

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ им. Х.М. БЕРБЕКОВА

2009

Вып. 7

АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ

Учредитель

*Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
«Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова
360004 Нальчик, ул. Чернышевского 173*

*Журнал зарегистрирован
в Министерстве РФ по делам печати, телерадиовещания
и средств массовых коммуникаций в 2003 г.
(свидетельство ПИ №77-16938 от 28 ноября 2003 г.)*

Адрес редакции: 360004 Нальчик, ул. Чернышевского 173
Телефон: (866-2)-423777 Факс: (095)-9563504 E-mail: avse@kbsu.ru

Редакционная коллегия:

Главный редактор: Хапачев Ю.П. – доктор физ.-мат. наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик

Зам. главного редактора: Дышеков А.А. – доктор физ.-мат. наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик

- | | |
|-----------------|--|
| Абрамов А.М. | – чл.-корр. Российской академии образования, Московский институт развития образования, г. Москва |
| Аристов В.В. | – чл.-корр. РАН, Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов, г. Москва |
| Бахмин В.И. | – исполнительный директор Института Открытое общество, г. Москва |
| Григорьев М.С. | – доктор химических наук, Институт физической химии РАН, г. Москва |
| Ивахненко Е.Н. | – доктор философских наук, профессор, РГГУ, г. Москва |
| Ильяшенко Ю.С. | – доктор физ.-мат. наук, профессор, МИРАН, г. Москва |
| Карамурзов Б.С. | – доктор технических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик |
| Кетенчиев Х.А. | – доктор биологических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик |
| Кочесоков Р.Х. | – доктор философских наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик |
| Крайзман В.Л. | – доктор физ.-мат. наук, профессор, Ростовский госуниверситет, г. Ростов-на-Дону |
| Лисичкин Г.В. | – доктор химических наук, профессор, МГУ, г. Москва |
| Лю Цзо И | – доктор технических наук, профессор, Технологический университет, г. Гуанджоу, Китай |
| Молодкин В.Б. | – чл.-корр. НАН Украины, профессор, Институт металлофизики НАН Украины, г. Киев |
| Оранова Т.И. | – доктор химических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик |
| Ошхунов М.М. | – доктор технических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик |
| Савин Г.И. | – академик РАН, профессор, Отдел информатики и вычислительной техники РАН, г. Москва |
| Скворцов Н.Г. | – доктор социологических наук, профессор, С.-Пб. госуниверситет, г. Санкт-Петербург |
| Ткачук В.А. | – чл.-корр. РАН, академик АМН, профессор, МГУ, г. Москва |
| Тлибеков А.Х. | – доктор технических наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик |
| Филатов В.П. | – доктор философских наук, профессор, Российский государственный гуманитарный университет, г. Москва |
| Шустова Т.И. | – доктор биологических наук, профессор, С.-Пб. НИИ уха, горла, носа и речи, г. Санкт-Петербург |
| Шхануков М.Х. | – доктор физ.-мат. наук, профессор, КБГУ, г. Нальчик |

НЕСТАНДАРТНАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

А.А. Дышеков

В работе представлен новый вариант динамической теории дифракции рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. Теория основывается на прямом анализе уравнений Максвелла с учетом модельных представлений о характере взаимодействия рентгеновского излучения с кристаллом, соответствующих теории Эвальда-Лауэ. В качестве математического метода нахождения приближенного решения дифракционного уравнения используется модификация метода многих масштабов. Полученные результаты соответствуют известным выводам динамической теории дифракции за пределами области полного внешнего отражения. Получены выражения для амплитудных коэффициентов отражения дифрагированной и зеркальной волны для произвольных углов, включая область полного внешнего отражения.

Введение

В теории динамического рассеяния рентгеновских лучей в кристалле можно выделить несколько основных подходов.

Исторически первой является теория Дарвина. Этот подход основывается на модели кристалла по Брэггу, когда кристалл рассматривается как семейство параллельных кристаллических плоскостей. Отражение рентгеновской волны рассматривается как результат последовательного прохождения и многократного отражения от плоскостей. Определение амплитуды дифрагированной волны сводится при этом к решению рекуррентных соотношений, связывающих между собой амплитуды прошедших и рассеянных волн при прохождении через данную атомную плоскость. По существу теория Дарвина представляет собой прямую экстраполяцию оптической задачи о распространении света в слоистой среде на случай рентгеновского диапазона длин волн. Вопрос о допустимости подобной экстраполяции при этом не ставится.

Следующим шагом в развитии теоретических представлений о характере распространения рентгеновских волн в кристалле в условиях динамического рассеяния явилась теория Эвальда-Лауэ. В рамках этой теории впервые формулируются модельные представления о взаимодействии рентгеновского излучения с кристаллом, имея ввиду, что длина рентгеновской волны сравнима с межатомными расстояниями. Тем самым, стандартное континуальное приближение электродинамики сплошных сред оказывается неприменимым и требуется учет рассеяния на отдельных зарядах. Как известно, подобный учет приводит к формализму трехмерно-периодической диэлектрической проницаемости $\epsilon(\mathbf{r})$ или поляризуемости $\chi(\mathbf{r})$ с периодами решетки кристалла. Теория Эвальда-Лауэ исходит из концепции единого волнового поля, которое возникает в кристалле в условиях динамического рассеяния. В двухволновом приближении волновое поле представляет собой суперпозицию преломленной и дифрагированной волн. Определение амплитуд поля сводится к решению некоторого дисперсионного уравнения, следующего из фундаментальных уравнений теории.

Несмотря на ряд безусловных достижений в интерпретации и теоретическом предсказании экспериментальных результатов по динамическому рентгеновскому рассеянию в кристаллах, как теория Эвальда-Лауэ, так и в особенности теория Дарвина, имеют принципиальное ограничение – они описывают динамическую дифракцию только в идеальных кристаллах. Здесь, пожалуй, можно привести лишь один эффективный пример выхода за пределы идеального кристалла в рамках теории Эвальда-Лауэ – теория динамической дифракции в ультразвуковых сверхрешетках, развитая Энтиным [1].

Необходимость учета всевозможных отклонений от идеальной периодичности в кристалле, и прежде всего деформаций, привела к созданию обобщенной динамической теории, развитой Такаги и Топеном. Она основывается на представлении волнового поля в виде су-

перпозиции проходящей и дифрагированной волн с медленно меняющимися амплитудами, зависящими от координат, что приводит к системе Такаги – системе дифференциальных уравнений, относительно амплитуд полей. Такой формализм дает возможность описания динамической дифракции в искаженном кристалле, поскольку в представлении волновых полей могут быть явно учтены нарушения идеальной периодичности. Соответственно, уравнения Такаги становятся системой дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами.

Существенно при этом, что система Такаги «укороченная» – в ней отброшены вторые производные амплитуд полей по координатам. С одной стороны, это значительно облегчает теоретическое рассмотрение и делает обозримыми решение ряда дифракционных задач в стандартных геометриях дифракции, когда подобное упрощение оказывается оправданным. С другой стороны, уравнения Такаги оказываются неприменимыми в условиях, скажем, скользящей геометрии дифракции; тогда приходится решать дифференциальные уравнения третьего или даже четвертого порядков [2].

Принципиальный недостаток процедуры «укорочения» уравнений связан с невозможностью корректной постановки граничных условий на границе кристалл-вакуум для амплитуд полей. Вместо известных классических условий непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей ставятся интуитивно ясные, но не согласующиеся с уравнениями Максвелла граничные условия типа задания нормальных компонент амплитуд полей на поверхности кристалла. Разумеется, решения таких граничных задач оказываются применимыми лишь для достаточно больших (точнее, значительно превышающих угол полного внешнего отражения) углах падения и выхода излучения.

В результате при рассмотрении дифракционных схем типа скользящей дифракции теория сталкивается с трудностями, связанными с необходимостью решения уравнений третьего или четвертого порядка, которые в случае кристалла с деформацией решетки становятся практически непреодолимыми.

Вместе с тем, уравнения Максвелла – это уравнения первого порядка, или, при переходе, например, к электрическому полю – второго порядка в «скалярном» случае одного волнового уравнения. Именно подобная структура уравнений согласуется с упомянутыми классическими граничными условиями. Это значит, что требование корректного учета граничных условий в любой теоретической схеме дифракции практически однозначно приводит к известной структуре волнового уравнения, следующего из уравнений Максвелла.

Таким образом, для преодоления указанных трудностей, необходимо строить теорию, прямо опирающуюся на уравнения Максвелла с применением модельных представлений о поляризуемости кристалла в рентгеновском диапазоне длин волн.

Физическая модель и основное уравнение

Модельные представления о кристалле и распространяющемся в нем рентгеновском излучении сводятся к следующему.

На кристалл из вакуума падает плоская монохроматическая волна. Граница кристалл-вакуум рассматривается как геометрическая, так что оказываются применимыми классические граничные условия из оптики.

Единое волновое поле в кристалле описывается с помощью фундаментальных уравнений Максвелла, дополненных материальным уравнением $\mathbf{D}=\epsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}$ с трехмерно-периодической с периодами решетки диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\mathbf{r})$. Тем самым мы предполагаем, что в рентгеновском диапазоне длин волн кристаллическая среда линейна и связь между $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$ локальна, то есть отсутствует пространственная и временная дисперсии. Кроме того, поскольку $\epsilon(\mathbf{r})$ (или $\chi(\mathbf{r})$) скаляр, то среда изотропна. Временной фактор также не принимается во внимание, тем самым исключается возможность некогерентного (в смысле изменения частоты излучения) рассеяния.

Как видно, указанные предположения вполне соответствуют модели, положенной в основу теории Эвальда-Лауэ, если не конкретизировать функциональный вид $\epsilon(\mathbf{r})$.

Уравнения Максвелла как уравнения электромагнитных волн в диэлектрике в отсутствие дисперсии могут быть записаны в виде (обозначения здесь и далее по возможности стандартные):

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}; \quad (1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{H} = 0; \quad (2)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (1 + \chi(\mathbf{r}')) \mathbf{E} = \frac{1}{c} (1 + \chi(\mathbf{r}')) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}; \quad (3)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 0. \quad (4)$$

Уравнения (1), (2) составляют первую пару, а (3), (4) – вторую пару. Эти уравнения дополняются материальными соотношениями

$$\mathbf{D} = \varepsilon(\mathbf{r}') \mathbf{E} = (1 + \chi(\mathbf{r}')) \mathbf{E}; \quad \mathbf{B} = \mu \mathbf{H} = \mathbf{H}. \quad (5)$$

Форма этих соотношений предполагает, что, как уже упоминалось, $\mathbf{D}$ и $\mathbf{E}$ связаны посредством ε (или χ) локальной зависимостью, не зависящей от частоты – нет дисперсии; и что среда немагнитна ($\mu=1$).

Предположим, что зависимость $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ от времени гармоническая:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}', t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}') \exp(-i2\pi\nu t); \quad \mathbf{H}(\mathbf{r}', t) = \mathbf{H}(\mathbf{r}') \exp(-i2\pi\nu t);$$

Это не всегда справедливо, например, при рассмотрении динамики решетки; тогда, строго говоря, необходимо решать систему (1)-(4). Учтем гармоничность в системе (1)-(4):

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -\frac{i2\pi\nu}{c} \mathbf{E} = -i2\pi k \mathbf{E}; \quad \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -i2\pi k \mathbf{H}.$$

Здесь и далее для экономии включаем множитель 2π в k : $2\pi k \rightarrow k$. Имеем систему:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = ik \mathbf{H}; \quad (6)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} (1 + \chi(\mathbf{r}')) \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = -ik(1 + \chi(\mathbf{r}')) \mathbf{E}.$$

Этой системой можно распорядиться двояко. Во-первых, можно исходить из (6) как базовой системы и развивать теорию первого порядка, в которой вектора $\mathbf{E}$ и $\mathbf{H}$ определяются одновременно как компоненты векторной матрицы-столбца. Такой подход, требующий применения методов дифференциального матричного исчисления, можно условно назвать «матричным». Во-вторых, можно анализировать лишь одну амплитуду (традиционно это $\mathbf{E}$). Такой вариант теории предполагает переход к одному векторному уравнению для $\mathbf{E}$; его можно условно назвать «скалярным».

Оба подхода, разумеется, приводят к одинаковым результатам, хотя в случае деформированного кристалла «матричный» вариант теории может оказаться предпочтительней. Здесь, однако, мы будем рассматривать только случай идеального кристалла, поэтому используем более привычный «скалярный» вариант.

От системы (6) стандартным путем приходим к одному уравнению:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= \operatorname{rot}(ik \mathbf{H}) = ik \operatorname{rot}(\mathbf{H}) = k^2 (1 + \chi(\mathbf{r}')) \mathbf{E}; \\ \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E} - k^2 (1 + \chi(\mathbf{r}')) \mathbf{E} &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

– это основное уравнение «скалярного» варианта теории.

Теперь необходимо сделать модельные предположения о $\chi(\mathbf{r}')$. Здесь можно поступить двояко. С одной стороны (более строгий, физический подход) $\chi(\mathbf{r}')$ вводится на основе микроскопических представлений о структуре твердого тела с применением квантовой механики. Однако этот путь очень быстро упирается в принципиальные сложности, которые обычно обходятся приближениями (в частности, одноэлектронным). С другой стороны, $\chi(\mathbf{r}')$ как поляризуемость может быть введена чисто феноменологически, как это делается в электродинамике сплошных сред, с одним, однако, существенным отличием: $\chi(\mathbf{r}')$ – функция координат, а не константа. Преимущества этого подхода – простота, как и во всякой феноменологии, и возможность ввести нарушения типа деформаций решетки согласованно с континуальной теорией упругости.

В данной работе мы рассмотрим случай идеального кристалла. Это даст возможность сопоставить выводы предлагаемого формализма с известными результатами динамической и кинематической теории, а также уточнить, что, собственно, представляет собой $\chi(\mathbf{r}')$ в классических вариантах теории.

Любое теоретическое построение рентгеновского волнового поля в кристалле должно учитывать важнейшее свойство $\chi(\mathbf{r}')$ – трехмерную периодичность с периодом решетки. Учет этого свойства в классических теориях естественно влечет за собой разложение $\chi(\mathbf{r}')$ в трехмерный ряд Фурье. Если быть последовательным, то необходимо в связи с этим ставить вопросы о соответствии ряда Фурье величине $\chi(\mathbf{r}')$, в частности сходимости ряда, количества членов ряда, потребных для адекватного представления $\chi(\mathbf{r}')$ и т.д. Источник этих трудностей кроется в претензии на знание (хотя бы в принципе) истинного значения $\chi(\mathbf{r}')$ и необходимости ее адекватной аппроксимации. Помимо этого фактора существует еще другой, связанный с описанием дифракции в реальном (с искажениями) кристалле. Наведение строгости в данном случае неминуемо ведет в разделы математики типа теории почти периодических функций [3]. Обычно при построении теории подобные трудности замалчиваются, предполагая (как правило, неявно) проводимые математические манипуляции корректными.

Можно, однако, поступить иначе – объявить (т.е. фактически постулировать), что $\chi(\mathbf{r}')$ имеет конкретный вид. Тем самым мы сознательно упрощаем ситуацию и вводим модель $\chi(\mathbf{r}')$, с перспективой дальнейшего уточнения и модификации.

Итак, выбираем модель кристалла $\chi(\mathbf{r}')$ в виде:

$$\chi(\mathbf{r}') = \chi_0 + \chi_H \exp(i2\pi\mathbf{H}\mathbf{r}') + \chi_{\bar{H}} \exp(-i2\pi\mathbf{H}\mathbf{r}')$$

Это фактически будет соответствовать 2-х волновому приближению теории дифракции.

Далее, как и для k , будем включать 2π в $\mathbf{H}$: $2\pi\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}$. Тогда для основного уравнения имеем:

$$\text{rot rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}') - k^2 (1 + \chi_0 + \chi_H \exp(i\mathbf{H}\mathbf{r}') + \chi_{\bar{H}} \exp(-i\mathbf{H}\mathbf{r}')) \mathbf{E}(\mathbf{r}') = 0. \quad (8)$$

Теперь приведем (8) к безразмерному виду. Это необходимо для корректного учета вклада различных членов в (8) при использовании методов теории возмущений. Процедура приведения к безразмерному виду предполагает выбор некоторого характерного пространственного масштаба. Очевидно, таковым в нашей задаче является параметр, определяющий обратную решетку – длина вектора обратной решетки:

$$\frac{\mathbf{H}}{H} = \mathbf{h}; \quad |\mathbf{h}| = 1; \quad \mathbf{H}\mathbf{r}' = \mathbf{h}\mathbf{H}\mathbf{r}' = \mathbf{h}\mathbf{r}; \quad \mathbf{r} = \mathbf{H}\mathbf{r}'.$$

$$\text{rot}_{r'} = H \text{rot}_r; \quad \text{rot}_{r'} \text{rot}_{r'} = H^2 \text{rot}_r \text{rot}_r$$

$$\text{rot rot } \mathbf{E}(\mathbf{r}) - \kappa^2 (1 + \chi_0 + \chi_H \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}) + \chi_{\bar{H}} \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r})) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0; \quad (8')$$

$$\kappa = \frac{k}{H}.$$

Уравнение (8) не поддается точному решению. Соответственно, требуется применить какой-либо способ приближенного решения. Есть два магистральных пути анализа уравнения (8). В первом случае, учитывая малость величины $\chi(\mathbf{r}')$, соотношение (8) представляется в виде неоднородного уравнения, правая часть которого рассматривается как малое возмущение, задающее поле падающей волны:

$$\text{rotrot } \mathbf{E}(\mathbf{r}') - \kappa^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}') = \chi(\mathbf{r}') \mathbf{E}(\mathbf{r}').$$

Приближенное решение ищется в пространстве вне рассеивающего кристалла на больших расстояниях от него в форме первого члена ряда борновского разложения. Оптический аналог этой задачи – дифракция Фраунгофера. Применимость такого подхода ограничивается малостью сечения рассеяния по сравнению с геометрической площадью сечения кристалла. Как известно, такой подход приводит к кинематической теории [4].

Во втором случае из уравнения (8) строятся два варианта динамической теории. В первом варианте решение (8) ищется в форме блоховской волны, представляемой в виде бесконечного ряда плоских волн с волновыми векторами, соответствующими преломленной волне и дифрагированным волнам в кристалле. Это блоховская волна интерпретируется как многоволновое решение динамической теории. Использование разложения $\chi(\mathbf{r}')$ в ряд Фурье в конечном итоге приводит к бесконечной системе фундаментальных уравнений алгебраического типа Эвальда-Лауэ. Поскольку решать бесконечную систему невозможно, приходится ограничиваться, как правило, двумя уравнениями, т.е. двухволновым приближением.

Во втором варианте теории решение (8) представляется в виде плоских волн с медленно меняющейся амплитудой; в результате двухволнового приближения получаются уравнения Такаги-Топена, которые можно интерпретировать как рекуррентные соотношения Дарвина, записанные в дифференциальной форме [5].

Здесь предлагается использовать новый подход к анализу основного уравнения (8). Физические предпосылки предлагаемого метода заключаются в следующем. Распространение рентгеновской волны в кристалле, не сопровождаемое появлением дополнительных рассеянных лучей, т.е. дифракции, адекватно описывается однородным волновым уравнением с $\varepsilon = 1 + \chi_0$. Это соответствует распространению рентгеновской волны в кристалле как непрерывной среде с показателем преломления $\sqrt{\varepsilon}$ по обычным законам оптики. Такую ситуацию в известном смысле можно назвать типичной. Напротив, появление дифрагированных лучей, требует выполнения определенных геометрических условий для волновых векторов и вектора обратной решетки. Очевидно, что за подобное кардинальное изменение картины волнового поля в кристалле отвечает фурье-компонента χ_H .

Таким образом, несмотря на то, что все величины $\chi_0, \chi_H, \chi_{\bar{H}} \sim 10^{-5} \div 10^{-6}$, что формально позволяет использовать их в качестве параметра возмущения, указанные физические предпосылки предписывают выбор в качестве параметра возмущения именно величину χ_H .

Прямое разложение и геометрические условия дифракции

Применим вначале простейший метод возмущений – прямое разложение по параметру χ_H :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \chi_H \mathbf{E}_1(\mathbf{r}) + \chi_H^2 \mathbf{E}_2(\mathbf{r}) + \dots$$

Ограничимся разложением первого порядка. Имеем:

$$\begin{aligned} & \text{rotrot } \mathbf{E}_0 + \chi_H \text{rotrot } \mathbf{E}_1 + \dots \\ & - (\kappa^2 (1 + \chi_0) + \kappa^2 \chi_H (\exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}) + \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r}))) (\mathbf{E}_0 + \chi_H \mathbf{E}_1 + \dots) = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Нулевое приближение соответствует нулевой степени параметра возмущения χ_H :

$$\begin{aligned} \text{rotrot } \mathbf{E}_0 - \kappa_0^2 \mathbf{E}_0 &= 0; \\ \kappa_0^2 &= \kappa^2 (1 + \chi_0). \end{aligned}$$

Решение этого векторного волнового уравнения выбираем в виде суперпозиции двух плоских волн:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}_{01}(\mathbf{r}) \exp(i\kappa_0 \mathbf{r}) + \mathbf{E}_{02}(\mathbf{r}) \exp(-i\kappa_0 \mathbf{r}); \\ (\kappa_0 \mathbf{E}_i) &= 0. \end{aligned}$$

Основания для такого выбора следующие. Нулевое приближение соответствует распространению плоской поперечной волны в сплошной среде с постоянной проницаемостью. При этом полную систему волн образуют две волны, распространяющиеся в противоположных направлениях – это своеобразный аналог единого поля в кристалле для случая «пустой» решетки. Направления распространения и амплитуды этих волн остаются неопределенными и задаются в дальнейшем граничными условиями на границе вакуум-кристалл.

Первое приближение получается приравниваем нулю всех членов (9), пропорциональных первой степени χ_H :

$$\begin{aligned} \text{rotrot } \mathbf{E}_1 - \kappa_0^2 \mathbf{E}_1 &= \kappa^2 \left(\exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}) + \frac{\chi_H}{\chi_H} \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r}) \right) \mathbf{E}_0 = \\ &= \kappa^2 \left(\exp(i(\kappa_0 + \mathbf{h})\mathbf{r}) + \frac{\chi_H}{\chi_H} \exp(i(\kappa_0 - \mathbf{h})\mathbf{r}) \right) \mathbf{E}_{01} + \\ &+ \kappa^2 \left(\exp(-i(\kappa_0 - \mathbf{h})\mathbf{r}) + \frac{\chi_H}{\chi_H} \exp(-i(\kappa_0 + \mathbf{h})\mathbf{r}) \right) \mathbf{E}_{02}. \end{aligned} \quad (10)$$

Мы получили неоднородное волновое уравнение. Согласно теории возмущений, необходимо найти его частное решение. Стандартный метод решения этой задачи опирается на интегральное представление (10) с помощью функции Грина (фундаментального решения). Такой подход нас не устраивает по следующей причине. Существенным является то, что решение в данном случае имеет вид сферической волны. Интерпретация сферической волны связана с наличием источника (пусть даже и фиктивного) рассеянной волны, локализованного в кристалле. С математической точки зрения это приводит к сингулярности типа $1/r$.

Вместе с тем, физический характер задачи и вид основного уравнения свидетельствуют о делокализации поля (с точностью до вектора обратной решетки $\mathbf{H}$) ввиду однородности среды. Такие соображения можно подтвердить более строго, используя векторный аналог теоремы Блоха для основного уравнения (8). Таким образом, частное решение необходимо искать в виде плоской волны.

Решим эту задачу элементарным методом, который, хотя и не отличается универсальностью, зато эффективен. Требуется найти частное решение уравнения вида:

$$\text{rotrot } \mathbf{E}_0 - \kappa_0^2 \mathbf{E}_0 = \mathbf{A} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}).$$

Учитывая, что в задаче имеется два выделенных направления $\mathbf{A}$ и $\mathbf{q}$, ищем его в виде:

$$\mathbf{E} = (\alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}).$$

Получим

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{E} &= \alpha [i\mathbf{q}\mathbf{A}] \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) + \beta [i\mathbf{q}\mathbf{q}] \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = i[\mathbf{q}\mathbf{A}] \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}); \\ \text{rotrot } \mathbf{E} &= -\alpha [\mathbf{q}[\mathbf{q}\mathbf{A}]] \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = -\alpha (\mathbf{q}(\mathbf{q}\mathbf{A}) - \mathbf{q}^2 \mathbf{A}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}); \end{aligned}$$

$$\alpha(\mathbf{q}(\mathbf{q}\mathbf{A}) - \mathbf{q}^2\mathbf{A}) - \kappa_0^2(\alpha\mathbf{A} + \beta\mathbf{q}) = \mathbf{A};$$

$$\begin{cases} \alpha(q^2 - \kappa_0^2) = 1, \\ \alpha(\mathbf{q}\mathbf{A}) + \beta\kappa_0^2 = 0; \end{cases}$$

$$\alpha = \frac{1}{q^2 - \kappa_0^2}; \quad \beta = \frac{(\mathbf{q}\mathbf{A})}{\kappa_0^2(\kappa_0^2 - q^2)}.$$

Итак, частное решение имеет вид:

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{A} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})}{q^2 - \kappa_0^2} - \frac{\mathbf{q}(\mathbf{q}\mathbf{A}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})}{\kappa_0^2(q^2 - \kappa_0^2)}. \quad (11)$$

В нашем случае эту формулу можно еще упростить. В самом деле, учитывая условие $\text{div}\mathbf{D} = 0$, имеем:

$$\begin{aligned} \text{div}\mathbf{D} &= \text{div}(1 + \chi(\mathbf{r}))\mathbf{E} = \mathbf{E} \text{grad}(1 + \chi(\mathbf{r})) + (1 + \chi(\mathbf{r}))\text{div}\mathbf{E} = \\ &= \mathbf{E}_{0i} (i\mathbf{h}\chi_H \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}) - i\mathbf{h}\chi_{\bar{H}} \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r})) \exp(i\kappa_0\mathbf{r}) + \\ &+ (1 + \chi_0 + \chi_H \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}) + i\chi_{\bar{H}} \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r})) i(\kappa_0\mathbf{E}_{0i}) \exp(i\kappa_0\mathbf{r}) = 0 \\ &i = 1, 2. \end{aligned}$$

Отсюда $(\kappa_0\mathbf{E}_{0i}) = 0$; $(\mathbf{h}\mathbf{E}_{0i}) = 0$, т.е. в отсутствие источников поле строго поперечно. С учетом этого частное решение имеет вид:

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{A} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})}{q^2 - \kappa_0^2}.$$

Теперь можно записать решение в первом порядке теории возмущений:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1 &= \kappa^2 \frac{\mathbf{E}_{01} \exp(i(\kappa_0 + \mathbf{h})\mathbf{r})}{(\kappa_0 + \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2} + \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \frac{\mathbf{E}_{01} \exp(i(\kappa_0 - \mathbf{h})\mathbf{r})}{(\kappa_0 - \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2} + \\ &\kappa^2 \frac{\mathbf{E}_{02} \exp(-i(\kappa_0 - \mathbf{h})\mathbf{r})}{(\kappa_0 - \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2} + \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \frac{\mathbf{E}_{02} \exp(-i(\kappa_0 + \mathbf{h})\mathbf{r})}{(\kappa_0 + \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2} \end{aligned} \quad (12)$$

В итоге прямое разложение с точностью до χ_H^2 имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \chi_H \mathbf{E}_1(\mathbf{r}) + \dots = \\ &= \mathbf{E}_{01} \left(\exp(i\kappa_0\mathbf{r}) + \kappa^2 \chi_H \frac{\exp(i(\kappa_0 + \mathbf{h})\mathbf{r})}{(\kappa_0 + \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2} + \kappa^2 \chi_{\bar{H}} \frac{\exp(i(\kappa_0 - \mathbf{h})\mathbf{r})}{(\kappa_0 - \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2} \right) + \\ &\mathbf{E}_{02} \left(\exp(-i\kappa_0\mathbf{r}) + \kappa^2 \chi_H \frac{\exp(-i(\kappa_0 - \mathbf{h})\mathbf{r})}{(\kappa_0 - \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2} + \kappa^2 \chi_{\bar{H}} \frac{\exp(-i(\kappa_0 + \mathbf{h})\mathbf{r})}{(\kappa_0 + \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2} \right) + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

Вид этого выражения показывает, что помимо прямого (κ_0) и обратного $(-\kappa_0)$ направлений распространения плоской волны в среде возникают также волны в направлениях $(\kappa_0 \pm \mathbf{h})$ и $(-\kappa_0 \pm \mathbf{h})$. Амплитуда этих волн пренебрежимо мала (в χ_H раз меньше) по сравнению с исходными, и не может существенно повлиять на общую картину волнового поля в кристалле.

Или, иначе говоря, в кристалле распространяется преломленная (а также возможно, отраженная) волна с небольшими искажениями.

Такое положение, однако, радикально меняется, когда какой-либо из знаменателей в формуле (12) стремится к нулю. В этом случае $E_1 \rightarrow \infty$ и уже никак не может рассматриваться как малая поправка к E_0 . Тогда прямое разложение теряет силу и требуется его модификация. Очевидно, это происходит при условии

$$(\kappa_0 \pm \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2 \leq \chi_H.$$

Данное условие хорошо известно – это условие Лауэ для рентгеновских лучей (для электронов ему соответствует построение Бриллюэна), а посему нет нужды входить в детали физического смысла. Отметим лишь основные моменты: появление понятия атомной плоскости, от которой происходит отражение, формула Вульфа-Брэгга, сфера Эвальда (зона Бриллюэна для электронов) и т.д. В данном случае важно, что эти понятия возникают естественно, без всяких дополнительных предположений.

Итак, при некоторых значениях κ_0 поле радикально меняется: возникают новые направления распространения волн, отличные от первоначального, т.е. дифракция. Здесь и далее мы ограничимся случаем, когда уравнению Лауэ удовлетворяют проходящая и дифрагированная волны – двухволновое приближение.

Таким образом, вблизи значений κ_0 , при которых наблюдается дифракция, необходима модификация прямого разложения. Принципиальным моментом здесь является параметрический характер взаимодействия среды и волнового поля, что дает физические (и математические) обоснования для поиска решения.

Существуют различные способы модификации прямого разложения. Все они направлены по существу на решение одной задачи – получение т.н. равномерно пригодного разложения вблизи интересующих нас значений параметров. По причинам, ясным из дальнейшего изложения, мы отдадим предпочтение известному методу многих масштабов [6], используемому для скалярного уравнения рассматриваемой задачи. Правда, с учетом специфики задачи, связанной с векторным характером исследуемого уравнения, нам понадобится некоторая его модификация. Для дифракции электронов, описываемой скалярным уравнением Шредингера, этой модификации не требуется.

Метод многих масштабов

Основная идея метода в применении к рассматриваемой задаче состоит в следующем. Особенности волнового поля проявляются на разных пространственных масштабах, определяемых малым параметром разложения χ_H . Соответственно, можно рассматривать эти особенности, в определенном приближении, независимо. Математически это достигается переходом от одной пространственно переменной (в нашем случае $\mathbf{r}$) к нескольким, отражающим различные масштабы задачи. Фиксируемое число масштабов определяет порядок разложения решения. Указанная выше модификация связана с тем, что метод многих масштабов применяется к скалярным уравнениям; здесь же мы распространяем его на векторное уравнение.

Итак, будем искать приближенное решение основного уравнения (8) в наиболее интересном случае в области брэгговского максимума, когда выполняется условие Лауэ $\kappa_0 \pm \mathbf{h} = \kappa_H$.

Сделаем в (8) замену $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots = \mathbf{r}_0, \chi_H \mathbf{r}_0, \dots$, тем самым, предполагая, что поле определяется разными пространственными масштабами:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots).$$

В дальнейшем, как и в прямом разложении, ограничимся первым порядком разложения; соответственно, будем рассматривать два пространственных масштаба $\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1$. Посмотрим

рим, как при этом меняется оператор rot . Воспользуемся стандартным координатным представлением в декартовых координатах:

$$\text{rot}\mathbf{A} = \begin{vmatrix} \mathbf{i}_1 & \mathbf{i}_2 & \mathbf{i}_3 \\ \frac{\partial}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_3} \\ A_1 & A_2 & A_3 \end{vmatrix}.$$

Учитывая замену $x_i \rightarrow x_i^0, x_i^1, \dots$, имеем для каждой из производных

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i^0} + \frac{\partial x_i^1}{\partial x_i^0} \frac{\partial}{\partial x_i^1} + \dots = \frac{\partial}{\partial x_i^0} + \chi_H \frac{\partial}{\partial x_i^1} + \dots$$

Тогда для $\text{rot}\mathbf{A}$ получим

$$\text{rot}\mathbf{A} = \begin{vmatrix} \mathbf{i}_1 & \mathbf{i}_2 & \mathbf{i}_3 \\ \frac{\partial}{\partial x_1^0} & \frac{\partial}{\partial x_2^0} & \frac{\partial}{\partial x_3^0} \\ A_1 & A_2 & A_3 \end{vmatrix} + \chi_H \begin{vmatrix} \mathbf{i}_1 & \mathbf{i}_2 & \mathbf{i}_3 \\ \frac{\partial}{\partial x_1^1} & \frac{\partial}{\partial x_2^1} & \frac{\partial}{\partial x_3^1} \\ A_1 & A_2 & A_3 \end{vmatrix} + \dots = (\text{rot}_0 + \chi_H \text{rot}_1 + \dots)\mathbf{A}.$$

т.е. оператор rot по отношению к проведенной замене линеен. Индекс у оператора означает пространство, в котором он действует. Воспользовавшись этим свойством, получим:

$$\begin{aligned} \text{rot}\text{rot} &= (\text{rot}_0 + \chi_H \text{rot}_1 + \dots)(\text{rot}_0 + \chi_H \text{rot}_1 + \dots) = \\ &= \text{rot}_0 \text{rot}_0 + \chi_H \text{rot}_1 \text{rot}_0 + \chi_H \text{rot}_0 \text{rot}_1 + \dots \end{aligned}$$

Здесь предусмотрительно учтено, что операторы rot_0 и rot_1 , вообще говоря, не коммутируют.

Как уже указывалось выше, взаимодействие поля со средой носит параметрический характер. Это означает, что наряду с разложением поля, необходимо также разложить волновой вектор $\mathbf{k}_0$ по степеням χ_H :

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{E}_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots) + \chi_H \mathbf{E}_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots) + \dots; \\ \mathbf{k}_0 &= \mathbf{k}_{00} + \chi_H \mathbf{k}_{01} + \dots; \\ \kappa_0^2 &= (\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_0) = \kappa_0^2 + 2\chi_H (\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_{01}) + \dots = \kappa_0^2 + \chi_H X; \quad X = 2(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_{01}) \end{aligned} \quad (14)$$

Подставляем все разложения в основное уравнение (8):

$$\begin{aligned} &(\text{rot}_0 \text{rot}_0 + \chi_H \text{rot}_1 \text{rot}_0 + \chi_H \text{rot}_0 \text{rot}_1 + \dots)(\mathbf{E}_0 + \chi_H \mathbf{E}_1 + \dots) - \\ &-(\kappa_0^2 + \chi_H X + \dots + \kappa^2 \chi_H (\exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}_0) + \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{r}_0))) (\mathbf{E}_0 + \chi_H \mathbf{E}_1 + \dots) = 0 \end{aligned} \quad (15)$$

При этом $\chi(\mathbf{r})$ представлена как функция основного пространственного масштаба $\mathbf{r}_0$. Дальнейшая процедура проходит по стандартной схеме методов возмущений. А именно, последовательным приравниванием коэффициентов при степенях параметра возмущения χ_H получают исходное приближение (невозмущенная задача) и дальнейшие приближения. Равномерно пригодное разложение получается при наложении дополнительных условий – исключении секулярных (расходящихся) членов разложения. Подобное исключение, в свою очередь, обусловлено разложением $\mathbf{k}_0$ и введением разных масштабов задачи.

Продemonстрируем эту процедуру. Нулевое приближение (невозмущенное уравнение) имеет по-прежнему вид стандартного векторного волнового уравнения для строго поперечной волны с волновым вектором $\mathbf{\kappa}_0$, распространяющейся в сплошной среде (континууме):

$$\text{rot}_0 \text{rot}_0 \mathbf{E}_0 - \kappa_{00}^2 \mathbf{E}_0 = 0. \quad (16)$$

Однако, в отличие от прямого разложения, оператор rot затрагивает здесь только один пространственный масштаб – $\mathbf{r}_0$. Исходя из этого, а также имея как всегда ввиду требование однородности поля в кристалле, решение следует искать в виде суперпозиции проходящей и дифрагированной волн (двухволновое приближение):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0 &= \mathbf{e}_1 c_1(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{\kappa}_{00} \mathbf{r}_0) + \mathbf{e}_2 c_2(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{\kappa}_h \mathbf{r}_0) \\ (\mathbf{\kappa}_{00}, \mathbf{e}_i) &= (\mathbf{\kappa}_h, \mathbf{e}_i) = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Величины $c_i(\mathbf{r}_1)$ относятся к другому пространственному масштабу и рассматриваются как «медленные» переменные.

Такая структура волнового поля предполагает строгое выполнение дифракционного условия Лауэ $\mathbf{\kappa}_0 \pm \mathbf{h} = \mathbf{\kappa}_h$ и наличие отражающей плоскости. В самом деле, из $(\mathbf{\kappa}_0 \pm \mathbf{h})^2 - \kappa_0^2 = 0$ следует условие $(\mathbf{\kappa}_0 \mathbf{h}) = \pm \frac{1}{2}$, которое накладывает ограничение лишь на составляющую $\mathbf{\kappa}_0$, направленную вдоль $\mathbf{h}$: $-\mathbf{\kappa}_{0\parallel}$. Нормальная к $\mathbf{h}$ компонента $\mathbf{\kappa}_{0\perp}$ для $\mathbf{\kappa}_0$ и $\mathbf{\kappa}_h$ одинакова (рис. 1).

