«…но все-таки это довольно специальная область исследования, интересоваться которой совершенно не обязательно всякому»
А.Н. Колмогоров

Фундаментальная система уравнений для импульса и энергии электромагнитного поля в неоднородной среде

Введение

В данном работе предлагается альтернативный подход к описанию электромагнитного поля в веществе. Все рассуждения носят достаточно общий характер, однако, учитывая профессиональные интересы автора, с акцентом на рентгеновский диапазон.

В уравнениях Максвелла присутствуют напряженности электрического и магнитного полей и, если дело идет о веществе, соответствующих индукций. Все известные подходы для описания волновых полей основываются так или иначе на решении или анализе уравнений Максвелла именно по отношению к напряженностям полей [1-4]. Однако непосредственно в эксперименте (а ведь мы хотим соответствия с экспериментом!) напряженности полей не измеряются по очевидным причинам (например, частота волны в рентгеновском диапазоне порядка 10^{18} Гц). А что же мы измеряем в эксперименте? На этот вопрос имеется следующий ответ. В эксперименте измеряется энергетическая характеристика волны (интенсивность), а направление распространения волны (вектор Умова-Пойнтинга) связывается с импульсом волны. Соответствие с экспериментом достигается посредством вычисления этих характеристик через напряженности полей. Например, чтобы найти коэффициент отражения волны от среды, необходимо вычислить нормальную по отношению к поверхности компоненту вектора Пойнтинга.

Импульс и энергия (точнее, их плотности) нелинейны (квадратичны) по полям. Вследствие этого их нельзя непосредственно представить как суперпозицию получаемых решений для полей. Ответ находится лишь в окончательной стадии, когда уже получены решения для полей. С одной стороны, это несомненный плюс (решать линейные уравнения гораздо приятней, нежели нелинейные). С другой стороны, при такой процедуре оказывается затруднительным (а может, и вообще невозможным) прямой анализ зависимости наблюдаемых параметров (распределение интенсивности в заданном направлении в пространстве) от характеристик рассеивающего объекта.

Приведем простой пример. Простейшая модельная система эпитаксиальная пленка-подложка в условиях динамической рентгеновской дифракции может давать разнообразные профили кривых дифракционного отражения в зависимости от величины рассогласования решеток (точнее, деформации) – от единичного профиля (искаженный влиянием пленки брэгговский максимум) до вполне оформленных дифракционных максимумов, ассоциирующихся с дифракцией от пленки и от подложки. Ясно, что такое разнообразие возникает вследствие интерференции полей в пленке и подложке. При этом естественно возникает вопрос: если максимумы разрешаются, то какой деформации решетки соответствует их угловое положение? Понятно, что если максимумы сравнительно далеко друг от друга, то угловому расстоянию между ними как будто соответствует средняя деформация пленки. А если максимумы близко и интерференцией нельзя пренебречь?

Второй пример. Как известно вторичные процессы в условиях динамической рентгеновской дифракции определяются интенсивностью дифракционной волны в кристалле. Здесь опять-таки возникает большое разнообразие форм кривых выхода фотоэлектронов в зависимости от структурных характеристик кристалла. Эти кривые моделируются с помощью решений динамических уравнений для полей. И здесь мы имеем неявную зависимость экспериментальных характеристик от параметров рассеяния.

Тогда возникает вопрос. А можно ли так изначально переформулировать задачу, чтобы описывать поля с помощью только непосредственно измеряемых характеристик – плотностей импульса и энергии? Иначе говоря, можно ли описать взаимодействие поля и вещества посредством плотностей энергии и импульса в соответствии с уравнениями движения электромагнитного поля. При этом достаточно ли только энергии и импульса для полного описания динамики или же необходимы также амплитуды полей.

Как известно, уравнения движения динамической системы (уравнения Эйлера-Лагранжа) получаются из вариационного принципа как условие экстремальности некоторого функционала действия. Этот принцип справедлив как для механических систем, так и для систем с бесконечным числом степеней свободы – полей. При этом инвариантность действия относительно определенной группы преобразований координат (внешние симметрии) или калибровочных преобразований (внутренние симметрии) приводит к ковариантным уравнениям движения и к фундаментальным законам сохранения.

Законы сохранения следуют из двух теорем Нётер [5-7] (прямых и обратных), которые формулируются соответственно, для глобальных и локальных преобразований симметрии функционала действия. Смысл первой теоремы Нётер сводится к следующему. Если действие инвариантно относительно преобразований глобальных симметрии, образующих некоторую группу Ли [7], то для каждого преобразования симметрии и любого решения уравнений Эйлера–Лагранжа сохраняются величины, называемые токами. Сохранение тока означает, что его 4-дивергенция обращается в ноль. Глобальная инвариантность означает, что параметр преобразования не зависит от точек пространства-времени. В свою очередь интегрирование токов по специально выбранным областям пространства-времени дает соответствующие каждому току сохраняющиеся заряды.

Пусть действие инвариантно относительно трансляций в пространстве-времени. Тогда общее выражение для тока переходит в выражение для тензора энергии-импульса для полей, 4-дивергенция которого в силу первой теоремы

Нётер обращается в ноль. Именно 4-дивергенция тензора энергии-импульса дает описание электромагнитного поля как динамической системы.

Вторая теорема Нётер устанавливает связь между экстремалями (левыми частями уравнения Эйлера-Лагранжа) и производными от экстремалей в случае, если функционал действия инвариантен относительно локальных (калибровочных) преобразований. Согласно второй теореме Нётер, из калибровочной инвариантности следует, что не все уравнения движения являются линейно независимыми. Таким образом, локальная инвариантность функционала действия не влечет за собой новые законы сохранения, а лишь ограничивает число линейно независимых уравнений движения.

Отметим, что первая теорема Нётер формулируется для инфинитезимальных (бесконечно малых) трансляций пространства-времени. Группа Ли в формулировке первой теоремы Нётер [6] непосредственно связана с непрерывностью пространственно-временных симметрий. Это обстоятельство в данном случае имеет решающее значение.

Поскольку длина рентгеновской волны сравнима с атомарными размерами, известная в макроскопической электродинамике процедура усреднения оказывается неприменимой, и диэлектрическая проницаемость оказывается функцией координат. Тогда, разумеется, непрерывность трансляций в атомарных масштабах несовместима с условием однородности среды. Лишь в частном случае кристаллической среды обеспечивается инвариантность функционала действия, причем лишь по отношению к дискретной, а не непрерывной группе пространственных трансляций на вектора решетки Бравэ. Тем самым непосредственное применение первой теоремы Нётер для построения тензора энергии-импульса как динамической основы теории с учетом микроскопической структуры среды оказывается невозможным.

Законы изменения импульса и энергии поля

Здесь мы будем развивать другой подход, возможно менее общий и более элементарный в математическом отношении, однако позволяющий получить интересующие нас соотношения непосредственно из уравнений классической макроскопической электродинамики.

Будем исходить из пары уравнений Максвелла для поля в отсутствие зарядов и токов в среде:

$$\begin{gathered}\nabla\times\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial t}\\ \nabla\times\mathbf{H}=\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t}\end{gathered}\,. \tag{1}$$

Примем во внимание, что в материальном уравнении для среды диэлектрическая проницаемость (поляризуемость), в отличие от обычной макроскопической теории диэлектриков, оказывается непрерывной функцией координат:

$$\mathbf{D}=\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}=(1+\chi(\mathbf{r}))\mathbf{E}. \tag{2}$$

Такое представление естественно для случая рентгеновских волн. Однако взаимодействие электромагнитных волн со средой и в других диапазонах может описываться формулой (2). Например, искусственные периодические структуры – фотонные кристаллы [8], объекты рентгеновской оптики для мягкого рентгена [9] также формально соответствуют (2), поскольку рассевающие излучение элементы образуют некоторую пространственную структуру.

В формулах (1), (2) и далее используются стандартные обозначения, $\nabla=\mathbf{i}_k\dfrac{\partial}{\partial x_k}$ – оператор Гамильтона в некотором декартовом базисе $\mathbf{i}_k$, по немому индексу k производится суммирование (соглашение Эйнштейна).

