Физика твердого тела, 2014, том 56, вып. 1

Приборы и методика нейтронного эксперимента

Границы применимости концепции амплитуды рассеяния в задачах малоуглового рассеяния

© Ф.С. Джепаров, Д.В. Львов

ГНЦ РФ Институт теоретической и экспериментальной физики,
Москва, Россия

E-mail: dzheparov@itep.ru

Рассмотрена применимость концепции амплитуды рассеяния к описанию экспериментов по малоугловому рассеянию. Получено выражение для потока рассеянного излучения на детекторе при условиях, которые значительно мягче условия дифракции Фраунгофера. Проведена оценка влияния на результаты некогерентности источника.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-02-00880-a).

В теории малоуглового рассеяния [1] традиционно используется концепция амплитуды рассеяния: интенсивность определяется как квадрат модуля амплитуды рассеяния. При этом предполагают, что на образец падает плоская волна, а амплитуда рассеяния определяется как коэффициент при расходящейся сферической волне e^{ikr}/r в выражении для волновой функции. Рассеянная волна совпадает со сферической при удалении от рассеивателя с характерным размером a на расстояние $r \gg R = a^2/\lambda$, где λ — длина волны излучения (условие дифракции Фраунгофера). При рассеянии тепловых нейтронов с $\lambda = 1$ Å на образце с размером $a \sim 1$ mm получаем $r \gg R \sim 10^4$ m, т.е. условие, которому невозможно удовлетворить в эксперименте. С другой стороны, если концентрация неоднородностей в образце мала и их положения с хорошей точностью являются случайными и нескоррелированными, то однократное малоугловое рассеяние происходит независимо на отдельных неоднородностях, и соответственно именно размер неоднородности должен входить в условие применимости теории. Причина этого состоит в том, что при рассеянии плоской волны на неупорядоченной системе когерентность разрушается. Существует мнение, что, если падающая волна излучается некогерентным источником, вместо размера образца в условие дифракции Фраунгофера входит поперечная длина когерентности, равная $l_t = \lambda/\alpha$, где α — угловой размер источника, т.е. $r \gg l_t^2/\lambda$. Мы показываем, что это неверно и данное условие не возникает в последовательной теории.

Будем рассматривать рассеяние монохроматической плоской волны. В этом случае волновая функция удовлетворяет уравнению Липпмана–Швингера

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3) + \psi_s(\mathbf{r}) = \exp(ikr_3) - \frac{m}{2\pi}\int d^3x\, \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\, U(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}), \tag{1}$$

где $U(\mathbf{x})$ — потенциал взаимодействия нейтрона с неоднородностями вещества. Проблема выбора потенциала была рассмотрена в работе [2]. Поскольку кинетическая энергия нейтрона много больше энергии $U(\mathbf{x})$, используем приближение высоких энергий [3], а именно при начальном импульсе $\mathbf{k} = k\mathbf{e}_3$ в правой части (1) выберем волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_e(\mathbf{x}) = e^{ikr_3}F(\mathbf{x}),$$
$$F(\mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{im}{k}\int\limits_{-\infty}^{x_3} dx_3 U(\mathbf{x})\right). \tag{2}$$

Учитывая, что $U(\mathbf{x})F(\mathbf{x}) = \frac{ik}{m}\frac{\partial}{\partial x_3}F(\mathbf{x})$, из (1), (2) получаем

$$\psi_s(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi}\int d^3x\, \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|+ikx_3)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\, \frac{ik}{m}\frac{\partial}{\partial x_3}F(\mathbf{x}). \tag{3}$$

Поскольку расстояние до детектора много больше размера образца, т.е. $r \gg x$, раскладываем по малому параметру x/r

$$|\mathbf{r}-\mathbf{x}| = r - \mathbf{n}\mathbf{x} + \frac{x_\perp^2}{2r} + \frac{(\mathbf{n}\mathbf{x})x_\perp^2}{2r^2} + \ldots, \tag{4}$$

