нормальных компонент волнового вектора:

$$R_{ud} = \frac{k_1(B_1)}{k_1(-B_1)} |\langle \xi_u | \hat{r} | \xi_d \rangle|^2, \quad R_{du} = \frac{k_1(-B_1)}{k_1(B_1)} |\langle \xi_d | \hat{r} | \xi_u \rangle|^2. \quad (2.41)$$

2.1.5 Тройное расщепление пучка при отражении

Матричные элементы (2.39), (2.40) связаны с явлением тройного лucheотражения [39, 40] и четвертого лучепреломления нейтронов при взаимодействии с магнитным зеркалом. Напомним, что в обычной оптике известно лишь двойное лучепреломление.

Посмотрим, что происходит, когда пучок неполяризованных нейтронов отражается от намагниченного зеркала, помещенного во внешнее магнитное поле. Схема эксперимента показана на рис. 2.1.

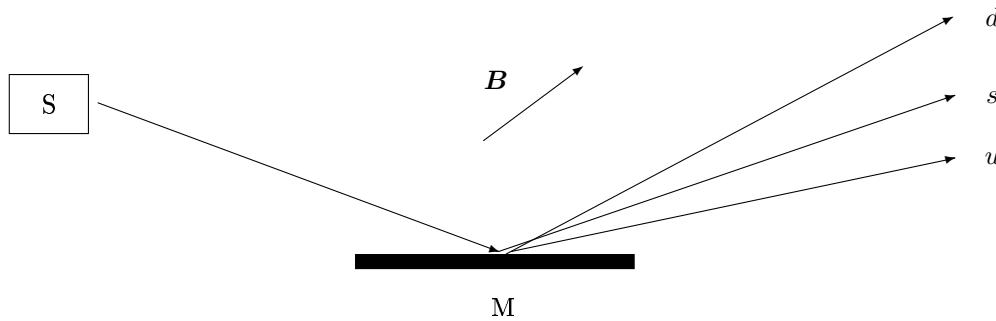


Рис. 2.1: Схема эксперимента по измерению тройного расщепления неполяризованного пучка нейтронов при отражении от намагниченного зеркала, когда внутреннее и внешнее поля неколлинеарны: S — источник нейтронов, M — зеркало, B — внешнее магнитное поле, s — зеркально отраженный пучок, u и d — пучки, полностью поляризованные по внешнему полю и против поля соответственно

При отражении от зеркала компонента скорости, параллельная зеркалу, сохраняется. Если отражение происходит без переворота спина (вероятность определяется квадратом модуля диагональных матричных элементов (2.39)), то сохраняется и величина нормальной компоненты скорости.

Посмотрим, что происходит при перевороте спина. Начнем с тех нейтронов, которые в падающем пучке поляризованы по полю. Их скорость в пучке равна k , причем $E = k^2/2$ — полная энергия нейтрона в поле. После переворота спина при отражении эти нейтроны окажутся поляризованными против поля. Поскольку полная энергия в упругом процессе рассеяния не меняется, а потенциальная энергия уменьшается на $2B$, то возрастает кинетическая энергия, и скорость нейтрона со спином против поля оказывается равной $\sqrt{k^2 + 4B}$, где B — величина магнитного поля вне зеркала.

Так как параллельная границе раздела компонента скорости не меняется, то изменение скорости приводит к изменению нормальной компоненты: $k_\perp \rightarrow \sqrt{k_\perp^2 + 4B}$. В рассматриваемом случае компонента после отражения стала больше. Это значит, что угол скольжения после отражения увеличился, и пучок нейтронов, полностью поляризованных против внешнего поля, отразился не в зеркальном направлении, а ближе к нормали. Обычно $k_\perp^2 \gg 4B$, поэтому изменение нормальной компоненты скорости

$$\Delta k_\perp = \sqrt{k_\perp^2 + 4B} - k_\perp \approx \frac{2B}{k_\perp},$$

а изменение угла отражения пучка по сравнению с зеркальным можно найти приближенно по формуле

$$\Delta\theta = \frac{\Delta k_\perp}{k} \approx \frac{2B}{k^2} \frac{k}{k_\perp} \approx \frac{B}{E\theta},$$

где θ — угол скольжения, который при полном отражении теплового нейтрона от зеркала составляет несколько миллирадиан. Из этого выражения видно, что для тепловых нейтронов и внешнего поля порядка 1 кГс изменение угла составляет доли милирадиана, и потому на расстоянии 1 м от зеркала пучок нейтронов, поляризованных против поля, разойдется с зеркально отраженным пучком на доли миллиметра.

Совершенно ясно, что у нейтронов, которые в падающем пучке были поляризованы против поля, скорость после переворота спина уменьшится. Значит, уменьшится и угол скольжения по отношению к зеркалу, поскольку после отражения от зеркала с переворотом спина эти нейтроны будут полностью поляризованы по полю и отклонятся ближе к зеркалу, как показано на рисунке. По абсолютной величине угловое отклонение будет примерно тем же, что и у нейтронов, поляризованных после отражения против поля.

Итак, мы видим, что неполяризованный пучок нейтронов после отражения от магнитного зеркала, намагниченность которого неколлинеарна внешнему полю, расщепится на три пучка. Зеркальный пучок будет почти не поляризован, а два боковых пучка будут полностью поляризованы. Пучок, идущий ближе к внешней нормали будет полностью поляризован против внешнего поля, а пучок, идущий ближе к поверхности, — вдоль внешнего поля.

Интенсивность I_u пучка, отраженного с переворотом спина и поляризованного по внешнему полю, из-за множителя $k_1(B)/k_1(-B)$ в (2.41) меньше интенсивности незеркально отраженного пучка, поляризованного противоположно внешнему полю. При сильном внешнем поле B и малом угле скольжения падающего пучка интенсивность I_u может вообще обратиться в нуль. Однако в обычных условиях, когда B значительно меньше кинетической энергии $k^2/2$ движения падающего пучка по нормали к зеркалу, интенсивности поляризованных незеркально отраженных пучков в нулевом порядке по B/k^2 одинаковы. В этом случае, согласно (2.40),

$$I_{u,d} \approx I_0 \left(\frac{B_{i\perp}}{k_\perp^2} \right)^2,$$

где I_0 — интенсивность падающих нейтронов, а $B_{i\perp}$ — компонента внутреннего поля зеркала, перпендикулярная внешнему полю. При намагниченности до насыщения и $B_{i\perp} \approx 10$ кГс доля интенсивности полностью поляризованных пучков в случае тепловых нейтронов может достигать 10% I_0 .

Несмотря на малое угловое расхождение, расщепление отраженного и преломленного нейтронных пучков обнаружено экспериментально [40–44]. Эти эксперименты подтвердили правильность теоретических предсказаний [39] и позволили использовать эффект для исследования свойств магнитных веществ [45].

Фундаментальные вопросы

Отражение от зеркала — это когерентный процесс, поэтому когерентная суперпозиция двух состояний с различными скоростями преобразуется при отражении в другую суперпозицию. Причем, если до отражения скорости двух компонент спинора различались только по величине, но не по направлению, то после отражения возникает когерентная суперпозиция, в которой скорости различаются и по направлению. Более того, компоненты с разнонаправленными скоростями расходятся на измеримое расстояние (расщепление пучка четко видно в эксперименте [40]), но возникает вопрос, как происходит потеря когерентности. Если бы с помощью некоторого анализатора можно было измерять поляризацию

в направлении, перпендикулярном магнитному полю, это позволило бы наблюдать, как по мере удаления от зеркала пропускание анализатора периодически изменяется вследствие прецессии спина нейтрона, но амплитуда колебаний постепенно уменьшается по мере увеличения расхождения компонент. Измерив это уменьшение, можно было бы определить «размер» нейтрона, иными словами, длину его когерентности [38].

2.2 Алгебра для магнитных зеркал

Покажем теперь, как алгебра, развитая для скалярного взаимодействия, обобщается на магнитное.

2.2.1 Магнитное зеркало конечной толщины

Рассмотрим задачу с прямоугольным потенциальным барьером (см. рис. 1.4), но будем считать, что помимо потенциала u_0 имеются еще и однородные магнитные поля внутри барьера и во всем внешнем пространстве. Будем считать, что магнитные поля вне и внутри зеркала могут различаться как по величине, так и по направлению. Обозначим поле вне зеркала через \mathbf{B}_1 , а внутри зеркала, в области $0 \leq x \leq d$, — через \mathbf{B}_2 . Пусть волна в спиновом состоянии $|\xi_0\rangle$ падает на зеркало слева. Обозначим через $\hat{\mathbf{X}}|\xi_0\rangle$ спинорную амплитуду волны, падающей на правый край изнутри зеркала. Теперь легко записать систему уравнений для $\hat{\mathbf{X}}$ и амплитуд отражения $\hat{\mathbf{R}}$ и пропускания $\hat{\mathbf{T}}$, аналогичную (1.40), (1.42):

$$\hat{\mathbf{X}} = \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{t}} + \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}}' \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}}' \hat{\mathbf{X}}, \quad (2.42)$$

$$\hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{t}}' \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}}' \hat{\mathbf{X}}, \quad \hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{t}}' \hat{\mathbf{X}}, \quad (2.43)$$

где

$$\hat{\mathbf{t}} = (\hat{k}_1 + \hat{k}_2)^{-1} 2\hat{k}_1, \quad \hat{\mathbf{t}}' = (\hat{k}_1 + \hat{k}_2)^{-1} 2\hat{k}_2, \quad \hat{\mathbf{r}} = (\hat{k}_1 + \hat{k}_2)^{-1}(\hat{k}_1 - \hat{k}_2) = -\hat{\mathbf{r}}', \quad (2.44)$$

$\hat{k}_1 = \sqrt{k^2 - 2\sigma\mathbf{B}_1}$, $\hat{k}_2 = \sqrt{k^2 - u_0 - 2\sigma\mathbf{B}_2}$ и u_0 — ядерный оптический потенциал зеркала.

Выпишем решение уравнения (2.42):

$$\hat{\mathbf{X}} = \left(\hat{\mathbf{I}} - \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}} \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}}' \right)^{-1} \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{t}}. \quad (2.45)$$

Подставив его в (2.43), найдем $\hat{\mathbf{R}}$ и $\hat{\mathbf{T}}$:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}} &= \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{t}}' \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}} \left(\hat{\mathbf{I}} - \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}} \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}}' \right)^{-1} \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{t}}, \\ \hat{\mathbf{T}} &= \hat{\mathbf{t}}' \left(\hat{\mathbf{I}} - \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}} \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{r}}' \right)^{-1} \exp(i\hat{k}_2 d)\hat{\mathbf{t}}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Используя свойства матриц Паули, приведенные в разделе 2.1.3, можно найти все желаемые матричные элементы.

С помощью $\hat{\mathbf{X}}$ можно также непосредственно записать волновую функцию внутри зеркала:

$$\begin{aligned} \Theta(0 \leq x \leq d)|\Psi(x)\rangle &= \left[e^{i\hat{k}_2(x-d)} + e^{-i\hat{k}_2(x-d)}\hat{\mathbf{r}}' \right] \hat{\mathbf{X}}|\xi_0\rangle = \\ &= \left[e^{i\hat{k}_2(x-d)} + e^{-i\hat{k}_2(x-d)}\hat{\mathbf{r}}' \right] \left(\hat{\mathbf{I}} - e^{i\hat{k}_2 d}\hat{\mathbf{r}} e^{i\hat{k}_2 d}\hat{\mathbf{r}}' \right)^{-1} e^{i\hat{k}_2 d}\hat{\mathbf{t}}|\xi_0\rangle. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Учитывая свойства матриц Паули, можно найти разложение этой волновой функции $\alpha_u(x)|\xi_u\rangle + \alpha_d(x)|\xi_d\rangle$ по состояниям $|\xi_{u,d}\rangle$ вдоль и против внутреннего поля \mathbf{B}_2 .

2.2.2 Система двух магнитных зеркал

Рассмотрим теперь систему из двух потенциалов (см. рис. 1.8, 1.9), добавив к ней магнитное поле, которое будем считать одинаковым и однородным снаружи и между потенциалами, а внутри потенциалов — произвольным. Первичную волну, падающую на первый потенциал, будем считать равной $\exp(i\hat{k}x)|\xi_0\rangle$ с произвольной поляризацией, а волну, падающую на второй потенциал, обозначим как $\hat{X}|\xi_0\rangle$. Для \hat{X} получаем уравнение

$$\hat{X} = \exp(i\hat{k}l)\hat{t}_1 + \exp(i\hat{k}l)\hat{r}_1 \exp(i\hat{k}l)\hat{r}_2 \hat{X}, \quad (2.48)$$

решением которого будет

$$\hat{X} = (\hat{I} - \exp(i\hat{k}l)\hat{r}_1 \exp(i\hat{k}l)\hat{r}_2)^{-1} \exp(i\hat{k}l)\hat{t}_1. \quad (2.49)$$

Отражение и пропускание системой двух зеркал записываются в виде

$$\begin{aligned} \hat{R}_{12} &= \hat{r}_1 + \hat{t}_1 e^{i\hat{k}l} \hat{r}_2 \hat{X} = \hat{r}_1 + \hat{t}_1 e^{i\hat{k}l} \hat{r}_2 (\hat{I} - e^{i\hat{k}l} \hat{r}_1 e^{i\hat{k}l} \hat{r}_2)^{-1} e^{i\hat{k}l} \hat{t}_1, \\ \hat{T}_{12} &= \hat{t}_2 \hat{X} = \hat{t}_2 (\hat{I} - e^{i\hat{k}l} \hat{r}_1 e^{i\hat{k}l} \hat{r}_2)^{-1} e^{i\hat{k}l} \hat{t}_1. \end{aligned} \quad (2.50)$$

При $l \rightarrow 0$ получаем более простые выражения

$$\hat{R}_{12} = \hat{r}_1 + \hat{t}_1 \hat{r}_2 (\hat{I} - \hat{r}_1 \hat{r}_2)^{-1} \hat{t}_1, \quad \hat{T}_{12} = \hat{t}_2 (\hat{I} - \hat{r}_1 \hat{r}_2)^{-1} \hat{t}_1, \quad (2.51)$$

которые могут быть получены из системы уравнений

$$\hat{X} = \hat{t}_1 + \hat{r}_1 \hat{r}_2 \hat{X}, \quad \hat{R}_{12} = \hat{r}_1 + \hat{t}_1 \hat{r}_2 \hat{X}, \quad \hat{T}_{12} = \hat{t}_2 \hat{X}. \quad (2.52)$$

2.2.3 Стоячие волны

Аналогичным образом можно поступить с любой системой зеркал и многослойных покрытий. При этом однозначно определяются и амплитуды отражения с переворотом и без переворота спина, и амплитуды пропускания, и волновая функция. Обычно в эксперименте измеряются только коэффициенты отражения и пропускания, но можно поставить вопрос и об измерении волновой функции [44]. Фактически именно об этом идет речь, когда обсуждаются стоячие волны [45, 46].

Стоячие волны образуются при интерференции падающей и отраженной волн. Они могут возникать снаружи, вблизи отражающей поверхности зеркала, и внутри слоев многослойной системы. Особенно четко они формируются при наличии резонансов. Благодаря интерференции полная волновая функция нейтрона в стоячей волне представляет собой совокупность фиксированных в пространстве узлов и пучностей, параллельных границам раздела.

Измерить волновую функцию — значит выявить точки, где расположены узлы и пучности. Если поместить тонкий слой вещества, поглощающего нейтроны, в область пучности, это приведет к существенному ослаблению нейтронного пучка и увеличению выхода продуктов ядерной реакции, сопровождающей захват нейронов. Слой того же вещества, помещенный в область узла стоячей волны, будет для нейтронов прозрачным, и ядерные реакции в нем будут подавлены. Поместив в пучность вещество, чувствительное к поляризации нейтрона, можно зарегистрировать усиление деполяризации падающего поляризованного пучка и т. д. [47].

2.2.4 Периодическая система зеркал

Для исследования отражения от периодической системы мы, так же как и в скалярном случае для симметричного периода (подраздел 1.6.2), отделяем один период и обозначаем волну, падающую на второй период, через $\hat{\mathbf{X}}$. В результате получается система уравнений для $\hat{\mathbf{X}}$ и амплитуды отражения от полубесконечного потенциала $\hat{\mathbf{R}}$:

$$\hat{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{t}} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{X}}, \quad \hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{t}}\hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{X}}, \quad (2.53)$$

где $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{t}}$ — амплитуды отражения и пропускания одним периодом (для простоты мы и здесь считаем период симметричным). Разрешив первое уравнение системы (2.53) относительно $\hat{\mathbf{X}}$ и подставив результат во второе, найдем уравнение для $\hat{\mathbf{R}}$:

$$\hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{t}}\hat{\mathbf{R}}(I - \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{R}})^{-1}\hat{\mathbf{t}}. \quad (2.54)$$

Это уравнение сводится к квадратному матричному уравнению вида

$$ZAZ - ZB - CZ + D = 0, \quad (2.55)$$

где $Z = \hat{\mathbf{R}}$, $B = \hat{\mathbf{t}}^{-1}$, $A = \hat{\mathbf{t}}^{-1}\hat{\mathbf{r}}$, $C = \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{t}}^{-1}\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{t}}$, $D = \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{t}}^{-1}$. Получить решение этого уравнения в аналитическом виде в общем случае при некоммутирующих матрицах A , B , C и D не удается.

2.2.5 Отражение от геликоидальной системы

Один из частных случаев периодической системы, для которой существует аналитическое решение, мы все-таки рассмотрим. Это геликоидальная система, где вектор намагниченности внутри среды вращается по часовой стрелке или против нее.

Отражение от полубесконечного зеркала

Рассмотрим сначала полубесконечное зеркало при $z > 0$, в котором вектор магнитной индукции \mathbf{b} вращается в плоскости (x, y) против часовой стрелки. Внешнее поле \mathbf{B}_0 может быть направлено произвольно. Уравнение Шредингера внутри среды имеет вид

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - u_0 - 2b[\sigma_x \cos(2qz + 2\varphi) + \sigma_y \sin(2qz + 2\varphi)] + k^2 \right) |\psi(z)\rangle = 0, \quad (2.56)$$

где u_0 — оптический ядерный потенциал среды, величина π/q определяет шаг винтового вращения. Для общности мы ввели начальную фазу 2φ поля \mathbf{b} у входной поверхности и для удобства выделили множитель 2.

Воспользуемся представлением

$$\sigma_x \cos(2qz + 2\varphi) + \sigma_y \sin(2qz + 2\varphi) = \exp(-i\sigma_z(qz + \varphi))\sigma_x \exp(i\sigma_z(qz + \varphi)), \quad (2.57)$$

представим $|\psi(z)\rangle$ в виде $\exp(-i\sigma_z(qz + \varphi))|\phi(z)\rangle$ и подставим в (2.56). В результате получим уравнение

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - 2iq\sigma_z \frac{d}{dz} - u_0 - 2b\sigma_x + k^2 - q^2 \right) |\phi(z)\rangle = 0. \quad (2.58)$$

Будем искать его решение в виде волны, уходящей от границы раздела:

$$|\phi(z)\rangle = \exp(i[a + p\sigma]z)|\chi\rangle, \quad (2.59)$$

с четырьмя неизвестными параметрами a и \vec{p} . Таким образом, $|\psi(z)\rangle = \exp(-i\sigma_z(qz + \varphi)) \exp(i[a + \vec{p}\sigma]z) |\chi\rangle$. При $z = 0$ имеем $|\chi\rangle = \exp(i\sigma_z\varphi) |\psi(0)\rangle$, поэтому решение уравнения (2.56) записывается в виде

$$|\psi(z)\rangle = \exp(-i\sigma_z(qz + \varphi)) \exp(i[a + \vec{p}\sigma]z) \exp(i\sigma_z\varphi) |\psi(0)\rangle = \exp(-i\sigma_z qz) \exp(i[a + \vec{p}_\varphi\sigma]z) |\psi(0)\rangle, \quad (2.60)$$

где $\vec{p}_\varphi\sigma = \exp(-i\sigma_z\varphi) \vec{p}\sigma \exp(i\sigma_z\varphi)$.

Для того чтобы найти параметры a и \vec{p} , подставим выражение (2.59) в уравнение (2.58). В результате получим

$$-a^2 - p^2 - 2a\vec{p}\sigma + 2q\sigma_z(a + \vec{p}\sigma) - u_0 - 2b\sigma_x + k^2 - q^2 = 0. \quad (2.61)$$

Это соотношение эквивалентно четырем уравнениям

$$-a^2 - p^2 + 2q\vec{p}_z - u_0 + k^2 - q^2 = 0, \quad (2.62)$$

$$-2a\vec{p}_z + 2qa = 0, \quad -2a\vec{p}_x - 2iq\vec{p}_y - 2b = 0, \quad -2a\vec{p}_y + 2iq\vec{p}_x = 0. \quad (2.63)$$

Из трех уравнений (2.63) следуют выражения

$$\vec{p}_z = q, \quad \vec{p}_x = \frac{ab}{q^2 - a^2}, \quad \vec{p}_y = i\frac{qb}{q^2 - a^2}. \quad (2.64)$$

Подставив их в уравнение (2.62), получим уравнение для a

$$-a^2 + q^2 - \frac{b^2}{a^2 - q^2} - u_0 + k^2 - q^2 = 0, \quad (2.65)$$

решение которого

$$a = \sqrt{q^2 + \frac{K'^2 \pm \sqrt{K'^4 - 4b^2}}{2}}, \quad (2.66)$$

где $K'^2 = k^2 - u_0 - q^2$. Знак под корнем должен быть выбран так, чтобы в предельном случае $b = 0$ величина a совпадала с $k' = \sqrt{k^2 - u_0}$, а при $K'^4 < 4b^2$ мнимая часть a была положительной.

Найдем теперь амплитуды отражения и преломления. Для этого представим волновую функцию в виде

$$\Theta(z < 0) \left(\exp(i\hat{k}_0 z) + \exp(-i\hat{k}_0 z) \hat{r} \right) |\xi_0\rangle + \Theta(z > 0) \exp(-i\sigma_z qz) \exp(i[a + \vec{p}_\varphi\sigma]z) \hat{t} |\xi_0\rangle, \quad (2.67)$$

где \hat{r} и \hat{t} — матричные амплитуды отражения и пропускания соответственно, $\hat{k}_0 = \sqrt{k^2 - 2B_0\sigma}$, а $|\xi_0\rangle$ — произвольное спинорное состояние падающей волны.

Требование непрерывности функции (2.67) и ее производной в точке $z = 0$ приводит к уравнениям

$$1 + \hat{r} = \hat{t}, \quad \hat{k}_0[1 - \hat{r}] = [a - q\sigma_z + \vec{p}_\varphi\sigma] \hat{t} = (a + \vec{p}'_\varphi\sigma) \hat{t}, \quad (2.68)$$

где

$$\vec{p}'_\varphi\sigma = e^{-i\sigma_z\varphi} (\vec{p}_x\sigma_x + \vec{p}_y\sigma_y) e^{i\sigma_z\varphi} = a \frac{b(\sigma_x \cos 2\varphi + \sigma_y \sin 2\varphi)}{q^2 - a^2} + iq \frac{b(\sigma_y \cos 2\varphi - \sigma_x \sin 2\varphi)}{q^2 - a^2}. \quad (2.69)$$

Решением уравнений (2.68) будет

$$\hat{t} = (\hat{k}_0 + a + \vec{p}'_\varphi\sigma)^{-1} 2\hat{k}_0, \quad \hat{r} = (\hat{k}_0 + a + \vec{p}'_\varphi\sigma)^{-1} (\hat{k}_0 - a - \vec{p}'_\varphi\sigma). \quad (2.70)$$

При $b = 0$ получаем

$$\hat{t} = \frac{2\hat{k}_0}{\hat{k}_0 + k'}, \quad \hat{r} = \frac{\hat{k}_0 - k'}{\hat{k}_0 + k'}, \quad k' = \sqrt{k^2 - u_0}, \quad (2.71)$$

что естественно, поскольку при $b = 0$ вращение не играет никакой роли. Легко проверить, что в пределе $q = 0$ получаются формулы для отражения и преломления на поверхности зеркала с постоянной намагниченностью \mathbf{b} .

Отражение от границы раздела изнутри зеркала

Мы рассмотрели волну, падающую на границу раздела слева. Для определения амплитуд отражения и пропускания слоя конечной толщины L нужны также соответствующие амплитуды для волны, падающей на границу раздела изнутри вещества. Чтобы найти их, рассмотрим волновую функцию внутри вещества, распространяющуюся влево:

$$|\psi(z)\rangle = \exp(-i\sigma_z(qz + \varphi)) \exp(-i[a + \overleftarrow{\mathbf{p}}\boldsymbol{\sigma}]z) \exp(i\sigma_z\varphi)|\psi(0)\rangle, \quad (2.72)$$

где $\overleftarrow{\mathbf{p}} \neq \overrightarrow{\mathbf{p}}$. Выразив и подставив $\exp(-i[a + \overrightarrow{\mathbf{P}} - \boldsymbol{\sigma}]z)|\chi\rangle$ в уравнение (2.58), получим

$$-a^2 - p^2 - 2a\overleftarrow{\mathbf{p}}\boldsymbol{\sigma} - 2q\sigma_z(a + \overleftarrow{\mathbf{p}}\boldsymbol{\sigma}) - u_0 - 2b\sigma_x + k^2 - q^2 = 0. \quad (2.73)$$

Видно, что полученное уравнение отличается от (2.58) только знаком q . Таким образом, его решения равны

$$\overleftarrow{\mathbf{p}}_z = -q = -\overrightarrow{\mathbf{p}}_z, \quad \overleftarrow{\mathbf{p}}_x = \frac{ab}{q^2 - a^2} = \overrightarrow{\mathbf{p}}_x, \quad \overleftarrow{\mathbf{p}}_y = -i\frac{qb}{q^2 - a^2} = -\overrightarrow{\mathbf{p}}_y. \quad (2.74)$$

Теперь можно записать полную волновую функцию для случая падения волны изнутри зеркала:

$$\Theta(z < 0)\hat{t}' \exp(-i\hat{k}_0 z)|\xi_0\rangle + \Theta(z > 0) \exp(-i\sigma_z qz) [\exp(-i[a + \overleftarrow{\mathbf{p}}_\varphi\boldsymbol{\sigma}]z) + \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}}_\varphi\boldsymbol{\sigma}]z)\hat{r}'] |\xi_0\rangle. \quad (2.75)$$

Сшивка этой функции на границе раздела дает

$$\hat{t}' = [\hat{k}_0 + a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma}]^{-1}[2a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma} + \overleftarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma}], \quad \hat{r}' = [\hat{k}_0 + a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma}]^{-1}[a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma} - \hat{k}_0]. \quad (2.76)$$

Совершенно ясно, что произойдет, если поле внутри среды будет вращаться по часовой стрелке. В этом случае q изменит знак, и параметры $\overrightarrow{\mathbf{p}}$ и $\overleftarrow{\mathbf{p}}$ поменяются местами.

Отражение от пластиинки конечной толщины

Найдем отражение и пропускание пластинкой конечной толщины L . Для этого необходимо вычислить отражение от второй поверхности раздела. Начало координат удобно поместить в точку $z = L$. Волновая функция около этой точки равна

$$\Theta(z < 0) \exp(-iq\sigma_z z) [\exp(-i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}}_\varphi\boldsymbol{\sigma}]z)\hat{r}'' + \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}}_\varphi\boldsymbol{\sigma}]z)] \xi_0 + \Theta(z > 0) \exp(i\hat{k}_0 z)\hat{t}'' \xi_0, \quad (2.77)$$

причем $\hat{t}'' \neq \hat{t}'$, $\hat{r}'' \neq \hat{r}'$ и угол φ — иной, чем на входной поверхности. Условия сшивки приводят к уравнениям

$$\hat{t}'' = 1 + \hat{r}'', \quad \hat{k}_0 \hat{t}'' = -[a + \overleftarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma}]\hat{r}'' + a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma}. \quad (2.78)$$

Их решение равно

$$\hat{t}'' = [\hat{k}_0 + a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma}]^{-1}[2a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma} + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma}], \quad \hat{r}'' = [\hat{k}_0 + a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma}]^{-1}[a + \overrightarrow{\mathbf{p}}'_\varphi\boldsymbol{\sigma} - \hat{k}_0]. \quad (2.79)$$

Отметим, что на расстоянии $-L$ от выходной границы отраженная от нее волна равна

$$\exp(iq\sigma_z L) \exp(i[a + \overleftarrow{\mathbf{p}}_\varphi \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{r}}''. \quad (2.80)$$

Теперь рассмотрим отражение и пропускание пластинкой толщины L . Примем, что на входной поверхности $\varphi = 0$. Тогда у второй границы раздела $\varphi = qL$. Обозначим волну, падающую на вторую границу раздела, через $\hat{\mathbf{X}}$. Для нее можно составить уравнение

$$\hat{\mathbf{X}} = \exp(-iq\sigma_z L) \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{t}} + \exp(-iq\sigma_z L) \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{r}}' \exp(iq\sigma_z L) \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}}_{qL} \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{r}}'' \hat{\mathbf{X}}, \quad (2.81)$$

которое имеет решение

$$\hat{\mathbf{X}} = [1 - \exp(-iq\sigma_z L) \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{r}}' \exp(iq\sigma_z L) \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}}_{qL} \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{r}}'']^{-1} \exp(-iq\sigma_z L) \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{r}}''. \quad (2.82)$$

Выражение (2.82) можно также представить в виде $\hat{\mathbf{X}} = \exp(-iq\sigma_z L) \hat{\mathbf{X}}'$, где

$$\hat{\mathbf{X}}' = \exp(iq\sigma_z L) \hat{\mathbf{X}} = [1 - \exp(2iLa) \exp(i\overrightarrow{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma} L) \hat{\mathbf{r}}' \exp(i\overrightarrow{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma} L) \hat{\mathbf{r}}''_{-qL}]^{-1} \exp(i[a + \overrightarrow{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{t}}, \quad (2.83)$$

причем

$$\hat{\mathbf{r}}''_{-qL} = \exp(iq\sigma_z L) \hat{\mathbf{r}}'' \exp(-iq\sigma_z L) = [\hat{\mathbf{k}}_{-qL} + a + \overleftarrow{\mathbf{p}}' \boldsymbol{\sigma}]^{-1} [a + \overrightarrow{\mathbf{p}}' \boldsymbol{\sigma} - \hat{\mathbf{k}}_{-qL}], \quad (2.84)$$

$$\hat{\mathbf{k}}_{-qL} = \exp(iq\sigma_z L) \hat{\mathbf{k}}_0 \exp(-iq\sigma_z L). \quad (2.85)$$

Амплитуды отражения $\hat{\mathbf{R}}$ и пропускания $\hat{\mathbf{T}}$ выражаются с помощью $\hat{\mathbf{X}}$ следующим образом:

$$\hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{r}} + \hat{\mathbf{t}}' \exp(i[a + \overleftarrow{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma}]L) \hat{\mathbf{r}}''_{-qL} \hat{\mathbf{X}}', \quad \hat{\mathbf{T}} = \exp(-iq\sigma_z L) \hat{\mathbf{t}}''_{-qL} \hat{\mathbf{X}}', \quad (2.86)$$

где

$$\hat{\mathbf{t}}''_{-qL} = \exp(iq\sigma_z L) \hat{\mathbf{t}}'' \exp(-iq\sigma_z L) = [\hat{\mathbf{k}}_{-qL} + a + \overleftarrow{\mathbf{p}}' \boldsymbol{\sigma}]^{-1} [2a + \overleftarrow{\mathbf{p}}' \boldsymbol{\sigma} + \overrightarrow{\mathbf{p}}' \boldsymbol{\sigma}].$$

Все изложенное в этом подразделе о геликоидальных системах справедливо и при наличии внутри вещества постоянного поля \mathbf{B} , параллельного оси z . Основное отличие — в том, что вместо биквадратного уравнения (2.65) получится уравнение третьей степени относительно a^2 .

2.3 Матричный метод расчета многослойных магнитных систем

Кроме аналитических методов расчета отражения и пропускания магнитными зеркалами сложной структуры необходимо знать и численные методы. В случае скалярной частицы наиболее популярен матричный метод, изложенный в разделе 1.10.3. Его можно обобщить на спинорные частицы [48].

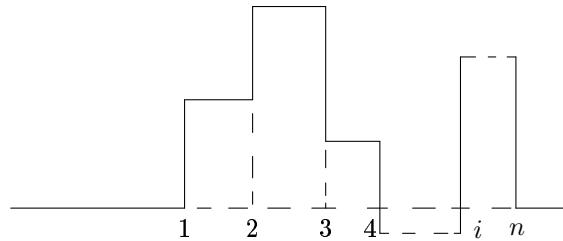


Рис. 2.2: Многослойная система с различными ядерными потенциалами и магнитными полями в слоях

Рассмотрим произвольную многослойную систему типа изображенной на рис. 2.2. Будем полагать, что все слои имеют различные ядерные потенциалы и магнитные поля.

Покажем, как вычисляются матричные амплитуды отражения и пропускания для такой системы.

Слева от границы раздела 1 волновая функция равна

$$\psi_0 = \begin{pmatrix} \exp(i\hat{k}_0^+ x) & 0 \\ 0 & \exp(-i\hat{k}_0^+ x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\xi_0\rangle \\ \hat{\rho}|\xi_0\rangle \end{pmatrix}, \quad (2.87)$$

а справа от n -й поверхности раздела —

$$\psi_n = \begin{pmatrix} \exp(i\hat{k}_n^+(x - x_n)) & 0 \\ 0 & \exp(-i\hat{k}_n^+(x - x_n)) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\tau}|\xi_0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.88)$$

где $|\xi_0\rangle$ — произвольный спинор, характеризующий поляризацию падающего нейтрона, $\hat{\rho}$ и $\hat{\tau}$ — матрицы отражения и пропускания всей системой, которые необходимо вычислить.

Волновые функции (2.87) и (2.88) связаны друг с другом через блочную матрицу \hat{M} :

$$\Xi_0 = \hat{M}\Xi_n \equiv \begin{pmatrix} |\xi_0\rangle \\ \hat{\rho}|\xi_0\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{M}_{11} & \hat{M}_{12} \\ \hat{M}_{21} & \hat{M}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\tau}|\xi_0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.89)$$

где блоки \hat{M}_{ij} сами представляют собой матрицы размерности 2×2 . Из этого соотношения непосредственно следует, что

$$\hat{\tau} = \hat{M}_{11}^{-1}, \quad \text{и} \quad \hat{\rho} = \hat{M}_{21}\hat{M}_{11}^{-1}. \quad (2.90)$$

Таким образом, чтобы найти $\hat{\rho}$ и $\hat{\tau}$, нужно найти матрицу \hat{M} размерности 4×4 . Для этого необходимо сплить волновую функцию (2.100) на всех границах раздела.

Представим волновую функцию в i -м прямоугольнике, расположенному справа от i -й границы раздела в точке a_i , в виде

$$\left(\exp(i\hat{k}_i(x - a_i))\hat{A}_i + \exp(-i\hat{k}_i(x - a_i))\hat{B}_i \right) |\xi_0\rangle. \quad (2.91)$$

Тогда в силу произвольности $|\xi_0\rangle$ условие непрерывности функции и ее производной на i -й границе раздела приводит к двум матричным уравнениям

$$\exp(i\hat{k}_{i-1}d_{i-1})\hat{A}_{i-1} + \exp(-i\hat{k}_{i-1}d_{i-1})\hat{B}_{i-1} = \hat{A}_i + \hat{B}_i,$$

$$\hat{k}_{i-1} \left[\exp(i\hat{k}_{i-1}d_{i-1})\hat{A}_{i-1} - \exp(-i\hat{k}_{i-1}d_{i-1})\hat{B}_{i-1} \right] = \hat{k}_i \left[\hat{A}_i - \hat{B}_i \right],$$

где d_i — ширина i -го слоя. Из этих двух уравнений следует, что

$$\hat{A}_{i-1} = \exp(-i\hat{k}_{i-1}d_{i-1}) \left(\frac{1}{2} \left[1 + \hat{k}_{i-1}^{-1}\hat{k}_i \right] \hat{A}_i + \frac{1}{2} \left[1 - \hat{k}_{i-1}^{-1}\hat{k}_i \right] \hat{B}_i \right), \quad (2.92)$$

$$\hat{B}_{i-1} = \exp(i\hat{k}_{i-1}d_{i-1}) \left(\frac{1}{2} \left[1 - \hat{k}_{i-1}^{-1}\hat{k}_i \right] \hat{A}_i + \frac{1}{2} \left[1 + \hat{k}_{i-1}^{-1}\hat{k}_i \right] \hat{B}_i \right). \quad (2.93)$$

Матрицы \hat{A}_i и \hat{B}_i можно объединить в один суперспинор, или четырехмерный вектор,

$$\Xi_i = \begin{pmatrix} \hat{A}_i \\ \hat{B}_i \end{pmatrix},$$

тогда уравнения (2.92) и (2.93) объединяются в одно:

$$\Xi_{i-1} = \hat{Q}_i^{i-1}\Xi_i,$$

где

$$\hat{Q}_i^{i-1} = \hat{E}_{i-1} \hat{K}_i^{i-1}, \quad \hat{K}_i^{i-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \hat{k}_{i-1}^{-1} \hat{k}_i & 1 - \hat{k}_{i-1}^{-1} \hat{k}_i \\ 1 - \hat{k}_{i-1}^{-1} \hat{k}_i & 1 + \hat{k}_{i-1}^{-1} \hat{k}_i \end{pmatrix}, \quad \hat{E}_i = \begin{pmatrix} e^{-i\hat{k}_i d_i} & 0 \\ 0 & e^{i\hat{k}_i d_i} \end{pmatrix}.$$

Сшивая волновую функцию последовательно на всех границах, получаем полную матрицу

$$\hat{M} = K_1^0 \prod_{i=2}^n \mathcal{N} \left[\hat{Q}_i^{i-1} \right] = K_1^0 \prod_{i=2}^n \mathcal{N} \left[\hat{E}_{i-1} \hat{K}_i^{i-1} \right], \quad (2.94)$$

где символ \mathcal{N} под знаком произведения означает, что сомножители должны располагаться в порядке возрастания i слева направо. Мы не будем продолжать эту тему, полагая, что теперь читатель имеет в своем распоряжении все необходимое для конкретной работы. Вместо этого перейдем к вопросам, которые представляют особый интерес для физики спинорной частицы.

2.4 Поляризаторы, анализаторы и спин-ротаторы

В этом разделе мы рассмотрим различные методы поляризации, анализа поляризации и поворота спина нейtronов.

2.4.1 Поляризаторы

Существуют три способа поляризовать тепловые нейтроны: путем отражения от намагниченных зеркал, пропускания через намагниченные пленки и пропускания через поляризованный газ ${}^3\text{He}$. Два первых способа основаны на том, что взаимодействие нейtronов с веществом описывается оптическим потенциалом $u/2 + \sigma B$, содержащим ядерную ($u = 4\pi N_0 b$) и магнитную (σB) части. Для нейtronов, поляризованных по полю, потенциал $u/2 + B$ выше, чем потенциал $u/2 - B$ для нейtronов, поляризованных против поля. Поэтому, когда энергия E_\perp движения перпендикулярно стенке находится в интервале $u/2 - B \leq E_\perp \leq u/2 + B$, намагниченное вещество полностью отражает нейтроны, поляризованные по полю, и частично — против поля. Прошедшие же нейтроны при коллинеарности внешнего и внутреннего полей должны быть полностью поляризованы против поля.

На многих установках поляризация пучка осуществляется с помощью нейtronоводов, стенки которых полностью отражают только нейтроны поляризованные по полю. Здесь благодаря многократным отражениям происходит чистка пучка от примеси противоположной поляризации, остающейся после однократного соударения со стенкой.

Зеркала и пленки позволяют добиться высокой степени поляризации, но для тепловых нейtronов этот метод работает лишь при малых углах падения и потому дает только узкий, т. е. малоинтенсивный, пучок поляризованных нейtronов. Иногда используется отражение от намагниченных кристаллов. Оно работает при больших углах падения, но годится только для узкой части спектра или для сильно коллимированного пучка.

Пропускание через поляризованный газ ${}^3\text{He}$ позволяет получить широкие пучки, но высокой степени поляризацию удается достичь ценой высоких потерь интенсивности. Этот метод основан на том, что поляризованное ядро сильно поглощает нейтроны, поляризованные в обратном направлении, и не поглощает поляризованные параллельно. Поляризация газа ${}^3\text{He}$ осуществляется путем оптической накачки паров рубидия, которые передают свою поляризацию ядрам гелия при столкновении атомов, или оптической накачки самих атомов гелия после их перевода в возбужденное метастабильное состояние. Степень поляризации атомов гелия удается довести до 30%, а степень поляризации прошедших

нейтронов оказывается тем выше, чем ниже их энергия. При этом чем выше степень поляризации, тем ниже интенсивность. Оптимальная поляризация составляет около 80%. Поляризованный гелий может сохранять свою поляризацию в течение нескольких суток при комнатной температуре.

2.4.2 Анализаторы

Принцип действия анализаторов — такой же, как у поляризаторов. Анализатор — это фильтр, который в случае пленок или зеркал пропускает только нейтроны, поляризованные против поля, или отражает в основном нейтроны, поляризованные по полю, а в случае гелиевого анализатора пропускает только нейтроны, поляризованные параллельно поляризации ядер гелия. Мы пишем «только», хотя это не совсем так, ведь анализатор — неидеальный фильтр, как неидеален и поляризатор.

2.4.3 Спин-ротаторы

Самые важные элементы схем большинства экспериментов с поляризованными нейтронами предназначены для поворота спина и называются спин-ротаторами, спин-флипперами или просто флипперами. Эксперименты с поляризатором и анализатором дают информацию лишь о поляризующих и деполяризующих свойствах образцов, а с флипперами простор для поляризационных исследований становится безграничным.

Повернуть спин можно двумя способами: с помощью постоянного во времени, но быстро меняющегося в пространстве магнитного поля (фактически это флиппер поля а не спина) и с помощью комбинации постоянного и радиочастотного полей [49].

Спин-ротаторы на постоянных полях

В постоянных полях, медленно меняющихся в пространстве, вектор спина нейтрона s «отслеживает» изменение поля, т. е. угол α между B и s сохраняется. Это сохранение тем точнее, чем меньше отношение угловой скорости $\Omega = (1/B)\mathbf{v} dB/dr$ поворота вектора B к частоте прецессии спина $\mu B/\hbar$ в системе отсчета, связанной с движущимся нейтроном (v — его скорость). Отношение Ω/ω называется параметром адиабатичности. Чем он меньше, тем точнее сохраняется скалярное произведение sB . Если же, наоборот, угловая скорость Ω велика, то вектор спина s сохраняет свое направление, не успевая следовать за B . В результате происходит неадиабатическое отставание спина от поля.

Применяются два метода быстрого переворота магнитного поля:

1) *Метод токовой фольги*. Спин-ротатор представляет собой тонкую пленку с текущим вдоль ее поверхности током [50, 51]. Нейtron, пролетевший сквозь пленку, сохраняет направление своего спина, но оказывается в перевернутом поле;

2) *Метод нулевого поля*. Спин-ротатор представляет собой две катушки с противоположно текущими токами. Если две катушки расположены так, как показано на рис. 2.3, *a*, то это флиппер Драбкина [50, 52]. Если катушки расположены, как показано на рис. 2.3, *б*, — это спин-флиппер Корнеева [53–57]. В области, обозначенной буквой *A*, магнитные поля двух катушек компенсируют друг друга, и полное поле равно нулю. Когда нейtron пролетает через область с нулевым полем, направление его спина сохраняется, а направление поля меняется на противоположное [54].

Эти методы хороши тем, что обладают высокой эффективностью для широкого спектра нейтронов.

Спин-ротатор Мезеи. Существует и третий способ поворота спина с помощью постоянных во времени полей, предложенный Мезеи [50, 58]. Он позволяет поворачивать спин на любой угол вокруг любой оси. Спин-флиппер Мезеи схематически изображен на рис. 2.3, *в*.

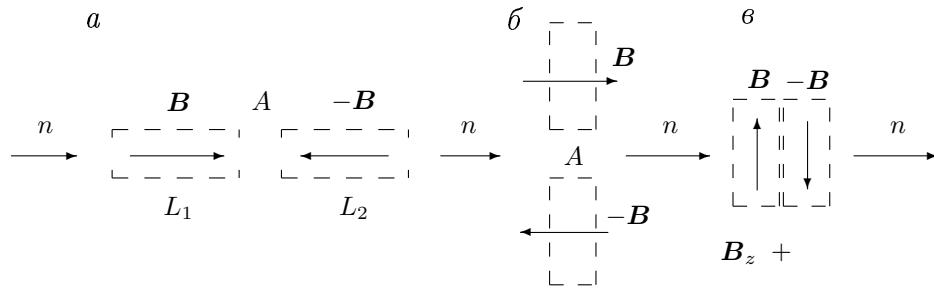


Рис. 2.3: Три типа неадиабатических спин-ротаторов. Для удобства все они помещены на одном и том же нейтронном пучке, обозначенном буквой n . Спин-ротаторы Драбкина (a) и Корнеева (b) состоят из двух катушек, между которыми поле благодаря взаимной компенсации обращается в нуль (область A). Спин-ротатор Мезеи (c) состоит из двух катушек, расположенных поперек нейтронного пучка. Поля B в катушках равны по величине и перпендикулярны внешнему полю B_z , показанному на рисунке крестиком. Спин нейтрона в каждой катушке совершает пол-оборота вокруг оси, параллельной суммарному вектору напряженности внешнего и внутреннего полей $B_z \pm B$

Здесь мы видим две катушки с противоположно ориентированными полями. Катушки расположены поперек нейтронного пучка. Магнитное поле в них по величине равно внешнему магнитному полю, перпендикулярному и направлению пучка, и полю катушек. Внешнее поле обозначено на рисунке крестиком. В этом флиппере происходит быстрый поворот поля по отношению к спину нейтрона всякий раз, когда нейтрон пересекает стенки катушки. Внутри катушки происходит прецессия спина вокруг результирующего поля (внешнее плюс поле катушки), но размеры катушки подбираются так, чтобы нейтрон, пролетая сквозь нее, успевал сделать только часть оборота. Например, если нейтрон сделает пол-оборота в первой катушке и пол-оборота вокруг результирующего поля во второй (оно перпендикулярно результирующему полю первой катушки), то после пролета всей системы ориентация спина нейтрона изменится на противоположную. Поскольку угол поворота спина зависит от времени пролета нейтрона сквозь катушку, а значит, от скорости нейтрона, то спин-ротатор Мезеи эффективен только для узкого спектрального интервала.

Ясно, что одна катушка спин-ротатора Мезеи поворачивает спин на $\pi/2$ вокруг диагонали параллелограмма, сторонами которого являются векторы внешнего и внутреннего полей катушки. Подбирая размер, направление оси катушки и соотношение внешнего и внутреннего полей, можно для заданной энергии нейтрона добиться поворота спина вокруг любой оси на любой угол.

2.4.4 Резонансные спин-ротаторы

Предыдущие системы мы рассмотрели очень коротко, изложив только принцип работы каждой из них. На резонансном же спин-ротаторе остановимся подробнее, потому что с ним связано много интересных экспериментов, о которых пойдет речь далее в этой главе.

Особенность неадиабатических спин-ротаторов с постоянными во времени магнитными полями состоит в том, что они не меняют полную энергию нейтрона. Радиочастотные спин-ротаторы энергию меняют, и это порождает множество интересных явлений, доступных экспериментальному исследованию. Изменение энергии происходит оттого, что в процессе взаимодействия с радиочастотным полем нейтрон может поглотить или испустить электромагнитный квант. С квантовомеханической точки зрения интересен сам процесс захвата и испускания кванта, возникающие суперпозиции состояний нейтрона с разными энергиями, интерференция нейтронов как проявление дуализма волна–частица и множество других эффектов, которые проявляются в экспериментах с поляризованными нейтронами.

В присутствии радиочастотного поля поведение нейтрона описывается нестационарным

уравнением Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t, x)\rangle = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{u(x)}{2} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}_0(x) + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}_{\text{rf}}(t, x) \right) |\Psi(t, x)\rangle, \quad (2.95)$$

в котором вещество представлено потенциалом $u(x)$, а поле разбито на две составляющие. Одна, постоянное поле \mathbf{B}_0 , не зависит от времени, а другая, радиочастотное поле \mathbf{B}_{rf} , зависит.

Будем рассматривать идеализированную задачу, так называемую задачу Крюгера [60], с полями, сосредоточенными в конечной области пространства $0 \leq x \leq D$ (рис. 2.4). При этом

$$\mathbf{B}_0(x) + \mathbf{B}_{\text{rf}}(t, x) = \Theta(0 \leq x \leq D)[\mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_{\text{rf}}(t)], \quad (2.96)$$

т. е. поля в этой области не зависят от координат. Более того, положим для простоты, что $u = 0$, а для конкретности потребуем, чтобы поля \mathbf{B}_0 и \mathbf{B}_{rf} имели компоненты $(0, 0, B_0)$ и $B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), \sin(2\omega t), 0)$, т. е. постоянное поле направлено вдоль оси z , а вектор радиочастотного поля вращается в плоскости (x, y) против часовой стрелки с угловой частотой 2ω (коэффициент 2 выбран для удобства). Поворот спина в магнитном поле \mathbf{B}_0 сопровождается изменением потенциальной энергии на $2B_0$ и полной энергии — на величину кванта электромагнитного поля. Частоту кванта удобно взять равной 2ω , чтобы сравнивать ω с B_0 , а не с $2B_0$.

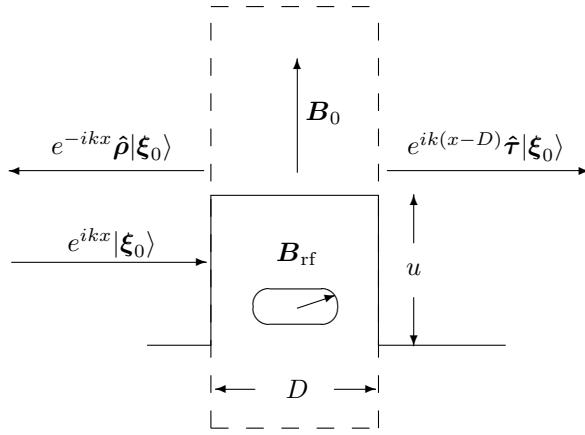


Рис. 2.4: Отражение и пропускание нейтрона магнитными полями, сосредоточенными в плоском слое $0 \leq x \leq D$. Магнитные поля содержат постоянную составляющую $\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0)$ и радиочастотную $\mathbf{B}_{\text{rf}} = B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), \sin(2\omega t), 0)$. Кроме магнитных полей слой может также содержать вещество с потенциалом $u/2$. Спин нейтрона, падающего на слой слева, может быть ориентирован произвольно. Поляризация нейтрона описывается спинором $|\xi_0\rangle$

Для решения уравнения (2.95) нам потребуется волновая функция падающей частицы, которую мы зададим в виде

$$\Theta(x < 0) \exp(ik_0 x - iE_0 t) |\xi_0\rangle, \quad (2.97)$$

где $|\xi_0\rangle$ — спинор произвольной поляризации и $E_0 = k_0^2/2$.

