

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

538.91

ЭТЮД ОБ ОДНОМЕРНОМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ*В. К. Игнатович*

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	145
2. Рекуррентные соотношения. Полубесконечный периодический потенциал. Амплитуда отражения	146
3. Блоховский волновой вектор	148
4. Периодический потенциал с конечным числом периодов	148
5. Пример 1. Прямоугольный потенциал	149
6. Пример 2. Потенциал Кронига — Пенни	150
7. Соотношение между фазами амплитуд r и t	152
8. Пример 3. Случай двухатомного кристалла	154
9. Дифракция Лауэ	156
10. Заключение	158
Список литературы	158

1. ВВЕДЕНИЕ

Периодический потенциал почти вездесущ, когда речь идет о физике твердого тела. Наиболее прямое отношение он имеет к кристаллам и многослойным системам, которые в последнее время находят все более широкое применение в технике. Во многих случаях и сами кристаллы могут рассматриваться как многослойные системы, т.е. представляться одномерным периодическим потенциалом.

Решение задачи о поведении частицы в одномерном периодическом потенциале (электрона, если речь идет о зонной теории твердого тела, или, например, нейтрона, если речь идет о рассеянии частицы на кристалле) известно уже давно, однако метод решения этой задачи все еще далек от совершенства и с тех пор, как он был сформулирован Матье ¹, Флоке ² и применительно к квантовой механике Блохом ³, не претерпел почти никаких изменений. Иногда, правда, делались попытки решить эту задачу с помощью рекуррентных соотношений (см., например, ⁴⁻⁶), но они тоже еще были далеки от совершенства и приводили к довольно громоздким выражениям. В настоящей заметке используется именно метод рекуррентных соотношений и с его помощью решение задачи о поведении частицы в одномерном периодическом потенциале приведено к наиболее простому виду. Правда, предполагается, что амплитуды прохождения и отражения t и r для одного периода известны и являются скалярными функциями энергии частицы.

Реальные задачи обычно трехмерны, но они могут в определенной степени сводиться к одномерным. В качестве примера можно указать случай дифракции Лауэ на монокристалле, который будет коротко рассмотрен в конце заметки. В некоторых случаях трехмерность может быть учтена путем перехода от скалярных функций t и r к матричным.

2. РЕКУРРЕНТНЫЕ СООТНОШЕНИЯ. ПОЛУБЕСКОНЕЧНЫЙ ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ. АМПЛИТУДА ОТРАЖЕНИЯ

Представим себе, что мы имеем идеальный полубесконечный периодический потенциал (рис. 1), в котором периоды разделены бесконечно узкими щелями шириной ε , в которых потенциал полагается равным нулю. Физически очевидно, что бесконечно узкие щели никак не сказываются на поведении частицы, но их введение позволяет контролировать движение частицы, не интересуясь тем, какова ее реальная волновая функция в том или ином конкретном потенциале. (Оговоримся, что хотя речь здесь пошла о волновой функции, т.е. конкретности ради мы будем иметь ввиду квантовую механику,

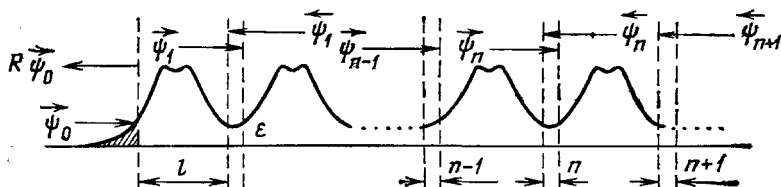


Рис. 1

нижеприведенные рассуждения справедливы и в других областях физики, где рассматриваются периодические слоистые среды: в оптике, акустике, гидродинамике и т. д.). Реальный потенциал обычно не бывает идеально периодическим, поскольку при наличии дальнедействующих сил крайние периоды отличаются от внутренних. Однако это отличие можно учесть, введя поверхностный потенциал и рассчитав рассеяние на этом потенциале отдельно.

Примем, что рассеяние на отдельно взятом периоде нам известно, т.е. известна амплитуда отражения $r(k)$ и прохождения $t(k)$, если справа и слева от отдельно взятого периода имеется вакуум; здесь k — волновой вектор падающего нейтрона (в дальнейшем для конкретности всегда будем иметь в виду рассеяние именно нейтронов — это отражает просто специализацию автора). Если отдельно взятый период не симметричен относительно своего центра, то следует различать случай падения на потенциал слева (амплитуды обозначают \vec{r} , \vec{t}) и справа (амплитуды $-\vec{r}$, \vec{t}). В квантовой механике при не-симметричном потенциале имеют место соотношения $\vec{t} = \vec{t} = t$, $\vec{r} = \vec{r} \times \times \text{erx}(2i\eta) = r e^{i\eta}$, где η — некоторая фаза, вещественная при вещественном потенциале. Дальше будет показано, что эта фаза наследуется в амплитуде отражения от всего периодического потенциала с конечным или бесконечным числом периодов.

Рассмотрим n -ю щель. Обозначим через $\vec{\psi}_n$ амплитуду волны, падающей на правую стенку щели, за которой находится оставшееся бесконечное число периодов. Амплитуду отражения от полубесконечного периодического потенциала обозначим \vec{R} , тогда волна, отраженная от правой стенки n -й щели, будет равна

$$\vec{\psi}_n = \vec{R} \vec{\psi}_n. \quad (1)$$

Волну $\vec{\psi}_n$ можно выразить через $\vec{\psi}_{n-1}$ воспользовавшись рекуррентным соотношением

$$\vec{\psi}_n = \vec{t} \vec{\psi}_{n-1} + \vec{r} \vec{\psi}_n. \quad (2)$$

Здесь первое слагаемое соответствует волне, прошедшей слева направо через один период, расположенный между n -й и $(n-1)$ -й щелью, а второе — волне,

отраженной от этого же периода слева. Из (1) и (2) следует

$$\frac{\vec{\Psi}_n}{\vec{\Psi}_{n-1}} = (1 - \overleftarrow{r}\overrightarrow{R})^{-1} \overleftarrow{t}. \quad (3)$$

Определим теперь волны $\overleftarrow{\Psi}_{n-1}$, для которой можно написать соотношения, аналогичные (1) и (2):

$$\overleftarrow{\Psi}_{n-1} = \overrightarrow{R}\overrightarrow{\Psi}_{n-1} = \overrightarrow{r}\overrightarrow{\Psi}_{n-1} + \overleftarrow{t}\overleftarrow{\Psi}_n. \quad (4)$$