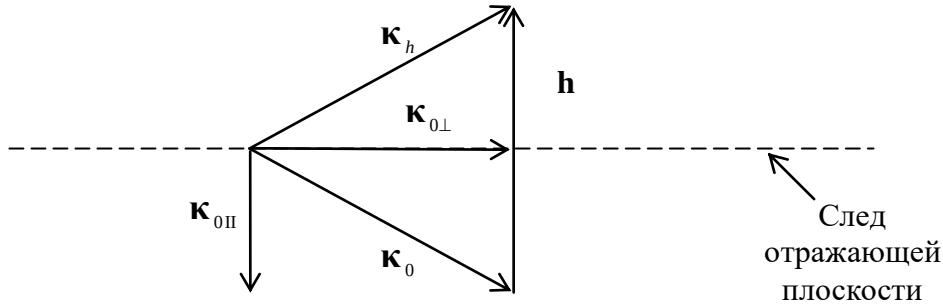


Рис. 1. Расположение векторов преломленной и дифрагированной волн

Условие поперечности волн $(\mathbf{\kappa}_{00}, \mathbf{e}_i) = (\mathbf{\kappa}_h, \mathbf{e}_i) = 0$ определяет лишь плоскости, ортогональные соответствующим волновым векторам. Как известно, обычно рассматриваются два случая поляризации: σ -поляризация, когда амплитуда поля лежит в плоскости, ортогональной плоскости дифракции; и π -поляризация, когда амплитуда поля лежит в плоскости дифракции. Случай σ -поляризации, как более простой, предпочтительнее для дальнейшего рассмотрения.

Следующее приближение – первого порядка по χ_H – приводит к неоднородному уравнению:

$$\begin{aligned} \text{rot}_0 \text{rot}_0 \mathbf{E}_1 - \kappa_{00}^2 \mathbf{E}_1 &= -(\text{rot}_1 \text{rot}_0 + \text{rot}_0 \text{rot}_1) \mathbf{E}_0 + \chi \mathbf{E}_0 + \\ &\kappa^2 \left(\exp(i\mathbf{h} \mathbf{r}_0) + \frac{\chi_H}{\chi} \exp(-i\mathbf{h} \mathbf{r}_0) \right) \mathbf{E}_0 \end{aligned} \quad (18)$$

Найдем $(\text{rot}_1 \text{rot}_0 + \text{rot}_0 \text{rot}_1) \mathbf{E}_0$. Имеем:

$$\begin{aligned} \text{rot}_0 \mathbf{E}_0 &= \text{rot}_0 (\mathbf{e}_1 c_1(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{\kappa}_{00} \mathbf{r}_0) + \mathbf{e}_2 c_2(\mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{\kappa}_h \mathbf{r}_0)) = \\ &= \exp(i\mathbf{\kappa}_{00} \mathbf{r}_0) [i\mathbf{\kappa}_{00} \mathbf{e}_1] c_1(\mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{\kappa}_h \mathbf{r}_0) [i\mathbf{\kappa}_h \mathbf{e}_2] c_2(\mathbf{r}_1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{rot}_1 \text{rot}_0 \mathbf{E}_0 &= [\nabla_1 c_1(\mathbf{r}_1), [\mathbf{i}\kappa_{00} \mathbf{e}_1]] \exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}_0) + [\nabla_1 c_2(\mathbf{r}_1), [\mathbf{i}\kappa_h \mathbf{e}_2]] \exp(i\kappa_h \mathbf{r}_0) \\
\text{rot}_1 \mathbf{E}_0 &= [\nabla_1 c_1(\mathbf{r}_1) \mathbf{e}_1] \exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}_0) + [\nabla_1 c_2(\mathbf{r}_1) \mathbf{e}_2] \exp(i\kappa_h \mathbf{r}_0) \\
\text{rot}_0 \text{rot}_1 \mathbf{E}_0 &= [\mathbf{i}\kappa_{00} [\nabla_1 c_1(\mathbf{r}_1) \mathbf{e}_1]] \exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}_0) + [\mathbf{i}\kappa_h [\nabla_1 c_2(\mathbf{r}_1) \mathbf{e}_2]] \exp(i\kappa_h \mathbf{r}_0).
\end{aligned}$$

Здесь оператор ∇_1 (градиент) действует в масштабе $\mathbf{r}_1$. Сгруппируем полученные выражения и преобразуем их согласно правилам векторной алгебры с учётом $(\kappa_{00} \mathbf{e}) = (\kappa_h \mathbf{e}) = 0$:

$$\begin{aligned}
(\text{rot}_1 \text{rot}_0 + \text{rot}_0 \text{rot}_1) \mathbf{E}_0 &= \\
&= (i\kappa_{00} (\nabla_1 c_1, \mathbf{e}_1) - \mathbf{e}_1 (\nabla_1 c_1, i\kappa_{00}) + \nabla_1 c_1 (i\kappa_{00}, \mathbf{e}_1) - \mathbf{e}_1 (i\kappa_{00}, \nabla_1 c_1)) \exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}_0) + \\
&+ (i\kappa_h (\nabla_1 c_2, \mathbf{e}_2) - \mathbf{e}_2 (\nabla_1 c_2, i\kappa_h) + \nabla_1 c_2 (i\kappa_h, \mathbf{e}_2) - \mathbf{e}_2 (i\kappa_h, \nabla_1 c_2)) \exp(i\kappa_h \mathbf{r}_0)
\end{aligned}$$

Подчиним это выражение дополнительному условию $(\nabla_1 c_1, \mathbf{e}_1) = 0$. Оно означает следующее. Величины $c_i(\mathbf{r}_1)$ рассматриваются как возмущенные амплитуды соответствующих плоских волн. При этом возмущение первого (и всех последующих) порядков не нарушает условия строгой поперечности волн. Иными словами мы полагаем, что возмущение не влияет на поляризацию волн. В итоге имеем:

$$(\text{rot}_1 \text{rot}_0 + \text{rot}_0 \text{rot}_1) \mathbf{E}_0 = -i2(\nabla_1 c_1, \kappa_{00}) \mathbf{e}_1 \exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}_0) - i2(\nabla_1 c_2, \kappa_h) \mathbf{e}_2 \exp(i\kappa_h \mathbf{r}_0).$$

Тогда неоднородное уравнение приобретает вид:

$$\begin{aligned}
\text{rot}_0 \text{rot}_0 \mathbf{E}_1 - \kappa_{00}^2 \mathbf{E}_1 &= \left((i2(\nabla_1 c_1, \kappa_{00}) + X_{c_1}) \mathbf{e}_1 + \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} c_2 \mathbf{e}_2 \right) \exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}_0) + \\
&+ (\kappa^2 c_1 \mathbf{e}_1 + (i2(\nabla_1 c_2, \kappa_h) + X_{c_2}) \mathbf{e}_2) \exp(i\kappa_h \mathbf{r}_0) + \\
&+ \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \exp(i(\kappa_{00} - \mathbf{h}) \mathbf{r}_0) c_1 \mathbf{e}_1 + \kappa^2 \exp(i(\kappa_h + \mathbf{h}) \mathbf{r}_0) c_2 \mathbf{e}_2.
\end{aligned} \tag{19}$$

Два первых члена в правой части этого выражения порождают секулярные составляющие в разложении, как нетрудно видеть из полученного выше частного решения. Или, иначе, они обеспечивают параметрический резонанс в системе. Следовательно, чтобы получить равномерное приближение вблизи условия Лауэ, необходимо обратить указанные члены в ноль.

Тогда получаем следующую систему векторных уравнений:

$$\begin{cases} (i2(\nabla_1 c_1, \kappa_{00}) + X_{c_1}) \mathbf{e}_1 + \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} c_2 \mathbf{e}_2 = 0 \\ (i2(\nabla_1 c_2, \kappa_h) + X_{c_2}) \mathbf{e}_2 + \kappa^2 c_1 \mathbf{e}_1 = 0 \end{cases} \tag{20}$$

В отличие от обычной скалярной системы, решение (20) требует дополнительных ограничений. Дело в том, что $\mathbf{e}$ и $\mathbf{e}_2$ в общем случае линейно независимы (например, для π -поляризации), т.е. образуют некоторый базис. Ясно, что располагая лишь данной системой, в общем случае невозможно обеспечить неограниченное возрастание поля во всём пространстве. Поэтому необходимо выделить характерные направления (или ортогональные к ним плоскости), вдоль которых реализуется ограничение поля, т.е. получаемое решение оказывается равномерно пригодным. Исходя из физического смысла задачи можно предположить, что эти направления связаны с проходящей (κ_{00}) и дифрагированной волнами (κ_h). Такое предположение подтверждается следующим образом.

Найдём частное решение неоднородной задачи в резонансном случае:

$$\text{rot} \text{rot} \mathbf{E} - \kappa_0^2 \mathbf{E} = \mathbf{e} \exp(i\kappa_0 \mathbf{r}).$$

Ищем решение в виде:

$$\mathbf{E} = (\alpha(\mathbf{\kappa}_0 \mathbf{r}) \mathbf{e} + \beta \mathbf{\kappa}_0 + \gamma(\mathbf{\kappa}_0 \mathbf{r}) \mathbf{\kappa}_0) \exp(i \mathbf{\kappa}_0 \mathbf{r}).$$

Подставляя его в неоднородное уравнение и решая получающуюся систему относительно констант α , β , γ , получим:

$$\mathbf{E} = \left(\frac{i(\mathbf{\kappa}_0 \mathbf{r})}{2\kappa^2} \mathbf{e} - \frac{(\mathbf{\kappa}_0 \mathbf{e})}{\kappa^4} \mathbf{\kappa}_0 - \frac{i(\mathbf{\kappa}_0 \mathbf{e})(\mathbf{\kappa}_0 \mathbf{r})}{2\kappa^4} \mathbf{\kappa}_0 \right) \exp(i \mathbf{\kappa}_0 \mathbf{r}).$$

Отсюда видно, что неограниченное возрастание амплитуды волны ассоциировано с волновым вектором $\mathbf{\kappa}_0$, причём в направлении, совпадающем с $\mathbf{e}$. Тогда, исходя из смысла нулевого приближения, мы должны потребовать обращения в ноль проекции на $\mathbf{e}_1$ первого из уравнений системы и, аналогично, проекции на $\mathbf{e}_2$ – второго уравнения.

Таким образом, умножая скалярно первое уравнение системы на $\mathbf{e}_1$, а второе на $\mathbf{e}_2$, получим скалярную систему:

$$\begin{cases} i2(\nabla_1 c_1, \mathbf{\kappa}_{00}) + X c_1 + \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \eta c_2 = 0, \\ \kappa^2 \eta c_1 + i2(\nabla_1 c_2, \mathbf{\kappa}_h) + X c_2 = 0 \end{cases}, \quad (21)$$

где

$$\eta = (\mathbf{e}_1 \mathbf{e}_2) = \begin{cases} 1 - \text{для } \sigma - \text{поляризации} \\ \cos 2\theta - \text{для } \pi - \text{поляризации} \end{cases}.$$

Полученная система фактически представляет собой записанное в дифференциальной форме дисперсионное соотношение для проходящей и дифрагированной волн в двухволновом приближении. Как следует из приведенного вывода, возможность получения этой системы диктуется выбором нулевого приближения. А именно, волновые вектора проходящей и дифрагированной волн должны иметь одинаковую компоненту $\kappa_{0\perp}$, что влечет за собой интерпретацию рассеяния как результат отражения от атомной плоскости.

Перейдём от дифференциальной формы системы к алгебраической, для чего сделаем очевидную подстановку $c_j(\mathbf{r}_1) \rightarrow c_j \exp(i \mathbf{P} \mathbf{r})$, $\nabla_1 c_j = i \mathbf{P} c_j$, где $\mathbf{P}$ – некоторый постоянный вектор.

Получим:

$$\begin{cases} (-2(\mathbf{P} \mathbf{\kappa}_{00}) + X) c_1 + \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \eta c_2 = 0, \\ \kappa^2 \eta c_1 + (-2(\mathbf{P} \mathbf{\kappa}_h) + X) c_2 = 0 \end{cases}. \quad (22)$$

Эту систему следует рассматривать как условие ограничения поля в заданном направлении распространения волн, связанное со структурными параметрами кристалла и геометрией дифракции. По физическому смыслу рассматриваемой задачи такое ограничение должно быть обеспечено в направлении нормали в глубь кристалла. Учитывая это, перепишем систему в виде:

$$\begin{cases} (-2P \kappa_{00} \gamma_0 + X) c_1 + \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \eta c_2 = 0, \\ \kappa^2 \eta c_1 + (-2P \kappa_h \gamma_h + X) c_2 = 0 \end{cases}. \quad (23)$$

Здесь $\gamma_{0,h}$ – направляющие косинусы соответствующих волновых векторов, $\kappa_h = \kappa_{00}$.

Нетривиальное решение этой системы требует обращения в ноль соответствующего детерминанта:

$$\begin{vmatrix} -2P\kappa_{00}\gamma_0 + X & \kappa^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \eta \\ \kappa^2 \eta & -2P\kappa_{00}\gamma_h + X \end{vmatrix} = 0. \quad (24)$$

$$= 4\kappa_{00}^2 \gamma_0 \gamma_h P^2 - 2\kappa_{00} X (\gamma_0 + \gamma_h) P + X^2 - \kappa^4 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \eta^2 = 0$$

Решение квадратного уравнения относительно P имеет вид:

$$P_{1,2} = \frac{X(\gamma_0 + \gamma_h) \pm \left[X^2 (\gamma_0 - \gamma_h)^2 + 4\gamma_0 \gamma_h \kappa^4 \eta^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H} \right]^{1/2}}{4\kappa_{00} \gamma_h \gamma_0} = \frac{X(\gamma_0 + \gamma_h) \pm D}{4\kappa_{00} \gamma_h \gamma_0}. \quad (25)$$

Тогда, разрешая, скажем, первое уравнение системы относительно c_2 , получим:

$$c_2 = \frac{X(\gamma_0 - \gamma_h) \pm D}{2\kappa^2 \eta \gamma_h \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H}} c_1 = \alpha_{1,2} c_1. \quad (26)$$

В итоге, возвращаясь к исходным переменным, представим волновое поле в кристалле в следующем виде:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} = \exp(i\chi_H(\mathbf{P}_1 \mathbf{r})) & (\exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}) \mathbf{e}_1 + \alpha_1 \exp(i\kappa_h \mathbf{r}) \mathbf{e}_2) c_{11} \\ & + \exp(i\chi_H(\mathbf{P}_2 \mathbf{r})) (\exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}) \mathbf{e}_1 + \alpha_2 \exp(i\kappa_h \mathbf{r}) \mathbf{e}_2) c_{12} \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь константы c_{ij} снабжены дополнительными индексами, соответствующими значениям P_1 и P_2 .

Выражение для волнового поля упрощается в случае полубесконечного кристалла, когда исключается отражение волн от нижней грани кристалла.

В этом случае выбор знака в $P_{1,2}$ и, соответственно, в $\alpha_{1,2}$ определяется физическими соображениями. А именно, необходимо потребовать, чтобы при отклонении от точного брэгговского условия (возрастании $|X|$) волновое поле переходило к обычному виду преломленной волны, распространяющейся в кристалле как континууме. Тогда имеем:

$$P = \frac{X(\gamma_0 + \gamma_h) - \text{sgn}(X)D}{4\kappa_{00} \gamma_h \gamma_0}; \quad (28)$$

$$\alpha = \frac{X(\gamma_0 - \gamma_h) - \text{sgn}(X)D}{2\kappa^2 \eta \gamma_h \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H}},$$

$$\text{sgn}(X) = \begin{cases} 1, & X \geq 0 \\ -1, & X < 0 \end{cases}. \quad (29)$$

В итоге, волновое поле в кристалле имеет вид:

$$\mathbf{E} = \exp(i\chi_H(\mathbf{P} \mathbf{r})) (\exp(i\kappa_{00} \mathbf{r}) \mathbf{e}_1 + \alpha \exp(i\kappa_h \mathbf{r}) \mathbf{e}_2) c, \quad (30)$$

где константа c определяется из граничных условий.

Соотношение (30) представляет собой единое волновое поле в идеальном кристалле вблизи брэгговского максимума.

Чтобы сопоставить полученное выражение с известными результатами и с экспериментом, необходимо перейти к угловой переменной – отклонению от точного угла Брэгга $\Delta\theta$. Для этого параметр $X = 2(\kappa_{00}\kappa_{01})$ должен быть выражен через $\Delta\theta$. Как уже отмечалось, параметрический резонанс (дифракционное условие Лауэ $(\kappa_0\mathbf{h}) = \mp \frac{1}{2}$) определяется лишь компонентой $\kappa_{0\parallel}$, направленной вдоль $\mathbf{h}$ в силу векторного характера задачи. Это означает, что вектор κ_{01} в разложении $\kappa_0 = \kappa_{00} + \chi_H \kappa_{01}$ направлен вдоль $\mathbf{h}$:

$$\kappa_{01} = \kappa_{01}\mathbf{h} \text{ (напомним, } |\mathbf{h}| = 1).$$

Тогда имеем:

$$2(\kappa_{00}, \kappa_{01}) = X = 2\kappa_{00}\kappa_{01} \cos(90^\circ + \theta) = -2\kappa_{00}\kappa_{01} \sin \theta.$$

С другой стороны, фиксируемое в эксперименте отражение определяется нормальной компонентой волнового вектора κ_0 : $\kappa_{0n} = (\kappa_0\mathbf{n})$. То есть, угловое сканирование приводит к вариации κ_{0n} . Отсюда получаем соотношения:

$$\kappa_0 = \kappa_{00} + \chi_H \kappa_{01};$$

$$\begin{aligned} \kappa_{0n} &= (\kappa_0\mathbf{n}) = \kappa_0\gamma_0 = (\kappa_{00}\mathbf{n}) + \chi_H (\kappa_{01}\mathbf{n}) = \kappa_{00}\gamma_0 + \chi_H \cdot \kappa_{01}((\kappa_h - \kappa_{00})\mathbf{h}) = \\ &= \kappa_{00}\gamma_0 + \chi_H \kappa_{01}\kappa_{00}(\gamma_h - \gamma_0) \end{aligned}$$

Здесь учтено $\mathbf{h} = \kappa_h - \kappa_0$, а также $|\kappa_{00}| = |\kappa_h|$. Тогда имеем:

$$\kappa_{01}\kappa_{00} = \frac{1}{\chi_H} \frac{\gamma_0}{\gamma_h - \gamma_0} (\kappa_0 - \kappa_{00}).$$

По условию дифракции $\kappa_{00} \sin \theta = \frac{h}{2} = \frac{1}{2}$; $\kappa_0 \sin(\theta + \Delta\theta) = \frac{h}{2} = \frac{1}{2}$

$$\kappa_0 - \kappa_{00} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sin(\theta + \Delta\theta)} - \frac{1}{\sin \theta} \right) \approx -\frac{\Delta\theta \cos \theta}{2 \sin^2 \theta}.$$

Подставляем в выражение для X :

$$\begin{aligned} X &= \frac{1}{\chi_H} \frac{\gamma_0}{\gamma_h - \gamma_0} \frac{2\Delta\theta \sin \theta \cdot \cos \theta}{2 \sin^2 \theta} = \frac{1}{\chi_H} \frac{\gamma_0}{\gamma_h - \gamma_0} \frac{\Delta\theta \sin 2\theta}{2 \sin^2 \theta} = \\ &= \frac{1}{\chi_H} \frac{\gamma_0}{\gamma_h - \gamma_0} \frac{2\Delta\theta \sin 2\theta}{4 \sin^2 \theta} = \frac{1}{\chi_H} \frac{\gamma_0}{\gamma_h - \gamma_0} \kappa_{00}^2 (2\Delta\theta \sin 2\theta) = -\frac{1}{\chi_H} \frac{\gamma_0}{\gamma_h - \gamma_0} \kappa_{00}^2 \beta_H \end{aligned} \quad (31)$$

Здесь введена стандартная (с точностью до преломления) угловая переменная

$$\beta_H = -2\Delta\theta \sin 2\theta.$$

Как известно, в теории дифракции рассматриваются две основные схемы: по Лауэ ($\gamma_0 > 0, \gamma_h > 0$) и по Брэггу ($\gamma_0 > 0, \gamma_h < 0$). В случае дифракции по Брэггу структура волнового поля будет качественно различаться в зависимости от рассматриваемого углового интервала.

В частности, в интервале:

$$X^2(\gamma_0 + |\gamma_h|)^2 < 4\gamma_0|\gamma_h|\kappa^4\eta^2 \frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H}.$$

Волны будут испытывать экспоненциальное затухание по нормали в глубь кристалла (напомним, $\mathbf{P} = \mathbf{Pn}$). В терминах качественной теории дифференциальных уравнений решение будет неустойчивым. Известная интерпретация [7] приводит к выводу о «выталкивании» волны из кристалла и формировании дифракционного максимума. Таким образом, указанное условие отделяет устойчивые решения (колебательный тип) от неустойчивых (экспоненциальный тип), т.е. дает уравнения переходных кривых параметрической плоскости (X, κ^2) [7].

Ширина неустойчивой области – области экстинкционного затухания волны – определяется выражением:

$$\Delta X = \frac{4\kappa^2\eta\left(\frac{\chi_{\bar{H}}}{\chi_H}\right)^{1/2}(\gamma_0|\gamma_h|)^{1/2}}{\gamma_0 + |\gamma_h|}. \quad (32)$$

Или, переходя к угловой переменной

$$\Delta\theta = \frac{2\eta(\chi_H\chi_{\bar{H}})^{1/2}\left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right)^{1/2}}{(1 + \chi_0)\sin 2\theta}. \quad (33)$$

Это известное выражение (с точностью до преломления) для угловой ширины брэгговского столика в случае полубесконечного идеального непоглощающего кристалла.

Длина экстинкции Λ_{ext} определяется как декремент затухания волны в точном брэгговском положении:

$$\Delta\theta = \frac{2\eta(\chi_H\chi_{\bar{H}})^{1/2}\left(\frac{|\gamma_h|}{\gamma_0}\right)^{1/2}}{(1 + \chi_0)\sin 2\theta}. \quad (34)$$

Подведем промежуточные итоги. Применение обобщенного метода многих масштабов позволило получить систему фундаментальных уравнений, описывающую поведение волнового поля вблизи брэгговского максимума в двухволновом приближении. Эта система является прямым аналогом дисперсионных соотношений теории Эвальда-Лауэ и системы Такаги-Топэна обобщенной динамической теории. Существенное отличие развиваемого варианта теории состоит в отказе от процедуры укорочения уравнений путем отбрасывания вторых производных. Принципиальный момент здесь – разложение по χ_H , которое позволяет максимально сохранить структуру уравнений Максвелла для волнового поля в кристалле в условиях динамической дифракции.

Сопоставление полученных результатов с известными из теории, скажем, Такаги, показывает полное соответствие как в качественной интерпретации типов полученных решений в различных угловых интервалах в случае дифракции по Брэггу, так и в аналитических выражениях для ширины брэгговского максимума и длины экстинкции. Это соответствие указывает также на то обстоятельство, что, несмотря на формальное представление $\chi(\mathbf{r})$ в виде бесконечного ряда Фурье в теориях Эвальда-Лауэ и Такаги-Топэна, в действительности используется лишь три члена ряда.

Однако ценность развиваемой здесь теории проявляется в наибольшей степени при учете граничных условий, который дает явные выражения для коэффициента отражения. Перейдем поэтому теперь к рассмотрению граничных условий и посмотрим, в чем состоит принципиальное различие нашего подхода и известных вариантов динамической теории дифракции.

Граничные условия и амплитудный коэффициент отражения

Полученное выше выражение для волнового поля в кристалле зависит, согласно (30) от константы c которая должна определяться граничными условиями задачи. Как уже указывалось выше, в теории Такаги-Топена нет возможности использовать классические граничные условия электродинамики, поскольку отбрасывание вторых производных от амплитуд по координатам понижает порядок уравнения. В итоге граничные условия переопределяют задачу; взамен ставятся новые граничные условия, определяющие лишь амплитуды полей на поверхности кристалла. Такая процедура оказывается вполне корректной при обычных геометриях дифракции, когда углы падения и выхода волн существенно превосходят критические значения.

Выясним теперь, к каким отличиям приводит строгий учет граничных условий в нашей теории.

Коэффициент отражения определяется как отношение усредненных значений нормальных компонент вектора Пойнтинга дифрагированной и падающей волн:

$$R = \frac{|c_h^0|^2}{|c^0|^2} \cdot \frac{(\mathbf{n}\mathbf{k}_h^0)}{(\mathbf{n}\mathbf{k})}. \quad (35)$$

Здесь $\mathbf{n}$ – единичный вектор нормали, направленный в глубь кристалла, $\mathbf{k}$, c^0 и $\mathbf{k}_h^0$, c_h^0 – волновые вектора и амплитуды падающей и дифрагированной волн, соответственно. Индекс 0 означает, что значения указанных величин относятся к внешней среде – вакууму. Таким образом, определение коэффициента отражения связано с нахождением амплитуды дифрагированной волны в вакууме. Эта задача решается с помощью граничных условий.

Как известно, граничные условия требуют непрерывности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей, которая является следствием однородности задачи вдоль поверхности. Граничная задача распадается на последовательные этапы, связанные с нахождением c_h^0 . При этом на каждом этапе рассматривается элементарная задача установления связи между амплитудами падающей, прошедшей и зеркально отраженной волн. Решение этой задачи приводит к известным формулам Френеля:

$$c = \frac{(\mathbf{n}, \mathbf{k}) - (\mathbf{n}, \mathbf{k}_R)}{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_0 + \mathbf{P}) - (\mathbf{n}, \mathbf{k}_R)} c^0 = \frac{2(\mathbf{n}, \mathbf{k})}{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_0 + \mathbf{P}) + (\mathbf{n}, \mathbf{k})} c^0; \quad (36)$$

$$c_R = \frac{(\mathbf{n}\mathbf{k}) - (\mathbf{n}, \mathbf{k}_0 + \chi_H \mathbf{P})}{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_0 + \chi_H \mathbf{P}) - (\mathbf{n}\mathbf{k}_R)} c^0 = \frac{(\mathbf{n}\mathbf{k}) - (\mathbf{n}, \mathbf{k}_0 + \chi_H \mathbf{P})}{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_0 + \chi_H \mathbf{P}) + (\mathbf{n}\mathbf{k})} c^0; \quad (37)$$

$$c_h^0 = \frac{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_h + \chi_H \mathbf{P}) - (\mathbf{n}, \mathbf{k}_{hR})}{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_h^0) - (\mathbf{n}, \mathbf{k}_{hR})} \alpha c = \frac{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_h + \chi_H \mathbf{P}) - (\mathbf{n}, \mathbf{k}_{hR})}{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_h^0) - (\mathbf{n}, \mathbf{k}_{hR})} \cdot \frac{2(\mathbf{n}, \mathbf{k})}{(\mathbf{n}, \mathbf{k}_0 + \chi_H \mathbf{P}) + (\mathbf{n}, \mathbf{k})} \alpha c^0. \quad (38)$$

Здесь c_R – амплитуда зеркально отраженной волны, $\mathbf{k}_{hR}$ – волновой вектор дифракционной волны, зеркально отраженной от нижней стороны границы раздела кристалл-вакуум.

Полученные соотношения позволяют найти не только дифрагированную волну, но также и зеркально отраженную волну, что принципиально отличает наш подход от формализма уравнений Такаги.

Формулы (36)-(38) решают задачу определения амплитуд полей в условиях скользящей некомпланарной дифракции, когда падающая и дифракционная волны оказываются вблизи

критических углов ПВО. Они аналогичны соотношениям, полученным в [8], где эта задача решалась с привлечением дисперсионного уравнения четвертого порядка.

Разумеется, здесь должно выполняться соответствие с теорией Такаги для случая больших углов падения и выхода дифракционной волны. Действительно, в этом случае амплитуда зеркальной волны, как и должно быть, стремится к нулю, а коэффициент отражения приобретает вид:

$$R = \left| \frac{c_h^0}{c^0} \right|^2 \cdot \frac{(\mathbf{n}\mathbf{k}_h^0)}{(\mathbf{n}\mathbf{k})} = |\alpha|^2 \frac{(\mathbf{n}\mathbf{k}_h^0)}{(\mathbf{n}\mathbf{k})} = \frac{\gamma_0(1+\chi_0)\beta_H - \text{sgn}(\beta_H)[(\gamma_0(1+\chi_0)\beta_H)^2 + 4\gamma_0\gamma_H\eta^2\chi_H\chi_H]^{1/2}}{2\gamma_H\eta\chi_H} \cdot \frac{\gamma_H}{\gamma_0}. \quad (39)$$

Это известное выражение для коэффициента отражения от идеального полубесконечного кристалла – брэгговский столбик. Вместе с тем, в случае предельно асимметричной дифракции, когда выходящая из кристалла дифракционная волна почти параллельна поверхности, амплитуда модулируется факторами, учитывающими преломление проходящей и дифрагированной волн на границе кристалл-вакуум, и дифракционное взаимодействие волн, связанное с вектором $\mathbf{P}$.

Заключение и выводы

Представленный в данной работе вариант теории динамической рентгеновской дифракции опирается на прямой анализ уравнений Максвелла при определенных модельных представлениях взаимодействия поля со средой, учитывающий наличие решетки, которые в целом согласуются с теорией Эвальда-Лауэ. Такой анализ оказывается возможным при использовании метода многих масштабов, адаптированного к векторному характеру задачи. При этом параметром разложения является величина χ_H , что в полной мере соответствует физическому характеру задачи. Подобное соответствие отражается в математической структуре анализируемого уравнения поля в кристалле в условиях динамического рассеяния.

Полученные выражения для основных характеристик поля в области брэгговского максимума, вытекающие из качественных особенностей распространения волн, соответствуют известным результатам динамической теории. Однако корректное применение граничных условий приводит к выражению для коэффициента отражения, которое существенно отличается от классического в случае предельно асимметричных схем дифракции. Кроме того, представленный подход дает амплитуду зеркально отраженной волны в условиях динамической дифракции, которая, очевидно, не может быть получена в рамках традиционных подходов.

В рамках данной работы мы не ставим задачу подробного анализа особенностей динамического рассеяния в скользящих геометриях дифракции.

В заключение отметим наиболее важные, на наш взгляд, отличия и преимущества развитого в данной работе подхода.

Анализируемое волновое уравнение второго порядка без каких-либо дополнительных предположений о возможности взаимодействия преломленной и рассеянной волн автоматически приводит к динамическому характеру рассеяния, кинематическое рассеяние в таком случае, можно рассматривать в известном смысле как искусственный прием, имеющий ограниченную применимость. Дифракционные условия Лауэ возникают как следствие естественных ограничений прямого разложения решения в резонансном случае.

В рамках развитой теории оказывается возможным единое рассмотрение различных геометрических схем дифракции, в том числе скользящей геометрии и прочих поверхностных вариантов, причем порядок дисперсионного уравнения при этом не меняется. Такая си-

туация связана с эффективным разделением задачи на построение единого волнового поля в кристалле и нахождение амплитуд полей согласно граничным условиям.

Предлагаемая теория допускает обобщение на случай кристалла с нарушениями решетки. Тем самым реализуется единый подход к учету деформаций и других нарушений во всех схемах дифракции, что особенно важно в случае дифракции в условия ПВО.

К числу преимуществ теории можно отнести определение волнового поля в целом, без разделения на преломленную и рассеянную волны. Ясно, что эта особенность теории имеет наибольшее значение при анализе вторичных процессов дифракции.

Автор выражает благодарность профессору Ю.П. Хапачеву за обсуждение принципиальных вопросов предлагаемой теории и поддержку в выполнении данного исследования.

Литература

1. Энтин И.Р. О динамической дифракции рентгеновских лучей на кристалле с периодическим полем смещений // ЖЭТФ. – 1979. – Т. 77. – Вып. 1(7). – С. 214-222.
2. Андреева М.А., Кузьмин Р.Н. Мессбауэровская и рентгеновская оптика поверхности. – М.: Изд-во Общественной академии знаний, 1996. – 128 с.
3. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости. – М.: Наука, 1967. – 472 с.
4. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. – М.: Наука, 1979. – 664 с.
5. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. – М.: Наука, 1979. – 392 с.
6. Найфэ А. Введение в методы возмущений. – М.: Мир, 1984. – 536 с.
7. Молодкин В.Б., Шпак А.П., Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Динамическое рассеяние рентгеновского и синхротронного излучения в сверхрешетках. Рентгенодифракционная кристаллооптика сверхрешеток. – Киев: Академперіодика, 2004. – 120 с.
8. Бушуев В.А., Орешко А.П. Зеркальное отражение рентгеновских лучей в условиях резко асимметричной некомпланарной дифракции в кристалле с аморфной пленкой // ФТТ. – 2001. – Т. 43. – С. 906-912.

THE NON-STANDARD THEORY OF X-RAY SCATTERING IN CRYSTALS

A.A. Dyshekov

In work the new variant of the dynamic theory of diffraction of X-rays in ideal crystals is presented. The theory is based on the direct analysis of Maxwell equations taking into account modeling representations about character of interaction of x-ray radiation with a crystal corresponding to Evald-Laue theory. As a mathematical method of a finding of the approached solution of diffraction equations updating of a method of many scales is used. Received results correspond to known conclusions of the dynamic theory of diffraction outside of area of full external reflection. Expressions for reflection amplitudes of diffracted and a mirror wave for any angles including area of full external reflection are received.

PACS number: 61.10. Dp, 61.10. Eq

ИНТЕГРАЛЬНАЯ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ДИФFUЗНОДИНАМИЧЕСКАЯ КОМБИНИРОВАННАЯ ДИФРАКТОМЕТРИЯ НАНОСИСТЕМ

**А.П. Шпак, *М.В. Ковальчук, В.Б. Молодкин, *В.Л. Носик,
С.В. Дмитриев, А.И. Низкова, Я.В. Василик**

*Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины
* Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН*

В работе изложена обобщенная динамическая теория брэгговского и диффузного рассеяний рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами нескольких типов. Рассмотрены выражения для дифференциальной и интегральной интенсивностей рассеяния, связывающие их с характеристиками дефектов в кристаллах, при дифракции как на отражение, так и на прохождение. Описаны экстинкционные эффекты за счет рассеяния на дефектах без ограничений на их размеры в когерентном и диффузном рассеяниях при малых и больших эффектах диффузной экстинкции для дифференциального и интегральных коэффициентов и факторов экстинкции за счет многократности рассеяния на флуктуационных отклонениях от периодичности решеток кристаллов. На основе построенной динамической теории, при ее сравнении с кинематической, создана новая физическая концепция, которая позволила раскрыть и детально проанализировать физическую природу обнаруженных явлений, обуславливающих, с одной стороны, принципиальное ограничение информативности кинематической картины рассеяния, а с другой стороны, радикальное повышение информативности картины динамического рассеяния. Показано, что это повышение информативности обусловлено обнаруженным явлением очень существенной зависимости от условий дифракции характера влияния дефектов на динамическую картину, что не имеет места принципиально в кинематическом случае. Показаны обусловленные этим явлением и рядом следствий из него уникальные диагностические возможности созданной интегральной диффузнодинамической комбинированной дифрактометрии (ИДДКД). В частности, показаны качественно новые возможности реализации впервые многопараметрической диагностики материалов и изделий нанотехнологий. При этом на основе построенной теории созданы модели для ИДДКД путем измерений скачков интенсивности вблизи К-края поглощения и отклонений от закона Фриделя и их деформационных и толщинных зависимостей и проведена их экспериментальная апробация.

Ключевые слова: кристаллы с дефектами, когерентное и диффузное рассеяние, кинематическая и динамическая картины рассеяния, неразрушающая многопараметрическая диагностика.

ВВЕДЕНИЕ

Одной из важнейших проблем цивилизации является расширение возможностей человеческого глаза, пределов человеческого зрения. Через этот канал человек получает более 80% информации. Именно продолжению решения этой проблемы посвящена настоящая работа. Как известно, революционный прорыв в решении этой проблемы был обеспечен открытием в 1895 году рентгеновских лучей. Это впервые позволило человеку «видеть» структуру непрозрачных предметов, что, в частности, обеспечило существенный прогресс в медицине. Кроме того, это впервые позволило «увидеть» и изучить атомную структуру кристаллов методами созданной тогда (в начале XX века) классической кристаллографии [1], которая широко применяется и сегодня.

При этом следует отметить, что классическая кристаллография, существующая уже более ста лет и основанная на кинематической (приближение однократного рассеяния) [2, 3] или динамической (с учетом эффектов многократности рассеяния) [2, 4, 5] теориях дифракции в идеальных кристаллах (без дефектов), позволяет определять только параметры идеально периодической структуры решеток кристаллов. Но, как стало ясно в последнее время, комплекс необходимых физических свойств разрабатываемых новых материалов определяется не столько этой исходной идеальной структурой, сколько целенаправленно созданными современными нано-

технологиями отклонениями от периодичности, а именно, дефектами и искусственной сверхструктурой, которые в этих теориях не учитываются, и поэтому не могут быть определены методами классической кристаллографии, т.е. остаются вне поля зрения человека.

Как известно, наличие случайных отклонений от периодичности структуры приводит к появлению диффузного рассеяния, которое несет всю информацию о характеристиках этих отклонений. Впервые кинематическая теория именно диффузного рассеяния нейтронов за счет тепловых колебаний атомов в идеальных кристаллах была построена А.И. Ахиезером еще в сороковые годы XX века [6]. В пятидесятые годы М.А. Кривоглаз обобщил эту теорию с помощью разработанного им метода флуктуационных волн на случай кинематического диффузного рассеяния в кристаллах с дефектами произвольного типа [7], а в шестидесятые годы один из авторов настоящей статьи обобщил эти результаты на случай динамической теории, т.е. впервые построил теорию многократного диффузного рассеяния [8-16].

