О ковариантном подходе в динамической теории резонансной дифракции рентгеновского излучения

А. П. Орешко

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твердого тела. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
E-mail: ap.oreshko@physics.msu.ru

Статья поступила 14.01.2013, подписана в печать 30.01.2013.

На основе прямых (бескоординатных) методов тензорного исчисления получены основные уравнения динамической теории резонансной дифракции рентгеновского синхротронного излучения.

Ключевые слова: динамическая теория дифракции, резонансное рассеяние.
УДК: 539.26. PACS: 78.70.Ck.

Введение

Резонансная дифракция (РД) рентгеновского излучения (РИ) наблюдается при энергии падающего излучения, близкой к краю поглощения какого-либо элемента, входящего в состав кристалла, и является интенсивно развивающимся методом изучения свойств кристаллов [1, 2]. Более доступным метод РД стал при появлении источников синхротронного излучения, сочетающих большую яркость и высокую степень поляризации излучения с возможностью выбора нужной длины волны.

Так как вблизи краев поглощения величина коэффициента поглощения резко увеличивается и тем самым уменьшается глубина проникновения излучения в вещество, для интерпретации полученных экспериментальных данных по РД используется кинематическое приближение теории дифракции [3]. Однако ряд наблюдаемых в последнее время явлений (например, эффект аномального прохождения [4]) не может быть описан в рамках кинематической теории дифракции, что вызвало необходимость развития динамической теории РД.

Впервые попытка последовательного описания динамического рассеяния РИ в условиях компланарной РД на основе решения уравнений Максвелла в среде с периодически меняющейся поляризуемостью была предпринята в работе [5]. Однако применение предложенного в [5] подхода значительно усложняется при некомпланарной дифракции РИ, где более оправданным является применение ковариантного (бескоординатного) подхода [6, 7], широко применяющегося в оптике анизотропных сред [8].

В настоящей работе развивается наиболее общий ковариантный подход к решению задачи динамической резонансной дифракции рентгеновского излучения в совершенных кристалах.

1. Ковариантная динамическая теория резонансной дифракции

Основой построения динамической теории дифракции в стационарных кристаллических средах является предположение о том, что материальные константы среды (тензоры диэлектрической $\widehat{\varepsilon}$ и магнитной $\widehat{\mu}$ проницаемости) в линейных уравнениях связи $\boldsymbol{D}=\widehat{\varepsilon}\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{B}=\widehat{\mu}\boldsymbol{H}$ являются трехмерно-периодическими функциями координат. Вместо тензора диэлектрической проницаемости оказывается удобно ввести тензор диэлектрической поляризуемости $\widehat{\chi}$ $(\widehat{\varepsilon}=1+\widehat{\chi})$, а в немагнитных кристаллах можно положить $\widehat{\mu}=1$ [9]. В этом случае тензор диэлектрической поляризуемости можно представить в виде разложения по векторам обратной решетки кристалла $\boldsymbol{h}$ (временной зависимостью в стационарных средах пренебрегаем):

$$\widehat{\chi}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\sum_{\boldsymbol{h}}\widehat{\chi}^{h}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\exp\{i\boldsymbol{h}\boldsymbol{r}'\}. \tag{1}$$

Таким образом, задача динамической теории дифракции сводится к решению уравнений Максвелла в среде с диэлектрической поляризуемостью (1).

Из микроскопических уравнений Максвелла для фурье-компонент амплитуд поля и индукции в совершенном немагнитном кристалле можно получить соотношения (индексы $\boldsymbol{k},\omega$ будем опускать)

$$(1+\boldsymbol{m}^{\times}\boldsymbol{m}^{\times}+\widehat{\chi})\boldsymbol{E}=0, \tag{2a}$$

$$(1+\boldsymbol{m}\boldsymbol{m}-\boldsymbol{m}^{\times}\widehat{\chi}\boldsymbol{m}^{\times})\boldsymbol{B}=0, \tag{2b}$$