Отсюда с учетом (3) следует

$$\frac{\overleftarrow{\Psi}_{n-1}}{\overrightarrow{\Psi}_{n-1}} = \overrightarrow{R} = \overrightarrow{r} + \overleftarrow{t}\overrightarrow{R} (1 - \overleftarrow{r}\overrightarrow{R})^{-1} \overleftarrow{t}. \quad (5)$$

Таким образом, для \overrightarrow{R} и, аналогично, для \overleftarrow{R} имеем уравнения

$$\overrightarrow{R} = \overrightarrow{r} + \overleftarrow{t}\overrightarrow{R} (1 - \overleftarrow{r}\overrightarrow{R})^{-1} \overleftarrow{t}, \quad (6a)$$

$$\overleftarrow{R} = \overleftarrow{r} + \overrightarrow{t}\overleftarrow{R} (1 - \overrightarrow{r}\overleftarrow{R})^{-1} \overrightarrow{t}. \quad (6b)$$

Подставив сюда $\overleftarrow{r} = \overrightarrow{r} \exp(2i\eta) = r \exp(i\eta)$, получим $\overleftarrow{R} = \overrightarrow{R} \exp(2i\eta)$, т.е. фаза η действительно наследуется.

Умножив обе части уравнения (6a) на $\exp(i\eta)$ и обозначив $R = \overrightarrow{R} \exp(i\eta)$, приведем уравнение (6a) к виду

$$R = r + tR (1 - rR)^{-1}t, \quad (6в)$$

характерному для симметричного потенциала. В случае скалярного потенциала уравнение (6) представляет собой алгебраическое квадратное уравнение

$$R^2 - \frac{2R(r^2 + 1 - t^2)}{2r} + 1 = 0. \quad (7)$$

Корни уравнения

$$x^2 - 2px + 1 = 0 \quad (8)$$

можно представить следующим образом:

$$x_{1,2} = [(p + 1)^{1/2} \mp (p - 1)^{1/2}] [(p + 1)^{1/2} \pm (p - 1)^{1/2}]^{-1}. \quad (9)$$

Очевидно, что эти корни взаимно обратны: $x_2 = 1/x_1$. В случае уравнения (7) имеем

$$p \pm 1 = \frac{(r \pm 1)^2 - t^2}{2r}, \quad (10)$$

поэтому

$$R = \frac{[(r+1)^2 - t^2]^{1/2} - [(r-1)^2 - t^2]^{1/2}}{[(r+1)^2 - t^2]^{1/2} + [(r-1)^2 - t^2]^{1/2}}. \quad (11a)$$

Из двух возможных корней выбран тот, который приводит к нулевой амплитуде отражения, если периоды фиктивны, т.е. $r = 0$. Если же $r = \pm 1$, а $t = 0$, то и $R = \pm 1$.

Для несимметричного скалярного потенциала получаются, как легко проверить, следующие выражения:

$$\overrightarrow{R} = \left(\frac{\overrightarrow{r}}{\overleftarrow{r}}\right)^{1/2} R, \quad \overleftarrow{R} = \left(\frac{\overleftarrow{r}}{\overrightarrow{r}}\right)^{1/2} R, \quad (11b)$$

где R дается выражением (11a), в котором

$$r = \left(\overrightarrow{r}\overleftarrow{r}\right)^{1/2}. \quad (12)$$

3. БЛОХОВСКИЙ ВОЛНОВОЙ ВЕКТОР

Полная волновая функция внутри периодического потенциала представляется в виде $\Psi(x) = \varphi(x) \exp(iqx)$, где $\varphi(x)$ — периодическая функция, а q — так называемый блоховский волновой вектор. Чтобы найти его величину, достаточно сравнить волновую функцию в двух соседних периодах. При произвольном потенциале найти волновую функцию в одном периоде не всегда возможно. Но здесь нас снова выручает щель, поскольку она является частью периода, а в ней, например в n -й щели, волновая функция равна

$$\psi_n = \vec{\psi}_n + \overleftarrow{\psi}_n = \exp(iql) \psi_{n-1} = \exp(iql) (\vec{\psi}_{n-1} + \overleftarrow{\psi}_{n-1}). \quad (13a)$$

Поскольку волны $\vec{\psi}$ и $\overleftarrow{\psi}$ линейно независимы, то соотношение (13a) справедливо для каждой из них по отдельности:

$$\vec{\psi}_n = \exp(iql) \vec{\psi}_{n-1}, \quad \overleftarrow{\psi}_n = \exp(iql) \overleftarrow{\psi}_{n-1}. \quad (13b)$$

Воспользовавшись этим, перепишем уравнение (4) в виде

$$\overleftarrow{\psi}_{n-1} = [1 - \overleftarrow{t} \exp(iql)]^{-1} \overrightarrow{r} \vec{\psi}_{n-1}, \quad (14)$$

а подставив (14) в (2), с учетом (13b) получим

$$\exp(iql) = \overrightarrow{t} + \overleftarrow{r} \exp(iql) [1 - \overleftarrow{t} \exp(iql)]^{-1} \overrightarrow{r}. \quad (15)$$

В случае скалярного потенциала уравнение (15) приводится к виду

$$X^2 - \frac{2X(t^2 + 1 - r^2)}{2t} + 1 = 0, \quad (16)$$

где введено обозначение $X = \exp(iql)$, $r = (\overrightarrow{r}\overleftarrow{r})$, $t = \overrightarrow{t} = \overleftarrow{t}$. Из двух решений уравнения (16) выбираем такое,

$$\exp(iql) = \frac{[(t+1)^2 - r^2]^{1/2} + [(t-1)^2 - r^2]^{1/2}}{[(t+1)^2 - r^2]^{1/2} - [(t-1)^2 - r^2]^{1/2}}, \quad (17)$$

которое в пустом пространстве с фиктивным периодом ($r = 0$, $t = \exp(ikl)$) приводит к $q = k$, где k — волновой вектор свободного нейтрона. Сравнение (17) с (11a) показывает, что

$$X(r, t) = R^{-1}(t, r). \quad (18)$$

4. ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ С КОНЕЧНЫМ ЧИСЛОМ ПЕРИОДОВ

Чтобы определить амплитуду отражения R_N и амплитуду пропускания T_N периодического потенциала с N периодами, можно воспользоваться тем фактом, что потенциал, периодичный с периодом l , периодичен также и с периодом Nl . Поэтому в уравнениях (6), (7), (15), (16) можно r и t заменить на R_N и T_N . При этом в качестве периода l в (15) и (16) следует взять Nl . В результате получим уравнения

$$R^2 - \frac{2R(R_N^2 + 1 - T_N^2)}{2R_N} + 1 = 0, \quad (19)$$

$$\exp(2iqLN) - 2 \exp(iqlN) (T_N^2 + 1 - R_N^2) (2T_N)^{-1} + 1 = 0. \quad (20)$$