Кинематическая теория М.А. Кривоглаза брэгговского и диффузного рассеяний в кристаллах с дефектами и проведенная им с помощью этой теории классификация дефектов по характеру их влияния на кинематическую картину рассеяния стала практически во всех структурных лабораториях мира теоретической основой для наблюдений и количественных исследований характеристик структуры дефектов и их распределения в кристаллах [7]. При этом кинематическая картина диффузного рассеяния оказалась прямым, однозначным Фурье-изображением этой структуры дефектов. Этим М.А. Кривоглазом достигнута фантастическая возможность для глаза человека непосредственно «видеть» дефекты кристаллического строения, поля смещений атомов вокруг них.

Но приближение однократного рассеяния, которое положено в основу кинематической теории, привело к существенным ограничениям возможностей ее применения. Эта теория хорошо работает в поликристаллах и в сильно искаженных дефектами монокристаллах, но не может быть применима, когда размеры кристаллов и областей когерентности рассеяния превышают длину экстинкции. В этих случаях необходимо обязательно учитывать эффекты многократности рассеяния, т.е. необходима динамическая теория. Кроме того кинематическая теория позволяет исследовать однозначно характеристики дефектов произвольного типа, но при условии присутствия в кристалле преимущественно дефектов только одного определяющего типа. Вклад от остальных типов дефектов не должен превышать точности измерений. Поскольку одна кинематическая картина – это одно уравнение при любых условиях дифракции, описывающее результаты экспериментальных измерений характера влияния дефектов на картину рассеяния, то из него однозначно можно определить неизвестные характеристики только одного эффективно определяющего типа дефектов. Поэтому, когда в кристалле присутствуют в достаточном количестве одновременно дефекты многих типов, возникает проблема неоднозначности диагностики многопараметрической системы по кинематической картине рассеяния. Это проблема невозможности раздельного «видения» и исследования каждого из определяющих типов дефектов отдельно.

В то же время большинство современных наносистем являются многопараметрическими, а монокристаллические изделия содержат одновременно дефекты многих типов.

Поэтому авторами на основе теории именно многократного диффузного рассеяния [8-22] создано диффузодинамическую комбинированную дифрактометрию (ДДКД) [23-28] – новое поколение неразрушающей высокоинформативной структурной диагностики, которое продемонстрировало принципиальные преимущества динамической картины рассеяния перед кинематической и впервые позволило решить проблему однозначной многопараметрической диагностики и обеспечило возможность раздельного «видения» характеристик одновременно многих типов дефектов и особенно многих параметров наноструктур [26-28]. Но при этом встал вопрос о физической природе этих преимуществ, решение которого оказалось наиболее важным и интересным. Впервые явление уникальной информативности динамической картины рассеяния открыто и объяснено в работе [23], а в работе [24] более детально рассмотрена и обоснована физическая природа этого явления. При этом установлено, что открытое явление радикального повышения информативности диагностики при переходе от кинематической картины рассеяния к динамической обусловлено появ-

лением в динамической теории принципиального различия в характерах зависимостей брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния от условий дифракции, а также существенной разницы в зависимостях от условий динамической дифракции удельных вкладов в картину рассеяния от дефектов различного типа. Но это объяснение носило скорее математический характер и не раскрывало до конца физический аспект природы открытого явления. Поэтому в работе [52] создана новая концепция, которая дала более углубленные представления о физической природе открытого явления. При этом установлены физические факторы, обуславливающие как существенное ограничение информативности кинематической картины рассеяния, так и физическую природу радикального повышения информативности картины динамического рассеяния. Это позволило дать единую физическую интерпретацию всего круга явлений и эффектов, обуславливающих различную информативность динамической и кинематической картин рассеяния, а также разработать новые принципы неразрушающей высокоинформативной (многопараметрической и однозначной) диагностики на основе комбинированного подхода.

Поскольку успех высокоточной однозначной многопараметрической количественной диагностики при комбинированном подходе может быть обеспечен только при наличии теоретической модели, адекватно описывающей экспериментальные измерения при всех возможных условиях динамической дифракции (геометрии Лауэ и Брэгга, предельные случаи тонкого и толстого кристаллов, спектральные, азимутальные, деформационные зависимости и др.), а также имеющей минимум упрощений и ограничений, которые уменьшают точность и надежность диагностики, то в настоящей работе анализ проводится на основе модели, максимально удовлетворяющей указанным требованиям.

1. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КИНЕМАТИЧЕСКОЙ И ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИЙ РАССЕЯНИЯ

1.1 Кинематическая картина рассеяния

На рис. 1 приведена схема картины рассеяния в идеальном кристалле и для кристалла с дефектами (в верхнем правом углу экрана).

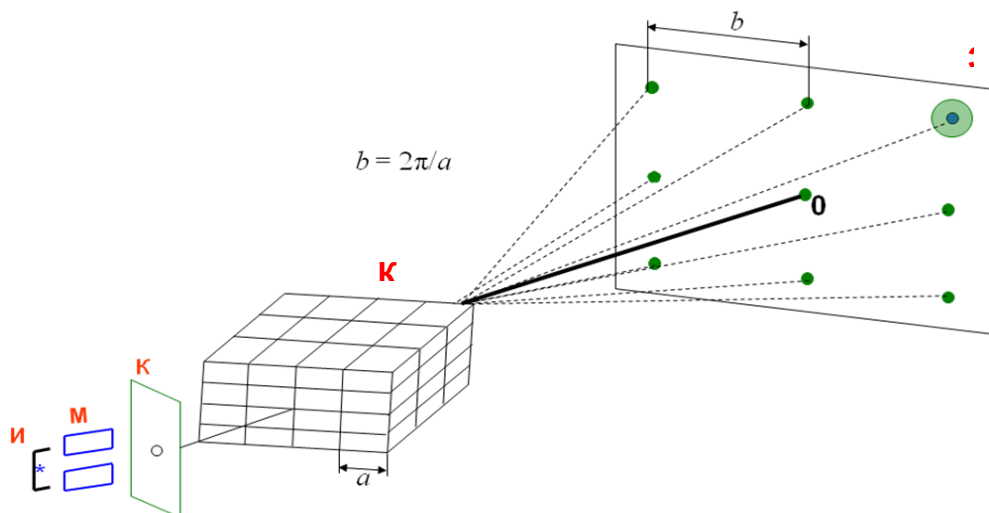


Рис. 1. Картины рассеяния в идеальном кристалле (жирные пятна на экране, размеры и форма которых определяются в кинематической теории только размерами и формой образца) и в кристалле с дефектами (в правом верхнем углу, жирная точка соответствует распределению в обратном пространстве брэгговской компоненты дифрагированной интенсивности, а более светлое пятно вокруг нее – распределению диффузной составляющей).

И – источник, М – монохроматор, К – коллиматор, Кр. – кристалл, Э – экран

Следует отметить, что за этой картиной рассеяния стоит не менее шести нобелевских лауреатов, среди которых: Рентген, Макс Планк, Луи де-Бройль, фон-Лауэ, отец и сын Брэгги, однако не хватает Кривоглаза. Слишком рано Кривоглаз ушел из жизни. В мае сего года ему исполнилось бы 80, но уже прошло более 20 лет, как его не стало.

Наиболее ярко различия между кинематической и динамической теориями рассеяния видны на примере интегральных интенсивностей дифрагированного излучения. Кривоглазовская кинематическая теория дает следующие результаты для полной интегральной интенсивности (ПИИ) кристалла с дефектами (R_i) [7,16]:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD}, \quad (1)$$

$$R_{iB} = R_{ip} e^{-2L}, \quad (2)$$

$$R_{iD} = R_{ip} (1 - e^{-2L}), \quad (3)$$

$$R_{ip} = 2CQt/\gamma_0, \quad (4)$$

$$Q = (\pi|\chi_{h\tau}|)^2/[\lambda \sin(2\theta_B)], \quad (5)$$

где R_{ip} – интегральная интенсивность рассеяния в идеальных кристаллах (без дефектов), $\chi_{h\tau}$ – вещественная часть фурье-компоненты поляризуемости кристалла, θ_B – угол Брэгга, λ – длина волны используемого излучения, t – толщина кристалла, C – поляризационный множитель. Здесь следует особо подчеркнуть, что в выражениях (2) и (3) для брэгговской (R_{iB}) и диффузной (R_{iD}) составляющих ПИИ, зависящим от условий дифракции является только множитель R_{ip} , который в силу своей природы не зависит от структуры дефектов в кристалле. При этом, от характеристик структуры дефектов кристаллической решетки зависят лишь множители, в которые входит статический фактор Кривоглаза-Дебая-Валлера ($E = e^{-L}$), определяемый независимо от условий дифракции для каждого рефлекса.

Следующим важным обстоятельством оказывается то, что интегральная интенсивность рассеяния в кристаллах с дефектами характеризуется двумя интегральными параметрами, которые целесообразно ввести следующим образом. Первый параметр – это общая яркость картины (размытого Лауэ-пятна, изображенного в правом верхнем углу на рис. 1), то есть полная интегральная интенсивность отражения R_i , равная сумме брэгговской и диффузной составляющих (1). Для удобства дальнейшего рассмотрения этот параметр целесообразно нормировать на общую яркость картины в идеальном кристалле (R_{ip}). Второй параметр – это удельный вклад диффузной составляющей или соотношение диффузной и брэгговской составляющих (R_{iD}/R_{iB}). Из выражений (1)-(3) следует, что в кинематической теории неидеальных кристаллов

$$R_i = R_{ip} \text{ или } R_i/R_{ip} = 1, \quad (6)$$

$$R_{iD}/R_{iB} = (1 - e^{-2L})/e^{-2L} \approx 2L, \quad (7)$$

т.е. для каждого выбранного отражения полная интегральная интенсивность не зависит от степени искаженности кристаллической решетки, а единственным структурночувствительным фактором является второй параметр (R_{iD}/R_{iB}), не зависящий от условий дифракции.

Из выражений (6) и (7) для этих двух параметров вытекают два соответствующих закона сохранения кинематической теории. Первый закон сохранения отражает независимость полной интегральной интенсивности R_i (первого параметра) от характеристик структуры дефектов кристалла, т.е. в кинематике R_i для кристалла с дефектами остается таким же, как в идеальном кристалле (R_{ip}), и следовательно, зависит только от условий дифракции. Однако нормализация этого параметра на R_{ip} приводит к потере его зависимости и от условий дифракции и делает его универсальной константой, равной единице в кинематической теории, т.е. полностью неинформативным. Второй закон сохранения кинематической теории указывает на независимость для каждого рефлекса относительного вклада диффузной составляющей (второго параметра) от условий дифракции. Таким образом, в кинематическом случае существует только этот единственный для любых условий дифракции структурночувствительный параметр.

1.2. Обобщенная динамическая теория рассеяния в кристаллах с дефектами нескольких типов

1.2.1. Дифференциальные отражательные способности

1.2.1.1. Общие выражения

В рамках динамической теории рассеяния неидеальными кристаллами [22, 38-40] необходимо учитывать многократность отражения как на периодической, так и на флуктуационной частях восприимчивости кристалла. При этом присутствие дефектов в кристалле влияет не только на когерентную компоненту, но, как и в случае кинематической дифракции в неидеальных кристаллах, является причиной возникновения диффузного рассеяния. Диффузное рассеяние, сформированное при рассеянии волн на искажениях кристаллической решетки, вызванных дефектами, является наиболее чувствительным к дефектной структуре монокристалла. Характер распределения и особенности рассеяния диффузных волн сильно зависят от характеристик того типа дефекта, в результате рассеяния на полях смещения от которого они образовались. В случае дефектов небольших размеров можно ограничиться при рассмотрении интегральных выражений кинематическим, одноволновым приближением в диффузной компоненте рассеяния, когда процессы перерассеяния диффузных волн на периодической части потенциала рассеяния не существенны из-за того, что ширина углового распределения таких волн намного больше ширины когерентного пика. При этом направления их распространения для подавляющего большинства диффузных волн существенно отличаются от условия Вульфа – Брэгга, и следовательно, такие волны не принимают участия в динамической дифракции на периодической части потенциала рассеяния. Однако, когда в кристалле присутствуют дефекты больших размеров (соизмеримых или превышающих длину экстинкции), направления распространения таких волн не сильно отличаются от направления, соответствующего точному выполнению условия Вульфа – Брэгга, и следовательно, такие диффузные волны попадают преимущественно в существенно динамическую область, поэтому для них должны быть существенными динамические эффекты, даже при рассмотрении интегральных вкладов от них.

Согласно вышесказанному в самом общем случае выражение для полной дифференциальной отражательной способности кристалла имеет вид:

$$R(\Delta\theta, \Delta\theta') = R_C(\Delta\theta, \Delta\theta') + R_D(\Delta\theta, \Delta\theta'),$$

где $R_C(\Delta\theta, \Delta\theta')$ и $R_D(\Delta\theta, \Delta\theta')$ – соответственно когерентная и диффузная компоненты дифференциальной отражательной способности, параметры $\Delta\theta$ и $\Delta\theta'$ являются соответственно отклонением падающего луча от точного условия Вульфа-Брэгга и отклонением дифрагированного луча от узла обратной решетки.

С целью нахождения в рамках динамического рассмотрения выражений для когерентной и диффузной составляющих дифференциальной отражательной способности необходимо сперва определить исходные выражения для амплитуд брэгговского и диффузного волновых полей индукции в кристалле, которые создаются при падении из вакуума на кристалл плоской гармонической волны $\vec{E}(\vec{r}) = \vec{E}_0 e^{-i\vec{k}\vec{r} + it\omega/c}$ ($\vec{r}$ – пространственная координата, t – время, ω и c – соответственно частота и скорость света, E_0 – амплитуда падающей волны.). Такие амплитуды можно найти, решая волновое уравнение:

$$\Delta\vec{D}(\vec{r}) + K^2\vec{D}(\vec{r}) + \text{rotrot}(\chi(\vec{r})\vec{D}(\vec{r})) = 0, \quad (8)$$

которое можно получить из системы уравнений Максвелла. Здесь $\vec{D}(\vec{r})$ – индукция волны, $K = 2\pi/\lambda$, λ – длина волны излучения, $\chi(\vec{r})$ – восприимчивость кристалла, умноженная на 4π .

В отличие от идеального кристалла, где восприимчивость есть периодической функцией пространственной координаты и ее можно разложить в ряд Фурье, в кристалле с дефектами $\chi(\vec{r})$ не будет периодической, и вместо ряда Фурье, ее можно представить в виде интеграла Фурье:

$$\chi(\vec{r}) = \frac{v_c}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \chi_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \approx \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}} \chi_{\vec{G}+\vec{q}} e^{-i(\vec{G}+\vec{q})\vec{r}}, \quad (9)$$

где $\vec{G}$ – вектор обратной решетки, умноженный на 2π , $\vec{q}$ – переданный импульс за счет рассеяния на искажениях, вызванных дефектами.

Представляя аналогично восприимчивости индукцию волны $D(\vec{r})$ в виде интеграла Фурье:

$$\vec{D}(\vec{r}) = \frac{v_c}{(2\pi)^3} \int d\vec{q} \vec{D}_{\vec{q}} e^{-i\vec{q}\vec{r}} \approx \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}} \vec{D}_{\vec{G}+\vec{q}} e^{-i(\vec{G}+\vec{q})\vec{r}}, \quad (10)$$

и подставляя (9) и (10) в (8), для амплитуд волн получим следующую бесконечную систему уравнений[30]:

$$(K^2 - k^2) \vec{D}_k - \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{q}} \chi_{\vec{G}+\vec{q}} \vec{k} \times \vec{k} \times \vec{D}_{\vec{k}-\vec{G}-\vec{q}} = 0. \quad (11)$$

Переходя к важному с точки зрения практического применения двухволновому случаю динамической дифракции в рамках развитой в [11,12,16] теории возмущений получим две связанные системы уравнений, одну для сильных брэгговских волн с волновыми векторами $\vec{K}_0$ и $\vec{K}_H = \vec{K}_0 + \vec{H}$ ($\vec{H}$ – вектор обратной решетки):

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0) D_0 + CE \chi_{-H} D_H = - \sum_{\vec{q}} (\delta \chi_{\vec{q}} D_{-\vec{q}} + C \delta \chi_{-\vec{H}+\vec{q}} D_{\vec{H}-\vec{q}}), \quad (12)$$

$$CE \chi_H D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0) D_H = - \sum_{\vec{q}} (C \delta \chi_{\vec{H}+\vec{q}} D_{-\vec{q}} + \delta \chi_{\vec{q}} D_{\vec{H}-\vec{q}}),$$

и другую для диффузных волн с волновыми векторами $\vec{K}_{0q}$ и $\vec{K}_{Hq}$:

$$(-2\varepsilon_{0q} + \chi_0) D_q + CE \chi_{-H} D_{H+q} = -(\delta \chi_{\vec{q}} D_0 + C \delta \chi_{-\vec{H}+\vec{q}} D_{\vec{H}}), \quad (13)$$

$$CE \chi_H D_q + (-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0) D_{H+q} = -(C \delta \chi_{\vec{H}+\vec{q}} D_0 + \delta \chi_{\vec{q}} D_{\vec{H}}),$$

Где ошибки возбуждения определены как:

$$\varepsilon_0 = \frac{K_0 - K}{K} \approx \frac{K_0^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_H = \frac{K_H - K}{K} \approx \frac{K_H^2 - K^2}{2K^2},$$

$$\varepsilon_{0q} = \frac{K_{0q} - K}{K} \approx \frac{K_{0q}^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_{Hq} = \frac{K_{Hq} - K}{K} \approx \frac{K_{Hq}^2 - K^2}{2K^2},$$

и флуктуационная часть Фурье компоненты восприимчивости кристалла задается выражением:

$$\delta \chi_{\vec{G}+\vec{q}} = \chi_{G+q} - \chi_G e^{-L_G} \delta_{0,q}, \quad (14)$$

где

$$\delta_{0,q} = \begin{cases} 1 & , \text{при } \bar{q} = 0 \\ 0 & , \text{при } \bar{q} \neq 0, \end{cases}$$

$E = e^{-L_H}$ – статический фактор Дебая Валера, $\chi_0, \chi_{\pm H}$ – Фурье – компоненты восприимчивости кристалла, C -поляризационный множитель ($C=1$ для σ -поляризации, $C = \cos 2\theta_B$ для π -поляризации, где θ_B – угол Брэгга). Выражение (14), определяющее фурье – компоненты восприимчивости кристалла с дефектами $\chi_{\bar{G}+\bar{q}}$, которая рассматривается как сумма Фурье-компонент средней восприимчивости $\chi_G e^{-L_G} \delta_{0,q}$ и флуктуационной части восприимчивости $\delta\chi_{\bar{G}+\bar{q}}$, позволяет при решении неоднородных систем (12) и (13) воспользоваться методом модифицированной теории возмущений [11,12]. Подставляя решения системы уравнений (6) в (12) и используя метод модифицированной теории возмущений получим следующую основную систему уравнений для сильных брэгговских волн:

$$\begin{aligned} (-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00})D_0 + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H})D_H &= 0, \\ (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0})D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0 + \Delta\chi_{HH})D_H &= 0, \end{aligned} \quad (15)$$

где дисперсионные поправки к восприимчивости, которые обусловлены дефектами, определяются выражениями [17]:

$$\begin{aligned} \Delta\chi_{00} &= -\sum_{\bar{q}} (-2\varepsilon_{0\bar{q}} + \chi_0) V_{00}(\bar{q}) / d(\bar{q}), \\ \Delta\chi_{HH} &= -\sum_{\bar{q}} (-2\varepsilon_{H\bar{q}} + \chi_0) V_{HH}(\bar{q}) / d(\bar{q}), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\Delta\chi_{0H} = C \sum_{\bar{q}} \chi_{-H} V_{0H}(\bar{q}) / d(\bar{q}),$$

$$\Delta\chi_{H0} = C \sum_{\bar{q}} \chi_H V_{H0}(\bar{q}) / d(\bar{q}),$$

$$d(\bar{q}) = (-2\varepsilon_{0\bar{q}} + \chi_0)(-2\varepsilon_{H\bar{q}} + \chi_0) - C^2 E^2 \chi_H \chi_{-H} = 0. \quad (17)$$

В обобщенном виде для (16) будем иметь:

$$\Delta\chi_{GG'} = \sum_{\bar{q}} \tilde{f}_{GG'}(\bar{q}) V_{GG'}(\bar{q}) / d(\bar{q}), \quad (18)$$

где

$$\tilde{f}_{GG'}(\bar{q}) = \begin{cases} (-2\varepsilon_{G\bar{q}} + \chi_0) & \text{при } G = G' \\ E\chi_{H-2G'} & \text{при } G \neq G' \end{cases}.$$

$$V_{GG'}(\bar{q}) = C^2 \delta\chi_{-\bar{q}-\bar{H}+2\bar{G}} \delta\chi_{\bar{q}+\bar{H}-2\bar{G}},$$

где $\delta\chi_{-\bar{q}-\bar{H}+2\bar{G}}$, $\delta\chi_{\bar{q}+\bar{H}-2\bar{G}}$ – Фурье-компоненты флуктуационной части поляризуемости.

Для дисперсионных поправок (18) справедливы [17] выражения: $\Delta\chi_{00} \approx \Delta\chi_{HH} \sim \frac{\mu_{ds}}{K}$, где μ_{ds} – коэффициент экстинкции из-за диффузного рассеяния (см. ниже п. 3), и $\Delta\chi_{H0} \approx \Delta\chi_{0H} \approx 0$.

1.2.1.2. Геометрия Брэгга

Решая систему уравнений (15) с использованием граничных условий для плоскопараллельной кристаллической пластинки в случае Брэгг – дифракции:

$$D_T(\vec{r}) = \sum_{\delta} D_0^{\delta} e^{-i\vec{K}_0^{\delta} \vec{r}} = E_0 e^{-i\vec{K} \vec{r}} \Big|_{z=0}, \quad D_S(\vec{r}) = \sum_{\delta} D_H^{\delta} e^{-i\vec{K}_H^{\delta} \vec{r}} = 0 \Big|_{z=t}, \quad D_S(\vec{r}) = E_S(\vec{r}) \Big|_{z=0},$$

$$\vec{K}_0^{\delta} = \vec{K} + K\Delta_{\delta} \vec{n}, \quad \vec{K}_H^{\delta} = \vec{K}_0^{\delta} + \vec{H},$$

здесь $E_S(\vec{r}) = E_H^a e^{-i\vec{K}_H^{\delta} \vec{r}}$ – амплитуда дифрагированной волны в вакууме, $\vec{K}_H^{\delta} = \vec{K}_0^{\delta} - K\Delta_{\delta} \vec{n}$, t – толщина кристалла, получим следующие выражения для амплитуд проходящей и отраженной когерентных волн:

$$D_0^{\delta} = (-1)^{\delta} E_0 \frac{B_{\delta'}}{B_1 - B_2}, \quad D_H^{\delta} = c^{(\delta)} D_0^{\delta}, \quad (19)$$

где

$$B_{\delta} = c^{(\delta)} e^{-iK\Delta_{\delta} t}, \quad c^{(\delta)} = -\frac{2\gamma_0 \Delta_{\delta} + \chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta}}, \quad \Delta_{\delta} = \frac{1}{2\gamma_0} (\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}) - \frac{\lambda}{2\Lambda} \left[y - (-1)^{\delta} \sqrt{y^2 - 1} \right],$$

$$y = -(\alpha - \alpha_0) \sqrt{b} / \sigma, \quad 2\alpha_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{HH}^{\delta} + (\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}) / b, \quad b = \gamma_0 / |\gamma_H|,$$

$$\sigma^2 = (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0}^{\delta})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^{\delta}), \quad \Lambda = \lambda |\gamma_H| \sqrt{b} / \sigma - \text{длина экстинкции},$$

$\delta = 1, 2$, γ_0 и γ_H – направляющие косинусы падающей и дифрагированной волн соответственно, $\alpha = -\Delta\theta \sin 2\theta_B$.

Решения для амплитуд (19) показывают, что при падении из вакуума плоской волны в кристалле образуется два сильных динамических волновых поля с амплитудами D_0^1 и D_0^2 , которые представляют слабо и сильно поглощающиеся волны. Такая ситуация возникает из-за того, что максимумы сильно поглощающихся стоячих волн попадают на атомные плоскости, и их поглощение, которое пропорционально восприимчивости в среде, становится значительным, тогда как максимумы амплитуды второго волнового поля попадают в межплоскостное пространство, и поглощение таких волн значительно слабее.

Таким образом, для когерентной компоненты отражательной способности в геометрии дифракции по Брэггу получим [17]:

$$R_{coh}(\Delta\theta) = \frac{chx_r - \cos x_i}{L_+ chx_r + \sqrt{L_+^2 - 1} shx_r - L_- \cos x_i + \sqrt{1 - L_-^2} \sin x_i} \quad (20)$$

$$L_{\pm} = \frac{z^2 + g^2 \pm \left[(z^2 - g^2 + \kappa^2 - 1)^2 + 4(zg - p^2) \right]^{1/2}}{\left[(1 - \kappa^2)^2 + 4p^2 \right]^{1/2}}, \quad x_r = \frac{t}{\Lambda_B} (1 - \kappa^2)^{1/2} \left[\left(\sqrt{a^2 + b^2} - a \right) / 2 \right]^{1/2},$$

$$x_i = \frac{t}{\Lambda_B} (1 - \kappa^2)^{1/2} \left[\left(\sqrt{a^2 + b^2} + a \right) / 2 \right]^{1/2}, \quad a = \frac{z^2}{1 - \kappa^2} - g^2 - 1, \quad b = \frac{2gz}{(1 - \kappa^2)^{1/2}} - \frac{2p}{(1 - \kappa^2)},$$

$$\Lambda_B = \frac{\lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_H|}}{2\pi C |\chi_{Hr}|}, \quad g = -\frac{(|\chi_{0i}| + \mu_{ds}(\Delta\theta)/K)(1 + |\gamma_H|/\gamma_0)}{2C |\chi_{Hr}| \sqrt{|\gamma_H|/\gamma_0}}, \quad \kappa = \left| \frac{\chi_{Hi}}{\chi_{Hr}} \right|,$$

$$z = -\frac{2\Delta\theta \sin 2\theta_B + |\chi_{0r}|(1 + |\gamma_H|/\gamma_0)}{2C |\chi_{Hr}| \sqrt{|\gamma_H|/\gamma_0}}.$$

где χ_{Hr} и χ_{Hi} – действительная и мнимая части Фурье-компоненты восприимчивости χ_H , χ_{0r} и χ_{0i} – действительная и мнимая части Фурье-компоненты восприимчивости χ_0 .

Нетрудно проследить, что при выполнении условия толстого кристалла, когда $\mu_0 t \gg 1$ (μ_0 – линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения) выполняется условие $\chi_r \gg 1$, что позволяет упростить (20). Тогда для когерентной компоненты дифференциальной отражательной способности при дифракции по Брэггу получим:

$$R_{coh}(\Delta\theta) = L_+ - \sqrt{L_+^2 - 1}. \quad (21)$$

Диффузно рассеянные волны создаются из-за рассеяния сильных брэгговских волн на флуктуационных полях статических смещений атомов кристалла, которые вызваны хаотически распределенными микродефектами, и тоже формируют в кристалле динамическое волновое поле. В двухволновом случае амплитуды диффузно рассеянных проходящей и дифрагированной плоских волн соответственно $D_{\vec{q}}$ и $D_{\vec{H}+\vec{q}}$, которые образуют диффузные блоховские волны, удовлетворяют системе неоднородных уравнений (13). Эти уравнения описывают процессы многократного перерассеяния диффузных волн $D_{\vec{q}}$ и $D_{\vec{H}+\vec{q}}$ на периодической части кристаллического потенциала, а также процессы однократного рассеяния из сильных брэгговских волн с амплитудами D_0 и D_H в диффузные волны с амплитудами $D_{\vec{q}}$ и $D_{\vec{H}+\vec{q}}$. Для учета процессов двукратного рассеяния на отклонениях от периодичности кристаллического потенциала в диффузных волнах следует сохранить в правой части уравнений (6) все амплитуды $\vec{q}' \neq \vec{q}$, $\vec{q} + \vec{H}$. Затем эти амплитуды можно выразить через D_0 , D_H , $D_{\vec{q}}$, $D_{\vec{H}+\vec{q}}$ с использованием уравнений (11) и подставить в уравнения (13). После этого первого итерационного шага коэффициенты при $D_{\vec{q}}$ и $D_{\vec{H}+\vec{q}}$ в уравнениях (13) получают поправки $\Delta\chi'_{GG'}$, которые полностью совпадают по форме с дисперсионными поправками к волновым векторам сильных брэгговских волн $\Delta\chi_{GG'}$ (18), но зависят от углов выхода $\Delta\theta'$:

$$(-2\varepsilon_{0q} + \chi_0 + \Delta\chi'_{00})D_q + (CE\chi_{-H} + \Delta\chi'_{0H})D_{H+q} = -(\delta\chi_q D_0 + C\delta\chi_{-H+q} D_H), \quad (22)$$

$$(CE\chi_H + \Delta\chi'_{H0})D_q + (-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0 + \Delta\chi'_{HH})D_{Hq} = -(C\delta\chi_{H+q} D_0 + \delta\chi_q D_H),$$

где ε_{0q} и ε_{Hq} – ошибки возбуждения диффузно рассеянных волн и $\Delta\chi'_{GG'}$ – дисперсионные поправки, учитывающие процессы двукратного диффузного рассеяния. Поправки к коэффициентам при амплитудах D_0 и D_H в правой части системы уравнений (22), которые также возникают при выполнении указанного итерационного шага и описывают перерассеяние диффузных волн обратно в сильные брэгговские, пренебрегаются как малые величины более высокого порядка [11, 12, 16, 17].

Налагая граничные условия на амплитуды диффузных волн для случая дифракции по Брэггу и преобразуя полученные амплитуды плоских волн на поверхности кристалла в ам-

плитуду диффузного рассеяния в телесный угол в направлении K' , получим следующее выражение для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности кристаллической пластинки [17]:

$$R_{diff}(\Delta\theta) = F_{dyn}\mu_{00}(\Delta\theta)t/\gamma_0,$$

$$\mu_{00}(\Delta\theta) = \mu_{ds}(\Delta\theta)p(\mu_i t), \quad F_{dyn} = 1 + |\zeta'|bR_{coh} + 2\operatorname{Re}(\zeta'c^{(\delta)}), \quad p(\mu_i t) = \frac{1 - e^{-2\mu_i t}}{2\mu_i t},$$

$$\zeta' = \frac{|CE\chi_H + \Delta\chi_{0H}^\delta|}{|CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{H0}^\delta|},$$

где μ_i – интерференционный коэффициент поглощения.

1.2.1.3 Геометрия Лауэ

Для определения дифференциальной отражательной способности в геометрии дифракции по Лауэ, используем соответствующие для этого случая граничные условия для амплитуд проходящей $D_T(\vec{r})$ и дифрагированной $D_S(\vec{r})$ волн:

$$D_T(\vec{r}) = \sum_{\delta} D_0^\delta e^{-i\vec{K}_0^\delta \vec{r}} = E_0 e^{-i\vec{K}\vec{r}} \Big|_{z=0}, \quad (23)$$

$$D_S(\vec{r}) = \sum_{\delta} D_H^\delta e^{-i\vec{K}_H^\delta \vec{r}} = 0 \Big|_{z=0}, \quad D_S(\vec{r}) = E_S(\vec{r}) \Big|_{z=t}.$$

Таким образом, решая (15) вместе с (23), получим следующие выражения для амплитуд сильных брэгговских волн в кристалле в геометрии дифракции по Лауэ [15] (здесь следует учесть, что в случае Лауэ – дифракции $\gamma_H = |\gamma_H|$, в отличие от случая дифракции по Брэггу, где $\gamma_H = -|\gamma_H|$):

$$D_0^\delta = (-1)^\delta \frac{A_{\delta^*}}{A_1 - A_2} E_0, \quad D_H^\delta = D_0^\delta A_\delta,$$

$$A_\delta = \frac{-2\varepsilon_0^\delta + \chi_0 + \chi_{00}^\delta}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^\delta}.$$

$$\varepsilon_0^\delta = \frac{1}{2} \left(-\alpha + \chi_{0r} - (-1)^\delta \sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2)} \right) + i \frac{1}{2} \left(\chi_{0i} - (-1)^\delta \frac{C^2 E^2 \chi_{Hr} \chi_{Hi}}{\sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2)}} \right).$$

Для когерентной компоненты дифференциальной отражательной способности в геометрии Лауэ будем иметь следующее выражение:

$$R(y) = \frac{|E_H^a|^2}{|E_0|^2} = \frac{1}{|E_0|^2} \left| \sum_{\delta} D_H^\delta e^{-iK\Delta_\delta t} \right|^2 = \frac{e^{-(\mu_0 + \mu_{ds}(y))l}}{2(1+y^2)} \left(ch \frac{\xi C(\mu_0 + \mu_{ds})l}{\sqrt{1+y^2}} - \cos 2A\sqrt{1+y^2} \right), \quad (24)$$

$$\text{где } y = \frac{\Delta\theta \sin 2\theta_B}{CE|\chi_{Hr}|}, \quad A = \frac{\pi C|\chi_{Hr}|l}{\lambda}, \quad \xi = \frac{\chi_{iH}}{\chi_{i0}}, \quad l = \frac{t}{\gamma_0}.$$

Учитывая, что второе слагаемое в (24) при выполнении условия толстого кристалла $\mu_0 l \gg 1$ ($\mu_0 = K\chi_{i0}$ – коэффициент фотоэлектрического поглощения) сильно осциллирует, а также то, что при разложении функции $ch(x)$ на экспоненты слагаемое с отрицательной степенью будет пренебрежимо мало, для $R(y)$ в приближении полубесконечного кристалла получим более простое выражение:

$$R(y) = R_p(y) e^{-\mu_{ds}(y)l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}}\right)}, \quad (25)$$

где $R_p(y) = \frac{1}{4(1+y^2)} e^{-\mu_0 l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}}\right)}$ – когерентная компонента дифференциальной отражательной способности идеального динамически рассеивающего кристалла при дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла.

Решая систему уравнений для амплитуд диффузно рассеянных волн с граничными условиями, соответствующими геометрии дифракции по Лауэ, для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности в приближении толстого кристалла получим следующее выражение [16]:

$$R_{diff}(\Delta\theta) = \frac{1}{K^2} \int dS_K R_D(\vec{k}), \quad (26)$$

$$R_D(\vec{k}) = P_0 \frac{C^2 E^2 K^2 \chi_{Hr}^2}{|\Delta_1 - \Delta_2|^2 |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2} \sum_{\delta, \tau} |\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 |2\gamma_0 \Delta_\delta - \chi_0|^2 |\vec{H}^0 \vec{u}(\vec{q})|^2 \Pi_{\delta\tau}, \quad (27)$$

$$\Pi_{\delta\tau} = \frac{e^{2Kt \operatorname{Im} \Delta_\delta} - e^{2Kt \operatorname{Im} \Delta'_\tau}}{2Kt \operatorname{Im}(\Delta_\delta - \Delta'_\tau)}, \quad \Delta_\delta = \frac{\varepsilon_0^\delta}{\gamma_0} = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-\alpha + \chi_0 - (-1)^\delta \sqrt{\alpha'^2 + C^2 E^2 \chi_H \chi_{-H}} \right),$$

$$\Delta'_\tau = \frac{\varepsilon_{0q}^\tau}{\gamma_0} = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-\alpha' + \chi_0 - (-1)^\tau \sqrt{\alpha'^2 + C^2 E^2 \chi_H \chi_{-H}} \right).$$

где $\alpha' = \Delta\theta' \sin 2\theta_B$, $u_{\vec{q}}$ – компонента Фурье поля смещений от одиночного дефекта.

В приближении тонкого кристалла в геометрии Лауэ диффузная компонента дифференциальной отражательной способности имеет вид:

$$R_{diff}(\Delta\theta) = \frac{C^2}{P} (1 - E^2) Q l e^{-\mu_0 l} \mu_{ds}(\Delta\theta) e^{-\mu_{ds}(\Delta\theta)l}, \quad (28)$$

где $P = \int \mu_{ds}(\Delta\theta) d\theta$, $Q = \frac{(\pi |\chi_{Hr}|)^2}{\lambda \sin(2\theta_B)}$.