Для случая рентгеновского диапазона уравнение (2) представляет собой феноменологическое описание процесса взаимодействия рентгеновского волнового поля со средой при известных физических предположениях относительно характера рассеяния. Эти предположения являются физической основой динамической теории рентгеновской дифракции Эвальда-Лауэ и последующих вариантов ее обобщения [2-4]. Разумеется, для идеального кристалла поляризуемость $\chi(\mathbf{r})$ представляет собой трехмерно-периодическую функцию.

Приведем обобщение на случай $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$ известного в электродинамике вывода закона изменения импульса. Рассмотрим величину $(\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{D}$ в некотором ортонормированном декартовом базисе $\mathbf{i}_m$, пока не конкретизируя его:

$$(\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{D} = \begin{vmatrix} \mathbf{i}_1 & \mathbf{i}_2 & \mathbf{i}_3 \\ ((\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{D})_1 & ((\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{D})_2 & ((\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{D})_3 \\ D_1 & D_2 & D_3 \end{vmatrix}.$$

Раскрывая детерминант и группируя члены, получим:

$$\begin{gathered} (\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{D} = \nabla \cdot (\mathbf{DE}) - \frac{1}{2} \nabla \cdot (\mathbf{I} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{E})) + \frac{E^2}{2} \nabla \varepsilon - \mathbf{E} \cdot (\nabla \cdot \mathbf{D}) = \\ \nabla \cdot (\mathbf{DE}) - \frac{1}{2} \nabla \cdot (\mathbf{I} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{E})) + \frac{E^2}{2} \nabla \varepsilon. \end{gathered} \qquad (3)$$

Аналогично найдем величину $(\nabla \times \mathbf{H}) \times \mathbf{H}$:

$$\begin{gathered} (\nabla \times \mathbf{H}) \times \mathbf{H} = \nabla \cdot (\mathbf{HH}) - \frac{1}{2} \nabla \cdot (\mathbf{I} \cdot H^2) - \mathbf{H}(\nabla \cdot \mathbf{H}) = \\ \nabla \cdot (\mathbf{HH}) - \frac{1}{2} \nabla \cdot (\mathbf{I} \cdot H^2). \end{gathered} \qquad (4)$$

В (3) и (4) введены величины $\mathbf{DE} = \mathrm{D}_i\mathrm{E}_j$; $\mathbf{HH} = \mathrm{H}_i\mathrm{H}_j$, представляющие собой диады (внешние произведения), а также единичный тензор $\mathbf{I} = \mathbf{i}_m \mathbf{i}_m$. В дальнейшем выражение вида **ab** будет означать внешнее произведение векторов **a** и **b**. При выводе (3) и (4) учтено, что в отсутствие зарядов $(\nabla \cdot \mathbf{D}) = 0$, а также $(\nabla \cdot \mathbf{H}) = 0$ согласно уравнению Максвелла. Отметим, что в силу инвариантности оператора ∇ формулы (3) и (4) справедливы в любом базисе.

Теперь образуем сумму (3) и (4) и, с учетом (1), после ряда преобразований получим

$$\begin{gathered} (\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{D} + (\nabla \times \mathbf{H}) \times \mathbf{H} = \\ \nabla \cdot \left(\mathbf{DE} + \mathbf{HH} - \frac{1}{2} \mathbf{I} \cdot (\mathbf{D} \cdot \mathbf{E} + H^2) \right) + \frac{E^2}{2} \nabla \varepsilon = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{D} \times \mathbf{H}) \end{gathered}$$

Представим это уравнение в виде

$$\nabla \cdot \mathbf{T} + \frac{E^2}{2}\nabla\varepsilon = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \; . \tag{5}$$

Здесь введены следующие величины: тензор натяжений (напряжений) Максвелла в среде **T**

$$\mathbf{T} = \mathbf{DE} + \mathbf{HH} - \frac{1}{2}\mathbf{I}\cdot(\mathbf{D}\cdot\mathbf{E} + H^2) = \mathbf{DE} + \mathbf{HH} - w\mathbf{I}\,, \tag{6}$$

плотность энергии

$$w = \frac{1}{2}(\mathbf{D}\cdot\mathbf{E} + H^2), \tag{7}$$

а также объемная плотность полного импульса поля $\mathbf{P} = \frac{1}{c}(\mathbf{D}\times\mathbf{H})$ (кратко будем называть ее импульсом). Как видно из (5), изменение импульса поля связано в общем случае не только с тензором Максвелла, но также зависит от градиента диэлектрической проницаемости $\nabla\varepsilon$. Согласно (6) с учетом (2) тензор **T** оказывается симметричным.

Теперь образуем выражение $\mathbf{H}\cdot(\nabla\times\mathbf{E}) - \mathbf{E}\cdot(\nabla\times\mathbf{H})$ и с помощью (1) найдем:

$$\nabla\cdot(\mathbf{E}\times\mathbf{H}) = \mathbf{H}\cdot(\nabla\times\mathbf{E}) - \mathbf{E}\cdot(\nabla\times\mathbf{H}) = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{H}\cdot\mathbf{H} + \mathbf{D}\cdot\mathbf{E}) = -\frac{1}{c}\frac{\partial w}{\partial t} \tag{8}$$

Найдем дивергенцию $c\mathbf{P}$:

$$c(\nabla\cdot\mathbf{P}) = \nabla\cdot(\mathbf{D}\times\mathbf{H}) = \nabla\cdot(\varepsilon(\mathbf{E}\times\mathbf{H})) = \varepsilon\nabla\cdot(\mathbf{E}\times\mathbf{H}) + \nabla\varepsilon\cdot(\mathbf{E}\times\mathbf{H}) =$$
$$\varepsilon\nabla\cdot(\mathbf{E}\times\mathbf{H}) + \frac{\nabla\varepsilon}{\varepsilon}\cdot(\mathbf{D}\times\mathbf{H})$$

Отсюда

$$\nabla\cdot(\mathbf{E}\times\mathbf{H}) = \frac{1}{\varepsilon}(\nabla\cdot(\mathbf{D}\times\mathbf{H}) - \frac{\nabla\varepsilon}{\varepsilon^2}\cdot(\mathbf{D}\times\mathbf{H})) \tag{9}$$

Подставляя (9) в (8), имеем

$$\nabla\cdot\mathbf{P} - \frac{\nabla\varepsilon}{\varepsilon}\cdot\mathbf{P} = -\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial w}{\partial t} \tag{10}$$

Канонический вид тензора Максвелла и условия для полей

Уравнения (5) и (10) образуют основную систему для импульса и энергии поля. Они представляют собой, соответственно, законы изменения импульса и энергии электромагнитного поля в случае $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$. Однако система (5), (10) в общем случае оказывается незамкнутой относительно w и $\mathbf{P}$, поскольку в тензор $\mathbf{T}$ входят диады $\mathbf{DE}$ и $\mathbf{HH}$. Кроме того, изменение импульса, согласно (5), зависит от амплитуды электрического поля через $\frac{E^2}{2}$. Выясним, с чем это связано, и попытаемся замкнуть систему.

При выводе уравнений (5) и (10) мы пользовались произвольным декартовым базисом, никак не связанным с электромагнитным полем. Однако очевидно вид тензора Максвелла $\mathbf{T}$ зависит от выбора базиса в соответствии с трансформационными свойствами тензора второго ранга. Это обстоятельство позволяет предположить, что динамический характер тензора $\mathbf{T}$ связан с некоторыми выделенными направлениями в пространстве, и эти направления определяются векторами $\mathbf{D}$, $\mathbf{H}$ и $\mathbf{P}$. Покажем, что это действительно так.

Наиболее простой (канонический) вид тензор $\mathbf{T}$ имеет в базисе, построенном на собственных векторах. Поскольку тензор T симметричный, его канонический вид представляет собой диагональный тензор.