Поскольку R и $\exp(iql)$, а значит, и $\exp(iqlN)$, известны и выражаются с помощью формул (11a), (17), то уравнения (19), (20) можно разрешить относительно R_N и T_N . После простых алгебраических преобразований получаем

$$R_N = R [1 - \exp(2iqLN)] [1 - R^2 \exp(2iqLN)]^{-1}, \quad (21a)$$

$$T_N = \exp(iqlN) (1 - R^2) [1 - R^2 \exp(2iqLN)]^{-1}. \quad (21b)$$

Эти два выражения, как и должно быть, переходят друг в друга при замене $R \leftrightarrow \exp(iqlN)$ или $R \leftrightarrow \exp(-iqlN)$. В случае несимметричного потенциала величину R в (21) следует заменить на $(\vec{R}/\overleftarrow{R})^{1/2}$. Кроме того, амплитуды отражения \vec{R}_N и \overleftarrow{R}_N будут содержать множители $(\vec{R}/\overleftarrow{R})^{1/2}$ и $(\overleftarrow{R}/\vec{R})^{1/2}$ соответственно.

Обратим внимание (это нам понадобится в дальнейшем для доказательства одной общей теоремы), что при действительных R и q фаза R_N отличается от фазы T_N на $\pm\pi/2$.

5. ПРИМЕР 1. ПРЯМОУГОЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

Если потенциал одного периода достаточно прост, то можно найти аналитический вид амплитуд r и t . Рассмотрим сначала прямоугольную потенциальную ступеньку высоты U_0 , показанную сплошной линией на рис. 2. Запишем уравнение Шрёдингера для скалярной частицы в таком потенциале:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} - [u(x) - k^2]\Psi(x) = 0, \quad (22)$$

где потенциал $U(x)$ представляется с помощью ступенчатой функции θ :

$$u(x) = u_0 \theta(x \geq 0), \quad (23)$$

которая равна единице при выполнении условия, указанного в аргументе, и нулю в противном случае. Решение уравнения (22) можно искать так:

$$\Psi(x) = (e^{ikh} + Re^{-ikh})\theta(x < 0) + \tau e^{ik'x}\theta(x > 0). \quad (24)$$

Коэффициенты R и τ определяются из условия непрерывности функции и ее производной на скачке потенциала

$$1 + R = \tau, \quad k(1 - R) = k'\tau. \quad (25)$$

Отсюда находится амплитуда отражения

$$R = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad k' = (k^2 - u_0)^{1/2}, \quad (26)$$

и волновая функция внутри барьера

$$\Psi(x) = \tau \exp(ik'x) = \frac{2k}{k + k'} \exp(ik'x). \quad (27)$$

Определим теперь амплитуды r и t для одного прямоугольного барьера шириной l , отдельного от всей прямоугольной ступеньки первой бесконечно узкой щелью, указанной на рис. 2 штрихами. Можно, как и раньше, искать эти коэффициенты, требуя непрерывность волновой функции и ее производной на обоих краях прямоугольного потенциала. При этом возникает система из четырех уравнений с четырьмя неизвестными, которую решать не трудно, но утомительно. Проще, однако, снова воспользоваться методом рекуррентных соотношений.

Обозначим волну, падающую на правый край прямоугольного барьера изнутри него, через $\tilde{\psi}_1^+$. Эта волна складывается из волны, прошедшей через левый скачок потенциала $\tau \exp(ik'l)$, и волн, переотраженных от обоих краев, и т. д.:

$$\tilde{\psi}_1^+ = \tau e^{ik'l} + e^{ik'l} \tilde{R} e^{ik'l} \tilde{R} \tilde{\psi}_1^+; \quad (28)$$

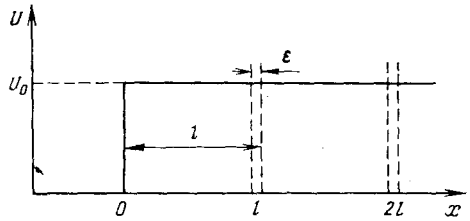


Рис. 2

здесь \tilde{R} — амплитуда отражения от края потенциала изнутри барьера. Она определяется точно так же, как (26), и равна

$$\tilde{R} = \frac{k' - k}{k' + k} = -R. \quad (29)$$

Из (28) с учетом (29) легко находим

$$\tilde{\psi}_1^\dagger = [1 - R^2 \exp(2ik'l)]^{-1} \tau \exp(ik'l). \quad (30)$$

После чего определяем амплитуду отражения от всего прямоугольного барьера

$$r = R + \tilde{\tau} e^{ik'l} \tilde{R} \tilde{\psi}_1^\dagger = R (1 - e^{2ik'l}) (1 - R^2 e^{2ik'l})^{-1}, \quad (31)$$

$$\tilde{\tau} = 1 + \tilde{R} = \frac{2k'}{k' + k}.$$

Амплитуда прохождения t равна

$$t = \tilde{\tau} \tilde{\psi}_1^\dagger = e^{ik'l} (1 - R^2) (1 - R^2 e^{2ik'l})^{-1}. \quad (32)$$

Отметим, что при действительном потенциале u_0 и $k^2 > u_0$ амплитуда R действительна, и потому фаза r отличается от фазы t на $\pm\pi/2$. При $k^2 < u_0$ величина k' — чисто мнимая, а R имеет вид $\exp(-2i\chi)$, поэтому, как легко видеть из (31) и (32), фазы r и t снова отличаются на $\pm\pi/2$.

Отметим также, что при $l \rightarrow 0$ из (31) и (32) следует, что $r \rightarrow 0$, а $t \rightarrow 1$, т. е. бесконечно узкий барьер, а также и бесконечно узкая потенциальная яма не сказываются на поведении частицы, если высота барьера или глубина ямы конечна. Это доказывает, что мы действительно имеем право вводить бесконечно узкие щели в потенциал, не оказывая влияния на динамику частицы.

Очевидно, что, поставив рядом бесконечное число прямоугольных барьеров ширины l с бесконечно узкими промежутками между ними, мы получим полубесконечный потенциал, который представляет собой простую потенциальную ступеньку. Амплитуда отражения от нее совпадает с (26). Если же поставить рядом N таких барьеров, то амплитуды R_N и T_N , рассчитанные по формулам (21), совпадут с (31) и (32) с заменой q на k' , поскольку блоховский волновой вектор q , вычисленный в соответствии с (17), будет в точности равен k' .