1.2.2. Коэффициент экстинкции

Когда в динамически рассеивающем кристалле присутствуют дефекты, искажающие решетку, то кроме статического фактора Дебая – Валлера появляется еще один структурно чувствительный параметр $\mu_{ds}(\Delta\theta)$, впервые введенный в [8] и, независимо, в [31] (в этой работе выражение для $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ получено при условии $\Delta\theta = 0$, где $\Delta\theta$ – угловое отклонение от точного условия Вульфа – Брэгга). Параметр $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ описывает эффективное поглощение или экстинк-

цию когерентных волн из-за их рассеяния на дефектах и ухода в диффузные волны, которые, в свою очередь также рассеиваются динамически. В работах [8,31] выражение для μ_{ds} имеет вид:

$$\begin{aligned}\mu_{ds}(k_0) &= cC^2E^2m_0J(k_0), \\ J(k_0) &= \frac{1}{\pi} \int dS_{K'} F(\vec{q}),\end{aligned}\quad (29)$$

где интегрирование в (29) проводится по сфере Эвальда вблизи узла обратной решетки, $F(\vec{q}) = |\nu_{\vec{q}}|^2$, $\nu_{\vec{q}} = \vec{H}\vec{u}_{\vec{q}}$, $m_0 = 2\pi\nu_c \left(\frac{H|\chi_{Hr}|}{2\lambda} \right)^2$, λ – длина волны излучения, K' – волновой вектор диффузно рассеянной плоской волны. В случае сферически симметричных кластеров поле смещения атомов решетки дается выражением:

$$\vec{u}(\vec{r}) = A \frac{\vec{r}}{r^3};$$

и таким образом

$$\vec{v}(\vec{r}) = A \frac{(\vec{H}\vec{r})}{r^3};$$

откуда для Фурье-компоненты имеем:

$$\begin{aligned}\vec{v}_q &= \frac{4\pi i A (\vec{H}\vec{q})}{\nu_c q^2}, \\ \vec{v}_q &= \frac{4\pi i A (\vec{H}\vec{q})}{\nu_c q^2}.\end{aligned}$$

Поскольку $q \ll K$, то в (29) удобно перейти от интегрирования по сфере к интегрированию по плоскости П, аппроксимирующей сферу Эвальда вблизи узла обратной решетки H (рис. 2). Переходя в этой плоскости к полярным координатам $\vec{k} = (\kappa \cos \varphi, \kappa \sin \varphi, k_0)$, подставляя в (29) $dS_{K'} = \kappa d\kappa d\varphi$, $\vec{H}\vec{q} = Hq \cos \varphi \cos \theta_B$, где θ_B – угол Вульфа – Брэгга, для μ_{ds} в соответствии с [8-10] получим:

$$\mu_{ds} = c(C|\chi_H|)^2 \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{2\nu_c \lambda^2} \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}, \quad (30)$$

ν_c – объем элементарной ячейки кристалла, c – концентрация дефектов. Поскольку для хаотически ориентированных дислокационных петель [31]:

$$\langle |\vec{v}_q|^2 \rangle = \left(\frac{\pi R_0^2 b H}{\nu_c} \right)^2 \frac{B_1 + B_2 (\vec{H}^0 \vec{q}^0)^2}{q^2}$$

$\vec{H}^0 = \vec{H}/H$, то можно получить для них:

$$\mu_{ds} = c(C|\chi_H|)^2 \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{\nu_c \lambda^2} \left(B_1 + \frac{B_2}{2} \cos^2 \theta_B \right) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}, \quad (31)$$

где $q_m = \frac{2\pi}{R_{eff}}$ – граница раздела между областями диффузного рассеяния Хуаня и Стокса –

Вильсона, $q_c = \frac{2\pi}{\Lambda_\sigma}$ – параметр обрезания со стороны малых q , $\Lambda_\sigma = \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_H} |\chi_{Hr}|^{-1}$ – экс-

тинкционная длина, для хаотически ориентированных дислокационных петель $B_1 = \frac{4}{15}(\pi b R_L^2 / \nu_c)^2$, $B_2 = \beta B_1$, $\beta = \frac{1}{4}(3\nu + 6\nu - 1)(1 - \nu)^{-2}$, b – модуль вектора Бюргерса петли, R_L – радиус петли, ν – коэффициент Пуассона,

$$R_{eff} = \begin{cases} R_L \sqrt{HbE}, & \text{для дислокационных петель} \\ \sqrt{HA_{cl}} E, & \text{для кластеров} \end{cases}$$

$A_{cl} = \Gamma \varepsilon R_p^3$, $\Gamma = \frac{1}{3}(1 + \nu)(1 - \nu)^{-1}$, ε – деформация на границе кластера, R_p – радиус кластера.

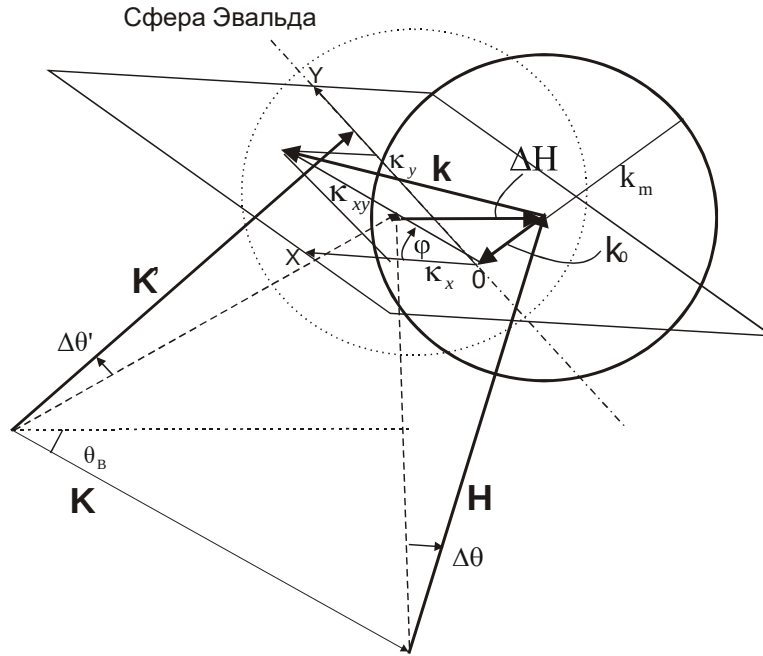


Рис. 2. Схема волновых векторов в геометрии Брэгга

Выражение (30) получено Дедериксом с целью описания интегральных брэгговских интенсивностей в предположении при интегрировании, что $\mu_{ds}(\Delta\theta) \approx \mu_{ds}(0)$, т.е. равно всегда значению, справедливому, когда направление падающего луча $\vec{K}$ соответствует точно условию Вульфа – Брэгга. Но в связи с широким применением метода кривых качения для диагностики реальных кристаллов, а также для учета динамических эффектов в диффузной компоненте отражательной способности, более важным является выражение для μ_{ds} , полученное в [16,17,31], где оно явно зависит от отклонения $\Delta\theta$ направления падающего луча от точного Брэгговского условия. В результате такого отклонения узел обратной решетки H не попадает точно на сферу Эвальда, а отклоняется от нее на величину q_0 (рис. 2). В этом случае удобно перейти к цилиндрической системе координат $\vec{q} = (\kappa \cos \varphi, \kappa \sin \varphi, q_0)$, где $\kappa = \sqrt{q^2 - q_0^2}$, $dS_{\vec{K}} = \kappa d\kappa d\varphi$, $\vec{H}_0 = (\cos \theta_B, 0, \sin \theta_B)$, и тогда для (22) получается:

$$\mu_{ds}(q_0) = \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{\nu_c \lambda^2} \begin{cases} \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m}{q_c} + (\sin^2 \theta_B - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B) q_0^2 \left(\frac{1}{q_c^2} - \frac{1}{q_m^2} \right), & |q_0| \leq q_c \\ \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m}{q_c} + (\sin^2 \theta_B - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B) q_0^2 \left(\frac{1}{q_0^2} - \frac{1}{q_m^2} \right), & |q_0| > q_c. \end{cases} \quad (32)$$

Однако в приведенных выше выражениях не учитывался тот факт, что диффузное рассеяние имеет различный характер в двух областях: Хуаня и Стокса – Вильсона, и функция $|\nu_q|^2$ ведет себя в этих областях соответственно как $\sim \frac{1}{q^2}$ и $\sim \frac{1}{q^4}$ [31]. Позже, в работах [32,33] было учтено различное поведение выражений для интенсивностей диффузного рассеяния в областях Хуаня и Стокса – Вильсона, т.е.

$$|\nu_q|^2 = \left(\frac{B_1 + B_2(\vec{H}^0 \vec{q}^0)^2}{q^2} \right) \frac{1}{q^2} \quad \text{в области Хуаня,} \quad (33)$$

$$|\nu_q|^2 = \left(\frac{B_1 + B_2(\vec{H}^0 \vec{q}^0)^2}{q^2} \right) \frac{k_m^2}{q^4} \quad \text{в области Стокса – Вильсона,}$$

где $\vec{q}^0 = \vec{q}/q$. С учетом соотношений (33), для (29) получается (при условии $R_{eff} \ll \Lambda$) [34]:

$$J(k_0) = \begin{cases} b_1 \left(1 - \frac{k_0^2}{k_c^2} \right) + b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_c^2} \right) + b_3 k_0^2 \left(\frac{1}{2k_m^2} - \frac{1}{k_c^2} \right), & |k_0| \leq k_c \\ b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_0^2} \right) + b_3 \left(\frac{k_0^2}{2k_m^2} - 1 \right), & k_c \leq |k_0| \leq k_m \\ \left(b_2 - \frac{1}{2} b_3 \right) \frac{k_m^2}{k_0^2}, & |k_0| > k_m \end{cases} \quad (34)$$

где $k_0 = K\Delta\theta \sin 2\theta_B$, $k_c \equiv q_c$, $k_m = q_m$, $b_1 = B_1 + B_2/3$, $b_2 = B_1 + \frac{1}{2} B_2 \cos^2 \theta_B$, $b_3 = \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B (1 - 2 \tan^2 \theta_B)$,

для хаотически ориентированных дислокационных петель $B_1 = \frac{4}{15} (\pi b R_L^2 / \nu_c)^2$, $B_2 = \beta B_1$,

$\beta = \frac{1}{4} (3\nu + 6\nu - 1)(1 - \nu)^{-2}$, для кластеров $B_1 = 0$, $B_2 = (4\pi A_{cl} / \nu_c)^2$.

Когда размеры дефектов соизмеримы с глубиной экстинкции Λ , диффузное рассеяние от таких дефектов концентрируется в непосредственной близости к брэгговскому пику, т.е., в области обрезания $k \sim k_c$, выражения для полной интегральной интенсивности (ПИИ), которая представляется суммой когерентной и диффузной компонент интегральной интенсивности рассеяния, с $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ в форме (34) не являются корректными в случае крупных дефектов.

В работах [32,33] был учтен комплексный характер передаваемого импульса $\vec{q} = \vec{k} + i\mu\vec{n}$, что обусловлено учетом многократности диффузного рассеяния на периодической части восприимчивости и позволило авторам устранить расходимость интеграла (29) вблизи узла обратной решетки при $k \rightarrow 0$, и получить аналитические выражения для $\mu_{ds}(\Delta\theta)$, корректные и в случае крупных дефектов

$$J(k_0) = \begin{cases} J_H(k_0) + J_{H-SW}(k_0) + J_H^*(k_0), & \text{при } |k_0| < k_m \\ J_{SW}(k_0), & \text{при } |k_0| \geq k_m \end{cases}, \quad (35)$$

где

$$J_H(k_0) = b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2 + \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \right) + \left(b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2 \right) \left(\frac{1}{k_m^2 + \mu_i^2} - \frac{1}{k_0^2 + \mu_i^2} \right),$$

$$J_{H-SW}(k_0) = \frac{k_m^2}{k_m^2 + \mu_i^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2}{k_m^2 + \mu_i^2} \right),$$

$$J_{SW}(k_0) = \frac{k_m^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \right), \quad b_4 = B_2 \left(\frac{1}{2} \cos^2 \theta_B - 1 \right).$$

$$J_H^*(k_0) = \text{sgn}(\Delta\theta) \text{sgn}(\varepsilon) b_1 \left(\sqrt{k_m^2 + \mu_i^2} - \sqrt{k_0^2 + \mu_i^2} \right),$$

где e – основание натурального логарифма, интерференционный коэффициент поглощения μ_i в геометрии Брэгга при асимптотике $\Delta\theta', \Delta\theta \rightarrow \infty$ имеет вид $\mu_i = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} \frac{1 + \gamma_0 / |\gamma_H|}{2}$.

Рассмотрим выражение для коэффициента экстинкции в геометрии Лауэ (рис. 3) в случае больших дефектов. При интегрировании в (29) разложим волновой вектор диффузно рассеянной волны $\vec{k}$ на составляющие $\vec{k}_0$ и $\vec{k}'$ таким образом, чтобы $\vec{k}_0 \perp S_{K'}$, а $\vec{k}'$ лежал в плоскости $S_{K'}$. Кроме того, в плоскости интегрирования перейдем к полярным координатам $\vec{k}' = (k' \cos \varphi, k' \sin \varphi)$. Тогда $q^2 = k_0^2 + k'^2 + \mu_i^2$, $\vec{k} = (k' \cos \varphi, k' \sin \varphi, k_0)$, $\vec{H}_0 = (-\sin \theta_B, 0, \cos \theta_B)$. Таким образом, для (22) получим:

$$F(\vec{q}) = \left(B_1 + B_2 \frac{k'^2 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta_B + k_0^2 \cos^2 \theta_B - k_0 k' \cos \varphi \sin 2\theta_B}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2} \right) \frac{1}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2}. \quad (36)$$

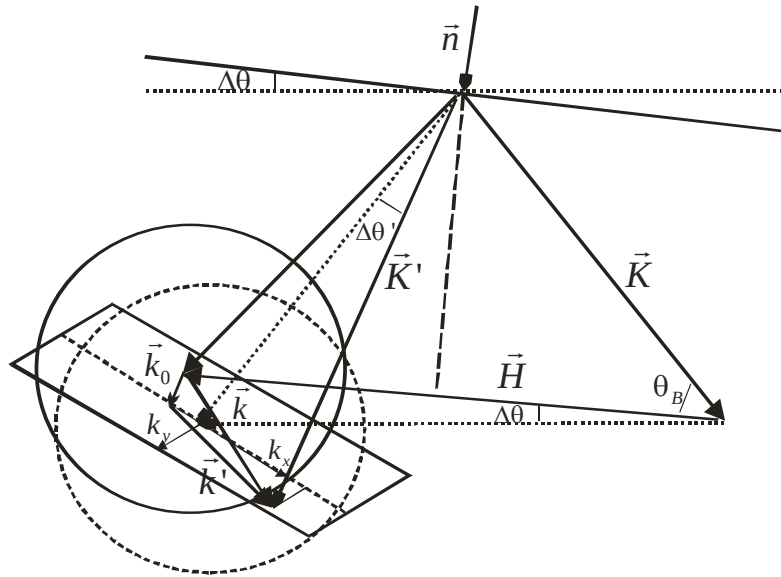


Рис. 3. Схема волновых векторов в обратном пространстве при дифракции по Лауэ

Элемент площади интегрирования в выбранной системе координат будет иметь вид $dS_{K'} = k' dk' d\varphi$. Подставляя (36) в (29) и выполняя интегрирование, с учетом различного характера рассеяния в областях Хуаня и Стокса – Вильсона для дифференциального коэффициента экстинкции когерентного рассеяния из-за ухода его части в диффузный фон в случае геометрии дифракции по Лауэ получим такие же выражения как и (35), но с коэффициентами b_i в виде:

$$b_2 = B_1 + \frac{B_2}{2} \sin^2 \theta_B, \quad b_3 = B_2 \left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta_B - \cos^2 \theta_B \right), \quad b_4 = \frac{1}{2} B_2 \sin^2 \theta_B,$$

и с интерференционным коэффициентом поглощения в виде

$$\mu_i = \frac{KCE\chi_{Hr}\chi_{Hi}}{\gamma_0\sqrt{\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2}},$$

при тех же асимптотиках $\Delta\theta', \Delta\theta \rightarrow \infty$.

В случае нескольких типов дефектов, в том числе и крупных, следует учесть, что при пренебрежении корреляциями в расположении дефектов имеет место линейная суперпозиция вкладов в величины L_H и $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ от разных типов дефектов [33,50]:

$$L_H = \sum_{\alpha=1}^n L_H^\alpha; \quad \mu_{ds} = \sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^\alpha;$$

где n – количество типов дефектов; α – индекс, обозначающий соответствующий тип дефекта.

1.2.3. Интегральные интенсивности в случае малых эффектов экстинкции

По мере развития интегральных методов диагностики, возникла необходимость получить выражения для ПИИ, которая является суммой когерентной и диффузной компонент. Динамические экстинкционные эффекты в ПИИ учитываются когерентным и диффузным факторами экстинкции, в результате чего выражения для ПИИ в разных условиях дифракции имеют универсальный вид:

$$R_i = ER_{ip}F_{ds}^{coh} + R_{id}^{kin}F_{ds}^{diff},$$

где R_{ip} – интегральная интенсивность рассеяния для идеального динамически рассеивающего кристалла, E – фактор Кривоглаза – Дебая – Валлера, R_{id}^{kin} – диффузная компонента рассеяния кинематически рассеивающего кристалла, F_{ds}^{coh} и F_{ds}^{diff} – соответственно когерентный и диффузные факторы экстинкции.

В случае малых эффектов экстинкции интегральные интенсивности, которые в общем случае выражаются через интегральные факторы экстинкции, можно выразить через интегральные коэффициенты экстинкции.

1.2.3.1. Лауэ, тонкий кристалл

Для геометрии дифракции по Лауэ в приближении тонкого кристалла ($\mu_0 l \ll 1$, $l = t / \cos\theta_B$, t – толщина кристалла, μ_0 – линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения) выражение для ПИИ дается выражением [11,16]:

$$R_i = e^{-\mu_0 l} [CQE I_0(h_s) F_{ds}^{coh} + (1 - E^2) Q I F_{ds}^{diff}], \quad (37)$$

где I_0 – функция Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента, $h_s = \mu_H l C E$ – динамический коэффициент фотоэлектрического поглощения. Введенные в (37) интегральные факторы экстинкции определены как:

$$F_{ds}^{coh} = \int_{-\infty}^{\infty} R_C(k_0) e^{-\mu_{ds}(k_0)l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (38)$$

$$F_{ds}^{diff} = \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}(k_0) e^{-\mu_{ds}(k_0)l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (39)$$

где $R_C(k_0)$ – когерентная компонента кривой отражения.

В случае малых эффектов экстинкции из-за диффузного рассеяния ($\mu_{ds}(0)l \ll 1$) факторы (38) и (39) сводятся к

$e^{-\mu_{ds}^0 l}$ и $e^{-\mu^* l}$ соответственно,

$$F_{ds}^{coh} = e^{-\mu_{ds}^0 l} \quad (40)$$

$$F_{ds}^{diff} = e^{-\mu^* l}, \quad (41)$$

где интегральные коэффициенты экстинкции даются выражениями:

$$\mu_{ds}^0 = \int_{-\infty}^{\infty} R_C(k_0) \mu_{ds}(k_0) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (42)$$

$$\mu^* = \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}^2(k_0) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}(k_0) dk_0 \right]^{-1}. \quad (43)$$

Поскольку при малых размерах дефектов ширина функции $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ значительно больше, чем $R_C(k_0)$, то последнюю можно рассматривать как δ – функцию, и в результате получим $\mu_{ds}^0 = \mu_{ds}(0)$, а с учетом (34) для (42) и (43) будем иметь:

$$\mu_{ds}^0 = cC^2 m_0 B, \quad (44)$$

$$B = b_1 + b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_c^2} \right),$$

$$\mu^* = \mu_{ds}^0 f(r_0), \quad (45)$$

$$f(r_0) = \begin{cases} (5 + 2r_0 \ln r_0 - 3,8r_0)/(3(1 - \ln r_0)), & \text{для дислокационных петель,} \\ (4 + r_0 \ln r_0 - 2r_0)/(5 - 6 \ln r_0), & \text{для сферических кластеров,} \end{cases}$$

где $r_0 = R_0 / \Lambda$, R_0 – радиус дефекта.

Таким образом, для ПИИ в геометрии Лауэ, в приближении тонкого кристалла с учетом малых эффектов экстинкции будем иметь:

$$R_i = e^{-\mu_0 l} [CQE I_0(h_s) e^{-\mu_{ds}^0 l} + (1 - E^2) Q l e^{-\mu^* l}].$$

В случае дефектов больших размеров приближение $\mu_{ds}^0 = \mu_{ds}(0)$ становится не корректным, и для определения коэффициентов экстинкции необходимо интегрировать (42), (43) с учетом (35).

1.2.3.2. Лауэ, толстый кристалл

Когерентный интегральный фактор экстинкции F_{ds}^{coh} в геометрии дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла согласно (25) описывается выражением:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) e^{-\mu_{ds}(y) l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right)} dy}{\int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) dy}. \quad (46)$$

В случае малых эффектов экстинкции будем иметь:

$$F_{ds}^{coh} = e^{-\mu_{ds}^0 l},$$

В отличие от геометрии дифракции по Брэггу, где характерной особенностью динамической дифракции является эффект полного отражения, в геометрии дифракции по Лауэ наблюдается эффект аномального прохождения рентгеновских лучей. Этот эффект заключается в том, что в малой угловой области в непосредственной близости от угла Брэгга наблюдается значительная интенсивность прошедшего излучения даже в достаточно толстых монокристаллах ($t \gg t_{abs}$, где t_{abs} – глубина абсорбции, обратно пропорциональная фотоэлектрическому коэффициенту поглощения μ_0), что вызвано существенным интерференционным уменьшением коэффициента поглощения для таких волн.

В случае толстого кристалла диффузное рассеяние от дефектов небольших размеров из-за его широкого углового распределения практически полностью поглощается (кроме малой части, которая попадает в указанный узкий угловой интервал), за исключением небольшого слоя (толщина которого порядка длины абсорбции) на выходной стороне кристалла.

Однако в случае дефектов больших размеров, направления распространения диффузных волн от которых преимущественно попадают в указанный узкий угловой интервал, для диффузного рассеяния также становится существенным эффект аномального прохождения. Следовательно, объем формирования диффузных волн в этом случае значительно больше, чем в случае дефектов небольших размеров. Эта особенность приводит к тому, что при исследовании кристаллов в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла чувствительность к динамическим экстинкционным эффектам в диффузном рассеянии от крупных дефектов значительно возрастает. При этом существенно важными в данном случае являются выражения для интенсивности рассеяния в кристаллах с дефектами больших размеров, диффузное рассеяние от которых имеет преимущественно динамический характер.

Диффузный фактор экстинкции в геометрии Лауэ в толстом кристалле определяется выражением:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{2P_0}{\pi K t} \sum_{\delta, \tau} I_{\delta\tau},$$

$$I_{\delta\tau} = \frac{1}{K^3 \sin 2\theta_B} \int D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') F(\vec{q}) \rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') (e^{2Km_\delta(\alpha)} - e^{2Km_\tau(\alpha')}) d\vec{k}, \quad (47)$$

$$m_\delta(\alpha) = \text{Im } \Delta_\delta(\alpha) = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-|\chi_{0i}| - (-1)^\delta \frac{C^2 E^2 \chi_{Hr} \chi_{Hi}}{\sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2)}} \right) - \frac{\mu_{ds}(\alpha)}{2\gamma_0 K}, \quad P_0 = \frac{ctv_c H^2}{16\gamma_0^3 \lambda^2},$$

$$D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{|\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 |2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_{0i}|^2}{|\Delta_1 - \Delta_2|^2 |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2}.$$

Здесь слагаемые $I_{\delta\tau}$ описывают вклад в интенсивность диффузного рассеяния от сильно ($\tau = 2$) и слабо ($\tau = 1$) поглощающихся диффузных волновых полей, которые сформированы при рассеянии на искажениях кристаллической решетки сильно ($\delta = 2$) и слабо ($\delta = 1$) поглощающихся когерентных волн.

Для определения диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла при малых эффектах экстинкции и малых размерах дефектов в (47) перейдем от переменных интегрирования k_x, k_z к переменным $y = (|\vec{K} + \vec{H}| - K)/(KCE\sqrt{\chi_{Hr}\chi_{-Hr}})$, $y' = (|\vec{K}' - \vec{H}| - K)/(KCE\sqrt{\chi_{Hr}\chi_{-Hr}})$, воспользовавшись соотношениями:

$$k_x = ((y'-y)\cos\psi / \operatorname{tg}\theta_B) + (y'+y)\sin\psi \pi / \Lambda ,$$

$$k_z = (-(y'-y)\sin\psi / \operatorname{tg}\theta_B) + (y'+y)\cos\psi \pi / \Lambda .$$

В результате получим:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{P_0(KCE|\chi_{Hr}|)^2(K\Lambda)^2}{16\pi^2 K \sin^2 \theta_B R_{iD}^{kin}} \sum_{\delta, \tau=1,2} I_{\delta\tau}, \quad (48)$$

$$I_{\delta\tau} = \iint y y' f_{\delta\tau}(y, y') \Pi_{\delta\tau}(y, y'),$$

$$f_{\delta\tau}(y, y') = \frac{|\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 |2\gamma_0 \Delta_\delta - \chi_0|^2}{(y^2 + 1)(y'^2 + 1)} \int dk_y |\bar{H}_0 \bar{u}(\bar{q}_{\delta\tau})|^2,$$

$$\Pi_{\delta\tau} = e^{-\mu_0 l} \frac{e^{-m_\delta(y)} - e^{-m_\tau(y')}}{m_\tau(y') - m_\delta(y)},$$

$$m_\delta(y) = \mu_{ds}(y)l + (-1)^\delta \frac{\mu_H l C}{\sqrt{y^2 + 1}}.$$

Множитель $\Pi_{\delta\tau}$ в подинтегральном выражении (48) описывает эффект аномального прохождения диффузно рассеянных волн [15,50] и является резко убывающей функцией переменных y и y' . Множители $f_{\delta\tau}$ в (48) представляют собой плавные функции y и y' . Ввиду этого для асимптотической оценки интеграла (48) при $\mu_H l \gg 1$ можно воспользоваться методом Лапласа [15,50], согласно которому асимптотика интеграла:

$$F(\lambda) = \int_a^b dx f(x) e^{\lambda S(x)}$$

при выполнении условий $\lambda \rightarrow \infty$, $S''(x_0) \neq 0$, $a < x_0 < b$ (x_0 – точка максимума функции $S(x)$) имеет вид:

$$F(\lambda) \approx f(x_0) \sqrt{\frac{-2\pi}{\lambda S''(x_0)}} e^{\lambda S(x_0)}.$$

Таким образом, для диффузного фактора экстинкции получим:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{\alpha C E |\chi_{Hr}| \mu_{ds}^0}{16 \sin^2 \theta_B \mu_H C \gamma_0^2 R_{iD}^{kin}} \sqrt{\frac{2\pi}{\mu_H l C}} e^{-(\mu_0 - \mu_H C + \mu_{ds}^0)l}.$$

1.2.3.3. Брэгг, тонкий и толстый кристаллы

В приближении тонкого кристалла выражение для когерентного фактора экстинкции в геометрии Брэгга имеет вид:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (49)$$

где

$$r(z; t, g, \kappa) = \frac{chx_r - \cos x_i}{L_+ chx_r + \sqrt{L_+^2 - 1} shx_r - L_- \cos x_i + \sqrt{1 - L_-^2} \sin x_i}.$$

Вообще говоря, выражение (49) описывает экстинкционные эффекты в когерентном рассеянии как в приближении тонкого, так и толстого кристаллов, однако в последнем случае выражение для интегрального когерентного фактора (49) можно значительно упростить, в следствие того, что при выполнении условия $\mu_0 t \rightarrow \infty$ справедливо приближение $\chi_r \rightarrow \infty$. Тогда когерентный фактор экстинкции в геометрии Брэгга в приближении толстого кристалла будет иметь вид:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (50)$$

где $r(z; t, g, \kappa) = L_+ - \sqrt{L_+^2 - 1}$.

Когерентный фактор экстинкции при дифракции на отражение в случае малых эффектов экстинкции дается выражением:

$$F_{ds}^{coh} = 1 - \frac{3\pi s}{4}, \quad (51)$$

где $s = \frac{(\mu_0 + \mu_{ds}^0)\Lambda E}{\gamma C}$, и должно выполняться условие $s \ll 1$.

Для диффузного фактора экстинкции при учете немалых эффектов экстинкции в геометрии Брэгга будем иметь:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{c\nu}{(2\pi)^3 L_H} \int d\vec{k} |\vec{H}\vec{u}_{\vec{k}}|^2 \frac{1 - e^{-2\mu_i t}}{2\mu_i t}. \quad (52)$$

Полагая, что $\mu_{ds}(0) \ll \mu_0$, и выполняя соответствующие разложения по малому параметру, получим в приближении толстого кристалла:

$$F_{ds}^{diff} \approx \frac{\gamma/2}{(\mu_0 + \mu^*)t}, \quad (53)$$

где $\gamma = \frac{1}{1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|}$.

В приближении тонкого кристалла для интегрального диффузного фактора экстинкции в геометрии Брэгга будем иметь:

$$F_{ds}^{diff} \approx \frac{1}{1 + (\mu_0 + \mu^*)t/\gamma}.$$

Как следует из выражений для факторов экстинкции в различных случаях дифракции, выражения для ПИИ в общем случае не являются аддитивными относительно вкладов в них дефектов разных типов. Это обусловлено нелинейным, как правило, характером зависимостей ПИИ от структурночувствительных параметров L_H , μ_{ds}^0 и μ^* .

1.2.4. Интегральные интенсивности в случае больших эффектов экстинкции

1.2.4.1. Лауэ, тонкий кристалл

Интегральный фактор экстинкции F_{ds}^{coh} когерентной составляющей ПИИ в геометрии Лауэ при приближении тонкого кристалла в случае присутствия в кристалле нескольких типов дефектов дается выражением:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{I_{coh}}{R_{ip}} = \int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) e^{-\sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}(k_0)l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1} \quad (54)$$

здесь $R(k_0)$ – дифференциальная отражательная способность идеального кристалла с учетом статического фактора Дебая – Валлера. Однако, в отличие от [32], здесь коэффициент эффективного поглощения или экстинкции за счет диффузного рассеяния $\mu_{ds}^\alpha(k_0)$ дается выражением (35), справедливым и в случае крупных дефектов. Пренебрегая динамическими осцилляциями дифференциальной отражательной способности идеального кристалла при интегрировании, и учитывая, что в таком случае $R(k_0) = \frac{K^2 \sigma_0^2}{2(k_0^2 b + K^2 \sigma_0^2)} e^{-\mu_0 l}$, где $K = \frac{2\pi}{\lambda}$, λ – длина волны излучения, $\sigma_0^2 = C_j^2 E^2 \chi_H \chi_{-H}$, для R_{ip} получим:

$$R_{ip} = \frac{\pi K \sigma_0}{2\sqrt{b}} e^{-\mu_0 l}.$$

Для рассмотрения интеграла I_{coh} удобно величины $k_{m\alpha}$, разделяющие области Хуаня и Стокса – Вильсона, расположить в порядке возрастания, т.е. $k_{m1} < k_{m2} < k_{m3} < \dots < k_{mn}$, n – количество типов дефектов в кристалле. Учитывая четность подинтегрального выражения, I_{coh} можно представить следующим образом: первый интеграл берется по интервалу $k_0 \in (0, k_{m1}]$, в этом интервале все $\mu_{ds}^\alpha(k_0)$ будут представлены в виде, соответствующем области Хуаня, второй интеграл берется по интервалу $k_0 \in (k_{m1}, k_{m2}]$, здесь $\mu_{ds}^1(k_0)$ будет представляться в виде, соответствующем области Стокса – Вильсона, а все остальные $\mu_{ds}^\alpha(k_0)$ области Хуаня, и т. д. В интервале $k_0 \in (k_{mn}, \infty)$ все интегралы будут иметь вид, соответствующий области Стокса – Вильсона. Таким образом, для F_{ds}^{coh} получим:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{K^2 \sigma_0^2}{\gamma R_{ip}} e^{-\mu_0 l} \left(\sum_{i=0}^{n-1} e^{-\beta_{5i} + \beta_{4i}} \int_{k_{mi}}^{k_{mi+1}} \frac{(k_0^2 + \mu^2)^{\beta_{1i}}}{k_0^2 + A_1^2} e^{-\left(\frac{\beta_{3i}}{k_0^1} + \frac{\beta_{2i}}{2} k_0^2\right)} dk_0 + 2 \int_{k_{mn}}^{\infty} \frac{e^{-\left(\frac{\beta_{3n}}{k_0^2}\right)}}{k_0^2 + A_1^2} dk_0 \right),$$

$$\text{где } \beta_{1i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{2j}, \quad \beta_{2i} = \sum_{j=i+1}^n \frac{F_j l b_{3j}}{k_{mj}^2}, \quad \beta_{3i} = \sum_{j=1}^i F_j l (b_{2j} - \frac{1}{2} b_{3j}) k_{mj}^2, \quad \beta_{4i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{3j},$$

$$\beta_{5i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{2j} \ln[e(k_{mj}^2 + \mu^2)], \quad A_1^2 = \frac{K^2 \sigma_0^2}{\gamma}, \quad F_j = c_j C^2 E^2 m_0.$$

Когда эффективные размеры дефектов намного меньше длины экстинкции, распределение диффузного фона, создаваемого такими дефектами, намного шире когерентного пика, т.е., направления распространения определяющего большинства диффузных волн значительно отклоняются от угла Брэгга и поэтому в таком случае, при определении интегральной интенсивности диффузного фона, можно пренебречь динамическими эффектами в диффузном рассеянии, так как их удельный вклад пренебрежимо мал. Однако когда размеры дефектов соизмеримы с длиной экстинкции, распределение диффузного фона узкое и все диффузно рассеянные волны по направлению распространения не сильно отличаются от когерентных волн, т.е., сосредоточены в существенно динамической области. В таком случае необходимо учитывать динамический характер диффузного рассеяния. При этом диффузная составляющая ПИИ имеет вид:

$$R_{iD} = C^2 (1 - E^2) F_{ds}^{diff} Q l e^{-\mu_0 l}.$$

С учетом динамических эффектов в диффузном рассеянии интегральный фактор экстинкции соответствующей компоненты ПИИ будет даваться выражением:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{I_{diff}}{I_0} = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) e^{-\sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^{\alpha}(k_0)l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) dk_0 \right]^{-1}. \quad (55)$$

Здесь следует отметить, что, с другой стороны, справедливо также выражение:

$$I_0 = (1 - E^2) R_{ip}^{kin} \approx R_{ip}^{kin} 2L_H.$$

Учитывая (10) и (11), для I_0 получим:

$$I_0 = \sum_{\alpha=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) dk_0 = 2 \sum_{\alpha=1}^n F_{\alpha} \left[b_{2\alpha} \left[3k_{m\alpha} - 2\mu \arctg\left(\frac{k_{m\alpha}}{\mu}\right) \right] - \frac{5k_{m\alpha}b_{3\alpha}}{6} + k_{m\alpha} \left(b_{2\alpha} - \frac{1}{2}b_{3\alpha} \right) \right].$$

Упорядочивая $k_{m\alpha}$ так же, как и при вычислении F_{ds}^{coh} , получим для F_{ds}^{diff} :

$$F_{ds}^{diff} = \frac{2}{I_0} = \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} e_i \left[(\beta_{5i} - \beta_{4i}) I_i - \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} \frac{\partial I_i}{\partial \beta_{ij}} \right] + \sqrt{\beta_{3n}} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{\beta_{3n}}}{k_{mn}}\right) \right\},$$

где, $I_i = \int_{k_{mi}}^{k_{mi+1}} (x^2 + \mu^2)^{\beta_{1i}} e^{-\left(\frac{\beta_{2i}}{2}x^2 + \frac{\beta_{3i}}{x^2}\right)} dx$, $e_i = e^{-\beta_{5i} + \beta_{4i}}$.

1.2.4.2. Лауэ, толстый кристалл

В случае когерентного фактора при больших эффектах экстинкции в геометрии Лауэ будем иметь:

$$F_{ds}^{coh} = \frac{1}{R_{ip}} \int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) e^{-\mu_{ds}(y)l} \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right) dy, \quad (56)$$

где $R_{ip} = \frac{Bi_0(\mu_H l C)}{\sqrt{2\pi\mu_H l C}} e^{-(\mu_0 - \mu_H C)l}$ — интегральная отражательная способность в случае Лауэ дифракции в приближении толстого идеального кристалла, $B = \frac{\pi C E |\chi_{Hr}|}{2 \sin(2\theta_B)}$, $i_0(x) = 1 + \frac{1}{8x} + \frac{9}{128x^2} + \dots$.

Для вычисления диффузного фактора экстинкции можно сделать некоторые упрощения:

$$|\Delta'_{\tau} - \Delta_{\delta}|^2 \approx \frac{1}{4\gamma_0^2} \left((\alpha - \alpha') + (-1)^{\delta} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} - (-1)^{\tau} \sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2} \right)^2,$$

$$|2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2 \approx (\alpha + (-1)^{\delta'} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2})^2, \quad |\Delta_1 - \Delta_2|^2 \approx \frac{1}{\gamma_0^2} (\alpha^2 + \alpha_0^2),$$

$$|\Delta'_1 - \Delta'_2|^2 \approx \frac{1}{\gamma_0^2} (\alpha'^2 + \alpha_0^2),$$

$$D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{\gamma_0^2}{4} \frac{(\alpha + (-1)^{\delta'} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2})^2 \left((\alpha - \alpha') + (-1)^{\delta} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} - (-1)^{\tau} \sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2} \right)^2}{(\alpha^2 + \alpha_0^2)(\alpha'^2 + \alpha_0^2)}.$$

Выражение для $\rho_{\delta\tau}(k_0, k')$ можно свести к следующему виду:

$$\rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{1}{2Kt \operatorname{Im}(\Delta_{\delta} - \Delta'_{\tau})} = \left((\mu_{ds}(\alpha) - \mu_{ds}(\alpha'))l + \frac{\beta_0 Kl}{2} \left(\frac{(-1)^{\delta}}{\sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2}} - \frac{(-1)^{\tau}}{\sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2}} \right) \right)^{-1}.$$

Перейдем в (47) от интегрирования по $d\vec{k}$ к интегралу по $d\theta d\theta' d\varphi'$, где φ' – угол отклонения диффузно рассеянной волны от плоскости дифракции. Выразим компоненты волнового вектора диффузной волны в вакууме $\vec{k}$ через угловые переменные θ , θ' , φ' . Согласно рис. 3 такая связь будет иметь вид:

$$k_x = K(\theta' + 2\theta \cos^2 \theta_B), \quad k_y = K\varphi', \quad k_z = -K\theta \sin 2\theta_B.$$

Таким образом, при переходе в интеграле (40) к угловым переменным, для элемента интегрирования получим:

$$d\vec{k} = dk_x dk_y dk_z = K^3 \sin 2\theta_B d\theta d\theta' d\varphi'.$$

В случае присутствия в кристалле нескольких типов дефектов, необходимо также как и в случае когерентной компоненты заменить дифференциальный коэффициент экстинкции на сумму коэффициентов экстинкции от каждого типа дефектов, и кроме того необходимо также заменить выражение для $F(\vec{q})$ на сумму таких выражений от каждого типа дефектов, т.е.:

$$F(\vec{q}) = \sum_{\alpha} F_{\alpha}(\vec{q}).$$

Такие замены справедливы из-за того, что величины квадратичные по полям смещений от дефектов складываются аддитивно от разных типов дефектов (при этом предполагается, что парными корреляциями между смещениями от различных типов дефектов можно пренебречь, что справедливо в случае небольшой объемной доли дефектов, когда $c \ll 1$).