Формула Раби. Рассмотрим самый распространенный случай $E_0 \gg B_0 \gg B_{\text{rf}}$, когда изменение скорости нейтрона, влетающего в поле \mathbf{B}_0 , пренебрежимо мало. Тогда можно записать волновую функцию в виде

$$|\Psi(x, t)\rangle = \exp(ik_0 x - iE_0 t) |\Psi(t)\rangle \quad (2.98)$$

и пренебречь отражениями на границах раздела. Подстановка (2.98) в (2.95) приводит к уравнению

$$id|\Psi(t)\rangle/dt = [\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}_0 + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}_{\text{rf}}(t)]|\Psi(t)\rangle \quad (2.99)$$

с начальным условием $|\Psi(0)\rangle = |\xi_0\rangle$ в момент влета нейтрона в поле.

Для решения уравнения (2.99) воспользуемся легко проверяемым тождеством (см. раздел 2.1.3)

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}_{\text{rf}}(t) = B_{\text{rf}}[\boldsymbol{\sigma}_x \cos(2\omega t) + \boldsymbol{\sigma}_y \sin(2\omega t)] = B_{\text{rf}}e^{-i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t} \boldsymbol{\sigma}_x e^{i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t} \quad (2.100)$$

и введем обозначение

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t}|\phi(t)\rangle. \quad (2.101)$$

Подстановка (2.100), (2.101) в уравнение (1.149) приводит последнее к виду

$$id|\phi(t)\rangle/dt = (\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\Omega})|\phi(t)\rangle, \quad (2.102)$$

где $\boldsymbol{\Omega} = (B_{\text{rf}}, 0, B_0 - \omega)$.

Выражение в скобках в правой части уравнения (2.102) не зависит от времени, поэтому решение для $|\phi(t)\rangle$ очевидно: $|\phi(t)\rangle = \exp(-i\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\sigma}t)|\phi(0)\rangle$. Начальное условие $|\Psi(0)\rangle = |\xi_0\rangle$ эквивалентно условию $|\phi(0)\rangle = |\xi_0\rangle$. Подставив его в (2.101), получим

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t} e^{-i\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\sigma}t} |\xi(0)\rangle = e^{-i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t} \left[\cos \Omega t - i \frac{\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\sigma}}{\Omega} \sin \Omega t \right] |\xi_0\rangle, \quad (2.103)$$

где $\Omega = |\boldsymbol{\Omega}| = \sqrt{B_{\text{rf}}^2 + (\delta\omega)^2}$, $\delta\omega = B_0 - \omega$.

Предположим, что спин первичной частицы ориентирован параллельно полю \mathbf{B}_0 , т. е. $|\xi_0\rangle = |\xi_u\rangle$. Множитель $\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\Omega} = B_{\text{rf}}\boldsymbol{\sigma}_x + \delta\omega\boldsymbol{\sigma}_z$ в (2.103) содержит недиагональную матрицу $\boldsymbol{\sigma}_x$, которая описывает переворот поляризации. Поэтому вероятность переворота спина после пребывания в полях в течение времени $t = t_1 = D/k_0$ равна

$$w_{\text{fl}} = \left| \frac{\Omega_x}{\Omega} \sin(\Omega t_1) \right|^2 = \frac{B_{\text{rf}}^2}{B_{\text{rf}}^2 + (\omega - B_0)^2} \sin^2 \left(\sqrt{B_{\text{rf}}^2 + (\omega - B_0)^2} t_1 \right). \quad (2.104)$$

Выражение (2.104) представляет собой хорошо известную формулу Раби. Для полного переворота спина ($w_{\text{fl}} = 1$) необходимо, чтобы выполнялись условия резонанса для ω и t_1 : $\omega = B_0$ и $t_1 B_{\text{rf}} = \pi n + \pi/2$, где n — целое число.

Преобразование неполяризованного пучка в полностью поляризованный

Согласно (2.104), при резонансе ($\omega = B_0$) вероятность переворота спина равна

$$w_{\text{fl}} = \sin^2(B_{\text{rf}}t_1). \quad (2.105)$$

Она зависит от времени пребывания нейтрона в катушке $t_1 = l/v_0$, где l — толщина катушки и v_0 — скорость нейтрона. Естественно ожидать, что неполяризованный пучок нейтронов после катушки останется неполяризованным, однако это справедливо только в том случае, если скорость нейтронов внутри поля \mathbf{B}_0 , создаваемого катушкой флиппера, не зависит от поляризации, что мы и предполагали при выводе формулы (2.104). Это предположение справедливо, когда кинетическая энергия нейтрона $v_0^2/2$ много больше магнитной потенциальной энергии $2B_0$. При низких же энергиях, такие свойственны, например, ультрахолодным нейtronам, необходимо учитывать изменение скорости нейтрона в магнитном поле. Нейтроны, поляризованные параллельно полю внутри катушки, замедляются (их скорость $v_+ = \sqrt{v_0^2 - 4B_0} < v_0$), а нейтроны, поляризованные против полю \mathbf{B}_0 , — ускоряются (их скорость $v_- = \sqrt{v_0^2 + 4B_0} > v_0$). Отсюда следует, что нейтроны

с разной поляризацией проводят внутри радиочастотной катушки разное время: $t_+ = l/v_+$ и $t_- = l/v_-$ соответственно.

Используя эту разность времен, можно создать такие условия, что неполяризованный пучок после прохождения резонансного радиочастотного спин-флиппера окажется полностью поляризованным [59]. Если подобрать толщину катушки l таким образом, чтобы $B_{\text{rf}}t_+ = \pi$, а $B_{\text{rf}}t_- = \pi/2$, то нейтроны, поляризованные по полю, не изменят свою поляризацию, а нейтроны, поляризованные против поля, — изменят ее на противоположную. Таким образом, после катушки спин-флиппера все нейтроны окажутся поляризованными параллельно внутреннему полю катушки \mathbf{B}_0 .

Если же выбрать толщину катушки так, чтобы $B_{\text{rf}}t_+ = 3\pi/2$, а $B_{\text{rf}}t_- = \pi$, то нейтроны, поляризованные по полю, изменят свою поляризацию на противоположную, а нейтроны, поляризованные против поля, ее не изменят. Таким образом, после катушки спин-флиппера все нейтроны окажутся поляризованными противоположно внутреннему полю катушки \mathbf{B}_0 .

Линейно осциллирующее поле

Мы рассмотрели переворот спина во вращающемся радиочастотном поле

$$\mathbf{B}_{\text{rf}} = B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), \sin(2\omega t), 0).$$

На самом деле обычно используется линейно осциллирующее поле $\mathbf{B}_{\text{rf}} = B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), 0, 0)$. Линейно осциллирующее поле можно представить в виде суперпозиции двух полей, вращающихся в противоположных направлениях:

$$\mathbf{B}_{\text{rf}} = B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), 0, 0) = \frac{1}{2}B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), \sin(2\omega t), 0) + \frac{1}{2}B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), -\sin(2\omega t), 0).$$

Таким образом, наряду с полем, вращающимся против часовой стрелки, т. е. в ту же сторону, что и прецессирующий спин, имеется поле, вращающееся в обратную сторону.

Влияние последнего на поляризацию нейтрона можно оценить при помощи формулы (2.104), подставив в нее $\omega = -B_0$. Вероятность переворота спина под действием этого поля равна

$$w_{\text{fl}} = \left| \frac{\Omega_x}{\Omega} \sin(\Omega t_1) \right|^2 \approx \frac{B_{\text{rf}}^2}{4B_0^2} \sin^2(2B_0 t). \quad (2.106)$$

Мы видим, что вероятность появления противоположной компоненты спина не превосходит $B_{\text{rf}}^2/4B_0^2 \ll 1$. Значит, противоположно вращающееся поле приводит к эффективной деполяризации нейтрона порядка $\delta P = B_{\text{rf}}^2/4B_0^2 \ll 1$. Обычно поляризация нейтронов вследствие неидеальной монохроматизации отличается от единицы на значительно большую величину, поэтому влиянием противоположно вращающегося поля на спин нейтрона можно пренебречь.

2.4.5 Неупругое взаимодействие нейтрона с радиочастотным полем

Формула (2.104) описывает переворот спина, но ничего не говорит о том, какие изменения происходят с энергией и импульсом нейтрона после взаимодействия с полем, и это естественно, поскольку при ее выводе мы пренебрегли изменением скорости нейтрона при входе в область с магнитными полями и выходе из нее. Однако допустим, что мы захотим узнать, как в результате взаимодействия изменилась энергия нейтрона. Здесь возникает неопределенность. С одной стороны, можно считать, что в результате взаимодействия с полями происходит захват или испускание радиочастотного кванта. В этом случае энергия нейтрона после взаимодействия может измениться на $\pm 2\omega$. С другой стороны, можно

допустить, что в результате переворота спина в поле B_0 кинетическая энергия нейтрона остается неизменной, зато потенциальная меняется на $\pm 2B_0$. Поэтому и полная энергия после взаимодействия с полями изменится на $\pm 2B_0$. В условиях резонанса, $\omega = B_0$, оба предположения приводят к одинаковому результату. Если же $\omega \neq B_0$, то результаты получатся разными. Ниже будет показано, что изменение энергии нейтрона целиком определяется энергией радиочастотного кванта, а не B_0 .

Предположительный вид волновой функции

Для того чтобы доказать это, необходимо проследить всю динамику взаимодействия нейтрона с полями спин-ротатора, а значит, решить полное уравнение Шредингера (2.95) с падающей плоской волной (2.97) с произвольной поляризацией $|\xi_0\rangle$. Но прежде чем решать полное уравнение, полезно путем простых рассуждений угадать, как может выглядеть волновая функция нейтрона, прошедшего через резонансный спин-ротатор, если падающий нейтрон описывается плоской волной (2.97) с волновым вектором k_0 , энергией $E_0 = k_0^2/2$, поляризацией $|\xi_0\rangle = |\xi_u\rangle$, параллельной постоянному полю B_0 спин-ротатора, и мы знаем, что при перевороте спина энергия нейтрона уменьшается на величину 2ω .

Волновую функцию падающего нейтрона $\exp(ik_0x - iE_0t)|\xi_u\rangle$ можно записать также в виде

$$\exp(i\hat{k}x - iE_0t - i\omega(\sigma_z - 1)t)|\xi_u\rangle, \quad (2.107)$$

где $\hat{k} = \sqrt{k_0^2 + 2\omega(\sigma_z - 1)}$, поскольку поскольку σ_z при действии на $|\xi_u\rangle$ равна единице. При этом волновая функция нейтрона, прошедшего через спин-ротатор, принимает вид

$$|\Psi(x, t)\rangle = \exp\left(i\hat{k}x - iE_0t - i\omega(\sigma_z - 1)t\right)\hat{\tau}|\xi_u\rangle. \quad (2.108)$$

Допустим, что матрица пропускания равна $\hat{\tau} = \exp(-i\Omega\sigma T)$, как это следует из формулы Раби, где $\Omega = (B_{\text{rf}}, 0, B_0 - \omega)$ и T — время пребывания нейтрона в ротаторе. В случае резонанса матрицу пропускания можно представить в виде

$$\hat{\tau} = \exp(-i\sigma_x\phi), \quad (2.109)$$

где $\phi = B_{\text{rf}}T$, и ее воздействие преобразует $|\xi_u\rangle$ в суперпозицию двух состояний: $\hat{\tau}|\xi_u\rangle = \cos\phi|\xi_u\rangle - i\sin\phi|\xi_d\rangle$. Подстановка (2.109) в (2.108) приводит волновую функцию к виду

$$|\Psi(x, t)\rangle = \cos\phi\exp(ik_0x - iE_0t)|\xi_u\rangle - i\sin\phi\exp(ik'x - i(E_0 - 2\omega)t)|\xi_d\rangle, \quad (2.110)$$

где $k' = \sqrt{k_0^2 - 4\omega}$.

Отсюда видно, что после спин-ротатора нейтрон с вероятностью $\cos^2\phi$ сохраняет свою поляризацию, а потому его скорость и энергия остаются такими же, как в падающей волне, а с вероятностью $\sin^2\phi$ спин нейтрона переворачивается, причем энергия и скорость уменьшаются до $E_0 - 2\omega$ и $k' = \sqrt{k_0^2 - 4\omega}$ соответственно.

Если в начальном состоянии нейтрон поляризован против поля, то его волновая функция до попадания в спин-ротатор равна

$$\exp(ik_0x - iE_0t)|\xi_d\rangle \equiv \exp(i\hat{k}x - iE_0t - i\omega(\sigma_z + 1)t)|\xi_d\rangle,$$

где $\hat{k} = \sqrt{k_0^2 + 2\omega(\sigma_z + 1)}$, а после вылета из него приобретает вид

$$|\Psi(x, t)\rangle = \exp(i\hat{k}x - iE_0t - i\omega(\sigma_z + 1)t)\hat{\tau}|\xi_d\rangle. \quad (2.111)$$

При той же матрице пропускания $\hat{\tau}$ (2.109) получаем после спин-ротатора суперпозицию состояний:

$$|\Psi(x, t)\rangle = \cos\phi\exp(ik_0x - iE_0t)|\xi_d\rangle - i\sin\phi\exp(ik'x - i(E_0 + 2\omega)t)|\xi_u\rangle, \quad (2.112)$$

где $k' = \sqrt{k_0^2 + 4\omega}$.

Отсюда видно, что после спин-ротатора нейтрон с вероятностью $\cos^2 \phi$ сохраняет свою поляризацию, а потому его скорость и энергия остаются такими же, как в падающей волне, и с вероятностью $\sin^2 \phi$ спин нейтрона переворачивается, причем энергия и скорость увеличиваются до $E_0 + 2\omega$ и $k' = \sqrt{k_0^2 + 4\omega}$ соответственно.

При произвольной поляризации падающего нейтрона

$$|\xi_0\rangle = \alpha_u |\xi_u\rangle + \alpha_d |\xi_d\rangle$$

можно ожидать, что после спин-ротатора нейтрон окажется в суперпозиции трех состояний. С вероятностью $\cos^2 \phi$ он сохранит свою поляризацию, а значит, его скорость и энергия будут такими же, как в падающем пучке; с вероятностью $|\alpha_u \sin \phi|^2$ он будет находиться в состоянии $|\xi_d\rangle$ с энергией $E_0 - 2\omega$ и скоростью $k'_d = \sqrt{k_0^2 - 4\omega}$ и с вероятностью $|\alpha_d \sin \phi|^2$ — в состоянии $|\xi_u\rangle$ с энергией $E_0 + 2\omega$ и скоростью $k'_u = \sqrt{k_0^2 + 4\omega}$.

Задача Крюгера

Выше мы попытались угадать или сконструировать волновую функцию, исходя из предположения, что взаимодействие с радиочастотным полем должно при повороте спина менять энергию нейтрона на $\pm 2\omega$. Теперь мы должны доказать это, точно решив полное нестационарное уравнение Шредингера (2.97) с постоянным полем \mathbf{B}_0 и радиочастотным \mathbf{B}_{rf} , сосредоточенными в ограниченной области пространства.

Эту задачу с магнитными полями (2.96) с целью показать, что с помощью радиочастотного поля можно ускорять нейтрон, сформулировал Крюгер [60]. Идея состоит в следующем: представим себе, что в область полей влетает нейтрон, поляризованный противоположно полю \mathbf{B}_0 . Внутри области $0 \leq x \leq D$ скорость нейтрона увеличивается, потому что магнитное взаимодействие для такого нейтрона притягивающее. Радиочастотное поле переворачивает спин, но не меняет скорость нейтрона. После поворота спина нейтрон оказывается поляризованным по полю, а значит, магнитное взаимодействие для него становится отталкивающим. Поэтому скорость нейтрона после вылета его из области $0 \leq x \leq D$, снова увеличивается. Таким образом энергия нейтрона в пустом пространстве после взаимодействия с магнитными полями возрастает, т. е. нейтрон ускоряется. Заметим, что согласно этой логике изменение энергии равно $2B_0$.

При противоположной поляризации первичного нейтрона может произойти, наоборот, замедление вместо ускорения. Процесс замедления с целью получения ультрахолодных нейтронов был за двадцать лет до Крюгера рассмотрен Драбкиным и Житниковым [61].

Для расчета вероятности ускорения или замедления при произвольной исходной поляризации нейтрона нужно записать полную волновую функцию вне и внутри области $0 \leq x \leq D$ и сшить на границах. Для падающей волны (2.97) с произвольной поляризацией мы имеем по четыре отраженные и прошедшие волны (всего восемь неизвестных коэффициентов, характеризующих амплитуды волн с разными энергиями и поляризациями). По две волны отражаются и проходят без переворота поляризации и по две с переворотом, причем одна из них соответствует ускоренному нейтрону, поглотившему радиочастотный квант, а другая — замедленному, испустившему радиочастотный квант.

Волновая функция внутри области $0 \leq x \leq D$, сшиваемая с функцией вне области, состоит из восьми волн, которые распространяются в двух противоположных направлениях, и содержит восемь неизвестных коэффициентов. Таким образом, полное решение задачи о рассеянии нейтрона на такой системе полей включает шестнадцать коэффициентов, т. е. необходимо разрешить линейную систему шестнадцати уравнений относительно шестнадцати неизвестных. Принципиальных трудностей здесь нет, но воодушевления такой расчет не вызывает. Сам Крюгер ограничился приближенным решением, которого

было достаточно для подтверждения возможности ускорения нейтрона. Позже к этой задаче обращались авторы работ [62, 63].

Мы покажем, как найти решение задачи Крюгера без утомительных вычислений. Наше решение будет содержать всю информацию о прошедших и отраженных волнах в общем виде, и для определения того или иного коэффициента достаточно будет воспользоваться алгеброй матриц Паули (см. раздел 2.1.3).

2.4.6 Решение задачи Крюгера

Итак, обратимся к уравнению Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)\rangle = \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left[\frac{u}{2} + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}_0 + \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}_{\text{rf}}(t) \right] \Theta(0 \leq x \leq D) \right\} |\Psi(x, t)\rangle, \quad (2.113)$$

в котором постоянное $\mathbf{B}_0 = (0, 0, B_0)$ и радиочастотное $\mathbf{B}_{\text{rf}}(t) = B_{\text{rf}}(\cos(2\omega t), \sin(2\omega t), 0)$ поля сосредоточены внутри слоя вещества $0 \leq x \leq D$ с оптическим потенциалом u . Вне области $x \in [0, D]$ нет ни вещества, ни полей.

Поиск решения задачи (2.113) осложняется тем, что магнитное поле зависит от времени. Мы можем исключить эту зависимость с помощью преобразования

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}_{\text{rf}}(t) = B_{\text{rf}}[\boldsymbol{\sigma}_x \cos(2\omega t) + \boldsymbol{\sigma}_y \sin(2\omega t)] = B_{\text{rf}} e^{-i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t} \boldsymbol{\sigma}_x e^{i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t}, \quad (2.114)$$

и подстановки

$$|\Psi(x, t)\rangle = e^{-i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t} |\phi(x, t)\rangle. \quad (2.115)$$

В результате уравнение (2.113) преобразуется к виду

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\phi(x, t)\rangle = \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \omega \boldsymbol{\sigma}_z + \left[\frac{u}{2} + \boldsymbol{\sigma}_z \mathbf{B}_0 + \boldsymbol{\sigma}_x B_{\text{rf}} \right] \Theta(0 \leq x \leq D) \right\} |\phi(x, t)\rangle. \quad (2.116)$$

В полученном уравнении магнитные поля не зависят от времени, зато во всем пространстве появилось дополнительное магнитное поле $-\omega$, антипараллельное \mathbf{B}_0 . Однако решение уравнения (2.116) эквивалентно решению задачи об отражении и пропускании магнитным зеркалом, намагниченность которого неколлинеарна внешнему полю (раздел 2.2.1).

Стационарное решение уравнения (2.116), содержащее падающую слева плоскую волну с произвольным спинором $|\xi_0\rangle$, имеет вид

$$|\phi(x, t, E)\rangle = e^{-iEt} \left\{ \Theta(x < 0) \left[e^{i\hat{k}x} + e^{-i\hat{k}x} \hat{\rho} \right] + \Theta(x > D) e^{i\hat{k}(x-D)} \hat{\tau} \right\} |\xi_0\rangle, \quad (2.117)$$

где E — энергетический параметр (это еще не энергия), $\hat{k} = \sqrt{2(E + \boldsymbol{\sigma}_z \omega)}$, $\hat{\rho}$ и $\hat{\tau}$ — матричные амплитуды отражения и пропускания слоем D с веществом и полями. Здесь выписано решение только вне области полей, потому что решение внутри области D нас пока не интересует.

Подстановка (2.117) в (2.115) дает

$$|\Psi(x, t, E)\rangle = e^{-iEt-i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t} \left\{ \Theta(x < 0) \left[e^{i\hat{k}x} + e^{-i\hat{k}x} \hat{\rho} \right] + \Theta(x > D) e^{i\hat{k}(x-D)} \hat{\tau} \right\} |\xi_0\rangle. \quad (2.118)$$

Проанализируем полученное решение для произвольного спинора

$$|\xi_0\rangle = \alpha_u |\xi_u\rangle + \alpha_d |\xi_d\rangle. \quad (2.119)$$

Подстановка (2.119) в (2.118) показывает, что падающая плоская волна в (2.118)

$$|\Psi_0(x, t, E)\rangle = e^{-iEt-i\omega \boldsymbol{\sigma}_z t} \Theta(x < 0) e^{i\hat{k}x} |\xi_0\rangle \quad (2.120)$$

представляет собой суперпозицию

$$|\Psi_0(x, t, E)\rangle = \alpha_u e^{-i(E+\omega)t} e^{ik_+x} |\xi_u\rangle + \alpha_d e^{-i(E-\omega)t} e^{ik_-x} |\xi_d\rangle \quad (2.121)$$

двух плоских волн с противоположной поляризацией $|\xi_{u,d}\rangle$ и разными энергиями. Компонента с $|\xi_u\rangle$ имеет энергию $E + \omega$ и импульс $k_+ = \sqrt{2(E + \omega)}$, а компонента с $|\xi_d\rangle$ имеет энергию $E - \omega$ и импульс $k_- = \sqrt{2(E - \omega)}$. Если мы хотим найти решение для произвольной поляризации (2.119) с заданной энергией E_0 падающего нейтрона, одинаковой для обеих компонент, нужно взять суперпозицию двух решений (2.117) с $E = E_0 - \omega$ для поляризации $|\xi_u\rangle$ и с $E = E_0 + \omega$ для поляризации $|\xi_d\rangle$. Взяв решение уравнения (2.116) в виде

$$\begin{aligned} |\phi(x, t)\rangle &= \alpha_u e^{-i(E_0-\omega)t} \left\{ \Theta(x < 0) \left[e^{i\hat{k}_u x} + e^{-i\hat{k}_u x} \hat{\rho}_u \right] + \right. \\ &\quad \left. + \Theta(x > D) e^{i\hat{k}_u(x-D)} \hat{\tau}_u \right\} |\xi_u\rangle + \\ &\quad + \alpha_d e^{-i(E_0+\omega)t} \left\{ \Theta(x < 0) \left[e^{i\hat{k}_d x} + e^{-i\hat{k}_d x} \hat{\rho}_d \right] + \right. \\ &\quad \left. + \Theta(x > D) e^{i\hat{k}_d(x-D)} \hat{\tau}_d \right\} |\xi_d\rangle, \end{aligned} \quad (2.122)$$

где $\hat{k}_{u,d} = \sqrt{k_0^2 + 2\omega(\sigma_z \mp 1)}$, $k_0^2 = 2E_0$, подставим его в (2.115) и получим

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)\rangle &= \alpha_u e^{-iE_0t-i\omega(\sigma_z-1)t} \left\{ \Theta(x < 0) \left[e^{i\hat{k}_u x} + e^{-i\hat{k}_u x} \hat{\rho}_u \right] + \right. \\ &\quad \left. + \Theta(x > D) e^{i\hat{k}_u(x-D)} \hat{\tau}_u \right\} |\xi_u\rangle + \\ &\quad + \alpha_d e^{-iE_0t-i\omega(\sigma_z+1)t} \left\{ \Theta(x < 0) \left[e^{i\hat{k}_d x} + e^{-i\hat{k}_d x} \hat{\rho}_d \right] + \right. \\ &\quad \left. + \Theta(x > D) e^{i\hat{k}_d(x-D)} \hat{\tau}_d \right\} |\xi_d\rangle. \end{aligned} \quad (2.123)$$

В этом решении у падающей волны

$$|\Psi_0(x, t)\rangle = \alpha_u e^{-iE_0t-i\omega(\sigma_z-1)t} e^{i\hat{k}_u x} |\xi_u\rangle + \alpha_d e^{-iE_0t-i\omega(\sigma_z+1)t} e^{i\hat{k}_d x} |\xi_d\rangle = e^{ik_0x-iE_0t} |\xi_0\rangle \quad (2.124)$$

энергия E_0 и скорость k_0 для произвольной поляризации $|\xi_0\rangle$ фиксированы.

Обратим внимание на то, что энергия нейтрона после переворота спина в спиновом ротаторе действительно меняется на 2ω , а не на $2B_0$, как можно было ожидать. Кроме того, мы правильно угадали вид волновой функции после взаимодействия со спин-ротатором. Однако мы пока не знаем точного вида матрицы пропускания $\hat{\tau}$.

Матрицы отражения и пропускания

Решение (2.123) содержит матричные амплитуды отражения $\rho_{u,d}$ и пропускания $\tau_{u,d}$, которые уже были найдены в разделе 2.2.1. Там для произвольной поляризации была фиксирована энергия падающего нейтрона. Теперь эти матрицы нужно вычислять отдельно для случая, когда падающий нейtron поляризован вдоль поля B_0 и для него параметр $E = E_0 - \omega$ (соответствующие матрицы отражения и пропускания обозначим $\hat{\rho}_u$ и $\hat{\tau}_u$), и для случая, когда падающий нейtron поляризован против поля B_0 , а параметр $E = E_0 + \omega$ (соответствующие матрицы отражения и пропускания обозначим $\hat{\rho}_d$ и $\hat{\tau}_d$). Рассуждая аналогично тому, как это было сделано в разделе 2.2.1, получим матричные амплитуды

$$\hat{\rho}_{u,d} = \hat{\rho}_{b0}^{u,d} + \hat{\tau}_{0b}^{u,d} \frac{\exp(i\hat{k}'_{u,d}D) \hat{\rho}_{0b}^{u,d}}{1 - [\exp(i\hat{k}'_{u,d}D) \hat{\rho}_{0b}^{u,d}]^2} \exp(i\hat{k}'_{u,d}D) \hat{\tau}_{b0}^{u,d}, \quad (2.125)$$

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_{u,d} = \hat{\boldsymbol{\tau}}_{0b}^{u,d} \frac{1}{1 - \left[\exp(i\hat{k}'_{u,d}D) \hat{\boldsymbol{\rho}}_{0b}^{u,d} \right]^2} \exp(i\hat{k}'_{u,d}D) \hat{\boldsymbol{\tau}}_{0b}^{u,d}, \quad (2.126)$$

где

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}_{0b}^{u,d} = (\hat{k}_{u,d} + \hat{k}'_{u,d})^{-1} (\hat{k}_{u,d} - \hat{k}'_{u,d}) = -\hat{\boldsymbol{\rho}}_{0b}^{u,d}, \quad (2.127)$$

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_{0b}^{u,d} = (\hat{k}_{u,d} + \hat{k}'_{u,d})^{-1} 2\hat{k}_{u,d}, \quad \hat{\boldsymbol{\tau}}_{0b}^{u,d} = (\hat{k}_{u,d} + \hat{k}'_{u,d})^{-1} 2\hat{k}'_{u,d}, \quad (2.128)$$

$$\hat{k}_{u,d} = \sqrt{k_0^2 + 2\omega(\sigma_z \mp 1)}, \quad \hat{k}'_{u,d} = \sqrt{k_0^2 \mp 2\omega - 2\sigma\Omega - u}, \quad (2.129)$$

а индексы $b0, 0b$ относятся к границам раздела между вакуумом и барьером со стороны барьера и вакуума соответственно. Применяя алгебру матриц Паули, можно найти все матричные элементы матриц $\hat{\boldsymbol{\rho}}_{u,d}$ и $\hat{\boldsymbol{\tau}}_{u,d}$. Диагональные матричные элементы определяют вероятность отражения или пропускания без переворота спина, а недиагональные — с переворотом.

Все матрицы M размерности 2×2 могут быть представлены в виде $M = aI + b\sigma$, где I — единичная матрица, a и b — четыре параметра. Соответственно переходы без переворота поляризации описываются слагаемыми $aI + b_z\sigma_z$, а переходы с переворотом — слагаемыми $b_x\sigma_x + b_y\sigma_y$.

Рассмотрим структуру отраженных волн, когда падающая волна имеет вид (2.124) с поляризацией (2.119). После отражения часть волны, отвечающая упругому рассеянию, т. е. без переворота поляризации, содержит спинор

$$|\xi_r^{\text{el}}\rangle = \alpha_u \rho_{uu} |\xi_u\rangle + \alpha_d \rho_{dd} |\xi_d\rangle, \quad (2.130)$$

где

$$\rho_{uu} = \langle \xi_u | \hat{\boldsymbol{\rho}}_u | \xi_u \rangle, \quad \rho_{dd} = \langle \xi_d | \hat{\boldsymbol{\rho}}_d | \xi_d \rangle.$$

Спинор (2.130) отличается от спинора $|\xi_0\rangle$ падающей волны, и потому поляризация волны, отраженной без переворота спина, отличается от поляризации падающей, но эта часть отраженной волны распространяется с той же энергией и скоростью, что и падающая:

$$|\Psi_r^{\text{el}}(x)\rangle = \rho_{uu} \alpha_u e^{-iE_0 t - i\omega(\sigma_z - 1)t} e^{-i\hat{k}_u x} |\xi_u\rangle + \rho_{dd} \alpha_d e^{-iE_0 t - i\omega(\sigma_z + 1)t} e^{-i\hat{k}_d x} |\xi_d\rangle = e^{-ik_0 x - iE_0 t} |\xi_r^{\text{el}}\rangle. \quad (2.131)$$

Другая часть волны отвечает неупругому рассеянию с переворотом спина. Ее волновая функция равна

$$\begin{aligned} |\Psi_r^{\text{in}}(x)\rangle &= \rho_{du} \alpha_u e^{-iE_0 t - i\omega(\sigma_z - 1)t} e^{-i\hat{k}_u x} |\xi_d\rangle + \rho_{ud} \alpha_d e^{-iE_0 t - i\omega(\sigma_z + 1)t} e^{-i\hat{k}_d x} |\xi_u\rangle = \\ &= \rho_{du} \alpha_u e^{-i(E_0 - 2\omega)t - ik_x} |\xi_d\rangle + \rho_{ud} \alpha_d e^{-i(E_0 + 2\omega)t - ik_x} |\xi_u\rangle, \end{aligned} \quad (2.132)$$

где

$$\rho_{du} = \langle \xi_d | \hat{\boldsymbol{\rho}}_u | \xi_u \rangle, \quad \rho_{ud} = \langle \xi_u | \hat{\boldsymbol{\rho}}_d | \xi_d \rangle,$$

$\mathbf{k}_\pm = \sqrt{2(E_0 \pm 2\omega)}$, $E_0 = k_0^2/2$. Первое слагаемое (2.132) отвечает перевороту поляризации $|\xi_u\rangle \rightarrow |\xi_d\rangle$ с испусканием радиочастотного кванта и замедлением нейтрона после выхода в пустое пространство, а второе — перевороту поляризации $|\xi_d\rangle \rightarrow |\xi_u\rangle$ с поглощением кванта и ускорением.

Аналогичную структуру имеет и волновая функция пропущенного нейтрона. Отметим, что изменение энергии нейтрона после захвата и испускания радиочастотного кванта равно 2ω — энергии кванта и не зависит от B_0 . От B_0 зависит только вероятность поглощения и испускания, но не энергия спиновых компонент нейтрона. Этот результат решает проблему, возникшую после вывода формулы Раби (2.104).

2.4.7 Приближенные выражения для матрицы пропускания (2.126)

Мы не будем вычислять матричные элементы матриц (2.125) и (2.126) в общем случае, оставив это тем, кто хочет научиться применять алгебру матриц Паули и кому это необходимо для описания соответствующих экспериментов. Ограничимся матрицей пропускания в простейшем случае, когда потенциал u равен нулю и $B_{\text{rf}} \ll k_0^2 - 2\omega$. При этом мы рассмотрим только случай, когда пропускание достаточно велико и многократными преотражениями внутри катушки можно пренебречь. При этом условии выражение (2.126) приводится к виду

$$\hat{\tau}_{u,d} = \hat{\tau}_{0b}^{u,d} \exp(i\hat{k}'_{u,d}D)\hat{\tau}_{b0}^{u,d}, \quad (2.133)$$

где

$$\hat{\tau}_{b0}^{u,d} = \frac{2\sqrt{k_0^2 + 2\omega(\sigma_z \mp 1)}}{\sqrt{k_0^2 + 2\omega(\sigma_z \mp 1)} + \sqrt{k_0^2 \mp 2\omega}}, \quad \hat{\tau}_{0b}^{u,d} = \frac{2\sqrt{k_0^2 \mp 2\omega}}{\sqrt{k_0^2 + 2\omega(\sigma_z \mp 1)} + \sqrt{k_0^2 \mp 2\omega}}, \quad (2.134)$$

т. е. в последних выражениях мы пренебрегли B_{rf} .

При высоких энергиях, когда можно пренебречь B_{rf} и ω по сравнению с k_0^2 , отражение будет нулевым, а матрицы пропускания $\hat{\tau}_{b0}^{u,d} = \hat{\tau}_{0b}^{u,d} = 1$. В этом случае (2.133) станет еще проще:

$$\hat{\tau}_{u,d} \approx \exp\left(i\hat{k}'_{u,d}(\sigma\Omega)D\right), \quad \text{где} \quad \hat{k}'_{u,d}(\sigma\Omega) = \sqrt{k_0^2 \mp 2\omega - 2\Omega\sigma}. \quad (2.135)$$

Воспользуемся соотношениями (2.32) и (2.33). Согласно (2.32),

$$\hat{k}'_u(\sigma\Omega) = K_{u,d}^+ + (\Omega\sigma/\Omega)K_{u,d}^-,$$

где $\Omega = \sqrt{B_{\text{rf}}^2 + (\omega - B_0)^2}$,

$$K_{u,d}^\pm = \frac{1}{2}[k'_{u,d}(\Omega) \pm k'_{u,d}(-\Omega)], \quad k'_u(\pm\Omega) = \sqrt{k_0^2 - 2\omega \mp 2\Omega}, \quad k'_d(\pm\Omega) = \sqrt{k_0^2 + 2\omega \mp 2\Omega}.$$

В результате матрица $\hat{\tau}_{u,d}$ приводится к виду

$$\hat{\tau}_{u,d} = \exp\left(i\hat{k}'_{u,d}(\sigma\Omega)D\right) = \exp(iK_{u,d}^+D)\exp\left(iK_{u,d}^-\frac{\sigma\Omega}{\Omega}\right). \quad (2.136)$$

Фазовым множителем $\exp(iK_{u,d}^+D)$ можно пренебречь, поскольку в выражение для вероятности пропускания и переворота спина он не входит, поэтому матрицу пропускания можно записать в виде

$$\hat{\tau}_{u,d} = \exp\left(iK_{u,d}^-\frac{\sigma\Omega}{\Omega}\right) = \cos(K_{u,d}^-D) + i\frac{\sigma\Omega}{\Omega}\sin(K_{u,d}^-D). \quad (2.137)$$

При резонансе ($\omega = B_0$) выражение (2.137) преобразуется к виду

$$\hat{\tau}_{u,d} = \exp(-i\varphi_{u,d}\sigma_x), \quad (2.138)$$

где

$$\varphi_{u,d} = -K_{u,d}^-D.$$

Сравнение с формулой Раби

Обратимся к выражению (2.137). Поскольку $\sigma\Omega = \sigma_x B_{\text{rf}} + \sigma_z(\omega - B_0)$, и к перевороту спина приводит только матрица σ_x , отсюда сразу следует, что вероятность переворота спина равна

$$w = \frac{B_{\text{rf}}^2}{B_{\text{rf}}^2 + (\omega - B_0)^2} \sin^2(K_{u,d}^-D). \quad (2.139)$$

Величина

$$-K_{u,d}^- D = \frac{\sqrt{k_0^2 \mp 2\omega + 2B_{\text{rf}}} - \sqrt{k_0^2 \mp 2\omega - 2B_{\text{rf}}}}{2} D$$

представляется в виде

$$-K_{u,d}^- D = \frac{2D}{\sqrt{k_0^2 \mp 2\omega + 2B_{\text{rf}}} + \sqrt{k_0^2 \mp 2\omega - 2B_{\text{rf}}}} B_{\text{rf}} = B_{\text{rf}} \frac{D}{\langle k_{u,d} \rangle} = B_{\text{rf}} T_{u,d}, \quad (2.140)$$

где $T_{u,d} = D/\langle k_{u,d} \rangle$ — время пребывания в ротаторе нейтрона с поляризациями по полю \mathbf{B}_0 и против него,

$$\langle k_{u,d} \rangle = \frac{\sqrt{k_0^2 \mp 2\omega + 2B_{\text{rf}}} + \sqrt{k_0^2 \mp 2\omega - 2B_{\text{rf}}}}{2D} \approx \sqrt{k_0^2 \mp 2\omega} \quad (2.141)$$

— средняя скорость каждой из спиновых компонент нейтрона внутри ротатора. Поэтому вероятность переворота спина (2.139) сводится к величине

$$w = \frac{B_{\text{rf}}^2}{B_{\text{rf}}^2 + (\omega - B_0)^2} \sin^2(B_{\text{rf}} T_{u,d}), \quad (2.142)$$

которая в случае резонанса ($\omega = B_0$) хорошо согласуется с (2.105).

Преобразование неполяризованного пучка в полностью поляризованный

При определении средней скорости (2.141) внутри спин-ротатора мы специально не пренебрегали ω по сравнению с k_0^2 , чтобы видеть, как отличаются скорости нейтронов с разными поляризациями. Это позволяет вернуться к вопросу о преобразовании неполяризованного пучка в полностью поляризованный (см. с. 82) и сделать несколько уточняющих замечаний.

Действительно, при достаточно малых энергиях k_0^2 , например в случае ультрахолодных нейтронов, можно выбрать параметры резонансного спин-ротатора таким образом, чтобы одна из компонент не переворачивалась, а вторая меняла свое направление. Однако при этом необходимо учитывать изменение энергии нейтрона после выхода из спин-ротатора. Если меняет направление компонента, антипараллельная полю \mathbf{B}_0 , то эта часть нейтронов увеличивает свою энергию, и тем самым общая энергия нейтронов возрастает. Если же меняет направление компонента, параллельная \mathbf{B}_0 , то энергия этой части нейтронов понижается, и общая энергия нейтронов тоже падает.

Различное поведение двух компонент обусловлено различием их скоростей $\sqrt{k_0^2 \mp \omega}$ в поле ротатора \mathbf{B}_0 , однако это различие необходимо учитывать также и в матрицах $\hat{\tau}_{b0}^{u,d}$ и $\hat{\tau}_{b0}^{u,d}$ (2.134), которые входят множителями в (2.133) и определяют вероятность преодоления нейтроном границы поля \mathbf{B}_0 . С учетом этих множителей вероятности $w(u \rightarrow d)$ переворота из состояния $|\xi_u\rangle$ в состояние $|\xi_d\rangle$ и $w(d \rightarrow u)$ переворота в обратном направлении равны

$$w(u \rightarrow d) = \frac{\sqrt{k_0^2 + 4\omega}}{k_0} |\langle \xi_d | \hat{\tau}_u | \xi_u \rangle|^2 = \\ = \frac{\sqrt{k_0^2 - 4\omega}}{k_0} \left| \frac{2\sqrt{k_0^2 - 2\omega}}{\sqrt{k_0^2 - 4\omega} + \sqrt{k_0^2 - 2\omega}} \sin(B_{\text{rf}} T_u) \frac{2k_0}{k_0 + \sqrt{k_0^2 - 2\omega}} \right|^2, \quad (2.143)$$

$$w(d \rightarrow u) = \frac{\sqrt{k_0^2 - 4\omega}}{k_0} |\langle \xi_u | \hat{\tau}_d | \xi_d \rangle|^2 = \\ = \frac{\sqrt{k_0^2 + 4\omega}}{k_0} \left| \frac{2\sqrt{k_0^2 + 2\omega}}{\sqrt{k_0^2 + 4\omega} + \sqrt{k_0^2 + 2\omega}} \sin(B_{\text{rf}} T_d) \frac{2k_0}{k_0 + \sqrt{k_0^2 + 2\omega}} \right|^2. \quad (2.144)$$

Покажем, что эти вероятности близки к единице.

Если мы хотим получить после спин-ротатора пучок в состоянии $|\xi_u\rangle$, то должны выполняться равенства $B_{\text{rf}}T_d = \pi/2$, $B_{\text{rf}}T_u = \pi$, т. е. отношение скоростей двух компонент внутри ротатора $\sqrt{k_0^2 + 2\omega}/\sqrt{k_0^2 - 2\omega} = 2$, откуда следует, что $k_0^2/2\omega = 5/3$. Поэтому вероятность пропускания компоненты $|\xi_d\rangle$ с переворотом ее в состояние $|\xi_u\rangle$ равна $w(d \rightarrow u) = 0.98$.

В случае, если мы хотим получить после спин-ротатора пучок в состоянии $|\xi_d\rangle$, должны выполняться равенства $B_{\text{rf}}T_u = 3\pi/2$, $B_{\text{rf}}T_d = \pi$, т. е. отношение скоростей двух компонент внутри ротатора $\sqrt{k_0^2 + 2\omega}/\sqrt{k_0^2 - 2\omega} = 3/2$, откуда следует, что $k_0^2/2\omega = 13/5$, поэтому вероятность пропускания компоненты $|\xi_u\rangle$ с переворотом ее в состояние $|\xi_d\rangle$ равна $w(u \rightarrow d) = 0.93$.

Таким образом, действительно, в случае медленных нейтронов мы можем неполяризованный пучок преобразовать в полностью поляризованный почти без потери интенсивности.

$\pi/2$ -Ротатор

В дальнейшем мы в основном будем рассматривать падающую волну, полностью поляризованную вдоль поля B_0 , т. е. со спинором $|\xi_u\rangle$, и потому при резонансе ограничимся матрицей

$$\hat{\tau}_u = \exp(-i\varphi\boldsymbol{\sigma}_x) = \cos\varphi - i\sin\varphi\boldsymbol{\sigma}_x. \quad (2.145)$$

Значит, прошедшая волна перейдет в спинорное состояние

$$|\xi\rangle = \hat{\tau}_u|\xi_u\rangle = (\cos\varphi|\xi_u\rangle - i\sin\varphi|\xi_d\rangle) \quad (2.146)$$

с компонентами вектора спиновой стрелки

$$\mathbf{s} = \langle\xi|\boldsymbol{\sigma}|\xi\rangle = (0, -\sin 2\varphi, \cos 2\varphi). \quad (2.147)$$

Отсюда видно, что для угла $\varphi = \pi/4$ спиновая стрелка будет перпендикулярна оси z , т. е. спин поворачивается на угол $\pi/2$ против часовой стрелки вокруг оси x , направленной по радиочастотному полю \mathbf{B}_{rf} , и ложится в плоскость, перпендикулярную оси z . Однако радиочастотный ротатор не только поворачивает спин, но и меняет энергию нейтрона. Часть волновой функции, которая отвечает перевернутой спиновой компоненте $|\xi_d\rangle$, описывает состояние нейтрона с иной, меньшей энергией $E_- = E_0 - 2\omega$ и меньшей скоростью $k_- = \sqrt{k_0^2 - 4\omega_0}$, чем состояние с неперевернутой спиновой компонентой $|\xi_u\rangle$. Таким образом, после $\pi/2$ -спин-ротатора каждый нейtron находится в суперпозиции двух состояний с разной энергией.

2.5 Игры с поляризованными нейтронами

В этом разделе мы рассмотрим некоторые эксперименты с поляризованными нейтронами. Иногда красотой идеи и исполнения они напоминают остроумную игру. Такие эксперименты не только полезны для изучения тех или иных свойств вещества, но и представляют собой замечательную иллюстрацию различных квантовомеханических явлений. Более того, они позволяют пролить свет на многие квантовые эффекты и выделить проблемы, требующие более тщательного исследования.

2.5.1 Волна спиновой прецессии и модуляция интенсивности после $\pi/2$ -ротатора

Посмотрим, как выглядит полная волновая функция после $\pi/2$ -ротатора с учетом временной зависимости. Согласно (2.123) и (2.145), эта волновая функция равна

$$\begin{aligned} |\Psi_t(x, t)\rangle &= e^{-iE_0t-i\omega(\sigma_z-1)t}e^{i\hat{k}_u(x-D)}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\xi_u\rangle - i|\xi_d\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{ik_0(x-D)-iE_0t}|\xi_u\rangle - ie^{ik_-(x-D)-iE_-t}|\xi_d\rangle), \end{aligned} \quad (2.148)$$

где $k_- = \sqrt{k_0^2 - 4\omega}$, $E_- = E_0 - 2\omega$. Найдем направление спиновой стрелки $s(x, t)$ в произвольный момент времени t и в произвольной точке x после ротатора:

$$s(x, t) = \langle \Psi_t(x, t) | \boldsymbol{\sigma} | \Psi_t(x, t) \rangle = -(\sin(k_s(x - D) - \omega_s t), \cos(k_s(x - D) - \omega_s t), 0), \quad (2.149)$$

где $k_s = k_0 - k_-$, $\omega_s = 2\omega$. Видно, что в любой точке x спиновая стрелка вращается с частотой ω_s , и в любой момент t направление спиновой стрелки периодически изменяется с расстоянием вдоль оси x — направления распространения нейтронов. Заметим, что никакого поля после спинового ротатора нет, и тем не менее после него происходит волнобразное изменение спиновой стрелки, которое можно назвать волной спиновой прецессии, поскольку ему присущи все атрибуты волны: частота ω_s и волновой вектор k_s . Эта волна возникла в результате интерференции двух спиновых состояний $|\xi_u\rangle$ и $|\xi_d\rangle$, имеющих различные энергии.

Такую интерференцию можно использовать для получения нейтронных пучков с периодически модулированной плотностью. Действительно, представим себе, что в некоторой точке x_1 на пути пучка, полученного после $\pi/2$ ротатора, установлен анализатор, который пропускает только нейтроны, поляризованные вдоль оси y . Найдем волновую функцию нейтронов после точки x_1 . Для этого разложим спиноры $|\xi_{u,d}\rangle$ по собственным спинорам $|\xi_{\pm y}\rangle$ матрицы $\boldsymbol{\sigma}_y$: $\boldsymbol{\sigma}_y|\xi_{\pm y}\rangle = \pm|\xi_{\pm y}\rangle$. Легко получаем выражения

$$|\xi_{\pm y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}, \quad |\xi_u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\xi_{+y}\rangle + |\xi_{-y}\rangle), \quad |\xi_d\rangle = \frac{1}{i\sqrt{2}}(|\xi_{+y}\rangle - |\xi_{-y}\rangle). \quad (2.150)$$

Подстановка в (2.148) показывает, что компонента $|\xi_{+y}\rangle$ в точке $x = x_1$ имеет амплитуду

$$\psi_y(x_1, t) = \frac{1}{2}e^{iK_+D}(e^{ik_0(x_1-D)-iE_0t} - e^{ik_-(x_1-D)-iE_-t}), \quad (2.151)$$

и потому интенсивность потока прошедших нейтронов,

$$I = |\Psi_y(x_1, t)|^2 = \frac{1}{2}[1 - \cos(\varphi_1 - \omega_s t)] = \sin^2(\varphi_1/2 - \omega t), \quad (2.152)$$

где $\varphi_1 = k_s(x_1 - D)$, осциллирует во времени. В результате получаем реальную волну модулированной плотности, или звуковую волну вдоль нейтронного пучка, с помощью которой можно наблюдать все оптические явления и даже проводить голографические исследования.

Классическое объяснение волны спиновой прецессии. Дуализм волна–частица

Итак, мы показали, что радиочастотный $\pi/2$ -ротатор не только поворачивает спин, переводя его в плоскость, перпендикулярную постоянному полю \mathbf{B}_0 , но одновременно создает суперпозицию двух состояний с разной энергией. В результате происходит своеобразная

прецессия спина в отсутствие магнитного поля и возникает волна спиновой прецессии. Фазовая скорость этой волны

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega_s}{k_s} = \frac{2\omega}{k_0 - \sqrt{k_0^2 - 4\omega}}$$

тождественно равна средней скорости двух спиновых компонент

$$\langle v \rangle = \frac{k_0 + \sqrt{k_0^2 - 4\omega}}{2},$$

которая при малых $\omega \ll k_0^2$ совпадает со скоростью нейтрона k_0 . Таким образом, если проследить за нейтроном, движущимся со скоростью $\langle v \rangle$, то связанная с ним спиновая стрелка вовсе не будет меняться и прецессировать, что естественно в отсутствие магнитного поля. Что же в таком случае представляет собой волна спиновой прецессии?