Определим канонический вид тензора Максвелла (6). Для этого найдем собственные значения λ_j и собственные векторы $\mathbf{e}_j$ тензора $\mathbf{T}$ в нормированном базисе, удовлетворяющие известному уравнению:

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{e}_j = \lambda \mathbf{e}_j \quad . \tag{11}$$

Характеристическое уравнение имеет вид

$$\det(\mathbf{T} - \lambda \mathbf{I}) = -\lambda^3 + I_1 \lambda^2 - I_2 \lambda + I_3 = 0,$$

где величины I_j – главные инварианты тензора $\mathbf{T}$:

$$I_1 = Tr(\mathbf{T}),\ I_2 = \frac{1}{2}\left(Tr(\mathbf{T})^2 - Tr(\mathbf{T}^2)\right),\ I_3 = \det(\mathbf{T}).$$

Здесь $Tr(\mathbf{T})$ – след тензора $\mathbf{T}$. Решать кубическое уравнение непосредственно не очень приятное занятие, поэтому воспользуемся симметрией тензора $\mathbf{T}$. Из вида

(6) получим одно собственное значение $\lambda_3 = -w$. В самом деле, непосредственной проверкой убеждаемся, что

$$\mathbf{T} - \lambda\mathbf{I} = \mathbf{DE} + \mathbf{HH} - w\mathbf{I} + w\mathbf{I} = \mathbf{DE} + \mathbf{HH},$$

$$\det(\mathbf{DE} + \mathbf{HH}) = 0.$$

Найдем собственный вектор $\mathbf{u}_3$, соответствующий $\lambda_3 = -w$. Решая (11) для $\lambda_3 = -w$, получим компоненты соответствующего вектора $\mathbf{u}_3$:

$$u_{31} = E_2H_3 - E_3H_2;\; u_{32} = E_3H_1 - E_1H_3;\; u_{33} = E_1H_2 - E_2H_2,$$

которые образуют вектор

$$\mathbf{u}_3 = u_{3j}\mathbf{e}_j = \mathbf{E}\times\mathbf{H}.$$

Отсюда

$$\mathbf{e}_3 = \frac{\mathbf{E}\times\mathbf{H}}{|\mathbf{E}\times\mathbf{H}|}$$

Запишем $\mathbf{T}$ в ортонормированном базисе $\mathbf{e}_j$: $T'_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{e}_j$

$$T'_{ij} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ T_{21} & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & -w \end{pmatrix}$$

Теперь потребуем, чтобы $T_{12} = T_{21} = 0$, тогда, очевидно, $T_{11} = \lambda_1$, $T_{22} = \lambda_2$, и $\mathbf{e}_{1,2}$ – собственные векторы. Получаем условия

$$T_{12} = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{e}_2 = (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{D})(\mathbf{E}\cdot\mathbf{e}_2) + (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{H})(\mathbf{H}\cdot\mathbf{e}_2) = 0,$$
$$T_{21} = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{e}_1 = (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{D})(\mathbf{E}\cdot\mathbf{e}_1) + (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{H})(\mathbf{H}\cdot\mathbf{e}_1) = 0.$$

Отсюда следует

$$\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{D} = D;\; \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{E} = E;\; \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{H} = 0.$$
$$\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{D} = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{E} = 0;\; \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{H} = H.$$

Тогда

$$T_{11} = \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{e}_1 = DE - w = \lambda_1 = \frac{1}{2}(DE - H^2);$$

$$T_{22} = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{e}_2 = H^2 - w = \lambda_2 = -\lambda_1 = \frac{1}{2}(H^2 - DE);$$

И собственные векторы оказываются равными

$$\mathbf{e}_1 = \frac{\mathbf{D}}{D} = \frac{\mathbf{E}}{E};\ \mathbf{e}_2 = \frac{\mathbf{H}}{H};\ \mathbf{e}_3 = \frac{\mathbf{P}}{P} \qquad (12)$$

Теперь потребуем выполнения дополнительного условия $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$. Обоснование этого требования приводится ниже. В этом случае на поля должна быть наложена дополнительная связь $DE = H^2$.

Значит, чтобы тензор **T** описывал поле, необходимы следующие условия:

1) Ортогональность полей

$$\mathbf{D}\cdot\mathbf{H} = \mathbf{D}\cdot\mathbf{H} = 0, \qquad (13)$$

2) Связь амплитуд полей

$$DE = \varepsilon E^2 = H^2. \qquad (14)$$

Наличие связи амплитуд полей (14), как будет видно далее, имеет решающее значение для построения замкнутой теории. При этом, если $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$ условия (13) и (14) реализуется *локально*. Кроме того, эти условия для *полного* поля. Таким образом, мы получаем канонический вид тензора Максвелла **T** в базисе $\mathbf{e}_j$:

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -w \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{T} = -w(\mathbf{e}_3\mathbf{e}_3).$$

Как видно, тензор Максвелла **T** локально определяется плотностью энергии w и направлением переноса импульса $\mathbf{e}_3$. При этом, в соответствии с теоремами о собственных значениях и собственных векторах симметричного тензора собственные значения оказываются вещественными, а собственные векторы, соответствующие этим значениям, ортогональными.

Релятивистское обоснование

Для обоснования указанных условий обратимся к результатам релятивистской электродинамики. Введем четырехмерный тензор поля в вакууме в пространстве Минковского $R^4_{1,3}$:

$$F_{ik}=\begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & -H_3 & H_2 \\ -E_2 & H_3 & 0 & -H_1 \\ -E_3 & -H_2 & H_1 & 0 \end{pmatrix},\ i,k=0,1,2,3$$

По определению, инвариантами тензора F_{ik} называются коэффициенты характеристического многочлена

$$P(\lambda)=\det(F_{ik}-\lambda g_{ik})$$

где g_{ik} – метрика Минковского:

$$g_{ik}=\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

Прямое вычисление приводит к следующему виду характеристического многочлена:

$$P(\lambda)=-\lambda^4+(E^2-H^2)\lambda+(\mathbf{E}\cdot\mathbf{H})^2,$$

откуда получаются известные инварианты поля $E^2 - H^2$ и $\mathbf{E}\square\mathbf{H}$.

Вопрос о приведении кососимметрического тензора поля F_{ik} лоренцевыми преобразованиями к каноническому виду решается следующей теоремой [10].

Теорема. 1. Пусть инварианты поля $E^2 - H^2$ и $\mathbf{E}\square\mathbf{H}$ не равны нулю.

a) Если $\mathbf{E}\cdot\ \mathbf{H} \neq 0$, тогда лоренцевым преобразованием можно привести тензор F_{ik} к такому виду, что векторы **E** и **H** параллельны и оба отличны от нуля.
b) Если $\mathbf{E}\cdot\ \mathbf{H} = 0$, $E^2 - H^2 \neq 0$, то можно привести тензор к такому виду, что $\mathbf{E} \neq 0$ $\mathbf{H} = 0$ при $E^2 - H^2 > 0$ или $\mathbf{E} = 0$ $\mathbf{H} \neq 0$ при $E^2 - H^2 < 0$.

2. Пусть $E^2 - H^2 = 0$ и $\mathbf{E}\square\mathbf{H} = 0$. Тогда после любого лоренцева преобразования

векторы **E** и **H** будут взаимно перпендикулярны и равны по длине. Тензор F_{ik} можно привести в этом случае к виду:

$$F_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & E & 0 & 0 \\ -E & 0 & 0 & E \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -E & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Нас интересует второй пункт этой теоремы, поскольку он отвечает особому состоянию поля – электромагнитной волне. Именно в этом случае возникают условие связи амплитуд поля и условие поперечности полей. Как видно, условие (14) может рассматриваться как обобщение классического инварианта поля $E^2 - H^2$ на случай электродинамики сплошной среды.