Интегрируя (47) по φ' , получим:

$$I_{\delta\tau} = \int D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') F(\alpha, \alpha') \rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') (e^{2K\mu_{\delta}(\alpha)} - e^{2K\mu_{\tau}(\alpha')}) d\theta d\theta', \quad (57)$$

где

$$F(\alpha, \alpha') = \begin{cases} f_H(\sqrt{k_m^2 - k_{\parallel}}) - f_H(0) + f_{sw}(\infty) - f_{sw}(\sqrt{k_m^2 - k_{\parallel}}), & \text{при } |k_{\parallel}| < k_m, \\ f_{sw}(\infty) - f_{sw}(0) & \text{при } |k_{\parallel}| \geq k_m, \end{cases}$$

$$f_H(x) = \frac{B_2 k_1^2 x}{K(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)(k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)} + \frac{B_2 k_1^2 + 2B_1(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}{K(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^{3/2}} \operatorname{arctg} \left[\frac{x}{\sqrt{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}} \right],$$

$$f_{sw}(x) = \frac{k_m^2}{4K} \left(\frac{(B_2 k_1^2 (5k_{\parallel}^2 + 3x^2 + \mu_i^2) + 4B_1(k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2))x}{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^2 (k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)^2} + \frac{3B_2 k_1^2 + 4B_1(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^{5/2}} \operatorname{arctg} \left[\frac{x}{\sqrt{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}} \right] \right),$$

$$k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_z^2}, \quad k_1 = -k_x \sin \theta_B + k_z \cos \theta_B.$$

1.2.4.3. Брэгг, тонкий и толстый кристаллы

Для диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Брэгга согласно (52) будем иметь:

$$F_{ds}^{diff} = \frac{1}{2\gamma_0 R_{iD}^{kin}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - e^{-2\mu t}}{\mu} F_{dyn} \sum_{\alpha} \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) dk_0. \quad (58)$$

В предельных случаях тонкого и толстого кристаллов экспонента в (58) превратится соответственно в 0 и $1 - 2\mu_i t$.

Когерентный и диффузный факторы в геометрии Брэгга нужно находить путем численного интегрирования выражений (49), (50) и (58) для приближений тонкого и толстого кристаллов соответственно. Следует учесть однако, что факторы экстинкции следует интегрировать с учетом ориентационной зависимости интерференционного коэффициента поглощения в случае присутствия в кристалле больших дефектов, которая существенно влияет на ПИИ [37].

2. МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНОЙ ДИФFUЗНОДИНАМИЧЕСКОЙ КОМБИНИРОВАННОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

2.1. Физические основы метода диффузнодинамической комбинированной дифрактометрии

Анализ приведенных выражений динамической теории рассеяния (54)-(58) показывает, что, в отличие от кинематической теории (1)-(7), введенные выше два интегральных параметра картины рассеяния (сумма и отношение диффузной и брэгговской составляющих R_i) при динамической дифракции оба оказываются зависящими как от параметров дефектной структуры, так и от условий дифракции. При этом, выражения (54)-(58) демонстрируют принципиальное различие в зависимостях брэгговской и диффузной составляющих R_i не только от параметров дефектов, но и от условий дифракции. Таким образом, благодаря учету многократного перерассеяния брэгговской и диффузной составляющих и установленному различию в проявлении эффектов многократности для этих составляющих, которое и обуславливает их различную зависимость от условий динамической дифракции, указанные выше законы сохранения кинематической теории при динамической дифракции нарушаются.

Установленное в работе [52] существование в кинематической теории рассеяния в кристаллах с дефектами и сверхструктурой двух законов сохранения для двух интегральных параметров картины рассеяния является причиной, ограничивающей информативность кинематической картины рассеяния. Учитывая, что распределения величин этих параметров в пространстве обратной решетки являются для первого параметра самой картиной рассеяния, а для второго – распределением ее диффузной составляющей, можно сделать выводы о причинах как ограничения информативности самой картины дифракции в условиях кинематического рассеяния, так и принципиальной неадекватности применения кинематического рассмотрения для динамической дифракции, не только в случае интегральных подходов, но и в случае дифференциально-интегральных и дифференциальных методов дифрактометрии.

Первый закон сохранения кинематической теории, указывающий на то, что первый из параметров (см. первое выражение в (6)) зависит только от условий дифракции (длины волны излучения, толщины кристалла, геометрии дифракции и т.д.) и не зависит от параметров структурного совершенства и сохраняется таким, как в идеальном кристалле при произвольных отклонениях от периодичности кристаллической решетки, был установлен ранее [41-47], как закон сохранения полной интегральной интенсивности дифрагированного излучения в несовершенных кристаллах. В результате, структурночувствительным интегральным пара-

метром оказывался только второй параметр (7), сводящийся в кинематической теории к удвоенному показателю статического фактора Кривоглаза-Дебая-Валлера.

На основе анализа параметра (7) М.А. Кривоглаз провел классификацию дефектов кристаллов по характеру их влияния на картину рассеяния [7]. При этом кинематическая картина рассеяния оказалась Фурье-изображением кристалла с дефектами, однозначно определяемым независимым от условий дифракции вторым параметром и его распределением в пространстве обратной решетки. Неизменность этого параметра при изменении условий дифракции является неизбежным следствием приближения однократного рассеяния и составляет суть второго закона сохранения, который, как и первый закон сохранения, автоматически вытекает из кинематической теории. Однако второй закон сохранения кинематической теории ранее не был установлен. Впервые он установлен и сформулирован в работе [52].

Рис. 4 и 5, приведенные в качестве примера, иллюстрируют радикальное изменение при динамической дифракции характера влияния дефектов на интегральную интенсивность рассеяния (первый параметр) в зависимости от радиуса кривизны макроскопического упругого изгиба (r) кристалла, а также изменение характера влияния дефектов на эти деформационные зависимости (ДЗ) при изменении других условий дифракции, а именно, при переходе от предельного случая динамической дифракции в «тонком» кристалле (а), когда наблюдается существенное увеличение полной интегральной интенсивности за счет дефектов относительно идеального кристалла, к предельному случаю «толстого» кристалла (б), когда имеет место ее существенное уменьшение за счет дефектов [24, 48]. Это обуславливается принципиально различными характерами влияния на брэгговскую и диффузную составляющие динамической картины дифракции как радиуса кривизны упругого изгиба, так и толщины кристалла, что иллюстрируется на рис. 5 и объясняет этим различием и его следствиями природу нарушения при динамической дифракции второго закона сохранения, а как следствие этого и первого. В результате общая яркость динамической картины рассеяния, нормированная на яркость картины для соответствующего идеального кристалла, и характеры возникших даже после указанной нормировки зависимостей ее компонент от условий дифракции и их различия становятся уникально чувствительными к характеристикам дефектов или параметрам сверхструктуры. Именно это открытое уникальное явление, а также явление изменения избирательности чувствительности к дефектам разного типа при изменении условий дифракции [49,50], были положены в основу создания комплекса новых, принципиально отсутствующих при кинематическом рассмотрении, интегральных методов ДДКД [24-26].

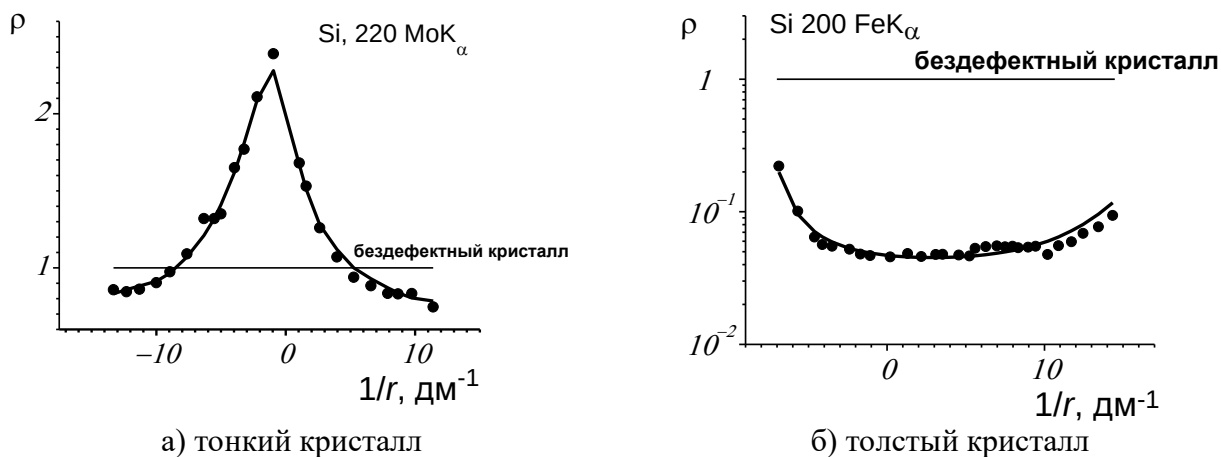


Рис. 4. Рассчитанные (жирные сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) деформационные зависимости нормализованной ПИИ ($\rho = R_i/R_{ip}$) для кристаллов Si с дефектами, а также ДЗ для идеального кристалла (тонкие сплошные линии)

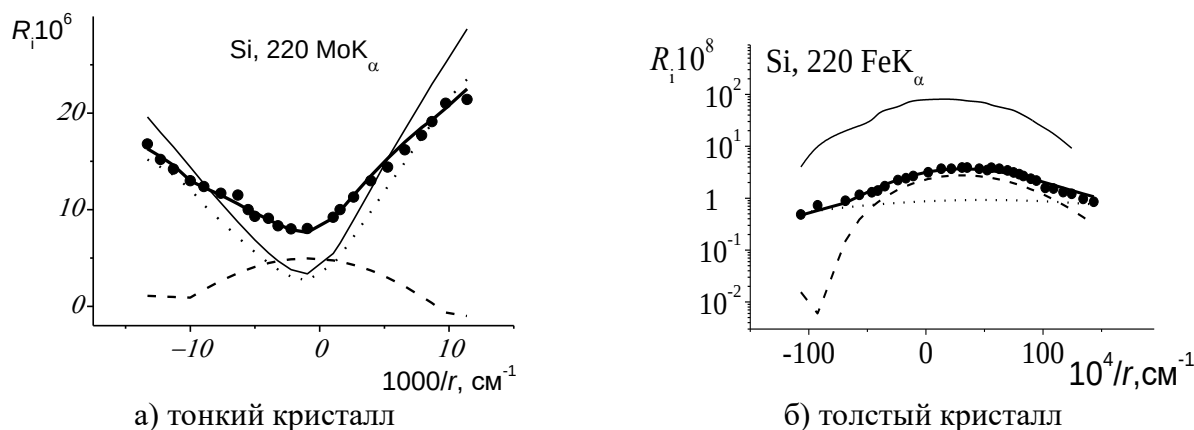


Рис. 5. Теоретические и экспериментальные значения деформационных зависимостей ПИИ неидеального кристалла изображены сплошными жирными линиями и маркерами, соответственно. Пунктирные линии представляют рассчитанные ДЗ когерентной компоненты ПИИ, штриховые – диффузной, а сплошные тонкие линии – ДЗ ПИИ кристалла без дефектов

В работах [23, 24] показано, что нелинейные эффекты многократности рассеяния обуславливают принципиально различные для брэгговской и диффузной составляющих динамической картины рассеяния, а также различные для удельных вкладов в картину от дефектов разного типа, зависимости их от условий динамической дифракции (длины волны излучения, толщины кристалла, геометрии дифракции (на прохождение или на отражение), параметра асимметрии отражения, азимутального угла, радиуса кривизны упругого изгиба кристалла и т.д.). Как показано и проиллюстрировано на рис. 4 и 5 в настоящей работе, именно эта разница между зависимостями брэгговской и диффузной составляющих и приводит к нарушению при динамической дифракции второго закона сохранения кинематической теории, а также является причиной, которая обуславливает нарушение и первого закона сохранения, т.е. этим раскрывается физическая природа установленного ранее явления уникальной чувствительности к искажениям структуры нормированной общей яркости динамической картины рассеяния.

В целом, во-первых, при динамической дифракции оба интегральных параметра динамической картины рассеяния, вводящиеся аналогично (6) и (7), становятся структурночувствительными. При этом, во-вторых, что более существенно, количество измеряемых экспериментально пар этих параметров теперь равно количеству условий динамической дифракции, которые могут быть экспериментально реализованы, т.е. указанные структурно-чувствительные параметры становятся многомерными, а сама динамическая картина – многообразной.

Многообразность динамической картины рассеяния иллюстрирует рис. 6. Для кристалла с фиксированной кристаллической (в том числе и дефектной) структурой для каждого рефлекса кинематическая теория при любых условиях дифракции (в данном случае при изменении толщины кристалла или длины волны излучения) предполагает единую картину рассеяния, представленную на рис. 6а. В отличие от кинематики, динамическая картина является многообразной (см. рис. 6а-в), т.е. сколько разных условий дифракции реализовано – столько для данного рефлекса разных картин рассеяния при неизменной кристаллической структуре может быть получено. Это впервые позволило лишь при динамической дифракции целенаправленно получить необходимое количество экспериментальных данных (независимых уравнений) путем управления относительным вкладом брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния при изменении условий дифракции для определения произвольного, в принципе, количества неизвестных характеристик структуры, и создать целый комплекс как интегральных, так и дифференциальных методов диагностики нового поколения (ДДКД) [23-28].

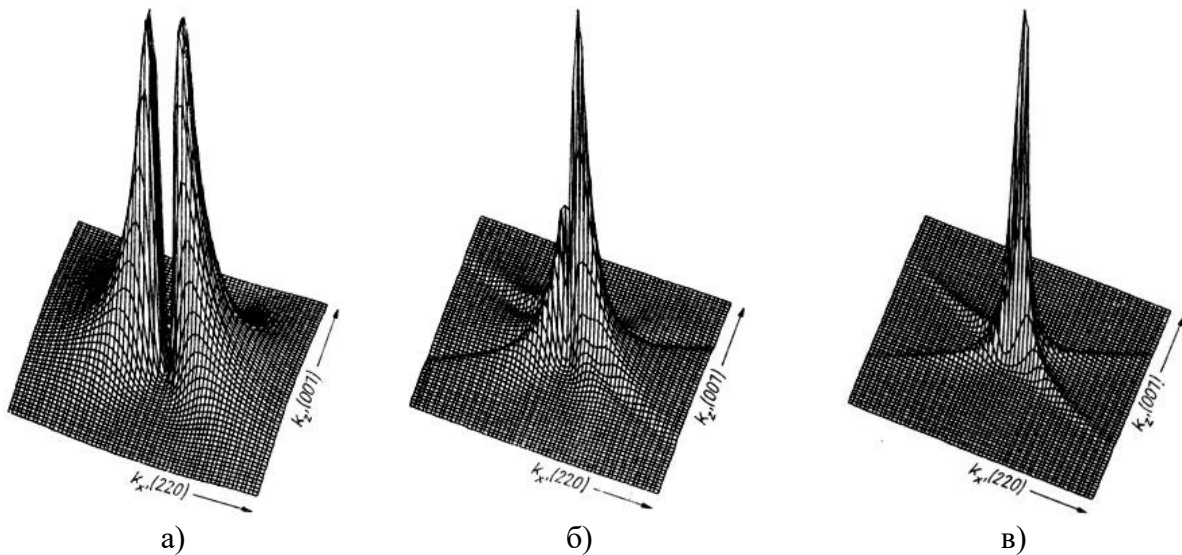


Рис. 6. Радикальное изменение картины диффузного рассеяния (двумерного распределения интенсивности в плоскости рассеяния) от кристалла с фиксированной дефектной структурой за счет изменения лишь условий динамической дифракции (с увеличением толщины t кристалла или длины волны излучения для $\mu_0 t = 0,027$ (а), 1,34 (б) и 5,36 (в)), демонстрирующее явление многообразности динамической картины рассеяния

Главной особенностью и преимуществом разработанного нового поколения диагностики (ДДКД) являются, обоснованные в [23-26] и в настоящей работе, необходимость и уникальная возможность комбинированной компьютерной обработки результатов экспериментальных измерений параметров картины рассеяния в различных условиях динамической дифракции, а также при использовании различных методик: интегральных, дифференциально-интегральных и дифференциальных, т.е. одно- двух- и трехкристалльных. Основой новых принципов высокоинформативной диагностики [23-28] является обеспечение возможности экспериментального измерения и теоретического анализа необходимого набора, указанных выше пар не только интегральных параметров, а также и характеристик их распределений в пространстве обратной решетки. То есть, речь идет не только о самих интегральных параметрах, а также и о дифференциально-интегральных и дифференциальных характеристиках распределения этих двух главных параметров динамических картин рассеяния, а именно о распределении в обратном пространстве яркости картины дифракции в целом и ее диффузной составляющей в частности.

2.2. Толщинные и спектральные зависимости ПИИ

Установление различий в механизмах формирования брэгговской и диффузной составляющих привело к открытию качественно новых эффектов динамической дифракции [34, 44, 45]. Одним из ярких примеров этого является установление нарушения при динамической дифракции справедливого при кинематическом рассеянии закона сохранения (независимости от искажений кристаллов) полной (сумма брэгговской и диффузной составляющих) интегральной отражательной способности кристаллов с дефектами. Это явление обусловило возникновение уникально чувствительных к дефектам толщинных, спектральных, азимутальных, деформационных и др. зависимостей ПИИ, которые могут быть экспрессно измерены и интерпретированы с использованием полученных авторами оригинальных аналитических формул, связывающих их с характеристиками дефектов.

На рис. 7 представлены результаты экспериментального подтверждения толщинной зависимости вклада ДР и нарушения закона сохранения ПИИ (маркеры – эксперимент, линии – теория). ПИИ представлена нормированной на ПИИ для идеального кристалла, что в кинематической теории всегда равно единице (см. формулу (6)).

Следует отметить, что на рис. 7 (и некоторых нижеследующих графиках) сплошная горизонтальная линия соответствует идеальному кристаллу при динамическом рассмотрении ($R_{i\text{ perf}}$) или любому (идеальному и неидеальному) кристаллу в кинематическом случае, т.е. в последнем случае ПИИ принципиально не чувствительна к искажениям кристалла.

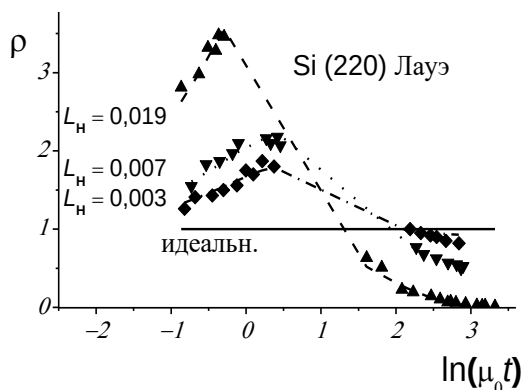


Рис. 7. Зависимости нормированной ПИИ ρ (отношения ПИИ исследуемого реального кристалла R_i к ПИИ для идеального $R_{i\text{ perf}}$) от величины $\mu_0 t$. Линии – результаты расчетов, а маркеры – результаты измерения ПИИ для трех образцов в приближениях тонкого (с использованием MoK_α -излучения, левая часть зависимостей) и толстого (с использованием CuK_α -излучения и FeK_α -излучения, правая часть зависимостей) кристаллов

Из рис. 8, где представлены толщинные зависимости удельных вкладов диффузной и когерентной составляющих ПИИ, видно, что именно изменение относительного вклада диффузной составляющей ПИИ (непрерывное с изменением толщины кристалла и дискретное при переходе от приближения тонкого к приближению толстого кристаллов), обусловленное принципиально различным характером толщинных зависимостей составляющих ПИИ, а также изменением этого характера при переходе от предельного случая тонкого кристалла к случаю толстого, определяет ее уникальную чувствительность к дефектам.

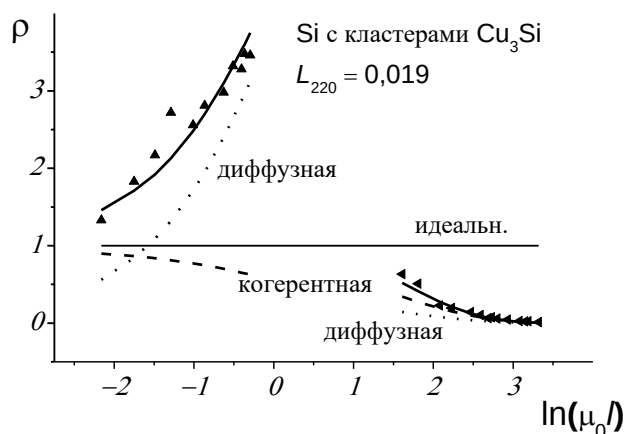


Рис. 8. Рассчитанные (сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) толщинные зависимости нормализованной ПИИ монокристалла Si. Штриховые линии – рассчитанные толщинные зависимости когерентной составляющей, пунктирные линии – диффузной составляющей. Параметры дефектной структуры кристалла: сферические кластеры Cu_3Si с $R = 0,035$ мкм, $\varepsilon = 0,13$ и $c = 9 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$

На рис. 9 и 10 представлены спектральные зависимости ПИИ неидеальных кристаллов, служащие экспериментальным подтверждением различной функциональной зависимости (2) в приближениях тонкого (область коротких длин волн) и толстого (длинноволновая часть спектра) кристаллов.

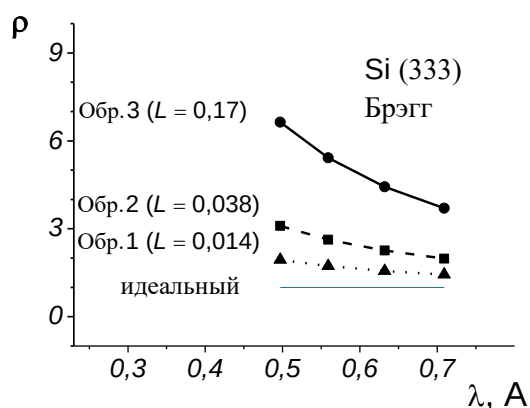


Рис. 9. Зависимость, в случае брэгг-дифракции, нормированной ПИИ дефектных образцов Si от длины волны излучения. Образцы 1 и 2 были отожжены на воздухе в течение 4 и 6 часов при 1000°C и 1080°C соответственно; образец 3 был отожжен в атмосфере азота в течение 7 часов при 1250°C

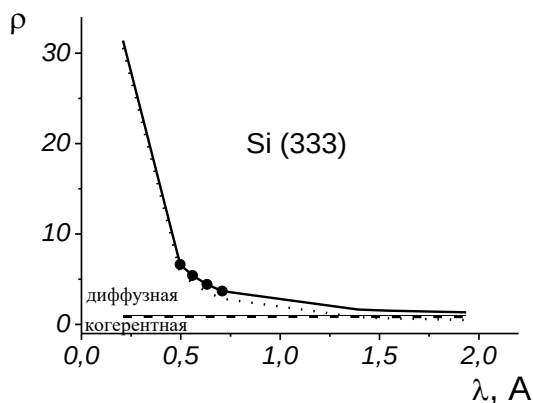


Рис. 10. Рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (маркеры) спектральная зависимость нормированной ПИИ монокристалла Si. Штриховая линия — рассчитанная спектральная зависимость когерентной составляющей, пунктирная линия — диффузной. Расчеты проводились для следующих параметров динамического рассеяния: $L_H = 0,17, \mu \cdot \mu_0 = 1,1$

Как следует из представленных результатов, при дифракции в геометрии Брэгга эти различия менее ярко выражены, нежели в случае лауэ-дифракции. Но и в этом случае высокая чувствительность динамической дифракции к различным типам дефектов, присутствующим в исследуемых образцах, сохраняется и существенно возрастает с ростом вклада диффузной составляющей при уменьшении длины волны, т.е. увеличении длины абсорбции и, следовательно, объема, в котором формируется диффузное рассеяние.

Из вышеприведенных выражений (54)-(58) динамической теории для брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния и проведенного анализа видно, что они имеют существенно различный характер зависимости от параметров дефектов и, что особо важно, этот характер зависит как от самих дефектов, так и от условий динамической дифракции (различные геометрии дифракции, случаи тонкого и толстого кристаллов и др.). Главный же вывод состоит в том, что зависимости от условий динамической дифракции для брэгговской и диффузной составляющих принципиально различны, следствием чего и являются все отмеченные эффекты и особенности их проявления.

2.3. Эффект асимметрии азимутальной зависимости нормированной ПИИ

Как известно, азимутальные зависимости нормированной ПИИ (нормированной на ПИИ идеального кристалла) для различных типов искажений кристаллической решетки являются симметричными относительно угла 90° . К таким типам искажений кристалла относятся: дефекты кулоновского типа (дислокационные петли, кластеры и пр.) небольших размеров $R \ll \Lambda$, нарушенный поверхностный слой.

Для исследования вышеуказанной симметрии азимутальной зависимости были измерены азимутальные зависимости для кристалла с дефектами. Объект исследования был вырезан из слитка CZ Si (р-тип проводимости, $\rho \sim 10 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, ось роста была направлена вдоль оси $\langle 111 \rangle$, концентрации кислорода и углерода были равны $\sim 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и 10^{16} см^{-3} , соответственно). Образец был приготовлен в форме пластины, параллельной плоскости (111), толщиной $t = 4000 \text{ мкм}$. Нарушения структуры поверхности, возникающие при механической обработке, были удалены путем химико-механической полировки с последующим химическим травлением до глубины $\sim 10 \text{ мкм}$.

Оказалось, что в результате присутствия в этом кристалле дефектов больших размеров (дислокационных петель с радиусом 15 мкм), азимутальная зависимость нормированной ПИИ существенно несимметрична (см. рис. 11.), тогда как расчеты с учетом формул (44), (46) дают симметричный результат даже при подстановке в эти выражения параметров больших дефектов. Однако, поскольку размеры дислокационных петель в исследуемом образце превышают длину экстинкции, то указанные формулы уже не дают корректного описания ПИИ, поскольку они выводились в предположении малых дефектов, что позволило пренебречь процессами перерассеяния диффузных волн на периодической части кристаллического потенциала. Для случая больших дефектов, как упоминалось выше, необходимо использовать выражения (50) и (58) для расчета ПИИ.

Как оказалось, результат, полученный с использованием обобщенных формул также дает асимметрию азимутальной зависимости нормированной ПИИ и практически совпадает с экспериментом (рис. 11, сплошная линия).

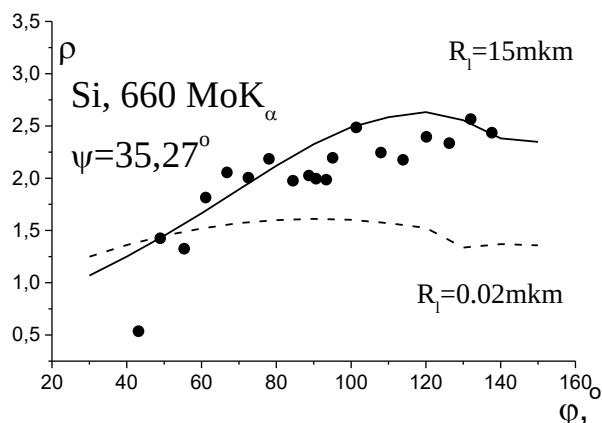


Рис. 11. Экспериментальная (маркеры) и рассчитанная с использованием выражений (50), (58) при значениях среднего радиуса дислокационных петель $R = 15$ мкм (сплошная линия) и $R = 0.02$ мкм (штриховая линия) азимутальные зависимости нормированной ПИИ

Анализируя причины асимметрии азимутальной зависимости было установлено, что этот эффект вызван поведением диффузной компоненты ПИИ. То есть, установлено, что присутствие в кристалле дефектов больших размеров вызывает симметрию азимутальной зависимости ненормированной диффузной компоненты (в случае малых дефектов она асимметрична), тогда как азимутальная зависимость когерентной компоненты остается асимметричной (подобно случаю идеального кристалла), что показано на рис. 12.

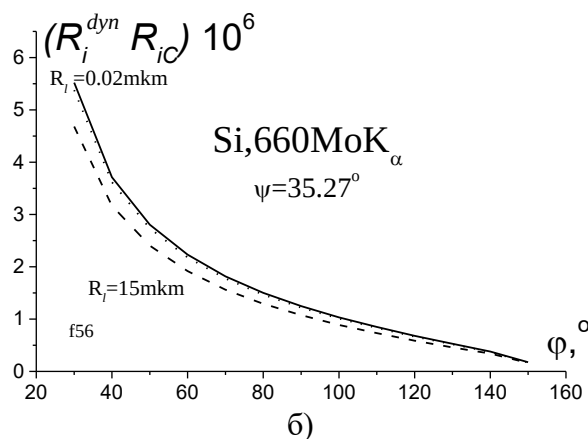
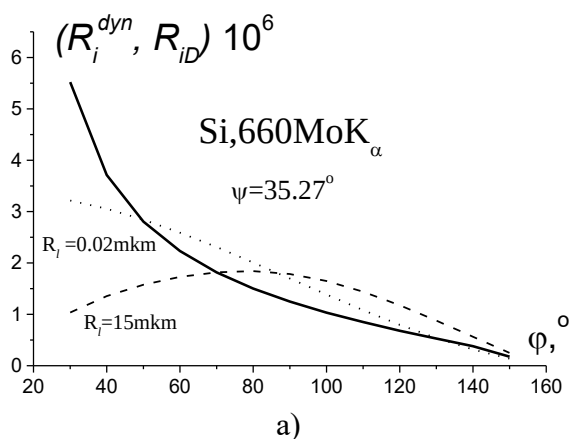


Рис. 12. Расчитанная азимутальная зависимость ПИИ для идеального кристалла R_i^{dyn} (сплошная линия). Расчитанные с использованием выражений (50), (58) азимутальные зависимости: а) диффузной составляющей ПИИ (R_{ID}) и б) когерентной составляющей ПИИ R_{IC} (штриховая линия и пунктирная)

Таким образом, нормируя азимутальную зависимость ПИИ кристалла с дефектами на аналогичную зависимость ПИИ идеального кристалла, получим симметричную зависимость в случае малых дефектов и несимметричную в случае дефектов больших рамеров. Следовательно, благодаря принципиально различному характеру азимутальной зависимости в случаях малых и больших дефектов, и проявления избирательной чувствительности формы зависимости к большим дефектам появляется возможность определения их параметров. Параметры малых дефектов, в случае если они присутствуют в кристалле, можна определить, используя другие условия дифракции для того же образца.

2.4. Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для Лауэ-дифракции в области К-края поглощения

Для изучения диагностических возможностей при указанных условиях необходимо сначала построить соответствующую теоретическую модель. В [38] путем фитирования деформационных зависимостей (ДЗ) ПИИ симметричного 220 лауэ-отражения от монокристалла кремния, измеренных при использовании характеристического FeK_α -излучения, получены значения параметров полуфеноменологической модели ПИИ изогнутого толстого кристалла с хаотически распределенными дефектами. Полученная на ее основе соответствующая модель для скачка (S) ПИИ вблизи К-края поглощения имеет вид[53]:

$$S = R_i(\lambda_1) / R_i(\lambda_2), \text{ где } \lambda_1 = 0.1139 \text{ нм}, \lambda_2 = 0.1094 \text{ нм},$$

$$R_i(\lambda) \equiv R_i = R_{\text{icoh}}[1 + (BT\mu_0 l) \times 0.074] \times \exp[-(BT\mu_0 l)^2 \times 0.00604] + \quad (59)$$

$$+ R_{\text{idif}}[1 + (BT\mu_0 l) \times 0.0157] \times \exp[-(BT\mu_0 l)^2 \times 0.00044],$$

$$B = \frac{\lambda^2 \sin \psi \cdot [1 + \gamma_1 \gamma_2 (1 + \nu)]}{2\pi |\chi_{\text{Hr}}|^2 r d}, \quad T = \frac{\pi t |\chi_{\text{Hr}}|}{\lambda \sqrt{\gamma_1 \gamma_2}}, \quad \gamma_1 = \cos(\theta_B + \psi), \quad \gamma_2 = \cos(\theta_B - \psi), \quad r - \text{ радиус}$$

кривизны цилиндрического изгиба кристалла, $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$, a – постоянная решетки,

h, k, l – индексы Миллера, $R_{\text{icoh}} = E R_{\text{ip}} F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ и $R_{\text{idif}} = R_i^{\text{kin}} F_{\text{ds}}^{\text{diff}}$ – соответственно когерентная и диффузная компоненты интегральной интенсивности в неизогнутом кристалле, в которых факторы экстинкции определяются выражениями (56) и (48) совместно с (57), E – фактор Кривоглаза-Дебая-Валлера.

Результаты сравнения расчетов по модели (59) при различных значениях параметра асимметрии ψ для отражений $[\bar{2}20]$ и $[\bar{2}20]$ представлены на рис. 13 а, б.

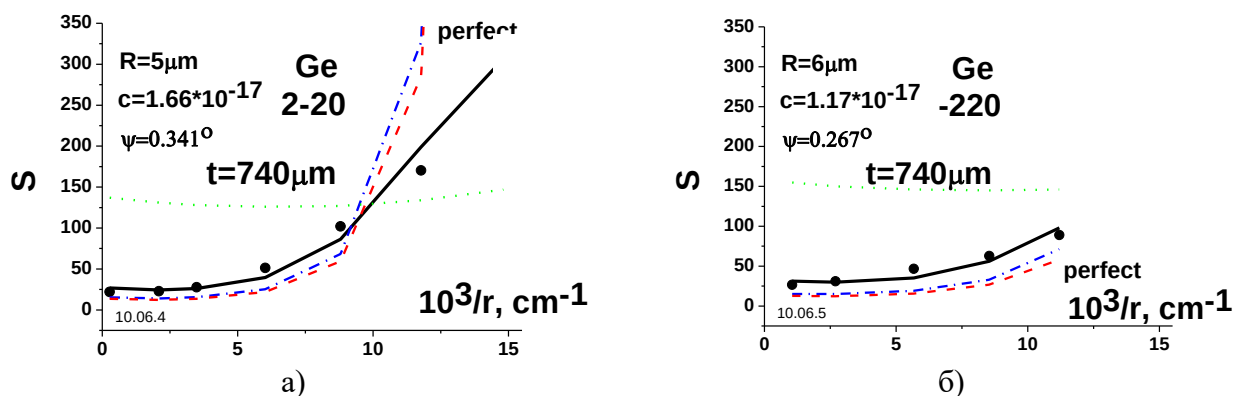


Рис. 13. Рассчитанные (линии) по модели, основанной на формулах (59), и измеренные (маркеры) в работе [39] зависимости скачка ПИИ от деформации у К-края поглощения для кристалла Ge при значении его толщины $t = 740 \mu\text{м}$. Сплошные линии – ДЗ скачка ПИИ, штрих – ДЗ скачка ее когерентной составляющей, пунктир – ДЗ скачка ее диффузной составляющей, штрих-пунктир – ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла

Из рис. 13 видно, что чем больше деформация, тем заметнее отличие ДЗ скачка ПИИ от рассчитанной ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла. Видно, что это является следствием кардинального различия характера ДЗ скачков для когерентной и для диффузной составляющих ПИИ и, видимо, достаточно заметным вкладом диффузной составляющей.

На рис. 14 показаны результаты расчетов ДЗ скачка ПИИ в кристаллах с дефектами, нормированной на ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла.

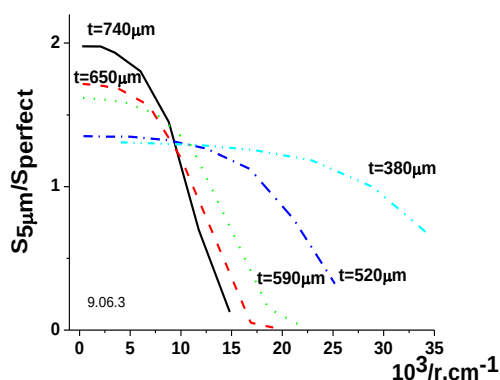


Рис. 14. Рассчитанные по формулам (59) нормированные на ДЗ скачка ПИИ в идеальных кристаллах ДЗ величины скачка ПИИ в кристаллах с дефектами при различных толщинах кристаллов

Из рис. 14 видно, что чем больше толщина кристалла, тем сильнее влияние дефектов на деформационную зависимость ПИИ. При максимальной толщине кристалла 740 мкм, если в неизогнутом кристалле величина скачка ПИИ из-за наличия дефектов увеличивается в 2 раза, то с увеличением степени изгиба ее чувствительность к дефектам сначала уменьшается до нуля, а затем при дальнейшем росте степени изгиба величина скачка уменьшается на два порядка, а чувствительность к дефектам на два порядка возрастает.