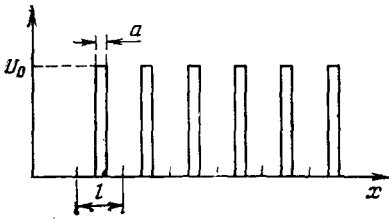


Рис. 3

6. ПРИМЕР 2. ПОТЕНЦИАЛ КРОНИГА — ПЕННИ

Рассмотрим теперь потенциал, показанный на рис. 3, причем будем устремлять высоту прямоугольного барьера к бесконечности: $U_0 \rightarrow \infty$, а ширину a к нулю так, чтобы $U_0 a$ была постоянной величиной $U_0 a = 2p_0$. В этом случае получим потенциал

$$U(x) = 2p_0 \delta(x). \quad (33)$$

Волновая функция уравнения Шрёдингера с потенциалом (33) непрерывна в точке $x = 0$, а ее производная имеет в этой точке скачок, равный $2p_0$. Из этих двух условий определяются амплитуды отражения \tilde{r} и пропускания \tilde{t} потенциала (33):

$$\tilde{r} = \frac{p_0}{ik - p_0}, \quad \tilde{t} = \frac{ik}{ik - p_0}. \quad (34)$$

Потенциал Кронига — Пенни представляет собой сумму потенциалов (33), отстоящих друг от друга на расстояние l . Обсудим, как выделить период

в нем. Например, период можно выбрать несимметричным:

$$u(x) = 2p_0 \delta(x) \theta(0 \leq x < l),$$

поместив δ -функцию в начале периода. В этом случае $\vec{r} = \tilde{r}$, а $\vec{r} = \tilde{r} \exp(2ikl)$. Чтобы период был симметричен, необходимо поместить δ -функцию в его середине:

$$u(x) = 2p_0 \theta(0 \leq x \leq l) \delta(x - l/2).$$

В этом случае будем иметь

$$\vec{r} = \overleftarrow{r} = r = \tilde{r} \exp(ikl), \quad \vec{t} = \overleftarrow{t} = t = \tilde{t} \exp(ikl). \quad (35)$$

Подставив (35) в (11) и (17), получим

$$R = \frac{(x+p \operatorname{tg} x)^{1/2} - (x-p \operatorname{ctg} x)^{1/2}}{(x+p \operatorname{tg} x)^{1/2} + (x-p \operatorname{ctg} x)^{1/2}}, \quad x = \frac{kl}{2}, \quad p = p_0 \frac{l}{2}, \quad (36a)$$

$$\exp(iql) = \frac{(x \operatorname{ctg} x + p)^{1/2} + i(x \operatorname{tg} x - p)^{1/2}}{(x \operatorname{ctg} x + p)^{1/2} - i(x \operatorname{tg} x - p)^{1/2}}. \quad (37a)$$

В случае одноатомных кристаллов $p_0 = u_0 l/2$, $u_0 = 4\pi N_0 b$, N_0 — число атомов в единице объема, b — когерентная длина рассеяния.

Выражения (36a), (37a) имеют точки ветвления при $x = x_n = \pi n/2$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Вблизи точки x_n удобно ввести регулярную в x_n функцию

$$f_n = \alpha_n \operatorname{ctg} \alpha_n \approx 1 - \frac{\alpha_n^2}{3} + \dots, \quad \alpha_n = x - x_n,$$

и переписать выражения (36a) (37a) в более простом виде. При $\alpha_n \geq 0$ имеем

$$R = e^{i\pi n} \frac{[\alpha_n + (p\alpha_n^2/f_n)]^{1/2} - (x\alpha_n - pf_n)^{1/2}}{[\alpha_n + (p\alpha_n^2/f_n)]^{1/2} + (x\alpha_n - pf_n)^{1/2}}, \quad (36b)$$

$$q = k_n + \frac{2}{l} \arcsin \left[\sin \alpha_n \cdot \left(1 - \frac{pf_n}{x\alpha_n} \right)^{1/2} \right], \quad (37b)$$

где $k_n = \pi n/l$. При $\alpha_n \leq 0$ имеем

$$R = \exp[i\pi(n-1)] \frac{(x|\alpha_n| + pf_n)^{1/2} - [x|\alpha_n| - (p\alpha_n^2/f_n)]^{1/2}}{(x|\alpha_n| + pf_n)^{1/2} + [x|\alpha_n| + (p\alpha_n^2/f_n)]^{1/2}}, \quad (36b)$$

$$R = k_{n-1} + \frac{2}{l} \arcsin \left[\sin \alpha_{n-1} \cdot \left(1 + \frac{p\alpha_n}{x f_n} \right)^{1/2} \right]. \quad (37b)$$

Из (36b) следует, что при $p > 0$ и $0 < x\alpha_n < pf_n$ имеет место полное отражение. Здесь

$$R = \exp(i\pi n + 2i\chi), \quad \chi = -\arccos \left\{ \left(\frac{x\alpha_n}{p} \right)^{1/2} \left[\frac{f + (p\alpha_n/x)}{f_n^2 + \alpha_n^2} \right]^{1/2} \right\}, \quad (36\Gamma)$$

$$q = k_n + i\Delta_n, \quad \Delta_n = \operatorname{arsh} \left[\sin \alpha_n \cdot \left(\frac{pf_n}{x\alpha_n} - 1 \right)^{1/2} \right]. \quad (37\Gamma)$$

С ростом k внутри диапазона полного отражения χ растет от $-\pi/2$ до 0. В случае $p < 0$ полное отражение, как это следует из (36b), имеет место при $pf_n < x\alpha_n < 0$. Соответствующие формулы получаются из (36\Gamma), (37\Gamma) путем замены $\alpha_n \rightarrow |\alpha_n|$ и $p \rightarrow |p|$. Ширина области полного отражения определяется из уравнения $x\alpha_n = pf_n$. С точностью до $u_0 l^2$ она равна

$$|k^2 - k_n^2| = 2|u_0| \left[1 - \frac{u_0 l^2}{(\pi n)^2} \right]^{1/2}. \quad (38)$$

Если пренебречь поправками $\sim u_0 l^2$, то вблизи брэгговского отражения формулы (36a) и (37a) можно приближенно представить в виде

$$R = (-1)^n \frac{(k - k_n^2)^{1/2} - (k^2 - k_n^2 - 2u_0)^{1/2}}{(k^2 - k_n^2)^{1/2} + (k^2 - k_n^2 - 2u_0)^{1/2}}, \quad (36\delta)$$

$$q \approx [k_n^2 \mp (k^2 - k_n^2)^{1/2} (k^2 - k_n^2 - 2u_0)^{1/2}]^{1/2}, \quad (37\delta)$$

причем знак под корнем следует выбирать так, чтобы было при $u_0 > 0$ всегда $q < k$, а при $u_0 < 0$ всегда $q > k$. Заметим, что значение q однозначно определяется величиной k , а не двузначно, как это следует из многочисленных учебников.