Теперь обоснуем условие $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$. Как известно, для тензора поля F_{ik} по скалярному лагранжиану

$$L = -\frac{1}{4} F^{ik} F_{ik}$$

строится симметричный четырехмерный тензор энергии-импульса **T**. Явный вид этого тензора определяется из первой теоремы Нётер [7]. Согласно теореме Нётер, поскольку действие для свободного электромагнитного поля в пространстве Минковского инвариантно относительно глобального действия группы Пуанкаре (пространственно-временные трансляции плюс отражения), существует тензор второго ранга, 4-дивергенция которого обращается в ноль:

$$\partial_k T_i^k = 0$$

Эта величина, называемая током, и есть тензор энергии-импульса:

$$T_i^k = \frac{1}{2}(-F_{ik} F_m^k + \frac{1}{4} g_{ik} F^2) g_{km}.$$

Найдем собственные значения T_i^k:

$$\det(T_i^k - \lambda \delta_i^k) = 0.$$

В силу симметрии тензора T_i^k получаем четыре попарно совпадающих собственных значения:

$$2\lambda_1 = 2\lambda_3 = H^2 + \frac{1}{2}(E^4 + H^4 - 4(\mathbf{E}\cdot\mathbf{H})^2 + 2E^2H^2)^{1/2},$$
$$2\lambda_2 = 2\lambda_4 = H^2 - \frac{1}{2}(E^4 + H^4 - 4(\mathbf{E}\cdot\mathbf{H})^2 + 2E^2H^2)^{1/2}.$$

Отсюда видно, что при выполнении условий $E = H$, $\mathbf{E}\cdot\mathbf{H} = 0$ собственные значения приобретают следующий вид:

$$\lambda_1 = \lambda_3 = E^2 = w,$$
$$\lambda_2 = \lambda_4 = 0.$$

Таким образом, мы приходим к условию равенства нулю двух собственных значений тензора энергии-импульса. Поскольку тензор Максвелла является пространственной частью тензора энергии-импульса, то ясно, что это условие должно выполняться и для тензора Максвелла **T**, определяемого формулой (6).

Необходимо отметить, что приведенные обоснования использовали тензоры поля и энергии-импульса в вакууме. Полученный выше вывод для тензора Максвелла является более общим, поскольку мы рассматриваем поле в веществе.

Фундаментальные уравнения в локальном базисе

Теперь с учетом (14) можно связать плотность энергии поля с амплитудой электрического вектора:

$$w = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\varepsilon}D^2 + H^2\right) = \frac{E^2}{2}\varepsilon(1+\varepsilon).$$

Отсюда

$$\frac{E^2}{2} = \frac{w}{\varepsilon(1+\varepsilon)}.$$

И уравнение (5) приобретает компактный вид:

$$\nabla\cdot\mathbf{T} + \frac{w}{\varepsilon(1+\varepsilon)}\nabla\varepsilon = \frac{\partial\mathbf{P}}{\partial t} \qquad (15)$$

Таким образом, мы добились, чтобы система (9), (11) оказалась замкнутой относительно **P** и *w*.

Однако такое «упрощение» не дается даром. Здесь как всегда действует общий принцип: любое обобщение теории при сокращении аксиоматической базы («сущностей») влечет за собой неизбежное усложнение описательных средств, в данном случае математического аппарата. Под обобщением здесь понимается обращение к общефизическим категориям – энергии и импульсу, подчиняющимся глобальным закона сохранения.

Действительно, приведенный выше вывод основных уравнений показывает, что они оказываются справедливыми в наиболее компактном (каноническом) виде только в специальном локальном базисе. Тем самым мы должны рассматривать все дифференциальные операции в ортогональной криволинейной системе координат, задаваемой базисом (10).

Чтобы подчеркнуть это обстоятельство, запишем систему (9), (11) в следующем виде:

$$\begin{aligned} &\nabla'\cdot\mathbf{T} + \frac{w}{\varepsilon(1+\varepsilon)}\nabla'\varepsilon = \frac{\partial\mathbf{P}}{\partial t} \\ &\nabla'\cdot\mathbf{P} - \frac{\nabla'\varepsilon}{\varepsilon}\cdot\mathbf{P} = -\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial w}{\partial t} \end{aligned} \qquad (12)$$

Здесь штрих означает дифференцирование в базисе (10).

Система (12), при внешней формальной простоте, не может быть непосредственно использована для расчета импульса и энергии поля. В самом деле, для решения такой задачи необходимо иметь явные выражения для перехода от локальной системы координат, задаваемой базисом (10), к лабораторной системе координат, в которой и фиксируется эксперимент. Иначе говоря, у нас остается неизвестной геометрия.

В общем случае такая задача оказывается совершенно неподъемной. Например, в общем случае векторы $\boldsymbol{e}_j$ рассматриваются как локальный базис криволинейных координат, и обычное дифференцирование заменяется на ковариантное (абсолютное). Тогда возникает необходимость рассчитывать 27 коэффициентов связности – символы Кристоффеля 2-го рода для трехмерного пространства [11].

К счастью, для дальнейшего продвижения теории у нас есть мощное эвристическое основание, а именно, условие локальной ортогональности поля и условие связи амплитуд. Это основание дает возможность установить связь между геометрией поля и геометрией эксперимента, что и является нашей дальнейшей целью.

Задача разбивается на два этапа. Вначале мы найдем выражения для дивергенции и градиента в полевом базисе через декартовый базис и дополнительную характеристику – локальный поворот базиса. Затем вычислим явный вид вектора угла поворота.

Вывод дифференциальных операций $\nabla' \cdot \mathbf{P}$, $\nabla' \cdot \mathbf{T}$, $\nabla' \varepsilon$

1. Расчет $\nabla' \cdot \mathbf{P}$

Прежде всего, необходимо ввести декартовый базис, который будет соответствовать геометрии распространения плоской волны в кристалле как континууме, когда отклик среды на внешнее воздействие сводится к материальному уравнению $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E} = (1+\chi_0)\mathbf{E}$. Это состояние естественно принять за исходное, по отношению к которому, в процессе взаимодействия рентгеновской волны с кристаллом, происходит локальная вариация базиса $\mathbf{e}_m$. Таким образом, мы будем рассматривать задачу рассеяния в специальном ортонормированном базисе $\mathbf{i}_k$, определяемом векторами $\mathbf{D}_0$, $\mathbf{H}_0$, $\mathbf{P}_0$ в континуальном приближении:

$$\mathbf{i}_1 = \frac{\mathbf{D}_0}{D_0};\ \mathbf{i}_2 = \frac{\mathbf{H}_0}{H_0};\ \mathbf{i}_3 = \frac{\mathbf{P}_0}{P_0}.$$

Значит, все дифференциальные операторы необходимо выразить именно в этом базисе.

Начнем с расчета дивергенции импульса. Найдем $\nabla \cdot \mathbf{P}$ в базисе $\mathbf{i}_k$. Основная идея расчета заключается в следующем. Из вектора $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ может быть построен тензор второго ранга $\dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}$ – производная по направлению. По определению, $\nabla \cdot \mathbf{P}$ есть след тензора $\dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}$ как один из его инвариантов:

$$\nabla' \cdot \mathbf{P} = Tr\left(\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}\right) = Tr\left(\frac{\partial (P^m \mathbf{e}_m)}{\partial \mathbf{r}}\right)$$

Здесь мы представили $\mathbf{P}$ в виде разложения по базису $\mathbf{e}_m$. Значит, задача сводится к вычислению тензора $\dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}$. Получим $\dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}$ в бескоординатном виде, используя т.н. производную Гато, или слабую производную. Это понятие является инструментом нелинейного функционального анализа, к которому, в частности, относится классическое вариационное исчисление [12, 13]. Слабая производная определяется через дифференциал Гато (слабый дифференциал), который вводится как предел отображения F одного нормированного пространства X в другое Y при приращении h:

$$DF(x,h)=\frac{\partial}{\partial\varepsilon}F(x+\varepsilon h)\Big|_{\varepsilon\to 0}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{F(x+\varepsilon h)\big|-F(x)\big|}{\varepsilon}$$

Иногда согласно Лагранжу, $DF(x,h)$ называют первой вариацией отображения F в точке x. Слабый дифференциал не обязательно линеен по ε. Если же линейность имеет место, тогда

$$DF(x,h)=F'(x)h$$

и ограниченный линейный оператор $F'(x)$ называется слабой производной, или производной Гато. Если применить эту общую конструкцию к обычному векторному пространству **r**, в котором отображение осуществляется вектором **P**, а приращение h отождествляется с d**r**, то дифференциал Гато окажется равным:

$$d\mathbf{P}=\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\mathbf{r}}\cdot d\mathbf{r}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\mathbf{P}(\mathbf{r}+\varepsilon\cdot d\mathbf{r})-\mathbf{P}(\mathbf{r})}{\varepsilon}$$