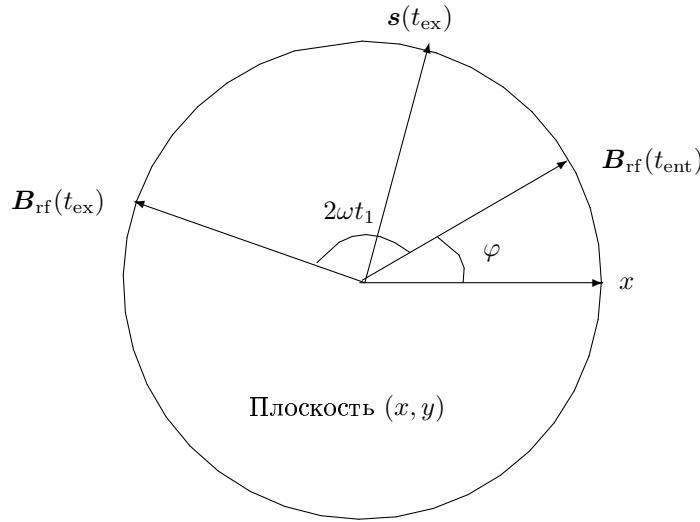


Рис. 2.5: Направление спина нейтрона $s(t_{\text{ex}})$ в момент t_{ex} выхода из $\pi/2$ -ротатора. Радиочастотное поле B_{rf} вращается в плоскости страницы против часовой стрелки и в момент t_{ent} , когда нейтрон влетает в область полей, повернуто под углом φ к оси x . Постоянное поле B_0 и спин нейтрона, влетающего в поле, ориентированы перпендикулярно странице в направлении к читателю. За время t_1 пролета нейтрона через область D радиочастотное поле B_{rf} поворачивается до положения $B_{\text{rf}}(t_{\text{ex}})$, где $t_{\text{ex}} = t_{\text{ent}} + t_1$; при этом направление спина вылетающего нейтрона $s(t_{\text{ex}})$ перпендикулярно полю $B_{\text{rf}}(t_{\text{ex}})$. Таким образом, направление спина нейтрона после вылета определяется направлением поля B_{rf} в момент t_{ent} влета нейтрона в поле ротатора

Объяснение очень простое, и, чтобы к нему прийти, нужно проследить, как происходит поворот спина в ротаторе. Когда нейтрон, поляризованный вдоль постоянного поля B_0 , попадает в область радиочастотного поля, его спиновая стрелка оказывается перпендикулярной радиочастотному полю B_{rf} и начинает прецессировать вокруг него против часовой стрелки, если смотреть с острия стрелки B_{rf} . После того как спиновая стрелка отклонится от направления B_0 , она начинает также прецессировать против часовой стрелки вокруг B_0 . При резонансе угловая скорость прецессии спина вокруг B_0 совпадает с угловой скоростью вращения B_{rf} , поэтому спиновая стрелка все время остается перпендикулярной полю B_{rf} , и когда спин окажется в плоскости, перпендикулярной B_0 , он в этой плоскости будет перпендикулярен также и B_{rf} , как видно из рис. 2.5. Поскольку направление спиновой стрелки нейтрона при вылете жестко привязано к направлению поля $B_{\text{rf}}(t_{\text{ex}})$ в момент вылета t_{ex} , значит, оно определяется направлением поля $B_{\text{rf}}(t_{\text{ent}})$ в момент t_{ent} влета нейтрона в спин-ротатор. У разных нейтронов время входа t_{ent} в спин-ротатор различно,

и потому различно направление поляризации при выходе. Спин-ротатор как бы маркирует каждый нейтрон по времени влета в катушку, устанавливая его спиновую стрелку в направлении, соответствующем времени начала взаимодействия с полями. Направление спиновой стрелки после спин-ротатора у каждого нейтрона фиксировано, но различно у разных нейтронов. По существу, у нас нет волны, а есть периодически распределенные спиновые стрелки разных нейтронов. Поясним изложенное двумя наглядными иллюстрациями.

Первое «чудо улицы Святого Марка»

В некотором городе N есть улица Святого Марка, на которую можно попасть через ворота с надвратными часами. У часов лишь одна стрелка. Она вращается с частотой ν и обладает замечательным свойством: у каждого, кто входит в ворота, над головой появляется нимб с ярким пятнышком в том же месте на окружности нимба, куда на циферблате часов указывала стрелка в момент прохода под ними путника. Люди входят в ворота в разное время, но шагают вдоль улицы с одной и той же скоростью v , и если кто-то посмотрит на город сверху, то увидит, что вдоль улицы Св. Марка бежит волна ярких пятен, длина которой $\lambda = \nu v$, а амплитуда равна радиусу нимба. Эта волна пятен аналогична волне спиновой прецессии нейтронов после $\pi/2$ -ротатора.

Второе «чудо улицы Святого Марка»

На полпути из конца в конец улицы стоят вторые ворота с часами. Здесь единственная стрелка часов неподвижна и всегда показывает полдень. Ворота открываются только для тех путников, у которых яркое пятно в нимбе находится в области от 0 до 6 часов. Остальных стражники направляют в боковые переулки. Глядя на улицу Св. Марка сверху, наблюдатель увидит, что после вторых ворот непрерывный поток нимбов разбивается на сгустки, подобно тому как после анализатора, пропускающего нейтроны, поляризованные вдоль оси y , образуется пучок нейтронов переменной интенсивности. Такой пучок получается в результате суперпозиции, или интерференции, двух состояний с разными энергиями. Поток нимбов переменной плотности возникает в результате последовательного действия идущих и стоящих часов.

«Чудеса улицы Св. Марка» иллюстрируют хорошо известный дуализм волна–частица. Согласно квантовой механике нельзя увидеть волну, связанную с частицей, если эта частица — выделенная. Волновые свойства частиц проявляются в специально поставленных экспериментах, когда в них участвует сразу много одинаковых частиц.

Не следует, однако, думать, что иллюстрация с помощью «чудес ул. Св. Марка» решает все проблемы, связанные с интерпретацией квантовой механики. Все хорошо, если скорость нейтрона в спиновой волне равна средней скорости двух спиновых компонент. Однако компоненты имеют разные скорости, и возникает вопрос: что это значит? Не расходятся ли две компоненты со временем? И, если да, то как это происходит, и что собой представляет нейтрон, расщепившийся на две волны с противоположной поляризацией? Ответа на эти «запретные» вопросы квантовой механики пока нет.

Еще один вопрос, относящийся к квантовой механике, может стать предметом пристального изучения с помощью радиочастотных флипперов благодаря аналогии, которая имеет место между переходами нейтрона из одного состояния в другое и переходами в атомных системах.

Переходы в атомных системах, согласно квантовой механике, происходят скачком. Нельзя спросить, откуда электрон знает, где находится орбита, на которую он должен перепрыгнуть, и как он совершает свой прыжок. Взаимодействие нейтрона с радиочастотным полем аналогично взаимодействию атома с электромагнитным полем, и здесь

все процессы имеют вполне измеримую временную протяженность, поэтому те вопросы, которые мы не можем адресовать электрону, вполне могут быть поставлены в отношении поведения нейтрона в катушке спин-флиппера.

2.5.2 π -Ротатор

Вернемся к выражению (2.137) для матрицы амплитуд пропускания, которое в условиях резонанса преобразуется в (2.145). Тогда спинор прошедшей волны определяется выражением (2.146), которое в случае $\varphi = -\pi/2$ приводится к виду

$$|\xi\rangle = \hat{\tau}_u |\xi_u\rangle = -i |\xi_d\rangle, \quad (2.153)$$

т. е. вектор спина переворачивается на 180° . Таким образом, если $\varphi = \pi/2$, то направление спиновой стрелки меняется на обратное. При этом энергия нейтрона тоже меняется: она уменьшается на величину 2ω .

2.5.3 Метод разделенных полей Рамсея

Любой π -ротатор можно рассматривать как совокупность двух $\pi/2$ -ротаторов, расположенных рядом. Пропускание такой системой можно записать в виде

$$\hat{\tau}_u(\pi) = \hat{\tau}_u(\pi/2) \hat{\tau}_u(\pi/2) = \exp(-i\sigma_x\pi/4) \exp(-i\sigma_x\pi/4). \quad (2.154)$$

Разнесем два $\pi/2$ -ротатора на расстояние L и посмотрим, как изменится пропускание. Прежде чем записывать математические формулы, подумаем, чего можно ожидать от такого разделения. Если поля между ротаторами нет, то спин нейтрона во время полета его между радиочастотными катушками не меняет направления. Однако радиочастотное поле второй катушки вращается с угловой скоростью 2ω синхронно и синфазно полю первой катушки, и за время T поле второй катушки повернется на угол $2T\omega$. Если $2T\omega = 2\pi n$, где n — целое число, то направление поля \mathbf{B}_{rf} при влете нейтрона во вторую катушку будет составлять с вектором спиновой стрелки тот же угол $\pi/2$, что и в момент t_{ex} вылета нейтрона из первой катушки. Поэтому второй $\pi/2$ -ротатор будет действовать так же, как если бы пустого промежутка между ним и первым ротатором не было вовсе. То есть оба $\pi/2$ -ротатора будут действовать как один π -ротатор.

Если же $2\omega T \neq 2\pi n$, то спиновая стрелка нейтрона $\mathbf{s}(T + t_{\text{ex}})$, направление которой совпадает с $\mathbf{s}(t_{\text{ex}})$, может оказаться неперпендикулярной к $\mathbf{B}_{\text{rf}}(T + t_{\text{ex}})$. Например, если $2\omega T = 2\pi n - \alpha$, то угол между направлением спина \mathbf{s} и полем \mathbf{B}_{rf} при входе во вторую катушку равен $\beta = \pi/2 - \alpha \neq \pi/2$. Далее спин нейтрона будет поворачиваться вокруг \mathbf{B}_{rf} против часовой стрелки, и спиновая стрелка, описав четверть конуса вокруг оси \mathbf{B}_{rf} , окажется в вертикальной плоскости, но она уже не будет направлена вдоль поля \mathbf{B}_0 .

Действительно, пусть поле \mathbf{B}_{rf} в момент входа нейтрона во вторую катушку направлено вдоль оси x . Тогда спин нейтрона, угол спиновой стрелки которого с осью x отличается от $\pi/2$ на α , должен описываться спинором

$$|\xi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\xi_u\rangle - i e^{i\alpha} |\xi_d\rangle). \quad (2.155)$$

Действие второго $\pi/2$ -ротатора задается оператором $\exp(-i\sigma_x\pi/4)$, который преобразует (2.155) следующим образом:

$$|\xi'\rangle = \exp(-i\sigma_x\pi/4) |\xi\rangle = -i \exp(i\alpha/2) (\sin(\alpha/2) |\xi_u\rangle + \cos(\alpha/2) |\xi_d\rangle). \quad (2.156)$$

Это означает, что спиновая стрелка после второго $\pi/2$ -ротатора имеет направление

$$\langle \xi' | \sigma | \xi' \rangle = (\sin \alpha, 0, -\cos \alpha),$$

т. е. между ней и направлением $-B_0$ остается угол α .

Из (2.156) следует, что второй $\pi/2$ -ротатор переворачивает спин нейтрона только с вероятностью $\cos^2(\alpha/2)$. Если $\alpha = 0$ то оба ротатора работают синхронно, как единый π -ротатор. Если же $\alpha = \pi$, то второй $\pi/2$ -ротатор полностью гасит результат действия первого.

Амплитудная матрица пропускания всей системой равна

$$\hat{\tau}_u(\pi/2, L, \pi/2) = \hat{\tau}_u(\pi/2) \exp(i\hat{k}_u L) \hat{\tau}_u(\pi/2) = e^{iK_+L} e^{-i\sigma_x \pi/4} e^{iK_-L\sigma_z} e^{-i\sigma_x \pi/4}, \quad (2.157)$$

где

$$K_{\pm} = \frac{1}{2} \left[k_0 \pm \sqrt{k_0^2 - 4\omega} \right].$$

Общий фазовый множитель e^{iK_+L} можно опустить, тогда общее пропускание двумя разделенными $\pi/2$ -ротаторами

$$\hat{\tau}_u(\pi/2, L, \pi/2) = \exp(-ia\sigma_x) \exp(ib\sigma_z) \exp(-ia\sigma_x) = \cos b e^{-2ia\sigma_x} + i\sigma_z \sin b, \quad (2.158)$$

где $a = \pi/4$, $b = \omega T$, $T = \omega L/k_{av}$ и $k_{av} = [k_0 + \sqrt{k_0^2 - 4\omega}] / 2$ — средняя скорость нейтрона в области между двумя спин-ротаторами.

Оператор (2.158) преобразует начальное состояние $|\xi_u\rangle$ в состояние

$$\hat{\tau}_u(\pi/2, L, \pi/2)|\xi_u\rangle = i [\sin(\omega T)|\xi_u\rangle - \cos(\omega T)|\xi_d\rangle]. \quad (2.159)$$

Отсюда видно, что если $2\omega T = 2\pi n$ или $\omega T = \pi n$ (n — целое), то начальная поляризация по полю $|\xi_u\rangle$ преобразуется в поляризацию против поля $|\xi_d\rangle$. Если же $2\omega T = \pi(2n+1)$, то действие второго ротатора компенсирует действие первого, и начальная поляризация $|\xi_u\rangle$ восстанавливается.

При произвольном значении ωT интенсивность нейтронов, сохранивших первоначальную поляризацию по полю после воздействия двух разнесенных ротаторов, пропорциональна $\sin^2(\omega L/v)$, где вместо T подставлено время пролета L/v расстояния между катушками. Это означает, что система двух разнесенных $\pi/2$ -ротаторов может служить спектрометром. При больших L/v даже небольшое изменение ω приводит к сильному изменению интенсивности прошедших нейтронов, поэтому величина L/v может быть измерена прецизионно. Если расстояние L известно, то прецизионное измерение L/v равносильно прецизионному измерению средней скорости нейтрона v .

Метод разделенных радиочастотных полей Рамсея используется в экспериментах по поиску электрического дипольного момента (ЭДМ) нейтрона (см., напр., [3, гл. 8]). В этих экспериментах в промежутке между катушками имеется постоянное магнитное поле $\omega_0 = B_0$. Поэтому спин нейтрона во время полета прецессирует с угловой скоростью B_0 . Эту прецессию можно учесть, заменив $\exp(i\omega\sigma_z T)$ в (2.159) на $\exp(i(\omega - \omega_0)\sigma_z T)$. Если $\omega = \omega_0$ то $\exp(i(\omega - \omega_0)\sigma_z T) = 1$, и оба $\pi/2$ -ротатора работают как две половинки неразделенного π -ротатора. При больших временах пролета T даже малое изменение частоты прецессии $\omega_0 - \omega$ (например из-за наличия ЭДМ и внешнего электрического поля) приводит к заметному изменению интенсивности после второй катушки.

Тюнер

Мы видели, что если $2\omega T = 2\pi n$, то обе разнесенные половины π -ротатора работают так же, как неразнесенные. Если $2\omega T \neq 2\pi n$, то на длине пролета L между ротаторами можно добавить катушку длины l с постоянным полем настройки B_t , параллельным оси z . Такую катушку можно назвать «тюнером», потому что она позволяет путем подбора величины B_t немного изменить направление спиновой стрелки нейтрона на пролетной базе

таким образом, чтобы спиновая стрелка в момент влета нейтрона во второй ротатор оказалась перпендикулярной его радиочастотному полю. Действительно, магнитное поле \mathbf{B}_t поворачивает спиновую стрелку на угол

$$B_t l / k_0. \quad (2.160)$$

При наличии тюнера амплитуда пропускания $\tau(L)$ для пространства L между двумя $\pi/2$ -ротаторами описывается оператором $\exp(ik_1 L) \exp(i\sigma_z [\omega T + \omega_t t_2])$, где $\omega_t = B_t$ и $t_2 = l/k_{av}$ (k_{av} — среднее значение скорости k на участке l). Если $\omega T \neq 2\pi n$, то ω_t можно подстроить таким образом, чтобы выполнялось условие $\omega T + \omega_t t_2 = 2\pi n$.

Эхо

Разделим путь L между двумя катушками на две части, L_1 и $L_2 = L - L_1$, а между этими частями поместим еще один π -ротатор. Тогда матричная амплитуда пропускания $\tau(L)$ на полном участке L становится равной

$$\tau(L_1, \pi, L_2) = \tau(L_1)\tau(\pi)\tau(L_2) = e^{i\sigma_z \omega T_1} e^{-i\sigma_x \pi/2} e^{i\sigma_z \omega T_2} = -ie^{i\sigma_z \omega [T_1 - T_2]} \sigma_x. \quad (2.161)$$

Если $L_1 = L_2$, то экспоненциальный множитель в правом выражении равен единице. Это означает, что фаза, набежавшая на первом участке пути, полностью компенсируется изменением фазы на втором участке, и потому пропускание всей системой ротаторов,

$$\tau(\pi/2)\tau(L_1)\tau(\pi)\tau(L_2)\tau(\pi/2) = -1,$$

будет таким, как если бы ротаторы вообще отсутствовали. (Общий множитель -1 не в счет, поскольку волновая функция всегда может быть умножена на произвольный фазовый множитель.) Компенсация фаз на двух участках пути — основным приемом, используемым во всех «эхо»-экспериментах. Достоинство эхо-экспериментов, особенно если в них $\pi/2$ -ротаторы работают на постоянных полях, состоит в том, что они очень светосильны: раз поворот спина на первом участке пути обязательно скомпенсируется на втором, то величина угла поворота не играет роли, а значит, падающий пучок не требует монохроматизации.

Покажем, что главная роль в компенсации фаз принадлежит π -ротатору. Действительно, за время пролета T участка L_1 радиочастотное поле всех катушек поворачивается на угол $\chi = 2\omega T$. Если $\chi = 2\pi n - \alpha$, то угол между \mathbf{s} и \mathbf{B}_{rf} в π -ротаторе равен $\beta = \pi/2 - \alpha$ (рис. 2.6). В π -ротаторе вектор спиновой стрелки нейтрона описывает полукулонус вокруг радиочастотного поля с углом раствора β , или, что эквивалентно, отражается относительно вектора $\mathbf{B}_\pi (= \mathbf{B}_{rf})$, т. е. теперь спин оказывается впереди поля \mathbf{B}_{rf} на угол $\beta = \pi/2 - \alpha$. Далее нейтрон летит ко второму $\pi/2$ -ротатору с той же скоростью, которую приобрел после первого. В момент, когда нейтрон попадает во второй $\pi/2$ -ротатор, поле \mathbf{B}_{rf} снова успевает повернуться на угол $2\pi n - \alpha$. При этом угол спина оказывается впереди поля на $\beta + \alpha = \pi/2$, и после поворота вокруг \mathbf{B}_{rf} против часовой стрелки вектор спина \mathbf{s} во втором $\pi/2$ -ротаторе возвращается в первоначальное состояние $|\xi_u\rangle$. Таким образом, система из трех ротаторов с произвольным расстоянием $L_1 = L_2$ эквивалентна пустому пространству без ротаторов. Проиллюстрируем, как это происходит, еще одним «чудом улицы Св. Марка».

Третье «чудо улицы Святого Марка»

Часовых дел мастера города N починили часы над вторыми воротами по улице Св. Марка, и единственная их стрелка стала показывать то же время, что и стрелка первых часов и стрелка таких же часов, установленных над третьими воротами в конце улицы. Теперь каждый прохожий, входя в первые ворота, по-прежнему приобретает нимб с ярким пятном там, куда на циферблате показывала стрелка первых часов (см. подраздел 2.5.1), но

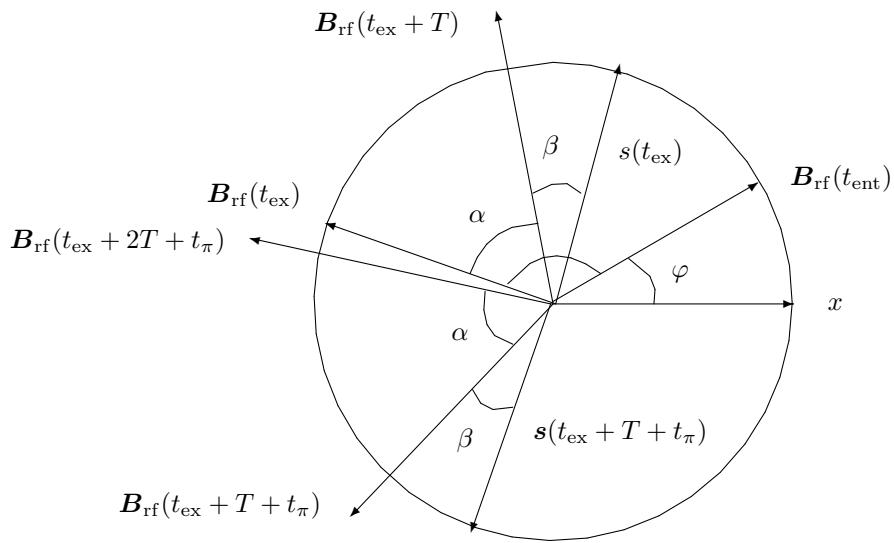


Рис. 2.6: Эффект компенсации фаз: $s(t_{\text{ex}})$, $B_{\text{rf}}(t_{\text{ex}})$ — положение векторов спина s и радиочастотного поля B_{rf} в момент времени t_{ex} , когда нейтрон вылетает из первого $\pi/2$ -ротатора (см. рис. 2.5); $s(t_{\text{ex}})$, $B_{\text{rf}}(t_{\text{ex}} + T)$ — положение тех же векторов в момент $t_{\text{ex}} + T$, когда нейтрон влетает в π -ротатор. Вектор спина s не меняет своего направления, а поле B_{rf} поворачивается на угол $2\pi - \alpha$. В π -ротаторе вектор спина отражается относительно поля B_{rf} и поворачивается вместе с ним на угол ωt_{π} , где t_{π} — время пролета нейтрона через π -ротатор. Через время T пролета нейтрона до второго $\pi/2$ -ротатора поле B_{rf} еще раз поворачивается на угол $2\pi - \alpha$ и занимает положение $B_{\text{rf}}(t_{\text{ex}} + 2T + t_{\pi})$, перпендикулярное вектору s , который после поворота против часовой стрелки на $\pi/2$ вокруг B_{rf} в третьем ротаторе возвращается в исходное положение, перпендикулярное рисунку в направлении к читателю

когда он минует вторые ворота, положение яркого пятна в его нимбе меняется. Новое положение получается из старого путем отражения относительно направления, которое занимает стрелка часов в момент прохода вторых ворот. Когда же путник выходит из улицы Св. Марка через третьи ворота, его нимб исчезает, если положение пятна совпадает с положением стрелки над третьими воротами. Легко показать, что нимбы всех людей должны исчезнуть, если их скорости в первой и второй половине улицы одинаковы.

Действительно, предположим, что в то время, как человек достигает вторых ворот, светлое пятно в его нимбе оказалось там, куда указывает стрелка часов. Это значит, что за время T пути между первыми и вторыми воротами она совершила n оборотов и повернулась на угол $2\pi n$. В этом случае отражение относительно направления стрелки никак не меняет положения пятна, а поскольку скорость прохожего во второй половине равна скорости в первой половине, то в момент, когда он достигнет третьих ворот, положение пятна снова совпадет с положением стрелки, и нимб исчезнет.

Если скорость путника меньше, то в момент прохода средних ворот стрелка успеет повернуться на угол $2\pi n + \alpha > 2\pi n$. Пятно на нимбе окажется позади стрелки на угол α , поэтому, отразившись относительно направления стрелки, оно окажется на угол α впереди нее. Так как скорость людей после вторых ворот такая же, как и до них, то перед третьими воротами стрелка снова успевает повернуться на угол $2\pi n + \alpha$. В результате она окажется в точности там, где находится яркое пятно нимба, и нимб тоже исчезнет.

Ничего не изменится, если люди идут быстрее, и за время пути между воротами стрелка часов успеет повернуться на угол, меньший $2\pi n$. Средние ворота исправляют положение пятна таким образом, что при любой скорости человека оно всегда окажется точно в нужном положении. Единственный способ сохранить нимб — изменить свою скорость на втором участке пути. Эксперименты с нейтронами по методу спинового эха в большинстве своем и нацелены на измерение небольших изменений скорости под влиянием тех или иных внешних воздействий на втором участке пути.

Некоторые детали спин-эхо-экспериментов

Существуют два типа спин-эхо-экспериментов. Если между ротаторами нет постоянного поля, то эксперименты носят название нейтронно-резонансного спин-эха (NRSE) [64]. Если же между ротаторами имеется постоянное магнитное поле \mathbf{B}_0 , параллельное оси z , но направленное противоположно в первом и втором промежутках $L/2$, то такие эксперименты называются просто нейтронным спин-эхом (NSE) [58].

В эхо-экспериментах (см., напр., [65]) сначала с помощью тюнера (в работе [65] он называется ускорителем) производится настройка на обеих половинах пути L так, чтобы сдвиги фаз полностью компенсировали друг друга. Затем во второй части пути нейтронов помещается образец. Если взаимодействие с образцом приводит к изменению скорости нейтрона $v \rightarrow v + \delta v$, то меняется время нахождения нейтрона на второй половине пути

$$\frac{L}{2v} \rightarrow \frac{L}{2v} \left[1 - \frac{\delta v}{v} \right]. \quad (2.162)$$

Теперь фазы на двух участках пути уже не компенсируются, и для восстановления компенсации требуется снова изменить поле тюнера. Это изменение и характеризует изменение скорости нейтрона δv .

Примеры применения методов спинового эха можно найти в работах [66, 67], где показано, как можно использовать прецессию спина для прецизионной спектрометрии и для исследования малоуглового рассеяния, о котором пойдет речь в четвертой главе.

2.5.4 Спектрометр на частотном биении интенсивности

Рассмотрим снова два $\pi/2$ -ротатора (неважно, разнесены они или нет). Но теперь величина \mathbf{B}_0 постоянных и соответственно частота ω радиочастотных полей ротаторов будут разными. Пусть частота ω' второго ротатора не равна частоте ω первого. Такая система ротаторов называется спектрометром на частотных биениях интенсивности [27].

Волновая функция нейтрона после первого ротатора равна

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\exp(ixk_0 - iE_0t) |\xi_u\rangle - i \exp\left(ix\sqrt{k_0^2 - 4\omega} - i(E_0 - 2\omega)t\right) |\xi_d\rangle \right]. \quad (2.163)$$

Волновая функция того же нейтрона после второго $\pi/2$ -ротатора становится равной

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|\Psi_1\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} \left\{ \exp\left(ix\sqrt{k_0^2 - 4\omega'} - i(E_0 - 2\omega')t\right) |\xi_d\rangle - \right. \right. \\ & \left. \left. - i \exp\left(ix\sqrt{k_0^2 - 4\omega + 4\omega'} - i(E_0 - 2\omega + 2\omega')t\right) |\xi_u\rangle \right\} \right]. \end{aligned} \quad (2.164)$$

Первое слагаемое в правой части (2.163) описывает нейtron, прошедший через второй ротатор упруго, остальные слагаемые отвечают за неупругое взаимодействие со вторым ротатором. Если после второго ротатора поместить анализатор поляризации, пропускающий нейтроны только с поляризацией вдоль оси z , то интенсивность прошедших нейтронов после анализатора будет равна

$$\begin{aligned} I(x, t) &= \frac{1}{4} \left| \exp(ik_0x - iE_0t) - \exp\left(ix\sqrt{k_0^2 - 4\omega + 4\omega'} - i(E_0 - 2\omega + 2\omega')t\right) \right|^2 \approx \\ &\approx \sin^2([\omega - \omega'][t - x/v]). \end{aligned} \quad (2.165)$$

Таким образом, в любой точке x позади анализатора интенсивность нейтронного пучка будет модулированной с частотой биений $\omega - \omega'$. Возникает когерентная звуковая волна с длиной волны $\lambda = 2\pi v/(\omega - \omega')$. Такие биения интенсивности впервые наблюдались

японскими экспериментаторами [68]. Разность частот у них составляла $\delta\omega = 2 \cdot 10^{-5}$ Гц. Удивительно, что удается наблюдать столь малую разность частот, ведь она соответствует периоду порядка суток, тогда как частоты ω и ω' роторов составляли около 32 кГц, а нейтрон пролетал через всю установку за время порядка всего лишь нескольких миллисекунд. Однако результаты эксперимента безусловноны. Наблюдавшиеся биения интенсивности характеризовали не свойства нейтронов, а свойства радиочастотных катушек и стабильность генерации радиочастот. Нейтроны были только орудием изучения свойств установки. Но то, что они оказались столь надежным орудием, свидетельствует о правильном понимании их свойств. Значительно более высокая частота биений, порядка 200–400 кГц, наблюдалась в экспериментах, описанных в работе [69].

Возникновение биений на разности частот хорошо иллюстрируется четвертым «чудом улицы Св. Марка».

Четвертое «чудо улицы Святого Марка»

Со временем часы над вторыми воротами улицы Св. Марка начали отставать. Частота вращения стрелки ν' стала меньше частоты ν вращения стрелки первых часов, и свойства часов тоже изменились. Теперь средние ворота открывались только перед теми из прохожих, у кого возле вторых ворот яркое пятно в нимбе попадало внутрь небольшого угла α вокруг положения стрелки. Остальные вынуждены были сворачивать в боковые уложки. Если бы частота ν' равнялась частоте ν и угол поворота νT стрелки вторых часов за время T пути от первых ворот до вторых попадал в интервал $2\pi n - \alpha \leq \nu T \leq 2\pi n + \alpha$, то все прохожие прошли бы через вторые ворота, и поток людей за воротами остался бы таким же, как перед ними. При другом угле поворота под вторыми воротами не сумел бы пройти никто, и второй отрезок улицы опустел бы.

При $\nu' \neq \nu$ поток нимбов позади ворот состоит из групп, которые распространяются волнобразно с частотой $|\nu - \nu'|$. Точно так же и поток нейтронов после анализатора поляризации представляет собой амплитудно модулированную волну плотности с частотой $|\nu - \nu'|$ аналогично рассмотренной в подразделе 2.5.1.

2.5.5 Преобразование непрерывного поляризованного пучка нейтронов в пульсирующий

Мы увидели, как с помощью радиочастотных спин-роторов создавать волну прецессии спина, из которой анализатор формирует волну плотности. Эта волна, однако, вследствие выделения только одной компоненты спина имеет меньшую интенсивность, чем падающая. Покажем, как непрерывный поляризованный падающий пучок нейтронов полностью преобразовать в пульсирующий [70].

Рассмотрим пучок нейтронов с энергией E_0 , поляризованных по оси x , летящий в направлении, параллельном оси y . Волновая функция таких нейтронов равна

$$|\psi_0(\mathbf{r})\rangle = \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - iE_0t)|\xi_{xu}\rangle, \quad (2.166)$$

где $k_0 = \sqrt{2E_0}$, а $|\xi_{xu}\rangle$ — собственный спинор матрицы σ_x : $\sigma_x|\xi_{xu}\rangle = |\xi_{xu}\rangle$.

Пропустим пучок через резонансный спин-флиппер с внутренним магнитным полем \mathbf{B}_1 , параллельным оси z , как показано на схеме в верхней части рис. 2.7. Поскольку

$$|\xi_{xu}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\xi_{zu}\rangle + |\xi_{zd}\rangle],$$

где $|\xi_{zu,d}\rangle$ — собственные спиноры матрицы σ_z :

$$\sigma_z|\xi_{zu,d}\rangle = \pm|\xi_{zu,d}\rangle,$$

то после спин-флиппера нейтроны окажутся в суперпозиции состояний $|\xi_{zu,d}\rangle$ с энергиями $E_0 \pm \omega_1$ соответственно, как показано на диаграмме в нижней части рис. 2.7, где $\omega_1 = 2B_1$. Их волновая функция записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} |\psi_1(\mathbf{r})\rangle &= \exp\left(i\hat{\mathbf{k}}_1\mathbf{r} - i(E_0 + \omega_1\sigma_z)t\right) \frac{-i}{\sqrt{2}}[|\xi_{zu}\rangle + |\xi_{zd}\rangle] = \\ &= \frac{-i}{\sqrt{2}}\left(\exp(ik_{1+}y - i(E_0 + \omega_1)t)|\xi_{zu}\rangle + \exp(ik_{1-}y - i(E_0 - \omega_1)t)|\xi_{zd}\rangle\right), \end{aligned} \quad (2.167)$$

где $\hat{\mathbf{k}}_1 = \sqrt{k_0^2 + 2\omega_1\sigma_z}$, $k_{1\pm} = \sqrt{k_0^2 \pm 2\omega_1}$ и $\omega_1 = 2B_1$.

Поставим теперь на пути нейtronов сразу же после первого флиппера — второй, с магнитным полем \mathbf{B}_2 , параллельным оси x . Поскольку состояния $|\xi_{zu,d}\rangle$ представляются в виде суперпозиций состояний $|\xi_{xu,d}\rangle$ с осью квантования вдоль поля \mathbf{B}_2 :

$$|\xi_{zu}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\xi_{xu}\rangle + |\xi_{xd}\rangle], \quad |\xi_{zd}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\xi_{xu}\rangle - |\xi_{xd}\rangle],$$

то после пропускания через второй спин-флиппер нейтронный пучок расщепится на четыре пучка с энергиями $E_0 \pm \omega_1 \pm \omega_2$, как показано на диаграмме в нижней части рис. 2.7.

Волновая функция после второго флиппера равна

$$\begin{aligned} |\psi_2(\mathbf{r})\rangle &= -\frac{1}{2}\left(\exp\left(i\hat{\mathbf{k}}_{1+}\mathbf{r} - i(E_0 + \omega_1 + \omega_2\sigma_x)t\right)[|\xi_{xu}\rangle + |\xi_{xd}\rangle] - \right. \\ &\quad \left.- \exp\left(i\hat{\mathbf{k}}_{1-}\mathbf{r} - i(E_0 - \omega_1 + \omega_2\sigma_x)t\right)[|\xi_{xu}\rangle - |\xi_{xd}\rangle]\right), \end{aligned} \quad (2.168)$$

где $\hat{\mathbf{k}}_{1\pm} = \sqrt{k_0^2 \pm 2\omega_1 + 2\omega_2\sigma_x}$, и преобразуется к виду

$$\begin{aligned} |\psi_2(\mathbf{r})\rangle &= -\frac{1}{2}\left(\left[\exp(ik_{++}y - i(E_0 + \omega_1 + \omega_2)t) - \exp(ik_{--}y - i(E_0 - \omega_1 + \omega_2)t)\right]|\xi_{xu}\rangle + \right. \\ &\quad \left.+ \left[\exp(ik_{+-}y - i(E_0 + \omega_1 - \omega_2)t) + \exp(ik_{-+}y - i(E_0 - \omega_1 - \omega_2)t)\right]|\xi_{xd}\rangle\right), \end{aligned} \quad (2.169)$$

где $k_{\pm,\pm} = \sqrt{k_0^2 \pm 2\omega_1 \pm 2\omega_2}$.

Полная интенсивность волны, соответствующая этой волновой функции, на расстоянии L от второго флиппера, равна сумме интенсивностей обеих компонент спина

$$I(L) = \sin^2(K_+L - \omega_1 t) + \cos^2(K_-L - \omega_1 t) = 1 + \sin([K_+ + K_-]L - 2\omega_1 t) \sin([K_+ - K_-]L), \quad (2.170)$$

где

$$K_+ = \frac{1}{2} \left[\sqrt{k_0^2 + 2\omega_1 + 2\omega_2} - \sqrt{k_0^2 - 2\omega_1 + 2\omega_2} \right] \approx \frac{\omega_1}{\sqrt{k_0^2 + 2\omega_2}}, \quad (2.171)$$

$$K_- = \frac{1}{2} \left[\sqrt{k_0^2 + 2\omega_1 - 2\omega_2} - \sqrt{k_0^2 - 2\omega_1 - 2\omega_2} \right] \approx \frac{\omega_1}{\sqrt{k_0^2 - 2\omega_2}}. \quad (2.172)$$

Поскольку $K_+ - K_- \approx -\omega_1\omega_2/k_0^3$, имеем $\sin([K_+ - K_-]L) = -1$, когда $L\omega_1\omega_2/k_0^3 = \pi/2$. В точке $L = \pi k_0^3/(2\omega_1\omega_2)$ интенсивность нейтронов равна

$$I(L) = 2 \sin^2 \left(\omega_1 t + \pi(k_0^2/2\omega_2 + 1/4) \right).$$

Таким образом, в точке L поначалу непрерывный поток поляризованных нейтронов превратился без какого бы то ни было прерывателя в пульсирующий источник неполяризованных нейтронов.

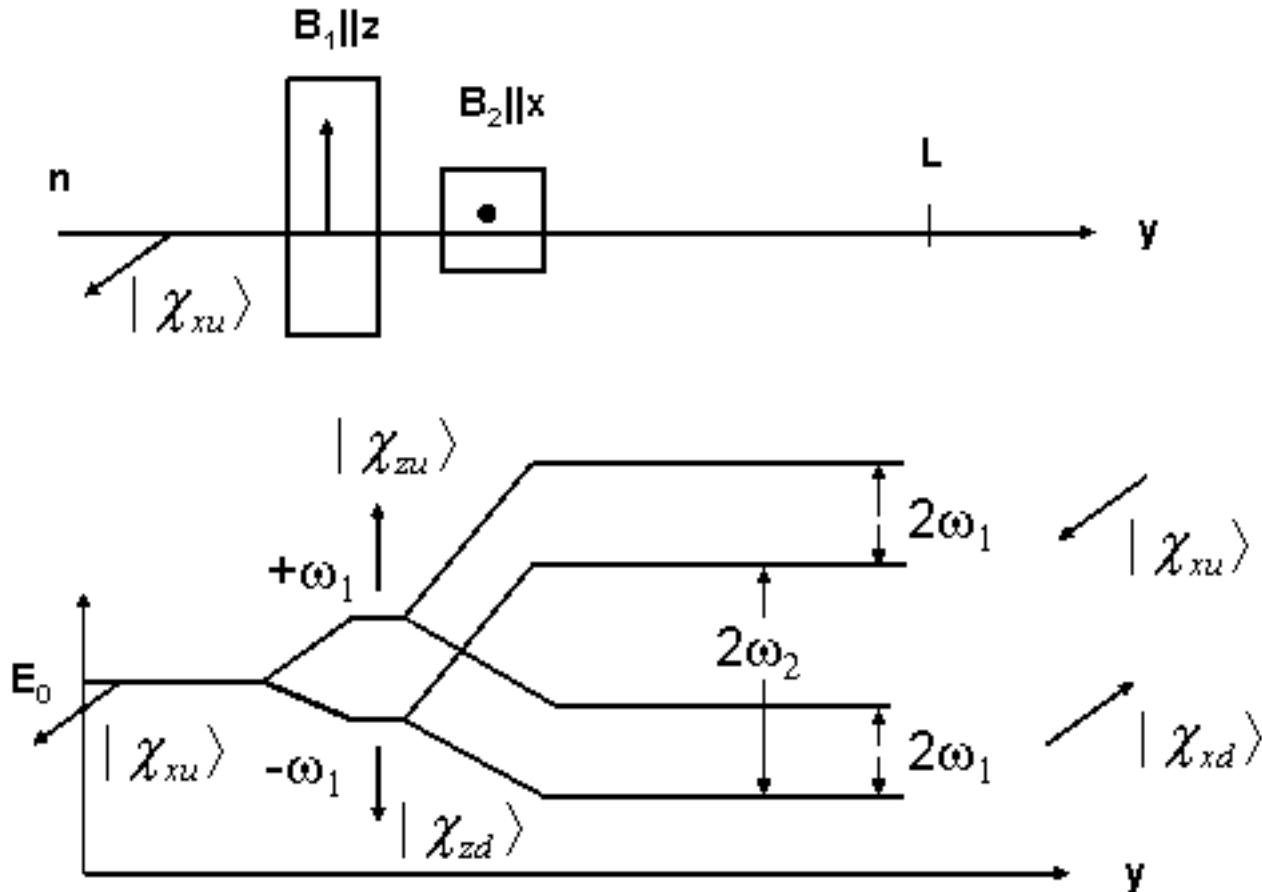


Рис. 2.7: Схема полного преобразования непрерывного пучка, поляризованного вдоль оси x , в осциллирующий (вверху). После первого флиппера с частотой $\omega_1 = 2B_1$, где B_1 — параллельное оси z постоянное поле внутри флиппера, нейtron оказывается в суперпозиции двух состояний с разными проекциями поляризации на ось z и с энергиями, различающимися на $2\omega_1$ (диаграмма внизу). После второго флиппера с полем B_2 , параллельным оси x , нейtron оказывается в суперпозиции двух спиновых состояний с поляризацией по полю и против поля B_2 во втором флиппере, и каждое состояние расщеплено по энергии на $2\omega_1$. Из-за расщепления интенсивность каждого состояния осциллирует во времени, и фаза осцилляций зависит от расстояния, пройденного после второго флиппера. На некотором расстоянии L осцилляции обеих компонент спина совпадают по фазе. Именно в этой точке непрерывный пучок оказывается полностью преобразованным в пульсирующий

Если напряженность поля B_1 в первом флиппере равна 1 кГс, то частота пульсирующего источника $\omega_1 \approx 3$ МГц. Расстояние L , на котором формируется этот источник, можно представить как

$$L = \lambda \frac{E_0^2}{4B_1 B_2}.$$

Если $B_1 = 1$ кГс, $B_2 = 2$ кГс и $E_0 = 10$ мэВ, то $L \approx 1$ м.

Выше, на с. 82, мы обсуждали метод полного преобразования неполяризованного пучка в поляризованный. Воспользовавшись этим методом, можно и непрерывный пучок неполяризованных нейтронов полностью преобразовать в пульсирующий. Однако этот метод годится в основном для очень медленных, ультрахолодных нейтронов. В случае более высоких энергий полное преобразование пучка неполяризованных нейтронов в пульсирующий практически неосуществимо из-за некогерентности нейтронов в различных спиновых состояниях падающего пучка.

2.5.6 Нейтронная голограмма

В этом разделе мы бегло познакомимся с возможностями нейтронной голограммы. Но предварительно вспомним основные принципы оптической голограммы и отметим некоторые элементы, которые будут отличать наш подход от общепринятого.

Общие принципы голограммы

Если плоская волна $\exp(kr - i\omega t)$ освещает некоторый объект, то совокупность упруго рассеянных волн

$$\psi_s(\mathbf{r}, t) = \int d^3 r' N_0(\mathbf{r}') b(\mathbf{r}') \exp(kr') \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - i\omega t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.173)$$

сфокусированная на сетчатку глаза, дает изображение объекта. Здесь $N_0(\mathbf{r}')$ и $b(\mathbf{r}')$ — атомарная плотность и амплитуда рассеяния атомов в точке \mathbf{r}' внутри объекта.

Если сфокусировать поле ψ на фотопластинку (фокусировка означает концентрацию поля, рассеянного точкой объекта, в точку на фотопластинке), то интенсивность сфокусированного поля создает изображение объекта на фотопластинке.

Отличительная черта нашего подхода. Всюду далее мы будем заменять сферические волны совокупностью плоских волн. Покажем, что это возможно.

Воспользуемся двумерным Фурье-представлением сферической волны

$$\frac{\exp(ikr)}{r} = \frac{i}{2\pi} \int \frac{d^2 p_{\parallel}}{\sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}} \exp\left(ip_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + \sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}|r_{\perp}|\right),$$

где \mathbf{p}_{\parallel} — компоненты волнового вектора, параллельные некоторой выбранной плоскости с координатами \mathbf{r}_{\parallel} , а r_{\perp} — координата, перпендикулярная этой плоскости (рис. 2.8). Область интегрирования по $d^2 p_{\parallel}$ включает в себя и такие компоненты \mathbf{p}_{\parallel} , величина которых больше k . Эти компоненты характеризуют волны, экспоненциально затухающие в направлении r_{\perp} , и ими можно пренебречь. В результате интеграл аппроксимируется выражением

$$\begin{aligned} \frac{\exp(ikr)}{r} &\approx \frac{i}{2\pi} \int_{p_{\parallel}^2 < k^2} \frac{d^2 p_{\parallel}}{\sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}} \exp\left(ip_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + \sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}|r_{\perp}|\right) = \\ &= \frac{i}{\pi} \int d^3 p \delta(k^2 - p^2) \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) \Theta(p_{\perp}r_{\perp} > 0) = \\ &= \frac{ik}{2\pi} \int d\Omega \exp(i\mathbf{k}_{\Omega}\mathbf{r}) \Theta(\mathbf{k}_{\Omega}\mathbf{r} > 0), \end{aligned} \quad (2.174)$$

где $|\mathbf{k}_{\Omega}| = k$, и мы воспользовались легко проверяемым соотношением

$$\frac{d^2 p_{\parallel}}{2\sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}} \Theta(p_{\parallel}^2 < k^2) = d^3 p \delta(k^2 - p^2).$$

Таким образом, рассеянное поле объекта представляется в виде

$$\psi_s(\mathbf{r}, t) = i \int d^3 r' N_0(\mathbf{r}') kb(\mathbf{r}') \exp(kr') \int \frac{d\Omega}{2\pi} \exp(i\mathbf{k}_{\Omega}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i\omega t). \quad (2.175)$$

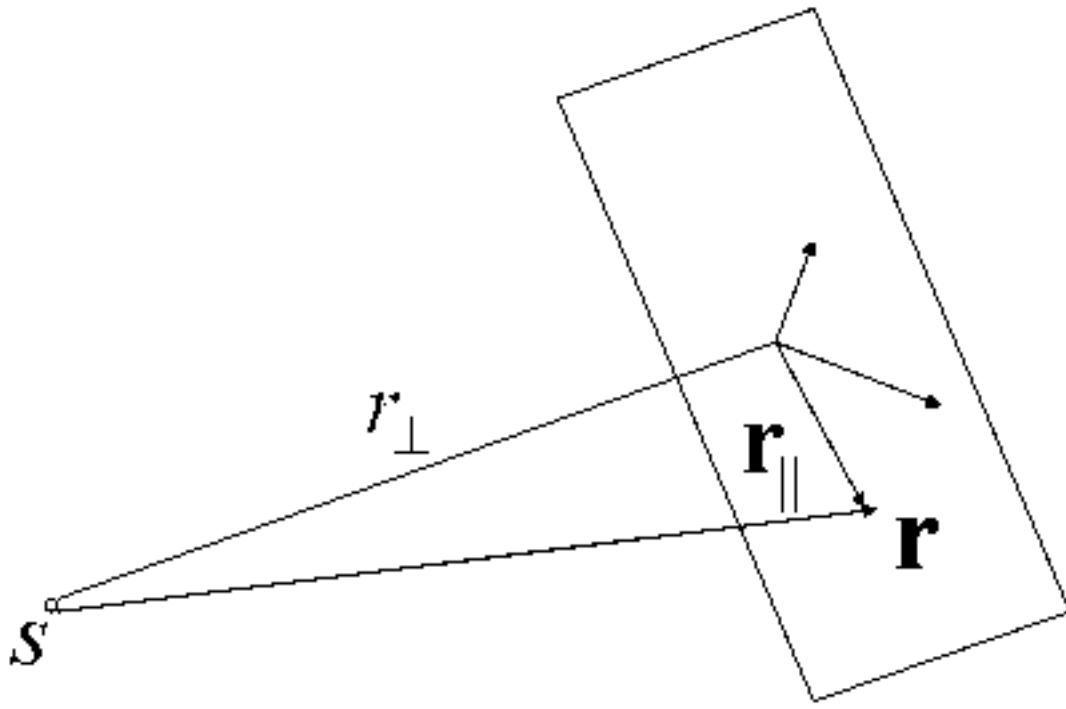


Рис. 2.8: Геометрия двумерного Фурье-представления сферической функции: s — рассеивающий центр, из которого исходит сферическая волна. В точке наблюдения на расстоянии r_\perp от s строим плоскость, перпендикулярную r_\perp . Координаты r_\parallel характеризуют точки, лежащие вокруг точки наблюдения r_\perp в построенной плоскости

Голографическое изображение

Голографическое изображение получается путем наложения рассеянного поля объекта $\psi_s(\mathbf{r}, t)$ на поле плоской волны $\psi_0(\mathbf{r}, t) = \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - i\omega t)$ ($|\mathbf{k}_0| = k$), которая называется опорной. Интенсивность $I(\mathbf{r})$ суммы двух волн в точке \mathbf{r} , усредненная по времени:

$$I(\mathbf{r}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau |\psi_0(\mathbf{r}, t) + \psi_s(\mathbf{r}, t)|^2 dt,$$

содержит интерференционный член

$$I_i(\mathbf{r}) = \int d^3 r' N_0(\mathbf{r}') k b(\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}') \int \frac{d\Omega}{\pi} \sin((\mathbf{k} - \mathbf{k}_\Omega) \cdot \mathbf{r}' + (\mathbf{k}_\Omega - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}). \quad (2.176)$$

Эта часть интенсивности создает пачернения на фотопластинке, которые и являются голографическим изображением объекта, или голограммой.

Восстановление рассеянного поля объекта по голограмме

Для того чтобы увидеть объект, необходимо восстановить рассеянное им поле (2.175). Для этого голограмму — фотопленку с прозрачностью $T(\mathbf{r}_\parallel) \sim I_i(\mathbf{r})$ в точке $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_\parallel, r_\perp = 0)$ плоскости голограммы освещают восстанавливающей волной $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega_q t)$, необязательно тождественной опорной. В результате в точке \mathbf{R} возникает прошедшее сквозь голограмму поле, определяемое по принципу Френеля–Кирхгофа:

$$\psi_t(\mathbf{R}, t) = \frac{1}{4\pi} \int d^2 r_\parallel \frac{\exp(ik|\mathbf{R} - \mathbf{r}|)}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \left(\frac{\overleftarrow{d}}{dr_\perp} - \frac{\overrightarrow{d}}{dr_\perp} \right)_{r_\perp=0} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega_q t) T(\mathbf{r}_\parallel), \quad (2.177)$$

где стрелка над производной показывает, какой множитель нужно дифференцировать по нормали к плоскости голограммы. Представим сферические функции в виде двумерного интеграла Фурье (2.174) и получим

$$\psi_t(\mathbf{R}, t) = \frac{1}{4\pi^2} \int d^2 r_{\parallel} \int d^2 p_{\parallel} \frac{p_{\perp} + q_{\perp}}{2p_{\perp}} \exp(i\mathbf{p}(\mathbf{R} - \mathbf{r}_{\parallel}) + i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\parallel} - i\omega_q t) T(\mathbf{r}_{\parallel}), \quad (2.178)$$

где $\mathbf{p} = (p_{\parallel}, p_{\perp})$ и $p_{\perp} = \sqrt{q^2 - p_{\parallel}^2}$. Легко проверить, что при $T(\mathbf{r}_{\parallel}) = 1$ возникающее поле полностью воспроизводит падающую плоскую волну $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{R} - i\omega_q t)$, как и должно быть по принципу Гюйгенса–Френеля.

Положим, что $T(\mathbf{r}_{\parallel}) = I_i(\mathbf{r}_{\parallel})$, подставим (2.176) в (2.178) и учтем, что $\sin x$ представляется суммой двух экспонент: $\sin x = (1/2i)[\exp(ix) - \exp(-ix)]$. Первая экспонента после интегрирования по плоскости голограммы, которую считаем бесконечной, приводит к полю

$$\psi_{t1}(\mathbf{R}, t) = \int d^3 r' N_0(\mathbf{r}') k b(\mathbf{r}') \int d\Omega \frac{k_{\Omega\perp} + k_{0\perp}}{2k_{\Omega\perp}} \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_{\Omega})\mathbf{r}' + i(\mathbf{k}_{\Omega} - \mathbf{k}_0 + \mathbf{q})_{\parallel}\mathbf{R}_{\parallel} + ip_{\perp}R_{\perp}), \quad (2.179)$$

где $p_{\perp} = \sqrt{q^2 - (\mathbf{k}_{\Omega} - \mathbf{k}_0 + \mathbf{q})_{\parallel}^2}$. Здесь и далее слагаемое $\omega_q t$ в показателе экспоненты опускается. При $\mathbf{q} = \mathbf{k}_0$, т. е. когда восстановливающая волна тождественна опорной, поле (2.179) идентично полю, рассеянному объектом и наблюдаемому в точке \mathbf{R} . Оно называется мнимым изображением и наблюдается визуально, если частота поля ω_q лежит в видимой части спектра электромагнитных волн. При $\mathbf{q} \neq \mathbf{k}_0$ визуально наблюдаемое изображение смещается относительно своего истинного положения и искажается, как если бы объект находился в среде с коэффициентом преломления

$$n^2(\Omega) = \frac{k^2 - k_{\Omega\parallel}^2 + (\mathbf{k}_{\Omega} - \mathbf{k}_0 + \mathbf{q})_{\parallel}^2}{q^2}.$$

и освещался волной с волновым вектором $\mathbf{k} - (\mathbf{k}_0 - \mathbf{q})_{\parallel}$.

