

01

Уравнения для импульса и энергии рентгеновского волнового поля в кристалле

© А.А. Дышеков

Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова,
Нальчик, Россия

E-mail: dyshekov@yandex.ru

Поступило в Редакцию 25 июня 2018 г.

Предложен новый подход для описания взаимодействия рентгеновского излучения в кристаллической среде. Получены общие соотношения для изменения импульса и энергии электромагнитного поля для случая немагнитной среды с переменной диэлектрической проницаемостью. Введена специальная локальная система координат для неоднородной среды, в которой тензор натяжений Максвелла имеет канонический вид, определяемый плотностями энергии и импульса. Получены основные соотношения для изменения плотностей энергии и импульса в системе координат, связанной с направлением распространения импульса плоской электромагнитной волны в однородной среде.

DOI: 10.21883/PJTF.2018.19.46689.17435

Как известно, для анализа электромагнитного поля в неоднородной периодической среде используются уравнения Максвелла вместе с материальными соотношениями для индукций и напряженностей полей, которые, в частности, служат основой теоретического описания процессов рентгеновской дифракции в кристаллах [1,2]. Вместе с тем не существует физических приборов, способных измерять напряженности полей в рентгеновском диапазоне частот. Для непосредственного сопоставления теории и эксперимента необходимо найти энергетические характеристики поля, составляющие тензор энергии-импульса — объемную плотность энергии, определяющую интенсивность волны, а также компоненты вектора Умова–Пойнтинга, задающие направление распространения волны в пространстве.

В связи с этим представляет интерес описание рентгеновского волнового поля в кристалле с использованием пространственного рас-

пределения динамических переменных: энергии и импульса поля. При таком подходе оказывается, что поляризуемость $\chi(\mathbf{r})$ определяет локальную геометрию среды по отношению к пространственно-временному изменению энергии и импульса.

Пара уравнений Максвелла для поля в немагнитной среде в отсутствие зарядов и токов имеет вид

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}.\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь используются стандартные обозначения для оператора Гамильтона и векторного произведения. Материальное уравнение в отличие от обычной макроскопической теории диэлектриков локально связывает электрическую индукцию \mathbf{D} и напряженность электрического поля \mathbf{E} в каждой точке пространства посредством диэлектрической проницаемости ε (или поляризуемости χ) как непрерывной функции координат

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

В случае идеального кристалла $\chi(\mathbf{r})$ представляет собой трехмерно-периодическую функцию, которая может быть представлена в виде соответствующего ряда Фурье. Получим известный в электродинамике закон изменения импульса поля в общем случае $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$. Для этого преобразуем величину $(\nabla \times \mathbf{E}) \times \mathbf{D}$ в некотором ортонормированном декартовом базисе \mathbf{i}_m и с учетом (1) и условия $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$ получим

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

Аналогично, согласно (1) и условию $\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$, найдем величину $(\nabla \times \mathbf{H}) \times \mathbf{H}$

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

В (3) и (4) введены внешние произведения векторов — диады $\mathbf{DE} = D_i E_j$, $\mathbf{HH} = H_i H_j$, а также единичный тензор $\mathbf{I} = \mathbf{i}_m \mathbf{i}_m$. Теперь образуем сумму (3) и (4) и с учетом (1) получим

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

Здесь введен тензор натяжений Максвелла в среде \mathbf{T}

$$\mathbf{T} = \mathbf{D}\mathbf{E} + \mathbf{H}\mathbf{H} - w\mathbf{I}, \quad (6)$$

плотность энергии

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

а также объемная плотность полного импульса поля $\mathbf{P} = \frac{1}{c}(\mathbf{D} \times \mathbf{H})$ (кратко будем называть ее импульсом). Согласно уравнению (5), в общем случае изменение полного импульса поля определяется как тензором Максвелла, так и градиентом диэлектрической проницаемости $\nabla\epsilon$.