где $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $x_\perp^2 = x^2 - (\mathbf{n}\mathbf{x})^2$, и оставляем в знаменателе (3) первый член разложения, а в числителе в показателе экспоненты два первых члена и получаем

$$\psi_s(\mathbf{r}) = -\frac{ik}{2\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3x e^{ikx_3 - ik\mathbf{n}\mathbf{x}}\frac{\partial}{\partial x_3}F(\mathbf{x}). \tag{5}$$

Отсюда следует стандартное выражение для амплитуды рассеяния

$$\psi_s(\mathbf{r}) = f\,\frac{e^{ikr}}{r},$$
$$f = \frac{k}{2\pi i}\int d^2\rho e^{-i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}}\left[F(\boldsymbol{\rho}, x_{3f}(\boldsymbol{\rho})) - 1\right], \tag{6}$$

где $\mathbf{q} = k\mathbf{n} - k\mathbf{e}_3$ — вектор рассеяния, а $x_{3f}(\boldsymbol{\rho})$ — координата x_3 выхода из мишени прямолинейной траектории с прицельным параметром $\boldsymbol{\rho}$. При этом мы пренебрегли членом $ikx_\perp^2/2r$ в показателе экспоненты, что можно сделать, если $kx_\perp^2/2r \ll 1$, т.е. $r \gg \pi x_\perp^2/\lambda$. Так как интегрирование в (1) производится по образцу, в качестве $x_\perp$ нужно взять поперечный размер образца, и мы получаем условие дифракции Фраунгофера. Далее покажем, что для того, чтобы получить правильное условие применимости теории, необходимо вести разложение пропагатора в выражение для наблюдаемой величины (потока на детекторе). Кроме того, в эксперименте на образец падает не плоская волна, а излучение от некогерентного источника размера R. Чтобы это учесть, рассмотрим рассеяние сферической волны, а потом просуммируем потоки рассеянных волн на детекторе по сферическим волнам, исходящим из источника.

Сначала получим эйкональное решение для случая сферической волны. Пусть источник находится в точке $\mathbf{r}_0$. Запишем стационарное уравнение Шредингера

$$\left(-\frac{\Delta}{2m}+U\right)\psi=\frac{k^2}{2m}\psi \tag{7}$$

и аналогично случаю плоских волн [3] представим волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{r})=\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}F(\mathbf{r}), \tag{8}$$

где $F(\mathbf{r})$ — функция, медленно меняющаяся по сравнению с первым множителем. Положим $s=|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|$, $\mathbf{n}=\mathbf{r}-\mathbf{r}_0/|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|$ и перейдем к сферическим координатам с центром в точке $\mathbf{r}_0$. Для лапласиана имеем $\Delta=\Delta_s+\Delta_n$, где $\Delta_s=\frac{1}{s}\frac{\partial^2}{\partial s^2}s$, а Δ_n — лапласиан по угловым переменным.

Подставляя выражение (8) для волновой функции в уравнение (7) и учитывая, что

$$\Delta\left(\frac{\exp(iks)}{s}F(\mathbf{r})\right)=\Delta_s\left(\frac{\exp(iks)}{s}F(\mathbf{r})\right)+\frac{\exp(iks)}{s}\Delta_nF(\mathbf{r})$$
$$=\frac{\exp(iks)}{s}\left(\left(\frac{\partial}{\partial s}+ik\right)^2+\Delta_nF(\mathbf{r})\right),$$

получаем уравнение для $F(\mathbf{r})$

$$\left(-\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial s^2}+2ik\frac{\partial}{\partial s}+\Delta_n\right)+U\right)F(\mathbf{r})=0. \tag{9}$$

Удерживая, как обычно [3], член $k\frac{\partial}{\partial s}$, имеем

$$F(\mathbf{r})=\exp\left(\frac{ik}{m}\int_{s_0}^{s}dsU(s,\mathbf{n})\right). \tag{10}$$

Полученное решение можно рассматривать как решение с граничным условием в точке $\mathbf{r}=\mathbf{r}_0$ или как решение неоднородного уравнения

$$\left(-\frac{\Delta}{2m}+U-\frac{k^2}{2m}\right)\psi=\frac{4\pi}{m}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0). \tag{11}$$