где введен вектор $\boldsymbol{m}=(c/\omega)\boldsymbol{k}$, а при получении выражения (2b) ввиду малости тензора поляризуемости $\widehat{\chi}$ мы воспользовались приближением $\widehat{\varepsilon}^{-1}=1-\widehat{\chi}$; учли соотношение $\boldsymbol{a}^{\times}\boldsymbol{b}^{\times}=\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}-\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$, в котором справа имеем сумму тензора $\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}$ — диады и скалярного произведения $\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}$, умноженного на единичный тензор $\widehat{1}$, а диада, по определению, имеет вид $\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}=(b_i a_j)$; ввели обозначение $\boldsymbol{m}^{\times}$ — тензор, дуальный вектору $\boldsymbol{m}$, т. е. определяемый соотношением $\boldsymbol{m}^{\times}\boldsymbol{m}=[\boldsymbol{m}^{\times}\boldsymbol{m}]$ [8, 10], и воспользовались поперечностью магнитного поля в среде $(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{m}=0)$. В дальнейшем мы не будем делать различия между числом k и скалярной матрицей $k\widehat{1}$, т. е. в записи $\alpha+k$, где α — тензор, а k — число, под k следует понимать скалярную матрицу $k\widehat{1}$, поскольку с матрицей можно складывать только матрицу.

С учетом пространственной периодичности среды и разложения (1) выражения (2) примут вид

$$(1+\boldsymbol{m}^{\times}\boldsymbol{m}^{\times})\boldsymbol{E}_n+\sum_{\boldsymbol{h}}\chi_{np}^{\boldsymbol{h}}\boldsymbol{E}_p=0, \tag{3a}$$

$$(1+\boldsymbol{m}\boldsymbol{m})\boldsymbol{B}_n-\sum_{\boldsymbol{h}}\boldsymbol{m}_n^{\times}\chi_{np}^{\boldsymbol{h}}\boldsymbol{m}_p^{\times}\boldsymbol{B}_p=0. \tag{3b}$$

Приравнивая детерминант уравнения (3a) или (3b) нулю, получаем дисперсионное уравнение (ДУ) для определения волновых векторов $\boldsymbol{m}$ в среде.

Проанализируем дисперсионное уравнение в одноволновом приближении. В первом порядке по величине $\widehat{\chi}$, вполне оправданном в рентгеновском диапазоне длин волн, так как $\chi \sim 10^{-5} \div 10^{-7}$, ДУ для (3a) и (3b) совпадают и принимают вид

$$\left(1-\boldsymbol{m}^2\right)^2+\left(1-\boldsymbol{m}^2\right)\left(\widehat{\chi}_t-\boldsymbol{m}\widehat{\chi}\boldsymbol{m}\right)+\boldsymbol{m}\widehat{\chi}\boldsymbol{m}=0. \qquad (4)$$

Полученное приближенное ДУ фактически является уравнением на собственные значения $\lambda = 1-\boldsymbol{m}^2$ поперечного тензора $\widehat{\chi}^{\perp}$. В решении уравнения можно выделить три основных приближения [7].

В первом приближении можно считать, что направление распространение плоской волны в среде известно и совпадает с направлением распространения падающей на среду волны. В оптике такое предположение может быть справедливо только при нормальном падении. В рентгеновской одноволновой оптике эффектами преломления на границе волновых векторов можно пренебречь вплоть до скользящих углов падения. В этом приближении мы определяем из ДУ лишь величину волнового вектора в среде — фактически показатель преломления собственных волн.

Во втором приближении, реализующемся для рентгеновской оптики при скользящих углах падения, когда $(\boldsymbol{m}_0\boldsymbol{n}) = \sin\varphi_0 \sim \chi^{1/2}$ ($\boldsymbol{m}_0$ — волновой вектор падающей на поверхность плоской волны, $\boldsymbol{n}$ — единичный вектор нормали к поверхности, направленный вглубь среды, φ_0 — угол падения), а в оптике получившем название случая наклонного падения, из ДУ необходимо определять не только величину волнового вектора в среде, но и его направление. При этом существенно, что волновой вектор в среде с поглощением или в условиях полного внешнего отражения (показатель преломления для рентгеновских длин волн $n<1$) является комплексным, а его действительная часть непараллельна мнимой: волна в среде становится неоднородной. Для решения задачи в этом случае, пользуясь однородностью задачи вдоль поверхности, полагают, что изменяться при переходе через границу может лишь нормальная к поверхности составляющая волнового вектора, т. е. в среде волновой вектор может быть представлен в виде

$$\boldsymbol{m} = \boldsymbol{m}_0 + \xi\boldsymbol{n}.$$

При этом

$$\boldsymbol{m}^2 = 1 + 2\sin\varphi_0\xi + \xi^2,$$

откуда сразу следует, что при нескользящих углах падения можно ограничиться линейной зависимостью $\boldsymbol{m}^2$ от величины преломления (или аккомодации) ξ, т. е. пренебречь квадратичными членами ξ^2 по сравнению с $2\sin\varphi_0\xi$.