т.е. необходимо вычислить указанный предел. Используя представление $\mathbf{P}=P^m\mathbf{e}_m$, получим:

$$d\mathbf{P}=\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\mathbf{r}}\cdot d\mathbf{r}=\frac{\partial(P^m\mathbf{e}_m)}{\partial\mathbf{r}}\cdot d\mathbf{r}=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{P^m(\mathbf{r}+\varepsilon\cdot d\mathbf{r})\mathbf{e}_m(\mathbf{r}+\varepsilon\cdot d\mathbf{r})-P^m(\mathbf{r})\mathbf{e}_m(\mathbf{r})}{\varepsilon}=$$
$$P^m\frac{\partial\mathbf{e}_m}{\partial\mathbf{r}}\cdot d\mathbf{r}+\left(\frac{\partial P^m}{\partial\mathbf{r}}\cdot d\mathbf{r}\right)\mathbf{e}_m$$

Во втором члене необходимо добиться, чтобы дифференциал d**r** оказался правым сомножителем. Однако просто передвинуть его нельзя, поскольку (**a**□**b**)**c** ≠ (**a**□**c**)**b**. Поэтому во втором слагаемом используем стандартный прием – вставим единичный тензор $\mathbf{i}_s\mathbf{i}_s$ как множитель перед $d\mathbf{r}$:

$$\left(\frac{\partial P^m}{\partial\mathbf{r}}\cdot d\mathbf{r}\right)\mathbf{e}_m=\left(\frac{\partial P^m}{\partial\mathbf{r}}\cdot(\mathbf{i}_s\mathbf{i}_s)\cdot d\mathbf{r}\right)\mathbf{e}_m=\left(\frac{\partial P^m}{\partial\mathbf{r}}\cdot\mathbf{i}_s\right)\cdot(\mathbf{e}_m\mathbf{i}_s)\cdot d\mathbf{r}$$

В итоге имеем

$$\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial\mathbf{r}}=P^m\frac{\partial\mathbf{e}_m}{\partial\mathbf{r}}+\left(\frac{\partial P^m}{\partial\mathbf{r}}\cdot\mathbf{i}_s\right)\cdot(\mathbf{e}_m\mathbf{i}_s)$$

Базис $\mathbf{e}_m$ ортогонален в каждой точке **r**, поэтому он должен получаться в результате поворота базиса $\mathbf{i}_m$ вокруг некоторой оси на малый угол φ. Малость угла φ обусловлена малым отличием базисов $\mathbf{e}_m$ и $\mathbf{i}_m$ на величину переменной составляющей $\chi(\mathbf{r})$.

Таким образом, в теорию вводится ключевое понятие – локальный угол поворота базиса $\mathbf{e}_m$, В случае идеального кристалла угол φ определяется трехмерно-периодической проницаемостью $\chi(\mathbf{r})$ как характеристикой среды.

Как известно, любая суперпозиция ортогональных преобразований, вызванных поворотом вектора вокруг осей координат, сводится к единственному повороту вокруг некоторой оси, что составляет содержание теоремы Эйлера. В бескоординатной формулировке теорема Эйлера формулируется следующим образом [13]. Произвольный тензор поворота **G**, отличный от тождественного преобразования единичным тензором **I**, допускает единственное представление

$$\mathbf{G} = \mathbf{kk} + \cos\varphi(\mathbf{I} - \mathbf{kk}) + \sin\varphi\mathbf{k} \times \mathbf{I}$$

где единичный вектор **k** является неподвижным вектором тензора **G** и определяет прямую в пространстве, называемою осью поворота. Вводя вектор $\boldsymbol{\varphi} = \varphi\mathbf{k}$, для малых φ получим закон преобразования базиса $\mathbf{e}_m$:

$$\mathbf{e}_m = \mathbf{i}_m + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m$$

Очевидно, в силу локальности базиса $\mathbf{e}_m$, вектор $\boldsymbol{\varphi}$ есть локальная характеристика среды (полевая переменная): $\boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r})$.

Найдем $\dfrac{\partial \mathbf{e}_m}{\partial \mathbf{r}}$, используя производную Гато:

$$d\mathbf{e}_m = \frac{\partial \mathbf{e}_m}{\partial \mathbf{r}} \cdot d\mathbf{r} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\mathbf{i}_m + \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r} + \varepsilon \cdot d\mathbf{r}) \times \mathbf{i}_m - \mathbf{i}_m - \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}) \times \mathbf{i}_m}{\varepsilon} =$$

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{r}} \cdot d\mathbf{r}\right) \times \mathbf{i}_m = \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\mathbf{i}_p \mathbf{i}_p) \cdot d\mathbf{r}\right) \times \mathbf{i}_m = \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_p\right) \cdot (\mathbf{i}_p \cdot d\mathbf{r}) \times \mathbf{i}_m =$$

$$\left(\frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_p\right) \times \mathbf{i}_m \cdot (\mathbf{i}_p \cdot d\mathbf{r}) = \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\mathbf{i}_p \times \mathbf{i}_m, \mathbf{i}_p) \cdot d\mathbf{r}$$

Тогда

$$\frac{\partial \mathbf{e}_m}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m)}{\partial \mathbf{r}} = \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{r}} \cdot ((\mathbf{i}_p \times \mathbf{i}_m)\mathbf{i}_p)$$

Между прочим, мы получили специальный вид т.н. деривационной формулы [11], которая используется при расчете дифференциальных операторов в криволинейных системах координат. Имеем для оператора $\dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}$:

$$\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}} = P^m \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}}{\partial \mathbf{r}} \cdot (\mathbf{i}_p \times \mathbf{i}_m, \mathbf{i}_p) + \left(\frac{\partial P^m}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s \right) \cdot (\mathbf{e}_m \mathbf{i}_s) .$$

Теперь получим выражение координат P^m в базисе $\mathbf{e}_m$ через P_r в базисе $\mathbf{i}_r$:

$$P^m \mathbf{e}_m = P_r \mathbf{i}_r$$

$$P^m = P_r(\mathbf{i}_r \cdot \mathbf{e}_m) = P_r(\mathbf{i}_r \cdot (\mathbf{i}_m + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m)) = P_m + (1 - \delta_{mr})\mathbf{i}_r \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m) P_r$$

Здесь δ_{mr} – символ Кронекера.

При подстановке P^m в $\dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}$ видно, что первый член не дает вклада в $Tr\left(\dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}\right)$.

Рассмотрим второй член

$$\left(\frac{\partial P^m}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s \right) \cdot (\mathbf{e}_m \mathbf{i}_s) = \left(\frac{\partial P_m}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s + (1 - \delta_{mr}) \frac{\partial (\mathbf{i}_r \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m) P_r)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s \right) \cdot (\mathbf{e}_m \mathbf{i}_s) =$$
$$\left(\frac{\partial P_m}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s + (1 - \delta_{mr}) \frac{\partial (\mathbf{i}_r \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m) P_r)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s \right) \cdot ((\mathbf{i}_m + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m) \mathbf{i}_s) \approx$$
$$\left(\frac{\partial P_m}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s \right) \cdot (\mathbf{i}_m \mathbf{i}_s) + \left(\frac{\partial P_m}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s \right) \cdot ((\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m) \mathbf{i}_s) +$$
$$\left((1 - \delta_{mr}) \frac{\partial (\mathbf{i}_r \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m) P_r)}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s \right) \cdot (\mathbf{i}_m \mathbf{i}_s).$$

Рассмотрим вектор

$$\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m = (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m)_j \mathbf{i}_j = ((\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m) \cdot \mathbf{i}_j) \mathbf{i}_j .$$

Ясно, что при $m = j$ $(\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_m)_j = 0$, и второе слагаемое не дает вклада в $Tr\left(\dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial \mathbf{r}}\right)$.