Область $0 < x \leq \pi/2$ следует рассмотреть отдельно. Здесь выражения (36а) и (37б) удобно привести к виду

$$R = \frac{x [1 + (p/f)]^{1/2} - (x^2 - pf)^{1/2}}{x [1 + (p/f)]^{1/2} + (x^2 - pf)^{1/2}}, \quad f = x \operatorname{ctg} x, \quad (36e)$$

$$\exp(iql) = \frac{(f^2 + pf)^{1/2} + i(x^2 - pf)^{1/2}}{i(f^2 + pf)^{1/2} - i(x^2 - pf)^{1/2}}. \quad (37e)$$

Область полного отражения определяется соотношением $x^2 < pf$, откуда находится характерная для ультрахолодных нейтронов граничная энергия

$$x_{\text{lim}}^2 = pf \rightarrow k_{\text{lim}}^2 \approx \frac{u_0}{1 + (u_0 l^2 / 12)}. \quad (39)$$

Из (37e) следует, что

$$\cos \frac{ql}{2} = \cos x \left(1 + \frac{p}{f}\right)^{1/2}, \quad \sin ql/2 = \sin x \left(1 - \frac{pf}{x^2}\right)^{1/2}. \quad (37ж)$$

Поэтому (36e) можно представить в виде

$$R = \frac{\sin [(k-q)l/2]}{\sin [(k+q)l/2]}. \quad (36ж)$$

Эта формула естественным образом продолжается на всю область изменения k . В частности, внутри интервала брэгговского отражения из (36ж) следует приближенное равенство

$$R = (-1)^n \frac{\alpha_n - i\Delta_n}{\alpha_n + i\Delta_n}, \quad \Delta_n \approx \left[\frac{\alpha_n}{2k_n(k^2 - k_n^2 - 2u_0)} \right]^{1/2}, \quad (36з)$$

откуда непосредственно получается выражение (36д).

В приближении (36д) нетрудно аналитически рассчитать полную интенсивность брэгговского отражения:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} |R(E)|^2 dE = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{y^{1/2} - (y-a)^{1/2}}{y^{1/2} + (y-a)^{1/2}} \right|^2 dy, \quad (40)$$

где $a = 2u_0 \hbar^2 / 2m$, m — масса нейтронов, $y = E - E_n$, $E_n = \hbar^2 k^2 / 2m$. Расчет легко провести не только для действительного потенциала u_0 , но и для комплексного потенциала. Мы приведем только окончательный результат:

$$I = |u_0| f(\varphi), \quad \varphi = \operatorname{arctg} \frac{\operatorname{Im} u_0}{\operatorname{Re} u_0}, \quad (41)$$

$$f(\varphi) = -\pi \sin |\varphi| \cdot \cos^2 |\varphi| - \frac{8}{3} + 4 \cos^2 \varphi + 4 \cos |\varphi| \cdot \sin^2 |\varphi| \ln \operatorname{ctg} \frac{|\varphi|}{2}. \quad (42)$$

7. СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ ФАЗАМИ АМПЛИТУД r И t

Уже много раз мы сталкивались с тем фактом, что фаза r отличается от фазы t на $\pm \pi/2$. Докажем теперь общую теорему.

Т е о р е м а. При произвольном вещественном потенциале (имеется в виду симметричный потенциал, обобщение на несимметричный очевидно) имеет место соотношение

$$\arg(r) - \arg(t) = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (43)$$

Справедливость этого соотношения доказана в ⁸. Мы докажем эту теорему несколько иначе, с помощью чисто физических рассуждений, пользуясь только условием унитарности, которое гласит, что при чисто вещественном потенциале не должно быть ни рождения, ни исчезновения частиц.

Представим себе мысленный эксперимент, схема которого показана на рис. 4. Частично отражающие зеркала *A* и *B* представляют собой одним и тем же потенциалом, а зеркала *M*₁ и *M*₂ отражают полностью, т. е. амплитуда отражения от них равна -1 . Два луча интерферируют на зеркале *B*, и результат интерференции сказывается на скорости счета детекторов *D*₁ и *D*₂. Фазу на одном из путей можно менять произвольно. При изменении этой фазы будет меняться скорость счета детекторов, но общее число зарегистрированных частиц должно всегда равняться числу падающих. Если интенсивность падающих частиц равна единице, то и суммарная скорость счета равна единице. Пусть амплитуда волны, падающей на зеркало *A*, равна 1. Тогда амплитуда волны, прошедшей по верхнему пути в направлении детектора *D*₁, равна $re^{i\varphi}t$, а по нижнему пути tr . (Мы учли только разность фаз на двух путях и пренебрегли общей фазой, которая не имеет значения.) Аналогично, в направлении детектора *D*₂ после зеркала *B* будут идти волны, прошедшие по верхнему и нижнему путям, амплитуды которых равны соответственно $te^{i\varphi}t$ и rr . Полная интенсивность, регистрируемая обоими детекторами, равна

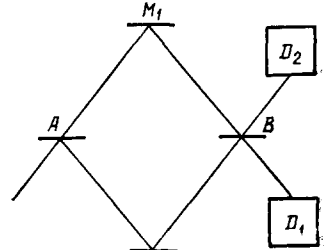


Рис. 4

$$I = |tre^{i\varphi} + tr|^2 + |t^2e^{i\varphi} + r^2|^2 = 1. \quad (44)$$

Раскроем скобки. Обозначим $r = |r| \exp(i\theta_r)$, $t = |t| \exp(i\theta_t)$ и учтем, что $|r|^2 + |t|^2 = 1$. Тогда получим

$$I = 1 + 2|t|^2|r|^2[\cos\varphi + \cos(\varphi + 2\theta_t - 2\theta_r)] = 1. \quad (45)$$

Поскольку фаза φ может меняться произвольно, а произведение $|t||r|$, вообще говоря, не равно нулю, то из последнего равенства вытекает $2(\theta_t - \theta_r) = (2n + 1)\pi$, что и требовалось доказать; см. также ^{9,10}.

Из этой теоремы, в частности, следует, что если для полубесконечного периодического потенциала обозначить $R = \exp(-\alpha)$, то α и q одновременно либо обе вещественные, либо обе мнимые величины. Это можно доказать с помощью следующего соотношения:

$$|r^2 - t^2| = |r|^2 + |t|^2 = 1. \quad (46)$$

Действительно, подставим вместо r и t величины R_N и T_N из выражений (20) и (21); в результате получим

$$R_N^2 - T_N^2 = [R^2 - \exp(2iqL_N)][1 - R^2 \exp(2iqL_N)]^{-1}. \quad (47)$$

Чтобы получившаяся величина была по модулю равна единице, должны быть либо q , R обе действительными, либо q и $\ln R$ — мнимыми.