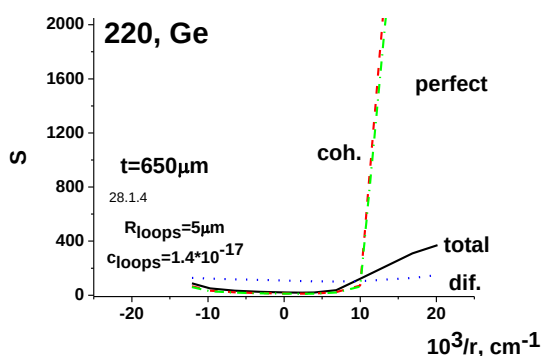
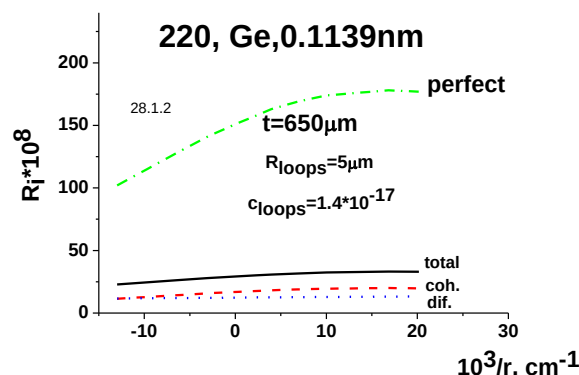
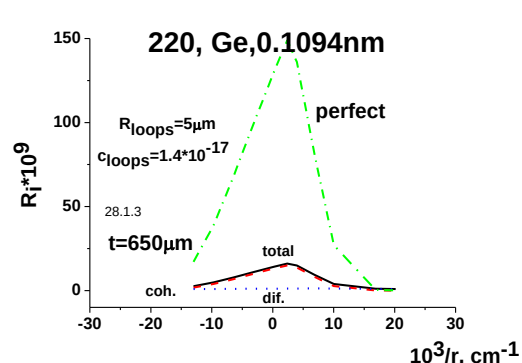


Рис. 15. Рассчитанные по модели, основанной на (59), деформационные зависимости ПИИ в идеальных кристаллах, ПИИ в кристаллах с дефектами, ее брэгговской и диффузной составляющих и их скачка в области К-края поглощения при толщине кристалла $t = 650$ мкм

Из рис. 15 видно, что, несмотря на малый угол наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла деформационная зависимость ПИИ в идеальном кристалле, когерентной составляющей ПИИ и самой ПИИ в кристаллах с дефектами, для коротковолновой границы К-края поглощения резко выражены. Это обусловлено эффектом аномального прохождения, который спадает с уменьшением эффективной толщины ($\mu_0 t$). В то же время из рис. 15 видно, что в связи с малым углом наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла деформационные зависимости когерентной и диффузной составляющих ПИИ для длинноволновой границы К-края поглощения, а также для диффузной составляющей у коротковолновой границы К-края поглощения практически отсутствуют. Это обусловлено изменением результатов конкуренции с изменением $\mu_0 t$ вкладов ДЗ отражающей и поглощающей способностей как для брэгговской, так и для диффузной составляющих в результирующую ДЗ.

2.5. Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в условиях нарушения закона Фриделя

На основе полуфеноменологической модели ПИИ изогнутого толстого кристалла с хаотически распределенными дефектами, полученной в работе [38], модель введенного и исследованного в работе [40] параметра асимметрии ДЗ ПИИ можно представить следующим образом [54]:

$$Y = R_i(+)/R_i(-),$$

$$R_i(+) = R_{\text{icoh}}[1 + (BT\mu_0) \times 0.074] \times \exp[-(BT\mu_0)^2 \times 0.00604] +$$

$$+ R_{\text{idif}}[1 + (BT\mu_0) \times 0.0157] \times \exp[-(BT\mu_0)^2 \times 0.00044],$$

$$R_i(-) = R_{\text{icoh}}[1 - (BT\mu_0) \times 0.074] \times \exp[-(BT\mu_0)^2 \times 0.00604] +$$

$$+ R_{\text{idif}}[1 - (BT\mu_0) \times 0.0157] \times \exp[-(BT\mu_0)^2 \times 0.00044]. \quad (60)$$

Значения среднего радиуса дислокационных петель $R = 5$ мкм и их концентрации $c = 1.69 \cdot 10^{-17}$, взятые при построении толщинных зависимостей параметров асимметрии для кристаллов с дефектами, представленных на рис. 12, близки к значениям параметров дислокационных петель, установленным в работе [38] путем фитирования деформационных зависимостей скачка ПИИ вблизи К-края поглощения, полученных экспериментально авторами работы [39]. Результаты расчетов представлены на рис. 16.

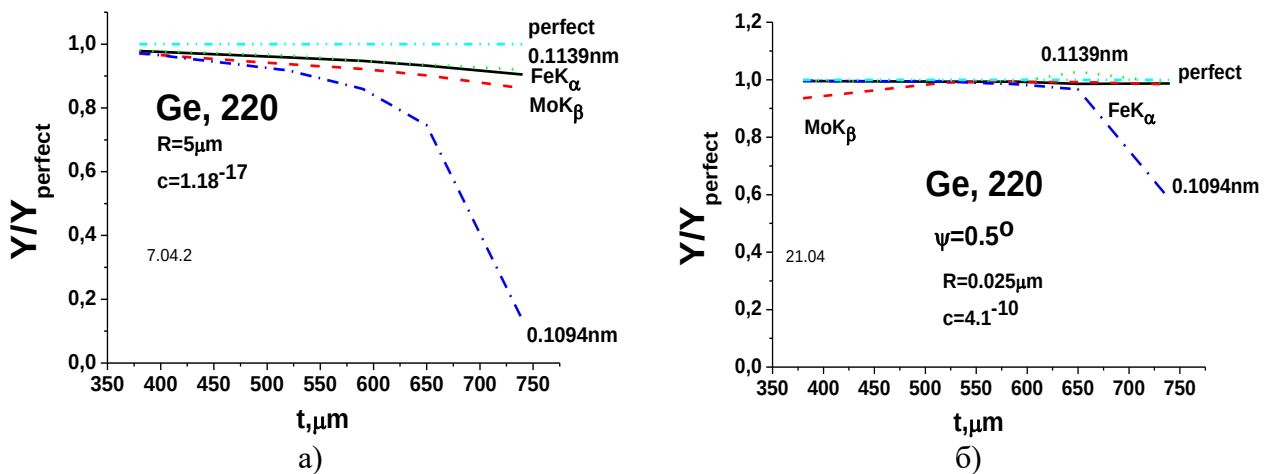


Рис. 16. Рассчитанные зависимости от толщины отношения параметра асимметрии ПИИ

$$Y = \frac{I_i^{hkl}}{I_i^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}} \text{ кристалла с дефектами (параметры хаотически распределенных}$$

в объеме кристалла дислокационных петель: а) средний радиус $R = 5$ мкм и концентрация $c = 1.18 \cdot 10^{-17}$; б) средний радиус $R = 0.025$ мкм и концентрация $c = 4.1 \cdot 10^{-10}$) к параметру асимметрии ПИИ для идеального кристалла Y_{perfect} . Расчеты проведены при $r = \pm 2,4$ м для случаев: излучения с длиной волны 0.1139 нм, (пунктир), излучения с длиной волны 0.1094 нм, (штрих-пунктир), для FeK_α -излучения (сплошная линия), для MoK_β -излучения (штриховая линия), а также ПИИ для идеального кристалла (штрих-двойной пунктир)

Из рис. 16 видно, что для излучения с длиной волны 0.1094 нм присутствие дефектов вызывает заметное уменьшение нормированного коэффициента асимметрии. При этом изменение с увеличением толщины кристалла нормированного коэффициента асимметрии намного чувствительнее к крупным дефектам, чем к мелким.

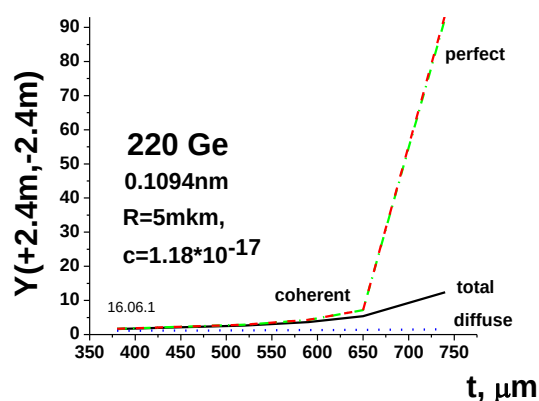


Рис. 17. Рассчитанные зависимости параметра асимметрии $Y = \frac{I_i^{hkl}}{I_i^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}$ от толщины кристалла при $r = \pm 2,4$ м для ПИИ для излучения с длиной волны $\lambda = 0,1094$ нм. Сплошная линия – для ПИИ кристалла с дефектами, штрих – для когерентной составляющей ПИИ, пунктир – для диффузной составляющей ПИИ, штрих-пунктир – для ПИИ в идеальном кристалле

Из рис. 17 видно, что для идеального кристалла Y резко возрастает с толщиной для интенсивности сильно поглощающейся длины волны вблизи К-края поглощения. Следовательно, Y резко уменьшается с толщиной для скачка интенсивностей на К-крае, причем указанное уменьшение тем больше, чем больше степень упругого изгиба образца. При этом отличие указанных зависимостей Y или скачка Y вблизи К-края поглощения для ПИИ в кристалле с дефектами от Y для ПИИ в идеальном кристалле или его нормированных величин от единицы демонстрирует высокую чувствительность метода к дефектам.

3.6. Экспериментальная апробация метода ИДДКД

Совместная комбинированная обработка приведенных экспериментальных данных по толщинным и деформационным зависимостям ПИИ в описанном выше образце при использовании предложенных в работе теоретических моделей в рамках метода ИДДКД позволила установить характеристики двух типов дефектов: крупных дислокационных петель с вектором Бюргерса $|\vec{b}| = \frac{a}{\sqrt{2}}$, $R = 5$ мкм, $c = 8.85 \times 10^{-18}$ и мелких дислокационных петель с вектором Бюргерса $|\vec{b}| = \frac{a}{\sqrt{2}}$, $R = 0.02$ мкм, $c = 1.47 \times 10^{-10}$. Величина фактора Кривоглаза-Дебая-Валлера $E = e^{-L_H} = 0.998$ больше величины динамического фактора Дебая-Валлера для используемого отражения 220: $e^{-M} = 0.966$, т.е. среднеквадратичные смещения атомов, вызванные присутствием дефектов, меньше тепловых. Это говорит о высоком совершенстве исследуемого монокристалла Ge, что подтверждается полученными малыми концентрациями дефектов. Возможность определения параметров дефектов, создающих столь малые искажения, свидетельствует о высокой структурной чувствительности метода ИДДКД.

Так же, в качестве иллюстрации преимуществ комбинированной обработки результатов рентгенодифракционного эксперимента, т.е. методов ИДДКД, приведена таблица, где представлены радиусы и концентрации четырех типов дефектов, определенные при независимой для каждого эксперимента только для одного определяющего типа дефектов и при комбинированной обработке данных, полученных в разных условиях динамической дифракции. Параметры дефектов разных типов определялись путем совместной обработки толщинных и деформационных зависимостей ПИИ, полученных в приближениях «толстого» и «тонкого» кристаллов на трехкристальном дифрактометре.

Как видно из таблицы, при независимой обработке результатов эксперимента в рамках динамической теории рассеяния удается более или менее надежно установить лишь характеристики дефектов средних размеров (дискообразных преципитатов кислорода (кластеров) с высотой h и дислокационных петель среднего радиуса), что объясняется частичной компенсацией вкладов в ПИИ от крупных и мелких дефектов, из-за их различного влияния на брэгговскую и диффузную составляющие динамической картины рассеяния (дефекты с малыми размерами и большой концентрацией преимущественно увеличивают диффузную составляющую, а дефекты больших размеров и малой концентрации преимущественно уменьшают когерентную составляющую). При этом следует напомнить, что кинематическое описание подобных экспериментов в принципе не-

возможно, из-за рассмотренных выше законов сохранения и, как следствие, абсолютной нечувствительности кинематической картины рассеяния к любым видам искажений кристаллической решетки на уровне интегральных отражательных способностей неидеальных кристаллов, а также ее низкой информативности (или полной неадекватности в условиях динамической дифракции) на уровне дифференциальных коэффициентов отражения. При комбинированной же обработке экспериментальных данных динамической дифрактометрии в различных условиях дифракции удается однозначно и с достаточной точностью определить параметры всех четырех типов дефектов, одновременно присутствующих в кристалле, что существенно повышает информативность метода ИДКД, в том числе, по сравнению с другими динамическими подходами.

Таблица

Характеристики (радиусы R и концентрации c) дефектов, определенные при независимой и комбинированной обработке экспериментальных данных, полученных при разных условиях динамической дифракции

Способ диагностики	$R_{\text{большие петли}}$, мкм	$c_{\text{большие петли}}$, см ⁻³	$R_{\text{кластеры}}$, мкм; $h_{\text{кластеры}}$, мкм	$c_{\text{кластеры}}$, см ⁻³	$R_{\text{средние петли}}$, мкм	$c_{\text{средние петли}}$, см ⁻³	$R_{\text{малые петли}}$, мкм	$c_{\text{малые петли}}$, см ⁻³
Независимая обработка данных	10 ± 1	$0.5 \div 3.3 \cdot 10^3$	0.45 ± 0.01 ; 0.012 ± 0.001	$(1.12 \pm 0.01) \cdot 10^7$	0.45 ± 0.01	$(2.6 \pm 0.1) \cdot 10^6$	0.001 ± 0.033	$7.3 \cdot 10^{10} \div 7 \cdot 10^{13}$
Комбинированная обработка (ДКД)	8 ± 0.8	$(5 \pm 1) \cdot 10^3$	0.45 ± 0.01 ; 0.012 ± 0.01	$(1.12 \pm 0.01) \cdot 10^7$	0.84 ± 0.01	$(8.4 \pm 1) \cdot 10^6$	0.035 ± 0.001	$(2 \pm 0.1) \cdot 10^{11}$

Дополнительным преимуществом подхода, использованного выше для определения характеристик нескольких типов дефектов, является применение трехкристалльной схемы дифракционного эксперимента. Это позволило в рамках метода ПИИ отдельно измерять интенсивности брэгговских и диффузных волн, т.е. напрямую определять оба структурночувствительных параметра динамической теории.

Следует подчеркнуть, что методы ДКД позволяют «видеть» примеси с концентрацией меньшей, чем миллионные доли процента и смещения атомов, которые в миллион раз меньше, чем размеры самих атомов. Чувствительность наблюдений методами ДКД структуры дефектов достигает микронанометров, обеспечивая возможность управляемых технологий даже на микронаноуровне.

Выводы

В работе детально изложена динамическая теория интегральных интенсивностей рассеяния и проведен анализ динамических экстинкционных эффектов как для когерентного, так и для диффузного рассеяний. Детально рассмотрен коэффициент экстинкции из-за диффузного рассеяния в случаях присутствия в кристалле как малых, так и больших дефектов с учетом двух областей рассеяния: Хуаня и Стокса-Вильсона. Представлены выражения для интегральных коэффициентов и факторов экстинкции в случае малых и больших дефектов при малых эффектах экстинкции. Кроме того, в работе получены выражения для интегральных факторов экстинкции при больших эффектах экстинкции и произвольных размерах дефектов. Рассмотрение указанных случаев проводилось в геометриях дифракции по Лауэ и по Брэггу в приближениях толстого и тонкого кристаллов, в которых протекание дифракционных процессов в когерентной и в диффузной компонентах ПИИ существенно различно, что оговорено в соответствующих разделах.

Такое различие в условиях протекания дифракционных процессов обуславливает различный характер зависимостей компонент ПИИ от параметров эксперимента, таких как длина волны, толщина кристаллов, азимутальный угол и пр. Имея выражения для указанных случаев, а также соответствующие экспериментальные данные, проведение диагностики дефектов нескольких типов в кристаллах становится значительно надежнее и информативнее нежели в случае исследования какого-либо одного условия дифракции. Комбиниро-

ванное использование различных условий дифракции для одного и того же образца представляет собой новое поколение диагностики, названное диффузодинамической комбинированной дифрактометрией [23, 24, 51, 52].

В данной работе рассмотрены в качестве примера дефекты кулоновского типа, а именно, дислокационные петли и сферические кластеры. Однако полученные выражения также использовались как базис для построения теоретических моделей в случаях других типов искажений кристаллической решетки, например таких, как упругий изгиб, нарушенный поверхностный слой, неравномерное распределение дефектов с глубиной и т.п., а также для построения динамических моделей в различных гетероструктурах [22].

Таким образом, в настоящей работе созданы теоретические основы для реализации нового метода интегральной диффузодинамической комбинированной дифрактометрии (ИДДКД).

В работе также проведен детальный сравнительный анализ информативных возможностей кинематической и динамической картин рассеяния на основе результатов соответственно кинематической и динамической теорий интегральных интенсивностей рассеяния и распределений интенсивностей в пространстве обратной решетки. Во-первых, установлено, что физической причиной, которая существенно ограничивает информативность кинематической картины рассеяния и описывающей ее теории, оказывается наличие двух интегральных параметров кинематической картины рассеяния и соответственно двух законов сохранения кинематической теории, а именно независимости полной интегральной интенсивности дифракционного отражения (первый параметр) от характеристик дефектов (первый закон) и отсутствия зависимости от условий дифракции удельного вклада в эту интегральную интенсивность ее диффузной составляющей (вторые соответственно параметр и закон сохранения).

Во-вторых, показано, что именно нарушение этих законов при динамической дифракции и ряд следствий из этого составляют физическую природу радикального повышения информативности ДДКД и обеспечивают появление возможности диагностики кристаллов с дефектами нескольких типов и многопараметрических наносистем при переходе от кинематической картины рассеяния Кривоглаза к динамической, т.е. при обобщении теории Кривоглаза на случай динамического рассеяния. При динамической дифракции оба из введенных здесь параметров (первый – общая яркость отражения и второй – доля в общей яркости ее диффузной составляющей) становятся структурночувствительными и при этом многомерными, т.е. зависящими от условий дифракции, а динамическая картина рассеяния становится многообразной. То есть для всех экспериментально возможных условий динамической дифракции существуют своя динамическая картина рассеяния и своя пара интегральных параметров (или их распределений в обратном пространстве) этой картины со своим (разным для различных условий дифракции) характером влияния дефектов кристалла как на саму картину рассеяния в целом, так и на оба ее параметра в отдельности. На этой основе разработаны новые принципы повышения информативности диагностики и обеспечены новые функциональные возможности разработанных методов диффузодинамической комбинированной дифрактометрии.

Литература

1. Wilhelm Conrad Röntgen, Nobel Lectures, Physics 1901-1921, Elsevier Publishing Company. – Amsterdam, 1967.
2. Von Laue M., Röntgenstrahlinterferenzen (Leipzig: Akademische Verlagsges.: 1948), p. 410.
3. Hammond C. The Basics of Crystallography and Diffraction. 2nd ed. – London: Oxford University Press, 2001. – P. 320.
4. James R.W. Solid State Phys., 15: 55 (1963).
5. Batterman B.W. and Cole H. // Rev. Mod. Phys. – 1964. – № 36. – P. 681.
6. Ахиезер А.И., Померанчук И.Я. Некоторые вопросы теории ядра. – М.: ОГИЗ, 1948.
7. Krivoglaz M.A X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals. – Berlin: Springer, 1996. – P. 466.
8. Молодкин В.Б., Тихонова Е. А. // ФММ. – 1967. – Т. 24, № 3. – С. 385.
9. Молодкин В.Б. // ФММ. – 1968. – Т. 25, № 3. – С. 410.
10. Молодкин В.Б. // ФММ. – 1969. – Т. 27, № 4. – С. 582.
11. Молодкин В.Б. // Металлофиз. – 1980. – Т. 2, № 1. – С. 3.

12. Molodkin V.B. // Phys. Metals, 3: 615 (1981).
13. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I. and Osinovskii M.E. // Phys. Metals. – 1984. – № 5.
14. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I. and Osinovskii M.E. // Phys. Metals. – 1985. – № 5. – P. 847.
15. Kochelab V.V., Molodkin V.B., Olikhovskii S.I. and Osinovskii M.E. // Phys. Stat. Solidi A. –1988. – V. 108, № 1. – P. 67.
16. Даценко Л.И., Молодкин В.Б., Осиновский М.Е. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами. – Киев: Наукова думка, 1988. – С. 200.
17. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N., Len E.G. et al. // Phys. Stat. Solidi B. – 2001. – V. 227, № 2. – P. 429.
18. Olikhovskii S.I., Molodkin V.B., Kislovskii E.N., Len E.G. et al. // Phys. Stat. Solidi B. – 2002. – V. 231, № 1. – P. 199.
19. Олиховский С.И., Молодкин В.Б., Кононенко О.С., Катасонов А.А. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2007. – Т. 29, № . – С. 887.
20. Олиховский С.И., Молодкин В.Б., Кононенко О.С., Катасонов А.А. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2007. – Т. 29, № 9. – С. 1225.
21. Олиховский С.И., Молодкин В.Б., Низкова А.И., Кононенко О.С. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2007. – Т. 29, № 10. – С. 1333.
22. Молодкин В.Б., Низкова А.И., Шпак А.П., Мачулин В.Ф. и др. Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов. – Киев: Академперіодика, 2005.
23. Molodkin V.B., Kovalchuk M.V., Shpak A.P., Olikhovskii S.I. et al. Dynamical Bragg and Diffuse Scattering Effects and Implications for Diffractometry in the Twenty-First Century // In Book «Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials», (MOMENTUM PRESS. – New Jersey, 2009. – P. 401-442.
24. Шпак А.П., Ковальчук М.В., Карнаухов И.М., Молодкин В.В. и др. // УФМ. – 2008. – Т. 9. – С. 810.
25. Шпак А.П., Ковальчук М.В., Низкова Г.І., Гінько І.В. та ін. «Спосіб багатопараметричної структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів» (Патент України № 36075. Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10.10.2008 р).
26. Багов А.Н., Динаев Ю.А., Дышеков А.А., Оранова Т.И. и др. Рентгенодифракционная диагностика упруго-напряженного состояния наногетероструктур. – Нальчик: Каб.-Балк. ун-т, 2008. – 206 с.
27. Shpak A.P., Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kyslovskyy Ye.M. et al // Phys. Stat. Sol. (a). – 2007. – V. 204. – № 8. – P. 2651.
28. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N., Fodchuk I.M. at al // Phys. Stat. Solidi A. – 2007. – V. 204. – № 8. – P. 2606.
29. Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. – М.: Наука, 1982.
30. Тихонова Е.А. // ФТТ. – 1967. – Т. 9, № 2. – С. 516.
31. Dederichs P.H. // Phys. Rev. B. – 1970. – V. 1. – № 4. – P. 1306.
32. Немошкालенко В.В., Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Кисловский Е.Н. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2000. – Т. 22, № 2. – С. 51.
33. Оліховський С.Й., Кисловський Є.М., Молодкін В.Б., Лень Є.Г. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2000. – Т. 22, № 6. – С. 3.
34. Барьяхтар В.Г., Гаврилова Е.Н., Молодкин В.Б., Олиховский С.И. // Металлофизика. – 1992. – Т. 35, № 14. – С. 68.
35. Nemoshkalenko V.V., Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kovalchuk M.V. et al. // Nucl. Instrum. and Meth. in Physics Research A. – 1991. – V. 308, № 1. – P. 294.
36. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Дмитриев С.В., Лень Е.Г., Первак Е.В. // Металлофиз. новейшие технол. – 2006. – Т. 28, № 7. – С. 953.
37. Молодкин В.Б., Дмитриев С.В., Первак Е.В., Белоцкая А.А., Низкова А.И. // Металлофиз. новейшие технол. – 2006. – Т. 28, № 8. – С. 1047.
38. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Дмитриев С.В., Первак Е.В. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2008. – Т. 30, № 5. – С. 1189.

39. Даценко Л.И., Кисловский Е.Н. // УФЖ. – 1975. – Т. 20, № 5. – С. 810.
40. Datsenko L.I., Kislovsky E.N. and I.V.Prokopenko // Ukr. Fiz. Zh. – 1977. – №. 22. – P. 513 (in Russian).
41. Молодкин В.Б., Гудзенко Г.И., Олиховский С.И., Осинковский М.Е. // Металлофизика. – 1983. – Т. 5, № 3. – С. 10.
42. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Осинковский М.Е., Гуреев А.Н. и др. // Металлофизика. – 1984. – Т. 6, № 2. – С. 18.
43. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Осинковский М.Е., Гуреев А.Н. и др. // Металлофизика. – 1984. – Т. 6, № 3. – С. 105.
44. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Osinovskii M.E., Gureev A.N. et al. // Phys. Status Solidi (a). – 1985. – V. 87, № 2. – P. 597.
45. Nemoshkalenko V.V., Molodkin V.B., Kislovskii E.N. and Kogut M.T. // Металлофизика. – 1994. – Т. 16, № 2. – С. 48.
46. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Низкова А.И. // УФМ. – 2004. – Т. 5, № 1. – С. 51.
47. Низкова А.И., Молодкин В.Б., Московка И.А. // Металлофиз. новейшие технол. – 2004. – Т. 26, № 6. – С. 783.
48. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Низкова А.И. // УФМ. – 2004. – Т. 5, № 1. – С. 51.
49. Молодкин В.Б., Немошкаленко В.В., Низкова А.И., Олиховский С.И. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2000. – Т. 22, № 3. – С. 3.
50. Молодкин В.Б., Олиховский С.И., Дмитриев С.В., Лень Е.Г. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2005. – Т. 27, № 12. – С. 1659.
51. Molodkin V.B., Olikhovskii S.I., Kislovskii E.N., Vladimirova T.P. et al. // Phys. Rev. B 78. – 2008. – № 224. – P. 109.
52. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Ковальчук М.В., Носик В.Л. и др. // Металлофиз. новейшие технол. – 2009. – Т. 31, № 5. – С. 607.
53. Шпак А.П., Молодкин В.Б., Ковальчук М.В., Носик В.Л. и др. Новые диагностические возможности деформационных зависимостей интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для Лауэ-дифракции в области К-края поглощения // Металлофиз. новейшие технол. (В печати).

INTEGRAL MANY-PARAMETRIC DIFFUSE-DYNAMICAL COMBINED DIFFRACTOMETRY OF NANOSYSTEMS

**A.P. Shpak, M.V. Kovalchuk, V.B. Molodkin, V.L. Nosik,
S.V. Dmitriev, A.I. Nizkova, Ya.V. Vasilik**

The generalized dynamical theory of Bragg and diffuse scattering of X-rays in crystals with defects of several type has been stated in this work. Expressions of differential and integrated scattering intensities, which bound them with defects characteristics in crystals, in cases of Bragg and Laue geometries have been considered. Extinction effects at the expense of scatterers on defects without limit to their size have been described in coherent and diffuse scatterings at small and big effects of diffuse extinction for differential and integrated coefficients of extinction at the expense of multiple scattering on fluctuating deviations from the periodicity of crystal lattices. Created new physical conception, based on built dynamical theory, at its comparison with kinematical one, which allowed to discover and detailed analyse the physical nature of discovered effects, which stipulate, on the one hand, principal limit of informativity of kinematical scattering, but on the other hand, radical increasing of informativity in case of dynamical diffraction. It has been shown, that this increasing of informativity caused by discovered effect of significant dependence from diffraction conditions of influence character of defects to dynamical scattering, which absent in kinematical case. Unique diagnostic facilities of created integral diffuse-dynamical combined diffractometry (IDDCD) have been shown, which caused by this effect and by series of consequences from it. Particularly, qualitatively new possibilities of carrying out of multiple-parameter diagnostics of materials and products of nanotechnologies have been shown. Also, the model for high-informative IDDCD has been created on basis of built theory by means of measuring of intensities leap near K-edge of extinction and deviations from Friedel-law and their deformational and thickness dependences and carried out their experimental test.

УДК 612.013

СОВРЕМЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ОБ ИННЕРВАЦИИ СРЕДНЕГО И ВНУТРЕННЕГО УХА ЧЕЛОВЕКА

Т.И. Шустова, А.Ю. Юрков, А.М. Вандышев

*ФГУ «Санкт-Петербургский НИИ уха, горла, носа и речи Росздрава»
(Директор – Засл. врач РФ, проф. Ю.К. Янов)*

Для получения информации об адренергических нервных структурах (АНС) в морфофункциональных образованиях среднего и внутреннего уха человека использовали материал, полученный во время секционных исследований. При обработке материала проводили гистохимическую реакцию с глиоксиловой кислотой. На продольных срезах нервов, в спиральном и вестибулярном ганглиях, а также в *chorda tympani* обнаружены одиночные и объединенные в пучки немиелинизированные, интенсивно люминесцирующие, зигзагообразно извитые, реже прямые симпатические нервные волокна без варикозных расширений. Густая сеть адренергических нервных волокон (АНВ) выявлена вокруг лабиринтной артерии. На значительном протяжении стенок *utrículus* и полукружных каналов, а также в улитке на сосудах *modiolus*, в спиральной связке и сосудистой полоске АНВ не выявляются. Наиболее заметное адренергическое нервное сплетение обнаружено на костной спиральной пластинке. Вблизи органа Корти АНВ более толстые и имеют много варикозностей. На продольных срезах *m.stapedius* АНВ с варикозными расширениями располагаются в соединительнотканых прослойках перимизия и в эндомизии непосредственно между мышечными клетками. В месте перехода мышцы в сухожилие и в самом сухожилии АНС не обнаружены. В слизистой оболочке среднего уха АНС образуют две сети: периваскулярную и не связанную с кровеносными сосудами.

Современные представления об организации вестибулоакустической системы млекопитающих основаны на данных нейрофизиологии, анатомии и нейроморфологии, полученных при изучении в сравнительном аспекте ее эволюционных и адаптивных преобразований. В свете этих представлений слуховая функция млекопитающих полисенсорна и поэтому, несмотря на то, что конструкция слухового анализатора у разных животных в значительной мере связана со спецификой его функциональной деятельности, слуховая система в целом ни у одного вида не может быть строго локализованной, т.е. привязанной к определенным структурам мозга, тем более, что внутреннее ухо по существу представляет собой соединение двух различных аппаратов: собственно слухового и статокINETического, где кортиев орган улитки представляет собой рецептор звуковой сигнализации, а ее вестибулярная часть – «рецептор пространства», и участвует не только в передаче информации, но и в организации сложных движений головы и всего тела [6, 8]. Возникнув на основе боковой линии рыб, вестибулярный и слуховой анализаторы у амфибий и птиц практически не отделены друг от друга, и только у млекопитающих в составе единой системы начинают формироваться самостоятельные слуховые образования. Именно поэтому многие морфофункциональные особенности вестибулоакустической системы обусловлены не столько спецификой обработки акустических сигналов, сколько эволюционно более поздним по сравнению с другими анализаторами структурным обособлением слуховых звеньев ЦНС. Формирование самостоятельных ядер из нейронных групп, перерабатывающих акустическую информацию, протекало у наземных позвоночных в несколько этапов и сопровождалось перераспределением клеточного материала на каждом уровне головного мозга [6, 8]. При своем возникновении подкорковые слуховые ядра «захватывали» области, обслуживающие несколько видов чувствительности и заполненные нервными клетками ретикулярного и моторного типов. Входя в состав нового образования, эти области сохранили связи со структурами другой специализации и осевой ретикулярной формацией, поэтому в отличие от других сенсорных центров, слуховые

подкорковые центры содержат в своем нейронном наборе, помимо специализированных клеток, большое количество ретикулярных элементов и близких к ним форм, а также собственные мотонейроны. Такие популяции нервных клеток характеризуются практически неограниченным полиморфизмом, способностью включаться в любые цепи передачи специфической и неспецифической информации и продуцировать специализированные формы ганглиозных клеток: кисточковые длинноаксонные нейроны, звездчатые и гранулярные короткоаксонные ассоциативные элементы, которые перерабатывают и передают различные импульсы в вышележащие и нижележащие отделы, формируют ядра и особые межъядерные скопления, афферентные и эфферентные пути, аккумулируя и интегрируя информацию, поступающую от различных анализаторов для выработки адекватных рефлекторных ответов [8, 17].

При сопоставлении низших млекопитающих с субприматами видно, что диапазон возможностей животных тесно коррелирует с уровнем развития не только самих специфических сенсорных аппаратов, но и мозговых структур, обеспечивающих интеграцию и координацию их деятельности [8, 17]. Активная роль вестибулоакустической системы высших животных в пространственной ориентации, развитии чувства ускорения, вибрации, гравитации, а также в организации специфического общения между индивидами обеспечивается в основном локализацией слуховых и вестибулярных корковых зон и подкорковых центров в непосредственной близости друг от друга, наличием в их нейронном наборе сходных клеток, объединением нервных проводников и едиными рецепторными полями. Одним из существенных результатов эволюции вестибулоакустической системы является постепенное формирование многоканальной передачи акустической сигнализации в высшие этажи мозга. Это свойство проявляется уже на рецепторном уровне периферического отдела системы в виде специализации отдельных элементов и закрепляется на центральных уровнях, которые локализованы во всех участках головного мозга от вестибулярных ядер продолговатого мозга до мозжечка и коры полушарий большого мозга включительно [1, 3, 7, 8, 9, 15].

Чем выше положение животного в эволюционном ряду, тем большее число специализированных каналов может быть выделено в пределах системы. Примером могут служить афферентные каналы, пространственно разнесенные в центральных структурах и передающие информацию о перемещении источника звука, его громкости, высоте и частоте импульсов [3, 10, 11, 13]. У высокоорганизованных животных локальное распределение информации строится следующим образом: специфические каналы передают информацию о физических параметрах сигнала, ассоциативные – о его биологической и социальной значимости, а деятельность неспецифических каналов, связанная с активацией неспецифических мозговых систем, заключается в поддержании общего уровня возбудимости сенсорных аппаратов. Поканальность сигнализации определяет многоуровневый или многоэтажный характер передачи и обработки сенсорных сообщений [2, 4, 5]. При этом надежность каналов связи обеспечивается благодаря частичному взаимному перекрытию нейронных полей, когда терминали одного нейрона подходят к нескольким нейронам следующего уровня и сам он контактирует, получая импульсацию, сразу с несколькими нейронами предыдущего уровня [4, 15]. Следовательно, четкая линейность проведения информации по независимым каналам не соблюдается. Вся система переключений в вестибулоакустической системе строится таким образом, чтобы обеспечить как точную связь однозначных элементов на всех уровнях, так и возможно более широкие взаимодействия между всеми элементами одного уровня, который работает по принципу дивергенции и представляет собой координационный аппарат, где происходит поэтапная обработка, передача или хранение информации [2, 4, 8]. Оба эти механизма переключений необходимы для неискаженной передачи сведений об отдельных признаках и деталях, наряду с объединением их при формировании целостного образа. С помощью этих механизмов осуществляется принцип множественных проекций на кору больших полушарий, тесно связанный с многоканальностью проводящих систем. Эти проекции организованы специфическими быстропроводящими каналами и полисинаптическими (неспецифическими и ассоциативными) путями, передающими интегрированную информацию, возникающую в результате взаимодействия различных каналов сенсорной системы. Ассоциативные нейроны на всех уров-

нях получают афферентацию от специфических и неспецифических каналов и с помощью обратных связей могут регулировать деятельность последних, используя эфферентные звенья рефлекторных дуг. Механизмы обратных связей лежат в основе таких процессов, как «центральное обострение», «центральное огрубление», «переменность» качественных характеристик, приспособление к текущим условиям [2, 4, 10]. Таким образом вестибулоакустическая система состоит не из лестницы релейных образований, а из аппаратов управления процессами обработки и передачи информации с одних уровней на другие, причем каждый уровень системы работает на основе минимум двух входов: входа информации и входа управления.

Вегетативные нервные волокна являются основными элементами «входа управления» на различных уровнях вестибулоакустической системы и осуществляют регуляцию функций ее центральных и периферических образований. По данным литературы вегетативная иннервация среднего и внутреннего уха осуществляется следующим образом: преганглионарные вегетативные нервные волокна являются аксонами клеток верхнего и нижнего слюноотделительных ядер. Волокна, которые берут начало в нижнем слюноотделительном ядре (*n. salivatorius inf.*) выходят из мозга вместе с языкоглоточным нервом, одна из ветвей которого в составе барабанного нерва проникает в барабанную полость. Аксоны клеток верхнего слюноотделительного ядра выходят из мозга в составе лицевого нерва, который включает в себя промежуточный нерв, переходит в большой каменистый, а затем в барабанный нерв (*chorda tympani*). Часть преганглионарных волокон языкоглоточного и лицевого нервов заканчивается на нейронах внутримозговой моноаминергической системы (ВМЭС), другая часть – на нейронах ушного вегетативного ганглия (*g. oticum*), который располагается под овальным отверстием (*foramen ovale*), прилегая с медиальной стороны к нижнечелюстной ветви тройничного нерва, а третья часть преганглионарных волокон, входящих в состав *chorda tympani* переключается на нейронах интрамурального барабанного узла, залегающего в толще слизистой оболочки барабанной полости. Аксоны нервных клеток вегетативных ганглиев вместе с симпатическими волокнами, отходящими от периваскулярных сплетений наружной и внутренней сонных артерий, формируют собственное барабанное сплетение на медиальной стенке барабанной полости. Терминальные волокна этого сплетения, иннервируя слизистую оболочку барабанной полости, слуховой трубы, ячеек сосцевидного отростка и структуры лабиринта, обеспечивают регуляцию функций среднего и внутреннего уха и участвуют в поддержании постоянства жидких сред внутреннего уха [12, 18]. Характер распределения волокон вегетативной нервной системы (ВНС) непосредственно в слизистой оболочке среднего уха детально изучен у животных [21]. С помощью электронной микроскопии, флуоресцентного и иммуногистохимического методов исследования, обнаружено большое количество адренергических (симпатических) нервных волокон в слизистой оболочке среднего уха, которые располагались преимущественно периваскулярно, образуя сеть вокруг мелких кровеносных сосудов. Некоторые адренергические волокна, однако, проходили в слизистой оболочке свободно, вне связи с сосудами. Холинергические волокна были также обнаружены в слизистой барабанной полости и имели сходные особенности локализации (преимущественно периваскулярно). В слизистой оболочке барабанной перепонки ни симпатических, ни парасимпатических волокон обнаружено не было, однако во внутреннем ухе выявлена богатая вегетативная, в том числе адренергическая иннервация [23]. Авторы выделили две системы адренергической иннервации внутреннего уха: периваскулярную, исчезающую уже на периферии оси улитки, и более значительную, создаваемую адренергическими волокнами независимо от сосудов и считали, что большинство таких волокон происходит из ВШСУ. Такие волокна пересекают спиральный ганглий, не образуя контактов с его нейронами, и располагаются по периферии слуховых пучков, образуя сплетение в области верхнего листка спиральной пластинки. Вместе с тем в происхождении адренергических нервных волокон не должна исключаться и роль ВМЭС, которая доказана для большинства внутримозговых сосудов. Наряду с многочисленными клиническими данными это дает веские основания полагать, что в патогенезе ряда слуховых и вестибулярных нарушений существенное значение имеет дисфункция вегетативной нервной системы.

В собственных исследованиях для получения информации о происхождении и локализации адренергических нервных структур в морфофункциональных образованиях среднего и

внутреннего уха человека использовали материал, полученный во время секционных исследований людей, погибших в результате несчастных случаев, но при жизни практически здоровых. Забор материала производили не позднее 6 ч с момента смерти.