Теперь перейдем к базису $\mathbf{i}_m$ и рассмотрим последовательно первый и третий члены:

$$\left(\frac{\partial P_m}{\partial \mathbf{r}} \cdot \mathbf{i}_s \right) \cdot (\mathbf{i}_m \mathbf{i}_s) = \left(\frac{\partial P_m}{\partial x_p} (\mathbf{i}_p \cdot \mathbf{i}_s) \right) \cdot (\mathbf{i}_m \mathbf{i}_s) = \left(\frac{\partial P_m}{\partial x_p} \delta_{ps} \right) \cdot (\mathbf{i}_m \mathbf{i}_s) = \left(\frac{\partial P_m}{\partial x_m} \right) \cdot (\mathbf{i}_m \mathbf{i}_s)$$

$$Tr\left(\left(\frac{\partial P_m}{\partial x_m}\right)\cdot(\mathbf{i}_m\mathbf{i}_s)\right)=\left(\frac{\partial P_m}{\partial x_m}\right)=\nabla\cdot\mathbf{P}$$

$$\left((1-\delta_{mr})\frac{\partial(\mathbf{i}_r\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_m)P_r)}{\partial\mathbf{r}}\cdot\mathbf{i}_s\right)\cdot(\mathbf{i}_m\mathbf{i}_s)=\left((1-\delta_{mr})\frac{\partial(\mathbf{i}_r\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_m)P_r)}{\partial x_p}(\mathbf{i}_p\cdot\mathbf{i}_s)\right)\cdot(\mathbf{i}_m\mathbf{i}_s)=$$

$$\left((1-\delta_{mr})\frac{\partial(\mathbf{i}_r\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_m)P_r)}{\partial x_p}\delta_{ps}\right)\cdot(\mathbf{i}_m\mathbf{i}_s)=\left((1-\delta_{mr})\frac{\partial(\mathbf{i}_r\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_m)P_r)}{\partial x_s}\right)\cdot(\mathbf{i}_m\mathbf{i}_s)$$

$$Tr\left(\left((1-\delta_{mr})\frac{\partial(\mathbf{i}_r\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_m)P_r)}{\partial x_s}\right)\cdot(\mathbf{i}_m\mathbf{i}_s)\right)=(1-\delta_{mr})\frac{\partial(\mathbf{i}_r\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_m)P_r)}{\partial x_m}$$

Разложим $\boldsymbol{\varphi}$ по базису $\mathbf{i}_m$: $\boldsymbol{\varphi}=\varphi_m\mathbf{i}_m$. Имеем:

$$(1-\delta_{mr})\frac{\partial(\mathbf{i}_r\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_m)P_r)}{\partial x_m}=\frac{\partial}{\partial x_1}(\varphi_3P_2)-\frac{\partial}{\partial x_1}(\varphi_2P_3)-\frac{\partial}{\partial x_2}(\varphi_3P_1)+\frac{\partial}{\partial x_2}(\varphi_1P_3)+$$
$$\frac{\partial}{\partial x_3}(\varphi_2P_1)-\frac{\partial}{\partial x_3}(\varphi_1P_2)=-\nabla\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{P})$$

Собирая результаты, получим выражение для дивергенции импульса:

$$\nabla'\cdot\mathbf{P}=\nabla\cdot\mathbf{P}-\nabla\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{P})\,. \qquad (13)$$

2. Расчет $\nabla'\varepsilon$

Найдем выражение для градиента ε. Будем рассматривать переход от базиса $\mathbf{e}_m$ к базису $\mathbf{i}_m$ как замену переменной скалярной функции векторного аргумента. По определению

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial\mathbf{r}}=\left(\frac{\partial\varepsilon}{\partial\mathbf{r}'}\right)^T\cdot\frac{\partial\mathbf{r}'}{\partial\mathbf{r}}=\left(\frac{\partial\mathbf{r}'}{\partial\mathbf{r}}\right)^T\cdot\frac{\partial\varepsilon}{\partial\mathbf{r}'}$$

$$\mathbf{r}'=\mathbf{r}+\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{r}$$

Здесь знак T означает транспонирование. Используя производную Гато, найдем:

$$\frac{\partial\mathbf{r}'}{\partial\mathbf{r}}=\mathbf{I}+\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{I}+\frac{\partial\boldsymbol{\varphi}}{\partial\mathbf{r}}\times\mathbf{r}\,,$$

$$\left(\frac{\partial\mathbf{r}'}{\partial\mathbf{r}}\right)^T=\nabla\mathbf{r}'=\mathbf{I}-\mathbf{I}\times\boldsymbol{\varphi}-\mathbf{r}\times\left(\frac{\partial\boldsymbol{\varphi}}{\partial\mathbf{r}}\right)^T=\mathbf{I}-\mathbf{I}\times\boldsymbol{\varphi}-\mathbf{r}\times\nabla\boldsymbol{\varphi}\,.$$

Тогда градиент ε равен

$$\nabla\varepsilon=(\mathbf{I}-\mathbf{I}\times\boldsymbol{\varphi}-\mathbf{r}\times\nabla\boldsymbol{\varphi})\cdot\nabla'\varepsilon\,.$$

Отсюда, с учетом малости $\boldsymbol{\varphi}$, обращая оператор $\mathbf{I}-\mathbf{I}\times\boldsymbol{\varphi}-\mathbf{r}\times\nabla\boldsymbol{\varphi}$, получим

$$\nabla'\varepsilon = (\mathbf{I} + \mathbf{I}\times\boldsymbol{\varphi} + \mathbf{r}\times\nabla\boldsymbol{\varphi})\cdot\nabla\varepsilon\,. \tag{14}$$

3. Расчет $\nabla'\cdot\mathbf{T}$

Теперь необходимо найти $\nabla'\cdot\mathbf{T}$. Для этого воспользуемся формулой для дивергенции диады:

$$\nabla\cdot(\mathbf{uv}) = (\nabla\cdot\mathbf{u})\mathbf{v} + \mathbf{u}\cdot(\nabla\mathbf{v})$$

а также известными формулами векторного анализа.

$$\begin{aligned}
&\nabla'\cdot\mathbf{T} = -\nabla'\cdot(w\mathbf{e}_3\mathbf{e}_3) = -\nabla'\cdot(w\mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3 - w\mathbf{e}_3\cdot(\nabla'\mathbf{e}_3) = \\
&-(\nabla\cdot(w\mathbf{e}_3))\mathbf{e}_3 - (\nabla\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times w\mathbf{e}_3))\mathbf{e}_3 - w\mathbf{e}_3\cdot(\nabla'\mathbf{e}_3) = \\
&-(\nabla w\cdot\mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3 - (w\nabla\cdot\mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3 - ((\nabla\times\boldsymbol{\varphi})\cdot w\mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3 + ((\nabla\times w\mathbf{e}_3)\cdot\boldsymbol{\varphi})\mathbf{e}_3 - w\mathbf{e}_3\cdot(\nabla'\mathbf{e}_3).
\end{aligned}$$

Вычисляем последовательно:

$$\begin{aligned}
&(\nabla w\cdot\mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3 = (\nabla w\cdot(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3))(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3) \approx \\
&(\nabla w\cdot\mathbf{i}_3)\mathbf{i}_3 + (\nabla w\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3))\mathbf{i}_3 + (\nabla w\cdot\mathbf{i}_3)(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3),
\end{aligned}$$

$$(w\nabla\cdot\mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3 = w(\nabla\cdot(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3))(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3) \approx w((\nabla\times\boldsymbol{\varphi})\cdot\mathbf{i}_3)\mathbf{i}_3,$$

$$((\nabla\times\boldsymbol{\varphi})\cdot w\mathbf{e}_3)\mathbf{e}_3 = w((\nabla\times\boldsymbol{\varphi})\cdot(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3))(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3) \approx w((\nabla\times\boldsymbol{\varphi})\cdot\mathbf{i}_3)\mathbf{i}_3,$$

$$((\nabla\times w\mathbf{e}_3)\cdot\boldsymbol{\varphi})\mathbf{e}_3 = ((\nabla\times w(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3))\cdot\boldsymbol{\varphi})(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3) \approx ((\nabla w\times\mathbf{i}_3)\cdot\boldsymbol{\varphi})\mathbf{i}_3.$$