В случае скользящего падения мнимая часть ξ, описывающая поглощение (затухание) волн, и действительная часть ξ, описывающая преломление и фазовые сдвиги между собственными волнами в среде, уже не определяются мнимой и действительной частями $\widehat{\chi}^{\perp}$ соответственно, как это имело место для нескользящих углов, а определяются $\mathrm{Im}(\widehat{\chi}^{\perp})$ и $\mathrm{Re}(\widehat{\chi}^{\perp})$ одновременно. Таким образом, при скользящих углах падения за счет эффектов преломления взаимодействие излучения со средой существенно изменяется, что требует существенной модификации кинематической [11, 12] и динамической [13, 14] теории. С физической точки зрения эти изменения связаны с формированием при скользящих углах падения зеркально отраженной волны.

В третьем приближении, т. е. фактически при точном решении дисперсионного уравнения, необходимо учитывать зависимость коэффициентов $\boldsymbol{m}\widehat{\chi}\boldsymbol{m}$, $\boldsymbol{m}\widehat{\widehat{\chi}}\boldsymbol{m}$ и самого тензора $\widehat{\chi}$ (при наличии пространственной дисперсии) от величины преломления ξ. Так как при обычных углах падения $\xi \sim \chi$, а при скользящих углах падения $\xi \sim \chi^{1/2}$, учет ξ при вычислении $\boldsymbol{m}\widehat{\chi}\boldsymbol{m}$ или $\boldsymbol{m}\widehat{\widehat{\chi}}\boldsymbol{m}$ будет соответствовать следующему порядку малости, которым мы уже пренебрегли при выводе дисперсионных соотношений.

Более сложным является вопрос об анизотропии взаимодействия и возможном усилении эффектов преломления при дальнейшем уменьшении угла скольжения. Анализ точного решения ДУ провести невозможно, так как в общем случае оно не имеет явного аналитического решения. Однако анализ влияния учета преломления на коэффициенты, а тем самым и на решение ДУ можно провести численно, методом итераций [15]. Анализ проводился в диапазоне $\chi \sim 10^{-4} \div 10^{-8}$ и показал, что итерационный процесс является быстро сходящимся (от 1–2 итераций при $\varphi_0 \sim 3\text{–}4\varphi_C$ до 30–40 итераций при $\varphi_0 \sim 0.01\text{–}0.02\varphi_C$, где $\varphi_C = \arcsin(|\chi_0|^{1/2})$ — критический угол полного внешнего отражения), при этом соотношение корней ДУ на первом ξ_i и последнем ξ_f итерационном шаге составляет величину $|(\xi_i-\xi_f)/\xi_i| < 0.001$.

Таким образом, подводя итог анализа, приходим к заключению, что малость восприимчивости среды в рентгеновском диапазоне длин волн ($\chi \sim 10^{-5} \div 10^{-7}$) позволяет пренебречь зависимостью коэффициентов дисперсионного уравнения от величины преломления ξ.

В случае возбуждения в кристалле N-волнового поля, уравнения Максвелла сводятся к системе из N векторных уравнений вида (3). Эта система определяет динамическое взаимодействие составляющих поля, устанавливающееся в результате многократных перерассеяний.

В двухволновом случае, когда в кристалле распространяются только проходящая и дифрагированная волны, уравнения (3) примут вид

$$(1+\boldsymbol{m}_1^{\times}\boldsymbol{m}_2^{\times})\boldsymbol{E}_1 = -\chi_{11}\boldsymbol{E}_1 - \chi_{12}\boldsymbol{E}_2, \qquad (5a)$$

$$(1+\boldsymbol{m}_2^{\times}\boldsymbol{m}_2^{\times})\boldsymbol{E}_2 = -\chi_{21}\boldsymbol{E}_1 - \chi_{22}\boldsymbol{E}_2, \qquad (5b)$$