Метод эйконала дает выражение (10) для рассеянной волны, применимое только вблизи области действия потенциала. Обычно [3] это решение распространяется на все пространство после его подстановки в правую часть уравнения Липпмана–Швингера (1). Удобнее, однако, сделать дополнительные преобразования на основе так называемых формул Кирхгофа–Грина, которые часто используются в оптике [4]. Проведем вывод формулы Кирхгофа–Грина исходя из уравнения Шредингера. Используя уравнение (11) и тождество для сферической волны

$$\left(-\frac{\Delta_x}{2m}-\frac{k^2}{2m}\right)\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}=\frac{4\pi}{2m}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{x}), \tag{12}$$

где Δ_x — лапласиан относительно переменной $\mathbf{x}$, имеем

$$\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\left(-\frac{\Delta_x}{2m}+U-\frac{k^2}{2m}\right)\psi(\mathbf{x})$$
$$+\psi(\mathbf{x})\left(\frac{\Delta_x}{2m}+\frac{k^2}{2m}\right)\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}$$
$$=\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\frac{4\pi}{2m}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{r}_0)-\psi(\mathbf{x})\frac{4\pi}{2m}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{x}). \tag{13}$$

Преобразуем левую часть (13), выделяя дивергенцию

$$\frac{1}{2m}\nabla_x\left(\psi(\mathbf{x})\nabla_x\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}-\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\nabla_x\psi(\mathbf{x})\right)$$
$$+\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}U(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$$
$$=\frac{2\pi}{m}\left(\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{r_0})-\psi(\mathbf{x})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{x})\right), \tag{14}$$

проинтегрируем это уравнение по объему и используем теорему Гаусса. Получаем

$$\frac{1}{4\pi}\int_S d\mathbf{S}\left(\psi(\mathbf{x})\nabla\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}-\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\nabla\psi(\mathbf{x})\right)$$
$$+\frac{m}{2\pi}\int_T d^3x\,\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}U(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}-\psi(\mathbf{r}). \tag{15}$$

Здесь $d\mathbf{S}$ направлен по внешней нормали к объему интегрирования T, который содержит точки $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}_0$.

Нерассеянная волна $\psi_0(\mathbf{x})$ удовлетворяет аналогичному уравнению при $U(\mathbf{x})=0$, т.е.

$$\frac{1}{4\pi}\int_S d\mathbf{S}\left(\psi_0(\mathbf{x})\nabla\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}-\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\nabla\psi_0(\mathbf{x})\right)$$
$$=\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}-\psi_0(\mathbf{r}). \tag{16}$$

Вычитаем (16) из (15) и получаем представление для рассеянной волны $\psi_s(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - \psi_0(\mathbf{r})$

$$\psi_s(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int_S d\mathbf{S}\left(\psi_s(\mathbf{x})\nabla_x \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|} - \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\nabla_x\psi_s(\mathbf{x})\right) - \frac{m}{2\pi}\int_T d^3x\, \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}U(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}). \quad (17)$$

Пусть объем интегрирования T ограничен сферой большого радиуса $R > \max(r, r_0)$ и поверхностью S_t в области мишени. Если область S_t стянуть в точку, то второй член справа в (17) дает обычное выражение для рассеянной волны. Это означает, что вклад от поверхности большой сферы равен нулю. Если теперь поверхность S_t примыкает к области действия потенциала и проходит там, где потенциал обращается в нуль, то остается

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}\int_{S_t} d\mathbf{S}_\mathbf{x}\left(\psi_s(\mathbf{x})\nabla_x \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|} - \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\nabla_x\psi_s(\mathbf{x})\right) \quad (18)$$

Здесь использована нормаль, внешняя к области действия потенциала.

Объединяя (8), (10) и (18), получаем

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi}\int_{S_t} d\mathbf{S}_x\left(\frac{\exp(ik|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|}\nabla_x \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|} - \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\nabla_x \frac{\exp(ik|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|}\right)(e^{i\varphi(\mathbf{x})}-1), \quad (19)$$

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{k}{m}\int_{\xi_0}^{\xi_1} d\xi U(\xi, \mathbf{n}) = \frac{k}{m}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi U(\xi, \mathbf{n}). \quad (20)$$

Здесь ξ_0 и ξ_1 — точки начала и конца действия потенциала $U(\xi, \mathbf{n})$ на прямой, соединяющей точки $\mathbf{x}$ и $\mathbf{r}_0$.