Найдем градиент $\mathbf{e}_3$, используя производную Гато.

$$d\mathbf{e}_3 = \frac{\partial\mathbf{e}_3}{\partial\mathbf{r}}\cdot d\mathbf{r} = \left(\frac{\partial\mathbf{e}_3}{\partial\mathbf{r}'}\right)^T\cdot\frac{\partial\mathbf{r}'}{\partial\mathbf{r}}\cdot d\mathbf{r} = (\nabla'\mathbf{e}_3)\cdot(\nabla\mathbf{r}')^T\cdot d\mathbf{r} = (\nabla\mathbf{e}_3)^T\cdot d\mathbf{r}\,.$$

$$\begin{aligned}
&(\nabla'\mathbf{e}_3) = (\nabla\mathbf{e}_3)^T\cdot(\nabla\mathbf{r}')^{-T} = (\nabla\mathbf{r}')^{-1}\cdot(\nabla\mathbf{e}_3) = \\
&(\mathbf{I} + \mathbf{I}\times\boldsymbol{\varphi} + \mathbf{r}\times\nabla\boldsymbol{\varphi})\cdot\nabla(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3) \approx \nabla(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3),
\end{aligned}$$

$$\mathbf{i}_3\cdot\nabla(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3) = ((\mathbf{i}_3\cdot\mathbf{i}_p)(\mathbf{i}_p\times\mathbf{i}_3)\cdot\nabla\boldsymbol{\varphi} = ((\mathbf{i}_3\cdot\mathbf{i}_3)(\mathbf{i}_3\times\mathbf{i}_3)\cdot\nabla\boldsymbol{\varphi} = 0.$$

Собирая результаты, получим:

$$\begin{aligned}
&\nabla'\cdot\mathbf{T} = -(\nabla w\cdot\mathbf{i}_3)(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3) - 2w((\nabla\times\boldsymbol{\varphi})\cdot\mathbf{i}_3)\mathbf{i}_3 = \\
&-(\nabla w\cdot\mathbf{i}_3)(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3) - 2w(\nabla\cdot(\boldsymbol{\varphi}\times\mathbf{i}_3))\mathbf{i}_3.
\end{aligned} \tag{15}$$

Расчет вектора поворота φ

Для того чтобы явно учесть локальность базиса, а значит зависимость от $\chi(\mathbf{r})$, перейдем к не нормированному на 1 ортогональному базису $\mathbf{m}_j$. Новую нормировку выбираем из требования, чтобы при переходе к континуальному приближению $\chi(\mathbf{r}) = \chi_0 = \mathrm{const}$ (или $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_0 = \mathrm{const}$) векторы $\mathbf{m}_j$ переходили в $\mathbf{e}_j$. (тем самым мы учтем преломление волны в кристалле).

$$\mathbf{m}_1 = \frac{\mathbf{D}}{D_0} = \frac{\varepsilon\mathbf{E}}{\varepsilon_0 E} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\mathbf{e}_1,$$

$$\mathbf{m}_2 = \frac{\mathbf{H}}{H_0} = \frac{\sqrt{\varepsilon}\mathbf{E}}{\sqrt{\varepsilon_0}E} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}}\mathbf{e}_2,$$

$$\mathbf{m}_3 = \frac{\mathbf{P}}{P_0} = \frac{\sqrt{\varepsilon}|\mathbf{E}|^2}{\sqrt{\varepsilon_0}|\mathbf{E}|^2}\mathbf{e}_3 = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}}\mathbf{e}_3.$$

В этом базисе тензор $\mathbf{T}$ имеет вид

$$\mathbf{T} = -w(\mathbf{e}_3\mathbf{e}_3) = -w\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}(\mathbf{m}_3\mathbf{m}_3).$$

Коэффициенты Ламе [11] $h_j = |\mathbf{m}_j|$ для базиса $\mathbf{m}_j$ равны

$$h_1 = |\mathbf{m}_1| = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0};\ h_2 = |\mathbf{m}_2| = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}};\ h_3 = |\mathbf{m}_3| = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}}.$$

Определим вектор смещения $\mathbf{u} = \mathbf{m}_j - \mathbf{e}_j$ при переходе от одного базиса к другому вдоль соответствующих направлений осей координат. При этом будем считать, что $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{hr})$, где $\mathbf{h}$ – вектор обратной решетки. Тем самым мы фактически используем модель идеального кристалла. (Отметим, что это ограничение отнюдь не является принципиальным. Здесь же можно «руками» вводить всевозможные отклонения от идеальной периодичности, т.е. проводить обобщение теории на деформированное состояние кристалла.) Для определенности можно выбрать стандартную форму поляризуемости, используемую в динамической теории дифракции.

$$\varepsilon = 1 + \chi_0 + \chi_h\left(\exp(i\mathbf{hr}) + \frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h}\exp(-i\mathbf{hr})\right) = \varepsilon_0 + \chi_h f(\mathbf{hr}). \qquad (16)$$

$$\mathbf{u} = (h_j - 1)\mathbf{e}_j = (h_j - 1)(\mathbf{i}_j + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_j)\,. \qquad (17)$$

Фактически мы здесь вводим альтернативную концепцию описания взаимодействия поля и вещества. При обычном описании мы используем представление о взаимодействии, разворачивающемся в евклидовом пространстве с неизменными метрическими характеристиками. Пространство в этой концепции играет пассивную роль «вместилища» событий.

Альтернативная концепция придает теории геометрическую интерпретацию, которая восходит еще к идее Эйнштейна о том, что геометрия пространства не задается *ad hoc*, а определяется взаимодействием, в данном случае поля и вещества. Таким образом, геометрия приобретает динамический характер [6].

В данном случае реакция среды на внешнее возмущение рассматривается как локальное изменение геометрии – поворот базиса, определяемое структурными характеристиками среды. Или, иначе, взаимодействие меняет геометрию.

Здесь позволительно провести аналогию с принципом эквивалентности в общей теории относительности. На вопрос, какова геометрия мира, можно ответить двояко. В первом случае пространство плоское и все тела испытывают гравитационное взаимодействие. Во втором случае взаимодействия нет, но пространство кривое [6].

Разумеется, рассматриваемая здесь теория не претендует на глобальность и мировоззренческий статус общей теории относительности.

Мы воспользуемся результатами линейной теории упругости [14], в которой малые смещения среды рассматриваются как полевые переменные, определяющие симметричный тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})$ и антисимметричный тензор вращений $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r})$. Как известно, любому антисимметричному тензору ставится в соответствие дуальный ему вектор. Этим вектором в случае $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r})$ оказывается аксиальный вектор малых вращений $\boldsymbol{\varphi}$. Геометрический смысл вектора $\boldsymbol{\varphi}$ заключается в повороте окрестности заданной точки среды как целого вокруг оси вращения, при этом угол и направление поворота совпадают соответственно с длиной и направлением вектора $\boldsymbol{\varphi}$.