$$(1+\boldsymbol{m}_1\boldsymbol{m}_1)\boldsymbol{B}_1 = \boldsymbol{m}_1^{\times}\chi_{11}\boldsymbol{m}_1^{\times}\boldsymbol{B}_1 + \boldsymbol{m}_1^{\times}\chi_{12}\boldsymbol{m}_2^{\times}\boldsymbol{B}_2, \qquad (6a)$$

$$(1+\boldsymbol{m}_2\boldsymbol{m}_2)\boldsymbol{B}_2 = \boldsymbol{m}_2^{\times}\chi_{21}\boldsymbol{m}_1^{\times}\boldsymbol{B}_1 + \boldsymbol{m}_2^{\times}\chi_{22}\boldsymbol{m}_2^{\times}\boldsymbol{B}_2, \qquad (6b)$$

где $\boldsymbol{m}_1 = \boldsymbol{m}_0 + \xi\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{m}_2 = \boldsymbol{m}_1 + \boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{H}$ — вектор обратной решетки в единицах ω/c ($H = 2\sin\theta_B$, θ_B — угол Брэгга), нижние индексы 1 и 2 соответствуют прошедшей и дифрагированной волнам. Следует отметить, что в системе (5) векторы электрического поля в кристалле $\boldsymbol{E}_j$ в общем случае непоперечны $(\boldsymbol{m}_j\boldsymbol{E}_j) \sim \chi$, причем члены, пропорциональные продольной части поля, имеют тот же порядок малости, что и остальные члены. При этом векторы магнитного поля являются поперечными, и для дальнейшего анализа оказывается удобнее использовать уравнения (6).

Дисперсионное уравнение системы (6)

$$\det\left\{(\lambda_1+\boldsymbol{A}_{11})-\boldsymbol{A}_{12}(\lambda_2+\boldsymbol{A}_{22})^{-1}\boldsymbol{A}_{21}\right\}=0, \qquad (7)$$

преобразуется к явному виду

$$\lambda_1^2\lambda_2^2+\lambda_1^2\lambda_2\widehat{\boldsymbol{A}}_{22t}+\lambda_1^2\overline{\overline{\boldsymbol{A}}}_{22t}+\lambda_1\widehat{\boldsymbol{A}}_{11t}\lambda_2^2+\lambda_1\widehat{\boldsymbol{A}}_{11t}\lambda_2\widehat{\boldsymbol{A}}_{22t}+$$
$$+\lambda_1\widehat{\boldsymbol{A}}_{11t}\overline{\overline{\boldsymbol{A}}}_{22t}+\overline{\overline{\boldsymbol{A}}}_{11t}\lambda_2^2+\overline{\overline{\boldsymbol{A}}}_{11t}\lambda_2\widehat{\boldsymbol{A}}_{22t}+\overline{\overline{\boldsymbol{A}}}_{11t}\overline{\overline{\boldsymbol{A}}}_{22t}-$$
$$-\operatorname{Sp}\Big\{\lambda_1\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\lambda_2\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}+\lambda_1\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\widehat{\boldsymbol{A}}_{22t}\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}-\lambda_1\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\widehat{\boldsymbol{A}}_{22}\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}+$$
$$+\widehat{\boldsymbol{A}}_{11t}\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\lambda_2\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}+\widehat{\boldsymbol{A}}_{11t}\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\widehat{\boldsymbol{A}}_{22t}\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}-\widehat{\boldsymbol{A}}_{11t}\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\widehat{\boldsymbol{A}}_{22}\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}-$$
$$-\widehat{\boldsymbol{A}}_{11}\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\lambda_2\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}-\widehat{\boldsymbol{A}}_{11}\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\widehat{\boldsymbol{A}}_{22t}\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}+\widehat{\boldsymbol{A}}_{11}\widehat{\boldsymbol{A}}_{12}\widehat{\boldsymbol{A}}_{22}\widehat{\boldsymbol{A}}_{21}\Big\}+$$
$$+\operatorname{Sp}\left\{\overline{\overline{\boldsymbol{A}}}_{21}\overline{\overline{\boldsymbol{A}}}_{12}\right\}=0, \qquad (8)$$