Последнее утверждение интересно проиллюстрировать на примере потенциала Кронига — Пенни. Причем удобно это сделать, не обращаясь к выражениям (36) и (37). Представим себе бесконечный периодический потенциал

$$u(x) = 2p_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(x - x_n - \frac{l}{2}\right), \quad x_n = nl. \quad (48)$$

Решение уравнения Шрёдингера в таком потенциале можно искать в виде

$$\Psi(x) = \sum_n \exp(iqx_n) \psi_n(k, x) \theta(x \in I_n), \quad (49)$$

где интервал I_n — промежуток между двумя дельта-функциями:

$$I_n = \left(x_n - \frac{l}{2}, x_n + \frac{l}{2} \right), \quad (50)$$

в котором волновая функция ψ_n состоит из двух свободных плоских волн:

$$\psi_n(k, x) = \exp[ik(x - x_n)] + R(k) \exp[-ik(x - x_n)]. \quad (51)$$

Амплитуда отражения $R(k)$ дается выражением (36), которое для нас сейчас несущественно. Волновые функции отличаются в двух соседних промежутках только фазой $\exp(iql)$, которая не должна нарушать непрерывность волновой функции в точке $x_n + l/2$. Из этого условия непрерывности следует, что

$$e^{ikh/2} + Re^{-ikh/2} = e^{iq/2} (e^{-ikh/2} + Re^{ikh/2}), \quad (52)$$

или

$$e^{iq/2} = (e^{ikh} + R)(1 + Re^{ikh})^{-1}. \quad (53)$$

Отсюда сразу вытекает, что q действительно, когда R действительно, и $q = \pi n + i\Delta$, где Δ — действительная величина, когда $R = \exp(ik)$.

8. ПРИМЕР 3. СЛУЧАЙ ДВУХАТОМНОГО КРИСТАЛЛА

Результаты предыдущего раздела позволяют перейти к исследованию более сложных периодических структур. Рассмотрим, например, двухатомный кристалл, от которого легко перейти и к более сложным кристаллам. Многоатомные кристаллы характеризуются структурным фактором. Каким образом этот структурный фактор проявит себя в амплитуде отражения и блоховском векторе, легко установить на двухатомной модели.

Рассмотрим периодический потенциал, в котором один период содержит две отражающие плоскости:

$$u = \theta (0 \leq x \leq l) [2p_1\delta(x - l_1) + 2p_2\delta(x - l_1 - l_2)]. \quad (54)$$

Такой потенциал явно несимметричен. Амплитуды \vec{r} , \overleftarrow{r} и t , рассчитанные рекуррентным образом, равны

$$\vec{r} = \exp(2ikl_1) \{r_1 + r_2 t_1^2 \exp(2ikl_2) [1 - r_1 r_2 \exp(2ikl_2)]^{-1}\}, \quad (55a)$$

$$\overleftarrow{r} = \exp(2ikl_3) \{r_2 + r_1 t_2^2 \exp(2ikl_2) [1 - r_1 r_2 \exp(2ikl_2)]^{-1}\}, \quad (55b)$$

$$t = \vec{t} = \overleftarrow{t} = \exp(ikl) t_1 t_2 [1 - r_1 r_2 \exp(2ikl_2)], \quad l_3 = l - l_1 - l_2. \quad (55в)$$

Подставим сюда $r_j = p_j/(ik - p_j)$, $t_j = ik/(ik - p_j)$, воспользуемся соотношением $t_j^2 - r_j^2 = (ik + p_j)/(ik - p_j)$ и введем обозначения $p = p_1 + p_2$, $\Delta = p_2 - p_1$, $g = p_1 p_2 / k$; тогда получим

$$\vec{r} = -i [p \cos kl_2 + (2g + i\Delta) \sin kl_2] \exp[ik(2l_1 + l_2)] Q^{-1}, \quad (56a)$$

$$\overleftarrow{r} = -i [p \cos kl_2 + (2g - i\Delta) \sin kl_2] \exp[ik(2l_3 + l_2)] Q^{-1}, \quad (56b)$$

$$t = k \exp(ikl) Q^{-1}, \quad Q = k + ip + 2ig \sin kl_2 \exp(ikl_2). \quad (56в)$$

Из (56a), (56b) следует

$$\overleftrightarrow{r} = r \exp(\mp i\eta), \quad \eta = k(l_1 - l_3) + \arcsin(\Delta \sin kl_2 \cdot A^{-1}), \quad (57a)$$

$$r = -iA \exp(ikl) Q^{-1}, \quad A = (F^2 + 2pg \sin 2kl_2 + 4g^2 \sin^2 kl_2)^{1/2} \approx F, \quad (57b)$$

$$F = [F(2k) F(-2k)]^{1/2}, \quad F(x) = p_1 + p_2 \cos \kappa l_2. \quad (57в)$$

Знак корня в (57b), (57в) должен быть выбран таким, чтобы при малых $k \rightarrow 0$ выполнялось предельное соотношение $F = F(0) = p$ при любом знаке ве-

личины p . Отношение $\mathcal{F}(x) = F(x)/p$ представляет собой структурный фактор ячейки (периода). Аналогично (57в) определяется среднегеометрическая величина $\mathcal{F} = [\mathcal{F}(2k) \mathcal{F}(-2k)]^{1/2}$.

Выражения (56б) и (57б) можно представить и в ином виде:

$$r = -i \langle r \rangle \exp(i\varphi), \quad t = |t| \exp(i\varphi), \quad \varphi = kl - \chi, \quad (58a)$$

$$\langle r \rangle = \text{sign } F |r| = A (A^2 + k^2)^{-1/2} \approx F (F^2 + k^2)^{-1/2}, \quad (58б)$$

$$|t| = k (A^2 + k^2)^{-1/2} \approx k (F^2 + k^2)^{-1/2}, \quad (58в)$$

$$\sin \chi = (p + g \sin 2kl_2) (A^2 + k^2)^{-1/2} \approx p (F^2 + k^2)^{-1/2}, \quad (58г)$$

$$\cos \chi = (k - 2g \sin^2 kl_2) (A^2 + k^2)^{-1/2} \approx k (F^2 + k^2)^{-1/2}. \quad (58д)$$

Подставив (58а) в (11а) и (17), получим

$$R = \frac{(\sin \varphi + \langle r \rangle)^{1/2} - (\sin \varphi - \langle r \rangle)^{1/2}}{(\sin \varphi + \langle r \rangle)^{1/2} + (\sin \varphi - \langle r \rangle)^{1/2}}, \quad (59a)$$

$$\exp(iql) = \frac{(|t| + \cos \varphi)^{1/2} + i(|t| - \cos \varphi)^{1/2}}{(|t| + \cos \varphi)^{1/2} - i(|t| - \cos \varphi)^{1/2}}. \quad (60a)$$