Исходя из этой интерпретации, в теории упругости выводится следующее фундаментальное соотношение, определяющее вектор поворота $\boldsymbol{\varphi}$ через ротор вектора смещения [14]:

$$\boldsymbol{\varphi} = \frac{1}{2}\nabla \times \mathbf{u}\,. \tag{18}$$

Согласно (18), используя (17), получим:

$$2\boldsymbol{\varphi} = \nabla \times \mathbf{u} = \nabla \times (h_j - 1)(\mathbf{i}_j + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_j) = \nabla(h_j - 1) \times \mathbf{i}_j + \nabla \times ((h_j - 1)(\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_j))$$

Или, с учетом (16) и малости χ:

$$2\boldsymbol{\varphi} = \frac{\chi_h}{2}\nabla f \times (2\mathbf{i}_1 + \mathbf{i}_2 + \mathbf{i}_3) + \frac{\chi_h}{2}\nabla \times (f(2\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_1 + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_2 + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_3))\,. \tag{19}$$

Решение уравнения (19) ищем в виде разложения в ряд по малому параметру χ_h:

$$\boldsymbol{\varphi} = \boldsymbol{\varphi}_0 + \chi_h \boldsymbol{\varphi}_1 + \ldots$$

Действуя стандартным методом теории возмущений, получаем решение в нулевом приближении $\boldsymbol{\varphi}_0 = 0$ и приближении первого порядка:

$$\boldsymbol{\varphi}_1 = \frac{1}{4}(\nabla f \times (2\mathbf{i}_1 + \mathbf{i}_2 + \mathbf{i}_3))\,.$$

Тогда решение уравнения (19) в приближении первого порядка примет вид:

$$\boldsymbol{\varphi} = \frac{\chi_h}{4}(\nabla f \times (2\mathbf{i}_1 + \mathbf{i}_2 + \mathbf{i}_3)) = \frac{\nabla \chi}{4} \times (2\mathbf{i}_1 + \mathbf{i}_2 + \mathbf{i}_3)\,. \tag{20}$$

$$\nabla f = \mathbf{h} f'(\mathbf{hr})$$

Согласно (20), величина $\boldsymbol{\varphi}$ является локальной мерой отклонения геометрических характеристик среды по отношению к распространению электромагнитных волн от континуального приближения.

Вектор $\boldsymbol{\varphi}$ при условии $\chi = \chi(\mathbf{hr})$ т.е. если кристалл идеальный, сохраняет ориентацию в пространстве и не совпадает с базисными векторами $\mathbf{i}_m$. Если бы он совпадал с $\mathbf{i}_1$, то реализовывалась бы σ-поляризация, а если бы с $\mathbf{i}_2$ – π-поляризация. Следовательно, при прохождении волны реализуется суперпозиция σ- и π-поляризаций, и это, по-видимому, общий результат. Отсюда вывод: разделение волн на поляризации при рассмотрении задач рассеяния рентгеновской волны на кристалле не вполне корректно даже в случае идеального кристалла.

Разумеется, сохранение ориентации вектора $\boldsymbol{\varphi}$ в пространстве есть специфическое свойство только идеального кристалла. В других случаях, скажем при учете деформации кристалла, вектор $\boldsymbol{\varphi}$ будет локально менять свою ориентацию в пространстве, например, прецессировать вокруг первоначального направления, соответствующего идеальному кристаллу.

Вывод основной системы уравнений в декартовом базисе

Линеаризуем фундаментальную систему (12) по малой величине χ.

$$\nabla' \cdot \mathbf{T} + w\nabla\varepsilon = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}$$

$$\nabla' \cdot \mathbf{P} - \nabla\varepsilon \cdot \mathbf{P} = -\frac{\varepsilon}{c^2}\frac{\partial w}{\partial t}$$

Тогда, используя явные выражения для дивергенций и градиента (13), (14), (15), получим:

$$\begin{aligned} &-(\nabla w \cdot \mathbf{i}_3)(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_3) - 2w(\nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_3))\mathbf{i}_3 + w\nabla\chi = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \\ &\nabla \cdot \mathbf{P} - \nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{P}) - \nabla\chi \cdot \mathbf{P} = -\frac{1+\chi(\mathbf{r})}{c^2}\frac{\partial w}{\partial t} \end{aligned} \qquad (21)$$

Эти соотношения представляют собой фундаментальные уравнения изложенной выше теории, которые позволяют рассчитывать импульс и энергию поля при его взаимодействии с кристаллом. Как и в обычной динамической теории дифракции (скажем, уравнения Такаги) такое взаимодействие носит параметрический характер, а значит, при определенных геометрических условиях должен наблюдаться параметрический резонанс. Разумеется, следует ожидать, что эти условия соответствуют уравнению Лауэ, а резонанс физически соответствует возникновению дифракционной волны (в терминах данной теории – появлению соответствующей компоненты полного импульса).

Уравнения (21), в отличие от уравнений дифракции для полей, параметрически зависят не только от χ, а от $\nabla\chi \sim \mathbf{h}$. Отметим, что уравнения являются линейными, что позволяет при построении решения использовать принцип суперпозиции.

Наметим дальнейшее развитие теории применительно к описанию дифракционного рассеяния в кристалле. Основные уравнения, очевидно, не могут быть решены точно, поэтому необходимо воспользоваться методами теории возмущений. При этом в качестве малого параметра используется фурье-компонента поляризуемости χ_h, которая связана с дифракционным рассеянием. Невозмущенные уравнения (нулевое приближение)

$$-(\nabla w_0 \cdot \mathbf{i}_3)\mathbf{i}_3 = \frac{\partial \mathbf{P}_0}{\partial t}$$
$$\nabla \cdot \mathbf{P}_0 = -\frac{1+\chi_0}{c^2}\frac{\partial w_0}{\partial t} \tag{22}$$

описывают распространение импульса-энергии в среде как в континууме.

При этом, в отличие от обычных волновых уравнений, физическое решение для нулевого приближения образуется не из гармонических волн а из их произведений. В самом деле, для гармонических волн имеет место зависимость:

$$\mathbf{P} \sim \mathbf{E}e^{I\psi} \times \mathbf{H}e^{I\psi} \sim EHe^{I2\psi}$$
$$w \sim \left(Ee^{I\psi}\right)^2 + \left(He^{I\psi}\right)^2 \sim EHe^{I2\psi}.$$

Тогда для $\mathbf{P}_0$ и w_0 следует выбрать функционально инвариантные решения в виде квадратов гармонических волн, содержащие постоянные (неосциллирующие) составляющие. Очевидно, именно эти составляющие фиксируются в эксперименте. Такие решения не являются гармоническими, поэтому нельзя путем простой подстановки избавиться от производных по времени и перейти к чисто пространственной задаче. Следовательно, необходимо развивать теорию возмущений для системы уравнений в частных производных типа (22).

Эта задача является предметом дальнейшего исследования.

Литература

1. James, R. W. The Optical Principles Of The Diffraction Of X Rays. Vol II. / London. G. Bell and sons Ltd. 1962. 664 p.
2. Пинскер З.Г. рентгеновская кристаллооптика. / М. Наука. 1982. 392 с.
3. Дышеков А.А., Хапачев Ю.П. Новые аналитические подходы к задачам рентгенодифракционной кристаллооптики / М-во образования и науки Российской Федерации, Гос. образовательное учреждение высш. проф. образования "Кабардино-Балкарский гос. ун-т им. Х. М. Бербекова". Нальчик, 2010. 45 с.
4. Dyshekov A.A. Generalization of the nonstandard approach in the dynamic theory of diffraction for deformed crystals. // Crystallography Reports. 2013. V. 58. № 7. P. 984-989.
5. Вариационные принципы механики. Сборник статей классиков науки. Под ред. Л.С. Полак. / М. Физматлит. 1959. 932 с.
6. Коноплева Н.П., Попов В.Н.. Калибровочные поля. / М. Атомиздат. 1972. 240 с.
7. Катанаев М.О. Геометрические методы в математической физике. / Математический институт им. В.А. Стеклова РАН, Москва и Казанский федеральный университет, Казань. 2016. 1570 с. https://arxiv.org/pdf/1311.0733.
8. Photonic crystals. Towards Nanoscale Photonic Devices. Lourtioz J.-M., Benisty H., Berger V., Gerard J.-M, Maystre D., Tchelnokov A. / Springer. 2008. 514 p.
9. Аристов В.В., Шабельников Л.Г.. Современные достижения рентгеновской оптики преломления. // УФН. Т.178. №1. С.61-83.
10. Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т. Современная геометрия. Методы и приложения. / М. Наука. 1986. 760 с.
11. Лурье А.И.. Теория упругости. / М. Наука. 1970. 940 с.
12. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. / М. Наука. 1981. 544 с.

13. Вильчевская Е.Н. Тензорная алгебра и тензорный анализ. Учебное пособие. / Санкт-Петербургский государственный технический университет. СПб. 2012. 45 с.

14. Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П.. Основы кристаллофизики. М. Наука. 1975. 680 с.