с учетом обозначений

$$\lambda_1=-(1-(\boldsymbol{m}_1\boldsymbol{m}_1))=\xi^2+2\xi\gamma_0,$$
$$\lambda_2=-(1-(\boldsymbol{m}_2\boldsymbol{m}_2))=\xi^2+2\xi\gamma_H+\zeta,$$
$$\gamma_0=(\boldsymbol{m}_0\boldsymbol{n}),\quad \gamma_{=}(\boldsymbol{m}_0+\boldsymbol{H},\boldsymbol{n}),\quad \zeta=2(\boldsymbol{m}_0\boldsymbol{H})+\boldsymbol{H}^2,$$
$$\boldsymbol{A}_{11}=\boldsymbol{m}_1^{\times}\chi_{11}\boldsymbol{m}_1^{\times},\quad \boldsymbol{A}_{12}=\boldsymbol{m}_1^{\times}\chi_{12}\boldsymbol{m}_2^{\times},$$
$$\boldsymbol{A}_{21}=\boldsymbol{m}_2^{\times}\chi_{21}\boldsymbol{m}_1^{\times},\quad \boldsymbol{A}_{22}=\boldsymbol{m}_2^{\times}\chi_{22}\boldsymbol{m}_2^{\times},$$

где нижний индекс t обозначает след тензора, черта над тензором обозначает взаимный тензор.

Таким образом, ДУ является уравнением 8-й степени относительно величины ξ и по основной теореме алгебры [16] имеет восемь корней ξ_j в комплексной плоскости. Следовательно, внутри кристалла могут распространяться восемь проходящих и восемь дифрагированных волн без разделения на собственные поляризации дифракционной задачи. При этом в случае толстого кристалла физический смысл имеют только решения, соответствующие волнам, затухающим вглубь кристалла, т. е. обладающие положительной мнимой частью $\operatorname{Im}\xi_j>0$.

Как показывает анализ уравнений типа (8), проведенный в работе [14], только четыре корня уравнения (8) имеют положительную мнимую часть, а четыре корня — отрицательную. Эти же результаты подтверждаются численным решением уравнения.

Нахождение собственных волн дифракционной задачи сводится к нахождению собственных векторов линейного оператора

$$(\lambda_1+\boldsymbol{A}_{11})-\boldsymbol{A}_{12}(\lambda_2+\boldsymbol{A}_{22})^{-1}\boldsymbol{A}_{21},$$

и детально разобрано как в общем виде [10, 17, 18].

Для нахождения амплитуд электрического и магнитного полей в среде уравнения (5), (6) необходимо дополнить соответствующими граничными условиями, в общем виде состоящими в удовлетворении условий непрерывности тангенциальных составляющих электрического и магнитного полей $\boldsymbol{E}$ и $\boldsymbol{H}$, а также нормальных составляющих векторов электрической и магнитной индукции $\boldsymbol{D}$ и $\boldsymbol{B}$ [9]. В теории дифракции из условия однородности решения вдоль поверхности эти условия записываются отдельно для проходящих и дифрагированных волн (см., например, [14]):

$$\left.\begin{aligned}&[(\boldsymbol{E}_0+\boldsymbol{E}_S)\times\boldsymbol{n}]=\sum_i\left[\boldsymbol{E}_1^j\times\boldsymbol{n}\right],\\&(\boldsymbol{D}_0+\boldsymbol{D}_S,\boldsymbol{n})=\sum_i\left(\boldsymbol{D}_1^j,\boldsymbol{n}\right),\end{aligned}\right. \qquad (9a)$$

$$\left.\begin{aligned}&[(\boldsymbol{H}_0+\boldsymbol{H}_S)\times\boldsymbol{n}]=\sum_i\left[\boldsymbol{H}_1^j\times\boldsymbol{n}\right],\\&(\boldsymbol{B}_0+\boldsymbol{B}_S,\boldsymbol{n})=\sum_i\left(\boldsymbol{B}_1^j,\boldsymbol{n}\right),\end{aligned}\right. \qquad (9b)$$

$$\left.\begin{aligned}&[(\boldsymbol{E}_{0D}+\boldsymbol{E}_{SD})\times\boldsymbol{n}]=\sum_i\left[\boldsymbol{E}_2^j\times\boldsymbol{n}\right],\\&(\boldsymbol{D}_{0D}+\boldsymbol{D}_{SD},\boldsymbol{n})=\sum_i\left(\boldsymbol{D}_2^j,\boldsymbol{n}\right),\end{aligned}\right. \qquad (10a)$$

$$\left.\begin{aligned}&[(\boldsymbol{H}_{0D}+\boldsymbol{H}_{SD})\times\boldsymbol{n}]=\sum_i\left[\boldsymbol{H}_2^j\times\boldsymbol{n}\right],\\&(\boldsymbol{B}_{0D}+\boldsymbol{B}_{SD},\boldsymbol{n})=\sum_i\left(\boldsymbol{B}_2^j,\boldsymbol{n}\right),\end{aligned}\right. \qquad (10b)$$