Вторая экспонента $\exp(-ix)$ в $\sin x$ после интегрирования в плоскости голограммы приводит к полю, которое на некотором расстоянии от голограммы формирует реальное изображение. Его мы здесь обсуждать не будем.

Волна спиновой препессии (ВСП)

Все сказанное выше относительно электромагнитной оптики справедливо и для нейтронной оптики. Однако в отличие от электромагнитной оптики, где имеются источники когерентного излучения — лазеры, в нейтронной физике их пока нет. Кроме того, длины волн, например тепловых нейтронов, в 3000 раз меньше световых, поэтому, даже если бы и можно было с помощью нейтронов записать нейтронную голограмму, воспроизвести ее в видимом свете было бы затруднительно.

Тем не менее ситуация не столь безнадежна, как может показаться на первый взгляд. Дело в том, что с помощью нейтронов, как мы уже видели, можно формировать волны с длиной волны, значительно превышающей длину волны де Броиля [71–73].

Рассмотрим систему из двух спин-флипперов (π -ротаторов), показанных на рис. 2.9. Если падающий нейtron поляризован вдоль оси x , то его волновая функция равна

$$|\psi_2(\mathbf{r}, t)\rangle = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - iEt)|\chi_{xu}\rangle, \quad (2.180)$$

где $E = k^2/2$ — кинетическая энергия нейтрона, $|\chi_{xu}\rangle$ — его спинорное состояние с поляризацией вдоль оси x . Это состояние является собственным для матрицы Паули σ_x :

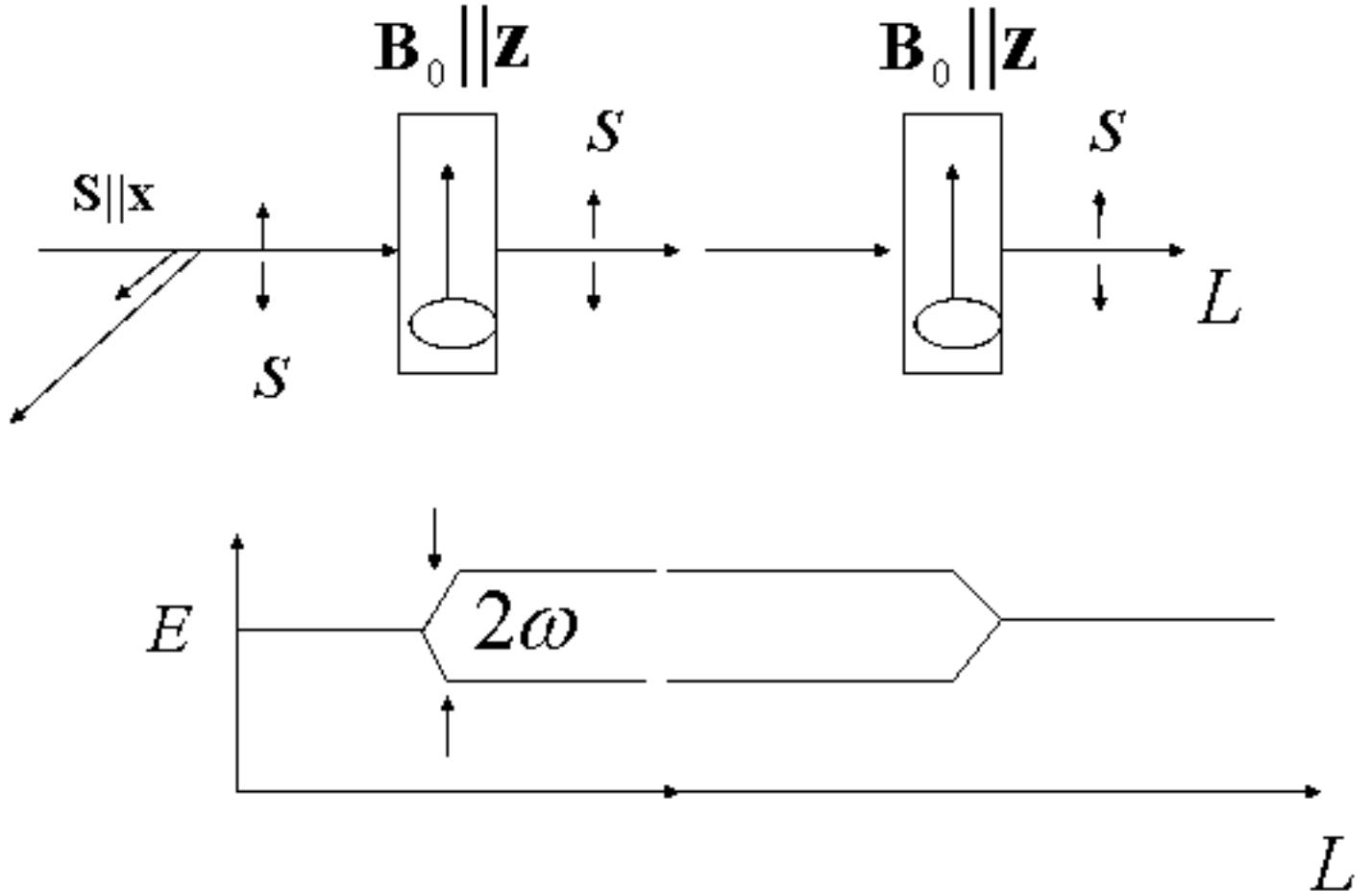


Рис. 2.9: Схема генерации когерентной ВСП между двумя тождественными спин-флипперами с внутренним магнитным полем B_0 , параллельным оси z (вверху). Падающий нейтронный пучок поляризован вдоль оси x и распространяется вдоль оси y . Магнитное поле вне флипперов отсутствует. После первого флиппера нейтрон оказывается в состоянии с двумя поляризациями по и против оси z , параллельной внутреннему полю первого флиппера, и состояния эти расщеплены по энергии, как видно из диаграммы внизу. После второго флиппера энергии обеих компонент возвращаются к первоначальному значению E . ВСП существует между двумя флипперами

$\sigma_x |\chi_{xu}\rangle = |\chi_{xu}\rangle$. Состояние $|\chi_{xu}\rangle$ разлагается по состояниям с поляризацией вдоль оси z :

$$|\chi_{xu}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\chi_{zu}\rangle + |\chi_{zd}\rangle],$$

где $|\chi_{zu,d}\rangle$ — собственные состояния для матрицы Паули σ_z :

$$\sigma_z |\chi_{zu,d}\rangle = \pm |\chi_{zu,d}\rangle.$$

В падающей волне оба состояния $|\chi_{zu,d}\rangle$ имеют одинаковую скорость k и энергию E .

После первого резонансного π -спин-флиппера волновая функция нейтрона оказывается равной

$$\begin{aligned} |\psi_1(\mathbf{r}, t)\rangle &= \exp \left(-i(E + \sigma_z \omega)t + i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r} \right) |\chi_{xu}\rangle = \\ &= \frac{-i}{\sqrt{2}} \exp \left(-i(E + \sigma_z \omega)t + i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r} \right) (|\chi_{zu}\rangle + |\chi_{zd}\rangle), \end{aligned} \quad (2.181)$$

где $\hat{\mathbf{k}} = \sqrt{k^2 + 2\omega\sigma_z} \mathbf{k}/k$, а ω — частота радиочастотного поля флиппера, которую мы здесь будем считать равной $2B_0$. Видно, что два состояния $|\chi_{zu,d}\rangle$ теперь имеют разные энергии, различающиеся на 2ω , как показано на диаграмме (рис. 2.9, внизу), и соответственно

разные скорости. Это приводит к тому, что направление спиновой стрелки меняется волнобразно и в пространстве, и во времени, как это уже обсуждалось в разделе 2.5.1. Такое изменение можно рассматривать как когерентную волну спиновой прецессии, когерентность которой обеспечивается радиочастотным полем спин-флиппера.

После второго спин-флиппера состояние нейтрона будет описываться волновой функцией

$$\begin{aligned} |\psi_2(\mathbf{r}, t)\rangle &= \exp(-iEt + ik(y - L))|\chi_{xu}\rangle = \\ &= |\psi_2(\mathbf{r}, t)\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}} \exp(-iEt + ik(y - L))(\exp(ik_+L)|\chi_{zu}\rangle + \exp(ik_-L)|\chi_{zd}\rangle), \end{aligned} \quad (2.182)$$

где $k_{\pm} = \sqrt{k^2 \pm 2\omega}$. Отсюда следует, что после второго флиппера нейtron имеет ту же энергию и скорость, что и до первого, но состояния $|\chi_{zu,d}\rangle$ приобрели разность фаз. Ее можно наблюдать в эксперименте, схема которого показана на рис. 2.10. Если после второго спин-флиппера пучок попадает в анализатор поляризации, который пропускает лишь нейтроны, поляризованные вдоль оси x , то интенсивность этих нейтронов

$$I(L) = \left| \frac{1}{2}(\exp(ik_+L) + \exp(ik_-L)) \right|^2 = \cos^2(K_-L) = \frac{1}{2}[1 + \cos(2\pi L/\Lambda)], \quad (2.183)$$

где $K_- = (k_+ - k_-)/2 \approx \omega/k$, $\Lambda = \lambda E/\hbar\omega$ и $\lambda = 2\pi/k$ — длина волны де Броиля. Если падающий пучок достаточно широк вдоль оси x , а второй спин-флиппер с магнитным полем $\mathbf{B}_0 \parallel z$ повернут в плоскости (x, y) на угол α по отношению к первому, то, обозначив координату вдоль позиционного чувствительного детектора ПЧД (рис. 2.10) через l , получим

$$I(l) = \frac{1}{2}[1 + \cos(2\pi\{L_0 + l \sin \alpha\}/\Lambda)] = \frac{1}{2}[1 + \cos(\phi + 2\pi l/\Lambda')], \quad (2.184)$$

где $\phi = 2\pi L_0/\Lambda$, $\Lambda' = \Lambda / \sin \alpha$.

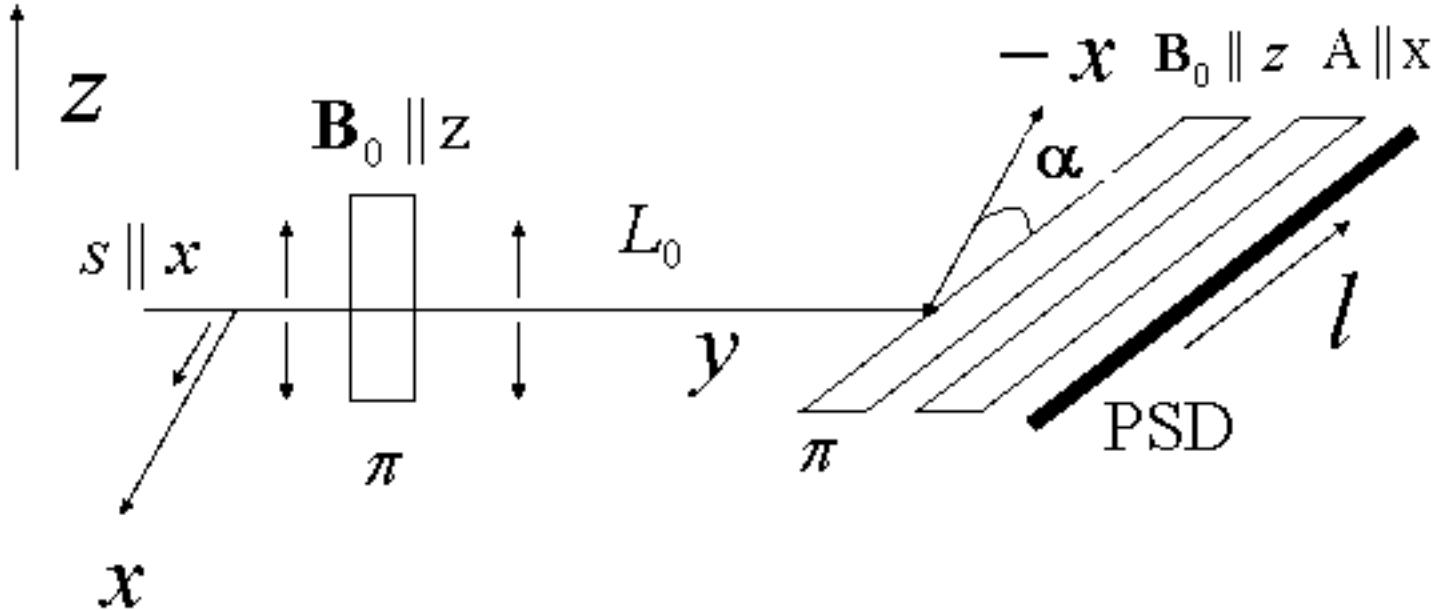


Рис. 2.10: Схема эксперимента по наблюдению интерференционной картины, создаваемой ВСП. Второй спин-флиппер повернут по в плоскости (x, y) относительно к первому на угол α . После него имеются анализатор A , выделяющий поляризацию, параллельную оси x , и позиционный чувствительный детектор ПЧД. Скорость счета вдоль детектора l меняется косинусоидально по формуле (2.184)

Для нейтронов низкой энергии (≈ 1 мэВ) с длиной волны 9 Å и магнитного поля $B_0 \approx 2$ Т длина волны $\Lambda \approx 10$ мкм.

Голографма рассеянных ВСП без опорной волны

Теперь посмотрим, как рассеются нейтроны на образце, помещенном между двумя спин-флипперами, как показано на рис. 2.11. Волновая функция рассеянных нейтронов до вто-

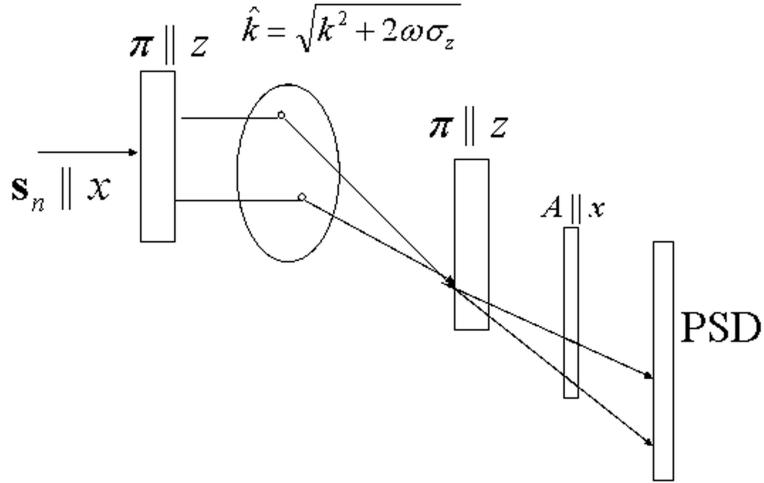


Рис. 2.11: Схема эксперимента по записи голограммы рассеянных волн спиновой прецессии. Между двумя тождественными спин-флипперами устанавливается некогерентно рассеивающий образец. Падающие на первый флиппер нейтроны поляризованы вдоль оси x . После второго флиппера устанавливается анализатор, пропускающий только нейтроны, поляризованные вдоль оси x . Голографма записывается на позиционно чувствительном детекторе ПЧД.

рого флиппера равна

$$|\psi_s(\mathbf{r}, t)\rangle = \exp(-i(E + \omega\sigma_z)t) \int d^3r' N_0(\mathbf{r}') \frac{b(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(i\hat{k}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \exp(i\hat{k}\mathbf{r}') |\chi_{xu}\rangle, \quad (2.185)$$

где $N_0(\mathbf{r}')$ и $b(\mathbf{r}')$ — атомная плотность и амплитуда рассеяния в точке \mathbf{r}' внутри образца, $\hat{k} = \sqrt{k^2 + 2\omega\sigma_z}$ и $\hat{\mathbf{k}} = \sqrt{k^2 + 2\omega\sigma_z}\mathbf{k}/k$. Воспользуемся представлением (2.174) для сферических волн. Тогда рассеянное поле (2.185) преобразуется к виду

$$|\psi_s(\mathbf{r}, t)\rangle = i \int d^3r' N_0(\mathbf{r}') \hat{k} b(\mathbf{r}') \int \frac{d\Omega}{2\pi} \exp\left(i\hat{\mathbf{k}}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i(E + \omega\sigma_z)t\right) \exp(\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r}') |\chi_{xu}\rangle, \quad (2.186)$$

где $\hat{\mathbf{k}}_\Omega = \sqrt{k^2 + 2\omega\sigma_z}\boldsymbol{\Omega}$, $\boldsymbol{\Omega}$ — единичный вектор в направлении Ω .

После второго флиппера, тождественного первому, и анализатора, пропускающего только нейтроны, поляризованные вдоль оси x , волновая функция (2.186) становится равной

$$\begin{aligned} \langle \chi_{xu} | |\psi_s(\mathbf{r}, t)\rangle &\approx \exp(-iE_0t) \times \\ &\times \int d^3r' N(\mathbf{r}') kb(\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}' + \mathbf{k}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) \cos(\mathbf{q}\mathbf{r}' + \mathbf{q}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}')), \end{aligned} \quad (2.187)$$

где $\mathbf{q} = (\omega/k^2)\mathbf{k}$, $\mathbf{q}_\Omega = (\omega/k)\boldsymbol{\Omega}$, и всюду, где это возможно, мы пренебрегли ω по сравнению с k .

Будем считать, что рассеяние некогерентно. Это значит, что интенсивность рассеянных нейтронов на ПЧД, определяемая квадратом волновой функции (2.187), усредненным по элементному изотопическому и спиновому состояниям атомов, приводится к виду

$$I(\mathbf{r}) = \langle\langle |\langle \chi_{xu} | |\psi_s(\mathbf{r}, t)\rangle|^2 \rangle\rangle = \int d^3r' N(\mathbf{r}') |kb(\mathbf{r}')|^2 \cos^2(\mathbf{q}\mathbf{r}' + \mathbf{q}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) =$$

$$= C + \frac{1}{2} \int d^3r' N(\mathbf{r}') |kb(\mathbf{r}')|^2 \cos(2\mathbf{q}\mathbf{r}' + 2\mathbf{q}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) , \quad (2.188)$$

где $C = \int d^3r' N(\mathbf{r}') |kb(\mathbf{r}')|^2 / 2$. Мы видим, что интенсивность зависит от координат точки \mathbf{r} на ПЧД и содержит информацию о фазе ВСП, т. е. о расстоянии между точкой \mathbf{r} на ПЧД и точкой \mathbf{r}' , в которой произошло рассеяние.

Поместив фотопленку на ПЧД, мы получим голограмму. Освещая голограмму восстанавливающей световой волной, можно визуально наблюдать структуру рассеивающих непрозрачных веществ. Однако для этого необходимо преодолеть некоторые трудности, связанные с сильным различием Λ и длин волн видимого спектра. Если волны де Броиля λ слишком коротки по сравнению с длинами световых волн, то ВСП, наоборот, значительно длиннее.

Магнитное рассеяние ВСП с переворотом спина

Мы рассмотрели случай упругого рассеяния без переворота спина. В магнитных и paramagnитных веществах возможно также рассеяние с переворотом спина. При этом после рассеяния состояние $|\chi_{zu}\rangle$ с более высокой энергией $E + \omega$ преобразуется в состояние $|\chi_{zd}\rangle$ с той же энергией $E + \omega$, а состояние $|\chi_{zd}\rangle$ с более низкой энергией $E - \omega$ — в состояние $|\chi_{zu}\rangle$ с энергией $E - \omega$. После прохождения второго спин-флиппера разность энергий между этими состояниями не сократится, а увеличится, поэтому на ПЧД интенсивность нейтронов, рассеянных с переворотом спина, будет зависеть от времени:

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}, t) &= \int d^3r' N(\mathbf{r}') |kb(\mathbf{r}')|^2 \cos^2(2\mathbf{q}\mathbf{r}' + 2\mathbf{q}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - 2\omega t) = \\ &= C + \frac{1}{2} \int d^3r' N(\mathbf{r}') |kb(\mathbf{r}')|^2 \cos(4\mathbf{q}\mathbf{r}' + 4\mathbf{q}_\Omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - 4\omega t) , \end{aligned} \quad (2.189)$$

и усреднение по времени стирает интерференционную картину.

Для того чтобы отдельно зарегистрировать рассеяние с переворотом спина, необходимо во втором спин-флиппере изменить направление магнитного поля \mathbf{B}_0 на обратное. Тогда рассеяние без переворота спина даст зависящую от времени интенсивность на ПЧД, которая после усреднения по времени создает однородный фон, а рассеяние с переворотом спина — интерференционную картину на голограмме, которая после некоторой обработки и освещения видимым светом позволит получить визуальное изображение магнитной структуры непрозрачного вещества.

Заключительные замечания

Мы завершили рассмотрение теоретических основ рефлектометрии поляризованных нейтронов. Применение изложенных теоретических методов позволяет разобраться в огромном множестве явлений, наблюдаемых при отражении поляризованных нейтронов от магнитных и немагнитных зеркал и многослойных покрытий. При этом исследовать можно не только свойства вещества и его взаимодействие с нейтронами, но и свойства самих нейтронов. К наиболее актуальным относится проблема скорости нейтрона в магнитном поле, сформулированная в подразделе 2.5.1: действительно ли скорость нейтрона равна средней скорости его спиновых компонент, или спиновые компоненты в конечном счете расходятся? Если они расходятся, то каким образом это происходит и как исчезает когерентность, связывающая две компоненты? Можно надеяться, что эти вопросы привлекут к себе внимание будущих исследователей, и, если они будут решены, мы поднимемся на новую ступеньку в понимании квантовой механики.

Но эти вопросы не исчерпывают всех проблем, связанных с магнитным взаимодействием. Мы рассматривали главным образом постоянные в пространстве магнитные поля или поля, меняющиеся скачком на границе раздела. Мы могли бы также рассмотреть поле, произвольно меняющееся вдоль нормали к зеркалу (скажем, вдоль оси z), но постоянное вдоль границы раздела. При этом мы получили бы обобщение на спинорную частицу всех тех результатов, которые в первой главе были получены для скалярной частицы. Но все они относятся к классическому полю, которое само не меняется при рассеянии нейтрона, и здесь нам совершенно не важна его природа.

Магнитное поле может быть создано внешними токами или атомными электронами. Интересных результатов можно ожидать в случае, когда магнитное взаимодействие возникает под действием внешних электрических полей \mathbf{E} . Согласно теории относительности, в системе координат, связанной с нейтроном, они преобразуются в магнитные: $\mathbf{B} = [\mathbf{v}\mathbf{E}]/c$, где v — скорость нейтрона, и c — скорость света в вакууме. В рефлектометрии тепловых нейтронов релятивистские эффекты очень малы в силу малости отношения v/c , однако в некоторых специальных случаях их роль может стать определяющей.

Очень коротко мы коснулись нейтронной голографии и волн спиновой прецессии. Эти волны значительно длиннее световых и могут служить для макроскопических исследований структуры вещества. Но в настоящее время ставятся также эксперименты по нейтронной голографии на атомарном уровне. В них используются короткие волны де Бройля, а в качестве опорных — сферические волны, рассеянные или образованные на фиксированных, реперных атомах. Интерференция опорной волны с волнами, рассеянными на других атомах, позволяет исследовать положение этих атомов относительно реперных. Данная тема выходит за рамки проблематики настоящей книги; интересующимся этими вопросами можно порекомендовать обратиться к работам [74, 75] и цитированной в них литературе.

*Конец главе. Но мысли нет предела.
Ее биение мозг тревожит то и дело.*

Глава 3

Динамическая дифракция в трехмерных периодических средах

В этой главе мы сначала рассмотрим дифракцию на трехмерном одноатомном идеальном кристалле, воспользовавшись методами, разработанными в предыдущих главах для скалярной и спинорной частиц в одномерных потенциалах. Затем напомним элементы стандартной динамической теории дифракции, после чего займемся фундаментальными вопросами, связанными с принципом унитарности и детального равновесия, и, наконец, используя весь арсенал полученных результатов, обратимся к выводу величины оптического потенциала u_0 .

Вторая глава, посвященная рефлектометрии поляризованных нейтронов, послужит хорошей базой для изучения взаимодействия нейтронов с трехмерными периодическими средами — кристаллами. Трехмерные кристаллы периодичны не только вдоль нормали к поверхности раздела, но и вдоль самой поверхности раздела. Поэтому, если представить кристалл одномерной периодической системой, разбив его на отдельные слои толщиной в период, параллельные входной поверхности, то отражение и пропускание одним одномерным периодом следует описывать не скалярными числами ρ и τ , а матрицами $\hat{\rho}$ и $\hat{\tau}$, как и в случае спинорных частиц. В настоящей главе мы, однако, снова отвлечемся от спиновых свойств нейтрана и будем рассматривать его как скалярную частицу. Тем не менее амплитуды отражения и пропускания останутся матрицами, что обусловлено трехмерной структурой кристалла [76].

Рассмотрим, например, кристалл с кристаллическим плоскостями, параллельными его поверхности. Раньше мы считали каждую плоскость сплошной, с равномерным распределением атомов, и описывали ее δ -образным потенциалом. При этом потенциал всего кристалла представлял собой сумму дельта-функций, известную как потенциал Кроннига–Пенни.

На самом же деле каждая плоскость состоит из дискретно расположенных атомов, и взаимодействие с ними нейтронной волны приводит не только к отражению и прохождению через атомную плоскость, но и к дифракции, т. е. к отражению и пропусканию под углами, отличными от падающего.

Для того чтобы понять термин «дифракция» применительно к кристаллической плоскости, представим себе волну $\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r})$, падающую на плоскость $z = 0$. Эта волна рассеивается на атомах (для простоты будем считать элементарную ячейку квадратной, со стороной a), расположенных в точках $\mathbf{r}_n = a(n_x, n_y)$, где n_x, n_y — целые числа. Каждый из атомов создает сферическую волну, а совокупность сферических волн по принципу Френеля создает плоскую волну. Если бы атомы были расположены на плоскости непрерывно, мы получили бы совокупность сферических волн, испускаемых каждой точкой фронта падающей плоской волны с фазовым множителем $\exp(i\mathbf{k}_{0\parallel}\mathbf{r}_\parallel)$. Такая совокупность сферических волн вдали от плоскости $z = 0$ просто воспроизводила бы при $z > 0$

падающую плоскую волну $\exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_{0\parallel} r_{\parallel} + ik_{0\perp} z)$ и при $z < 0$ — отраженную волну $\exp(i\mathbf{k}_{0\parallel} r_{\parallel} - ik_{0\perp} z)$, где $\mathbf{k}_{0\parallel}$, $k_{0\perp}$ — компоненты волнового вектора \mathbf{k}_0 , параллельные и перпендикулярные плоскости $z = 0$ соответственно.

Однако, поскольку атомы на кристаллической плоскости расположены дискретно, они порождают дискретную совокупность сферических волн с теми же фазовыми множителями $\exp(i\mathbf{k}_{0\parallel} \cdot \mathbf{r}_n)$. Эти множители тождественны множителям $\exp(i[\mathbf{k}_{0\parallel} + \boldsymbol{\kappa}] \cdot \mathbf{r}_n)$ при $\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_n = 2\pi n$ с целыми n , поэтому сумма дискретных сферических волн воспроизводит плоскую волну неоднозначно. Она воспроизводит не только первоначальную и отраженную волны, но также волны $\exp(i\mathbf{k}_{\kappa} \cdot \mathbf{r}) = \exp(i[\mathbf{k}_{0\parallel} + \boldsymbol{\kappa}] \cdot \mathbf{r}_{\parallel} + ik_{\kappa\perp} z)$ и $\exp(i[\mathbf{k}_{0\parallel} + \boldsymbol{\kappa}] \cdot \mathbf{r}_{\parallel} - ik_{\kappa\perp} z)$, где $k_{\kappa\perp} = \sqrt{k_0^2 - (\mathbf{k}_{0\parallel} + \boldsymbol{\kappa})^2}$. Последнее равенство следует из закона сохранения энергии. Поскольку рассеяние на фиксированных в пространстве атомах упруго, то $|\mathbf{k}_{\kappa}| = |\mathbf{k}_0|$.

Условие $\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}_n = 2\pi n$ выполняется только для $\boldsymbol{\kappa} = 2\pi(n_x, n_y)/a$ с целыми n_x, n_y . Такие $\boldsymbol{\kappa}$ называются векторами обратной решетки кристаллической плоскости, а плоские волны с $\boldsymbol{\kappa} \neq 0$ называются дифрагированными.

Таким образом, кристаллическая плоскость преобразует падающую плоскую волну в несколько отраженных и прошедших плоских волн, волновые векторы которых отличаются векторами обратной решетки. Совокупность отраженных и прошедших волн, а также падающую волну можно описать многомерными (вообще говоря, бесконечномерными) векторами амплитуд

$$|\psi_r\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ a_{-2} \\ a_{-1} \\ a_0 \\ a_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \hat{\rho}|\psi_0\rangle, \quad |\psi_t\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ b_{-2} \\ b_{-1} \\ b_0 \\ b_1 \\ \vdots \end{pmatrix} = \hat{\tau}|\psi_0\rangle,$$

где, например,

$$|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

При этом амплитуды $\hat{\rho}$ и $\hat{\tau}$ являются многомерными матрицами, матричные элементы которых связывают компоненты первичного вектора $|\psi_0\rangle$ падающей волны с компонентами a_j, b_j векторов отраженных и прошедших волн. Описывая таким образом совокупность всех волн, мы можем трехмерные периодические среды рассматривать как одномерные и воспользоваться алгеброй, развитой для одномерного случая, учитывая матричный характер всех величин. Чтобы понять, каковы эти матрицы, рассмотрим подробнее дифракцию нейтрона на кристаллической плоскости.

3.1 Дифракция на кристаллической плоскости

Будем считать, что поверхность идеального кристалла бесконечна, и он может быть разбит на симметричные периоды, каждый из которых содержит бесконечную кристаллическую плоскость и два равных пустых промежутка с обеих сторон от нее, как в случае потенциала Кроннига–Пенни (см. рис. 1.16). Элементарную ячейку плоскости будем считать квадратной, а элементарную ячейку всего кристалла — кубической.

Рассеяние на одном периоде (он делит пространство на два полупространства) описывается матрицами амплитуд отражения $\hat{\rho}$ и пропускания $\hat{\tau}$. Матричные элементы первой

характеризуют амплитуды зеркального отражения и дифракции в ту же сторону, куда идет зеркально отраженная волна, а матричные элементы второй — амплитуды прошедшой и дифрагированных волн, идущих в то же полупространство, что и прошедшая волна. С помощью $\hat{\rho}$ и $\hat{\tau}$ находятся матрицы отражения \hat{R} от полубесконечного кристалла и блоховского волнового вектора \hat{q} внутри него. С помощью же \hat{R} и \hat{q} находятся матрицы отражения \hat{R}_N и пропускания \hat{T}_N кристаллом конечной толщины, состоящего из N периодов. Таким образом, в первую очередь нужно вычислить $\hat{\rho}$ и $\hat{\tau}$, т. е. найти, как рассеивается падающая плоская волна на совокупности атомов, составляющих кристаллическую плоскость. Этому посвящен следующий подраздел.

3.1.1 Теория многократного рассеяния

Будем считать, что атомы, составляющие плоскость, строго фиксированы в пространстве. Это значит, что рассеяние на отдельном атоме и на их совокупности строго упруго.

Рассеяние на одном фиксированном центре

Согласно стандартной теории рассеяния (к ее основаниям мы обратимся позже) рассеяние нейтрона (сейчас мы не будем учитывать его спин) на отдельном центре, фиксированном в точке $\mathbf{r} = 0$, описывается волновой функцией

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \frac{b}{r} \exp(ikr), \quad (3.1)$$

где первое слагаемое соответствует падающему нейтрону (плоская волна), а второе — рассеянному (сферическая волна). Множитель b называется амплитудой рассеяния (обычно за амплитуду рассеяния принимается величина $-b$, но нам удобнее учитывать знак «минус» отдельно) и имеет размерность длины.

Если рассеивающий центр расположен не в точке $\mathbf{r} = 0$, а в точке $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1$, то волновая функция записывается в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_1) \frac{b}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) = \psi_0(\mathbf{r}) - \psi_0(\mathbf{r}_1) \frac{b}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|), \quad (3.2)$$

где $\psi_0(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. Из формулы видно, что рассеянная волна пропорциональна не только амплитуде b рассеивающего центра, но и амплитуде волны $\psi_0(\mathbf{r}_1)$, которая его освещает.

Рассеяние на двух фиксированных центрах

Рассмотрим рассеяние на двух различных центрах. Полная волновая функция при наличии двух рассеивателей имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \psi_1 \frac{b_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|) - \psi_2 \frac{b_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|), \quad (3.3)$$

где коэффициенты $\psi_{1,2}$ характеризуют амплитуды поля, которое освещает рассеивающие центры, так же как $\psi_0(\mathbf{r}_1)$ характеризует поле, освещдающее единственный рассеиватель в (3.2). Для амплитуд $\psi_{1,2}$ можно записать естественные уравнения

$$\psi_1 = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_1) - \psi_2 \frac{b_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \exp(ik|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \quad \psi_2 = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_2) - \psi_1 \frac{b_1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \exp(ik|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|), \quad (3.4)$$

которые означают, что поле, освещдающее каждый центр, состоит из двух частей. Первая — это падающая плоская волна, а вторая — сферическая волна, идущая от другого центра.

Система уравнений (3.4) легко решается. В результате получаем

$$\psi_{1,2} = \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_{1,2}) - b_{2,1}\eta_{12}\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_{2,1})}{1 - b_1b_2\eta_{12}^2}, \quad (3.5)$$

где мы ввели обозначение

$$\eta_{12} = \frac{\exp(ik|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|)}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}. \quad (3.6)$$

Подстановка (3.5) в (3.3) дает полную волновую функцию рассеяния на двух различных центрах.

Рассеяние на многих фиксированных центрах

Рассеяние на двух центрах легко обобщается на много центров. Полная волновая функция с учетом рассеяния на N центрах равна

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \sum_{j=1}^N \psi_j \frac{b_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|), \quad (3.7)$$

где b_j — амплитуда рассеяния центром, расположенным в точке \mathbf{r}_j , а ψ_j — полная амплитуда поля, освещдающего j -й центр. Амплитуды ψ_j складываются из амплитуды падающей плоской волны $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j)$ и волн, идущих от всех остальных центров,

$$\psi_j = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) - \sum_{j' \neq j} \psi_{j'} b_{j'} \eta_{j'j}, \quad (3.8)$$

где η_{ij} аналогичны (3.6). Ясно, что в общем случае решить систему уравнений (3.8) в аналитическом виде невозможно. Мы рассмотрим частный случай, когда аналитическое решение существует. Это случай рассеяния на кристаллической плоскости, состоящей из одинаковых атомов.

3.1.2 Рассеяние на бесконечной кристаллической плоскости

Представим себе бесконечную плоскость x, y , на которой находятся атомы, образующие идеальную решетку с квадратной элементарной ячейкой. Выберем оси x и y так, чтобы координаты атомов можно было представить в виде $\mathbf{r}_n = a\mathbf{n}$, где a — сторона ячейки, а вектор $\mathbf{n} = (n_x, n_y, 0)$ имеет целочисленные компоненты n_x, n_y (рис. 3.1). Атомы одинаковы, и это означает, что их амплитуды рассеяния тоже одинаковы, т. е. $b_j = b$.

Если из области $z < 0$ на плоскость падает плоская волна $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, то по отношению к ней все атомы плоскости равноправны и освещдаются одинаково. Из соображений симметрии амплитуды полей ψ_j могут различаться только фазой $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j)$ падающей волны. Таким образом, решение системы уравнений (3.8) можно искать в виде

$$\psi_n = C \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_n). \quad (3.9)$$

Подставив (3.9) в (3.8), получим уравнение для C :

$$C = 1 - bSC, \quad (3.10)$$

где

$$S = \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_n) \frac{\exp(ikr_n)}{r_n}. \quad (3.11)$$

Если мы сможем вычислить S , то сможем найти

$$C = \frac{1}{1 + bS}. \quad (3.12)$$

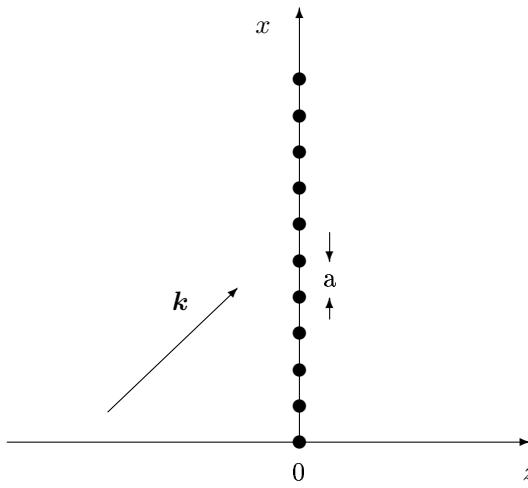


Рис. 3.1: Бесконечная атомная плоскость и падающая плоская волна с волновым вектором \mathbf{k} . Атомы расположены в плоскости x, y , пересекающей ось z в точке $z = 0$. Элементарная ячейка решетки атомов представляет собой квадрат со стороной a . Направления сторон совпадают с направлениями осей x и y . Ось y перпендикулярна плоскости рисунка и направлена к читателю

Идея вычисления S

Для вычисления кристаллических сумм вида (3.11) полезно знать одно правило преобразования:

$$\sum_{n=N_1}^{N_2} f(n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{N_1}^{N_2} f(n) \exp(2\pi i m n) dn. \quad (3.13)$$

Его легко проверить. Действительно, в результате преобразования мы получили новую сумму по m от новых функций $F(m) = \int_{N_1}^{N_2} f(n) \exp(2\pi i m n) dn$, к которой можно применить то же самое правило (3.13). В результате получим

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{\infty} F(m) &= \sum_{M=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} F(m) \exp(2\pi i M m) dm = \sum_{M=-\infty}^{\infty} 2\pi \int_{N_1}^{N_2} f(n) \delta(2\pi M + 2\pi n) dn = \\ &= \sum_{M=-\infty}^{\infty} \int_{N_1}^{N_2} \delta(M - n) f(n) dn = \sum_{M=-\infty}^{\infty} f(M) \Theta(N_1 \leq M \leq N_2) \equiv \sum_{M=N_1}^{N_2} f(M). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Выражение (3.13) для одномерной суммы можно обобщить на многомерные. Например, двумерная сумма (3.11) представляется в виде

$$S = k \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \eta(kan) \exp(iak\mathbf{n}) = k \sum_{\mathbf{m}} \int_{|n_{x,y}| \geq 1} d^2 n \eta(kan) \exp(iak\mathbf{n} + 2\pi i \mathbf{m}\mathbf{n}), \quad (3.15)$$

где $\eta(x) = \exp(ix)/x$, векторы \mathbf{n} и \mathbf{m} имеют целочисленные компоненты $\mathbf{n} = (n_x, n_y, 0)$ и $\mathbf{m} = (m_x, m_y, 0)$ соответственно, и $n = |\mathbf{n}|$. Суммирование в (3.15) производится по всем целым m_x и m_y , а интегрирование — по безразмерному двумерному пространству \mathbf{n} .

Взять интеграл по $d^2 n$ по всему пространству было бы легко, однако одну элементарную ячейку следует исключить из области интегрирования, и это делает задачу довольно трудной (см. книгу [3, с. 163]).

3.1.3 Рассеянное поле кристаллической плоскости

Впрочем, можно отложить эту задачу, считая C неким параметром, который перенормирует (переопределяет) амплитуду рассеяния: $b \rightarrow b_c = bC$, и сразу заняться вычислением рассеянных полей. Для этого нужно подставить решение (3.9) в (3.7) и просуммировать по бесконечному двумерному множеству точек с координатами $a\mathbf{n}$, в которых находятся рассеиватели. Применив правило суммирования (3.13), получим

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - b_c \sum_{\mathbf{m}} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 n \exp(2\pi i m \mathbf{n} + i a k \mathbf{n}) \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - a\mathbf{n}|)}{|\mathbf{r} - a\mathbf{n}|}, \quad (3.16)$$

где радиус-вектор имеет размерные координаты $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Здесь интегрирование ведется по всему пространству, и никаких сложностей не возникает. В интегrale удобно от безразмерных координат \mathbf{n} перейти к размерным $\rho = a\mathbf{n}$, а вместо безразмерного вектора \mathbf{m} ввести размерный вектор обратной решетки $\kappa = 2\pi\mathbf{m}/a$. При этом выражение (3.16) преобразуется к виду

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \frac{b_c}{a^2} \sum_{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 \rho \exp(i(\kappa + \mathbf{k})\rho) \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \rho|)}{|\mathbf{r} - \rho|}. \quad (3.17)$$

Для того чтобы увидеть, как это выражение представляется в виде совокупности отраженных и прошедших дифрагированных волн, воспользуемся двумерным Фурье-представлением сферических волн (1.24):

$$\eta(r) = \frac{i}{2\pi} \int \frac{d^2 p_{\parallel}}{k_{\perp}} \exp(ip_{\parallel}\mathbf{r} + ik_{\perp}|z|), \quad (3.18)$$

где $k_{\perp} = \sqrt{k^2 - p_{\parallel}^2}$.

Подставив (3.18) в (3.17), получим весь набор отраженных и прошедших дифрагированных плоских волн:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - \frac{2\pi i b_c}{a^2} \sum_{\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ip_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + ik_{\perp}|z|) \frac{d^2 p_{\parallel}}{k_{\perp}} \delta(\mathbf{p}_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel} - \kappa) = \\ &= \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - 2\pi i N_2 b_c \sum_{\kappa} \frac{1}{k_{\perp}(\kappa)} \exp(i\mathbf{k}_{\kappa\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + ik_{\perp}(\kappa)|z|), \end{aligned} \quad (3.19)$$

где $N_2 = 1/a^2$ — двумерная плотность атомов на кристаллической плоскости, $k_{\perp}(\kappa) = \sqrt{k^2 - \mathbf{k}_{\kappa\parallel}^2}$, $\mathbf{k}_{\kappa\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \kappa$. При отрицательных z слагаемое $k_{\perp}(\kappa)|z|$ равно $-k_{\perp}(\kappa)z$ и соответствует волнам, уходящим налево от рассеивающей плоскости, которая расположена в точке $z = 0$. Волны, идущие налево, будем называть отраженными. При $z > 0$ имеем $k_{\perp}(\kappa)|z| = k_{\perp}(\kappa)z$, что отвечает волнам, уходящим направо от рассеивающей плоскости. Их мы будем называть прошедшими.

Вектор обратной решетки $\kappa = 0$ относится к зеркально отраженной и прошедшей волнам, а векторы $\kappa \neq 0$ — к дифрагированным волнам. Поскольку величина κ не ограничена, то число дифрагированных волн бесконечно. Однако если $|\mathbf{k}_{\kappa\parallel}| > k$, то нормальная компонента $k_{\perp}(\kappa)$ оказывается мнимой, и соответствующие дифрагированные волны экспоненциально убывают при удалении от плоскости. На достаточно большом расстоянии ими можно пренебречь, поэтому число дифрагированных волн оказывается конечным. Распространяются в пространстве только те волны, которым соответствуют $k_{\perp}^2(\kappa) > 0$.

В дальнейшем будем формулу (3.19) записывать в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - i \sum_n \beta_n \exp(i\mathbf{k}_{n\parallel}\mathbf{r}_\parallel + ik_{n\perp}|z|), \quad (3.20)$$

где

$$\beta_n = p/k_{n\perp}, \quad p = 2\pi N_2 b_c, \quad \mathbf{k}_{n\parallel} = \mathbf{k}_\parallel + \boldsymbol{\kappa}_n, \quad k_{n\perp} = \sqrt{k^2 - \mathbf{k}_{n\parallel}^2}. \quad (3.21)$$

Таким образом, число n нумерует все векторы обратной решетки $\boldsymbol{\kappa}$.

Далее для простоты будем опускать индекс c у амплитуды b_c , но будем помнить о перенормировке и возвращаться к ней, когда это будет необходимо. Например, можно заметить, что при $k_{n\perp} = 0$ амплитуда n -й дифрагированной волны равна бесконечности, чего, конечно, не должно быть. В таком аномальном случае необходимо внимательнее отнести к перенормировке. Оказывается, что в этом случае константа перенормировки C (3.12) обращается в нуль, т. е. при $k_{n\perp} = 0$ только n -я дифрагированная волна и остается. Ее амплитуда становится равной единице, а амплитуды всех остальных волн обращаются в нуль. Этот интересный факт несколько подробнее будет обсуждаться на с. 147.

3.2 Дифракция на полубесконечном монокристалле

Волновая функция (3.20), описывающая рассеяние на кристаллической плоскости, представляет собой дискретную суперпозицию волн

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - i \sum_n \beta_n \exp(i\mathbf{k}_{n\parallel}\mathbf{r}_\parallel + ik_{n\perp}|z|) \equiv \Theta(z < 0) [\psi_0(\mathbf{r}) + \psi_r(\mathbf{r})] + \Theta(z > 0) \psi_t(\mathbf{r}), \quad (3.22)$$

которую мы разделили на две части: слева от плоскости ($z < 0$) имеются падающая и отраженные волны, описываемые функциями ψ_0 и ψ_r соответственно, а справа — прошедшие волны, представленные функцией ψ_t . Каждая из этих функций равна сумме нескольких плоских волн с различными $\boldsymbol{\kappa}$.

Введем понятие вектора состояния $|\Psi\rangle$, который определяет, какие из плоских волн, с какими $\boldsymbol{\kappa}$ и амплитудами входят в волновую функцию. Это состояние записывается в виде бесконечномерного вектора-столбца комплексных чисел. В нем определена строка с номером 0, которая соответствует волне с $\boldsymbol{\kappa} = 0$. Число α_0 на нулевой строке говорит о том, что у нас имеется волна $\alpha_0 \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ с амплитудой α_0 . Число α_j на строке j показывает, что у нас также есть волна $\alpha_j \exp(i\mathbf{k}_j\mathbf{r})$ с амплитудой α_j и волновым вектором $\mathbf{k}_{j\parallel} = \mathbf{k}_\parallel + \boldsymbol{\kappa}_j$, где $\boldsymbol{\kappa}_j$ — j -й вектор обратной решетки рассеивающей плоскости.

Состояния $|\Psi\rangle$ образуют линейное векторное пространство, в котором можно определить базис. В качестве базиса возьмем векторы $|j\rangle$ — бесконечные столбцы, содержащие единицу на строке j и нули на всех остальных. Разложив состояние $|\Psi\rangle$ по этому базису, получим $|\Psi\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle$. Таким образом, числа α_j представляют собой координаты вектора $|\Psi\rangle$ в базисе $|j\rangle$.

Теперь волновую функцию (3.22) можно представить в виде

$$|\psi(\mathbf{r})\rangle = \Theta(z < 0) \left[\exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r}) + \exp(i\hat{\mathbf{k}}_r\mathbf{r}) \hat{\rho}_s \right] |\Psi_0\rangle + \Theta(z > 0) \exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r}) \hat{\tau}_s |\Psi_0\rangle, \quad (3.23)$$

где введены операторы отражения $\hat{\rho}_s$ и пропускания $\hat{\tau}_s$ единственной кристаллической плоскостью, а также операторы $\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r}$ и $\hat{\mathbf{k}}_r\mathbf{r}$, которые имеют собственные значения $\mathbf{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_\parallel + k_{j\perp}z$ и $\mathbf{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_\parallel - k_{j\perp}z$ соответственно, и собственные векторы $|j\rangle$. При этом

$$\exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r})|j\rangle = \exp(i\mathbf{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_\parallel + ik_{j\perp}z)|j\rangle, \quad \exp(i\hat{\mathbf{k}}_r\mathbf{r})|j\rangle = \exp(i\mathbf{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_\parallel - ik_{j\perp}z)|j\rangle.$$

Вектор состояния $|\Psi_0\rangle = |\kappa = 0\rangle \equiv |0\rangle$ соответствует падающей волне $\exp(i\hat{k}\mathbf{r})|\Psi_0\rangle = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})|0\rangle$.

Базис, используемый для определения векторов состояния, можно использовать также для записи матриц. Пусть дана матрица \hat{M} с матричными элементами M_{ij} , которые переводят вектор $|j\rangle$ в вектор $|i\rangle$. Матрицу \hat{M} удобно записывать в виде

$$\hat{M} = \sum_{i,j} |i\rangle M_{ij} \langle j|,$$

и тогда в силу ортонормированности базиса $|i\rangle$ ее матричные элементы равны

$$\langle l|\hat{M}|n\rangle = M_{ln}.$$

Матричные элементы матриц $\hat{\rho}_s$ и $\hat{\tau}_s$ равны соответственно

$$\langle j|\hat{\rho}_s|i\rangle = -i\beta_j, \quad \langle j|\hat{\tau}_s|i\rangle = \delta_{ji} - i\beta_j, \quad (3.24)$$

где δ_{ji} — символ Кронекера, равный единице при $i = j$ и нулю при $i \neq j$, а $\beta_j = 2\pi N_2 b / k_{j\perp}$.

Заметим, что матричный элемент $\hat{\rho}_s$ не зависит от начального индекса, а матрицу $\hat{\tau}_s$ можно представить как $\hat{I} + \hat{\rho}_s$, где \hat{I} — единичная матрица.

Рассмотрим полубесконечный одноатомный кристалл с кубической ячейкой, одна из осей которой перпендикулярна входной поверхности. Такой кристалл представляет собой совокупность кристаллических плоскостей, разделенных пустым промежутком ширины a . Выберем в нем период так же, как в случае потенциала Кроннига–Пенни (см. рис. 1.16, б). Этот период состоит из кристаллической плоскости и двух пустых промежутков ширины $a/2$ по обе стороны от него.

Матрицы амплитуд отражения $\hat{\rho}$ и пропускания $\hat{\tau}$ для одного периода связаны с матрицами $\hat{\rho}_s$, $\hat{\tau}_s$ для одной-единственной кристаллической плоскости очевидными соотношениями

$$\hat{\rho} = \hat{E}\hat{\rho}_s\hat{E}, \quad \hat{\tau} = \hat{E}\hat{\tau}_s\hat{E} = \hat{E}^2 + \hat{\rho},$$

где введена диагональная матрица \hat{E} с матричными элементами $E_{ji} = \langle j|\hat{E}|i\rangle = \delta_{ji}e_j$, $e_j = \exp(ik_{j\perp}a/2)$, которые описывают распространение волн по пустому промежутку ширины $a/2$.