Ясно, что вклад в интеграл вносит только выходная для пучка поверхность. Подобная формула, но для амплитуды рассеяния, т.е. с плоскими волнами в качестве начального и конечного состояний, получена в работе [5].

Если траекторию в фазе (20) заменить на траекторию вдоль общей оси симметрии установки, то для малоуглового рассеяния фаза изменится на величину порядка угла расположения излучателя, чем в данном случае можно пренебречь. Выбирая это направление в качестве оси z, а выходную поверхность ортогональной этой оси, получаем

$$\varphi(\mathbf{x}_\perp) = \frac{k}{m}\int_{-\infty}^{\infty} dz U(\mathbf{x}), \qquad \mathbf{x} = (\mathbf{x}_\perp, z). \quad (21)$$

Поскольку расстояния от образца до источника и детектора много больше размера a образца, т.е.

$$r \gg a, \qquad r_0 \gg a, \qquad \text{(условия I)}$$

в знаменателе в (19) можно пренебречь $\mathbf{x}$ (но не в числителе, так как $k|\mathbf{r}-\mathbf{x}| \gg 1$ и $k|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0| \gg 1$), при этом получаем

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \int \frac{d^2x_\perp}{4\pi}\mathbf{n}_z\left(\frac{\exp(ik|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|}\nabla_x \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|} - \frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}\nabla_x \frac{\exp(ik|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|}\right) \times (e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)}-1) \approx \frac{ik}{4\pi r r_0}\int d^2x_\perp e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|}e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|} \times (-\cos\vartheta_r + \cos\vartheta_0)(e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)}-1), \quad (22)$$

где $\mathbf{n}_z$ — единичный вектор вдоль оси z, а ϑ_r и ϑ_0 — углы между $\mathbf{n}_z$ и направлением из выходной поверхности образца на детектор и источник соответственно. Для малоуглового рассеяния $\vartheta_r \approx 0$ и $\vartheta_0 \approx \pi$. Таким образом, окончательно на немалых расстояниях, но не в зоне Фраунгофера и для малых углов падения и рассеяния имеем

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \frac{k}{2\pi i r r_0}\int d^2x_\perp e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{r}_0|}e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}(e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)}-1). \quad (23)$$

Важным достоинством полученного выражения является то, что интегрирование ведется по поверхности, т.е. интеграл двумерный, а не трехмерный, как в уравнении Липпмана–Швингера.

Поток в плоскости детектора с достаточной точностью равен

$$J(\mathbf{r}) = \frac{k}{m}\left\langle\left|\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} + \psi_s(\mathbf{r})\right|^2\right\rangle. \quad (24)$$

Здесь усреднение $\left\langle\left|\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} + \psi_s(\mathbf{r})\right|^2\right\rangle$ проводится по расположению рассеивающих зерен в образце.

Представим нейтронооптический потенциал среды, в которой распространяются нейтроны, как $U(x) = \Sigma_\mathbf{R} n_\mathbf{R} V(\mathbf{x}-\mathbf{R})$, где $V(\mathbf{x})$ — потенциал зерна (рассеивателя) с „центром“ в точке $\mathbf{x} = 0$, $n_\mathbf{R}$ — число заполнения узла $\mathbf{R}$, равное единице, если в узле $\mathbf{R}$ находится центр зерна, и нулю в обратном случае. Здесь предполагается, что центры зерен могут располагаться в узлах некоторой решетки, элементарная ячейка которой имеет объем Ω, а среднее значение $\langle n_\mathbf{R} = f\rangle$. В пределе $\Omega \to 0$, $f \to 0$, $f/\Omega = c = \text{const}$ получается случайное распределение зерен в непрерывном пространстве. Здесь c — концентрация рассеивателей. Положим

$$J(\mathbf{r}) = J_0 + J_1,$$

$$J_0 = \frac{k}{m}\left|\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} + \langle\psi_s(\mathbf{r})\rangle\right|^2, \qquad (25)$$

$$J_1 = \frac{k}{m}\langle|\psi_s(\mathbf{r}) - \langle\psi_s(\mathbf{r})\rangle|^2\rangle = \frac{k}{m}\langle|\Delta\psi_s(\mathbf{r})|^2\rangle. \qquad (26)$$