Аналогично после соответствующих преобразований из (1) получим

$$\nabla \cdot \mathbf{P} - \frac{\nabla\epsilon}{\epsilon} \mathbf{P} = -\frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial w}{\partial t}. \quad (8)$$

Система уравнений (5), (8) в общем случае оказывается незамкнутой относительно w и \mathbf{P} , поскольку, согласно (6), в нее входят поля \mathbf{D} , \mathbf{E} и \mathbf{H} . Чтобы сделать систему (5), (8) замкнутой, необходимо привести тензор \mathbf{T} к диагональному виду. При этом необходимо иметь в виду, что в отличие от общего случая тензор \mathbf{T} описывает поле волнового типа без источников и токов. В этом случае, как показывает анализ возможностей приведения релятивистского тензора поля к каноническому виду, для того, чтобы тензор \mathbf{T} описывал поле, необходимы следующие условия:

1) ортогональность полей

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{H} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (9)$$

2) связь амплитуд полей

$$DE = \epsilon E^2 = H^2. \quad (10)$$

Если условия (9), (10) выполнены, тензор \mathbf{T} приобретает канонический вид

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

где $\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_3(\mathbf{r})$ — единичный вектор направления переноса импульса поля. Очевидно, тензор \mathbf{T} локально определяется плотностью энергии w и направлением переноса импульса \mathbf{e}_3 . Можно показать, что

условия (9), (10) непосредственно связаны с определением инвариантов релятивистского тензора поля.

Таким образом, если записать систему (5), (8) в локальном базисе $\mathbf{e}_j(\mathbf{r})$, то она оказывается замкнутой относительно \mathbf{P} и w и может быть переписана в следующем виде:

$$\begin{aligned} \nabla' \cdot \mathbf{T} + \frac{w}{\varepsilon(1+\varepsilon)} \nabla' \varepsilon &= \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}, \\ \nabla' \cdot \mathbf{P} - \frac{\nabla' \varepsilon}{\varepsilon} \cdot \mathbf{P} &= -\frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial w}{\partial t}. \end{aligned} \quad (11)$$

В (11) штрих означает дифференцирование в локальном базисе $\mathbf{e}_j(\mathbf{r})$.

Уравнения (11) формально решают поставленную задачу описания динамики волнового поля в неоднородной среде в переменных энергии и импульса. Вместе с тем система (11) не может быть непосредственно использована для расчета импульса и энергии поля, поскольку локальная ориентация базиса $\mathbf{e}_j(\mathbf{r})$ остается неизвестной.

Для решения этой задачи необходимо связать базис $\mathbf{e}_j(\mathbf{r})$ с лабораторным базисом, за который естественно выбрать единичные векторы в направлениях векторов \mathbf{D} , \mathbf{H} и $\mathbf{D} \times \mathbf{H}$, соответствующих распространению плоской электромагнитной волны в среде с постоянной диэлектрической проницаемостью ε_0 . В случае кристалла для рентгеновского диапазона длин волн величина ε_0 есть среднее значение $\varepsilon(\mathbf{r})$ по элементарной ячейке кристалла и отвечает за преломление волны.

При этом необходимо учесть условие локальной ортогональности волнового поля, из которого следует, что изменение базиса при переходе от точки к точке происходит только вследствие поворота φ декартового базиса преломленной плоской волны вокруг некоторой оси в пространстве.

Таким образом, необходимо найти связь дифференциальных операций в двух различных ортогональных базисах, связанных локальным углом поворота. При этом необходимо учесть, что поляризуемость $\chi(\mathbf{r})$ в рентгеновском диапазоне длин волн имеет порядок $10^{-5} - 10^{-6}$, а значит, угол поворота φ есть малая величина.