где индексы 0, S и 1 обозначают падающую, зеркально-отраженную и проходящую в кристалл волны, индексы $0D$, SD и 2 — условную «падающую в направлении дифрагированной волны» (вводим формально для аналогии с (9) $\boldsymbol{E}_{0D}=\boldsymbol{H}_{0D}=\boldsymbol{D}_{0D}=\boldsymbol{B}_{0D}=0$), зеркально-дифрагированную и дифрагированную в кристалле волны соответственно, а индекс i соответствует различным собственным волнам в кристалле.

Такая задача решается следующим образом: поскольку в общем случае не представляется возможным выразить отраженную и проходящую волны через падающую, то выражают, наоборот, падающую и отраженную волны через поле в среде, которое может быть, в принципе, сколь угодно сложным. Полученная векторная связь позволяет найти скалярные коэффициенты разложения поля в среде по собственным поляризациям и определить тем самым коэффициенты отражения и пропускания. Для плоскостей проходящих (11) и дифрагированных (12) волн эта векторная связь может быть представлена в виде

$$\boldsymbol{H}_0=-\frac{1}{\xi_S}\sum_i\Big\{\left(\xi_1^j-\xi_S\right)\left[\boldsymbol{m}_0\times\boldsymbol{E}_1^j\right]-$$
$$-\left(\boldsymbol{m}_1^j\boldsymbol{E}_1^{(i)}\right)[\boldsymbol{m}_0\times\boldsymbol{n}]\Big\}, \qquad (11a)$$

$$\boldsymbol{H}_S=\frac{1}{\xi_S}\sum_i\left\{\xi_1^j\left[\boldsymbol{m}_S\times\boldsymbol{E}_1^j\right]-\left(\boldsymbol{m}_1^j\boldsymbol{E}_1^j\right)[\boldsymbol{m}_S\times\boldsymbol{n}]\right\}, \qquad (11b)$$

$$\boldsymbol{H}_{0D}=-\frac{1}{\xi_{SD}}\sum_i\Big\{\left(\xi_2^j-\xi_{SD}\right)\left[\boldsymbol{m}_{0D}\times\boldsymbol{E}_2^j\right]-$$
$$-\left(\boldsymbol{m}_2^{(i)}\boldsymbol{E}_2^j\right)[\boldsymbol{m}_{0D}\times\boldsymbol{n}]\Big\}, \qquad (12a)$$

$$\boldsymbol{H}_{SD}=\frac{1}{\xi_Sd}\sum_i\left\{\xi_2^j\left[\boldsymbol{m}_{SD}\times\boldsymbol{E}_2^j\right]-\left(\boldsymbol{m}_2^j\boldsymbol{E}_2^j\right)[\boldsymbol{m}_{SD}\times\boldsymbol{n}]\right\}, \qquad (12b)$$

где $\xi_{1,2}^{(i)}$, ξ_S, ξ_{SD} — поправки на преломление волновых векторов проходящих и зеркальных волн:

$$\boldsymbol{m}_S=\boldsymbol{m}_0+\xi_S\boldsymbol{n},\quad \boldsymbol{m}_1^{(i)}=\boldsymbol{m}_0+\xi_1^{(i)}\boldsymbol{n},\quad \boldsymbol{m}_{SD}=\boldsymbol{m}_{0D}+\xi_{SD}\boldsymbol{n},$$

$$\boldsymbol{m}_2^{(i)} = \boldsymbol{m}_{0D} + \xi_2^{(i)}\boldsymbol{n}, \quad \boldsymbol{m}_2^{(i)} = \boldsymbol{m}_1^{(i)} + \boldsymbol{H},$$

$$\xi_2^{(i)} = \xi_1^{(i)} + (\gamma_0 + \psi_B) - \left[(\gamma_0 + \psi_B)^2 - \alpha\right]^{1/2},$$