Пусть для определенности мишень имеет форму пластинки и полностью перекрывает пучок. Тогда J_0 представляет практически нерассеянный пучок, а рассеянные нейтроны представлены членом J_1. Нерассеянный пучок нельзя выразить через среднюю амплитуду рассеяния на образце, однако в малоугловом эксперименте прямой пучок и не измеряется [1]. Проведем анализ формулы для рассеянного пучка и покажем, что в типичных условиях расчет малоуглового рассеяния можно начинать с амплитуды рассеяния на всем образце.

Подставляя выражение (23) для волновой функции в (26), имеем

$$J_1 = \frac{k}{m}\left(\frac{k}{2\pi r r_0}\right)^2 \times \int\limits_S d^2x_\perp d^2y_\perp e^{ik(|\mathbf{r}-\mathbf{x}|-|\mathbf{r}-\mathbf{y}|+|\mathbf{r}_0-\mathbf{x}|-|\mathbf{r}_0-\mathbf{y}|)} Z(\mathbf{x},\mathbf{y}), \qquad (27)$$

$$Z(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \Big\langle\left(e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)} - \langle e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)}\rangle\right)\left(e^{-i\varphi(\mathbf{y}_\perp)} - \langle e^{-i\varphi(\mathbf{y}_\perp)}\rangle\right)\Big\rangle. \qquad (28)$$

В пределе малых концентраций, когда корреляции в расположении рассеивателей отсутствуют, усреднение можно провести точно [6], что дает

$$Z(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \exp\left(c\int d^3R \times \left(e^{\frac{i}{v}\left(\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_3 V(\mathbf{x}-\mathbf{R}) - \int\limits_{-\infty}^{\infty} dy_3 V(\mathbf{y}-\mathbf{R})\right)} - 1\right)\right) - \exp\left[c\int d^3R\left(e^{\frac{i}{v}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx_3 V(\mathbf{x}-\mathbf{R})} - 1\right) + c\int d^3R\left(e^{-\frac{i}{v}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dy_3 V(\mathbf{y}-\mathbf{R})} - 1\right)\right]. \qquad (29)$$

Основное свойство $Z(\mathbf{x},\mathbf{y})$ состоит в том, что $Z(\mathbf{x},\mathbf{y}) = 0$, если $|(\mathbf{x}-\mathbf{y})_\perp| > 2a_0$, где a_0 — радиус рассеивающего зерна. Если положения зерен скоррелированы, то вместо $2a_0$ в выражение войдет длина корреляции r_{corr} в направлении, ортогональном пучку.

Для анализа в выражении (27) интеграла $\int\limits_S d^2x_\perp d^2y_\perp$ поместим S в начало координат, введем новые переменные $\boldsymbol{\rho} = (\mathbf{x}_\perp + \mathbf{y}_\perp)/2$ и $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}_\perp = \mathbf{y}_\perp$ и разложим $k(|\mathbf{r}-\mathbf{x}|-|\mathbf{r}-\mathbf{y}|+|\mathbf{r}_0-\mathbf{x}|-|\mathbf{r}_0-\mathbf{y}|)$ по малым $\xi/|\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}|$ и $\xi/|\mathbf{r}_0-\boldsymbol{\rho}|$ согласно формуле (4). В результате с учетом членов до ξ^3 включительно

$$k\left(|\mathbf{r}-\mathbf{x}|-|\mathbf{r}-\mathbf{y}|+|\mathbf{r}_0-\mathbf{x}|-|\mathbf{r}_0-\mathbf{y}|\right) = -\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})\xi + \left(\frac{\cos\vartheta\sin^2\vartheta}{8r^2} + \frac{\cos\vartheta_0\sin^2\vartheta_0}{8r_0^2}\right)k\xi^3,$$

$$\cos\vartheta = (\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho})\xi/(|\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}|\xi),$$
$$\cos\vartheta_0 = (\mathbf{r}_0-\boldsymbol{\rho})\xi/(|\mathbf{r}_0-\boldsymbol{\rho}|\xi). \qquad (30)$$