Заметим, что дифракция на последующих периодах кристалла не порождает волн, которые не входят в множество волн, порожденных первым периодом. Именно поэтому дифракция на кристалле может рассматриваться как дифракция частицы с многомерным спином на одномерном потенциале, т. е. аналогично дифракции спиновой частицы на одномерной периодической магнитной системе.

С помощью $\hat{\rho}$, $\hat{\tau}$ можно найти матрицу отражения \hat{R} от полубесконечного кристалла так же, как это делается в случае одномерного потенциала.

Обозначим состояние падающей волны у первого периода через $|\Psi_0\rangle$, тогда состоянием отраженной будет $\hat{R}|\Psi_0\rangle$. Обозначим состояние волны, падающей на второй период, через $\hat{X}|\Psi_0\rangle$, где $\hat{X} = \exp(i\hat{q}a)$ — матрица блоховских фаз, которая выражается через матрицу блоховского волнового вектора \hat{q} внутри кристалла.

Матрица амплитуд отражения \hat{R} от всего полубесконечного кристалла и матрица блоховских фаз \hat{X} определяются из системы уравнений

$$\hat{X} = \hat{\tau} + \hat{\rho}\hat{R}\hat{X}, \quad \hat{R} = \hat{\rho} + \hat{\tau}\hat{R}\hat{X}. \quad (3.25)$$

Первое уравнение (3.25) можно разрешить относительно \hat{X} :

$$\hat{X} = (\hat{I} - \hat{\rho}\hat{R})^{-1}\hat{\tau}. \quad (3.26)$$

Подставив (3.26) в (3.25), получим уравнение для $\hat{\mathbf{R}}$:

$$\hat{\mathbf{R}} = \hat{\rho} + \hat{\tau} \hat{\mathbf{R}} (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\rho} \hat{\mathbf{R}})^{-1} \hat{\tau}. \quad (3.27)$$

Мы получили уравнение, которое приводится к квадратному уравнению вида $Z^2 + BZ + ZC + D = 0$ для матрицы Z при заданных матрицах B , C и D , которые, вообще говоря, не коммутируют друг с другом. Решить такое уравнение в общем виде не удается. Наш случай, однако, обладает особенностями, которые помогают находить нужные решения.

Одной из особенностей является вид матрицы $\hat{\rho}$. Ее матричные элементы представляются в виде

$$\rho_{ji} = \langle j | \hat{\rho} | i \rangle = a_j b_i, \quad a_j = -ie_j \beta_j, \quad b_i = e_i. \quad (3.28)$$

Матрицы $\hat{\mathbf{M}}$ с матричными элементами $M_{ij} = p_i q_j$, равными прямому произведению координат p_i , q_j двух векторов $|p\rangle$ и $|q\rangle$, называются диадными, и сейчас мы рассмотрим их свойства.

3.2.1 Немного математики. Свойства диадных матриц

Пусть $\hat{\mathbf{A}}$ — диадная матрица, т. е. $\hat{\mathbf{A}} = |\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{N}|$ с некоторыми векторами $|\mathbf{K}\rangle$ и $|\mathbf{N}\rangle$, имеющими координаты K_j , N_j . Тогда справедливы следующие соотношения.

1. Для произвольной матрицы $\hat{\mathbf{B}}$ произведение $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}$ — тоже диадная матрица:

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = |\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{B}^r|, \quad \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} = |\mathbf{B}^l\rangle\langle\mathbf{N}|, \quad \mathbf{B}_n^r = \sum_m N_m B_{mn}, \quad \mathbf{B}_n^l = \sum_m B_{nm} K_m. \quad (3.29)$$

2. Для произвольной матрицы $\hat{\mathbf{B}}$ выполняется равенство

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} = c_{AB}\hat{\mathbf{A}}, \quad c_{AB} = \text{Sp } \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = \langle\mathbf{N}|\hat{\mathbf{B}}|\mathbf{K}\rangle = \sum_{m,n} N_m B_{mn} K_n. \quad (3.30)$$

3. Действие матрицы A на произвольный вектор $|\mathbf{q}\rangle = \sum_n Q_n |n\rangle$, где Q_n — компоненты вектора, порождает вектор

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{q}\rangle = c_{Nq}|\mathbf{K}\rangle = c_{Nq} \sum_n K_n |n\rangle, \quad c_{Nq} = \langle\mathbf{N}||\mathbf{q}\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} N_n Q_n. \quad (3.31)$$

Таким образом, диадная матрица $\hat{\mathbf{A}}$ пропорциональна проекционному оператору, поскольку любой вектор она проектирует на направление, указываемое вектором $|\mathbf{K}\rangle$.

4. Квадрат матрицы $\hat{\mathbf{A}}$ равен

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = |\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{N}||\mathbf{K}\rangle\langle\mathbf{N}| = c_A \hat{\mathbf{A}}, \quad c_A = \text{Sp } \hat{\mathbf{A}} = \langle\mathbf{N}||\mathbf{K}\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} K_m N_m. \quad (3.32)$$

5. Если $\hat{\mathbf{I}}$ — единичная матрица, то

$$(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{A}})^{-1} = \hat{\mathbf{I}} + C_A \hat{\mathbf{A}}, \quad (3.33)$$

где $C_A = 1/(1 - c_A)$, $c_A = \langle\mathbf{N}||\mathbf{K}\rangle$. Действительно,

$$(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{A}})^{-1}(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{A}}) = (\hat{\mathbf{I}} + C_A \hat{\mathbf{A}})(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{A}}) = \hat{\mathbf{I}} - (1 - C_A + c_A C_A) \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{I}} \Rightarrow C_A(1 - c_A) = 1.$$

3.2.2 Собственные векторы и собственные значения оператора \hat{X}

Для того чтобы понять, какие волны распространяются внутри кристалла, нам нужно найти собственные значения и собственные вектора матрицы \hat{X} . Допустим, мы найдем и то и другое. Какой мы будем обладать информацией о волнах внутри среды и о волнах, выходящих из кристалла?

Собственными значениями оператора \hat{X} являются комплексные числа $\exp(iqa)$ с различными q . Собственный вектор, соответствующий числу q , обозначим $|\mathbf{q}\rangle$. Его можно нормировать и разложить по базису $|j\rangle$:

$$|\mathbf{q}\rangle = \sum_j Q_j(q) |j\rangle, \quad (3.34)$$

где $Q_j(q)$ — координаты вектора $|\mathbf{q}\rangle$ в базисе $|j\rangle$.

Нормированные собственные векторы $|\mathbf{q}\rangle$ могут и сами служить базисом. Если на кристалл падает волна в состоянии $\exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r})|\Psi_0\rangle$ и отраженной волной можно пренебречь, то в точке $z = 0$ начала первого периода ее можно разложить по базису $|\mathbf{q}\rangle$:

$$\exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r}_\parallel)|\Psi_0\rangle = \exp(i\hat{\mathbf{k}}_\parallel\mathbf{r}_\parallel) \sum_q \psi_q |\mathbf{q}\rangle, \quad (3.35)$$

где ψ_q — координаты вектора $|\Psi_0\rangle$ в базисе $|\mathbf{q}\rangle$. При этом волновое поле $|\psi_{\text{ins}}(\mathbf{r})\rangle$ внутри кристалла оказывается равным

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{ins}}(z)\rangle &= \exp(i\hat{\mathbf{k}}_\parallel\mathbf{r}_\parallel) \sum_q \psi_q \exp(iqz) |\mathbf{q}\rangle = \exp(i\hat{\mathbf{k}}_\parallel\mathbf{r}_\parallel) \sum_q \psi_q \exp(iqz) \sum_j Q_j(q) |j\rangle = \\ &= \sum_j \exp(i\mathbf{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_\parallel) \left(\sum_q Q_j(q) \psi_q \exp(iqz) \right) |j\rangle. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Если кристалл имеет толщину D и отражениями можно пренебречь, то, как мы увидим ниже, поле нейтронов, вышедших из кристалла, будет таким:

$$\begin{aligned} \exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r})|\Psi_t\rangle &= \sum_j \exp(i\mathbf{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_\parallel + ik_{j\perp}(z - D)) \left(\sum_q Q_j(q) \psi_q \exp(iqD) \right) |j\rangle = \\ &= \sum_j \psi_{tj} \exp(i\mathbf{k}_{j\parallel}\mathbf{r}_\parallel + ik_{zj}(z - D)) |j\rangle, \end{aligned} \quad (3.37)$$

где координаты ψ_{tj} определяют интенсивность $k_{j\perp}|\psi_{tj}|^2$ нейтронов, вышедших из кристалла с волновым вектором $\mathbf{k}_j = (\mathbf{k}_\parallel + \boldsymbol{\kappa}_{j\parallel}, k_{j\perp})$, $k_{j\perp} = \sqrt{k^2 - (\mathbf{k}_\parallel + \boldsymbol{\kappa}_{j\parallel})^2}$. Согласно (3.37), амплитуды ψ_{tj} равны

$$\psi_{tj} = \sum_q Q_j(q) \psi_q \exp(iqD). \quad (3.38)$$

Как раз для их вычисления нам нужны и собственные числа q , и собственные векторы матрицы \hat{X} , т. е. координаты $Q_j(q)$ вектора $|\mathbf{q}\rangle$ в базисе $|j\rangle$.

Для получения уравнения на собственные вектора и собственные значения воспользуемся выражением (3.26) и пренебрежем $\hat{\mathbf{R}}$ (во многих случаях это можно сделать, другие же будут рассмотрены отдельно). В результате получим

$$\hat{X} \approx \hat{\tau} = \hat{\mathbf{E}}^2 + \hat{\rho}, \quad (3.39)$$

где

$$\hat{\rho} = |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{b}| \equiv -i\hat{\mathbf{E}}\hat{\mathbf{b}}|\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}|\hat{\mathbf{E}}, \quad (3.40)$$

$|\mathbf{n}\rangle = \sum_j |j\rangle$ — вектор, все координаты которого равны единице, $\hat{\mathbf{E}}$ и $\hat{\mathbf{b}}$ — диагональные матрицы:

$$\hat{\mathbf{E}} = \sum_j |j\rangle e_j \langle j|, \quad \hat{\mathbf{b}} = \sum_j |j\rangle \beta_j \langle j|, \quad (3.41)$$

и диагональные элементы этих матриц равны

$$e_j = \exp(ik_{j\perp}a/2), \quad \beta_j = \frac{p}{k_{j\perp}}, \quad k_{j\perp} = \sqrt{k^2 - (\mathbf{k}_\parallel + \boldsymbol{\kappa}_j)^2}. \quad (3.42)$$

Уравнение для собственных векторов $|\mathbf{q}\rangle = \sum_n Q_n(q)|n\rangle$ и собственных значений λ оператора $\hat{\mathbf{X}}$ имеет вид

$$\hat{\mathbf{X}}|\mathbf{q}\rangle \equiv \hat{\mathbf{E}}^2|\mathbf{q}\rangle + \hat{\rho}|\mathbf{q}\rangle = \lambda|\mathbf{q}\rangle. \quad (3.43)$$

Поскольку $\hat{\rho}$ — диадная матрица (3.40), то, согласно (3.31), она проецирует любой вектор $|\zeta\rangle$ на вектор $|\mathbf{a}\rangle = \sum_n a_n(q)|n\rangle$, и уравнение (3.43) преобразуется к виду

$$\hat{\mathbf{E}}^2|\mathbf{q}\rangle + C_q|\mathbf{a}\rangle = \lambda|\mathbf{q}\rangle, \quad (3.44)$$

где

$$C_q = \langle \mathbf{b} || \mathbf{q} \rangle. \quad (3.45)$$

Из (3.44) следует, что

$$|\mathbf{q}\rangle = C_q \left(\lambda \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{E}}^2 \right)^{-1} |\mathbf{a}\rangle \equiv -i C_q \left(\lambda \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{E}}^2 \right)^{-1} \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{b}} |\mathbf{n}\rangle. \quad (3.46)$$

Подстановка (3.46) в (3.45) дает уравнение для λ :

$$\langle \mathbf{b} | \left(\lambda \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{E}}^2 \right)^{-1} |\mathbf{a}\rangle \equiv -i \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}}^2 \left(\lambda \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{E}}^2 \right)^{-1} \hat{\mathbf{b}} |\mathbf{n}\rangle = 1. \quad (3.47)$$

В координатах векторов $|\mathbf{a}\rangle$ и $|\mathbf{b}\rangle$ или $|\mathbf{n}\rangle$ уравнение (3.47) записывается в виде

$$\sum_n \frac{a_n b_n}{\lambda - e_n^2} \equiv \sum_n \frac{-i \beta_n e_n^2}{\lambda - e_n^2} \equiv -i \sum_n \frac{p}{k_{n\perp}} \frac{e_n^2}{\lambda - e_n^2} \equiv -2\pi i N_2 b \sum_n \frac{e_n^2}{k_{n\perp}(\lambda - e_n^2)} = 1. \quad (3.48)$$

Задача теперь состоит в том, чтобы найти все решения λ , и после этого с помощью (3.46) при произвольном параметре C_q (его можно считать нормировочной постоянной) — все собственные векторы $|\mathbf{q}\rangle$.

Случай, когда все $e_n^2 = \exp(ik_{n\perp}a)$ различны

Поскольку величины $\beta_n \equiv 2\pi N_2 b / k_{n\perp}$ малы, то левая часть уравнения (3.48) может быть равной единице только при таких λ , которые близки к одной из экспонент: $\lambda = \lambda_n \approx e_n^2$. В общем случае, когда все e_n^2 различны, каждая из величин λ_n близка к одному из e_n^2 , и уравнение (3.48) сводится к виду

$$-i \beta_n \frac{e_n^2}{\lambda_n - e_n^2} \approx 1, \quad (3.49)$$

откуда следует, что

$$\lambda_n = e_n^2 (1 - i \beta_n) = \exp(ik_{n\perp}a) (1 - i u_0 a / 2k_{n\perp}) \approx \exp(i a (k_{n\perp} - u_0 / 2k_{n\perp})), \quad (3.50)$$

или, если обозначить решения при всех различных e_n^2 через $\lambda_{n1} = \exp(i q_{n1} a)$, то $q_{n1} \approx \sqrt{k_{n\perp}^2 - u_0}$, что эквивалентно волновому вектору внутри сплошной среды с оптическим

потенциалом $u_0 = 4\pi N_0 b$. Собственный волновой вектор для собственного λ_{n1} , согласно (3.46), имеет единственную компоненту $|\mathbf{q}_n\rangle = |n\rangle$. Поэтому, если падающая волна характеризуется состоянием $|\Psi_0\rangle = |0\rangle$, то как в базисе $|q\rangle$, так и в базисе $|n\rangle$ у него будут одни и те же координаты: $\psi_n = \delta_{n,0}$. Таким образом, внутри вещества будет распространяться только одна волна с волновым вектором $q_0 = \sqrt{k_{0\perp}^2 - u_0}$.

В принципе можно найти и поправки к волновому числу q , если аппроксимировать (3.48) уравнением

$$-i\beta_n \frac{e_n^2}{\lambda - e_n^2} = 1 + i \sum_{m \neq n} \frac{\beta_m}{\lambda_{n1}^2 - e_m^2}, \quad (3.51)$$

и подставить в правую часть (3.50).

Случай двух близких e_n

Значительно интереснее случай, когда имеются два или более $k_{n\perp}$, а следовательно, и e_n , близких друг другу. Допустим, $k_{n\perp} \approx k_{m\perp}$. Тогда уравнение (3.48) приводится к виду

$$-i\beta_n \frac{e_n^2}{\lambda - e_n^2} - i\beta_m \frac{e_m^2}{\lambda - e_m^2} \approx 1, \quad (3.52)$$

поскольку всеми остальными членами в нем можно пренебречь. Обозначим решения уравнения (3.48) при двух близких экспонентах через λ_{n2}^\pm . Из (3.52) следует, что

$$\lambda_{n2}^\pm = \frac{1}{2} \left(\lambda_{n1} + \lambda_{m1} \pm \sqrt{(\lambda_{n1} - \lambda_{m1})^2 - 4e_m^2 e_n^2 \beta_m \beta_n} \right). \quad (3.53)$$

При $k_{m\perp} = k_{n\perp}$ получаем $\lambda_{n2}^+ = e_n^2$ и $\lambda_{n2}^- = e_n^2(1 - 2i\beta_n)$. Этим двум значениям соответствуют собственные нормированные векторы состояний (3.46)

$$|\mathbf{q}_{n2}^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle - |m\rangle), \quad |\mathbf{q}_{n2}^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle + |m\rangle), \quad (3.54)$$

которые схематично показаны на рис. 3.2.

Первое собственное значение соответствует $q_{n2}^+ = k_{n\perp}$. Это означает, что волна внутри кристалла не видит ядер кристалла и распространяется, словно в свободном пространстве. Действительно, внутри среды собственный вектор $|\mathbf{q}_{n2}^+\rangle$ обозначает функцию

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} + \boldsymbol{\kappa}_n)\mathbf{r}_{\parallel}} - e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} + \boldsymbol{\kappa}_m)\mathbf{r}_{\parallel}}) \exp(iq_{n2}^+ r_{\perp}), \quad (3.55)$$

которая в точках, где расположены ядра среды, обращается в нуль, поскольку $\boldsymbol{\kappa}_n \mathbf{r}_j = 2\pi N$ и $\boldsymbol{\kappa}_m \mathbf{r}_j = 2\pi M$, а N и M — целые числа.

Второе решение соответствует $q_{n2}^- \approx \sqrt{k_{n\perp}^2 - 2u_0}$, т. е. среда для этого решения имеет удвоенный оптический потенциал. Действительно, собственный вектор $|\mathbf{q}_{n2}^-\rangle$ внутри среды обозначает функцию

$$\psi_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} + \boldsymbol{\kappa}_n)\mathbf{r}_{\parallel}} + e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} + \boldsymbol{\kappa}_m)\mathbf{r}_{\parallel}}) \exp(iq_{n2}^- r_{\perp}). \quad (3.56)$$

В точках, где расположены ядра среды, экспоненты складываются в $2 \exp(i\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{r}_{\parallel})$. Это и приводит к удвоению потенциала.

Если волна, падающая на кристалл, находится в состоянии $|\Psi_0\rangle = |n\rangle$, то в базисе $|\mathbf{q}^\pm\rangle$ векторов (3.54) для нее справедливо разложение (3.35) с координатами $\psi^\pm = 1/\sqrt{2}$.

Разумеется, для определение формы дифракционных линий необходимо рассмотреть отклонение от идеально симметричного случая, т. е. ввести $\Delta k = k_{m\perp} - k_{n\perp}$ и мнимую часть амплитуды b . Это потребует элементарных алгебраических выкладок, и мы оставляем их читателю, которому форма линий понадобится в связи с обработкой конкретных экспериментов.

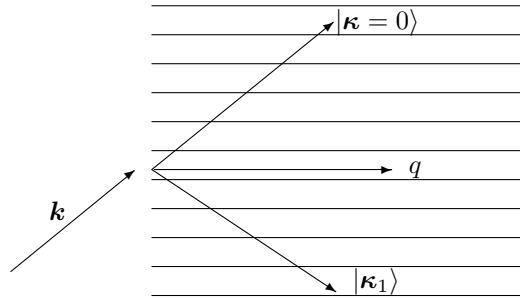


Рис. 3.2: В случае, когда две волны имеют примерно одинаковые волновые векторы $|\mathbf{k}_\parallel| \approx |\mathbf{k}_\parallel + \boldsymbol{\kappa}|$, в кристалле возникает суперпозиция состояний с этими волновыми векторами, распространяющаяся вдоль кристаллических плоскостей с единым волновым вектором Блоха \mathbf{q}

3.2.3 Решение уравнения (3.27)

Оператор $\hat{\mathbf{X}}$ определяет блоховский волновой вектор и волновое поле внутри среды. Оператор $\hat{\mathbf{R}}$ определяет волны, отраженные в вакуум. Чтобы найти $\hat{\mathbf{R}}$, подставим в уравнение (3.27) $\hat{\tau} = \hat{\mathbf{E}}^2 + \hat{\rho}$ и воспользуемся свойством диадных матриц (3.33) для преобразования $(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\rho}\hat{\mathbf{R}})^{-1}$. В результате получим

$$\hat{\mathbf{R}} = \hat{\rho} + (\hat{\mathbf{E}}^2 + \hat{\rho}) \hat{\mathbf{R}} (\hat{\mathbf{I}} + C_R \hat{\rho} \hat{\mathbf{R}}) (\hat{\mathbf{E}}^2 + \hat{\rho}) = \hat{\rho} + (\hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{R}} + C_R \hat{\rho} \hat{\mathbf{R}} + C_R \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{R}} \hat{\rho} \hat{\mathbf{R}}) (\hat{\mathbf{E}}^2 + \hat{\rho}), \quad (3.57)$$

где во втором слагаемом мы перемножили первые три сомножителя, $C_R = 1/(1 - c_R)$ и $c_R = \text{Sp } \hat{\rho} \hat{\mathbf{R}} = \langle \mathbf{b} | \hat{\mathbf{R}} | \mathbf{a} \rangle = -i \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{E}} | \mathbf{n} \rangle$. Раскроем скобки и воспользуемся правилами (3.29) и (3.30), тогда уравнение (3.57) примет вид

$$\hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2 = \frac{(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{R}}) \hat{\rho} (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2)}{1 + i \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{E}} | \mathbf{n} \rangle} \equiv -i \frac{(\hat{\mathbf{E}} + \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}) \hat{\mathbf{b}} | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | (\hat{\mathbf{E}} + \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2)}{1 + i \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{E}} | \mathbf{n} \rangle}. \quad (3.58)$$

Представим $\hat{\mathbf{R}}$ в виде

$$\hat{\mathbf{R}} = -i \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{R}}^s \hat{\mathbf{E}}. \quad (3.59)$$

Подставим его в (3.58) и разделим обе части уравнения на $-i \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{b}}$ слева и на $\hat{\mathbf{E}}$ справа. В результате приведем уравнение (3.58) к виду

$$\hat{\mathbf{R}}^s - \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{R}}^s \hat{\mathbf{E}}^2 = \frac{(\hat{\mathbf{I}} - i \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{R}}^s \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{E}}^2) | \mathbf{n} \rangle \langle \mathbf{n} | (\hat{\mathbf{I}} - i \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{R}}^s \hat{\mathbf{E}}^2)}{1 + \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{R}}^s \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{E}}^2 | \mathbf{n} \rangle}. \quad (3.60)$$

Отсюда следует, что матрица $\hat{\mathbf{R}}^s$ симметрична и ее матричные элементы $R_{ll'}^s$ удовлетворяют уравнениям

$$R_{ll'}^s (1 - e_l^2 e_{l'}^2) = \frac{(1 - ie_l^2 \sum_m R_{lm}^s \beta_m e_m^2) (1 - i \sum_m e_m^2 \beta_m R_{ml'}^s e_{l'}^2)}{1 + \sum_{i,j} e_i^2 \beta_i R_{ij}^s \beta_j e_j^2}, \quad (3.61)$$

поэтому их можно представить в виде $R_{ll'}^s = x_l x_{l'} / (1 - e_l^2 e_{l'}^2)$, где

$$x_l = \frac{1 - ie_l^2 x_l \sum_m x_m \beta_m e_m^2 / (1 - e_l^2 e_m^2)}{\sqrt{1 + \sum_{i,j} x_i \beta_i e_i^2 x_j \beta_j e_j^2 / (1 - e_i^2 e_j^2)}}. \quad (3.62)$$

Величина $\beta_l = 2\pi b N_2 / k_{l\perp} \approx b\lambda/a^2$, где λ — длина волны нейтрона, обычно мала, поэтому ею можно пренебречь всюду, за исключением тех слагаемых, у которых знаменатель $1 - e_l^2 e_m^2$ тоже мал.

Если ни один из знаменателей не мал, то можно положить все $x_l = 1$, и тогда матричные элементы матрицы отражения $\hat{\mathbf{R}} = -i\hat{\mathbf{E}}\hat{\mathbf{b}}\hat{\mathbf{R}}^s\hat{\mathbf{E}}$ равны

$$R_{ll'} = -i \frac{\beta_l e_l e_{l'}}{1 - e_l^2 e_{l'}^2}, \quad (3.63)$$

а вероятность отражения с переходом волны из состояния $|l\rangle$ в состояние $|l'\rangle$ равна

$$w_{ll'} = \frac{k_{l'\perp}}{k_{l\perp}} |R_{ll'}|^2 = \frac{k_{l'\perp}}{k_{l\perp}} \left| \frac{2\pi N_2 b}{2k_{l'\perp} \sin[(k_{l\perp} + k_{l'\perp})a/2]} \right|^2. \quad (3.64)$$

Для зеркального отражения $l = l'$ получаем

$$w_{ll} = \frac{u_0^2 a^2}{16k_{l\perp}^2 \sin^2(k_{l\perp} a)},$$

где введен оптический потенциал $u_0 = 4\pi N_0 b$, в котором $N_0 = N_2/a$ — трехмерная плотность атомов. При малых $k_{l\perp} a$ получаем стандартное выражение для зеркального отражения вдали от области полного отражения $u_0^2/16k_{l\perp}^4$. С другой стороны, при $k_{l\perp} a = \pi n$ вероятность отражения расходится, что свидетельствует о наличии полного отражения вблизи этих точек. Конечно, при этих значениях $k_{l\perp} a$ приближение $x_l = 1$ уже несправедливо, поскольку некоторые знаменатели в уравнении (3.62) оказываются малыми.

При $l' \neq l$ получаем из (3.64) выражение

$$w_{ll'} = \frac{1}{16k_{l\perp} k_{l'\perp}} \frac{u_0^2 a^2}{\sin^2[(k_{l\perp} + k_{l'\perp})a/2]}, \quad (3.65)$$

симметричное относительно перестановки $k_{l\perp}$ и $k_{l'\perp}$.

3.3 Дифракция Брэгга

Если один из знаменателей $1 - e_l^2 e_m^2$ в (3.62) мал, то возможно полное отражение, и систему уравнений нужно решать иначе.

Умножим друг на друга два уравнения с номерами l и l' из системы (3.62) и получим новую систему

$$x_l x_{l'} \left(1 + \sum_{m, m'} \frac{x_m e_m^2 \beta_m x_{m'} e_{m'}^2 \beta_{m'}}{1 - e_m^2 e_{m'}^2} \right) = \left(1 - i e_l^2 x_l \sum_m \frac{x_m e_m^2 \beta_m}{1 - e_l^2 e_m^2} \right) \left(1 - i e_{l'}^2 x_{l'} \sum_m \frac{x_m e_m^2 \beta_m}{1 - e_{l'}^2 e_m^2} \right). \quad (3.66)$$

В случае, когда одно из произведений $e_l^2 e_m^2$ близко к единице, существенными в скобках остаются только члены с произведением $x_l x_m$.

3.3.1 Зеркальное брэгговское отражение

Рассмотрим сначала простейший случай зеркального отражения, когда близко к единице произведение $e_l^2 e_m^2$ с $l = m = 0$.

В этом случае наиболее значимо произведение x_0^2 . Обозначив его через y , получим уравнение

$$y \left(1 - \frac{y r^2}{1 - e_0^4} \right) = \left(1 - \frac{e_0^2 y r}{1 - e_0^4} \right)^2, \quad (3.67)$$

где введено обозначение $r = -i e_0^2 \beta_0$. Решив это квадратное уравнение, найдем y и соответственно амплитуду зеркального отражения R :

$$R = \frac{y r}{1 - e_0^4} = \frac{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} - \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}{\sqrt{(1+r)^2 - t^2} + \sqrt{(1-r)^2 - t^2}}, \quad (3.68)$$

где $t = e_0^2 + r$. Результат полностью совпадает с (1.93), поскольку $r = -i(p/k_\perp)e_0^2$ и t — амплитуды отражения и пропускания для одного периода (1.212) потенциала Кроннинга—Пенни, вычисленные по теории возмущений. Мы нигде не пользовались теорией возмущений, но получили результат, эквивалентный ей, потому что в p из (3.21) заменили $b_c = Cb$ на b , т. е. приняли $C = 1$. Если бы мы вычислили сумму (3.11), то получили бы в нашем случае $C = 1/(1+ip/k_\perp)$, и тогда r и t были бы точными амплитудами для одного периода потенциала Кроннинга—Пенни.

Заметим, что $(1\pm r)^2 - t^2 = 1 - e_0^4 + 2i\beta_0(e_0^4 \mp e_0^2)$. Условие $e_0^4 \approx 1$ означает, что $2k_\perp a \approx 2\pi n$, где n — целое. При $n = 0$ условие $e_0^4 \approx 1$ эквивалентно $1 - e_0^4 \approx -2ik_\perp a$, и выражение (3.68) представляется в виде

$$R \equiv R_{B0} \approx \frac{k_\perp - \sqrt{k_\perp^2 - u_0}}{k_\perp + \sqrt{k_\perp^2 - u_0}}, \quad (3.69)$$

где появляется оптический потенциал $u_0 = 2p/a = 4\pi N_0 b$, в котором $N_0 = N_2/a$ — трехмерная плотность атомов. В интервале $0 \leq k_\perp^2 \leq u_0$ отражение будет полным, а при $k_\perp^2 > u_0$ амплитуда R при отсутствии потерь — вещественна и положительна. В области полного отражения R имеет вид $\exp(-2i\varphi)$, где $\varphi = \arctg \sqrt{(u_0 - k_\perp^2)/k_\perp^2}$. Таким образом, при изменении k_\perp^2 от нуля до u_0 комплексное число R в нижней полуплоскости описывает полуокружность против часовой стрелки начиная от точки $R = -1$ при $k_\perp = 0$.

Пусть теперь $n = 1$, т. е. $2k_\perp a \approx 2\pi$. Это значит, что $k_\perp \approx \pi/a$ и $e_0^2 \approx -1$. Введем брэгговское волновое число $k_{B1} = \pi/a$. Тогда $1 - e_0^4 \approx -2i(k_\perp - k_{B1})a$, и выражение (3.68) преобразуется к виду

$$R \equiv R_{B1} = \frac{\sqrt{k_\perp^2 - k_{B1}^2 - 2u_0} - \sqrt{k_\perp^2 - k_{B1}^2}}{\sqrt{k_\perp^2 - k_{B1}^2 - 2u_0} + \sqrt{k_\perp^2 - k_{B1}^2}}, \quad (3.70)$$

где мы воспользовались приближенным равенством $2k_\perp(k_\perp - k_{B1}) \approx k_\perp^2 - k_{B1}^2$. Из полученного выражения следует, что отражение будет полным в интервале $k_{B1}^2 < k_\perp^2 < k_{B1}^2 + 2u_0$. Интервал $2u_0$ называется шириной «столика» Дарвина, поскольку именно Дарвин заметил, что отражение является полным не в точке, как это следовало из теории возмущений, а на конечном интервале энергий.

При $k_\perp^2 < k_{B1}^2$ амплитуда отражения равна

$$R_{B1} = \frac{\sqrt{k_{B1}^2 + 2u_0 - k_\perp^2} - \sqrt{k_{B1}^2 - k_\perp^2}}{\sqrt{k_{B1}^2 + 2u_0 - k_\perp^2} + \sqrt{k_{B1}^2 - k_\perp^2}}, \quad (3.71)$$

и видно, что она представляет собой положительное вещественное число. При $k_\perp^2 > k_{B1}^2 + 2u_0$, она, согласно (3.70), представляет собой отрицательное вещественное число. В области полного отражения ее нужно представлять в виде

$$R_{B1} = -\frac{\sqrt{k_\perp^2 - k_{B1}^2} - i\sqrt{k_{B1}^2 + 2u_0 - k_\perp^2}}{\sqrt{k_\perp^2 - k_{B1}^2} + i\sqrt{k_{B1}^2 + 2u_0 - k_\perp^2}}. \quad (3.72)$$

При этом R оказывается единичным комплексным числом, которое при увеличении k_\perp описывает полуокружность против часовой стрелки в верхней полуплоскости. Выбор знака мнимой части, вообще говоря, кажется произвольным. Обоснование для такого выбора будет получено позже при исследовании блоховского волнового числа q . Из физических соображений ясно, что при полном отражении волна должна экспоненциально затухать в направлении внутрь кристалла. Это возможно только если мнимая часть q положительна.

Пусть теперь $n = 2$. Условие $e_0^4 \approx 1$ в этом случае означает, что и $e_0^2 \approx 1$. Введем брэгговское волновое число $k_{B2} = 2\pi/a$. Условие $e_0^2 \approx 1$ означает, что $1 - e_0^4 \approx -2i(k_\perp - k_{B2})a$.

Подстановка в (3.68) преобразует амплитуду отражения к виду

$$R \equiv R_{B2} = \frac{\sqrt{k_\perp^2 - k_{B2}^2} - \sqrt{k_\perp^2 - k_{B2}^2 - 2u_0}}{\sqrt{k_\perp^2 - k_{B2}^2} + \sqrt{k_\perp^2 - k_{B2}^2 - 2u_0}}, \quad (3.73)$$

где мы воспользовались приближенным равенством $2k_\perp(k_\perp - k_{B2}) \approx k_\perp^2 - k_{B2}^2$. Из полученного выражения следует, что при $k_\perp^2 < k_{B2}^2$ амплитуда отражения вещественна и отрицательна и в интервале $k_{B2}^2 < k_\perp^2 < k_{B2}^2 + 2u_0$ представляет собой единичное комплексное число

$$R_{B2} = \frac{\sqrt{k_\perp^2 - k_{B2}^2} - i\sqrt{k_{B2}^2 + 2u_0 - k_\perp^2}}{\sqrt{k_\perp^2 - k_{B2}^2} + i\sqrt{k_{B2}^2 + 2u_0 - k_\perp^2}}, \quad (3.74)$$

которое описывает полуокружность в нижней полуплоскости против часовой стрелки, а при $k_\perp^2 > k_{B2}^2 + 2u_0$ амплитуда R вещественна и положительна.

Случай $n = 1$ и $n = 2$ обобщаются на произвольные целые n . Брэгговское отражение будет полным во всех интервалах $k_B^2 < k_\perp^2 < k_B^2 + 2u_0$, где $k_B = n\pi/a$, и амплитуда отражения представляется единичным комплексным числом

$$R_B = (-1)^n \frac{\sqrt{k_\perp^2 - k_B^2} - i\sqrt{k_B^2 + 2u_0 - k_\perp^2}}{\sqrt{k_\perp^2 - k_B^2} + i\sqrt{k_B^2 + 2u_0 - k_\perp^2}}. \quad (3.75)$$

Между соседними брэгговскими волновыми числами $n^2(\pi/a)^2 + 2u_0 < k_\perp^2 < (n+1)^2(\pi/a)^2$ амплитуда отражения R вещественна и положительна при четных n и отрицательна при нечетных n , а в области полного отражения представляется единичным комплексным числом, описывающим полуокружность против часовой стрелки в верхней полуплоскости для нечетных n и в нижней — для четных.

Впрочем, если вспомнить, что мы выбрали период кристалла состоящим из кристаллической плоскости и двух пустых промежутков шириной $a/2$, то наш кристалл содержит перед собой пустой промежуток ширины $a/2$. Поэтому, если мы удалим этот промежуток, и будем «начинать» кристалл прямо с кристаллической плоскости, то получим матрицу отражения $\hat{\mathbf{R}}' = \hat{\mathbf{E}}^{-2}\hat{\mathbf{R}}$ и вместо (3.75) — амплитуду

$$R'_B = (-1)^n \exp(-ik_\perp a) \frac{\sqrt{k_\perp^2 - k_B^2} - i\sqrt{k_B^2 + 2u_0 - k_\perp^2}}{\sqrt{k_\perp^2 - k_B^2} + i\sqrt{k_B^2 + 2u_0 - k_\perp^2}}. \quad (3.76)$$

Множитель $\exp(-ik_\perp a)$ в промежутке $n^2(\pi/a)^2 < k_\perp^2 < (n+1)^2(\pi/a)^2$ поворачивает фазу амплитуды R'_B на угол π против часовой стрелки, и потому амплитуда R'_B перед началом брэгговского отражения всегда оказывается равной -1 , на столике Дарвина описывает полуокружность против часовой стрелки, почти достигая значения $+1$, после чего, перед следующим брэгговским отражением, вновь возвращается к значению -1 .

Блоховский вектор при зеркальном брэгговском отражении

Вблизи брэгговских отражений матрицей $\hat{\mathbf{R}}$ в операторе $\hat{\mathbf{X}}$ (3.26) пренебрегать нельзя. Воспользуемся свойствами (3.29)–(3.33) для преобразования обратной матрицы $(\hat{\mathbf{I}} - \hat{\rho}\hat{\mathbf{R}})^{-1}$ и приведем $\hat{\mathbf{X}}$ к виду

$$\hat{\mathbf{X}} = (\hat{\mathbf{I}} + C_R \hat{\rho} \hat{\mathbf{R}})(\hat{\mathbf{E}}^2 + \hat{\rho}), \quad (3.77)$$

где

$$C_R = 1/(1 - c_R), \quad c_R = \text{Sp } \hat{\rho} \hat{\mathbf{R}} = -i\langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{b}} | \mathbf{n} \rangle = -i\langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}}^2 \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{R}}^s \hat{\mathbf{b}} \hat{\mathbf{E}}^2 | \mathbf{n} \rangle. \quad (3.78)$$

Раскрывая скобки в (3.77) и воспользовавшись правилами (3.29) и (3.30), получим

$$\hat{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{E}}^2 + \hat{\rho} + C_R c_R \hat{\rho} + C_R \hat{\rho} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2 = \hat{\mathbf{E}}^2 + C_R \hat{\rho} (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2). \quad (3.79)$$

Уравнение для собственных векторов $|\mathbf{q}\rangle = \sum_n Q_n(q)|n\rangle$ и собственных значений λ оператора $\hat{\mathbf{X}}$ теперь имеют следующий вид:

$$\hat{\mathbf{X}}|\mathbf{q}\rangle \equiv \hat{\mathbf{E}}^2|\mathbf{q}\rangle + C_R \hat{\rho} (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2) |\mathbf{q}\rangle = \lambda |\mathbf{q}\rangle. \quad (3.80)$$

Поскольку $\hat{\rho}$ — диадная матрица (3.28), то, согласно (3.31), она проецирует любой вектор $|\zeta\rangle$ на вектор $|\mathbf{a}\rangle = -i\hat{\mathbf{E}}\hat{\mathbf{b}}|\mathbf{n}\rangle = -i\sum_n e_n \beta_n |n\rangle$, и уравнение (3.80) приводится к виду, тождественному (3.43):

$$\hat{\mathbf{E}}^2|\mathbf{q}\rangle + C_q |\mathbf{a}\rangle = \lambda |\mathbf{q}\rangle, \quad (3.81)$$

где

$$C_q = C_R \langle \mathbf{b} | (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2) |\mathbf{q}\rangle = C_R \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}} (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2) |\mathbf{q}\rangle. \quad (3.82)$$

Из (3.81) следует, что

$$|\mathbf{q}\rangle = C_q (\lambda \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{E}}^2)^{-1} |\mathbf{a}\rangle = -i C_q (\lambda \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{E}}^2)^{-1} \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{b}} |\mathbf{n}\rangle. \quad (3.83)$$

Подстановка (3.83) в (3.82) приводит к уравнению для λ

$$C_R \langle \mathbf{b} | (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2) (\lambda \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{E}}^2)^{-1} |\mathbf{a}\rangle \equiv -i \frac{\langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}} (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}}^2) (\lambda \hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{E}}^2)^{-1} \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{b}} |\mathbf{n}\rangle}{1 + i \langle \mathbf{n} | \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{E}} \hat{\mathbf{b}} |\mathbf{n}\rangle} = 1, \quad (3.84)$$

которое несколько отличается от (3.47). При зеркальном брэгговском отражении это уравнение приводится к виду

$$\frac{r(1 + Re_0^2)}{(1 - rR)(\lambda - e_0^2)} = 1, \quad (3.85)$$

где $r = -ie_0^2 \beta_0$. Отсюда следует, что

$$\lambda \equiv \exp(iqa) = \frac{e_0^2 + r}{1 - rR} \approx e_0^2 (1 - i\beta_0(1 + Re_0^2)). \quad (3.86)$$

В области полного отражения вблизи значения $k_\perp \approx k_{B1}$ множитель e_0^2 в скобках (при R) можно заменить на -1 . Подставив для R выражение (3.72), получим

$$\exp(iqa) \approx e_0^2 \left(1 - i \frac{k_\perp^2 - k_{B1}^2}{2k_\perp} a - \frac{\sqrt{(k_\perp^2 - k_{B1}^2)(k_{B1}^2 + 2u_0 - k_\perp^2)}}{2k_\perp} a \right). \quad (3.87)$$

Поскольку $k_\perp^2 - k_{B1}^2 \approx (k_\perp - k_{B1})2k_\perp$, имеем

$$q = k_{B1} + i \frac{\sqrt{(k_\perp^2 - k_{B1}^2)(k_{B1}^2 + 2u_0 - k_\perp^2)}}{2k_\perp} \quad (3.88)$$

и видим, что правильно выбрали знак мнимой части в (3.72), потому что блоховский волновой вектор получился, как и нужно, с положительной мнимой частью.

В области полного отражения вблизи $k_\perp \approx k_{B2}$ множитель e_0^2 в скобках при R в (3.86) можно заменить на $+1$. Подставив для R выражение (3.73), получим

$$\exp(iqa) \approx e_0^2 \left(1 - i \frac{k_\perp^2 - k_{B2}^2}{2k_\perp} a - \frac{\sqrt{(k_\perp^2 - k_{B2}^2)(k_{B2}^2 + 2u_0 - k_\perp^2)}}{2k_\perp} a \right). \quad (3.89)$$

Поскольку $k_{\perp}^2 - k_{B2}^2 \approx (k_{\perp} - k_{B2})2k_{\perp}$, имеем

$$q = k_{B2} + i \frac{\sqrt{(k_{\perp}^2 - k_{B2}^2)(k_{B2}^2 + 2u_0 - k_{\perp}^2)}}{2k_{\perp}} \quad (3.90)$$

и снова получаем блоховский волновой вектор с положительной мнимой частью.

Теперь мы готовы сделать обобщение на произвольные брэгговские волновые числа k_B . В области полного отражения вблизи любого брэгговского числа $k_B = \pi n/a$ с целым n волновое число Блоха равно

$$q \approx k_B + i \frac{\sqrt{(k_{\perp}^2 - k_B^2)(k_B^2 + 2u_0 - k_{\perp}^2)}}{2k_B} \approx \sqrt{k_B^2 + \sqrt{(k_{\perp}^2 - k_B^2)(k_{\perp}^2 - k_B^2 - 2u_0)}}, \quad (3.91)$$

когда $k_{\perp}^2 > k_B^2$, и

$$q \approx \sqrt{k_B^2 - \sqrt{(k_B^2 - k_{\perp}^2)(k_B^2 + 2u_0 - k_{\perp}^2)}}, \quad (3.92)$$

когда $k_{\perp}^2 < k_B^2$. Вдали от брэгговского отражения, когда $|k_{\perp}^2 - k_B^2| \gg u_0$, получаем $q = \sqrt{k_{\perp}^2 - u_0}$, что вполне согласуется со случаем, рассмотренным в разделе (3.2.2).

Отметим одно важное обстоятельство. Волновое число Блоха при наличии у него мнимой части не может в отсутствие потерь иметь действительную часть, отличную от k_B , так как иначе на границе раздела возникает поток внутрь вещества, который с удалением от границы раздела экспоненциально затухает, а значит, частицы внутри вещества беспричинно пропадают. Поток внутрь вещества означал бы нарушение унитарности или закона сохранения энергии.

3.3.2 Незеркальное брэгговское отражение

Рассмотрим теперь случай, когда близко к единице произведение $e_l^2 e_0^2$ при некотором $l \neq 0$. Тогда, обозначив $x_l x_0 = y$, $a_i b_j = r_{ij}$, получим из (3.66) вместо (3.67) уравнение

$$y \left(1 - 2y r_{0l} r_{l0} / (1 - e_0^2 e_l^2) \right) = \left(1 - e_0^2 y r_{ll} / (1 - e_0^2 e_l^2) \right) \left(1 - e_l^2 y r_{00} / (1 - e_0^2 e_l^2) \right). \quad (3.93)$$

Оно приводится к виду

$$y^2 \frac{r_{0l} r_{l0}}{(1 - e_0^2 e_l^2)^2} \left[1 + (1 - e_0^2 e_l^2) \right] - y \left(1 + \frac{e_0^2 r_{ll} + e_l^2 r_{00}}{1 - e_0^2 e_l^2} \right) + 1 = 0. \quad (3.94)$$

Величиной $1 - e_0^2 e_l^2$ в скобках у коэффициента при y^2 можно пренебречь. При этом уравнение (3.94) упрощается:

$$y^2 \frac{r_{0l} r_{l0}}{(1 - e_0^2 e_l^2)^2} - y \left(1 + \frac{e_0^2 r_{ll} + e_l^2 r_{00}}{1 - e_0^2 e_l^2} \right) + 1 = 0, \quad (3.95)$$

и его решение представляется в виде

$$y = \frac{1 - e_0^2 e_l^2}{\sqrt{r_{0l} r_{l0}}} \frac{\sqrt{(1 + \sqrt{r_{0l} r_{l0}})^2 - t_{00} t_{ll}} - \sqrt{(1 - \sqrt{r_{0l} r_{l0}})^2 - t_{00} t_{ll}}}{\sqrt{(1 + \sqrt{r_{0l} r_{l0}})^2 - t_{00} t_{ll}} + \sqrt{(1 - \sqrt{r_{0l} r_{l0}})^2 - t_{00} t_{ll}}}, \quad (3.96)$$

где $t_{jj} = e_j^2 + r_{jj}$. Отсюда следует, что амплитуда брэгговского отражения волны с $\boldsymbol{\kappa} = 0$ в волну с $\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\kappa}_l$ равна

$$R_{l0} = \sqrt{\frac{k_{0\perp}}{k_{l\perp}}} \frac{\sqrt{(1 + \sqrt{r_{0l} r_{l0}})^2 - t_{00} t_{ll}} - \sqrt{(1 - \sqrt{r_{0l} r_{l0}})^2 - t_{00} t_{ll}}}{\sqrt{(1 + \sqrt{r_{0l} r_{l0}})^2 - t_{00} t_{ll}} + \sqrt{(1 - \sqrt{r_{0l} r_{l0}})^2 - t_{00} t_{ll}}}, \quad (3.97)$$

а коэффициент отражения определяется по формуле

$$W_{l0} = \frac{k_{l\perp}}{k_{0\perp}} |R_{l0}|^2 = \left| \frac{\sqrt{(1 + \sqrt{r_{0l}r_{l0}})^2 - t_{00}t_{ll}} - \sqrt{(1 - \sqrt{r_{0l}r_{l0}})^2 - t_{00}t_{ll}}}{\sqrt{(1 + \sqrt{r_{0l}r_{l0}})^2 - t_{00}t_{ll}} + \sqrt{(1 - \sqrt{r_{0l}r_{l0}})^2 - t_{00}t_{ll}}} \right|^2, \quad (3.98)$$

где множитель $k_{l\perp}/k_{0\perp}$ характеризует отношение потоков.

Поскольку $(1 \pm \sqrt{r_{0l}r_{l0}})^2 - t_{00}t_{ll} = 1 - e_0^2e_l^2 \mp 2ie_0e_l\sqrt{\beta_0\beta_l} + ie_0^2e_l^2(\beta_0 + \beta_l)$, выражение (3.97) вблизи $e_0^2e_l^2 \approx 1$ можно представить в виде

$$\begin{aligned} R_{l0} \approx (-1)^l \sqrt{\frac{k_{0\perp}}{k_{l\perp}}} \times \\ \times \frac{\sqrt{k_{0\perp} + k_{l\perp} - 2k_B - \frac{u_0}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{k_{0\perp}}} - \frac{1}{\sqrt{k_{l\perp}}} \right)^2} - i\sqrt{2k_B - k_{0\perp} - k_{l\perp} + \frac{u_0}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{k_{0\perp}}} + \frac{1}{\sqrt{k_{l\perp}}} \right)^2}}{\sqrt{k_{0\perp} + k_{l\perp} - 2k_B - \frac{u_0}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{k_{0\perp}}} - \frac{1}{\sqrt{k_{l\perp}}} \right)^2} + i\sqrt{2k_B - k_{0\perp} - k_{l\perp} + \frac{u_0}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{k_{0\perp}}} + \frac{1}{\sqrt{k_{l\perp}}} \right)^2}}. \end{aligned} \quad (3.99)$$

При $l = 0$ оно совпадает с (3.75). Теперь нетрудно найти и волновое число Блоха, которое мы здесь не выписываем ввиду его громоздкости.

3.3.3 Дифракция на кристалле конечной толщины

Зная $\hat{\mathbf{X}}$ и $\hat{\mathbf{R}}$, можно перейти к исследованию дифракции на кристалле конечной толщины, т. е. на кристалле, содержащем N кристаллических плоскостей. Для этого выделим в полубесконечном кристалле первые N плоскостей и обозначим отражение от них $\hat{\mathbf{R}}_N$ а пропускание $\hat{\mathbf{T}}_N$. Если вектор состояния волновой функции, падающей на первый период, равен $|\Psi_0\rangle$, то вектор амплитуд волновой функции, падающей на $N+1$ -й период, будет $\hat{\mathbf{X}}_N|\Psi_0\rangle$, где $\hat{\mathbf{X}}_N = \hat{\mathbf{X}}^N$ — блоховская матрица фаз.

Систему уравнений (3.25) теперь можно заменить следующей:

$$\hat{\mathbf{X}}_N = \hat{\mathbf{T}}_N + \hat{\mathbf{R}}_N \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N, \quad \hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{R}}_N + \hat{\mathbf{T}}_N \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N. \quad (3.100)$$

В этой системе $\hat{\mathbf{R}}$ и $\hat{\mathbf{X}}$ уже известны, и, чтобы найти отражение и пропускание от конечного числа кристаллических плоскостей, нужно разрешить систему относительно $\hat{\mathbf{R}}_N$ и $\hat{\mathbf{T}}_N$. Подстановка $\hat{\mathbf{R}}_N = \hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{T}}_N \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N$ в первое уравнение дает

$$\hat{\mathbf{T}}_N = (\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{R}}^2) \hat{\mathbf{X}}_N [\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N]^{-1}, \quad (3.101)$$

а подстановка $\hat{\mathbf{T}}_N = \hat{\mathbf{X}}_N - \hat{\mathbf{R}}_N \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N$ во второе уравнение приводит к

$$\hat{\mathbf{R}}_N = [\hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{X}}_N \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N] [\hat{\mathbf{I}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{X}}_N]^{-1}. \quad (3.102)$$

При зеркальной дифракции Брэгга мы имеем фактически скалярный одномерный результат, поскольку самым существенным является единственный матричный элемент $(R_N)_{00}$. Подставив в (3.102) выражения (3.75) и (3.91), получим в области полного отражения

$$\begin{aligned} (R_N)_{00} &= R_{00} \frac{1 - \exp(2iqD)}{1 - R_{00}^2 \exp(2iqD)} = \\ &= \frac{u \operatorname{sh}(q''D)}{(k_\perp^2 - k_B^2 - u) \operatorname{sh}(q''D) + i\sqrt{(k_\perp^2 - k_B^2)(k_B^2 - k_\perp^2 + 2u)} \operatorname{ch}(q''D)}, \end{aligned} \quad (3.103)$$

где, согласно (3.90), $q'' = \sqrt{(k_\perp^2 - k_B^2)(k_B^2 - k_\perp^2 + 2u)/2k_\perp}$ и $D = Na$. Если обозначить

$$y = (k_B^2 - k_\perp^2 + u)/u, \quad A = uD/2k_\perp, \quad (3.104)$$

то вероятность отражения $W = |(R_N)_{00}|^2$ в области полного отражения $y^2 < 1$, записывается в виде

$$W(y) = \frac{\operatorname{sh}^2(A\sqrt{1-y^2})}{1-y^2+\operatorname{sh}^2(A\sqrt{1-y^2})} = \frac{1}{y^2+(1-y^2)\operatorname{cth}^2(A\sqrt{1-y^2})}. \quad (3.105)$$

Это выражение понадобится нам в дальнейшем при сопоставлении с результатами стандартной теории динамической дифракции.