Из (59а) следует, что полное отражение имеет место в области $|\varphi - \pi n| < < |r|$. Вблизи $\varphi \approx \pi n$, $n \neq 0$, выражение (59а) приближенно записывается

$$R = (-1)^n \frac{[k^2 - k_n^2 - u_0(1 - \mathcal{F})]^{1/2} - [k^2 - k_n^2 - u_0(1 + \mathcal{F})]^{1/2}}{[k^2 - k_n^2 - u_0(1 - \mathcal{F})]^{1/2} + [k^2 - k_n^2 - u_0(1 + \mathcal{F})]^{1/2}}, \quad (59б)$$

где $k_n = \pi n/l$, $u_0 = 2pl$. Отсюда видно, что полное отражение имеет место при $|k^2 - k_n^2 - u_0| < |u_0 \mathcal{F}|$, $n \neq 0$. Вблизи $\varphi \approx 0$ выражение (59а) приводится к виду

$$R = \frac{k - (k^2 - u_0)^{1/2}}{k + (k^2 - u_0)^{1/2}}. \quad (59в)$$

Приближенные значения q вблизи $\varphi \approx \pi n$ определяются из выражения (60а), из которого, в частности, следует, что

$$\cos ql = \cos \varphi \cdot |t|^{-1} \approx \cos \varphi \cdot (1 + F^2 k^{-2})^{1/2}, \quad (60б)$$

$$\sin ql \approx (\sin^2 \varphi - \cos^2 \varphi \cdot F^2 k^2)^{1/2}, \quad (60в)$$

и потому при $\varphi \approx \varphi_n = \pi n$ имеет место

$$q \approx [k_n^2 + \{[k^2 - k_n^2 - u_0(1 - \mathcal{F})][k^2 - k_n^2 - u_0(1 + \mathcal{F})]\}^{1/2}]^{1/2}. \quad (60г)$$

В случае $\varphi \approx 0$ имеем более простое выражение: $q \approx (k^2 - u_0)^{1/2}$.

Из (57а) следует, что при наличии мнимых частей у p_1 и p_2 интенсивности отражения от потенциала справа и слева отличаются на величину

$$\delta I = 2I_0 |R|^2 \frac{\Delta}{p} \text{tg } kl_2 \left(\frac{\text{Im } \Delta}{\Delta} - \frac{\text{Im } F}{F} \right), \quad (61)$$

где F определено выражением (57в), а I_0 — падающая интенсивность. Это различие в принципе позволяет решить фазовую проблему при расшифровке дифрактограмм.

Отражение от кристалла конечной толщины следует рассчитывать с помощью выражения (21а), которое мы перепишем в виде

$$\mathbf{R}_N = [R(1 - R^2)^{-1}] (1 - e^{2iqLN}) [1 + R^2(1 - e^{2iqLN})(1 - R^2)^{-1}]^{-1}. \quad (62)$$

Используя выражение (59б), получим

$$\frac{R}{1 - R^2} = \frac{2 \langle r \rangle}{4(\sin^2 \varphi - |r|^2)^{1/2}}. \quad (63)$$

Вблизи брэгговского отражения полагаем $ql = \pi n + \alpha$. Рассмотрим тонкий

кристалл, для которого $2N\alpha \ll 1$. В этом случае можно воспользоваться приближением

$$\begin{aligned} (1 - e^{2iq^l N}) &= (1 - e^{2iq^l}) (1 + e^{2iq^l} + \dots + e^{2iq^l(N-1)}) \approx \\ &\approx N (1 - e^{iq^l}) (1 + e^{iq^l}) = \\ &= -4i (|t|^2 - \cos^2 \varphi)^{1/2} N [(|t| + \cos \varphi)^{1/2} - i (|t| - \cos \varphi)^{1/2}]^{-2} \end{aligned} \quad (64)$$

где последнее равенство получено в результате подстановки (60а). Подстановка (63) и (64) в (62) в случае тонкого кристалла приводит к выражению

$$|R_N|^2 = \left| \frac{NR}{1-R^2} (1 - e^{2iq^l}) \right|^2 = N^2 \frac{|r|^2 (|t|^2 - \cos^2 \varphi)}{|t|^2 (\sin^2 \varphi - |r|^2)}. \quad (65)$$

Поскольку при отсутствии поглощения $|t|^2 + |r|^2 = 1$, то $|t|^2 - \cos^2 \varphi = \sin^2 \varphi - |r|^2$, и потому интенсивность отражения от тонкого кристалла дается выражением

$$|R_N|^2 = N^2 |r|^2 |t|^{-2} \approx N^2 F^2 k^{-2} = L^2 u_0^2 \mathcal{F}^2 (4k^2)^{-1}, \quad (66)$$

где $L = Nl$.

Это предельное выражение для тонкого кристалла совпадает с тем, которое получается по теории возмущений, т. е. в рамках кинематической теории дифракции.

9. ДИФРАКЦИЯ ЛАУЭ

Дифракцию Лауэ тоже можно рассматривать в одномерном приближении. Выход за рамки одного измерения по существу требуется только для удовлетворения граничным условиям на входной и выходной поверхностях. Рассмотрим потенциал

$$u = 2p_0 \theta (0 \leq z \leq a) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta \left(x - x_n - \frac{l}{2} \right), \quad x_n = nl. \quad (67)$$

Он представляет собой кристалл, бесконечно протяженный вдоль оси x , с кристаллическими плоскостями, перпендикулярными x и параллельными оси z . Ширина кристалла вдоль оси z равна a . Входную поверхность можно ограничить щелью конечной ширины. Для простоты мы будем считать щель достаточно широкой, чтобы пренебречь явлениями дифракции, связанными с конечными размерами щели.