Здесь каждому значению $\boldsymbol{\rho}$ на поверхности S соответствует свой вектор рассеяния $\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})$

$$\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho}) = k\left(\frac{\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}}{|\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}|} - \frac{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{r}_0}{|\boldsymbol{\rho}-\mathbf{r}_0|}\right). \qquad (31)$$

Если выполняется условие

$$\varepsilon = \frac{1}{8r^2}kr_{\text{corr}}^3 \ll 1, \qquad \text{(условие II)}$$

то вторым слагаемым в (30) можно пренебречь. В эксперименте при рядовых значениях $\lambda = 1\,\text{Å}$, $r_{\text{corr}} = 10\,\mu\text{m} = 10^{-3}\,\text{cm}$, $r = 300\,\text{cm}$ имеем вполне удовлетворительное значение $\varepsilon \sim 10^{-6}$. Тогда для потока рассеянного излучения имеем

$$J_1 = \frac{k}{m}\left(\frac{k}{2\pi r r_0}\right)^2 \int\limits_S d^2x_\perp d^2y_\perp e^{-i\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})\xi} \times \Big\langle\left(e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)} - \langle e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)}\rangle\right)\left(e^{-i\varphi(\mathbf{y}_\perp)} - \langle e^{-i\varphi(\mathbf{y}_\perp)}\rangle\right)\Big\rangle. \qquad (32)$$

Вектор $\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})$ переходит в стандартный вектор рассеяния при $\boldsymbol{\rho} = 0$. Получим условие, при котором $\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})$ можно заменить на $\mathbf{q}(0)$. Поскольку мы рассматриваем малоугловое рассеяние, угол рассеяния $\theta \ll 1$ и, следовательно, вектор $\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})$ лежит в плоскости, ортогональной падающей волне. Так как максимальное значение $\xi \sim r_{\text{corr}}$, изменение показателя экспоненты при замене $\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})$ на $\mathbf{q}(0)$ не превосходит $|\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho}) - \mathbf{q}(0)|r_{\text{corr}}$, оно должно быть много меньше единицы. Отсюда получаем, что достаточно выполнения условий

$$k\left|\frac{\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}}{|\mathbf{r}-\boldsymbol{\rho}|} - \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}\right| \ll \frac{1}{r_{\text{corr}}},$$

$$k\left|\frac{\boldsymbol{\rho}-\mathbf{r}_0}{|\boldsymbol{\rho}-\mathbf{r}_0|} + \frac{\mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}_0|}\right| \ll \frac{1}{r_{\text{corr}}},$$

т.е. расстояния от образца до детектора и источника должны удовлетворять условиям

$$r \gg 2r_{\text{corr}}\frac{a}{\lambda}, \qquad r_0 \gg 2r_{\text{corr}}\frac{a}{\lambda}. \qquad \text{(условие III)}$$

Эти условия являются значительно более сильными, чем условие II, однако в экспериментах они всегда должны выполняться. Покажем это для случая рассеяния на системе случайно расположенных неоднородностей с размером l. В этом случае $r_{\text{corr}} \sim l$, характерный угол при однократном рассеянии $\theta = \lambda/l$, а неопределенность угла рассеяния из-за конечного размера образца $\Delta\theta = \Delta\theta_1 + \Delta\theta_2 = a/r + a/r_0$. Измерение малоуглового рассеяния возможно при выполнении условий $\Delta\theta_1 \ll \theta$, $\Delta\theta_2 \ll \theta$, что с точностью до незначительного коэффициента совпадает с условиями III. С учетом условий III из (32) окончательно получаем искомое выражение для потока на детекторе

$$J_1 = \frac{k}{m}\left(\frac{k}{2\pi r r_0}\right)^2 \int\limits_S d^2x_\perp d^2y_\perp e^{-i\mathbf{q}(\boldsymbol{\xi})}$$

$$\times \left\langle \left(e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)} - \langle e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)}\rangle\right)\left(e^{-i\varphi(\mathbf{y}_\perp)} - \langle e^{-i\varphi(\mathbf{y}_\perp)}\rangle\right)\right\rangle, \tag{33}$$