Угловая ширина отражения идеального кристалла. Запишем $k_\perp = k \cos \vartheta$ и в качестве брэгговского угла отражения примем угол ϑ_B , при котором $k_\perp^2 = k^2 \cos^2 \vartheta_B = k_B^2 + u$, т. е. k_\perp^2 находится в середине столика Дарвина. Переменную y можно представить как

$$y = \frac{k_B^2 + u - k^2 \cos^2(\vartheta_B + \delta\vartheta)}{u} \approx k^2 \sin 2\vartheta_B \frac{\delta\vartheta}{u}. \quad (3.106)$$

Точное выполнение условия Брэгга соответствует $\delta\vartheta = 0$ и $y = 0$. Полное отражение имеет место в диапазоне $-1 \leq y \leq 1$, поэтому угловая ширина брэгговского отражения при заданной энергии k^2 падающих нейтронов равна

$$\Delta\vartheta = \frac{2u}{k^2 \sin 2\vartheta_B}. \quad (3.107)$$

Легко оценить, что при $\hbar^2 u / 2m = 10^{-7}$ эВ и $\hbar^2 k^2 / 2m = 2.5 \cdot 10^{-2}$ эВ полная угловая ширина брэгговского пика $\Delta\vartheta$ составляет величину порядка $8 \cdot 10^{-6}$ радиан, или примерно 1.65 угловой секунды.

3.3.4 Полное отражение мозаичного кристалла

Интенсивность нейтронов, отраженных по Брэггу, пропорциональна угловой ширине брэгговского пика. Если угловая ширина коллимации падающего монохроматического пучка равна χ , то интенсивность пучка, отраженного от толстого идеального кристалла ($A \gg 1$ в (3.105)), составляет $\Delta\vartheta/\chi$ от падающего. Реальные кристаллы отражают значительно больше. Это объясняется тем, что реальный кристалл далек от идеального и представляет собой мозаику, составленную из малых идеальных блоков, угловой разброс ориентации которых значительно больше $\Delta\vartheta$.

Для оценки отражения мозаичного кристалла рассмотрим отражение от одного блока, считая его толщину l столь малой, что A в (3.105) значительно меньше единицы. Тогда полное отражение одним блоком равно

$$R(l) = \int W(y) d(\delta\vartheta) = \int W(y) \frac{d(\delta\vartheta)}{dy} dy \approx \pi A \frac{u}{k^2 \sin 2\vartheta_B} \approx \frac{\pi u^2 l}{2k^3 \cos \vartheta \sin 2\vartheta_B} = \frac{|N_0 b|^2 \lambda^3 l}{\cos \vartheta \sin 2\vartheta_B}. \quad (3.108)$$

Принято записывать его в виде $Ql / \cos \vartheta$ и тем самым определять коэффициент Q , называемый коэффициентом вторичной экстинкции.

Коэффициенты экстинкции

Коэффициент экстинкции характеризует скорость ослабления пучка нейтронов по мере углубления внутрь вещества. Коэффициентом первичной экстинкции при брэгговском

отражении называется $2q''$ — удвоенная величина минимой части волнового вектора Блоха (3.90), поскольку именно она определяет глубину затухания $l_0 = 1/2q''$ квадрата модуля волновой функции при удалении от границы раздела вглубь кристалла. Глубину затухания, согласно (3.90), можно оценить величиной

$$l_0 \approx \frac{k}{u} = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{k^2}{u}.$$

В случае тепловых нейтронов $l_0 \approx 7$ мкм.

Вторичная экстинкция определяет ослабление пучка вследствие отражения отдельными блоками. Если у нас есть N одинаковых блоков с ориентацией внутри угловой ширины $\Delta\vartheta$, но случайно расположенных по глубине кристалла, то интенсивность отраженная каждым следующим блоком будет меньше интенсивности отражения предыдущим, потому что, во-первых, до него доходит меньшее количество нейтронов первичного пучка и, во-вторых, интенсивность отраженных им нейтронов понижается обратным отражением от предыдущих блоков.

Некогерентное отражение от N одинаковых блоков

Для оценки отражения мозаичным кристаллом, вычислим отражение от группы из N одинаковых блоков, каждый из которых представляет собой идеальный кристалл (бесконечно протяженную пластину) толщины l , и расстояние между пластинами — случайная величина, так что никакой интерференции между волнами, отраженными разными пластинами, нет.

Для вычисления некогерентного отражения от такой системы поступим так же, как при расчете отражения от одномерного потенциала. Найдем сначала отражение R от бесконечного числа блоков, полагая отражение и пропускание одним блоком равными ρ и $\tau = 1 - \rho$. Будем считать интенсивность, падающую на первый блок, равной единице и обозначим интенсивность, падающую на второй блок, через X . Для R и X запишем систему уравнений

$$R = \rho + \tau RX, \quad X = \tau + \rho RX. \quad (3.109)$$

Однако, если теперь решать эту систему уравнений, то получим тривиальный результат: $R = X = 1$, что само по себе физически понятно: бесконечная система блоков, разумеется, отражает все. Нам же нужно вычислить отражение от конечного числа N блоков, и это снова можно сделать по уже разработанной схеме: $R_N = R(1 - X^{2N})/(1 - R^2 X^{2N})$. Но теперь результат оказывается неопределенным, поскольку при $X = R = 1$ получается неопределенное отношение $0/0$.

Для того чтобы разрешить эту неопределенность, можно поступить следующим образом. Введем поглощение одним блоком. Поглощение существует в действительности, и его нужно учитывать при исследовании отражения одним идеальным блоком, но здесь речь пойдет об искусственном приеме. Будем считать, что $\tau = 1 - \rho - \alpha$, где α — бесконечно малая величина. При этом R и X будут уже отличаться от единицы:

$$R \approx \frac{\sqrt{4\rho} - \sqrt{2(1-\rho)\alpha}}{\sqrt{4\rho} + \sqrt{2(1-\rho)\alpha}}, \quad X \approx \frac{\sqrt{4(1-\rho)} - \sqrt{2\rho\alpha}}{\sqrt{4(1-\rho)} + \sqrt{2\rho\alpha}}. \quad (3.110)$$

Теперь, чтобы разрешить неопределенность $0/0$ в R_N , достаточно продифференцировать числитель $1 - X^{2N}$ и знаменатель $1 - R^2 X^{2N}$ по $\sqrt{\alpha}$ и принять $\alpha = 0$. В результате получим

$$R_N = \frac{N\rho}{1 + N\rho}. \quad (3.111)$$

Учтем теперь, что отражение от одного блока равно $Ql/\cos\vartheta$. Полное число блоков в кристалле толщины L равно $N_L = L/l$. Если часть этих блоков $N(\vartheta) = N_L W(\vartheta)$ ориентированы в интервале ширины брэгговского пика $\Delta\vartheta$ и функция $W(\vartheta)$ характеризует плотность вероятности найти блоки с данной ориентацией, то вероятность отражения этой системой блоков равна [77]

$$R_N(\vartheta) = \frac{QLW(\vartheta)/\cos\vartheta}{1 + QLW(\vartheta)/\cos\vartheta}, \quad (3.112)$$

и полный коэффициент отражения от мозаичного кристалла толщины L равен интегралу

$$R_L = \int_{-\chi}^{\chi} d\vartheta R_N(\vartheta) = \int_{-\chi}^{\chi} d\vartheta \frac{QLW(\vartheta)/\cos\vartheta}{1 + QLW(\vartheta)/\cos\vartheta}, \quad (3.113)$$

где χ — угловой разброс падающего пучка. Если $QL \geq 1$, величина R_L может оказаться значительно больше чем $\Delta\vartheta/\chi$.

Однако дальше здесь все оказывается во власти случая. И распределение $W(\vartheta)$, и мозаичность (угловая ширина функции $W(\vartheta)$) — феноменологические величины. Для их описания составляются модели с некоторым числом параметров, и параметры определяются путем подгонки результатов модельных расчетов к экспериментальным данным.

3.4 Дифракция Лауэ

При дифракции Лауэ нейтроны проходят сквозь кристалл. Это значит, что отражением можно пренебречь, т. е. можно положить $\hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{R}}_N = 0$. Пропускание кристалла в этом случае целиком определяется $\hat{\mathbf{X}}_N$:

$$\hat{\mathbf{T}}_N = \hat{\mathbf{X}}_N. \quad (3.114)$$

Волновая функция прошедших нейтронов равна

$$\exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r})|\psi_t\rangle = \Theta(z > D) \exp\left(i\hat{\mathbf{k}}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + i\hat{\mathbf{k}}_{\perp}(z - D)\right) \hat{\mathbf{X}}^N |\Psi_0\rangle. \quad (3.115)$$

Зная собственные векторы $|\mathbf{q}_n\rangle$ матрицы $\hat{\mathbf{X}}$, получаем явный вид волновой функции прошедшего нейтрона

$$\exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r})|\psi_t\rangle = \exp(i\hat{\mathbf{k}}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + i\hat{\mathbf{k}}_{\perp}(z - D)) \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{iq_n D} |\mathbf{q}_n\rangle \langle \mathbf{q}_n| |\Psi_0\rangle \quad (3.116)$$

и, используя представление (3.46) для $|\mathbf{q}_n\rangle$, приходим к выражению

$$\exp(i\hat{\mathbf{k}}\mathbf{r})|\psi_t\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp(i\mathbf{k}_{m\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + ik_{m\perp}(z - D)) \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{iq_n D} C_n \frac{-i\beta_m}{\lambda_n - e_m^2} |m\rangle \langle \mathbf{q}_n| |\Psi_0\rangle, \quad (3.117)$$

где C_n — нормировочная постоянная собственного вектора $|\mathbf{q}_n\rangle$. Из (3.117) видно, что основной вклад в волновую функцию дают те слагаемые в сумме по m , у которых мал знаменатель, а значит, $\lambda_n \approx e_m^2$.

В случае, когда все e_m^2 различны, а $|\Psi_0\rangle = |0\rangle \equiv |\kappa = 0\rangle$, основной вклад в волновую функцию из двойной суммы вносит один член с $n = 0$:

$$|\psi(\mathbf{r})\rangle = \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} + ik_{0\perp}(z - D)) \exp(iq_0 D) |0\rangle, \quad (3.118)$$

где $q_0 = \sqrt{k_{0\perp}^2 - u_0}$.

При дифракции Лауэ несколько $k_{n\perp}$ и соответственно e_n имеют близкие значения. Чаще всего встречается случай, когда близки два значения, которые мы обозначим k_0 и k_1 . Пусть $k_1 = k_0 + \delta k$, тогда $e_1^2 = e_0^2(1 + i\varepsilon)$ где $\varepsilon = \delta k a$. Для нахождения собственных значений λ воспользуемся системой уравнений (3.52) и найдем ее решения (3.53). Рассмотрим случай строгого выполнения условия дифракции Лауэ $k_1 = k_0$. При этом собственные значения $q_1 = k_0$ и $q_2 = \sqrt{k_0^2 - 2u_0}$. Собственные векторы указаны в (3.54), и полная волновая функция прошедших нейтронов состоит из двух волн:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}e^{ik_0\parallel\mathbf{r}\parallel+ik_0\perp(z-D)}(e^{iq_1D} + e^{iq_2D}) + \frac{1}{2}e^{ik_1\parallel\mathbf{r}\parallel+ik_1\perp(z-D)}(e^{iq_1D} - e^{iq_2D}). \quad (3.119)$$

Одна из них, с волновым вектором \mathbf{k}_0 , распространяется в направлении падающей (будем называть ее прямой), а другая, с \mathbf{k}_1 , является дифрагированной. Интенсивность прямой волны $I_1 = \cos^2(\delta q D/2)$, а интенсивность дифрагированной $I_2 = \sin^2(\delta q D/2)$, где $\delta q = q_1 - q_2$. При изменении D или k_0 полная интенсивность прошедших нейтронов осциллирует между двумя направлениями маятникообразно. Это явление получило немецкое название Pendellösung, т. е. маятниковое решение.

При наличии поглощения на атомах кристалла потенциал u_0 содержит мнимую часть, поэтому q_2 тоже содержит мнимую часть, и величина $\exp(iq_2D)$ экспоненциально уменьшается с ростом D . В этом случае при достаточно больших толщинах в волновой функции (3.119) можно пренебречь $\exp(iq_2D)$, и осцилляции с ростом D прекращаются.

Поскольку q_1 не содержит потенциала, то, несмотря на поглощение, половина интенсивности проходит через кристалл без затухания. Эта способность волн проходить через поглощающий кристалл при дифракции Лауэ называется аномальным пропусканием и в рентгеновской оптике носит название эффекта Бормана, а в нейtronной оптике — эффекта Кагана–Афанасьева.

Аномальное пропускание объясняется тем, что при дифракции внутри кристалла возникает состояние $|\mathbf{q}_1\rangle$, у которого суммарная амплитуда на ядрах решетки обращается в нуль, т. е. такое состояние распространяется, не замечая ядер кристалла, и потому не поглощается.

Одновременное выполнение условия Брэгга и Лауэ

Брэгговская дифракция характеризуется полным отражением, которое в зеркальном случае возникает, когда выполняется условие $k_{n\perp} = k_B = \pi n/a$, или $e_n^4 = 1$. Дифракция Лауэ возникает тогда, когда для некоторых векторов обратной решетки $\boldsymbol{\kappa}_m$ и $\boldsymbol{\kappa}_n$ имеет место приближенное равенство $k_{m\perp} \approx k_{n\perp}$, или $e_m^2 \approx e_n^2$. Вполне можно представить себе случай, когда $e_m^2 = e_n^2$ и одновременно $e_m^4 = 1$. При этом должна наблюдаться дифракция Брэгга, т. е. отражение от кристалла, и дифракция Лауэ, т. е. расщепление падающей волны на две и прохождение двух волн через кристалл. Возникает вопрос: что же будет на самом деле? Будут ли нейтроны отражаться по Брэггу или проходить через кристалл по Лауэ?

Ответ достаточно прост. Мы знаем, что при дифракции Лауэ внутри кристалла возникают две пары волн. Одна пара интерферирует так, что на узлах решетки волны гасят друг друга, а в другой паре они друг друга усиливают. Первая пара проходит через кристалл, не замечая его, и потому даже при выполнении условия Брэгга она пройдет через него и создаст прямую и дифрагированную волны после кристалла. Вторая пара волн при выполнении условия Брэгга будет отражаться от кристалла, причем прямая волна выйдет в качестве зеркально отраженной, а дифрагированная выйдет незеркально отраженной. В случае симметричных условий незеркально отраженная волна будет распространяться точно назад по отношению к первичной падающей. Все это легко показать математически [76], и мы оставляем это читателю в качестве упражнения.

Еще более интересный вопрос возникает при незеркальном брэгговском отражении. Вполне можно представить, что имеются два состояния m и n , такие, что $e_m^2 e_n^2 = 1$, и од-

новременно — третье состояние l с $e_l^2 = e_n^2$. Что мы при этом будем наблюдать? Будут ли нейтроны полностью отражаться или они будут расщепляться и проходить через кристалл? Это хорошая исходная точка для читателя, желающего начать собственные исследования.

3.5 Стандартное описание дифракции в кристалле

I hate diffraction... always have, always will.
Anonymous¹

В стандартном подходе взаимодействие нейтрона с кристаллом описывается периодическим потенциалом, который представляется в виде ряда Фурье

$$u(\mathbf{r}) = \sum_{\boldsymbol{\kappa}} v(\boldsymbol{\kappa}) \exp(i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}), \quad (3.120)$$

где $\boldsymbol{\kappa}$ — вектор обратной решетки, а коэффициенты разложения $v(\boldsymbol{\kappa})$ и $v(-\boldsymbol{\kappa})$ в силу вещественности потенциала (мы не учитываем сейчас потерю, обусловливающую мнимую добавку к потенциальному) комплексно сопряжены друг с другом: $v(-\boldsymbol{\kappa}) = v^*(\boldsymbol{\kappa})$. Компонента $v(0)$ представляет собой усредненный потенциал, совпадающий с оптическим потенциалом среды u_0 .

Для описания дифракции решается уравнение Шредингера с потенциалом (3.120)

$$\left(\Delta + k^2 - \sum_{\boldsymbol{\kappa}} v(\boldsymbol{\kappa}) \exp(i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.121)$$

и с заданной падающей плоской волной $\exp(i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r})$.

3.5.1 Псевдопотенциал Ферми

Сначала нам желательно понять, что из себя представляют Фурье-компоненты потенциала $v(\boldsymbol{\kappa})$. Запишем полный потенциал кристалла в виде суммы псевдопотенциалов Ферми $4\pi b\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ для взаимодействия нейтрона с ядром, расположенным в точке \mathbf{r}' . Псевдопотенциал Ферми хорош тем, что амплитуда рассеяния b получается из него в первом порядке теории возмущений.

Псевдопотенциал Ферми всего кристалла равен

$$v(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_n \sum_{j=0}^m b_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{nj}), \quad (3.122)$$

где координаты \mathbf{r}_{nj} атомов в кристалле представляются в виде суммы $\mathbf{r}_{nj} = \mathbf{r}_n + \boldsymbol{\xi}_j$, в которой индекс n означает номер элементарной ячейки, а j — номер атома внутри элементарной ячейки. Примем для простоты элементарную ячейку кубической, со стороной a , тогда $\mathbf{r}_n = \mathbf{n}a$, где \mathbf{n} — вектор с целочисленными координатами.

Воспользуемся правилом преобразования сумм (3.13) и преобразуем потенциал (3.122) к виду

$$v(\mathbf{r}) = 4\pi \sum_N \int d^3 n \exp(2\pi i \mathbf{N} \mathbf{n}) \sum_{j=0}^m b_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{nj}) = 4\pi \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \int \frac{d^3 r'}{a^3} \exp(i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}') \sum_{j=0}^m b_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \boldsymbol{\xi}_j), \quad (3.123)$$

¹ Терпеть не могу дифракцию... Всегда испытывал и буду испытывать отвращение к ней. Аноним (англ.). (Из лекции Р. Голуба.)

где \mathbf{N} — вектор с целочисленными координатами и во втором равенстве введены векторы обратной решетки $\boldsymbol{\kappa} = 2\pi\mathbf{N}/a$. Интегрирование по \mathbf{r}' элементарно, и получаем выражение (3.120), где

$$v(\boldsymbol{\kappa}) = 4\pi N_c F(\boldsymbol{\kappa}), \quad (3.124)$$

$N_c = 1/a^3$ — число элементарных ячеек в единице объема и структурный фактор решетки

$$F(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{j=0}^m b_j \exp(i\boldsymbol{\kappa}\xi_j). \quad (3.125)$$

3.5.2 Кинематическая теория дифракции

Решение уравнения (3.121) в некоторых случаях можно искать по теории возмущений. Такая теория дифракции называется кинематической. При этом амплитуда рассеяния с переданным импульсом $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ представима в виде

$$f(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi} \int_V d^3 r \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \exp(i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{r}) v(\boldsymbol{\kappa}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) = \frac{(2\pi)^3}{4\pi} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} v(\boldsymbol{\kappa}) \delta(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{q}), \quad (3.126)$$

где V — объем кристалла, который считается достаточно большим, чтобы интеграл по нему можно было считать δ -функцией, и достаточно малым, чтобы окончательная вероятность рассеяния (3.128) была мала, т. е. применение теории возмущений было правомерным.

По амплитуде рассеяния (3.126) находим дифференциальное сечение рассеяния

$$\sigma'(\mathbf{s}) = |f(\mathbf{q})|^2 = \sum_{\boldsymbol{\kappa}} |v(\boldsymbol{\kappa})|^2 \left[\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \delta(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{q}) \right]^2 = \sum_{\boldsymbol{\kappa}} |v(\boldsymbol{\kappa})|^2 V \frac{(2\pi)^3}{(4\pi)^2} \delta(\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{q}), \quad (3.127)$$

где в последнем равенстве одна из δ -функций заменена на $V/(2\pi)^3$. Умножив полученное выражение на число конечных состояний $d^3 k' V/(2\pi)^3$ и проинтегрировав по $d^3 k'$ около направления $\boldsymbol{\kappa}$, получим полное сечение рассеяния в этом направлении

$$\sigma(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k} - \boldsymbol{\kappa}) = \frac{V^2}{(4\pi)^2} |v(\boldsymbol{\kappa})|^2 = (VN_0)^2 |F(\boldsymbol{\kappa})|^2 = N^2 |F(\boldsymbol{\kappa})|^2, \quad (3.128)$$

где мы учли, что $v(\boldsymbol{\kappa}) = 4\pi N_c F(\boldsymbol{\kappa})$, N_c — число элементарных ячеек в единице объема, и $N = N_c V$ — полное число элементарных ячеек в кристалле.

Кинематическая теория дифракции показывает, что рассеяние на кристалле сопровождается передачей нейтронному импульсу вектора обратной решетки. По этой теории амплитуда рассеяния содержит бесконечно узкие пики с высотой, пропорциональной квадрату числа атомов в кристалле. Ясно, что такая теория слишком примитивна. Она позволяет связать дифракционные пики со структурой кристалла, но не может описать ширины пики и становится неприменимой для больших объемов V .

3.6 Стандартная динамическая теория дифракции

Представим кристалл в виде бесконечного перпендикулярного оси z кристаллического слоя толщины D . Взаимодействие нейтрона с этим слоем описывается трехмерным периодическим потенциалом (3.120). Волновая функция внутри периодического потенциала непериодична. Однако непериодичность ее задается лишь блоховским волновым вектором. Это означает, что волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ внутри кристалла представима в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}), \quad (3.129)$$

где \mathbf{q} — блоховский волновой вектор, а $\phi(\mathbf{r})$ — периодическая функция, которая, как и потенциал (3.120), записывается в виде ряда Фурье:

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\kappa} \Phi(\kappa) \exp(i\kappa r). \quad (3.130)$$

Из сопоставления (3.129) и (3.130) видно, что компоненты \mathbf{q}_{\parallel} , параллельные поверхности кристалла, можно принять равными \mathbf{k}_{\parallel} , поскольку \mathbf{q}_{\parallel} в силу непрерывности волны на границе и дискретности кристаллических плоскостей может отличаться от \mathbf{k}_{\parallel} только на вектор обратной решетки κ_{\parallel} кристаллических плоскостей, но κ_{\parallel} можно перенести в сумму (3.130).

Для того чтобы найти коэффициенты $\Phi(\kappa)$, подставим волновую функцию в уравнение Шредингера и с учетом разложения (3.130) получим

$$\exp(iqr) \sum_{\kappa} \left([(\mathbf{q} + \kappa)^2 - k^2] \Phi(\kappa) + \sum_{\kappa'} v(\kappa') \Phi(\kappa - \kappa') \right) \exp(i\kappa r) = 0. \quad (3.131)$$

Это уравнение эквивалентно бесконечной системе уравнений для $\Phi(\kappa)$

$$[(\mathbf{q} + \kappa)^2 - k^2] \Phi(\kappa) + \sum_{\kappa'} v(\kappa') \Phi(\kappa - \kappa') = 0. \quad (3.132)$$

Система однородна, и потому имеет ненулевое решение только тогда, когда детерминант ее коэффициентов обращается в нуль. Приравнивая нулю бесконечномерный детерминант, получаем уравнение бесконечной степени для блоховских векторов \mathbf{q} , а поскольку $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel}$, то уравнение определяет только нормальную компоненту q_{\perp} .

Уравнение имеет бесконечное множество решений $q_{n\perp}$, и, после того как мы их найдем, можно все коэффициенты однородной системы $\Phi(\kappa)$ выразить через один из них, например $\Phi(0)$, а потом воспользоваться граничными условиями непрерывности функции и ее производной, чтобы найти все волны в пустом пространстве, порожденные дифракцией в кристалле. Разумеется, целиком эта программа невыполнима, и приходится прибегать к тем или иным приближениям.

Одноволновое приближение

Перепишем систему уравнений (3.132) в виде

$$[(\mathbf{q} + \kappa)^2 - k^2 + u] \Phi(\kappa) + \sum_{\kappa' \neq \kappa} \Phi(\kappa - \kappa') v(\kappa') = 0, \quad (3.133)$$

где $u = v(0)$. Потенциал взаимодействия обычно очень мал, поэтому малы и коэффициенты $v(\kappa)$. Если внутри кристалла имеется единственная волна с большой амплитудой $\Phi(\kappa)$, то для того, чтобы она удовлетворяла системе (3.133), должен быть равен нулю коэффициент при $\Phi(\kappa)$, т. е.

$$(\mathbf{q} + \kappa)^2 - k^2 + u = 0. \quad (3.134)$$

Этим уравнением определяется \mathbf{q} . Сам коэффициент $\Phi(\kappa)$ определяется сшивкой с падающей плоской волной на поверхности кристалла. В дальнейшем будем считать, что эта поверхность совпадает с координатной плоскостью $z = 0$. Падающая плоская волна $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$ при отсутствии дифракции порождает в кристалле единственную волну $\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$ с $\kappa = 0$. Поскольку, как было указано выше, $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel}$, уравнение (3.134) записывается в виде

$$q_{\perp}^2 - k_{\perp}^2 + u = 0, \quad (3.135)$$

откуда следует, что $q_{\perp}^2 = k_{\perp}^2 - u$, т. е. волновой вектор внутри кристалла имеет тот же вид, что и внутри сплошной среды, а коэффициент $\Phi(\kappa = 0)$, когда отражением можно пренебречь, совпадает с амплитудой падающей волны, т. е. в нашем случае $\Phi(\kappa = 0) = 1$.

Двухволновое приближение

Если внутри кристалла возникают две волны с достаточно большой амплитудой, скажем, волна $\Phi(0) = \Phi(\boldsymbol{\kappa} = 0)$, и $\Phi(\boldsymbol{\kappa})$ с некоторым не равным нулю $\boldsymbol{\kappa}$, то бесконечная система уравнений сводится к системе двух уравнений

$$[q_\perp^2 - k_\perp^2 + u]\Phi(0) + \Phi(\boldsymbol{\kappa})v(-\boldsymbol{\kappa}) = 0, \quad [(q_\perp + \kappa_\perp)^2 - k_{\kappa\perp}^2 + u]\Phi(\boldsymbol{\kappa}) + \Phi(0)v(\boldsymbol{\kappa}) = 0, \quad (3.136)$$

где $k_{\kappa\perp}^2 = k^2 - (\mathbf{k}_\parallel + \boldsymbol{\kappa}_\parallel)^2$. Эта система имеет решение, если равен нулю детерминант:

$$[q_\perp^2 - k_\perp^2 + u][(q_\perp + \kappa_\perp)^2 - k_{\kappa\perp}^2 + u] - v(\boldsymbol{\kappa})v(-\boldsymbol{\kappa}) = 0. \quad (3.137)$$

Это алгебраическое уравнение четвертой степени имеет четыре решения, но в стандартной теории, как мы увидим ниже, отбираются только два из них, которые будут обозначаться $q_{1,2\perp}$.

Допустим, что мы нашли эти решения. Покажем, как дальше решается задача, — сначала в общем случае двух волн, а потом в двух частных случаях: зеркальной дифракции Брэгга и симметричной дифракции Лауэ.

Общий случай. Из уравнений (3.136) находим связь между $\Phi(0)$ и $\Phi(\boldsymbol{\kappa})$:

$$\Phi(\boldsymbol{\kappa}) = -\frac{q_\perp^2 - k_\perp^2 + u}{v(-\boldsymbol{\kappa})}\Phi(0),$$

которая для разных $q_{1,2\perp}$ превращается в два соотношения между $\Phi^{(1,2)}(0)$ и $\Phi^{(1,2)}(\boldsymbol{\kappa})$:

$$\Phi^{(1,2)}(\boldsymbol{\kappa}) = -\frac{q_{1,2\perp}^2 - k_\perp^2 + u}{v(-\boldsymbol{\kappa})}\Phi^{(1,2)}(0). \quad (3.138)$$

Эти соотношения еще не определяют $\Phi^{(1,2)}(\boldsymbol{\kappa})$, поскольку нам неизвестны $\Phi^{(1,2)}(0)$. Для определения $\Phi^{(1,2)}(0)$ нужно учесть граничные условия. Первое граничное условие связывает падающую волну с $\Phi^{(1,2)}(0)$. Если амплитуду падающей волны принять равной единице, то первое граничное условие записывается в виде

$$\Phi^{(1)}(0) + \Phi^{(2)}(0) = 1. \quad (3.139)$$

Второе граничное условие зависит от того, с какой дифракцией мы имеем дело.

При дифракции Брэгга, когда дифрагированные волны оказываются отраженными, требуется, чтобы дифрагированных волн не было на другой стороне кристалла, при $z = D$. Воспользуемся представлением (3.129) и (3.130) и учтем только два коэффициента. При этом мы получим два комплекта волн с двумя коэффициентами при двух разных $q_{1,2}$. В точке $z = D$ волновая функция будет равна

$$\psi(z = D) = (\Phi^{(1)}(0)e^{iq_{1\perp}D} + \Phi^{(1)}(\boldsymbol{\kappa})e^{i(q_{1\perp} + \kappa_\perp)D}) + (\Phi^{(2)}(0)e^{iq_{2\perp}D} + \Phi^{(2)}(\boldsymbol{\kappa})e^{i(q_{2\perp} + \kappa_\perp)D}). \quad (3.140)$$

Требование отсутствия дифрагированных волн в точке $z = D$ эквивалентно условию

$$e^{iq_{1\perp}D}\Phi^{(1)}(\boldsymbol{\kappa}) + e^{iq_{2\perp}D}\Phi^{(2)}(\boldsymbol{\kappa}) = 0. \quad (3.141)$$

Условия (3.139) и (3.141) с учетом (3.138) эквивалентны двум уравнениям для определения $\Phi^{(1,2)}(0)$:

$$\Phi^{(1)}(0) + \Phi^{(2)}(0) = 1, \quad e^{iq_{1\perp}D}(q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u)\Phi^{(1)}(0) + e^{iq_{2\perp}D}(q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u)\Phi^{(2)}(0) = 0. \quad (3.142)$$

Решение этой системы:

$$\Phi^{(1)}(0) = \frac{(q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u) \exp(iq_{2\perp}D)}{(q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u) \exp(iq_{2\perp}D) - (q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u) \exp(iq_{1\perp}D)}, \quad (3.143)$$

$$\Phi^{(2)}(0) = -\frac{(q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u) \exp(iq_{1\perp}D)}{(q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u) \exp(iq_{2\perp}D) - (q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u) \exp(iq_{1\perp}D)}. \quad (3.144)$$

Подставив его в (3.138), найдем $\Phi^{(1,2)}(\kappa)$, а значит, и амплитуду дифрагированной отраженной волны:

$$\Psi(\kappa) = \Phi^{(1)}(\kappa) + \Phi^{(2)}(\kappa) = -\frac{(q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u)(q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u)(\exp(iq_{2\perp}D) - \exp(iq_{1\perp}D))}{v(-\kappa)[(q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u)\exp(iq_{2\perp}D) - (q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u)\exp(iq_{1\perp}D)]}. \quad (3.145)$$

При дифракции Лаэ, когда дифрагированные волны оказываются прошедшими, мы должны потребовать, чтобы дифрагированных волн не было на входной стороне кристалла при $z = 0$. Это требование эквивалентно условию

$$\Phi^{(1)}(\kappa) + \Phi^{(2)}(\kappa) = 0. \quad (3.146)$$

Условия (3.139) и (3.146) с учетом (3.138) эквивалентны двум уравнениям для определения $\Phi^{(1,2)}(0)$:

$$\Phi^{(1)}(0) + \Phi^{(2)}(0) = 1, \quad (q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u)\Phi^{(1)}(0) + (q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u)\Phi^{(2)}(0) = 0, \quad (3.147)$$

решением которых будут коэффициенты

$$\Phi^{(1)}(0) = \frac{q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u}{q_{2\perp}^2 - q_{1\perp}^2}, \quad \Phi^{(2)}(0) = -\frac{q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u}{q_{2\perp}^2 - q_{1\perp}^2}. \quad (3.148)$$

Соответственно амплитуда прошедшей дифрагированной волны равна

$$\begin{aligned} \Psi(\kappa, D) &= \Phi^{(1)}(\kappa)e^{iq_{1\perp}D} + \Phi^{(2)}(\kappa)e^{iq_{2\perp}D} = \\ &= \frac{(q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u)(q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u)(\exp(iq_{1\perp}D) - \exp(iq_{2\perp}D))}{v(-\kappa)(q_{2\perp}^2 - q_{1\perp}^2)}, \end{aligned} \quad (3.149)$$

а амплитуда прошедшей недифрагированной волны

$$\begin{aligned} \Psi(0, D) &= \Phi^{(1)}(0)e^{iq_{1\perp}D} + \Phi^{(2)}(0)e^{iq_{2\perp}D} = \\ &= -\frac{(q_{1\perp}^2 - k_\perp^2 + u)\exp(iq_{2\perp}D) - (q_{2\perp}^2 - k_\perp^2 + u)\exp(iq_{1\perp}D)}{q_{2\perp}^2 - q_{1\perp}^2}. \end{aligned} \quad (3.150)$$

Для вывода окончательного выражения для всех интересующих нас амплитуд необходимо найти и подставить сюда $q_{1,2\perp}$.

Решение уравнения (3.137) в случае зеркальной дифракции Брэгга. В этом случае $\kappa_{||} = 0$, и уравнение (3.137) приводится к виду

$$[q_\perp^2 - k_\perp^2 + u][(q_\perp - 2k_B)^2 - k_\perp^2 + u] - v(-\kappa)v(\kappa) = 0, \quad (3.151)$$

где κ_\perp мы обозначили как $-2k_B$.

Произведем замену переменной $q_\perp = k_B + x$ и получим биквадратное уравнение

$$x^4 - 2x^2(k_\perp^2 - u + k_B^2) + (k_\perp^2 - u - k_B^2)^2 - v(-\kappa)v(\kappa) = 0, \quad (3.152)$$

имеющее четыре решения:

$$x = \pm \sqrt{k_{\perp}^2 + k_B^2 - u \pm \sqrt{4k_B^2(k_{\perp}^2 - u) + v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})}}. \quad (3.153)$$

Отсюда получаем четыре решения для q_{\perp} :

$$q_{\perp} = k_B \pm \sqrt{k_{\perp}^2 + k_B^2 - u \pm \sqrt{4k_B^2(k_{\perp}^2 - u) + v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})}}. \quad (3.154)$$

Разберемся, какие из этих решений физические, а какие нет. Для этого рассмотрим предельный случай, когда потенциал отсутствует, т. е. $u = v(-\boldsymbol{\kappa}) = v(\boldsymbol{\kappa}) = 0$. При этом мы должны естественным образом получить единственное решение $q_{\perp} = k_{\perp}$. К нему приводят решения

$$q_{\perp} = k_B + \sqrt{k_{\perp}^2 + k_B^2 - u - \sqrt{4k_B^2(k_{\perp}^2 - u) + v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})}} \quad (3.155)$$

при $k_{\perp} > k_B$ и

$$q_{\perp} = k_B - \sqrt{k_{\perp}^2 + k_B^2 - u - \sqrt{4k_B^2(k_{\perp}^2 - u) + v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})}} \quad (3.156)$$

при $k_{\perp} < k_B$.

Обратим внимание на то, что при $v(\boldsymbol{\kappa}) = 0$ решения (3.155), (3.156) для $\sqrt{k_{\perp}^2 - u} > k_B$ и соответственно $\sqrt{k_{\perp}^2 - u} < k_B$ приводят к $q_{\perp} = \sqrt{k_{\perp}^2 - u}$. Это случай так называемых запрещенных рефлексов, когда условие Брэгга $k_{\perp} \approx k_B$ выполняется, но структурный фактор $F(\boldsymbol{\kappa})$ (3.125) равен нулю. Тогда брэгговского отражения нет, а нейtron распространяется внутри вещества, как в сплошной среде.

При $k_{\perp}^2 - u \approx k_B^2$ выражения (3.155), (3.156) можно приближенно представить в виде

$$q_{\perp} = k_B \pm \Delta, \quad \Delta = \frac{\sqrt{(k_B^2 - k_{\perp}^2 + u + \sqrt{v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})})(k_B^2 - k_{\perp}^2 + u - \sqrt{v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})})}}{2k_B}, \quad (3.157)$$

т. е.

$$q_{1,2\perp} = k_B \pm \Delta \approx \sqrt{k_B^2 \pm \sqrt{(k_{\perp}^2 - k_B^2 - u_1)(k_{\perp}^2 - k_B^2 - u_2)}}, \quad (3.158)$$

где

$$u_{1,2} = u \mp \sqrt{v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})}, \quad (3.159)$$

причем знак минус в (3.158) нужно брать при $k_{\perp}^2 < k_B^2 + u_1$, а знак плюс — при $k_{\perp}^2 > k_B^2 + u_2$. В интервале $k_B^2 + u_1 < k_{\perp}^2 < k_B^2 + u_2$

$$q_{\perp} \approx \sqrt{k_B^2 + i\sqrt{(k_{\perp}^2 - k_B^2 - u_1)(k_B^2 + u_2 - k_{\perp}^2)}},$$

поскольку компонента q_{\perp} должна иметь положительную мнимую часть. В случае однотомного кристалла, когда $v(-\boldsymbol{\kappa}) = v(\boldsymbol{\kappa}) = u$, получаем $u_1 = 0$, $u_2 = 2u$, и значение q_{\perp} полностью совпадает с полученным ранее в (3.91) и оказывается единственным.

В стандартной динамической теории дифракции два значения (3.158) принимают как два независимых корня уравнения (3.151), что делает теорию трудной для понимания. Тем не менее такой шаг приводит к правильному результату.

Последуем за стандартной теорией и посмотрим, какой получится результат для одноатомного кристалла. Будем считать, что $q_{1,2\perp} = k_B \pm \Delta$, где

$$\Delta = \frac{\sqrt{(k_B^2 - k_\perp^2 + 2u)(k_B^2 - k_\perp^2)}}{2k_B}.$$

Соответственно $q_{1,2\perp}^2 - k_\perp^2 + u = \pm 2k_B\Delta + k_B^2 - k_\perp^2 + u$. Подстановка $q_{1,2\perp}$ в (3.145) дает амплитуду отраженной волны

$$\Psi(\boldsymbol{\kappa}) = -\frac{iu \sin(\Delta D)}{i(k_B^2 - k_\perp^2 + u) \sin(\Delta D) + \sqrt{(k_\perp^2 - k_B^2)(k_\perp^2 - k_B^2 - 2u)} \cos(\Delta D)}. \quad (3.160)$$

Следовательно, коэффициент зеркального брэгговского отражения равен

$$W = \frac{I(\boldsymbol{\kappa})}{I(0)} = |\Psi(\boldsymbol{\kappa})|^2 = \frac{u^2 \sin^2(\Delta D)}{(k_B^2 - k_\perp^2 + u)^2 \sin^2(\Delta D) + (k_\perp^2 - k_B^2)(k_\perp^2 - k_B^2 - 2u) \cos^2(\Delta D)}, \quad (3.161)$$

и его можно записать также в виде

$$W = \frac{u^2 \sin^2(\Delta D)}{(k_\perp^2 - k_B^2)(k_\perp^2 - k_B^2 - 2u) + u^2 \sin^2(\Delta D)}. \quad (3.162)$$

Обозначим $y = (k_\perp^2 - k_B^2 - u)/u$, $A = uD/2k_B$, тогда при $y^2 < 1$, когда имеет место полное отражение, выражение (3.162) записывается в виде

$$W = \frac{\operatorname{sh}^2(A\sqrt{1-y^2})}{1 - y^2 + \operatorname{sh}^2(A\sqrt{1-y^2})} \equiv \frac{1}{y^2 + (1-y^2)\operatorname{cth}^2(A\sqrt{1-y^2})}, \quad (3.163)$$

и, несмотря на недостаточную логичность, мы получили результат, тождественный (3.105), полученному выше. Это совпадение можно объяснить тем, что выбранные два решения уравнения (3.157) определяют волновой вектор q для распространения частицы в двух противоположных направлениях.

Симметричная дифракция Лауэ

Рассмотрим случай $\kappa_\perp = 0$. При этом уравнение (3.137) принимает вид

$$[q_\perp^2 - k_\perp^2 + u][q_\perp^2 - k_{\kappa\perp}^2 + u] - v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa}) = 0, \quad (3.164)$$

где $k_{\kappa\perp}^2 = k^2 - (\mathbf{k}_\parallel - \boldsymbol{\kappa})^2$. Обозначим $x = q_\perp^2 - \zeta_+ + u$, где $\zeta_\pm = (k_\perp^2 \pm k_{\kappa\perp}^2)/2$. Тогда (3.164) сводится к уравнению $x^2 - \zeta_-^2 - v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa}) = 0$, решения которого равны

$$x_{1,2} = \pm \sqrt{\zeta_-^2 + v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})}. \quad (3.165)$$

Отсюда следует, что

$$q_{1,2\perp} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{k_\perp^2 + k_{\kappa\perp}^2 - 2u \pm \sqrt{(k_\perp^2 - k_{\kappa\perp}^2)^2 + 4v(-\boldsymbol{\kappa})v(\boldsymbol{\kappa})}}, \quad (3.166)$$

и при точном выполнении условия Брэгга ($k_\perp = k_{\kappa\perp}$) получаем

$$q_{1,2\perp} = \sqrt{k_\perp^2 - 2u_{1,2}}, \quad (3.167)$$

где $u_{1,2}$ заданы формулой (3.159). Для одноатомного кристалла получаем, как и раньше: $q_{1\perp} = k_\perp$, $q_{2\perp} = \sqrt{k_\perp^2 - 2u}$.

Два других корня с отрицательным радикалом в (3.166) были отброшены, поскольку они соответствуют волнам, распространяющимся внутри кристалла в противоположном направлении. Эти волны нужны только в случае, если требуется учесть отражение на двух поверхностях кристалла.

Для одноатомного кристалла, подставив в (3.149), (3.150)

$$x_{1,2} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{(k_{\perp}^2 - k_{\kappa\perp}^2)^2 + 4u^2}$$

вместо $q_{1,2\perp}^2 - k_{\perp}^2 + u$ и разделив числитель и знаменатель на $2u$, получим

$$\Psi(\boldsymbol{\kappa})(D) = \exp(iq^+D) \frac{i \sin(q^-D)}{\sqrt{1 + \eta^2}}, \quad \Psi(0)(D) = \exp(iq^+D) \left(\cos(q^-D) + \frac{i\eta \sin(q^-D)}{\sqrt{1 + \eta^2}} \right), \quad (3.168)$$

где $\eta = (k_{\perp}^2 - k_{\kappa\perp}^2)/2u$, $q^{\pm} = (q_{1\perp} \pm q_{2\perp})/2$.

Внутри кристалла волновая функция состоит из четырех волн:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iq_{1\perp}z} [\Phi^{(1)}(0)e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}} + \Phi^{(1)}(\boldsymbol{\kappa})e^{i(\mathbf{k}_{\parallel}+\boldsymbol{\kappa}_{\parallel})\mathbf{r}}] + e^{iq_{2\perp}z} [\Phi^{(2)}(0)e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}} + \Phi^{(2)}(\boldsymbol{\kappa})e^{i(\mathbf{k}_{\parallel}+\boldsymbol{\kappa}_{\parallel})\mathbf{r}}], \quad (3.169)$$

где

$$\Phi^{(1)}(0) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta}{\sqrt{1 + \eta^2}} \right), \quad \Phi^{(2)}(0) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\eta}{\sqrt{1 + \eta^2}} \right), \quad (3.170)$$

$$\Phi^{(1)}(\boldsymbol{\kappa}) = -\frac{1}{2\sqrt{1 + \eta^2}}, \quad \Phi^{(2)}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2\sqrt{1 + \eta^2}}. \quad (3.171)$$

При точном выполнении условия Брэгга (т. е. при $\eta = 0$) волновая функция (3.169) записывается следующим образом:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_{\perp}z} \frac{1}{2} [e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}} - e^{i(\mathbf{k}_{\parallel}+\boldsymbol{\kappa}_{\parallel})\mathbf{r}}] + e^{iq_{2\perp}z} \frac{1}{2} [e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}} + e^{i(\mathbf{k}_{\parallel}+\boldsymbol{\kappa}_{\parallel})\mathbf{r}}]. \quad (3.172)$$

Видно, что четыре волны разбиваются на две пары. Волны первой пары гасят друг друга на ядрах решетки, и при точном выполнении условия Брэгга эта пара на ядрах обращается в нуль. Она распространяется по кристаллу с компонентой волнового вектора $q_{1\perp}$, которая при точном выполнении условия дифракции Брэгга равна k_{\perp} — нормальной компоненте волнового вектора свободного нейтрона. Это значит, что первая пара распространяется по кристаллу, не замечая его.

Волны второй пары усиливают друг друга на ядрах решетки, и при точном выполнении условия Брэгга амплитуда этой пары удваивается на ядрах. Пара распространяется по кристаллу с компонентой волнового вектора $q_{2\perp}$, которая при точном выполнении условия Брэгга равна $\sqrt{k_{\perp}^2 - 2u}$. То есть для второй пары оптический потенциал кристалла удваивается.

Обе пары волн достигают выходной поверхности кристалла и выходят наружу. В результате получаем две прошедшие волны

$$\psi(\mathbf{r}) = \Psi_0(D)e^{ik_{\perp}(z-D)} \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}) + \Psi(\boldsymbol{\kappa})(D)e^{ik_{\kappa\perp}(z-D)} \exp(i(\mathbf{k}_{\parallel} + \boldsymbol{\kappa}_{\parallel})\mathbf{r}_{\parallel}), \quad (3.173)$$

где $k_{\kappa\perp} = \sqrt{k^2 - (\mathbf{k}_{\parallel} + \boldsymbol{\kappa}_{\parallel})^2}$.

Обозначим $D_0 = 1/q^-$. Тогда интенсивности прошедших прямой и дифрагированной волн записутся соответственно как

$$I(0) = \cos^2(D/D_0) + \frac{\eta^2}{1 + \eta^2} \sin^2(D/D_0), \quad I(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{1 + \eta^2} \sin^2(D/D_0). \quad (3.174)$$

Мы видим, что они осциллируют с ростом D , причем период осцилляций и их амплитуда $1/(1 + \eta^2)$ убывают с ростом отклонения η от нулевого значения, при котором условие Брэгга выполняется точно.

Результаты, полученные по стандартной теории динамической дифракции полностью совпадают с полученными матричным методом. Более подробно стандартная теория динамической дифракции в применении к исследовательским задачам в нейтронной физике и физике рентгеновского и синхротронного излучения изложена в книгах [77–83].

3.7 Сравнение двух методов

Оба метода, как и должно быть, описывают одни и те же процессы и приводят к одинаковым результатам. Выбор того или иного метода для описания известных явлений в дифракции нейтронов на монокристаллами — дело вкуса. Достоинство метода разложения Фурье состоит в том, что он позволяет быстро найти положение и интенсивность дифракционных пиков для сколь угодно сложной элементарной ячейки. Матричным методом тоже можно исследовать кристалл со сложной ячейкой [76], но рассеяние на одном периоде лучше рассчитывать по теории возмущений. При этом матричный метод позволяет более подробно исследовать процессы дифракции и на каждом шаге контролировать точность расчетов и оценивать поправки.

Метод разложения Фурье сравнительно прост в приближении двух сильных волн и становится громоздким по мере включения все большего количества дифрагируемых волн. Матричный же метод дает один и тот же алгоритм расчета при сколь угодно большом числе дифракционных волн.

Преимущество матричного метода также в том, что он позволяет увидеть в дифракции новые явления, которые, конечно же, можно описать и с помощью теории Фурье, но изначально разглядеть довольно сложно. Примеры — явление дифракции при выполнении условий и Брэгга и Лауэ, а также дифракция при наличии запрещенных рефлексов, т. е. таких рефлексов, для которых теория Фурье предсказывает нулевую интенсивность. Строгое вычисление структурного фактора приводит к значению, отличному от нуля. Это свидетельствует о том, что рефлекс на самом деле не запрещен, а просто очень узок — на 4–5 порядков уже незапрещенной ширины [21].

Думается, матричный метод открывает путь к исследованию многих новых тонких явлений в дифракции, которые помогут лучше понять и взаимодействие нейтрона с кристаллом, и структуру волновой функции самого нейтрона.

Мы ограничились здесь только принципиальными вопросами и не обсуждали тонкостей, связанных с реальными системами, а также с экспериментом и обработкой экспериментальных данных, потому что они достаточно хорошо изложены в других книгах.

3.8 Унитарность и оптическая теорема

Выше, изучая методику исследования дифракции на монокристаллах, мы ограничились случаем простейшей решетки и опустили ряд вопросов, которые могут оказаться очень важными при попытке применить рассмотренные методы к сложным кристаллам и при использовании теории возмущений. Теория возмущений всегда содержит погрешности, которые, если их не учитывать, могут привести к ложным эффектам, например, к нарушению унитарности. Если нарушение унитарности не исправить, то из-за интерференции на многих атомных плоскостях эта погрешность может накапливаться. Здесь будут рассмотрены те принципы, которые не должны нарушаться в физических процессах. Это закон сохранения числа частиц при отсутствии потерь, эквивалентный требованию унитарности,

и закон детального равновесия, означающий, что рассеяние на любых объектах не должно приводить к уменьшению энтропии замкнутой системы. Начнем с условия унитарности.

Одним из незыблемых законов физики является закон сохранения энергии, который, в частности, утверждает, что частицы не могут бесследно исчезать или появляться из ниоткуда. Эта частная формулировка закона сохранения энергии называется условием унитарности.