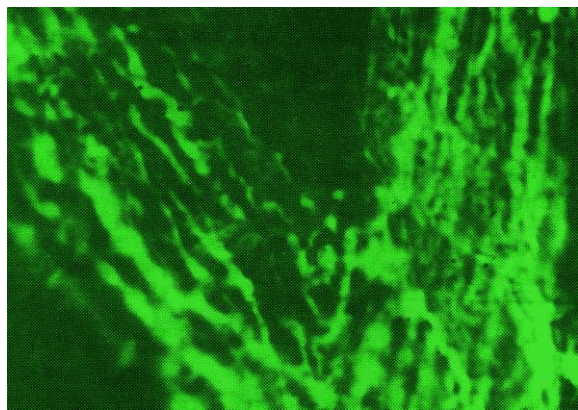
При секционном исследовании височные кости трепанировали, а затем выпиливали таким образом, что в препарат входила пирамида, каменистая часть и участок чешуи размером не менее 5 см (по Абрикосову). Материал доставляли в лабораторный отдел Санкт-Петербургского НИИ ЛОР в эксикаторе, заполненном сухим льдом. В условиях лаборатории для работы с костной тканью фиксировали чешуйчатую часть кости в тисках и удаляли твердую мозговую оболочку с передней поверхности пирамиды. С помощью боров разрушали кость в области крыши барабанной полости, что обеспечивало доступ к структурам среднего уха. Далее под контролем операционного микроскопа удаляли участок кости на передней поверхности пирамиды в проекции полукружных каналов, преддверия и улитки. С помощью микрохирургических инструментов последовательно извлекали эллиптический мешок (*utricle*), сагиттальный, фронтальный, горизонтальный полукружные каналы и улитку. Из костного лабиринта улитки извлекали спиральный ганглий, расположенный в основании веретена (*modiolus*).

Во внутреннем слуховом проходе брали общий ствол преддверно-улиткового нерва, вестибулярный ганглий вместе с преганглионарным участком вестибулярного нерва и лабиринтную артерию, которая проходит рядом с преддверно-улитковым нервом и представляет собой ветвь базальной артерии.

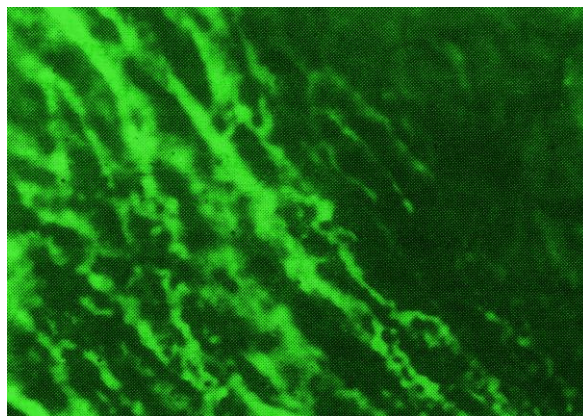
Из структур перепончатого лабиринта исследовали *utricle*, полукружные каналы с ампулами, а также сосудистую полоску, спиральную связку, орган Корти и поверхность костной спиральной пластинки в основном и верхушечном завитках улитки.

В барабанной полости для исследования брали стремянную мышцу (*m. stapedius*) с ее сухожилием, барабанную струну (*chorda tympani*) и слизистую оболочку среднего уха. Из фаллопиева канала медиальной стенки барабанной полости извлекали участок лицевого нерва. Тотальные препараты и срезы, приготовленные на криостате, монтировали на предметные стекла и проводили гистохимическую реакцию с глиоксиловой кислотой для выявления адренергических нервных структур.

На продольных срезах вестибулокохлеарного, лицевого и преганглионарного участков вестибулярного нерва обнаружены пучки немиелизированных, интенсивно люминесцирующих, зигзагообразно извитых, реже прямых адренергических нервных волокон без варикозных расширений. По ходу нервов пучки в значительной мере меняют свой состав, волокна анастомозируют между собой, разветвляются и переходят из одного пучка в другой. Число и диаметр нервных волокон в пучке весьма непостоянны из-за их ветвления. В результате относительная толщина пучков и число волокон в них по ходу нервов непрерывно изменяются (рис. 1 а, б).



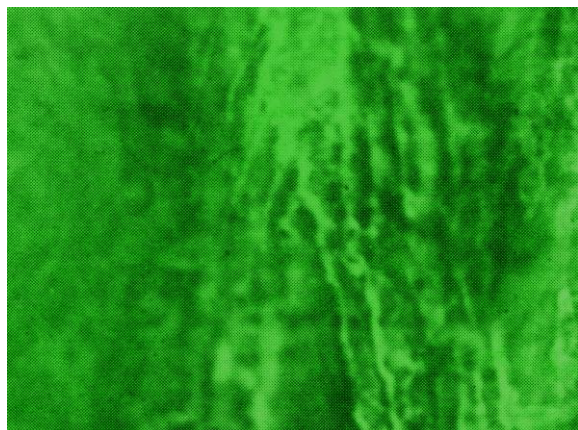
а)



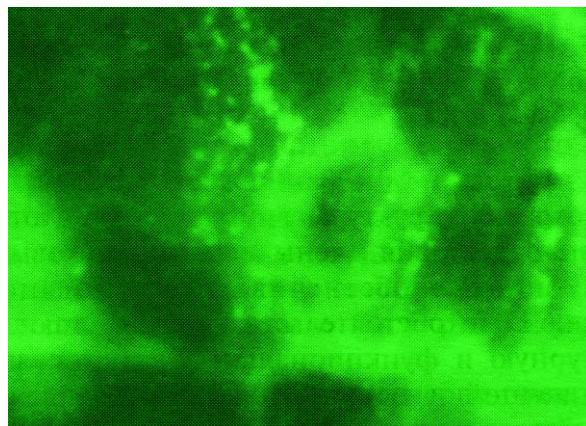
б)

Рис. 1. Адренергические нервные волокна в составе вестибулокохлеарного (а) и лицевого (б) нервов. Об. х 20, ок. Гомаль 3

В спиральном и вестибулярном ганглиях обнаружены одиночные или объединенные в пучки более тонкие немиелизированные нервные волокна, локализованные не только в нейропиле, но и вокруг нейронов (рис 2 а, б). В нейропиле волокна обладают специфической люминесценцией, однако лишены варикозных расширений, выпрямлены или имеют зигзагообразную форму. Волокна, окружающие нейрон, напротив, имеют множество характерных утолщений – варикозных расширений, которые придают окончанию вид четок и свидетельствуют о наличии тесных функциональных связей между нервной терминалью и ганглиозным нейроном. Варикозные расширения выполняют роль пресинаптических структур, из которых выделяется нейромедиатор, предназначенный для взаимодействия с клетками-эффекторами, и отличаются наиболее интенсивной люминесценцией.



а)



б)

Рис. 2. Адренергические нервные волокна в вестибулярном ганглии.

а – нейропиль, об. х20, ок. Гомаль 3, б – ганглиозный нейрон, окруженный нервными терминалями, об. х 40, ок. Гомаль 3

На тотальных препаратах барабанной перепонки, взятой вместе с барабанной струной, выявлены тонкие прямые адренергические нервные волокна (АНВ) без варикозных расширений. Они сосредоточены в *chorda tympani*, где образуют отдельный пучок. Нервные волокна в пучке идут параллельно друг другу и отличаются от окружающих образований характерным изумрудно-зеленым свечением. Отсутствие варикозных расширений свидетельствует о том, что АНВ *chorda tympani* являются транзитными и не имеют функциональных связей со структурными элементами барабанной перепонки.

Густая сеть АНВ выявлена вокруг лабиринтной артерии и ее основных ветвей, отходящих к преддверию, улитке и полукружным каналам. Периваскулярное сплетение, окружающее сосуды, состоит из разветвляющихся и переплетающихся между собой нервных волокон с большим количеством варикозных расширений. Плотность распределения АНВ снижается по мере приближения кровеносных сосудов к периферическим отделам лабиринта.

На значительном протяжении стенок *utricle* и полукружных каналов, а также в улитке на сосудах ее центрального стержня (*modiolus*), в спиральной связке и в сосудистой полоске АНВ не выявляются. Вместе с тем в области макулы *utricle* обнаружены тонкие интенсивно люминесцирующие варикозные нервные волокна, расположенные независимо от кровеносных сосудов. Они локализованы в субэпителиальном слое, проходят параллельно, разветвляются, но типичных нервных сплетений не образуют (рис. 3). Изредка встречаются слабо светящиеся варикозные терминали, внедряющиеся между рецепторными клетками утолщенного эпителия макул.

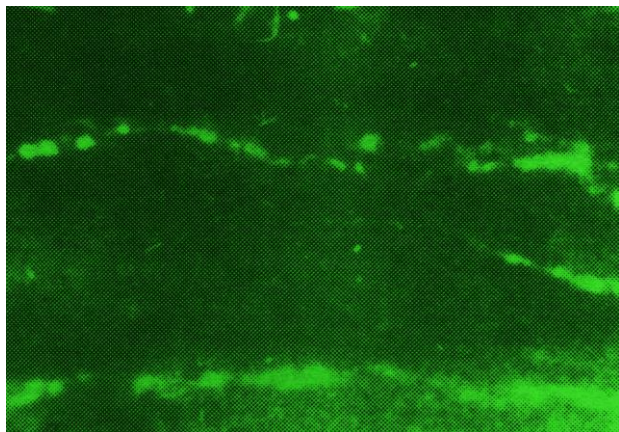


Рис. 3. Адренергические нервные структуры в макуле эллиптического мешочка преддверия. Об. х40, ок. Гомаль 3

В соединительной ткани наружных стенок ампул полукружных каналов, входящей в состав выстилки поперечных гребешков (крест), также выявляются АНВ с типичными варикозностями. Они лежат рядом с капиллярами, но не связаны с ними и концентрируются субэпителиально. Проникновения терминалей в слой сенсорного эпителия крест не наблюдалось, хотя, по данным некоторых исследователей, в электронно-микроскопических препаратах среди нейроэпителиальных волосковых клеток поперечных гребешков иногда видны тонкие немиелизированные нервные волокна [23].

Наиболее заметное скопление АНВ обнаружено в улитке на костной спиральной пластинке. От центра костного стержня улитки тонкие АНВ, не связанные с кровеносными сосудами, идут радиально и направляются к периферической части костной спиральной пластинки. Особенно хорошо радиальное расположение АНВ, выходящих из области модиолуса, заметно в верхушечном завитке, где спиральная пластинка тонкая и на криостатных срезах не маскирует своим неспецифическим свечением окружающие структуры. В основном завитке костная спиральная пластинка наиболее толстая, в связи с чем изготовить криостатные срезы без декальцинации не удастся. По этой причине материал для исследования адренергических нервных структур костной пластинки основного завитка брали путем осторожной препаровки ее поверхностных слоев. На тотальных препаратах поверхности костной спиральной пластинки основного завитка улитки вблизи органа Корти выявляется множество интенсивно люминесцирующих АНВ. Они выглядят более толстыми, чем радиальные волокна, имеют много варикозностей и, разветвляясь, образуют сплетение в виде соединяющихся арок (рис. 4). В самом органе Корти люминесцирующих нервных волокон не обнаружено. По-видимому, радиальные нервные волокна, выходя из костного стержня улитки, достигают периферической части костной спиральной пластинки, где поворачивают и формируют «арочное» терминальное сплетение.

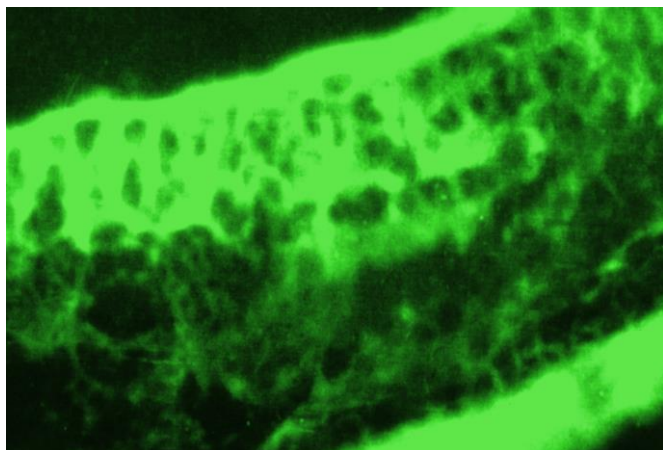


Рис. 4. «Арочное» терминальное сплетение в основном завитке улитки. Об. х20, ок. Гомаль 3

В слизистой оболочке среднего уха адренергические нервные структуры связаны, в основном, с кровеносными сосудами. От периваскулярных нервных сплетений ответвляются тонкие нервные волокна с варикозными расширениями. Свободные нервные терминали располагаются среди соединительнотканых волокон собственной пластинки слизистой оболочки, где формируют собственные нервные сплетения, не связанные с капиллярами (рис. 5). Отдельные волокна располагаются параллельно базальной мембране эпителия и, по-видимому, иннервируют эпителиальные клетки дистантным способом. Наибольшая концентрация адренергических нервных сплетений выявлена в медиальной стенке барабанной полости и в области устья слуховой трубы.

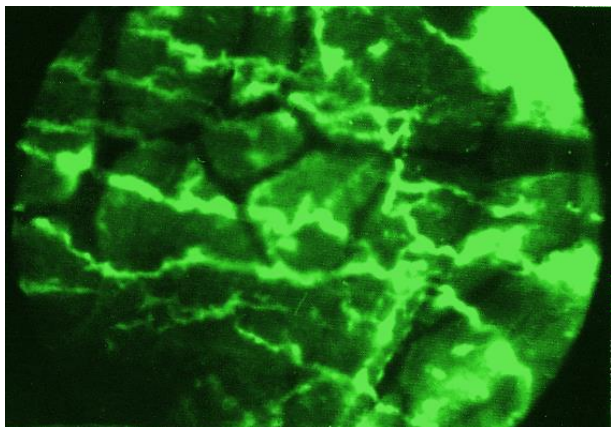


Рис. 5. Адренергические нервные сплетения в собственной пластинке слизистой оболочки среднего уха. Об. x20, ок. Гомаль 3

Исследование мышцы стремени связано с тем, что в нормальных условиях ее деятельность зависит от интенсивности низкочастотных шумов. При чрезмерном шуме *m. stapedius* рефлекторно тетанически сокращается и выполняет защитную роль, охраняя структуры внутреннего уха от повреждающего действия очень сильных звуковых колебаний, а также обеспечивает аккомодационную функцию. Эти обстоятельства предполагают тесную структурную и функциональную взаимосвязь между мышечной и нервной тканями, позволяющую осуществлять тонкую регуляцию деятельности мышцы стремени в процессе восприятия звуковых колебаний.

На продольных срезах *m. stapedius* видно, что АНВ с большим количеством варикозных расширений располагаются в соединительнотканых прослойках перимизия и в эндомизии непосредственно между мышечными клетками. Они часто сопровождают капилляры, но не объединяются с ними. На конце мышцы, где соединительнотканые элементы продолжают за пределы мышечных волокон, переходя в сухожилие, и в самом сухожилии адренергические нервные структуры не обнаружены. Вероятно, выявленные в мышце стремени нервные волокна могут изменять ее тонус путем диффузии медиатора к мембранам миоцитов. Управление работой мышцы осуществляется по принципу обратной связи: количество выделяемого медиатора и его обратный захват зависят от оперативной информации, поступающей в вегетативную нервную систему от мышечных интерорецепторов.

Помимо АНВ, отличающихся специфической изумрудно-зеленой люминесценцией, в препаратах часто встречаются гранулосодержащие клетки и отдельные гранулы с ярко-желтым свечением, характерным для серотонина и дофамина. Такие структуры обнаружены в спиральной связке, сосудистой полоске, в костной спиральной пластинке улитки и в стенках полукружных каналов. В одном случае наблюдалась дегрануляция клеток с массовым выбросом гранул в полости полукружных каналов. Следует отметить, что в этом случае специфическая люминесценция периваскулярных и самостоятельных адренергических нервных волокон выглядела значительно менее интенсивной, чем в остальных. Возможно, это объясняется общей вегетативной недостаточностью, связанной с возрастом (72 года), так как у людей концентрация нервных волокон, число варикозных расширений и уровень активности

нейромедиаторов после 55 лет характеризуется снижением этих показателей. В то же время они имеют индивидуальные особенности, и сохранность нервных проводников у пожилого человека может быть выше, чем у молодого [14].

Наиболее значительные скопления структур, обладающих изумрудно-зеленой и ярко-желтой люминесценцией, наблюдаются вблизи капилляров, которые не имеют мышечных клеток, являющихся потенциальными эффекторами адренергической иннервации. По мнению японских авторов [22], группу родственных гранулосодержащих клеток (гранулоцитов), структурно и функционально связанных с капиллярами, составляют тканевые базофилы, хромоаффиноциты и меланоциты. Их специфическая люминесценция обусловлена наличием в цитоплазматическом матриксе большого количества гранул, содержащих биогенные амины. За участие в обмене биогенных аминов эти клетки названы моноаминоцитами [14]. Все они выделяют вазоактивные вещества и рассматриваются как сосудистые эндокриноциты с паракриновым механизмом действия [20].

Сведения о локализации адренергических нервных структур в барабанной полости и лабиринте позволяют утверждать, что адренергическая иннервация среднего и внутреннего уха человека имеет двойное происхождение. Одна часть АНВ связана с периваскулярными сплетениями, достаточно хорошо выраженными на сосудах, имеющих гладкомышечный компонент в составе своих стенок. Другая часть, не зависящая от кровеносных сосудов, начинается в ЦНС, достигая периферии в составе лицевого, языкоглоточного, вестибулокохлеарного и других нервов. Это согласуется с данными экспериментальных исследований по селективной односторонней перерезке улиткового, вестибулярного и вестибулокохлеарного нервов у кошек без повреждения лабиринтной артерии [23]. Перерезка нервов приводила к почти полному исчезновению АНВ, не связанных с сосудами, в структурах внутреннего уха на оперированной стороне. Оставшиеся нервные волокна выглядели раздутыми и содержали необычайно крупные варикозности, что является признаком ретроградной дегенерации. Периваскулярное сплетение вокруг ветвей лабиринтной артерии не исчезало.

Данные о наличии в структурных образованиях лабиринта моноаминоцитов соответствуют представлению о градиенте прямой и опосредованной нейрогенной регуляции гемодинамики в сосудистом русле: по мере сокращения диаметра сосудов уменьшается значение нервных терминалей и увеличивается роль местных клеток-регуляторов [14]. Экспериментальные исследования указывают на неравнозначность вазомоторных ответов при действии одного и того же трансмиттера. Так например, норадреналин и серотонин оказывают на крупные сосуды преимущественно констрикторное воздействие, а на сосуды микроциркуляторного русла – релаксирующее [19]. Из-за отсутствия нервных терминалей на мелких артериолах и капиллярах регуляция деятельности микрососудов осуществляется главным образом за счет моноаминоцитов. Секретирующие гранулосодержащие клетки встречаются и по ходу крупных вне- и внутримозговых сосудов, особенно в области их бифуркаций, где образуются скопления моноаминоцитов – так называемые гломусы или параганглии, например, сонные, яремные, барабанные, однако наибольшее количество таких клеток сосредоточено вблизи капилляров. Очевидно, это является выражением общей эволюционной закономерности, согласно которой эндокринные регуляторы перемещаются с магистральных артерий на капилляры и по своему функциональному назначению подобны периферическим вегетативным нейронам [14].

Располагая биологически активными веществами, моноаминоциты могут функционировать как относительно автономные регуляторы, однако их системная деятельность корректируется нервными механизмами, в том числе с помощью холинергических и адренергических аксонов, усиливающих или ослабляющих секреторную активность гранулоцитов. У человека аксонные терминали могут подходить к внешней мембране клеток-регуляторов на расстояние от 100 до 200 нм (холинергические) и от 7 до 20 нм (адренергические) [14], т.е. синаптическая щель для адренергических аксонов на порядок уже, чем для холинергических.

Экспериментально установлено, что стимуляция преганглионарных вегетативных волокон сопровождается дегрануляцией и изменением формы и величины тканевых базофилов (тучных клеток, лаброцитов), а введение норадреналина или ацетилхолина вызывает дозозависимую реакцию. При этом из тканевых базофилов выделяются триптамин, серотонин, дофамин, гистамин и вазопрессин. Влияние ацетилхолина на функцию сосудистых эндокриноцитов реализуется через мускариновые рецепторы, а норадреналина – через бетта-адренорецепторы. В отличие от ацетилхолина адренергический медиатор тормозит дегрануляцию и секрецию гранулоцитами вазоактивных веществ [14]. Показано, что мобилизация биогенных аминов в моноаминергических аксонах начинается и заканчивается раньше, чем в моноаминоцитах, а восстановление происходит в обратном порядке. На основании этих наблюдений высказана гипотеза о коррелированном обмене катехоламинов между АНВ и моноаминоцитами: экзоцитированные биогенные амины могут захватываться адренергическими аксонами и использоваться для нервной регуляции сосудистых и тканевых реакций [16].

В целом гистохимическое исследование иннервации среднего и внутреннего уха человека показало, что в периферическом отделе вестибулоакустической системы имеются вегетативные АНВ, которые образуют две сети: периваскулярную и не связанную с кровеносными сосудами. Изучение структур перепончатого лабиринта выявило наличие в них моноаминоцитов, которые совместно с АНВ осуществляют регуляцию гемодинамики и тканевой трофики. Данные проведенного исследования согласуются с клиническими представлениями об участии ВНС в деятельности органов слуха и равновесия. Они позволяют считать, что у больных слуховые и вестибулярные расстройства могут быть связаны с нейродистрофическим процессом, развивающимся в организме при нарушениях адаптационно-трофической функции ВНС. Этот патогенетический механизм необходимо учитывать при выборе тактики лечения пациентов, страдающих заболеваниями среднего и внутреннего уха.

Литература

1. Адрианов О.С. Архитектура мозга и индивидуальность личности // Успехи физиол.наук. – 1993. – Т. 24, № 3. – С. 25 – 39.
2. Альтнер Х., Дудель Дж., Гюссер О. и др. Основы сенсорной физиологии. Морфология нервной системы / Под ред. В.П. Бабминдры. – Л., 1985. – 160 с.
3. Базаров В.Г., Лисовский В.А., Мороз Б.С., Токарев О.П. Основы аудиологии и слухопротезирования. – М.: Медицина, 1984. – 250 с.
4. Батуев А.С. Программирование целенаправленного поведения и ассоциативные системы мозга // Физиология. – 1980. – Т. 66, № 5. – С. 629 – 641.
5. Беневольская Н.П. Этюды по эргономике. – Новосибирск: Наука, 1980. – 208 с.
6. Богословская Л.С., Солнцева Г.П. Слуховая система млекопитающих: сравнительно-морфологический очерк. – М.: Наука, 1979. – 347 с.
7. Вербицкая Л.Б., Майский В.А. Связи сенсомоторной и орбито-фронтальной коры с гипоталамусом, исследование методом ретроградного аксонного транспорта пероксидазы хрена // Аксонный транспорт веществ в системах мозга. – Киев: Наукова думка, 1981. – С. 91-94.
8. Винников А.Я. Эволюция структурно-функциональной организации органа слуха позвоночных // Сенсорные системы. Слух. – Л.: Наука, 1982. – С. 122 – 123.
9. Гранстрем Э.Э. Связи вторичных зон слуховой коры со слуховыми подкорковыми центрами мозга у кошки // Арх. анат. – 1989. – Т. 96, № 3. – С. 5-7.
10. Ильичев В.Д. Лекции по биоакустике. – М.: Изд-во МГУ, 1971. – 91 с.
11. Лесовой А.С., Шевчук В.А. Морфологические данные при повреждениях головы, обусловленных производственными и бытовыми травмами // Врач. дело. – 1988. – № 7. – С 84-85.

12. Лобко П.И., Мельман Е.Н., Денисов С.А. и др. Вегетативная нервная система. Атлас. – Минск: Высшейш. шк., 1988. – 271 с.
13. Мовчан В.Н. Слух и особенности слуховой среды млекопитающих. – СПб.: Университет, 1993. – 169 с.
14. Мотавкин П.А. Современные представления о механизмах регуляции мозгового кровообращения // Морфология. – 1992. – Т. 103, № 7-8. – С. 7-34.
15. Наута Дж., Фейртаг М. Организация мозга. Мозг / Ред. П.В. Симонов. – М.: Мир, 1984. – С. 83-111.
16. Черток В.М., Мотавкин П.А. Теории регуляции мозгового кровообращения. / Актуальные проблемы здравоохранения Приморья. – Владивосток, 1988. – С. 44-88.
17. Cardy J.N., Berlin Ch.I. Binaural components. Their possible origins in guinea pig auditory brain stem response // Arch. Otolaryngol. – 1981. – Vol. 107, № 3. – P. 165-168.
18. Chusid I. Correlative neuroanatomy and functional neurology // Los Atlos, Calif. Lange Medikal. – 1982. – 184 p.
19. Deschmahn V.D., Harper A.M. The effect of serotonin on cerebral and extracerebral blood flow with possible implications in migrain // Acta Neurol Scand. – 1973. – Т. 44, № 5. – С. 649-658.
20. Fujita T. Present status of paraneuron concept // Arch Histol Cytol. – 1989. – Т. 52. – С. 1-8.
21. Ishii T., Kaga K. Autonomic nervous system of the cat middle ear mucosa. // Ann. Otol. Rhinol. – 1976. – Т. 85, № 25. – С. 51-57.
22. Okun M., Hamada G., Dannelan B. Latency of dopa reaction in must cell // Histochemia. – 1975. – №1. – С. 1-8.
23. Spöndlin H., Lichtensteiger W. The adrenergic innervation of the labyrinth // Acta otolaryngol. – 1966. – Т. 61. – С. 423-434.

UPDAITED PRESENTATION ABOUT INNERVATION OF HUMAN MIDDLE AND INTERNAL EAR

T.I. Shustova, A.Yu. Yurkov, A.M. Vandyshv

Saint-Petersburg

Abstract. Adrenergic nervous structures (ANS) in morphofunctional formations of human middle and internal ear were studied on the autopsy material. The samples were treated histochemically with glyoxylic acid. Non-varicose dilated sympathetic nerve fibers (single and in bundles, nonmyelinated, intensively luminescent, twisted and direct) were detected in vertical nerve sections, in spiral and vestibular ganglia, in chorda tympani. A thick net of adrenergic nerve fibers (ANF) was noted around the labyrinthine artery. ANF were absent long along the utriculus and semicircular canals, in the modiolus vessels, spiral ligament, vascular stripe. ANF were most numerous on the osseous spiral lamina. Near the Cortis organ ANF are thicker and often varicose. On the vertical sections of m. stapedius ANF with varicose parts locate in the connective tissue perimysial layers and in the endomysium directly between the muscular cells. At the site of muscle transition into the tendon and in tendon as such no ANF were found. Two sets of ANF were noted in the middle ear mucosa: perivascular and unrelated tj blood vessels.

АРХЕТИП МОДЕЛИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ И ЕГО ВОПЛОЩЕНИЕ В РАЗЛИЧНЫХ РАЗДЕЛАХ ФИЗИКИ (ТЕРМОДИНАМИКЕ, МЕХАНИКЕ СПЛОШНЫХ СРЕД, ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ)

А.И. Липкин

*Московский физико-технический институт
(государственный университет), Москва*

1. Введение.

Общая структура оснований раздела физики

Что такое физика? В чем ее специфика по сравнению с другими естественными науками, например, химией?

В [Липкин 2001; 2007 (гл. 7)] утверждается, что специфика физики, как и других естественных наук, определяется теми *моделями*, с помощью которых она описывает (упорядочивает) мир природы. Именно модели дают понимание физических явлений¹. При этом модели явлений, которые я называю «вторичными идеальными объектами» (ВИО), строятся с помощью базовых идеальных объектов (я их называю «первичными идеальными объектами» (ПИО)), которые (аналогично первичным понятиям геометрии в изложении Д.Гильберта) задаются с использованием неявного типа определения в рамках оснований раздела физики (систему утверждений, составляющую такое основание я называю «ядром раздела физики» (ЯРФ)) [Липкин 2001; 2007 (гл.7); 2005 (введение)]:

$$(ЯРН = \text{неявн} \Rightarrow \text{ПИО}) - \text{явн} \Rightarrow \text{ВИО}. \quad (1.1)$$

Из анализа ПИО различных разделов физики следует, что модели самих ПИО основываются (вырастают), главным образом, из *двух архетипических моделей* – модели *локальной (точечной) частицы* и *нелокальной сплошной среды*. На естественнонаучном уровне они впервые были разработаны соответственно в механике Ньютона и гидродинамике идеальной жидкости Эйлера. Их альтернативность и противостояние, которое на натурфилософском уровне были обозначены в споре картезианцев с ньютонианцами, актуализируется при появлении теории электромагнитного поля Фарадея-Максвелла.

Воплощение модели локальной частицы в классической механике, а также в теории относительности были рассмотрены в [Липкин 2001; 2007], ее существенная модификация в виде множества частиц, лежащая в основе статистической физики – в [Липкин 2008], в основаниях нерелятивистской квантовой механики лежит гибридная модель волна-частица, с доминированием модели частицы [Липкин 2005; 2001; 2007, гл. 13].

Данная статья посвящена рассмотрению второго архетипа и его реализации в различных разделах физики: термодинамике, механике сплошных сред, электродинамике.

При их анализе будем исходить из проводимой автором линии [Липкин 2001, 2007, ...], что современная форма представления физического знания наиболее адекватно представлена в структуре *теоретической физики*, сложившейся на границе XIX-XX вв. (на отрезке от создания электродинамики Фарадея-Максвелла до создания новой квантовой механики в 1925-27 гг.). Но-

¹ В статье «Что такое «понимание» в теоретической физике? В. Гейзенберг (1971), ссылаясь на пример теории Птолемея с ее высокой «предсказательной ценностью», подчеркивал, что несмотря на это «большинство физиков согласятся, что лишь после Ньютона удалось добиться «реального понимания» динамики движения планет. Приводимые им примеры теории Турбулентного движения в жидкости, сверхпроводимости показывают, что ощущение «понятности» возникает у физиков после построения соответствующих моделей. Более развернуто эта тема обсуждается в [Липкин 2001 а; 2007 а].

вая форма знания – продукт методологической революции, происшедшей как ответ на возникший в конце XIX в. кризис в основаниях механики и физики в целом. Этот кризис развивался параллельно аналогичному кризису в основаниях геометрии в связи с появлением неевклидовых геометрий. В физике аналогичную роль сыграло появление неньютоновского по своей сути электромагнитного поля. Ответом, как и в геометрии, стал *переход к неявному типу определения основных понятий*. В результате физика в своей новой форме – теоретической физике – предстала в виде *совокупности разделов*, в каждом из которых есть *свое основание в виде системы постулатов* (называемых мной «*ядром раздела физики*» – ЯРФ), осуществляющих неявное определение основных понятий, включая базовые объекты – «первичные идеальные объекты» (ПИО) данного раздела физики.

Все разделы физики имеют сходную структуру ЯРФ (сх. 1.2), в которой можно выделить *теоретическую и операциональную части*.

Теоретическая часть (выделена квадратными скобками) состоит из *физической модели* и ее *математического представления*. Основными элементами физической модели являются «*физическая система*» (A) – то, что не меняется (в классической механике – механические частицы), и ее «*состояния*» ($S_A(j)$) – то, что меняется (в классической механике – положения и скорости механических частиц). Эта пара понятий, представляющая *физический процесс* (движение) как *переход физической системы A* (в виде ПИО или ВИО) *из одного состояния ($S_A(1)$) в другое ($S_A(2)$)*, является центральной в современной теоретической физике [Липкин 2007; 2001]:

$$\langle \Pi | S_A(1) \rightarrow \{ S_A(2) = \text{УД} \Rightarrow S_A(2) \} | I \rangle \rightarrow S_A(2) | I \rangle. \quad (1.2)$$

При этом связь между состояниями физической системы задается с помощью «*уравнения движения*» (например – уравнения Ньютона), для чего вводится «*математическое представление*» (выделено подчеркиванием), состоящее из *математических образов* физической системы, внешних воздействий (сил и т.п.), состояний физической системы и «*законов природы*» в виде «*уравнения движения*» (УД).

Состояние физической системы – одно из центральных понятий физики (хотя в курсе общей физики и в школе, этого понятия избегают). Знание состояния задает полную возможную информацию о системе в данный момент времени, а посредством уравнения движения – и в другие моменты времени. Так в классической механике, где уравнением движения является уравнение Ньютона, для случая физической системы, состоящей из одной частицы, зная положение и скорость частицы с помощью уравнения движения, можно ответить на любой вопрос про движение частицы, как в этот момент времени, так и в любой другой. Поэтому знание положения и скорости частицы и задает состояние частицы в классической механике.

Физическая модель, с одной стороны, связана с математическим представлением, а с другой – с *операциями приготовления* $\langle \Pi |$ (системы и ее начального состояния) и *измерения* $| I \rangle$ (основу последней составляют эталон и операции сравнения с эталоном), которые составляют *операциональную часть*.

Все элементы этой структуры взаимосвязаны и определяются (как и основные понятия геометрии) *совместно*.

Наиболее четко эта структура проявлена в таких разделах физики как классическая и квантовая механика и теория относительности, т.е. тех разделов, которые непосредственно были вовлечены в указанный «кризис оснований». В стандартных изложениях рассматриваемых в данной статье разделов указанная выше структура раздела физики, как правило, выражена слабо. При их изложении акцент делается на «выводе» исходных уравнений и применении их к типовым классам задач. Это прямой путь к овладению предметом, т.е. приобретению способности решать задачи. Но если начинать с понимания, то необходимо сначала выделить исходный *физический объект (систему)* и связанные с ним возможные его состояния. Сначала выделить основания в виде соответствующих «*ядра раздела физики*» и «*первичных идеальных объектов*», а уж потом переходить к типовым классам задач. Причем, исходя из идеи о существовании двух базовых архетипов (протомоделей) – частицы и сплошной среды, мы будем придерживаться изложения, в котором модель сплошной среды вводится без ссылок на молекулярную структуру.

Наиболее последовательно такая схема реализована в книге Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. (М.: Мир, 1964) (а также в [Зубарев а]) Обращение к этой книге мы предварим рассмотрением двух наиболее простых реализаций (воплощений) архетипа сплошной среды в конкретных разделах физики: гидродинамике идеальной жидкости Эйлера и электродинамике Максвелла.

2. Гидродинамика Эйлера и общая схема динамики сплошной среды

Начнем с самой простой и исторически первой реализации архетипа сплошной среды в гидродинамике идеальной жидкости Эйлера.

В качестве *физической системы* здесь выступает жидкость, имеющая определенную *плотность*, занимающая определенное *пространство*, ограниченное соответствующей *границей*. *Состояние* этой физической системы задается *значениями* скорости v и давления p во *всех точках* данного пространства. Последнее задает типологическое отличие состояний сплошной среды, имеющей бесконечное число степеней свободы, от состояний локальных частиц, имеющих конечное (как правило, небольшое) число степеней свободы. *Внешнее воздействие* осуществляется через границу – граничные условия (внешние поля мы пока не рассматриваем). *Операции измерения* соответствующих величин предполагают *использование «пробного тела»*, с помощью которого выделяется определенная локальная окрестность некоторой точки x в занимаемом жидкостью пространстве. Математическими образами соответствующих физических величин являются их значения. Связь состояний фиксируется *уравнением движения* в форме уравнений Эйлера.

Обобщая эту модель, **архетип сплошной среды** сведем к следующей общей схеме:

- *физическая система* – сплошная среда, занимающая определенное пространство, ограниченное соответствующей границей и характеризующаяся плотностью некоторых измеримых характеристик;
- *состояние* этой физической системы задается *значениями* определенного набора измеримых величин во *всех точках* данного пространства;
- *внешнее воздействие* осуществляется, во-первых, через граничные условия для входящих в пункт 2 величин, во-вторых к ним могут быть добавлены внешние силы или поля одновременно с дополнительными характеристиками физической системы – сплошной среды – плотности заряда и т.п., которые ответственны за взаимодействие с этими внешними силами и полями;
- *операции измерения* соответствующих величин, характеризующих состояние системы, предполагают использование *«пробного тела»*;
- *математическими образами* измеримых величин являются значения этих измеримых величин;
- *связь состояний* в математическом слое фиксируется соответствующим *уравнением движения*.
- специфика динамики сплошных сред по отношению к динамике частиц, состоит в том, что, имея ту же структуру «ядра раздела физики», ее «первичные идеальные объекты» имеют внутреннее пространство, поэтому появляется место для движения внутри: *изменения характеристик внутри системы*, которые определяют пространственные потоки различных величин (теплопроводности, диффузии, вязкого течения, электропроводности), т.е. потоки характеристик внутри объекта (физической системы в виде сплошной среды), которые, наряду с изменениями границ и граничных условий, оказываются в центре внимания.

3. Электромагнитное поле в вакууме как вариант сплошной среды

Говоря о сплошной среде, часто оговаривают, что масштаб описания велик по сравнению с величиной молекул. Но предположение о молекулярной структуре является излишним при введении понятия сплошной среды (они отсутствуют и в споре картезианцев и ньютоналинцев). Поэтому в нашем определении *отсутствует ссылка на молекулы и вещественность*.

В результате этого под определение сплошной среды подпадает, как нетрудно убедиться, и «невещественное» силовое поле (электромагнитное или гравитационное), описание которого вполне вписывается в пп. 1-7. Так электромагнитное поле определяется тогда как особая («невещественная») сплошная среда, состояния которой задаются значениями напряженностей электрического и магнитного полей, их изменение – уравнениями Максвелла, а их измерение использует пробные заряды и витки с током. Такое определение соответствует и истории формирования этого понятия, поскольку и Фарадей и Максвелл рассматривали поле как сплошную среду (эфир), вводя принцип «близкодействия», в противовес ньютоновой модели «дальнодействия», из которой исходили их конкуренты Нейман и др. в Германии.