где вектор рассеяния $\mathbf{q} = k(\mathbf{r}/|\mathbf{r}| + \mathbf{r}_0/\mathbf{r}_0)$. Это выражение можно получить, разложив выражение (23) для волновой функции по малым x/r_0 и x/r и пренебрегая квадратичными членами в показателе экспоненты, что дает

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \frac{k}{2\pi i r r_0} e^{ikr_0} e^{ikr} \int d^2x_\perp e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}}(e^{i\varphi(\mathbf{x}_\perp)} - 1).$$

После подстановки этого выражения в (26) сразу получаем (33), но при этом выводе необходимо выполнение условий дифракции Фраунгофера для образца, которые значительно жестче условий I–III и в эксперименте не выполняются.

Если на образец падает излучение от некогерентного источника, то направление падающей волны будет изменяться в пределах угла α, где α — угловой размер источника, видимый с позиции образца. Соответственно вектор рассеяния $\mathbf{q}$ будет лежать в диапазоне ширины $k\alpha$ относительно среднего значения. Поэтому выражение (32) надо переписать в виде

$$J_1 = \frac{k}{m}\left(\frac{k}{2\pi r r_0}\right)^2 \int\limits_S d^2\rho d^2\xi e^{-i\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})\boldsymbol{\xi}}$$

$$\times \left\langle \left(e^{i\varphi(\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\xi}/2)} - \langle e^{i\varphi(\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\xi}/2)}\rangle\right)\right.$$

$$\left.\times \left(e^{-i\varphi(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\xi}/2)} - \langle e^{-i\varphi(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\xi}/2)}\rangle\right)\right\rangle \tag{34}$$

и дополнительно проинтегрировать по $\mathbf{q}(\boldsymbol{\rho})$ в указанном диапазоне, что приведет к тому, что интеграл по ξ будет браться по области размера $1/k\alpha \sim \lambda/\alpha = l_t$. Вследствие этого расстояние, на котором могут наблюдаться интерференционные эффекты, ограничивается поперечной длиной когерентности l_t. Но поскольку условие применимости теории III определяется интегралом по $\boldsymbol{\rho}$, оно является одинаковым для сферической падающей волны и для волны от некогерентного источника.

Применимость амплитуды рассеяния в приложении к опытам с двухкристальным дифрактометром была показана в [7]. В настоящей работе мы, опираясь на формулы Кирхгофа–Грина [4,5] и проводя разложение функции Грина в выражении для наблюдаемой величины (что было предложено в работе [8] для случая однократного рассеяния), построили теоретическое описание интенсивности малоуглового рассеяния исходя из выражения для волновой функции в эйкональном приближении. Получено такое же выражение для интенсивности, как следует из концепции амплитуды рассеяния, но при условиях I–III, которые значительно мягче условия дифракции Фраунгофера.

Авторы благодарят В.М. Каганера за полезные обсуждения.

Список литературы

[1] Д.И. Свергун, Л.А. Фейгин. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние. Наука, М. (1986). 279 с.
[2] F.S. Dzheparov, D.V. Lvov. Cryst. Rep. **56**, 16 (2011).
[3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989). 768 с.
[4] М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики. Наука, М. (1973). 721 с.
[5] Н.В. Бондаренко, Н.Ф. Шульга. ТМФ **115**, 280 (1998).
[6] Ф.С. Джепаров, Д.В. Львов. Письма в ЖЭТФ **72**, 518 (2000).
[7] Ф.С. Джепаров, К.С. Забелин, Д.В. Львов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **9**, 9 (2009).
[8] С.М. Рытов, Ю.А. Кравцов, В.И. Татарский. Введение в статистическую радиофизику. Случайные поля. Наука, М. (1978). Ч. 2. 463 с.