Условие унитарности вытекает из уравнения Шредингера. Если волновая функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ частицы удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2} [-\Delta + u(\mathbf{r}, t)] \psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.175)$$

где $u(\mathbf{r}, t)$ — вещественный потенциал, описывающий взаимодействие с внешними объектами, то комплексно сопряженная волновая функция $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяет уравнению

$$-i \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{1}{2} [-\Delta + u(\mathbf{r}, t)] \psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (3.176)$$

Умножив (3.175) на ψ^* и (3.176) на ψ , вычтем полученные произведения друг из друга, и проинтегрируем разность по некоторому объему V пространства. В результате приедем к уравнению

$$i \frac{d}{dt} \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 r = -\frac{1}{2} \int_V [\psi^*(\mathbf{r}, t) \Delta \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \Delta \psi^*(\mathbf{r}, t)] d^3 r. \quad (3.177)$$

Подынтегральное выражение справа можно представить в виде

$$\nabla [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)],$$

после чего интеграл по объему V преобразуется в интеграл по поверхности S , окружающей этот объем, и соотношение (3.177) приобретает вид

$$i \frac{d}{dt} \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 r = -\frac{1}{2} \int_S [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)] \mathbf{n}(\mathbf{r}) d^2 r, \quad (3.178)$$

где $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ — единичный вектор внешней нормали к поверхности S в точке интегрирования \mathbf{r} .

Соотношение (3.178) показывает, что изменение вероятности пребывания частицы в объеме V целиком и полностью обусловлено утечкой частицы через поверхность, окружающую этот объем:

$$\frac{d}{dt} \int_V \mathcal{R}(\mathbf{r}, t) d^3 r = - \int_S \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \mathbf{n}(\mathbf{r}) d^2 r, \quad (3.179)$$

где $\mathcal{R}(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ — вероятность найти частицу в точке \mathbf{r} , а $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ — плотность потока:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2i} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)]. \quad (3.180)$$

Заметим, что плотность потока имеет размерность $(\hbar k/m)|\psi|^2 = v|\psi|^2$, где v — скорость нейтрона. Если волновая функция нормируема, то $|\psi|^2$ имеет размерность $1/\text{см}^3$, и плотность потока имеет разумную физическую размерность: число частиц в единицу времени через единицу поверхности. Если же волновая функция ненормируема, как это имеет место в случае плоских волн, то плотность потока имеет размерность скорости.

3.8.1 Унитарность при рассеянии на центре

Если волновая функция стационарна, то \mathcal{R} не зависит от времени, вероятность пребывания частицы в любом объеме V постоянна, и левая часть (3.179) обращается в нуль. Тогда правая часть тоже должна быть равна нулю, т. е. поток уходящих через поверхность S частиц должен равняться потоку входящих. Покажем, как, исходя из закона сохранения потока, получить информацию об амплитуде рассеяния.

Представим себе две параллельные бесконечные плоскости на пути падающей плоской волны. Одна расположена перед рассеивателем, а другая — после него, как показано на рис. 3.3.

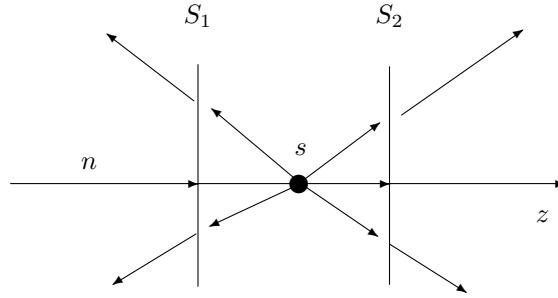


Рис. 3.3: Вывод оптической теоремы. Рассеиватель s создает плоские волны, идущие направо и налево, и мы сравниваем поток падающих нейтронов через плоскость S_1 до рассеивателя и результирующий поток через обе плоскости S_1 и S_2 после рассеяния

Вычислим поток волн через плоскость S_1 , перпендикулярную \mathbf{k} . Он состоит из потока падающей волны J_0 слева направо и потока рассеянных волн, идущих справа налево. Рассмотрим сначала поток падающей волны e^{ikz} . Поскольку плотность потока j_0 равна k , то поток через часть плоскости с площадью S равен $J_0 = kS$.

Вычислим поток рассеянных волн справа налево:

$$J_s = \int_S \frac{d^2 r_{\parallel}}{2i} [\psi_s^*(\mathbf{r}, t) \nabla_{\perp} \psi_s(\mathbf{r}, t) - \psi_s(\mathbf{r}, t) \nabla_{\perp} \psi_s^*(\mathbf{r}, t)], \quad (3.181)$$

где $\psi_s = -ib\eta(r)$ и $\nabla_{\perp} = d/dz$. Воспользуемся для сферической волны $\eta(r)$ двумерным Фурье-разложением (3.18), которое представляет сферическую функцию в виде суперпозиции плоских волн. Подставив его в (3.181), получим

$$J_s = \int_S \frac{d^2 r_{\parallel}}{2} \frac{|b|^2}{(2\pi)^2} \iint \frac{d^2 p_{\parallel} d^2 p'_{\parallel}}{p'_{\perp} p_{\perp}} e^{i(\mathbf{p}_{\parallel} - \mathbf{p}'_{\parallel}) \cdot \mathbf{r} - i(p_{\perp} - p'_{\perp})z} (p_{\perp} + p'_{\perp}) = |b|^2 \int_{p_{\perp}^2 > 0} \frac{d^2 p_{\parallel}}{p_{\perp}} = 2\pi k|b|^2, \quad (3.182)$$

где интегрирование по $d^2 r_{\parallel}$ проводится в конечных пределах, но в предположении, что S достаточно велико для того, чтобы интеграл от экспоненты можно было приравнять к δ -функции. При интегрировании по $d^2 p_{\parallel}$ учтены только волны, идущие налево, и мы пренебрегли экспоненциально затухающими волнами, поскольку они потока не создают.

Найдем теперь поток через вторую плоскость S_2 после рассеивателя, воспользовавшись тем же двумерным Фурье-разложением (3.18). Полная совокупность волн, падающих на плоскость S_2 , равна

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{ib}{2\pi} \int \frac{d^2 p_{\parallel}}{p_{\perp}} \exp(i\mathbf{p}_{\parallel} \cdot \mathbf{r} + ip_{\perp}z). \quad (3.183)$$

Поток через плоскость S_2 равен

$$J = \int_S \frac{d^2 r_{\parallel}}{2i} \left(e^{-ikz} + \frac{ib^*}{2\pi} \int \frac{d^2 p_{\parallel}}{p_{\perp}} e^{-ip_{\parallel}r - ip_{\perp}z} \right) \left(\overrightarrow{\frac{d}{dz}} - \overleftarrow{\frac{d}{dz}} \right) \left(e^{ikz} - \frac{ib}{2\pi} \int \frac{d^2 p_{\parallel}}{p_{\perp}} e^{ip_{\parallel}r + ip_{\perp}z} \right), \quad (3.184)$$

где стрелка над производной показывает, какой сомножитель нужно дифференцировать. Поток (3.184) можно представить суммой трех слагаемых $J = J_0 + J_s + J_i$. Первое слагаемое определяется падающей плоской волной и равно kS . Второе определяется рассеянными волнами, его можно вычислить, как в (3.182), и оно равно $J_s = 2\pi k|b|^2$. Третье слагаемое J_i является результатом интерференции падающей и рассеянных волн:

$$J_i = \int_S d^2 r_{\parallel} \int_{p_{\perp}^2 > 0} \frac{d^2 p_{\parallel}}{4\pi i p_{\perp}} (k + p_{\perp}) e^{ip_{\parallel}r} (be^{i(k-p_{\perp})z} - b^* e^{-i(k-p_{\perp})z}) = 4\pi \operatorname{Im} b, \quad (3.185)$$

где $\operatorname{Im} b$ — мнимая часть амплитуды b .

Условие унитарности требует, чтобы, когда частицы не гибнут и не рождаются, поток, входящий в промежуток между плоскостями S_1, S_2 , был равен потоку, выходящему из него, т. е.

$$J_0 = J_0 + 2J_s + J_i. \quad (3.186)$$

Это возможно только если $2J_s + J_i = 0$, или

$$\operatorname{Im} b = -k|b|^2 = -k \frac{\sigma_{el}}{4\pi}, \quad (3.187)$$

где $\sigma_{el} = 4\pi|b|^2$ — сечение упругого рассеяния. Заметим, что мы пренебрегли потоком, уходящим от рассеивателя между плоскостями, поскольку для точечного рассеивателя расстояние между плоскостями можно сделать сколь угодно малым, а экспоненциально затухающая часть сферической волны не дает потока наружу ни при каких расстояниях.

Связь (3.187) между мнимой частью амплитуды и сечением рассеяния называется оптической теоремой. Из нее сразу следует, что в отсутствие источников и стоков частиц амплитуда рассеяния всегда представима в виде

$$b = \frac{b_0}{1 + ikb_0}, \quad (3.188)$$

где b_0 — вещественная величина. Конечно, выражение (3.188) можно записать иначе:

$$b = \frac{b_1}{c + ikb_1}, \quad (3.189)$$

где c и b_1 — вещественные параметры. Однако, разделив числитель и знаменатель на c , мы перенормируем b_1 : $b_0 = b_1/c$ и придем к выражению (3.188).

Теперь нетрудно понять, что произойдет, если рассеивающий центр не только рассеивает, но и поглощает. Поток частиц, вылетающих из промежутка между плоскостями S_1 и S_2 , должен быть меньше потока влетающих, и выражение (3.186) должно быть записано в измененном виде

$$J_0 - (J_0 + 2J_s + J_i) = k\sigma_a, \quad (3.190)$$

где σ_a — сечение поглощения, а $k\sigma_a$ описывает часть потока, поглощенного центром. Собственно, соотношением (3.190) и определяется сечение поглощения. Подставив сюда (3.182) и (3.185), получаем формулировку оптической теоремы в виде

$$\operatorname{Im} b = -k \frac{\sigma_t}{4\pi}, \quad (3.191)$$

где σ_t — полное сечение рассеяния.

При наличии поглощения мнимую часть в знаменателе (3.188) следует видоизменить. Запишем (3.188) в виде

$$b = \frac{b_0}{1 + ikx} \quad (3.192)$$

и потребуем, чтобы

$$\frac{kxb_0}{1 + k^2x^2} = k \frac{\sigma_t}{4\pi}.$$

Тогда получим уравнение

$$k^2x^2\sigma_t + \sigma_t - 4\pi b_0x = 0,$$

из которого следует, что

$$x = \frac{2\pi b_0 - \sqrt{(2\pi b_0)^2 - k^2\sigma_t^2}}{k^2\sigma_t}. \quad (3.193)$$

Обычно $k\sigma_a \ll 2\pi b_0$, поэтому $x \approx \sigma_t/4\pi b_0$, и можно записать (3.192) в виде

$$b = \frac{b_0}{1 + ik\sigma_t/4\pi b_0}. \quad (3.194)$$

Выражение (3.191) все еще не является полной формулировкой оптической теоремы. Дело в том, что мы рассмотрели здесь частный случай изотропного рассеяния, когда амплитуда рассеяния не зависит от угла рассеяния. В самом общем случае, когда b зависит от угла рассеяния θ , оптическая теорема утверждает, что

$$\text{Im } b(\theta = 0) = -k \frac{\sigma_t}{4\pi}, \quad (3.195)$$

т. е. мнимая часть амплитуды рассеяния вперед равна $-k\sigma_t/4\pi$.

3.8.2 Унитарность в случае рассеяния на кристаллической плоскости

Посмотрим теперь, к чему приводит требование унитарности, примененное к волновой функции (3.20), описывающей рассеяние на кристаллической плоскости. В данном случае можно рассматривать только плотность потока, поскольку волновая функция представляет собой дискретную совокупность плоских волн. Поток от всех волн содержит произвольно большую площадь S , которая во всех получаемых соотношениях сокращается.

Итак, плотность потока, рассеянного в одну сторону, равна

$$J_s = (2\pi N_2)^2 |bC|^2 \sum_n^{k_{n\perp}^2 > 0} \frac{1}{k_{n\perp}}, \quad (3.196)$$

где в суммировании по n отбрасываются все слагаемые с экспоненциально затухающими волнами.

Интерференционная плотность потока через плоскость S_2 в направлении \mathbf{k}_0 равна

$$J_i = -2\pi i N_2 (bC - b^* C^*). \quad (3.197)$$

Условие унитарности $J_i + 2J_s = 0$ накладывает требование на bC :

$$\text{Im}(bC) = -\gamma |bC|^2, \quad \gamma = 2\pi N_2 \sum_n^{k_{n\perp}^2 > 0} \frac{1}{k_{n\perp}}. \quad (3.198)$$

Заметим, что, согласно (3.12), число C можно представить в виде

$$C = \frac{1}{1 + ib\alpha}, \quad (3.199)$$

где α , вообще говоря, — комплексное число: $\alpha = \alpha' - i\alpha''$. Принимая во внимание выражение (3.188) для b , справедливое в отсутствие поглощения, получаем, что

$$bC = \frac{b_0}{1 + b_0\alpha'' + ib_0(k + \alpha')} = \frac{b_1}{1 + ib_1(k + \alpha')}, \quad (3.200)$$

где $b_1 = b_0/(1 + b_0\alpha'')$ — перенормированная амплитуда рассеяния. Из (3.200) следует, что

$$\text{Im}(bC) = -(k + \alpha')|bC|^2. \quad (3.201)$$

Сравнивая с (3.198), сразу получаем

$$\alpha' = -k + \gamma = -k + 2\pi N_2 \sum_n^{\frac{k_{n\perp}^2 > 0}{}} \frac{1}{k_{n\perp}}. \quad (3.202)$$

Таким образом, умножение амплитуды b на множитель C (3.199) учитывает изменение баланса унитарности. Первое слагаемое $-k$ в (3.202) прекращает действие унитарности единственного рассеивающего центра, а второе вводит правило унитарности в новых условиях, когда имеется уже не один рассеиватель, а целая кристаллическая плоскость, содержащая бесконечное множество эквидистантных рассеивателей.

Нетрудно угадать, что комплексное число α получается из вещественного α' (3.202) распространением суммы в (3.202) на все возможные κ_n :

$$\alpha = -k + 2\pi N_2 \sum_n^{\infty} \frac{1}{k_{n\perp}}. \quad (3.203)$$

Таким образом, те из κ_n , которые приводят к распространяющимся волнам, дают вклад в действительную часть α' , а те, для которых $k_{n\perp}$ мнимое, дают вклад в мнимую часть α'' . Ряд в (3.203) расходится, однако эта расходимость фиктивна. На самом деле бесконечный ряд — это формальное представление конечной функции, так же как сумма геометрической прогрессии x^n при $x > 1$ является формальным представлением конечной функции $1/(1-x)$. Аккуратное вычисление ряда [3] показывает, что $\alpha'' \approx 1/a$.

В принципе, мы можем положить постоянную C равной единице и считать амплитуду рассеяния b действительным числом. И лишь в конце вычислений необходимо изменить b в соответствии с требованием унитарности, т. е. положить $b = b_0/(1 + ikb_0)$ в случае отдельного центра или

$$b = \frac{b_1}{1 + 2\pi i N_2 b_1 \sum_n (1/k_{n\perp})} \quad (3.204)$$

в случае дифракции на плоскости.

При малых $k \ll 2\pi/a$ все дифракционные волны экспоненциально затухают, и распространяющимися остаются только зеркально отраженная и прошедшая волны. Отраженная волна имеет амплитуду $-ip/(k_\perp + ip)$, а у прошедшей амплитуда равна $k_\perp/(k_\perp + ip)$, что хорошо согласуется с амплитудами отражения и пропускания плоскостью, описываемой δ -образным потенциалом, $u = 2p\delta(r_\perp)$, в котором $p = 2\pi N_2 b_1$.

Отметим одно замечательное явление, которое должно иметь место в соответствии с представлением (3.204). Если вектор κ_0 таков, что для одного из κ компонента $k_\perp(\kappa)$ строго равна нулю, то знаменатель для такого κ_0 бесконечно велик, и рассеяние приводит к появлению единственной плоской волны, распространяющейся вдоль кристаллической плоскости. Было бы очень интересно проверить этот вывод экспериментально.

3.8.3 Принцип детального равновесия

Теперь обратимся к принципу детального равновесия. Суть его состоит в следующем: если имеется рассеиватель, который может рассеивать неупруго, и мы поместим его в равновесный нейтронный газ, т. е. газ, в котором нейтроны распределены в пространстве однородно, по углам изотропно и по энергиям — по закону Максвелла, а сам рассеиватель находится в термодинамическом равновесии с нейтронным газом, то рассеяние нейтронов на таком рассеивателе не должно менять равновесного распределения ни нейтронов, ни самого рассеивателя. Поскольку равновесное состояние обладает максимальной энтропией, то условие детального равновесия означает, что рассеяние никогда не должно уменьшать энтропию.

Одиночный рассеиватель

Обозначим вероятность рассеяния нейтрона на неупругом рассеивателе через $w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$, тогда условие детального равновесия записывается следующим образом:

$$k\rho_0 \exp(-k^2/2T) d^3k w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') d^3k' = k'\rho_0 \exp(-k'^2/2T) d^3k' w(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}) d^3k, \quad (3.205)$$

где $\rho_0 = \text{const}$ — плотность нейтронов в фазовом пространстве, а множитель k характеризует плотность потока нейтронов, падающих на рассеиватель. Условие (3.205) означает, что число нейтронов с энергией k^2 , переходящих в единицу времени в результате рассеяния из фазового объема d^3k в фазовый объем d^3k' , должно в точности равняться числу нейтронов, переходящих в единицу времени обратно. Из (3.205) следует ограничение на форму функции вероятности рассеяния:

$$k \exp(-k^2/2T) w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = k' \exp(-k'^2/2T) w(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}). \quad (3.206)$$

Это ограничение означает, что вероятность рассеяния не может быть произвольной функцией своих аргументов, а может быть только функцией, представимой в виде

$$w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = k' \exp(-(k'^2 - k^2)/4T) w^s(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'), \quad (3.207)$$

где $w^s(x \rightarrow y)$ — функция, симметричная относительно перестановки аргументов.

Рассеивающая плоскость

Допустим, что рассеиватели расположены на бесконечной плоскости и находятся в термодинамическом равновесии между собой и с равновесным нейтронным газом по обе стороны от плоскости. Если вероятность рассеяния нейтрона из состояния \mathbf{k} в состояние \mathbf{k}' описывается функцией $w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$, то условие детального равновесия для рассеяния на плоскости запишется в виде

$$k_\perp \rho_0 \exp(-k^2/2T) d^3k w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') d^3k' = k'_\perp \rho_0 \exp(-k'^2/2T) d^3k' w(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}) d^3k, \quad (3.208)$$

где множитель k_\perp характеризует плотность потока нейтронов, падающих на плоскость. Из (3.208) следует ограничение на форму функции вероятности рассеяния:

$$k_\perp \exp(-k^2/2T) w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = k'_\perp \exp(-k'^2/2T) w(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}), \quad (3.209)$$

из которого вытекает, что

$$w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = k'_\perp \exp(-(k'^2 - k^2)/4T) w^s(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'), \quad (3.210)$$

где $w^s(x \rightarrow y)$ — функция, симметричная относительно перестановки аргументов.

В случае чисто упругого рассеяния имеем

$$w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = w(\Omega \rightarrow \Omega') \delta(k^2 - k'^2), \quad (3.211)$$

поэтому условие детального равновесия (3.208) приводится к виду

$$\cos \theta d\Omega w(\Omega \rightarrow \Omega') d\Omega' = \cos \theta' d\Omega' w(\Omega' \rightarrow \Omega) d\Omega, \quad (3.212)$$

и из него следует, что

$$w(\Omega \rightarrow \Omega') = \cos \theta' w^s(\Omega \rightarrow \Omega'), \quad (3.213)$$

где $w^s(\Omega \rightarrow \Omega')$ — функция, симметричная при перестановке $\Omega \leftrightarrow \Omega'$.

Дифракция на атомной плоскости

Проверим, как дифракция на плоскости удовлетворяет условию детального равновесия. Дифракция представляет собой упругое и дискретное рассеяние. Амплитуда рассеяния $f(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$, согласно (3.19), равна $-ip/k'_\perp$, где $p = 2\pi N_2 b_c$. Поэтому плотность потока дифрагированных нейтронов от плоскости равна

$$J(\mathbf{k}') = k'_\perp |p/k'_\perp|^2 = |p|^2/k'_\perp. \quad (3.214)$$

Вероятность дифракции $w_d(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$, при которой падающий нейtron имеет нормальную компоненту k_\perp , а дифрагированный k'_\perp , равна отношению плотности потока дифрагированных нейтронов $J(\mathbf{k}')$ к плотности потока падающих $J(\mathbf{k}) = k_\perp$:

$$w_d(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{J(\mathbf{k}')}{J(\mathbf{k})} = \frac{|p|^2}{k_\perp k'_\perp}. \quad (3.215)$$

Мы видим, что вероятность дискретного перехода симметрична по перестановке $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}'$, что, казалось бы, противоречит соотношению (3.213). Однако выражение (3.213) относится к непрерывному распределению по углам рассеянных нейтронов, поэтому, чтобы проверить выполнение условия детального равновесия, представим дискретную вероятность в непрерывном виде. Полная вероятность рассеяния, т. е. перехода во все дифрагированные волны, равна

$$w(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{|p|^2}{k_\perp k'_\perp} \equiv \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \frac{|p|^2}{k_\perp k_{\perp\boldsymbol{\kappa}}} = \frac{|p|^2}{k_\perp} \int \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \delta(\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{k}'_\parallel + \boldsymbol{\kappa}) \delta(k^2/2 - k'^2/2) d^3 k', \quad (3.216)$$

где суммирование по всем \mathbf{k}' в первом равенстве заменено на суммирование по всем векторам обратной плоской решетки во втором. Интеграл же в третьем равенстве тождественно равен $1/k_{\perp\boldsymbol{\kappa}}$.

Из непрерывного представления (3.216) следует, что

$$w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{|p|^2}{k_\perp} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \delta(\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{k}'_\parallel + \boldsymbol{\kappa}) \delta(k^2/2 - k'^2/2) \quad (3.217)$$

полностью удовлетворяет условию детального равновесия: $w(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = k'_\perp w^s(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$, где симметричная функция w^s равна

$$w^s(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{|p|^2}{k_\perp k'_\perp} \sum_{\boldsymbol{\kappa}} \delta(\mathbf{k}_\parallel - \mathbf{k}'_\parallel + \boldsymbol{\kappa}) \delta(k^2/2 - k'^2/2). \quad (3.218)$$

Эта функция симметрична, поскольку суммирование проводится по всем $\boldsymbol{\kappa} = (2\pi/a)(n_x, n_y, 0)$, как с положительными так и с отрицательными целыми n_x и n_y .

3.9 Оптический потенциал u_0

Начиная с первой главы этой книги мы практически всюду пользуемся понятием оптического потенциала $u_0 = 4\pi N_0 b$, который играет важную роль во взаимодействии нейтронов с веществом. Очень важную роль этот потенциал играет в физике ультрахолодных нейтронов. Именно благодаря ему нейтроны с энергией $k^2 < u_0$ можно хранить в замкнутых сосудах, но возникает вопрос, откуда берется этот потенциал? Можно ли его вывести из первых принципов?

Ответ на этот вопрос положителен, и появление величины u_0 в формулах (3.50) и (3.69) показывает путь в этом направлении. Фактически у нас нет никакого оптического потенциала. Все, что у нас есть, — это рассеяние на каждом атоме, характеризуемое амплитудой рассеяния b . Тем не менее исследование процесса рассеяния на упорядоченной системе атомов показало, что при малых значениях k_{\perp}^2 в интервале $0 \leq k_{\perp}^2 \leq u_0$ нейtron испытывает полное отражение. Этот факт и позволяет приписать веществу оптический отталкивающий потенциал u_0 , несмотря на то, что оптический потенциал сильного взаимодействия нейтрона с отдельными ядрами отрицателен.

Выражение для u_0 , полученное в (3.69), не совсем точно. Интересно было бы найти поправки к нему. Последнее особенно важно в связи с проблемой аномальных потерь, наблюдавшихся при хранении ультрахолодных нейтронов [3]. Для оценки величины поправок мы заново рассмотрим дифракцию на полубесконечном кристалле, сразу ограничиваясь малыми энергиями, при которых все дифрагированные волны экспоненциально затухают.

3.9.1 Рассеяние на кристаллической плоскости при низких энергиях

Вернемся к формуле (3.19) для волнового поля, рассеянного кристаллической плоскостью,

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) - 2\pi i N_2 b C \sum_{\kappa} \frac{1}{k_{\perp}(\kappa)} \exp(i\mathbf{k}_{\kappa}\mathbf{r}) \quad (3.219)$$

и примем, что $k \ll \pi/a$, т. е. что k много меньше брэгговского вектора первого порядка. В этом случае для всех $\kappa \neq 0$ нормальная компонента $k_{\perp}(\kappa)$ — мнимая величина, и распространяющимися остаются только зеркально отраженная и прошедшая волны. Все дифрагированные волны экспоненциально затухают при удалении от плоскости. Иными словами, функция (3.219) записывается в виде

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) = & \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}) \left(\Theta(z < 0) \left[e^{ik_{0\perp}z} - i \frac{p}{k_{0\perp}} e^{-ik_{0\perp}z} \right] + \left[1 - i \frac{p}{k_{0\perp}} \right] \Theta(z > 0) e^{ik_{0\perp}z} \right) - \\ & - \sum_{\kappa \neq 0} \frac{p}{|k_{\perp}(\kappa)|} \exp(i\mathbf{k}_{\kappa\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} - |k_{\perp}(\kappa)||z|), \end{aligned} \quad (3.220)$$

где $k_{0\perp} = k_{\perp}(\kappa = 0)$, $p = 2\pi N_2 b C$.

Постоянную C можно всегда записать в виде $C = 1/(1 + ib\alpha)$ (см. (3.199)), где α при низких энергиях, согласно (3.203), равна

$$\alpha = -k + \frac{2\pi N_2}{k_{0\perp}} - i\alpha'', \quad \alpha'' = 2\pi N_2 \sum_{\kappa \neq 0}^{\infty} \frac{1}{|k_{\perp}(\kappa)|}. \quad (3.221)$$

Соответственно bC при отсутствии потерь представляется в виде

$$bC = \frac{b}{1 - ibk + 2\pi i N_2 b/k_{0\perp} + b\alpha''} = \frac{b_0}{1 + b_0\alpha'' + ip_0/k_{0\perp}} = \frac{b_1}{1 + ip_1/k_{0\perp}}, \quad (3.222)$$

где мы воспользовались выражением (3.188) для b и обозначили $p_{0,1} = 2\pi b_{0,1} N_2$. Величина

$$b_1 = \frac{b_0}{1 + b_0 \alpha''} \quad (3.223)$$

— перенормированная вещественная амплитуда рассеяния.

Вдали от плоскости, где экспоненциально затухающими волнами можно пренебречь, волновая функция (3.220), учитывая (3.222) и (3.223), равна

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_{0\parallel}\mathbf{r}_\parallel) \left(\Theta(z < 0) \left[e^{ik_{0\perp}z} - \frac{ip_1}{k_{0\perp} + ip_1} e^{-ik_{0\perp}z} \right] + \frac{k_{0\perp}}{k_{0\perp} + ip_1} \Theta(z > 0) e^{ik_{0\perp}z} \right). \quad (3.224)$$

Мы не вводили никакого потенциала, и эта волновая функция в точности соответствует волновой функции (1.98), полученной для рассеяния на потенциале $u(z) = 2p_1\delta(z)$.

3.9.2 Рассеяние при низких энергиях на полубесконечном кристалле

Если сделать такое же приближение для рассеяния от каждой кристаллической плоскости полубесконечного кристалла, то кристалл заменится потенциалом Кроннига–Пенни (1.95), рассмотренным в подразделе 1.6.5. Отражение от такого потенциала описывается формулами (1.105), (1.109) и оказывается полным при $k^2 < u_1 = 2p_1/a$, где a — расстояние между плоскостями. Иными словами, мы получили отражение такое же, как и отражение от оптического потенциала, хотя изначально никакого потенциала не вводили. Именно этот факт позволяет сделать вывод, что взаимодействие нейтрона с веществом при низких энергиях (энергиях, при которых структура не важна) может быть представлено оптическим потенциалом u_0 .

3.9.3 Поправки к оптическому потенциалу

Поправки Кроннига–Пенни к оптическому потенциалу

Формула (1.109) — это приближенное выражение для (1.105). Можно улучшить разложение в (1.105), и тогда мы найдем поправки порядка $u_1 a^2$ (будем называть их поправками Кроннига–Пенни).

Отражение от потенциала Кроннига–Пенни можно приближенно представить в виде

$$R = \frac{k - \sqrt{\frac{1 + u_1 a^2 / 12}{1 + u_1 a^2 / 4}} \sqrt{k^2 - \frac{u_1}{1 + u_1 a^2 / 12}}}{k + \sqrt{\frac{1 + u_1 a^2 / 12}{1 + u_1 a^2 / 4}} \sqrt{k^2 - \frac{u_1}{1 + u_1 a^2 / 12}}}. \quad (3.225)$$

Отсюда видно, что отражение будет полным при $k^2 < u_1/(1 + u_1 a^2 / 12)$. Поправка $u_1 a^2 / 12 \approx b_1/a$ обусловлена дискретностью кристалла в направлении нормали к поверхности, когда кристаллическая плоскость считается сплошной и описывается δ -образным потенциалом. Для большинства веществ поправка имеет величину порядка 10^{-4} и может считаться пренебрежимо малой.

Дифракционная поправка к оптическому потенциалу

Имеются, однако, поправки и другого вида (будем называть их дифракционными), которые определяются суммой экспоненциально убывающих волн в выражении (3.220). Дело в том, что каждая экспоненциально убывающая волна с $k_\perp(\boldsymbol{\kappa}) = i|k_\perp(\boldsymbol{\kappa})|$, возникающая на одной плоскости, при дифракции на следующей может превратиться в волну с начальным

вектором $k_{\perp}(\kappa - \kappa) = k_{0\perp}$. Эта волна далее распространяется параллельно падающей или зеркально отраженной волне.

Оценим величину поправки к потенциалу, обусловленной экспоненциально затухающими волнами. Для этого ограничимся только одной волной, которая дает максимальную поправку. Эта волна затухает меньше всего между двумя кристаллическим плоскостями. Она задается первым слагаемым в сумме (3.220). Иными словами, заменим всю сумму (3.220) единственным слагаемым и рассеяние на одной плоскости будем описывать волновой функцией

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) = & \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}) (\Theta(z < 0) [e^{ik_{0\perp}z} + \rho_0 e^{-ik_{0\perp}z}] + \Theta(z > 0) \tau_0 e^{ik_{0\perp}z}) + \\ & + \rho_1 \exp(i(\mathbf{k}_{\parallel} + \kappa_{1\parallel})\mathbf{r}_{\parallel} - |k_{1\perp}||z|),\end{aligned}\quad (3.226)$$

где введены амплитуды отражения $\rho_0 = -p_1/(p_1 - ik_{i\perp})$, $\rho_1 = -i\rho_0 k_{0\perp}/|k_{1\perp}|$ и пропускания $\tau_0 = 1 + \rho_0$.

Вектор $\kappa_{1\parallel}$ равен вектору обратной решетки кристаллической плоскости минимальной длины $\kappa_{1\parallel} = 2\pi/a$, где a — параметр ячейки, который будем считать равным расстоянию между плоскостями. Если $k^2 \ll (2\pi/a)^2$, то $|k_1| \approx \kappa_{1\parallel} = 2\pi/a$, и экспоненциально затухающая волна в (3.226) возле следующей плоскости, при $z = a$, имеет величину $\exp(-2\pi) \approx 2 \cdot 10^{-3}$. Но это еще не весь вклад в порядок малости экспоненциально затухающей волны. Необходимо учесть еще и предэкспоненциальный множитель. Этот множитель в $k_{0\perp}/|k_{1\perp}| \approx a/\lambda$ раз меньше ρ_0 . Поскольку характерная длина волны $\lambda = 2\pi/k$ для ультрахолодных нейтронов ($k^2 < u_0$) имеет величину порядка 600 Å, то амплитуда экспоненциально затухающей волны примерно в 200 раз меньше распространяющейся, и после обратной дифракции с $\kappa = -\kappa_1$ на второй плоскости она дает поправку к распространяющейся волне порядка 10^{-5} .

Отметим, что примерно такой же величине равна аномалия при хранении УХН, поэтому чрезвычайно важно посмотреть, как влияет эта дифракционная поправка на полное отражение от монокристалла. Однако из общих соображений можно сразу утверждать, что эта поправка меняет только эффективную высоту потенциала u_0 и фазу отраженной волны, но не приводит к утечке внутрь кристалла. Действительно, среди отраженных волн при низкой энергии имеется только одна распространяющаяся и много экспоненциально затухающих. Поэтому отраженный поток определяется одной волной с $k_{\perp} = k_{0\perp}$. Внутри кристалла все волны экспоненциально затухают. Основная волна затухает с показателем $q = \sqrt{u - k_{0\perp}^2}$, а минимальный показатель затухания дифрагированных волн равен $\sqrt{(2\pi/a)^2 + u}$. Дифракционная поправка меняет эти показатели на относительную величину 10^{-5} , однако при отсутствии потерь она не может привести к мнимой поправке для этих показателей. Действительно, если бы, например, q в результате дифракционной поправки стала бы равной $q - i\alpha$, то волна внутри кристалла превратилась бы в $\exp(-qx + i\alpha x)$ и появился бы поток $J \sim \alpha$ внутрь кристалла, который затухал бы там по закону $\exp(-2qx)$. При этом, если бы отражение было неполным, то нарушилась бы унитарность: отраженный поток меньше приходящего, а дефицит потока бесследно исчезает внутри кристалла, ядра которого не поглощают нейтроны. Если отражение остается полным, то на границе кристалла опять происходит нарушение унитарности, ибо теперь сумма потока, отраженного от границы, и потока, идущего внутрь кристалла, больше приходящего потока. Таким образом, можно заключить, что дифракционная поправка только меняет фазу амплитуды полного отражения на величину порядка 10^{-5} и ею можно пренебречь.

Если же рассеяние на кристалле сопровождается потерями, то отражение уже не будет полным, но оно должно быть пропорционально сечению потерь. Дифракционная поправка только слегка увеличивает потери, и потому ею снова можно пренебречь.

Мнимая часть оптического потенциала

Всюду выше мы предполагали, что амплитуда рассеяния для всех атомов одинакова. На самом деле кристалл может состоять из разных атомов и разных изотопов одного и того же элемента. Кроме того, атомы могут обладать спином и находиться в различных спиновых состояниях. Поэтому каждому атому соответствует своя амплитуда рассеяния b_i , которая может меняться в зависимости от поляризации рассеиваемого нейтрона. Для такой системы атомов можно ввести понятие «когерентной» амплитуды рассеяния $b = \bar{b}_i$, которая представляет собой амплитуду, усредненную по элементам, изотопам и спиновому состоянию атомов.

Когерентная амплитуда для отдельного рассеивателя является комплексным числом. Мнимая часть в соответствии с оптической теоремой (3.195) пропорциональна полному сечению рассеяния σ_t , в которое включены среднее сечение поглощения $\sigma_a = \overline{\sigma_{ai}}$ и среднее сечение упругого рассеяния $\sigma_{el} = 4\pi|\bar{b}_i|^2$. Удобно из среднего сечения упругого рассеяния выделить когерентную часть $\sigma_c = 4\pi|b|^2$ и назвать оставшуюся часть $4\pi[|\bar{b}_i|^2 - |\bar{b}_i|^2]$ некогерентным сечением упругого рассеяния, обозначив его σ_{inc} . При этом когерентную амплитуду в соответствии с оптической теоремой можно представить выражением (3.194) или, подробнее,

$$b = \frac{b_0}{1 + ikb_0 + ik[\sigma_a + \sigma_{inc}]/4\pi b_0}.$$

Переход от отдельного атома ко многим атомам приводит к изменению характера рассеяния и мнимой части амплитуды b . Однако это изменение касается главным образом слагаемого kb_0 . Например, рассеяние на кристаллической плоскости сопровождается перенормировкой амплитуды b множителем $C = 1/(1 + ib\alpha)$ (3.199), который меняет слагаемое kb_0 в знаменателе b на $b_0(k + \alpha)$, оставляя $[\sigma_a + \sigma_{inc}]/4\pi b_0$ неизменным. Правда, поскольку $\alpha = \alpha' - i\alpha''$ — комплексная величина, можно преобразовать b_0 в $b_1 = b_0/(1 + b_0\alpha'')$, что приводит к перенормировке

$$[\sigma_a + \sigma_{inc}]/4\pi b_0 \rightarrow [\sigma_a + \sigma_{inc}]/4\pi b_0[1 + b_0\alpha''],$$

однако обычно эта перенормировка невелика и можно считать мнимую часть амплитуды $b = b' - ib''$, входящей в оптический потенциал $u_0 = 4\pi N_0 b$, равной $b'' = k[\sigma_a + \sigma_{inc}]/4\pi$.

Мнимая часть амплитуды рассеяния обуславливает наличие и величину мнимой части оптического потенциала $u_0'' = 4\pi N_0 b''$, а та в свою очередь — уменьшение амплитуды зеркального отражения. Это уменьшение характеризуется отношением b''/b' и может быть значительным, если сечение некогерентного рассеяния велико.

В случае ультрахолодных нейтронов упругое некогерентное рассеяние, хотя и входит в мнимую часть потенциала, не влияет на величину потерь, поскольку приводит только к незеркальному отражению, но не к утечке нейтронов из сосудов хранения. Поэтому за потери отвечает только сечение поглощения, к которому необходимо добавить также полное сечение неупругого рассеяния [3]. Неупругое рассеяние мы здесь не рассматриваем.

3.9.4 Оптический потенциал и амплитуда рассеяния $b(q)$

Выше мы рассмотрели простейший случай формирования оптического потенциала, когда амплитуда рассеяния b не зависит от угла рассеяния. На практике, однако, бывает необходимо учесть зависимость амплитуды от переданного импульса $b(q)$. При этом возникает вопрос, каким q определяется оптический потенциал. Обычно $b(q)$ монотонно убывает при увеличении q от нуля до максимального значения $q = 2k$. Многие учебники утверждают, что высота оптического потенциала определяется величиной $b(0)$. Однако при отражении мы всегда имеем рассеяние с переданным импульсом $q = 2k_\perp$, для которого $b(2k_\perp) < b(0)$,

и это различие может быть существенным. Какой же высоты потенциал будет «виден» отражающимся нейтроном: $4\pi N_0 b(2k_\perp)$ или $4\pi N_0 b(0)$?

Простые рассуждения показывают, что высота оптического потенциала определяется главным образом тем, как распространяется частица, проникшая внутрь среды. Для нее характерно рассеяние именно вперед с $q = 0$, и потому ее волновой вектор равен $k = \sqrt{k^2 - 4\pi N_0 b(0)}$. Отсюда следует, что волновая функция частицы с $k^2 < 4\pi N_0 b(0)$ экспоненциально затухает внутри среды. Значит, частицы с $k^2 < 4\pi N_0 b(0)$ должны полностью отражаться, и потому высота потенциального барьера определяется именно величиной $b(0)$.

С другой стороны, какую роль играет $b(2k_\perp)$ при отражении частицы? Оказывается, зависимость $b(q)$ эквивалентна размытию границы раздела потенциального барьера и соответственно (см. раздел (1.10.1)) изменению фазы отраженного нейтрона (при полном отражении) по сравнению с резкой границей. При этом фаза отражения меняется так, будто потенциал даже выше $4\pi N_0 b(0)$, но это превышение тем меньше, чем меньше разность $4\pi N_0 b(0) - k^2$. В точке $k^2 = 4\pi N_0 b(0)$ это превышение обращается в нуль, и при $k^2 > 4\pi N_0 b(0)$ амплитуда отражения уменьшается так, как если бы высота потенциала была меньше $4\pi N_0 b$ (см. раздел 1.10.1).

3.9.5 Лирическое отступление об оптическом потенциале

Казалось бы, что интересного в константе, определяющей высоту оптического потенциала? Да, она определяет коэффициент преломления, но этим ее роль в физике не ограничивается. Проиллюстрируем на нескольких примерах, как она важна для многих приложений.

Оптика

Выше мы говорили в основном о потенциальном барьеце $u > 0$, т. е. об отталкивающем взаимодействии с веществом, поскольку именно барьер определяет полное отражение. Волновое число внутри среды равно $k' = \sqrt{k^2 - u}$, и его можно записать также в виде $k' = kn$, где $n = \sqrt{1 - u/k^2}$ — коэффициент преломления.

Если $u > 0$, то $n < 1$. Однако, поскольку $u = 4\pi N_0 b$, а амплитуда рассеяния b может быть отрицательной (типичный пример: рассеяние нейтрона на водороде), то потенциал u тоже может быть отрицательным, т. е. взаимодействие нейронов с веществом — притягивающим, и тогда $n > 1$. Обратим внимание на то, что коэффициент преломления света для большинства веществ больше единицы. Это значит, что большинство веществ не отталкивают光子ы, а притягивают их. Поэтому в оптике нет полного отражения, а есть полное внутреннее отражение, т. е. для света, падающего на границу раздела изнутри объема вещества, вакуум представляет собой потенциальный барьер.

Действительно, взаимодействие вещества с электромагнитными волнами описывается коэффициентом преломления $n = \sqrt{\varepsilon}$, где ε — диэлектрическая проницаемость. Коэффициент преломления преобразует вакуумное волновое число k в волновое число внутри среды $k' = nk$. Последнее можно записать следующим образом:

$$k' = \sqrt{\varepsilon k^2} = \sqrt{k^2 + (\varepsilon - 1)k^2} = \sqrt{k^2 - u},$$

где по аналогии с нейtronами введен оптический потенциал $u = (1 - \varepsilon)k^2$. Учтем, что $\varepsilon = 1 + 4\pi N_0 \alpha$, где α — поляризуемость вещества. При этом потенциал u полностью аналогичен оптическому потенциалу для нейtronов $u = 4\pi N_0 b$, где $b = -\alpha k^2$.

Поляризуемость совершенно органично входит в понятие энергии взаимодействия света с веществом. Действительно, если атом вещества имеет дипольный момент \mathbf{d} , то энергия

взаимодействия его с электрическим полем \mathbf{E} равна $-\mathbf{d}\mathbf{E}$. Если же атомы не имеют собственного электрического дипольного момента, то в поле \mathbf{E} они приобретают индуцированный момент $\mathbf{d} = \alpha\mathbf{E}$, где α — поляризуемость. Таким образом, энергия взаимодействия атома с полем равна $-\alpha E^2$. Она отрицательна, т. е. взаимодействие притягивающее. Если учесть, что $E^2/4\pi$ представляет собой плотность электромагнитной энергии, то для фотонов с частотой ω ее можно представить в виде $E^2 \sim \hbar\omega N_\gamma$, где N_γ — плотность числа фотонов. Поэтому энергия U_γ взаимодействия атома с полем пропорциональна величине $-\alpha\hbar\omega N_\gamma$. Если плотность N_γ неоднородна в пространстве, то на атом действует сила $\mathbf{F} = -\nabla U_\gamma(\mathbf{r})$, которая втягивает атом в ту область, где плотность фотонов больше.

Мы видим, что амплитуда рассеяния b отрицательна, значит, «кинетическая энергия» фотонов k'^2 внутри вещества выше «кинетической энергии» k^2 в вакууме, т. е. вещество притягивает фотоны, и «потенциал притяжения» равен $-4\pi N_0 \alpha k^2 = -4\pi N_0 \alpha c^2 \omega^2$, где c — скорость света. Конечно, это выражение не имеет размерности энергии. Для того чтобы потенциал u_0 приобрел размерность энергии, его в случае нейтронов нужно умножить на постоянную $\hbar^2/2m$, где m — масса нейтрона. У фотонов массы нет, поэтому нет и такой постоянной. Однако потенциальному u_0 можно придать размерность квадрата энергии, если умножить его на $(\hbar c)^2$.

В отличие от нейтронного потенциала фотонный зависит от частоты падающего излучения $\omega = kc$. Однако при высоких частотах, характерных для рентгеновских лучей, поляризуемость α обратно пропорциональна квадрату частоты и меняет знак, в результате чего амплитуда $-\alpha k^2$ перестает зависеть от ω^2 и становится положительной. Выражение u для рентгеновских лучей точно такое же, как для нейтронов, только вместо ядерной амплитуды рассеяния b в него входит томсоновская длина рассеяния e^2/mc^2 , а вместо атомной плотности N_0 — плотность электронов $n_e = N_0 Z$, где Z — заряд атомного ядра. Таким образом, $u = 4\pi N_0 Z e^2/mc^2 > 0$, т. е. для рентгеновских лучей вещество представляет собой потенциальный барьер, как и для нейтронов в случае $b > 0$, и потому рентгеновским лучам свойственно полное внешнее отражение.

Самофокусировка. Рассмотрим взаимодействие света с веществом, когда потенциал вещества отрицателен, т. е. притягивающий. В соответствии с третьим законом Ньютона, если вещество притягивает фотоны, то и фотоны притягивают к себе вещество. Это притяжение называется электрострикцией, и оно приводит к явлению самофокусировки. Действительно, представим себе мощный луч, проходящий сквозь вещество. Благодаря силам притяжения плотность вещества внутри луча увеличивается, а у края луча уменьшается. Возникшее разрежение у края луча приводит к полному внутреннему отражению луча, т. е. к искривлению краев внутрь, к увеличению плотности света и к сужению луча. А это и есть самофокусировка.

Нелинейность. Процесс самофокусировки приводит к нелинейности. Действительно, нелинейность — это зависимость коэффициента преломления от интенсивности света I . Коэффициент преломления, так же как и в случае нейтронов, зависит от плотности атомов N_0 . Плотность же атомов в силу притяжения между веществом и фотонами увеличивается с увеличением плотности фотонов, т. е. с увеличением интенсивности света. Таким образом, плотность атомов в поле волны становится равной $N = N_0 + \alpha I$, где α — постоянная, характерная для данного вещества. Соответственно и коэффициент преломления и диэлектрическая постоянная ϵ приобретают поправку, пропорциональную I : $\epsilon = \epsilon_0 + \beta I$, где β — постоянная, характерная для данного вещества.

Поскольку световое поле E зависит от времени: $E = E_0 \cos(\omega t)$, то соответственно зависит от времени и интенсивность $I \sim E^2$, и в силу нелинейности взаимодействие с веществом световой волны с частотой ω порождает волны с частотами 3ω . Интерференция

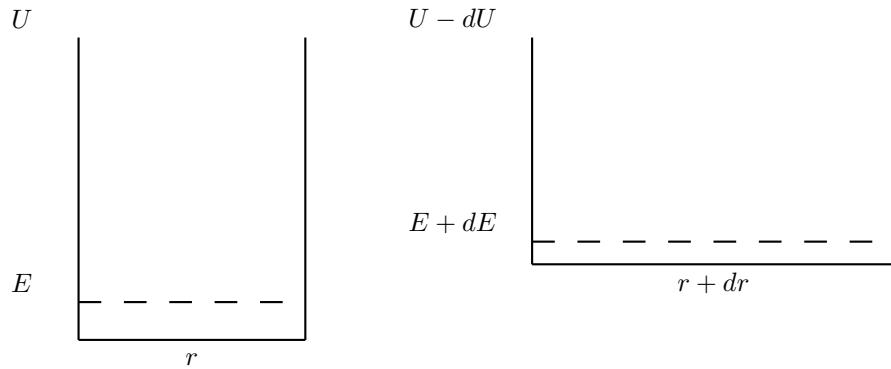


Fig.1

Рис. 3.4: Благодаря нейтрону в связанном состоянии внутри вещества силы нейтронострекции удерживают само вещество от расширения

же порожденных высокочастотных волн между собой и с первичной волной порождает еще более высокие гармоники, т. е. волны с частотами $n\omega$, где $n > 3$.

Шаровая молния. Оптический потенциал может иметь прямое отношение к возникновению шаровой молнии [84]. Представим себе точечный взрыв в атмосфере, не задумываясь о его происхождении. Вследствие взрыва возникает сферическая ударная волна, расходящаяся от эпицентра. Поскольку воздух за фронтом ударной волны сжат, коэффициент преломления за фронтом больше, чем перед фронтом, и фотоны могут испытывать полное внутреннее отражение от фронта ударной волны.

Представим себе, что газ за фронтом ударной волны сильно возбужден, и один из атомов испустил фотон, способный полностью отразиться от фронта ударной волны. Тогда этот фотон может привести к лазерному разряду внутри ударной волны. Если количество фотонов в разряде достаточно велико, то из-за электрострикций ударная волна останавливается, и возникает стабильный шар, оболочка которого представляет собой тонкую пленку, заполненную фотонами. Почему такая пленка может достаточно долго оставаться стабильной и как, в принципе, можно зажечь такое образование, изложено в [84], однако по-настоящему серьезных исследований в этом направлении пока не проводилось.

Нейтронострекция в нейтронных звездах

Мы уже говорили о том, что при $b < 0$ оптический потенциал становится притягивающим, т. е. вещество представляет собой потенциальную яму. В потенциальной яме у нейтрона может существовать связанный уровень. Это означает, что вещество удерживает нейтрон. Однако одновременно и нейтрон удерживает вещество. Действительно, представим себе, что нейтрон находится на самом нижнем связанном уровне, а вещество начинает расширяться. При этом плотность атомов N_0 и глубина потенциальной ямы уменьшаются. Соответственно энергия связанного уровня должна возрасти, как показано на рис. 3.4. Это означает, что при расширении необходимо совершить работу над нейтроном, т. е. нейтрон в связанном состоянии препятствует расширению, а значит, сжимает вещество. Возникает сила, аналогичная электрострикции, которую можно назвать нейтронострекцией.

Конечно, один нейтрон создает ничтожную силу, но в природе существует объект, в котором эта сила может сыграть очень большую роль. Этот объект — нейтронная звезда. Известно, что нейтрон-нейтронное рассеяние характеризуется амплитудой $b \approx -1.8 \cdot 10^{-12}$ см. Правда, это рассеяние имеет место только в синглетном состоянии, когда полный спин рас-

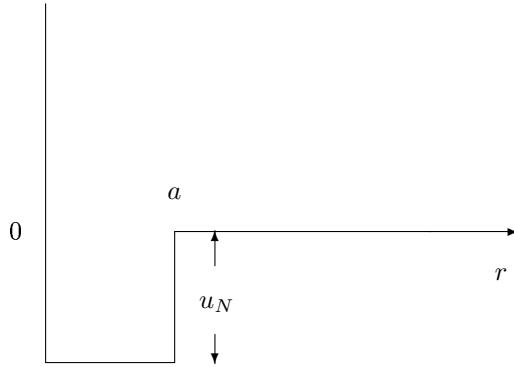


Рис. 3.5: Сферически симметричная потенциальная яма нейтрон-нейтронного взаимодействия ширины a и глубины u_N . Ее можно представить одномерной потенциальной ямой и бесконечно высоким барьером при $r = 0$

сеивающихся частиц равен нулю. Поэтому когерентная амплитуда нейтрон-нейтронного рассеяния вчетверо меньше: $b_c \approx 0.45 \cdot 10^{-12}$ см.