Пусть снаружи из области $z < 0$ падает плоская волна $\exp(ikr)$ с компонентами волнового вектора k_{\parallel} и k_{\perp} соответственно вдоль осей x и z . Внутри кристалла возбуждаются волны, которые являются собственными для данной среды, так же как внутри волновода возбуждаются только собственные моды. В нашем случае такими собственными модами являются блоховские волны вида

$$\Psi = e^{ik_z z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{iqx_n} \psi_n(k_x, x) \theta(x \in I_n), \quad (68)$$

где функции $\psi_n(k_x, x)$ внутри интервалов (50) равны выражениям (51), в которых k следует заменить на k_x . Заметим, что k_x и k_z отличаются от k_{\parallel} и k_{\perp} , но

$$k_x^2 + k_z^2 = k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2 = k^2. \quad (69)$$

Падающая плоская волна должна на входной поверхности непрерывным образом перейти в совокупность волн вида (68). Отсюда следует, что непрерывность должна строго выполняться хотя бы в одной точке внутри интервалов I_n , а поскольку при достаточно широкой щели внутри нее уклады-

вается много интервалов I_n , то волновой вектор q либо должен совпадать с k_{\parallel} , либо может отличаться от k_{\parallel} только на $2\pi n/l$, т. е.

$$q_n = k_{\parallel} + \frac{2\pi n}{l}. \quad (70)$$

Зная блоховский вектор q , можно разрешить выражение (37) относительно k , т. е. найти k_x , после чего с помощью (69) находится $k_z = k^2 - k_x^2$. Число блоховских волн внутри кристалла ограничивается условием $k_z^2 > 0$. Для определения k_x воспользуемся приближенным равенством (37д). Из него при $u_0 > 0$ и $q < k_n$ следует

$$q < k_x = \{k_n^2 + u_0 [1 - (1 + y^2)^{1/2}]\}^{1/2} < k_n, \quad (71a)$$

где $y = (k_n^2 - q^2)/u_0$. При $q > k_n$ получаем

$$k_n < q < k_x = \{k_n^2 + u_0 [1 + (1 + y^2)^{1/2}]\}^{1/2}, \quad k_x^2 > k_n^2 + 2u_0. \quad (71б)$$

Выражения (71) для k_x справедливы и при $u_0 < 0$, только знаки неравенств в (71) будут другими.

Из (71) и (69) находим

$$k_z = \{k_{\perp}^2 - u_0 [1 - (1 + y^2)^{1/2} + y]\}^{1/2}, \quad (72a)$$

$$k_z = \{k_{\perp}^2 - u_0 [1 + y + (1 + y^2)^{1/2}]\}^{1/2}. \quad (72б)$$

При не очень больших k внутри кристалла могут возникнуть только две блоховские волны. Тогда волновую функцию внутри кристалла можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Psi = & A_1 e^{ik_{z1}z} \sum_n e^{ik_{\parallel}x} \psi_n(k_{x1}, x) \theta(x \in I_n) + \\ & + A_2 e^{ik_{z2}z} \sum_n e^{-i(2k_1 - k_{\parallel})x} \psi_n(k_{x2}, x) \theta(x \in I_n), \quad (73) \\ & k_1 = \frac{\pi}{l}. \end{aligned}$$

Заметим, что если $k_{\parallel} < k_1$, то $2k_1 - k_{\parallel} > k_1$, поэтому k_{x1} и k_{z1} определяются по формулам (71a) и (72a), тогда как k_{x2} и k_{z2} — по формулам (71б) и (72б). Кроме того, $k_{x1} \approx k_{\parallel}$ и $k_{x2} \approx 2k_1 - k_{\parallel}$. Условие непрерывности на входной поверхности можно приблизительно удовлетворить, если выполняются следующие равенства:

$$A_1 + R_2 A_2 = 1, \quad A_2 + R_1 A_1 = 0. \quad (74)$$

Амплитуды отражения $R_i(k_{xi})$ удобно вблизи брэгговского отражения представить в виде (3бд). Подставив в них вместо k выражения (71), получим соответственно

$$R_1 = \frac{1}{y + (1 + y^2)^{1/2}}, \quad (75a)$$

$$R_2 = -R_1. \quad (75б)$$

Подставив (75) в (74) и решив уравнения (74) относительно A_i , получим

$$A_1 = \frac{[y + (1 + y^2)^{1/2}]}{2(1 + y^2)^{1/2}}, \quad (76a)$$

$$A_2 = \frac{-1}{2(1 + y^2)^{1/2}}. \quad (76б)$$

Таким образом, получены все формулы, имеющие отношение к динамической теории дифракции.

Из проведенного рассмотрения, в частности, вытекает, что если кристалл достаточно толст, то у выходной поверхности две блоховские волны разой-

дуются достаточно далеко друг от друга и на выходной поверхности будут наблюдаться как бы два ярких пятна, ширины которых будут определяться шириной входной щели, и каждое из этих пятен будет давать прямую и дифрагированную волны. Если две волны из двух пятен свести вместе, как это делается в двухкристальном интерферометре¹¹, то можно наблюдать интерференционную картину. Если k велико, то внутри кристалла может возникнуть несколько блоховских волн, которые при достаточном толстом кристалле дадут несколько ярких пятен на выходной поверхности, каждое из которых дает всю совокупность дифрагированных волн. Выделив с помощью щели одно из пятен, можно разделить различные порядки дифракции, не прибегая к методу времени пролета.

В случае тонкого кристалла различные блоховские волны не успевают далеко разойтись, яркие пятна на выходной поверхности перекрываются и интерферируют, что приводит к известной картине маятниковых колебаний интенсивности. В случае многоволновой дифракции маятниковые колебания происходят с разными частотами, и эти частоты комбинируются друг с другом.

10. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Простой рекуррентный подход к периодическому потенциалу оказался очень плодотворным и позволил по-новому взглянуть на многие уже устоявшиеся понятия. Нужно сказать, что метод не ограничен только скалярными частицами и скалярным потенциалом. Уравнения (6) и (15) записаны таким образом, что они прямо обобщаются на нескаларный и неоднородный случай, когда и r , и t , и q являются матрицами. К сожалению, в этом случае автор не может найти общего красивого решения для матричного квадратного уравнения вида $X^2 + AX + B = 0$, к которому после несложных преобразований приводятся уравнения (6) и (15). Конечно, в случае симметричных или коммутативных матриц A и B это уравнение решается тривиально, но можно надеяться, что либо интересующие нас физические проблемы приведут именно к такому простому варианту, либо все же тем или иным способом это уравнение удастся решить.

Объединенный институт ядерных исследований,
Дубна (Московская обл.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mathieu E. L. // J. de Math. (2). 1868. T. 13. P. 137.
2. Floquet G. // Ann. de l'Ecole Norm, Sup. (2). 1883. T. 12. P. 47.
3. Bloch F. // Zs. Phys. 1928. Bd 52. S. 555.
4. Розенберг Г. В. Оптика тонкослойных покрытий. — М.: Физматгиз, 1985.
5. Kiang D. // Am. J. Phys. 1974. V. 42. P. 785.
6. Игнатович В. К. ОИЯИ. P4-10778. — Дубна, 1977.
7. Игнатович В. К. ОИЯИ. P4-11135. — Дубна, 1978.
8. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. — М.: Мир, 1979. — Т. 1. С. 154.
9. Lai H. M., Leung A. F., Wong P. Y. // Am. J. Phys. 1985. V. 53. P. 1103.
10. Degiorgio V. // Ibidem. 1980. V. 48. P. 81.
11. Atwood D. K. et al. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 52. P. 1673.