где $\psi_B = 2\sin\psi\sin\theta_B$ — эффективный параметр наклона отражающих плоскостей, характеризующий угол наклона отражающих плоскостей по отношению к нормали $\boldsymbol{n}$ (z-проекция вектора обратной решетки $H_z = -H\sin\psi$), параметр $\alpha = 1 - (m_0 + H)^2/m_0^2 = 2(\theta - \theta_B)\sin 2\theta_B$ характеризует угловую отстройку падающего излучения от точного угла Брэгга θ_B, а θ — угол между направлением падающего излучения и отражающими атомно-кристаллическими плоскостями. Комплексные поправки $\xi_{1,2}^{(i)}$ определяются из дисперсионного уравнения, являющегося уравнением 8-й степени для каждой собственной поляризации.

Решение задачи динамической теории в наиболее общем случае скользящей некомпланарной геометрии является весьма громоздкой задачей. Однако ситуация значительно упрощается в компланарной геометрии — в этом случае собственные поляризации дифракционной и граничной задачи совпадают [3], и граничная задача может решаться в скалярном виде отдельно для σ- и π-поляризаций излучения.

Заключение

В настоящей работе на основе прямых методов тензорного исчисления получены основные уравнения динамической теории резонансной дифракции рентгеновского синхротронного излучения. Проведен анализ дисперсионного уравнения и показано, что в рентгеновском диапазоне длин волн можно пренебречь зависимостью коэффициентов дисперсионного уравнения от величины аккомодации (преломления) при любых углах скольжения падающего излучения, что позволяет свести дисперсионное уравнение к алгебраическому уравнению 8-й степени.

Автор выражает глубокую благодарность М. А. Андреевой, В. А. Бушуеву и Е. Н. Овчинниковой за интерес к работе и плодотворные обсуждения полученных результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 12-02-00924-а и 13-02-00760-а).

Список литературы

1. *Дмитриенко В.Е., Овчинникова Е.Н.* // Кристаллография. 2003. **48**, № 6. С. 59.
2. *Hodeau J.L., Favre-Nicolin V., Bos S.* et al. // Chem. Rev. 2001. **101**. P. 1843.
3. *Беляков В.А., Дмитриенко В.Е.* // Успехи физ. наук. 1989. **158**, № 4. С. 679.
4. *Pettifer R.F., Collins S.P., Laundy D.* // Nature. 2008. **454**. P. 196.
5. *Орешко А.П.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 2007. № 3. С. 49.
6. *Андреева М.А., Борисова С.Ф.* // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1982. № 3. С. 55.
7. *Андреева М.А., Кузьмин Р.Н.* Мёссбауэровская гамма-оптика. М., 1982.
8. *Федоров Ф.И., Филиппов В.В.* Отражение и преломление света прозрачными кристаллами. Минск, 1976.
9. *Агранович В.М., Гинзбург В.Л.* Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М., 1979.
10. *Гантмахер Ф.Р.* Теория матриц. М., 1953.
11. *Андреева М.А.* // Поверхность. 1988. № 12. С. 17.
12. *Андреева М.А.* // Вестник Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1989. № 3. С. 52.
13. *Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М.* Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев. М., 1989.
14. *Бушуев В.А., Орешко А.П.* Зеркальное отражение рентгеновских лучей в условиях скользящей дифракции. М., 2002.
15. *Демидович Б.П., Марон И.А.* Основы вычислительной математики. М., 1966.
16. *Лаврентьев М.А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного. М., 1973.
17. *Гельфанд И.М.* Лекции по линейной алгебре. М., 1971.
18. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике. М., 1978.

The covariant approach in the dynamical theory of the resonant X-ray diffraction

A. P. Oreshko

Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.
E-mail: ap.oreshko@physics.msu.ru.

On the basis of the straightlines (coordinate-free) tensor calculus methods general equations of the dynamical theory of the X-ray synchrotron radiation resonant diffraction are obtained.

Keywords: X-ray dynamical diffraction, resonant scattering.
PACS: 78.70.Ck.
Received 14 January 2013.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 3(2013).

Сведения об авторе

Орешко Алексей Павлович — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-12-26; e-mail: ap.oreshko@physics.msu.ru.