Нейтронная звезда целиком состоит из нейтронов и потому представляет собой потенциальную яму для каждого нейтрона. Плотность n в нейтронной звезде по величине $> 10^{37}$ см $^{-3}$, поэтому глубина ямы $(\hbar^2/2m) 4\pi n b$ больше 10 МэВ.

Поскольку потенциал ямы действует на каждый нейтрон, то полная энергия всех нейтронов, равная $(\hbar^2/2m) 4\pi n^2 b V$, где V — объем звезды, может оказаться больше гравитационной. Действительно, если считать, что плотность внутри звезды постоянна, то гравитационная энергия звезды равна

$$U_g = -\frac{3}{5} G \frac{M^2}{R}, \quad (3.227)$$

где G — гравитационная постоянная, R — радиус звезды, а $M = mnV$ — полная масса звезды. Оптическая же энергия

$$U_o = \frac{\hbar^2}{2m} 4\pi b \frac{M^2}{V} = \frac{\hbar^2}{2m} 3b \frac{M^2}{R^3}.$$

Поэтому, если $b = 0.45 \cdot 10^{-12}$ см, то $U_g < U_o$ при

$$R < R_0 = \sqrt{\frac{5|b|\hbar^2}{2m^3G}} = \frac{1}{m} \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} \sqrt{\frac{5}{2}|b| \frac{\hbar}{mc}} \approx 20 \text{ км}. \quad (3.228)$$

Зависимость амплитуды b от энергии. Критический радиус R_0 равен 20 км и не зависит от плотности только при условии, что $b = 4.5$ фм — постоянная величина. Однако на самом деле b зависит от энергии E и с ростом энергии убывает. С увеличением плотности энергия нейтронов возрастает, а значит, амплитуда b уменьшается, и потому уменьшается критический радиус R_0 . Покажем, как можно рассчитать зависимость $b(E)$, предположив, что нейтрон-нейтронное взаимодействие описывается потенциальной ямой, изображенной на рис. 3.5.

Для того чтобы получить зависимость $b(E)$, нужно решить уравнение Шредингера со сферически симметричным потенциалом. Сферически симметричная волновая функция $\Psi_s(r)$, характеризующая s -рассеяние, может быть представлена в виде $\psi(r)/r$, при этом $\psi(r)$ удовлетворяет одномерному уравнению

$$\frac{d^2\psi(r)}{dr^2} - [u(r) - k^2]\psi(r) = 0,$$

справедливому на полуоси $r > 0$. Мы получили одномерное уравнение с потенциалом, для которого легко найти амплитуду отражения:

$$\rho = \rho_{0u} + \frac{\tau_{0u}\tau_{u0}e^{2ik'a}\rho_0}{1 - \rho_{u0}\rho_0e^{2ik'a}}, \quad (3.229)$$

где ρ_0 — амплитуда отражения от бесконечно высокой потенциальной стенки при $r = 0$ (она равна -1), $\rho_{0u} = -\rho_{u0} = (k - k')/(k + k')$ — амплитуда отражения от края потенциальной ямы со стороны вакуума, $\tau_{0u} = 2k/(k + k')$ и $\tau_{u0} = 2k'/(k + k')$ — амплитуды рефракции на краю ямы, а $k' = \sqrt{k^2 + u_N}$ — волновое число внутри ямы. После подстановки этих выражений в (3.229) получим

$$\rho = -e^{2ik'a} \frac{1 - \rho_{0u}e^{-2ik'a}}{1 - \rho_{0u}e^{2ik'a}} = -e^{2i\chi},$$

где

$$\chi = k'a + \arctg \left(\frac{\rho_{0u} \sin(2k'a)}{1 - \rho_{0u} \cos(2k'a)} \right). \quad (3.230)$$

С амплитудой отражения (3.229) функция $\psi(r)$ записывается в виде

$$\psi(r) = \exp(-ik[r - a]) + \rho \exp(ik[r - a]), \quad (3.231)$$

обычно же радиальную волновую функцию при рассеянии записывают как

$$\psi(k, r) = -\exp(-ikr) + S(k) \exp(ikr), \quad (3.232)$$

где S — матрица рассеяния.

Так как функция $\psi(r)$ определена с точностью до произвольной фазы, то можно умножить (3.231) на $\exp(-ika)$, и тогда (3.231) преобразуется к виду (3.232), в котором множитель S представляет собой матрицу рассеяния

$$S(k) = -\exp(-2ika)\rho = \exp(-2ika + 2i\chi). \quad (3.233)$$

Отсюда определяется амплитуда рассеяния

$$f = \frac{1}{2ik}(S - 1) = \frac{1}{2ik}[\exp(-2ika + 2i\chi) - 1] = \frac{\tg(\chi - ka)/k}{1 - i\tg(\chi - ka)}, \quad (3.234)$$

и нужная нам длина рассеяния

$$b(k) = -\frac{1}{k}\tg(\chi - ka). \quad (3.235)$$

Подстановка сюда (3.230) и $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ приводит к выражению

$$b(E) = \frac{1}{\sqrt{E}} \frac{\sqrt{E + c^2} \tg(\sqrt{E}) - \sqrt{E} \tg(\sqrt{E + c^2})}{\sqrt{E + c^2} + \sqrt{E} \tg(\sqrt{E}) \tg(\sqrt{E + c^2})}, \quad (3.236)$$

где энергия E задана в единицах $\hbar^2/2ma^2$, b — в единицах ширины потенциальной ямы a , а постоянная c определяется таким образом, чтобы в пределе $E \rightarrow 0$ получалось заданное значение $b_0 = 4.5$ фм. Это возможно, когда c удовлетворяет уравнению

$$\tg c = c(1 - b_0/a).$$

Выражение (3.236) можно с хорошей точностью представить более простой функцией

$$b(E) = b_0 \frac{0.4}{E + 0.4}. \quad (3.237)$$

Мы вывели это выражение, чтобы показать, как применяется алгебраический метод в сферической системе координат. Однако зависимость $b(E)$ можно получить сразу, воспользовавшись теорией эффективного радиуса [4], согласно которой зависимость амплитуды $b_s(E)$ синглетного нейтрон-нейтронного рассеяния можно описать выражением

$$\frac{1}{b_s(E)} = \frac{1}{b_s(0)} \left(1 - \frac{1}{2} k^2 a b_s(0) \right), \quad (3.238)$$

где $a = 1.2$ фм — эффективный радиус сильного взаимодействия. С помощью этого выражения можно представить зависимость когерентной амплитуды рассеяния от энергии следующим образом:

$$b(E) \equiv \frac{b_s(E)}{4} = \frac{b(0)}{1 + Qx^2}. \quad (3.239)$$

Здесь введено безразмерное отношение $x = k/k_c$, где $k_c = mc/\hbar = 4.8 \cdot 10^{13}$ см⁻¹ — комптоновское волновое число нейтрана, а $Q = a|b_s(0)|k_c^2/2 \approx 250$.

Влияние нейтронострекции на параметры звезды. Для оценки влияния нейтронострекции на структуру и параметры нейтронных звезд воспользуемся уравнениями Толмена—Оппенгеймера—Волкова (ТОВ) [85], которые представляют собой условие равновесия между силами гравитационного сжатия и силами внутреннего давления нейтронного газа.

Представим себе сферически симметричную звезду плотности $\rho(r)$ с внутренним давлением $p(r)$. Выделим в ней тонкий сферический слой радиуса r и толщины dr . Нерелятивистское ньютонаовское условие равновесия означает равенство силы $[p(r) - p(r+dr)]4\pi r^2$, обусловленной давлением на этот слой, и силы тяготения $4\pi r^2 dr \rho(r)$, действующей на массу этого слоя со стороны части массы звезды $\mathcal{M}(r) = 4\pi \int_0^r r'^2 dr' \rho(r')$, заключенной внутри сферы радиуса r . В ньютонаовских уравнениях ТОВ плотность массы заменяется на плотность энергии $\varepsilon(r)/c^2$, и уравнения приводятся к виду

$$\frac{dp}{dr} = -G \frac{\varepsilon(r)\mathcal{M}(r)}{c^2 r^2}, \quad \frac{d\mathcal{M}(r)}{dr} = \frac{4\pi r^2 \varepsilon(r)}{c^2}, \quad (3.240)$$

где $G = 6.673 \cdot 10^{-11}$ Дж·м/кг² — гравитационная постоянная.

При учете релятивистских поправок первое уравнение ТОВ приобретает вид

$$\frac{dp}{dr} = -G \frac{\rho(r)\mathcal{M}(r)}{r^2} = -G \frac{\varepsilon(r)\mathcal{M}(r)}{c^2 r^2} \left[1 + \frac{p(r)}{\varepsilon(r)} \right] \left[1 + \frac{2\pi r^2 p(r)}{\mathcal{M}(r)c^2} \right] \left[1 - \frac{2G\mathcal{M}(r)}{c^2 r} \right]^{-1}, \quad (3.241)$$

Нейтронострекция приводит к дополнительному слагаемому в правой части первого уравнения ТОВ (3.240) [86]. Поскольку нейтронострекция существенна при не очень высоких плотностях, то мы будем включать ее только в нерелятивистское уравнение, которое приобретает вид

$$\frac{dp(r)}{dr} = -G \frac{\varepsilon(r)\mathcal{M}(r)}{c^2 r^2} - n \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d[4\pi nb(n)]}{dr} = -G \frac{\varepsilon(r)\mathcal{M}(r)}{c^2 r^2} + \frac{4\pi}{5} (mn_c R_0)^2 G x^3 \frac{d[x^3 \beta(x)]}{dr}, \quad (3.242)$$

где $n = \rho/m$ — плотность числа нейтронов, зависимость амплитуды b от энергии представлена в виде зависимости от плотности n , а в последнем равенстве введен параметр R_0 из (3.228) и безразмерные переменные $\beta = b(E)/b(0)$ и $x = (n/n_c)^{1/3}$ ($n_c = k_c^3/3\pi^2 \approx 3.7 \cdot 10^{39}$ см⁻³ — комптоновская плотность нейтронов).

Будем считать нейтронную звезду вырожденным Ферми-газом нулевой температуры. Плотность энергии такого газа равна

$$\varepsilon(r) = \frac{8\pi\hbar c}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F(r)} \sqrt{k^2 + k_c^2} k^2 dk = mc^2 n_c \int_0^x 3\sqrt{u^2 + 1} u^2 du = \varepsilon_c f(x), \quad (3.243)$$

где k_F — импульс Ферми, связанный с плотностью n соотношением $n = k_F^3/3\pi^2$; $x = k_F/k_c = \sqrt[3]{n/n_c}$; $n_c = k_c^3/3\pi^2$; $\varepsilon_c = mc^2 n_c = 5.6 \cdot 10^{35}$ Дж/м³, и

$$f(x) = 3 \int_0^x \sqrt{1+u^2} u^2 du = \frac{3}{8} \left[(2x^2 + 1)x\sqrt{1+x^2} - \ln(x + \sqrt{1+x^2}) \right] = x^3 \begin{cases} 1, & x \rightarrow 0, \\ 3x/4, & x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (3.244)$$

Давление p определяется из термодинамического уравнения

$$p = -\frac{\partial U}{\partial V} = n \frac{d\varepsilon}{dn} - \varepsilon = \varepsilon_c \phi(x), \quad (3.245)$$

где U — внутренняя энергия системы, V — ее объем, а

$$\phi(x) = \frac{x}{3} \frac{df}{dx} - f = \frac{1}{8} \left[(2x^2 - 3)x\sqrt{1+x^2} + 3\ln(x + \sqrt{1+x^2}) \right] = x^4 \begin{cases} x/5 & x \rightarrow 0 \\ 1/4 & x \rightarrow \infty \end{cases}. \quad (3.246)$$

Введем единицу длины r_0 и единицу массы

$$\mathcal{M}_0 = \frac{4\pi}{3} r_0^3 \varepsilon_c / c^2 \quad (3.247)$$

и запишем уравнения ТОВ в безразмерных переменных $\mu = \mathcal{M}/\mathcal{M}_0$ и $z = r/r_0$. При подстановке ε , p и $r = r_0 z$ в уравнения (3.240) без учета нейтронострикции они принимают наипростейший вид для

$$r_0 = \sqrt{\frac{3c^2}{4\pi G m n_c}} = \frac{3}{2} \frac{\hbar}{mc} \sqrt{\frac{\pi \hbar c}{G m^2}}. \quad (3.248)$$

Единица длины оказывается равной $r_0 = 7.3$ км, а единица массы $\mathcal{M}_0 = (4\pi/3)r_0^3 n_c m = 10^{31}$ кг, что эквивалентно пяти массам Солнца. Обе единицы характерны для нейтронных звезд.

С учетом нейтронострикции уравнения ТОВ в безразмерных переменных принимают вид

$$\frac{dx}{dz} \left[\phi'(x) - \frac{3}{5} \left(\frac{R_0}{r_0} \right)^2 x^3 \frac{d[x^3 \beta(x)]}{dx} \right] = -f(x) \frac{\mu(x)}{z^2}, \quad \frac{d\mu}{dz} = 3z^2 f(x), \quad (3.249)$$

где

$$\phi' = \frac{d\phi(x)}{dx} = \frac{x^4}{\sqrt{1+x^2}}, \quad \beta(x) = \frac{1}{1+Qx^2}.$$

Уравнения (3.249) определяют функцию xz . Они могут быть решены численно. Для этого нужно задать $x(0)$, т. е. плотность в центре звезды, и найти точку z_0 , в которой $x(z_0) = 0$. При этом определяются радиус звезды $R = r_0 z_0$, масса $\mathcal{M}_0 \mu(z_0)$ и распределение плотности $n(r) = n_c x^3(r/r_0)$. Результаты интегрирования показывают, что поправки, вносимые эффектами нейтронострикции в параметры звезды, при плотностях меньше ядерных могут быть больше поправок, обусловленных общими эффектами относительности.

Мы не будем продолжать эту тему, поскольку она выходит за рамки книги. Отметим только, что она включает множество интересных неизученных явлений, например пульсации и взрывы при наличии резонансов [87].

Заключение к лирическому отступлению

Отметим еще одно очень важное обстоятельство. Оптический потенциал для нейтронов пропорционален амплитуде рассеяния b , которая порождается короткодействующим сильным взаимодействием. Сам же оптический потенциал оказывается дальнодействующим,

ибо в процесс рассеяния нейтронов вовлекается много атомов, отстоящих друг от друга на расстояние, на много порядков превышающее радиус ядерного взаимодействия. Дальнодействие мы наблюдаем повсеместно в таких явлениях, как дифракция и полное отражение. Оно порождено свойствами волновой функции нейтрона, и это обстоятельство, возможно, будет играть ключевую роль в определении физического смысла волновой функции.

Рассеяние свойственно не только нейtronам, но и целым атомам и молекулам. Для них тоже можно определить оптический потенциал, и этот потенциал может играть существенную роль как в эволюции обыкновенных звезд, так и в поведении таких экзотических систем, как Бозе-конденсат. Возможно, он имеет большое значение и для объяснения явлений сверхтекучести и сверхпроводимости.

*Но дальше — тишина. Немым мне должно быть
Перед внезапно развернувшейся картиной.
И нужно мысль свою мне приостановить,
Затем чтоб песнь моя не стала лебединой.*

Заключительные замечания

В этой главе метод, развитый в первой главе, был обобщен на трехмерные периодические потенциалы. Это позволило по-новому сформулировать динамическую теорию дифракции и строго обосновать величину оптического потенциала. При этом мы ограничивались полностью упорядоченными системами фиксированных в пространстве рассеивающих центров. Рассеяние на неупорядоченных центрах будет рассмотрено в следующей главе.

Литература

- [1] Steyerl A. // Neutron physics. Springer tracts in modern physics.— V. 80.— Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1977.— P. 57–130.
- [2] Golub R., Richardson D., Lamoreaux S.K. Ultra-Cold Neutrons. Bristol, Philadelphia, New York: Adam Hilger, 1991.
- [3] Игнатович В.К. Физика ультрахолодных нейтронов.— М.: Наука, 1986;
Ignatovich V.K. The Physics of Ultracold Neutrons (UCN).— Oxford: Clarendon Press, 1990.
- [4] Гуревич И.И., Тарасов Л.В. Физика нейтронов низких энергий.— М.: Наука, 1965.
- [5] Ферми Э. Лекции по атомной физике.— М.: Иностранная литература, 1952.— С. 92
(Fermi E. Conferenze di Fisica atomica.— Roma, 1950).
- [6] Goldberger M.L., Zeits F. Theory of the refraction and the diffraction of neutrons by crystals // Phys. Rev.— 1947.— V. 71.— P. 295.
- [7] Fermi E., Zinn W. // Phys. Rev.— 1946.— V. 70.— P. 103.
- [8] Rutherford E. Nuclear constitution of atom. Bakerian lecture // Proc. Roy. Soc.— 1920.— V. A97.— P. 395.
- [9] Зельдович Я.Б. // ЖЭТФ.— 1959.— Т. 36.— С. 1952.
- [10] Лущиков В.И. и др. // Письма в ЖЭТФ.— 1969.— Т. 9.— С. 40.
- [11] Groshev L.V. et al. // Phys. Lett.— 1971.— V. B34.— P. 293.
- [12] Pokotilovskii Yu.N. UCN anomaly and the possibility for further decreasing neutron losses in traps // Nucl. Instr. Meth.— 2005.— V. A554.— P. 356–362.
- [13] Godfrey G.H. // Austral. J. Phys. — 1957.— V. 10.— P. 1.
- [14] Корнеев Д.А., Игнатович В.К., Ярадайкин С.П., Боднарчук В. Отражение нейтронов от потенциалов с размытыми границами.— ОИЯИ, Р4-2002.— Дубна, 2002;
Specular reflection of neutrons from potentials with smooth boundaries // Physica B: Condensed Matter.— 2005.— V. 364, N. 1–4.— P. 99–110.
- [15] Игнатович В.К. Принцип инвариантности или расслоения в нейtronной оптике и фундаментальные свойства нейтрона // Ядерная физика. — 1999.— Т. 62, № 5.— С. 792–806 (Ignatovich V.K. Principle of invariance, or splitting, in neutron optics and basic properties of the neutron // Physics of Atomic Nuclei.— 1999.— V. 62, N. 5.— P. 738–753).
- [16] Darwin C.G. // Phil. Mag.— 1914.— V. 27.— P. 675–686.
- [17] Игнатович В.К. Рассеяние волн и частиц на одномерных периодических потенциалах.— ОИЯИ, Р4-10778.— Дубна, 1977.

- [18] Игнатович В.К. Этюд об одномерном периодическом потенциале // УФН.— 1986.— Т. 150.— С. 146–158 (*Ignatovich V.K.* // Sov. Phys. Usp.— 1986.— V. 29(9).— P. 880–887).
- [19] Ignatovich V.K. The remarkable capabilities of recursive relations // Am. J. Phys.— 1989.— V. 57, N. 10.— P. 873–878.
- [20] Ignatovich V.K. An Algebraic Approach to the Propagation of Waves and Particles in Layered Media // Physica B.— 1991.— V. 175, N. 1–3.— P. 33–38.
- [21] Ignatovich V.K., Protopopescu D., Utsuro M. Darwin table width for forbidden reflections // Phys. Rev. Lett.— 1996.— V. 77, N. 20.— P. 4202.
- [22] Ignatovich V.K., Ignatovitch F.V. Multilayered Systems with Forbidden Reflections // Proc. of the Int. Conf. «Thin films deposition of oxide multilayers. Industrial-scale processing». Vilnius, Lithuania, September 28–29, 2000.— Vilnius University Press, 2000.— P. 103–107.
- [23] Carron I., Ignatovich V. Algorithm for preparation of multilayer systems with high critical angle of total reflection // Phys. Rev. A.— 2003.— V. 67.— P. 043610.
- [24] Ignatovich V.K., Ignatovitch F.V., Andersen D.R. Algebraic description of multilayer systems with resonances // Particles and Nuclei Lett.— 2000.— V. 3 [100].— P. 48–61.
- [25] Ignatovich V.K., Radu F. Theory of neutron channeling in resonant layer of multilayer systems // Phys. Rev. B.— 2001.— V. 64.— P. 205408.
- [26] Bloch J.-F., Ignatovich V.K. A new approach to bound states in potential wells // Am. J. Phys.— 2001.— V. 69.— P. 1177.
- [27] Golub R., Yoshiki H. Ultracold anti-neutrons. 1. The approach to the semiclassical limit // Nucl. Phys.— 1989.— V. A501.— P. 869–876.
- [28] Ландау Л.Д., Либшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория.— М.: Наука, 1989.— С. 106.
- [29] Игнатович В.К. Новый метод решения одномерного уравнения Шрёдингера.— ОИЯИ, Р4-87-878.— Дубна, 1987.
- [30] Parratt L.G. // Phys. Rev.— 1954.— V. 95.— P. 359.
- [31] Игнатович В.К., Терехов Г.И. Удержание УХН в плоской гравимагнитной ловушке.— ОИЯИ, Р4-10102.— Дубна, 1976.
- [32] Игнатович В.К., Никитенко Ю.В. Физические особенности действия гравитационного спектрометра ультрахолодных нейтронов.— ОИЯИ, Р3-87-832.— Дубна, 1987.
- [33] Игнатович В.К. Диффузия ультрахолодных нейтронов по нейtronоводу в присутствии гравитационного поля.— ОИЯИ, Р4-87-402.— Дубна, 1987.
- [34] Голиков В.В., Игнатович В.К., Никитенко Ю.В. Диффузия ультрахолодных нейтронов в разветвленном нейtronоводе.— ОИЯИ, Р3-88-48.— Дубна, 1988.
- [35] Goos F., Hänchen H. Ein neuer und fundamentaler Versuch zur Totalreflexion // Ann. der Phys.— 1947.— B. 1, Hf. 6.— S. 333–346.
- [36] Goos F., Hänchen H. Neumessung des Strahlversetzungseffekten bei Totalreflexion // Ann. der Phys.— 1949.— B. 5, Hf. 5.— S. 251–252.

- [37] Кухарчик П.Д., Сердюк В.М., Титовицкий И.А. Полное внутреннее отражение гауссова светового пучка // ЖТФ.— 1999.— Т. 69.— С. 74.
- [38] Korneev D.A., Bodnarchuk V.I., Yaradaikin S.P., Peresedov V.F., Ignatovich V.K., Menelle A., Gähler R. Refelectometry study of the coherent properties of neutron // Physica B.— 2000.— V. 276–278.— P. 973–974.
- [39] Ignatovich V.K. // Письма в ЖЭТФ.— 1978.— Т. 28.— С. 311.
- [40] Korneev D.A., Bodnarchuk V.I., Ignatovich V.K. Off-specular neutron reflection from magnetic media with nondiagonal reflectivity matrices // Письма в ЖЭТФ.— 1996.— Т. 63.— С. 900 (J. Exp. Theor. Phys. Lett.— 1996.— V. 63.— P. 944); Proc. of the Int. symp. on advance in neutron optics and related research facilities. (Neutron Optics in Kumatori '96) // J. Phys. Soc. Japan.— 1996.— V. 65, Suppl. A.— P. 7–12.
- [41] Felcher G.P. et al. // Nature.— 1995.— V. 377.— P. 409.; Felcher G.P. et al. // Physica B.— 1996.— V. 221.— P. 494.; Felcher G.P. Polarized neutron reflectometry—a historical perspective // Physica B.— 1999.— V. 267–268.— P. 154.
- [42] Aksenov V.L. et al. // Physica B.— 1997.— V. 234–236.— P. 513.
- [43] Fredrikze H. et al. // Physica B.— 1998.— V. 248.— P. 157.
- [44] Aksenov V.L., Nikitenko Yu.V., Kozhevnikov S.V. Spin-flip spatial neutron beam splitting in magnetic media // Physica B: Condensed Matter.— 2001.— V. 297, Iss. 1–4.— P. 94–100.
- [45] Aksenov V.L., Lauter-Pasyuk V.V., Lauter H., Nikitenko Yu.V., Petrenko A.V. Polarized neutrons at pulsed sources in Dubna // Physica B: Condensed Matter.— 2003.— V. 335, Iss. 1–4.— P. 147–152.
- [46] Aksenov V.L., Nikitenko Yu.V. Neutron interference at grazing incidence reflection. Neutron standing waves in multilayered structures: applications, status, perspectives // Physica B: Condensed Matter.— 2001.— V. 297, Iss. 1–4.— P. 101–112.
- [47] Аксенов В.Л., Игнатович В.К., Никитенко Ю.В. Нейтронные стоячие волны в слоистых системах // Кристаллография.— 2006 (в печати).
- [48] Radu F., Ignatovich V.K. Generalized matrix method for the transmission of neutrons through multilayer magnetic systems with noncollinear magnetization // Physica B.— 1999.— V. 267–268.— P. 175–180.
- [49] Крупчицкий П.А. Фундаментальные исследования с поляризованными нейtronами.— М.: Энергоатомиздат, 1985.
- [50] Jones T.J.L., Williams W.G. Spin flippers for thermal neutrons.— RL-77-079/A.— 1977.
- [51] Dabbs J.W.T., Roberts L.D., Bernstein S. Report ORNL-CF-55-5-126.— 1955.
- [52] Драбкин Г.М., Забидаров Е.И., Касман Я.А., Окороков А.И. // ЖЭТФ.— 1969.— Т. 56.— С. 479 (Soviet Phys. JETP.— 1969.— V. 29.— P. 261).
- [53] Корнеев Д.А. Спин-флиппер с протяженной рабочей областью для немонокроматических пучков нейтронов.— ОИЯИ, Р13-12362.— Дубна, 1979.
- [54] Korneev D.A. A new spin-flipper with a prolonged working area for non-monochromatic neutron beams // Nucl. Instr. and Meth.— 1980.— V. 169.— P. 65–68.

- [55] Корнеев Д.А., Кудряшов В.А. Способ определения вероятности реверса при прохождении нейтрона через спин-флиппер.— ОИЯИ, Р3-80-65.— Дубна, 1980.
- [56] Корнеев Д.А. Экспериментальное определение физических характеристик спин-флиппера с протяженной рабочей областью.— ОИЯИ, Р3-80-350.— Дубна, 1980.
- [57] Korneev D.A., Kudriashov V.A. Experimental determination of the characteristics of a spin-flipper with a prolonged working area // Nucl. Instr. and Meth.— 1981.— V. 179.— P. 509–513.
- [58] Mezei F. // Z. Phys.— 1972.— V. 255.— P. 146.
- [59] Schmidt U., Abele H., Boucher A., Klein M., Stellmach C., Geltenbort P. // Phys. Rev. Lett.— 2000.— V. 84.— P. 3270.
- [60] Krüger E. Acceleration of polarized neutrons by rotating magnetic field // Nukleonika.— 1980.— V. 25.— P. 889–893.
- [61] Драбкин Г.М., Житников П.А. // ЖЭТФ.— 1960.— Т. 38.— С. 1013 (Sov. Phys. JETP.— 1960.— V. 38).
- [62] Golub R., Gähler R., Keller T. A plane wave approach to particle beam magnetic resonance // Am. J. Phys.— 1994.— V. 62.— P. 779–788.
- [63] Ignatovich V.K., Ignatovich F.V. The Krüger problem and neutron spin games // Am. J. Phys.— 2003.— V. 71.— P. 1013–1024; ОИЯИ, Е4-2002-121.— Дубна, 2002.
- [64] Felber J., Gähler R., Golub R., Hank P., Ignatovich V., Keller T., Rauch U. Neutron time interferometry // Foundation of Phys.— 1999.— V. 29, N. 3.— P. 381–396.
- [65] Hino M., Achiwa N., Tasaki S., Ebisawa T., Kawai T., Yamazaki D. Measurement of spin-precession angles of resonant tunneling neutrons // Phys. Rev. A.— 2000.— V. 61.— P. 013607.
- [66] Aksenov V.L., Dokukin E.B., Kozhevnikov S.V., Nikitenko Yu. V. Spin-precessor intended for microstructure investigations at ultrasmall-angle neutron spectrometer // Physica B: Condensed Matter.— 2004.— V. 345, N. 1–4.— P. 254–257.
- [67] Lauter H.J., Toperverg B.P., Lauter-Pasyuk V., Petrenko A., Aksenov V. Larmor precession reflectometry // Physica B: Condensed Matter.— 2004.— V. 350, Iss. 1–3, Suppl. 1.— P. E759–E762.
- [68] Ebisawa T., Yamazaki D., Tasaki S., Kawai T., Hino M., Akiyoshi T., Achiwa N., Otake Y. Quantum beat experiments using a cold neutron spin interferometer // J. Phys. Soc. Japan.— 1998.— V. 67.— P. 1569–1573.
- [69] Achiwa N., Shirozu G., Ebisawa T., Hino M., Tasaki S., Kawai T., Yamazaki D. Time beat neutron spin interferometry before and after analyzer // J. Phys. Soc. Japan.— 2001.— V. 70, Suppl. A.— P. 436–438.
- [70] Golub R., Gähler R., Habicht K., Klimko S. Bunching of continuous neutron beams // Phys. Lett. A.— 2006.— V. 349,— Iss. 1–4.— P. 59–66.
- [71] Игнатович В.К., Останевич Ю.М., Подгорецкий М.И. Способ получения голограмм без опорного пучка // Гос. реестр изобретений СССР. — 08.01.1980.— Авт. свид. № 745271 (08.01.1979).
- [72] Открытия, изобретения, промышленные образцы, товарные знаки: Бюллетень.— 1980.— Т. 24.— С. 351.

- [73] *Gähler R., Golub R.* Neutron spin optics: a thought experiment with applications // Phys. Lett. A.— 1996.— V. 213, Iss. 5–6.— P. 239–244.
- [74] *Cser L., Török G., Krexner G., Sharkov I., Faragó B.* Holographic imaging of atoms using thermal neutrons // Phys. Rev. Lett.— 2002.— V. 89. P. 175504.
- [75] *Sur B., Anghel V.N.P., Rogge R.B., Katsaras J.* Diffraction pattern from thermal neutron incoherent elastic scattering and the holographic reconstruction of the coherent scattering length distribution // Phys. Rev. B.— 2005.— V. 71. P. 014105.
- [76] *Игнатович В.К.* Многоволновой алгебраический подход Дарвина к динамической теории дифракции // Кристаллография.— 1992.— Т. 37, № 5.— С. 1100–1112 (*Ignatovich V.K.* Multiwave algebraic Darwin method in dynamic theory of diffraction // Sov. Phys. Crystallogr.— 1992.— V. 37, N. 5.— P. 588).
- [77] *Бэкон Дж.* Дифракция нейтронов.— М.: Иностранный литература, 1957.
- [78] *Турчин В.Ф.* Медленные нейтроны.— М.: Госатомиздат, 1963.
- [79] *Пинскер З.Г.* Рентгеновская кристаллооптика.— М.: Наука, 1982.
- [80] *Беляков В.А.* Дифракционная оптика периодических сред сложной структуры.— М.: Наука, 1988.
- [81] *Юз Д.* Нейtronная оптика.— М.: Иностранный литература, 1955.
- [82] *Sears V.F.* Neutron optics.— New York; Oxford: Oxford University Press, 1989.
- [83] *Александров Ю.А., Шарапов З.И., Чер Л..* Дифракционные методы в нейтронной физике.— М.: Энергоиздат, 1981.
- [84] *Ignatovich V.K.* The ball lightning // Laser Phys.— 1992.— V. 2, N. 6.— P. 991–996.
- [85] *Silbar R.R., Reddy S.* Neutron stars for undergraduates // Am. J. Phys.— 2004.— V. 72.— P. 892–905.
- [86] *Ignatovich V.K.* Neutronstriction in neutron stars // arXiv: astro-ph/0311471.— 2006.
- [87] *Ignatovich V.K.* Neutron stars without gravity // Proc. of the XXXVII–VIII Winter school in PINPI on physics of atomic nuclei and elementary particles.— St. Petersburg, 2004.— P. 446–466.
- [88] *Foldy L.L.* The multiple scattering of waves // Phys. Rev.— 1945.— V. 67.— P. 107–119.
- [89] *Lax M.* Multiple scattering of waves // Rev. Mod. Phys.— 1951.— V. 23.— P. 287–310.
- [90] *Кляцкин В.И.* Стохастические уравнения и волны в случайно-неоднородных средах.— М.: Наука, 1980.
- [91] *Yoneda Y.* Anomalous surface reflection of X-rays // Phys. Rev.— 1963.— V. 131.— P. 2010.
- [92] *Свергун Д.И., Фейгин Л.А.* Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние.— М.: Наука, 1986.
- [93] *King S.M.* Small angle neutron scattering // <http://www.isis.rl.ac.uk/largescale/loq/documents/sans.htm>.
- [94] *Gilbert R.J.C.* Small angle neutron scattering // <http://www.strubi.ox.ac.uk/people/gilbert/sans.html>.

- [95] Modern aspects of small angle scattering / H. Brumberger (ed.). — Netherlands: Kluwer Academic Press, 1995.
- [96] *Sinha S.K.* Small angle and surface scattering from porous and fractal materials // Proc. of the Sixth summer school on neutron scattering. Complementarity between neutron and synchrotron X-ray scattering. / Furrer A. (ed.).— Singapore; New Jersey; London; Hong Kong: World Scientific, 1998.— P. 251–281.
- [97] *Ignatovich V.K.* Measuring surface roughness in transmission geometry // Proc. SPIE. Scattering and surface roughness III. / Zu-Han Gu, A.A. Maradudin (eds.).— 2000.— V. 4100.— P. 190–198.
- [98] *Radu F., Leiner V., Westerholt K., Zabel H., McCord J., Vorobiev A., Major J., Jullien D., Humblot H., Tasset F.* Magnetic induction and domain walls in magnetic thin films at remanence // J. Phys.: Condens. Matter.— 2005.— V. 17.— P. 1711–1718.
- [99] *Radu F., Vorobiev A., Major J., Humblot H., Westerholt K., Zabel H.* Spin-resolved off-specular neutron scattering from magnetic domain walls using the polarized ^3He gas spin filter // Physica B.— 2003.— V. 335.— P. 63–67.
- [100] *Radu F., Vorobiev A., Jullien D., Humblot H., Major J., McCord J., Leiner V., Tasset F., Westerholt K., Zabel H.* Spin-resolved off-specular neutron scattering from ripple magnetic domains using polarized ^3He gas neutron spin filter // Phys. Rev. B (to be published).
- [101] *Radu F., Etzkorn M., Leiner V., Schmitte T., Schreyer A., Westerholt K., Zabel H.* Polarised neutron reflectometry study of Co/CoO exchange-biased multilayers // Appl. Phys. A.— 2002.— V. 74, Suppl.— P. S1570–S1572.
- [102] *Zabel H.* Neutron reflectivity of spintronic materials // Materials Today.— 2006.— V. 9.— P. 42.
- [103] *Игнатович В.К., Шабалин Е.П.* Альбедо нейтронов.— ОИЯИ, Р4-2005-107.— Дубна, 2005.
- [104] *Кейз К., Цвайфель П.* Линейная теория переноса.— М.: Мир, 1972.
- [105] *Бекурц К., Виртиц К.* Нейтронная физика.— М.: Атомиздат, 1968.— С. 119.
- [106] *Гермогенова Т.А. и др.* Альбедо нейтронов.— М.: Атомиздат, 1973.
- [107] *Артемьев В.А.* Оценка критических параметров реакторов на тепловых нейтронах с активной зоной изnanoструктурного материала // Вопр. атом. науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 2003.— № 1–2.— С. 7–12.
- [108] *Артемьев В.А.* Оценка критических параметров реакторов на тепловых нейтронах с активной зоной из nanoструктурного материала // Атомная энергия.— 2003.— Т. 94, № 3.— С. 231–233.
- [109] *Bouchaud J.-Ph., Georges A.* Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models, and physical applications // Phys. Reports.— 1990.— V. 195, N. 4, 5.— P. 131.
- [110] *Ignatovich V.K.* Contradictions in scattering theory // Concepts of Phys.— 2004.— V. 1.— P. 51.
- [111] *Marshall W., Lovesey S.W.* Theory of thermal neutron scattering.— Oxford: Clarendon Press, 1971.

- [112] *Lovesey S.W.* Theory of neutron scattering from condensed matter.— Oxford: Clarendon Press, 1984.
- [113] *Goldberger M.R., Watson K.W.* Collision theory.— New York; London; Sydney; Toronto: John Wiley & Sons, 1964.
- [114] *Taylor J.R.* Scattering theory. The quantum theory of nonrelativistic collisions.— New York; London; Sydney; Toronto: John Wiley & Sons, 1972.
- [115] *Broglie L. de.* Non-linear wave mechanics: a causal interpretation.— Amsterdam: Elsevier, 1960.
- [116] *Ignatovich V.K., Utsuro M.* Tentative solution of UCN problem // Phys. Lett. A.— 1997.— V. 225.— P. 195–202.
- [117] *Utsuro M., Ignatovich V.K.* Experimental test of the de Broglie wavepacket description of the neutron // Phys. Lett. A.— 1998.— V. 246.— P. 7–15.
- [118] *Fetter A.L., Walecka J.D.* Quantum theory of many-particle systems.— Boston: McGraw-Hill, 1971.
- [119] *Ignatovich V.K.* On uncertainty relations and interference in quantum and classical mechanics // Concepts of Phys.— 2006.— V. III.— P. 11.
- [120] *Sanz A.S., Borondo F., Miret-Artes S.* Particle diffraction studied using quantum trajectories // J. Phys.: Condensed Matter.— 2002.— V. 14.— P. 6109–6145.
- [121] *Ignatovich V.K.* Apocrypha of standard scattering theory (SST) and quantum mechanics of the de Broglie wave packet // Proc. of the XXXVI winter school in PINPI on physics of atomic nuclei and elementary particles.— St. Petersburg, 2002.— P. 347–380; Proc. of ISINN-9.— Dubna, 2001.— P. 116–127.
- [122] *Genin R., Beil H., Signarbieux C.* et al. Détermination des sections efficaces d'absorption et de diffusion des gaz rares pour les neutrons thermique // Le Journal de physique et le radium.— 1963.— V. 24.— P. 21.
- [123] *Utsuro M.* et al. An experimental search of subcritical transmission of very cold neutrons (VCN) described by the de Broglie wave-packet // Proc. of ISINN-7.— Dubna, 1999.— P. 110–125.
- [124] *Ignatovich V.K.* Neutron reflection from condensed matter, the Goos–Haenchen effect and coherence // Phys. Lett. A.— 2004.— V. 322.— P. 36–46.

Предметный указатель

- Амплитуда рассеяния, 8, 113
когерентная, 153
- Анализаторы поляризации, 79
- Блоха
фазовый множитель, 24, 118
волновое число, 125
волновой вектор, 22, 24, 118, 135
в потенциале Кроннига–Пенни, 29
- Бора ядерный магнетон, 63
- Брэгга волновое число, 125
- Дарвина «столик», 30, 125
- Диэлектрическая проницаемость, 1
- Дифрагированные волны, 116
- Дифракция
Брэгга, 24, 124
незеркальная, 128
нулевого порядка, 30
порядка n , 29
потенциал Кроннига–Пенни, 30
зеркальная, 124
- Брэгга и Лауэ, 133
- Лауэ, 132
симметричная, 140
динамическая, 135
двухволновое приближение, 137
кинематическая, 135
на кристаллической плоскости, 116
на монокристалле, 117, 129
одноволновое приближение, 136
- Дисперсионные соотношения, 1
- Эффект
Бормана, 133
Кагана–Афанасьева, 133
- Электрический дипольный момент нейтрана, 96
- Электрострикция, 155
- Фазы r и t , 20
- Ферми псевдопотенциал, 10, 12, 134
- Флиппер, 79
- Френеля принцип, 111
- Фундаментальные вопросы, 66, 70
- Функция
Грина
- одномерного уравнения, 53
ступенчатая, 2
- Голограмма, 104
- Гооса–Хенхен
незеркальное отражение, 59
смещение, 56, 57, 59, 61
- Канализование, 40
- Коэффициент
первичной экстинкции, 130
преломления, 8, 10
вторичной экстинкции, 130
- Кристаллические суммы, 115
- Кривая отражения, 16
- Крюгера задача, 81, 85, 86
- Линейно осциллирующее поле, 83
- Магнитная стрелка, 63
- Матрица диадная, 119
- Матричный метод, 51
расчета магнитной системы, 76
- Маятниковое решение, 133
- Метод непрерывных дробей, 50
- Модуляция пучка разностью двух частот, 99
- Мозаичные кристаллы, 130
- Нейтроны ультрахолодные, 7
аномалия, 12
потери, 12, 153
- Нейтронная звезда, 156
- Нейтронострекция, 156
- Нелинейность, 155
- Оптическая теорема, 142, 145
- Отражение
антиферромагнитное, 33
ферромагнитное, 33
от N симметричных периодов, 25
от двух зеркал
магнитных, 72
несимметричных, 18
от магнитного зеркала, 64, 71
амплитудная матрица отражения, 68
от магнитной периодической системы, 73
от полубесконечного периодического потенциала

- несимметричного, 26
- симметричного, 23, 24
- от потенциала Кроннига–Пенни, 29
- полное, 7, 11
- во внешнем поле, 54
- Паули матрицы, 63
 - свойства, 67
- Перенормировка амплитуды рассеяния, 116, 145
- Периодические системы
 - алгебраический подход, 23
 - двуухволновое приближение, 23
 - одноволновое приближение, 22
 - стандартный подход, 22
- Плоская волна, 1
 - фонона, 1
 - фотона, 1
 - нейтрона, 1
 - спинорной частицы, 65
- Полупрозрачные зеркала, 17
- Поляризаторы, 78
- Потенциал
 - Эккарта, 48
 - Кроннига–Пенни, 27
 - рассеяние на одном периоде, 27
 - несимметричный, 18, 19
 - оптический, 1, 7, 12, 150
 - дальнодействие, 12
 - мнимая часть, 153
 - несимметричный, 26
 - поправки, 151
- Потенциальная ступенька, 5
- Преобразование непрерывного потока
 - в пульсирующий, 100
- Принцип детального равновесия, 148
- Принципы голограммии, 103
- Пропускание
 - N симметричными периодами, 25
 - двумя зеркалами
 - несимметричными, 18
 - симметричными, 18
- Прямоугольный потенциальный барьер, 13
- Раби формула, 81
- Рамсея метод разделенных полей, 95
- Рассеяние
 - когерентное, 153
 - на двух фиксированных центрах, 113
 - на фиксированном центре, 113
 - на кристаллической плоскости, 114, 150
 - на многих фиксированных центрах, 114
 - на монокристалле, 151
- некогерентное, 153
- неупругое, 2
- упругое, 2
- Расщепление потенциала, 18
- Размытие границ, 48
- Резонансы
 - формула Брейта–Вигнера, 37
 - при полном отражении, 39
 - распад, 38
 - система двух барьёров, 36
- Самофокусировка, 155
- Сферическая волна, 8, 9, 113
 - Фурье-представление
 - двумерное, 10, 103
 - трехмерное, 9
 - уравнение, 9
- Синглетное состояние, 156
- Скорость
 - фазовая, 1
 - групповая, 1
- Снеллиуса закон, 11
- Спин-эхо, 97, 99
 - резонансное, 99
- Спин-ротор, 79
 - π , 95
 - с постоянными полями, 79
 - Корнеева, 79
 - Мезеи, 79
 - токовая фольга, 79
 - с радиочастотными полями, 80
 - с постоянными полями
 - Драбкина, 79
- Спинор, 63
- Спиновая стрелка, 63
- Столкновение двух частиц, 6
- Стоячие волны, 72
- Структурный фактор, 30, 32
- Суперпозиция состояний, 66
- Суперзеркала, 33
- Свойства амплитуд отражения и пропускания, 19
- Связанные состояния
 - прямоугольная потенциальная яма, 44
 - расщепление, 47
 - зоны в периодическом потенциале, 46
- Шаровая молния, 156
- Теория рассеяния
 - многократного, 113
- Теория возмущений
 - рассеяние на одном периоде, 53
- Тройное лучеотражение, 69

- Тюнер, 96
Угловая ширина брэгговского пика, 130
Унитарность, 20, 142
 рассеяние на центре, 144
 рассеяние на кристаллической плоскости, 146
 условие, 6
 на границе раздела, 6
Уравнение
 Шредингера
 нестационарное, 4
 одномерное, 5
 стационарное, 2, 4
Волна спиновой прецессии, 92, 105
Восстановление поля по голограмме, 104
Вращающееся радиочастотное поле, 81
Запрещенные рефлексы, 31
Звуковая волна вдоль пучка нейтронов, 92

Оглавление

Введение	1
1 Рассеяние скалярной частицы на одномерных системах	4
1.1 Отражение и преломление потенциальной ступенькой	5
1.1.1 Аналогия с упругим столкновением двух частиц в классической механике	6
1.1.2 Условие унитарности	6
1.1.3 Полное отражение	7
1.2 Оптический потенциал и УХН	7
1.2.1 Рассеяние нейтрона на фиксированном ядре	7
1.2.2 Коэффициент преломления	8
1.2.3 Оптический потенциал	12
1.3 Рассеяние на прямоугольном потенциальном барьере	13
1.3.1 Геометрическая прогрессия многократных переотражений [13]	14
1.3.2 Другой способ	15
1.3.3 Волновая функция внутри барьера	15
1.3.4 Простейший рефлектометрический эксперимент	16
1.4 Алгебра рассеяния на полупрозрачных зеркалах	17
1.4.1 Сближение зеркал	18
1.4.2 Расщепление прямоугольных барьеров	19
1.5 Свойства амплитуд отражения и пропускания одномерными потенциалами	19
1.5.1 Несимметричные потенциалы	19
1.5.2 Соотношение между фазами r и t	20
1.6 Периодические системы	21
1.6.1 Стандартный подход к периодическим средам	22
1.6.2 Алгебраический подход	23
1.6.3 Конечное число периодов	25
1.6.4 Несимметричный период	26
1.6.5 Примеры периодических потенциалов	27
1.6.6 Суперзеркала	33
1.7 Примеры применения алгебры	36
1.7.1 Резонансное рассеяние	36
1.7.2 Резонанс в системе двух неодинаковых барьеров	37
1.7.3 Формула Брейта–Вигнера	37
1.7.4 Распад квазисвязанной системы	38
1.7.5 Резонансы при полном отражении	39
1.8 Канализование	40
1.8.1 Волновая функция внутри канала	40
1.8.2 Волновая функция над неосвещенной поверхностью	42
1.9 Связанные состояния в периодических потенциалах	44
1.9.1 Уровни в прямоугольной потенциальной яме [26, 27]	44

1.9.2	Зоны в периодическом потенциале	46
1.9.3	Расщепление уровней в системе из двух потенциальных ям	47
1.10	Потенциалы общего вида	48
1.10.1	Аналитическое описание отражения от комбинации прямоугольного потенциала и потенциалов Эккарта	48
1.10.2	Метод непрерывных дробей	50
1.10.3	Матричный метод расчета рассеяния на произвольном потенциале . .	51
1.10.4	Теория возмущений	53
1.10.5	Отражение от зеркал при наличии внешнего поля	54
1.11	Смещение Гооса–Хенхен	56
1.11.1	Плоская волна	57
1.11.2	Ограниченнная волновая функция	57
1.11.3	Полное отражение	58
1.11.4	Неполное отражение	59
1.11.5	Смещение ГХ при отражении от слоя на подложке	59
1.11.6	Смещение ГХ для волнового пакета	61
2	Одномерное рассеяние нейтрона со спином	63
2.1	Отражение от магнитного зеркала	64
2.1.1	Плоская волна в однородном магнитном поле	65
2.1.2	Решение уравнения (2.9)	66
2.1.3	Свойства матриц Паули	67
2.1.4	Матричные элементы матрицы отражения	68
2.1.5	Тройное расщепление пучка при отражении	69
2.2	Алгебра для магнитных зеркал	71
2.2.1	Магнитное зеркало конечной толщины	71
2.2.2	Система двух магнитных зеркал	72
2.2.3	Стоячие волны	72
2.2.4	Периодическая система зеркал	73
2.2.5	Отражение от геликоидальной системы	73
2.3	Матричный метод расчета многослойных магнитных систем	76
2.4	Поляризаторы, анализаторы и спин-ротаторы	78
2.4.1	Поляризаторы	78
2.4.2	Анализаторы	79
2.4.3	Спин-ротаторы	79
2.4.4	Резонансные спин-ротаторы	80
2.4.5	Неупругое взаимодействие нейтрона с радиочастотным полем	83
2.4.6	Решение задачи Крюгера	86
2.4.7	Приближенные выражения для матрицы пропускания (2.126) . . .	89
2.5	Игры с поляризованными нейtronами	91
2.5.1	Волна спиновой прецессии и модуляция интенсивности после $\pi/2$ -ротатора	92
2.5.2	π -Ротатор	95
2.5.3	Метод разделенных полей Рамсея	95
2.5.4	Спектрометр на частотном биении интенсивности	99
2.5.5	Преобразование непрерывного поляризованного пучка нейтронов в пульсирующий	100
2.5.6	Нейтронная голограмия	103

3 Динамическая дифракция в трехмерных периодических средах	111
3.1 Дифракция на кристаллической плоскости	112
3.1.1 Теория многократного рассеяния	113
3.1.2 Рассеяние на бесконечной кристаллической плоскости	114
3.1.3 Рассеянное поле кристаллической плоскости	116
3.2 Дифракция на полубесконечном монокристалле	117
3.2.1 Немного математики. Свойства диадных матриц	119
3.2.2 Собственные векторы и собственные значения оператора \hat{X}	120
3.2.3 Решение уравнения (3.27)	123
3.3 Дифракция Брэгга	124
3.3.1 Зеркальное брэгговское отражение	124
3.3.2 Незеркальное брэгговское отражение	128
3.3.3 Дифракция на кристалле конечной толщины	129
3.3.4 Полное отражение мозаичного кристалла	130
3.4 Дифракция Лауэ	132
3.5 Стандартное описание дифракции в кристалле	134
3.5.1 Псевдопотенциал Ферми	134
3.5.2 Кинематическая теория дифракции	135
3.6 Стандартная динамическая теория дифракции	135
3.7 Сравнение двух методов	142
3.8 Унитарность и оптическая теорема	142
3.8.1 Унитарность при рассеянии на центре	144
3.8.2 Унитарность в случае рассеяния на кристаллической плоскости	146
3.8.3 Принцип детального равновесия	148
3.9 Оптический потенциал u_0	150
3.9.1 Рассеяние на кристаллической плоскости при низких энергиях	150
3.9.2 Рассеяние при низких энергиях на полубесконечном кристалле	151
3.9.3 Поправки к оптическому потенциалу	151
3.9.4 Оптический потенциал и амплитуда рассеяния $b(q)$	153
3.9.5 Лирическое отступление об оптическом потенциале	154