При таком взгляде, где электромагнитное поле является разновидностью сплошной среды, переход от модели эфира к модели поля является кумулятивным движением улучшения модели в рамках модели сплошной среды, а не скачком².

4. Неравновесная термодинамика как прародитель динамик сплошных сред

Теперь посмотрим как этот архетип воплощается в других разделах физики. Начнем с наиболее общего рассмотрения, представленного в упомянутой «Неравновесной термодинамике» С. Де Гроота и П. Мазура (где, кстати, наряду с гидродинамикой фигурирует и электродинамика).

«Неравновесная термодинамика должна строиться с самого начала как *континуальная теория*, где параметры состояния рассматриваются как *полевые переменные*, т.е. *непрерывные функции пространственных координат и времени*. Кроме того, желательно формулировать основные уравнения теории таким образом, чтобы они содержали только величины, *относящиеся к одной точке пространства в один момент времени*, т.е. в форме локальных уравнений. Именно в этой форме формулируются *уравнения динамики жидкости и теория Максвелла*» (здесь и далее выделено – А.Л.) [Гроот, с. 10]³.

Т.е. *состояние физической системы задается значениями соответствующих измеримых величин во всем пространстве, занимаемой системой* (п.2). В состав этих величин входят переменные идеальной жидкости – *скорости v и давления p* , а также термодинамические переменные: *температура T , концентрация $\{c_k\}$* (для многокомпонентных систем). В качестве соответствующих внешних воздействий выступают нагревание δQ , граничные температура, давление, скорость. Наряду с величинами, характеризующими состояние системы, есть величины, которые характеризуют саму *систему*. К ним, наряду с плотностью и составом (для многокомпонентных систем), относятся так называемые «*кинетические коэффициенты*» или «*коэффициенты переноса*» (теплопроводности, диффузии, вязкости, электропроводности).

Авторы рассматривают весьма общий случай «*системы, состоящей из n компонентов, между которыми возможны g химических реакций*» [Гроот, с. 19]. *Состояния* этой системы задает « *$n + 4$ независимых переменных: плотности ρ , $n - 1$ концентраций c_k , трех декартовых компонент v_x, v_y, v_z скорости v и температуры T* » [Гроот, с. 47].

Уравнения движения вводятся на основе *законов сохранения* массы, количества движения и энергии (т.е. «*первого закона термодинамики*»), *уравнение баланса энтропии* (т.е. «*второго закона термодинамики*») в их локальной форме, *уравнения состояния* и *набор феноменологических урав-*

² Из этого следует, что переход от Френеля к Максвеллу не ограничивается формулами, как утверждает структурный реализм [Worrall, p. 117-120], при переходе от эфира к силовому полю онтологический скачок не столь велик, как об этом говорят, скажем Л.Лаудан (в качестве антиреалистического контрпримера) [Laudan] и Дж. Уоррелл (в качестве аргумента в пользу структурного реализма) [Worrall].

³ То же найдем в статье Д.Н. Зубарева «Систему представляют состоящей из элементарных объемов... термодинамическое состояние каждого выделенного элементарного объема характеризуется *температурой, давлением и др. параметрами*, применяемыми в термодинамике равновесных процессов, но зависящими от координат и времени» [Зубарев а].

нений, связывающих входящие в выражение для интенсивности источника энтропии⁴ необратимые потоки (поток диффузии, поток тепла и тензор давлений, которые характеризуют соответственно поток массы, энергии и импульса) и «термодинамические силы» (связанные с неоднородностью системы (например, градиент температуры) или с отклонением некоторой внутренней переменной состояния от ее равновесного значения (например, химическое сродство)). В первом приближении потоки являются линейными формами термодинамических сил⁵ [Гроот, с. 11].

По сравнению с идеальной жидкостью в термодинамике (неравновесной и равновесной) появляются: новая измеримая величина температура T , задающая состояние, количество тепла в качестве формы внешнего воздействия, и две новые величины – внутренняя энергия U и энтропия S , вводимые в первом и втором законах (началах) термодинамики.

Энергия в физике (сначала в механике), как и другие интегралы движения, есть функция состояния, т.е. она задается состоянием, она является функцией измеримых величин, задающих состояние системы. Энергия, как и другие интегралы движения, играет особую роль в силу сохранения в ходе движения, это характеристика процесса-движения⁶. Это сохранение является следствием условий симметрии (однородности времени для энергии, однородности и изотропности пространства для импульса и момента импульса), которые физики накладывают на все разделы физики (за исключением общей теории относительности) и строимые ими теории.

Внутренняя энергия U (и ее плотность u) вводится в результате распространения закона сохранения энергии на тепловые процессы. Это и есть *первое начала (закон) термодинамики*: $dU = \delta Q - p dV$. Этот закон вводит эту новую величину (и понятие) (ср [Гроот, с.25]), подобно тому, как второй закон Ньютона вводит величину (и понятие) силы.

Второй закон термодинамики вводит другую новую величину – энтропию – наиболее сложное понятие термодинамики⁷. Локальная формулировка второго закона термодинамики приводит к так называемому уравнению баланса энтропии, которое играет центральную роль в неравновесной термодинамике.

⁴ «Оказывается, что выражение для источника энтропии имеет очень простой вид: оно представляет собой сумму членов, каждый из которых является произведением двух множителей – потока, характеризующего необратимый процесс, и величины, носящей название термодинамической силы» [Гроот, с. 11].

⁵ Закон диффузии Фика, закон теплопроводности Фурье, закон электропроводности Ома принадлежат к классу линейных феноменологических законов. Эти линейные законы должны... отражать и возможные перекрестные эффекты... Примером перекрестного эффекта является эффект Соре (возникновение диффузии при наличии градиента температур). Существуют... термоэлектрические явления, ряд термомагнитных и гальваномагнитных явлений, а также электрокинетические явления... Вне области линейных законов известно очень мало... Ряд соотношений между этими коэффициентами дает прежде всего теорема взаимности Онсагера – Казимира» [Гроот, с. 12].

⁶ Она (вместе с др. интегралами движения) характеризует состояние атома, но лишь постольку, поскольку атом как ВАО задается (определяется) как совокупность движений электронов.

⁷ «В термодинамике понятие энтропии было введено нем. физиком Р.Клаузиусом (1865), который показал, что процесс превращения теплоты в работу подчиняется определенной физической закономерности – второму началу термодинамики, которое можно сформулировать строго математически, если ввести особую функцию состояния – энтропию. Так для термодинамической системы, совершающей квазистатически (бесконечно медленно) циклический процесс, в котором система последовательно получает малые количества тепла δQ при соответствующих значениях абсолютной температуры T , интеграл от «приведенного» количества теплоты $\delta Q/T$ по всему циклу равен нулю (... т.н. равенство Клаузиуса). Это равенство эквивалентно второму началу термодинамики для равновесных процессов... Математически равенство Клаузиуса необходимо и достаточно для того, чтобы выражение $dS = \delta Q/T$ представляло собой полный дифференциал функции состояния, названный «энтропией»... приращение энтропии (при переходе из состояния A в состояние $B - A.L.$) $\Delta S = S_B - S_A$ не зависит от пути интегрирования. Т.о., из второго начала термодинамики следует, что существует однозначная функция состояния S , которая при квазистатических адиабатических процессах ($\delta Q=0$) остается постоянной... Энтропия адиабатически изолированной системы при необратимых процессах может только возрастать» [Зубарев б, с. 904].

«Согласно основным понятиям термодинамики, для всякой макроскопической системы можно ввести некоторую функцию состояния S – энтропию системы, которая обладает следующими свойствами...

$$dS = d_e S + d_i S, \quad (4.1)$$

где $d_e S$ – энтропия, поступающая в систему от окружающей среды, а $d_i S$ – энтропия, возникающая в самой системе. Второй закон термодинамики утверждает, что величина $d_i S$ должна быть равной нулю для обратимых (или равновесных) превращений и положительной для необратимых превращений системы: $d_i S \geq 0$.

Поступающая энтропия $d_e S$, напротив, может быть положительной, равной нулю или отрицательной в зависимости от рода взаимодействия системы с окружающей средой... Для адиабатической изолированной системы $d_e S = 0$, так что... $dS \geq 0$. Это – известная форма записи второго закона термодинамики. Для так называемых *замкнутых* систем, которые могут обмениваться с окружающей средой только тепловой энергией, мы имеем согласно теореме Карно – Клаузиуса, $d_e S = dQ/T$. Можно ввести энтропию на единицу массы s так, что $S = \int \rho s dV$.

К этому добавляется *гипотеза (постулат) о «локальном» равновесии*, утверждающая, что хотя полная система и не находится в равновесном состоянии, тем не менее в ней существуют малые элементы массы, которые находятся в состоянии «локального» равновесия и для которых локальная энтропия s является вполне определенной функцией параметров, необходимых для полного описания макроскопического состояния системы, т.е. $s = s(u, v, c_k)$ и к ней применима *формула Гиббса*, ведущая к выражению

$T ds/dt = du/dt + p dv/dt - \sum_{k=1}^n \mu_k dc_k/dt$, (где μ_k – соответствующий химический потенциал, u – плотность внутренней энергии в среде, v – удельный объем – А.Л.) [Гроот, с. 27-30].

«Для однокомпонентной изотропной жидкости эти уравнения (вытекающие из законов сохранения массы, импульса и энергии – А.Л.) в частных производных (в отсутствие внешних сил) таковы⁸:

$$\partial \rho / \partial t = -\operatorname{div} \rho \mathbf{v}, \quad (4.2)$$

$$\rho d\mathbf{v}/dt = -\operatorname{grad} p + \eta \Delta \mathbf{v} + (1/3\eta + \eta_v) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{v}, \quad (4.3)$$

$$\rho du/dt = \lambda \Delta T - p \operatorname{div} \mathbf{v} + 2\eta (\operatorname{Grad} \mathbf{v})^s : (\operatorname{Grad} \mathbf{v})^s + \eta_v (\operatorname{div} \mathbf{v})^2 \quad (4.4)$$

(раскрытие вида выражения, обозначенного как « $(\operatorname{Grad} \mathbf{v})^s : (\operatorname{Grad} \mathbf{v})^s$ » см. в [Гроот])... Коэффициенты η и η_v ... называются соответственно коэффициентами сдвиговой (первой) и объемной (второй) вязкости. Здесь принимается, что коэффициенты вязкости постоянны... λ ... называется коэффициентом теплопроводности и также считается постоянным. Символ Δ обозначает оператор Лапласа. К этим уравнениям необходимо добавить уравнения состояния

$$p = p(\rho, T), \quad (4.5)$$

$$u = u(\rho, T). \quad (4.6)$$

Уравнения (4.2)-(4.6) полностью описывают изменение во времени состояния однокомпонентной изотропной жидкости при заданных начальных и граничных условиях. Часто область применимости гидродинамического рассмотрения ограничивают только уравнениями (4.2), (4.3) и (4.5), принимая, что имеют место либо изотермические, либо изоэнтропические условия. В обоих случаях давление является функцией только плотности, так что гидродинамическое поведение системы полностью описывается уравнениями (4.2) и (4.3). В более общем случае для описания системы необходим полный набор уравнений (4.2)-(4.6)... В этих уравнениях содержится и теория теплопроводности. Уравнение (4.3) представляет собой из-

⁸ Выражения (4.2) – (4.6) соответствуют выражениям (4.62) – (4.66) в [Гроот].

вестное уравнение Навье-Стокса. Последние два члена в (4.4) дают диссипативную функцию Рэлея. Для среды, в которой скорость $\mathbf{v}$ равна нулю, уравнение (4.4) переходит в дифференциальное уравнение теплопроводности Фурье: $\rho c_v \partial T / \partial t = \lambda \Delta T$, где $c_v = (du/dT)$ – теплоемкость при пост объеме на единицу массы.

Для более общих случаев, например для многокомпонентной системы при наличии диффузии, система дифференциальных уравнений становится более сложной»⁹ [Гроот, с. 47-48].

Равновесную термодинамику – «науку о наиболее общих свойствах макроскопических систем, находящихся в состоянии термодинамического равновесия, и о процессах перехода между этими состояниями» [Элиашберг, с. 750] можно рассматривать как частный¹⁰ случай неравновесной, когда все параметры, характеризующие систему (сплошную среду) неизменны в пространстве и времени (точнее могут меняться, но очень медленно, квазистационарно). Здесь тоже речь идет об изменениях состояний системы, но это изменение связано с внешним воздействием, а не ходом времени.

Из приводимого подхода видно, что неравновесная и равновесная термодинамики являются не феноменологическими (как часто можно услышать), а (подобно гидродинамике) полноценными теориями с полноценной моделью сплошной среды. Статистическая (молекулярная) физика дает более полные модели лишь в области пересечения областей применимости обеих моделей.

Таким образом, гидро- и газодинамика являются подразделами так вводимой неравновесной термодинамики. В *теории упругости*, в соотнесении ее с гидродинамикой, место скорости занимает деформация (или тензор деформации), а место градиента давления – модули всестороннего сжатия и сдвига.

5. Электродинамики сплошных сред

Основания *электродинамики сплошных сред* (ЭСС) можно строить по-разному. Можно исходить из сплошной среды (жидкой или твердой) и ввести в ней дополнительно заряды и электромагнитное поле и учесть уравнения непрерывности для электромагнитной энергии и импульса, которые следуют из уравнений Максвелла (как это делается в Де Гроот, гл. XIII). Можно же исходить, как это обычно делается в курсах теоретической физики из электродинамики в вакууме. В последнем случае возможны две стратегии: максимально (как у Ландау) или минимально (как у Левича) использовать молекулярную модель среды. Нам представляется, что исходить из электродинамики в вакууме при минимизации и локализации использования молекулярной модели среды, является оптимальной стратегией при введении оснований ЭСС с точки логики построения оснований раздела физики.

Во всех случаях следует разбить все вещества на две противоположные группы – на проводники (в них под действием сколь угодно малого поля может возникнуть постоянный ток) и не проводники – диэлектрики (в них есть «связанные» заряды, которые могут смещаться лишь недалеко, поэтому здесь не может возникнуть постоянный ток в сколь угодно малом поле). Практическая граница между «плохими» проводниками и «плохими» диэлектриками не всегда четкая. Но нам важны базовые принципы, поэтому ограничимся крайними идеальными случаями, из которых выберем для анализа *диэлектрики*.

Интересующий нас вопрос можно сформулировать так: является ли ЭСС следствием (т.е. выводится из) электродинамики в вакууме и молекулярной модели вещества, или здесь, как и в случае взаимоотношений термодинамики и статистической физики ЭСС может формулироваться без обращения (жесткой привязки) к молекулярной структуре, а за «выводом» скрывается «принципе соответствия».

В [Тамм] (и [Левич]) прослеживается следующая логика: берутся величины из электродинамики в вакууме – напряженности электрического и магнитного полей ($\mathbf{e}$ и $\mathbf{h}$), плотность заряда (ρ), ток ($\rho \mathbf{v}$ – заряд, умноженный на его скорость)), им сопоставляются соот-

⁹ «Можно сказать, что задача неравновесной термодинамики состоит в исследовании различных необратимых процессов – теплопроводности, диффузии и вязкости с единой точки зрения».

¹⁰ Точнее предельный. Кроме того, понятия внутренней энергии и энтропии, как было сказано выше, вводятся в равновесной термодинамике и отсюда переносятся на неравновесную. В связи с этим, по крайней мере в классических изложениях, равновесную термодинамику и ее основания надо строить отдельно (см. [Липкин 2008]).

ветствующие средние (по пространству и времени) величины, относимые к среде, первые две из которых называются теперь напряженность поля E и магнитной индукцией B . Затем к ним добавляются характеризующие среду величины, отвечающие «связанному заряду» диэлектрической среды: дипольный момент единицы объема – поляризация P^{11} и магнитный момент единицы объема – намагниченность M , создаваемый движением в ограниченном объеме связанных зарядов диэлектрика.

Далее путем усреднения (по пространству и времени) максвелловских (Максвелла-Лоренца-Герца) уравнений электромагнитного поля в вакууме:

$$\operatorname{rot} \mathbf{e} = - (1/c) \partial \mathbf{h} / \partial t; \operatorname{div} \mathbf{h} = 0;$$

(2)

$$\operatorname{rot} \mathbf{h} = (1/c) \partial \mathbf{e} / \partial t + 4\pi \mathbf{j} / c; \operatorname{div} \mathbf{e} = 4\pi \rho,$$

используя введенные выше средние величины, переходят к уравнениям электромагнитного поля в диэлектрической среде [Тамм, с. 686, 687, 695]:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = - (1/c) \partial \mathbf{B} / \partial t; \operatorname{div} \mathbf{B} = 0;$$

(3)

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = (1/c) \partial \mathbf{D} / \partial t + 4\pi \mathbf{j} / c; \operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi \rho$$

Вводя простейшую линейную зависимость между величинами $P = \alpha E$, $M = \chi H^{12}$, получают простые соотношения¹³:

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (5.1)$$

где вместо P и M введены более простые характеристики среды в виде диэлектрической проницаемости $\varepsilon = (1 + 4\pi\alpha)$ и магнитной восприимчивости $\mu = (1 + 4\pi\chi)$. Через эти величины, которые в анизотропной среде являются тензорными величинами, входит зависимость от термодинамического состояния вещества (свойства среды полностью характеризуются векторами P и M).

Особого обсуждения заслуживают процедуры измерения характеристик поля. Рассмотрим диэлектрическую среду¹⁴. Следуя структуре, характерной для модели сплошной среды и электродинамики в вакууме, используем для измерения величин E и B , характеризующих состояние электромагнитного поля в среде¹⁵ макроскопические пробные заряды, помещая их в соответствующие «макроскопические точки» среды (т.е. их размеры малы по сравнению с размерами системы, но велики, по сравнению с молекулярной микроструктурой). Если это пробное тело организовать в виде сферической полости с зарядом внутри, то измеряемое этим зарядом поле будет¹⁶ $E_1 = E + (4/3)\pi P$. Благодаря тому, что в это выражение не входят размеры «пробного тела», мы получаем нормальную процедуру измерения поля E , в которой «вакуумное значение» E_1 требуется умножить на коэффициент $3/(2+\varepsilon)$: $E = E_1 \cdot 3/(2+\varepsilon)^{17}$. В том, что измерение оказывается «теоретически нагруженным» ничего страшного нет, поскольку, как было сказано выше, все, входящие в структуру (1.2) элементы, включая операции приготовления, задаются, в общем слу-

¹¹ Важным является свойство: «в первом приближении любая, в целом нейтральная система зарядов, электрический момент которой равен $\mathbf{p}$, эквивалентна диполью того же момента $\mathbf{p}$ как в активном, так и в пассивном отношении (т.е. как в отношении возмущаемого ею поля, так и в отношении испытываемых ею сил)» [Тамм, с. 100].

¹² Здесь α – поляризуемость диэлектрика, χ – магнитная восприимчивость

¹³ Согласно методологическому «принципу простоты».

¹⁴ Аналогичный анализ надо провести и относительно измерения магнитной индукции.

¹⁵ В силу линейной зависимости соответствующих величин то, какую пару величин из E , D , B , H выбрать для характеристики состояния электромагнитного поля в среде является вопросом удобства.

¹⁶ Поле внутри полости – это искомое поле E за вычетом поля вырезанного поляризованного шара [Тамм, с. 127, 114-115].

¹⁷ Это связано с тем, что в диэлектрической сплошной среде полость, занимаемая «пробным телом» («пробный зарядом»), сколь бы малым оно ни было, искажает действующее поле. Но поскольку это искажение зависит от формы полости, но не от ее размера, то это искажение сводится к постоянному коэффициенту (зависящему от формы полости).

чае, не по отдельности, а совместно посредством неявного определения в рамках соответствующего «ядра раздела физики», составляющего основания данного раздела.

Отметим, что в указанной процедуре перехода от электродинамики в вакууме к электродинамике сплошных сред *по сути, не вводится (не используется) молекулярная модель вещества*¹⁸, т.е. неважно как распределен «связный заряд» дискретно или непрерывно.

Представим теперь диэлектрическую среду в виде молекулярной (многочастичной) системы, т.е. подойдем к ней со стороны электродинамики в вакууме и статистической физики (т.е. модели типа рассмотренной в [Липкин 2008]). Тогда мы увидим, что значения макроскопического поля $\mathbf{E}$ (или $\mathbf{D}$), о котором шла речь выше, отличаются, вообще говоря, от описываемого формулами типа Лоренц-Лорентца значения «микроскопического» поля Лоренца, действующего на отдельные молекулы и атомы, [Тамм, §28. Отличие действующего на диполь поля от среднего]. То же можно сказать и про многомoleкулярный малый, но макроскопический фрагмент: действующее на него поле будет отлично от среднего. Учет молекулярной структуры вещества в рамках статистической физики может приводить к специфическим добавкам к среднему полю, зависящим от молекулярной структуры (см., например, [Джепаров] для случая спинов).

Из изложенного выше видно, что ЭСС вытекает из электродинамики в вакууме, и этот вывод основывается на вполне естественных предположениях о наличии дипольного и магнитного моментов единицы объема среды ($\mathbf{P}$ и $\mathbf{M}$) и их пропорциональности соответствующим полям. Никаких дополнительных постулатов здесь не вводится. То есть здесь мы имеем случай, когда новый раздел физики получается путем строгого вывода из старого. Впрочем, выход за пределы простого вывода, по-видимому, возникает при рассмотрении достаточно сложных сред, где провести точное усреднение на молекулярном уровне не удастся (трудности возникают уже в любой конденсированной среде, если там отсутствует малый параметр, с помощью которого поле отдельной молекулы или атома заменяют полем эквивалентного диполя [Тамм, с. 129, 99]). Тогда указанный «вывод» превращается в «принципа соответствия» (впрочем, строгий вывод можно рассматривать как предельный случай «принципа соответствия»). В этом плане соотношение электродинамики и ЭСС напоминает соотношение статистической физики и термодинамики.

6. Волны

Теперь несколько слов о дочерней по отношению к модели сплошной среды – модели волны. Наиболее важные и часто встречающиеся виды волн – упругие волны (в том числе звуковые), волны на поверхности жидкости и электромагнитные волны. Волны – это изменения состояния среды (возмущения), распространяющиеся в этой среде и несущие с собой энергию¹⁹. Т.е. некий тип состояний среды представляется в виде стационарного состояния (типа гладкой поверхности воды) и особого типа нестационарной добавки (чаще всего колебательного характера), называемой волной, которая возникает во многих средах в результате локального возмущения стационарного состояния (типа брошенного в воду камня).

Но, с другой стороны, волны могут рассматриваться как физические системы. Причем, так же как различные механические системы собираются из частиц, так волны (это может быть одиночный импульс, пук, состоящий из нескольких импульсов и т.д.) собираются из простейших, так называемых, «гармонических» или синусоидальных волн. Все прочие волны можно представить в виде суммы синусоидальных волн. При этом линейные волны подчиняются принципу суперпозиции, т.е. они распространяются независимо друг от друга. Таким образом «гармонические» или синусоидальные волны играют здесь роль ПИО, которые характеризуются частотой (подобно тому, как механические частицы характеризуются массой). Направление распространения гармонической волны, ее амплитуда, начальная фаза, поляризация – характеризуют ее состояние.

¹⁸ В предлагаемом изложении эффекты молекулярного уровня в виде поля Лоренца, вокруг которого сломано немало копий, вытеснены в процедуры измерения, где от них здесь избавляются, вводя сферическую форму для пробного тела.

¹⁹ Характерное свойство волн, независимо от их природы, состоит в том, что в волне осуществляется перенос энергии без переноса вещества (последний может иметь место лишь как побочное явление).

Они меняются под действием затухания, фильтров, поляризаторов, фазовых пластин, зеркал и т.п., выступающих в роли внешних воздействий («сил»). Вообще говоря, волны имеют передний и задний фронты (начало и конец, расстояние между которыми определяет еще один важный параметр волны – ее «длину когерентности») и могут представлять из себя и весьма компактные образования (волновые пакеты). То есть волна представляет собой протяженный, но локальный (ограниченный) объект, движущийся в пространстве.

Поэтому многое в их поведении напоминает поведение частиц. Не случайно в течение долгого времени конкурировали волновая и корпускулярная модели распространения света. Тем не менее исходно они выступают как альтернативные модели. Специфические свойства волн, характеризующие их распространение как принципиально отличное от движения частиц, – свойства интерференции (термин, введенный Томасом Юнгом в 1803 г.) и дифракции (явление огибания тела волной, из-за чего предсказываемые геометрической оптикой резкие тени размываются). Эти свойства отличают поведение волн от поведения потока частиц, описываемого законами геометрической оптики.

Таким образом волны представляют собой дочернюю, но самостоятельную модель, тоже архетипическую, поскольку она используется в разных разделах физики.

7. Заключение

Таким образом, все перечисленное выше множество разделов физики опирается на архетипическую модель сплошной (непрерывной, континуальной) среды. Сплошные среды описываются общей для всех разделов схемой (1.2), соответственно главными понятиями здесь тоже являются понятия физической системы (сплошной среды) и ее состояний. Отличие сплошных сред друг от друга определяется набором измеримых величин, характеризующих их состояние, рядом параметров, которые характеризуют саму среду и уравнениями движения, задающих поведение этих сред. Описание оснований соответствующих разделов физики по единой с механикой частиц схеме (1.2) облегчает работу по освоению этих разделов, поскольку указывает на те 6-7 вопросов, на которые надо иметь ответы, чтобы понять основания того или иного раздела физики. Последнее позволяет чувствовать себя более свободно при работе в данных весьма сложных разделах и свободнее строить соответствующие модели (ВИО)²⁰.

Возникает вопрос о связи модели сплошной среды и локальной (точечной) частицы. Как мы видели, ЯРФ разделов сплошной среды по сути не используют ни молекулярную модель²¹, ни механику Ньютона²². Но у них есть ряд общих понятий. Во-первых, это вводимое в классической механике понятие массы, которое присутствует здесь в виде плотности. Во-вторых, законы сохранения массы, импульса, энергии. Естественно, что здесь соблюдается и принцип

²⁰ В качестве примера (иллюстрации) сошлюсь на работу в области акустики магнитных жидкостей [Липкин А.И. Акустические свойства магнитных жидкостей с агрегатами // Магнитная гидродинамика. – 1985. – № 3. – С. 25-30], которая следовала этому методу, в противоположность работам В.В. Гогосова и др. [Гогосов В.В., Налетова В.А., Шапошникова Г.А. Гидродинамика намагничивающихся жидкостей // Итоги науки и техник. Механика жидкости и газа. – М., 1981. – Т. 16. – С. 76-208]. Авторы последней, следуя рекомендациям академика Л.И. Седова, начинали с построения максимально общей, но труднообозримой системы уравнений гидродинамики, содержащей довольно много свободных параметров [6]. В результате физический смысл терялся вплоть до получения результатов, противоречивших закону сохранения энергии. В первой же работе, опираясь на изложенную выше структуру, идя от оснований МСС была построена модель магнитной жидкости, из которой непосредственно следовали ее акустические свойства.

²¹ Молекулярная модель при таком изложении вытеснена (локализована) в вопрос об уравнении состоянии среды, которое замыкает систему уравнений для сплошной среды. Уравнение состояния, где можно, выводится из молекулярной физики, но часто этого сделать нельзя и оно берется феноменологически из опыта, без обращения к молекулярной модели. Естественно, что модель сплошной среды не вездесуща. Например, сейчас в рамках нанотехнологий вводятся среды, для которых применение этой модели требует особого обсуждения.

²² Хотя третий закон Ньютона используется при введении понятия давления.

соответствия. Разделы механики сплошных сред являются самостоятельными разделами физики, со своими понятиями, вводимыми независимо от механики Ньютона. Но через понятие плотности устанавливается принцип соответствия между гидро- и газодинамикой, с одной стороны, и механикой Ньютона – с другой. Последняя использовалась Эйлером при создании гидродинамики идеальной жидкости, но это не обязательно, в современном изложении, как и в гидродинамике Бернулли, механика Ньютона непосредственно не задействуется. Принцип соответствия приводит к своеобразной кумулятивности разделов физики: там где области их применимости пересекаются вводится критерий сравнимости, позволяющий говорить, что один тип моделей (например статистической (молекулярной) физики или теории относительности) дает более точное описание явлений, чем другой (соответственно термодинамика и классическая физика). Но есть области вне этого пересечения, где применимы только модели одного типа (статистическая физика работает с моделями на базе слабонеидеального газа, и ряда частных случаев типа модели Изинга или гейзенберговских магнетиков, а спектр применимости термодинамики значительно шире (она малочувствительна к внутренней структуре вещества, вытесняя этот вопрос в вопрос об уравнении состояния (см. сноску 22)).

Литература

1. Гроот С.Де, Мазур П. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1964.
2. Джепаров Ф.С., Хеннер Е.К. О сдвиге частоты магнитного резонанса в магниторазбавленной спиновой системе при низких температурах // Физика твердого тела. – 1986. Т. 28. – Вып. 7. – С. 2180-2182.
3. Зубарев Д.Н. Термодинамика неравновесных процессов. Физический энциклопедический словарь. – М., 1983. – С. 752-754 (или Большая Советская энциклопедия (3-е изд. – М., 1976. – Т. 25. – С. 482-483).
4. Зубарев Д.Н. Энтропия. Физический энциклопедический словарь. – М., 1983. – С. 903-904.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. – М., 1982.
6. Левич В.Г. Теоретическая физика. – М., 1969. – Т. 1.
7. Липкин А.И. Основания современного естествознания. Модельный взгляд на физику, синергетику, химию. – М.: Вузовская книга, 2001.
8. Липкин А.И. () Квантовая механика как раздел теоретической физики. Формулировка системы исходных понятий и постулатов // Актуальные вопросы современного естествознания. Вып. 3. – 2005. – С. 31-43.
9. Липкин А.И. Философия науки. – М., 2007.
10. Липкин А.И. Основания статистической физики и кинетики и их связь с классической механикой // Актуальные вопросы современного естествознания. Вып. 6. – 2008. – С. 103-112.
11. Тамм И.Е. Основы теории электричества. – М., 2003.
12. Элиашберг Г.М. Термодинамика. Физический энциклопедический словарь. – М., 1983. – С. 750-752.
13. Laudan L. A confutation of convergent realism // Philosophy of Science. – 1981. – № 48. – P. 19-49.
14. Worrall J. Structural realism: The best of both worlds? // Dialectica. – 1989. – № 43. – P. 99-124.

THE ARCHETYPE OF MODEL OF A CONTINUOUS MEDIUM AND ITS INCARNATION IN VARIOUS SECTIONS OF PHYSICS (THERMODYNAMICS, CONTINUUM MECHANICS, ELECTRODYNAMICS)

A.I. Lipkin

Moscow institute of Physics & Tecnology (State University)

The common structure of the basis of physics surveyed. The special attention is given to hydrodynamics of the Euler, common scheme dynamics of a continuous medium and electromagnetic field in vacuum as to variant of a continuous medium. The nonequilibrium thermodynamics is considered as a primogenitor the dynamics of continuous mediums.

СОДЕРЖАНИЕ*А.А. Дышеков*

Нестандартная теория рассеяния рентгеновских лучей – 3

*А.П. Шпак, М.В. Ковальчук, В.Б. Молодкин, В.Л. Носик,**С.В. Дмитриев, А.И. Низкова, Я.В. Василик*

Интегральная многопараметрическая диффузнодинамическая комбинированная дифрактометрия наносистем – 21

Т.И. Шустова, А.Ю. Юрков, А.М. Вандышев

Современные представления об иннервации среднего и внутреннего уха человека – 59

А.И. Липкин

Архетип модели сплошной среды и его воплощение в различных разделах физики (термодинамике, механике сплошных сред, электродинамике) – 71

CONTENTS*A.A. Dyshekov*

The non-standard theory of x-ray scattering in crystals – 3

*A.P. Shpak, M.V. Kovalchuk, V.B. Molodkin, V.L. Nosik,**S.V. Dmitriev, A.I. Nizkova, Ya.V. Vasilik*

Integral many-parametric diffuse-dynamical combined diffractometry of nanosystems – 21

T.I. Shustova, A.Yu. Yurkov, A.M. Vandyshev

Updated presentation about innervation of human middle and internal ear – 59

A.I. Lipkin

The Archetype Of Model Of A Continuous Medium And Its Incarnation In Various Sections Of Physics (Thermodynamics, Continuum Mechanics, Electrodynamics) – 69

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Редакция просит авторов руководствоваться изложенными ниже правилами

1. Статья, предоставленная для публикации, должна иметь направление экспертное заключение от учреждения, в котором выполнена работа.
2. Рукопись должна быть отпечатана на компьютере или машинке (размер шрифта – 12 кегль) через два машинописных интервала (полуторный межстрочный интервал в редакторе Word), на белой бумаге формата А4 (297х210 мм) с одной стороны листа, левое поле – 25 мм. Все листы в статье должны быть пронумерованы.
3. Статья должна быть подписана авторами и представлена в двух экземплярах.
4. Рисунки, таблицы и фотографии в текст рукописи не размещаются, а прилагаются на отдельных листах в конце статьи.
5. Начало статьи оформляется по образцу: индекс статьи по универсальной десятичной классификации (УДК), название, авторы, полное название учреждений, в которых выполнялось исследование, краткая аннотация (объем – не более половины страницы), текст статьи. Далее на отдельных листах:
 - список литературы,
 - таблицы,
 - рисунки,
 - подписи к рисункам,
 - на английском языке: название, авторы, полное название учреждений, в которых выполнялось исследование, краткая аннотация,
 - адреса для переписки, телефоны, fax, e-mail.
6. В статье должны использоваться единицы и обозначения в международной системе единиц СИ и относительные атомные массы элементов по шкале ^{12}C . В расчетных работах необходимо указывать авторов используемых программ. При названии различных соединений необходимо использовать терминологию ИЮПАК.
7. Все сокращения должны быть расшифрованы, за исключением небольшого числа общепотребительных.
8. При упоминании в тексте иностранных фамилий в скобках необходимо давать их оригинальное написание, за исключением общеизвестных, а также в случае, если на эти фамилии даются ссылки в списке литературы.
9. При упоминании иностранных учебных заведений, фирм, фирменных продуктов и т.д. в скобках должны быть даны их названия в оригинальном написании.
10. Оформление формул должно соответствовать следующим требованиям.
 - a. Все формулы и буквенные обозначения должны быть напечатаны на компьютере, или впечатаны на машинке с латинским шрифтом, или вписаны от руки черными чернилами, с четкой разметкой всех особенностей текста (индексов, полужирного и курсивного начертаний и т.д.).
 - b. При разметке формул необходимо прописные и строчные буквы всех алфавитов, имеющих одинаковое начертание (P, S) подчеркивать простым карандашом: большие – двумя чертами снизу, маленькие – двумя чертами сверху.
 - c. Показатели степени и индексы выделять простым карандашом дугой: верхние – снизу, нижние – сверху.
 - d. Для полужирных символов (векторов) использовать подчеркивание синим карандашом.
11. Таблицы нумеруются по порядку упоминания их в тексте арабскими цифрами. После номера должно следовать название таблицы. Все графы в таблицах и сами таблицы должны иметь заголовки.

12. Рисунки предоставляются размером не менее 5х6 см и не более 17х24 см, с указанием низа и верха. Рисунки должны быть выполнены на белой бумаге черной тушью или распечатаны на лазерном или струйном принтере качеством не менее 300 dpi. Использовать другие цвета кроме черного не допускается.
13. Фотографии предоставляются на не тисненной глянцевой бумаге размером не более 9х12 см.
14. На обратной стороне рисунков и фотографий указывают фамилию первого автора, порядковый номер, верх, низ.
15. В тексте необходимо дать ссылки на все приводимые рисунки и таблицы, на полях рукописи слева должно быть отмечено, где приводимый рисунок или таблица встречаются впервые.

Требования к рукописям, предоставляемым в электронном виде.

1. В целях сокращения сроков подготовки материалов к публикации желательно предоставление материалов в электронном виде. Электронная версия материалов сдается в дополнение к бумажной и должна быть максимально ей идентична.
2. Электронная версия предоставляется электронной почтой (avse@kbsu.ru), или на 3,5» дискетах, форматированных для IBM PC, либо на CD- или DVD-дисках. На диске должны быть обозначены имена файлов, название статьи и фамилия и инициалы автора(ов).
3. Основной текст статьи и таблицы предоставляются в формате MS Word for Windows (версии 6.0 и старше). Шрифт – Times New Roman, 12 кегль. Строки в пределах абзаца не должны разделяться тем же символом, что и абзацы.
4. Формулы, если это необходимо, должны быть набраны в формате MS Equation. Как в тексте, так и в MS Equation следует соблюдать следующие стили и размеры:
 - a. Стил: текст, функция, числа – Times New Roman Обычный, переменная – Times New Roman Наклонный (Курсив), матрица-вектор Times New Roman Полужирный, греческие и символы – Symbol Обычный.
 - b. Размер: обычный, мелкий символ – 12 пт, крупный индекс – 8 пт, мелкий индекс – 6 пт, крупный символ – 18 пт.
 - c. Формат–интервал: высота/глубина индексов – 30 %, все остальное – по умолчанию.
 - d. В числах следует использовать десятичную запятую, а не точку.
5. Штриховые и полутоновые иллюстрации должны быть представлены в форматах TIFF, JPEG, GIF с разрешением не менее 300 dpi. Цветовая палитра: grayscale. Каждый графический файл должен содержать один рисунок.
6. Допускается сжатие графических файлов архиваторами WinRAR или WinZIP. Каждый файл должен быть помещен в отдельный архив.

НАУЧНОЕ ИЗДАНИЕ

**АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ
СОВРЕМЕННОГО ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ**

В печать 11.12.2009. Формат 60х84 ¹/₈.
Печать трафаретная. Бумага газетная. 10.23 усл.п.л. 10.0 уч.-изд.л
Тираж 1001 экз. Заказ № 5915.
Кабардино-Балкарский государственный университет.
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

Полиграфический участок ИПЦ КБГУ.
360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.