Для решения этой задачи воспользуемся формализмом функционального дифференцирования [3], который обычно используется в вариационном анализе. Такой подход позволяет получать выражения для дифференциальных операций, применяемых к векторам и тензорам,

в бескоординатном виде. При этом аналогом обычного дифференцирования служит производная Гато [3]. Используя формализм производной Гато, получим

$$\nabla' \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot \mathbf{P} - \nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{P}), \quad (12)$$

$$\nabla' \varepsilon = (\mathbf{I} + \mathbf{I} \times \boldsymbol{\varphi} + \mathbf{r} \times \nabla \boldsymbol{\varphi}) \cdot \nabla \varepsilon, \quad (13)$$

$$\nabla' \cdot \mathbf{T} = -(\nabla w \cdot \mathbf{i}_3)(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_3) - 2w(\nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_3))\mathbf{i}_3, \quad (14)$$

Выберем стандартное представление для диэлектрической проницаемости идеального кристалла в рентгеновском диапазоне длин волн

$$\varepsilon = 1 + \chi_0 + \chi_h \left(\exp(i\mathbf{hr}) + \frac{\chi_{\bar{h}}}{\chi_h} \exp(-i\mathbf{hr}) \right) = \varepsilon_0 + \chi_h f(\mathbf{hr}). \quad (15)$$

Здесь использованы обычные обозначения χ_h и $\chi_{\bar{h}}$ для фурье-компонент поляризуемости, \mathbf{h} — вектор обратной решетки.

Определим микроскопический вектор смещения \mathbf{u} при переходе от одного базиса к другому вдоль соответствующих направлений осей координат, который изменяется в масштабах элементарной ячейки.

Используем теперь аналогию с теорией упругости [4], согласно которой через малые смещения среды определяется антисимметричный тензор вращений $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{r})$ и соответствующий ему дуальный вектор малых поворотов $\boldsymbol{\varphi}$ окрестности заданной точки среды как целого вокруг оси вращения. Согласно теории упругости, вектор поворота $\boldsymbol{\varphi}$ определяется через ротор вектора смещения [4]:

$$\boldsymbol{\varphi} = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{u}. \quad (16)$$

Используя (15) и (16), с учетом малости $\boldsymbol{\varphi}$ получим

$$\boldsymbol{\varphi} = \frac{\chi_h}{4} (\nabla f \times (2\mathbf{i}_1 + \mathbf{i}_2 + \mathbf{i}_3)) = \frac{\nabla \chi}{4} \times (2\mathbf{i}_1 + \mathbf{i}_2 + \mathbf{i}_3), \quad (17)$$

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

Согласно (17), угол поворота $\boldsymbol{\varphi}$ определяет локальную меру отклонения геометрии среды от континуального приближения, соответствующего распространению плоской волны.

Отметим, что вектор $\boldsymbol{\varphi}$ при условии $\chi = \chi(\mathbf{hr})$ сохраняет ориентацию в пространстве и не совпадает с базисными векторами \mathbf{i}_m .

Следовательно, при прохождении волны в общем случае реализуется суперпозиция σ - и π -поляризаций. Разумеется, сохранение ориентации вектора $\boldsymbol{\varphi}$ в пространстве есть специфическое свойство только идеального кристалла.

В линейном приближении по малой величине χ из (11) следует система

$$\begin{aligned}\nabla' \cdot \mathbf{T} + w \nabla \varepsilon &= \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}, \\ \nabla' \cdot \mathbf{P} - \nabla \varepsilon \cdot \mathbf{P} &= -\frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial w}{\partial t}.\end{aligned}$$

Тогда, используя формулы (12)–(14) и (17), получим

$$\begin{aligned}- (\nabla w \cdot \mathbf{i}_3)(\mathbf{i}_3 + \boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_3) - 2w(\nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{i}_3))\mathbf{i}_3 + w \nabla \chi &= \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}, \\ \nabla \cdot \mathbf{P} - \nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi} \times \mathbf{P}) - \nabla \chi \cdot \mathbf{P} &= -\frac{1 + \chi(\mathbf{r})}{c^2} \frac{\partial w}{\partial t}.\end{aligned}\quad (18)$$

Уравнения (18) позволяют рассчитывать импульс и энергию поля при его взаимодействии с неоднородной средой и, в частности, с кристаллом. Они представляют собой основные соотношения теории.

Список литературы

- [1] Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982. 392 с.
- [2] Dyshakov A.A. // Cryst. Rep. 2013. V. 58. N 7. P. 984–989.
- [3] Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1981. 544 с.
- [4] Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1975. 680 с.