НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЕ УЧЕРЕЖДЕНИЕ
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ
им. Г.И. Будкера СО РАН

С. В. Мытниченко

БОРНОВСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ИСКАЖЕННЫХ ВОЛН В СЛУЧАЕ ОПТИЧЕСКОГО ОСНОВНОГО ПОТЕНЦИАЛА

ИЯФ 2004-25

Новосибирск
2004

Борновское приближение искаженных волн
в случае оптического основного потенциала

С. В. Мытниченко

В работе показано, что использование борновского приближения искаженных волн в обычной форме, разработанной для случая действительного основного потенциала, может привести к заметным ошибкам при расчетах сечения рентгеновского рассеяния от неидеальных кристаллов, сверхрешеток, многослойных тонких пленок и других объектов в случае, когда диссипация энергии когерентной волны (фотопоглощение, неупругое рассеяние и др.) не является пренебрежимо слабым процессом, то есть основной потенциал является оптическим (комплексным). Показано, как в таком случае в рамках борновского приближения искаженных волн может быть получено корректное выражение для сечения рентгеновского диффузного рассеяния. В общем случае сечение рассеяния на оптическом потенциале не является T-инвариантным, то есть оптическая теорема взаимности нарушается. Чем существеннее динамический характер дифракции на основном потенциале, тем заметнее нарушения T - инвариантности.

Относительно слабое взаимодействие рентгеновского излучения с веществом позволяет, как правило, успешно использовать борновское (кинематическое) приближение для расчетов сечения рентгеновского рассеяния. Однако, при дифракции на некоторых объектах, таких как, кристаллы, сверхрешетки, гладкие одиночные поверхности, многослойные тонкие пленки (МТП) динамическое взаимодействие рентгеновских волн может оказаться существенным. Динамическая теория рассеяния от таких объектов развита давно и с успехом применяется для расчетов зеркальной когерентной дифракции. Что касается не зеркального диффузного рассеяния, возникающего из-за различных нарушений структуры, то в последнее время для его расчетов широко используется борновское приближение искаженных волн (distorted-wave Born approximation, DWBA) [1–8], в котором принимается, что основное поле можно описать обычной динамической теорией, а различные отклонения структуры от идеальной можно рассматривать как возмущение. Заметим, что во всех вышеперечисленных ссылках использовался формализм DWBA, предполагающий вещественным основной потенциал, в то время как в реальности рассеивающий потенциал является оптическим. Такое пренебрежение диссипацией энергии из когерентной волны может привести в ряде случаев к заметным ошибкам в расчетах. В частности, в рамках такого подхода сечение диффузного рассеяния всегда оказывается T-инвариантным, то есть сечение рассеяния рентгеновского фотона из состояния с волновым вектором $\boldsymbol{k}_0$ в состояние с $\boldsymbol{k}_1$ равно сечению рассеяния из состояния с $-\boldsymbol{k}_1$ в состояние с $-\boldsymbol{k}_0$:

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{k}_1) = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}(-\boldsymbol{k}_1 \to -\boldsymbol{k}_0). \tag{1}$$

Такое равенство обусловлено симметрией уравнений Максвелла относительно обращения времени и в общем случае справедливо для консервативных систем.[1] В частности, это равенство выполняется всегда в обычном борновском приближении, в котором поток энергии в опорной волне сохраняется в принудительном порядке за счет нарушения оптической теоремы. Это же справедливо и для борновского приближения искаженных волн в случае вещественного основного потенциала. Тем не менее, в эксперименте обсуждаемая симметрия нередко отсутствует [10–13].

Мнимая добавка к потенциалу возникает как следствие сведения многоканальной задачи рассеяния с учетом многих возможных процессов (фотопоглощение, неупругое, упругое некогерентное рассеяние и др.) к одноканальной задаче, в которой учитывается только упругое когерентное рассеяние. В настоящей работе, на примере фотопоглощения показано, как можно модернизировать стандартный формализм DWBA для расчетов диффузного рентгеновского рассеяния от МТП или других аналогичных объектов с учетом того факта, что основной потенциал имеет комплексный вид.

Задача о вычислении сечения рентгеновского рассеяния от МТП сводится к решению волнового уравнения

$$(\Delta + k^2)E(\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r})E(\boldsymbol{r}) , \qquad (2)$$

где Δ – оператор Лапласа, $k = 2\pi/\lambda$ – волновой вектор монохроматического рентгеновского излучения, $E(\boldsymbol{r})$ – решение волнового уравнения, $V(\boldsymbol{r}) = 4\pi r_0 \rho(\boldsymbol{r})$ – рассеивающий потенциал, r_0 – классический радиус электрона и $\rho(\boldsymbol{r})$ – электронная плотность в точке $\boldsymbol{r}$.[2] DWBA может быть использовано для решения волнового уравнения (2), если потенциал можно разбить на две неэквивалентные части

[1] В рентгеновской оптике и дифракции соотношение (1) известно как следствие оптической теоремы взаимности (reciprocity principle), впервые сформулированной еще Лоренцом, что если поменять источник и приемник рентгеновских лучей местами, то интенсивность регистрируемого сигнала не должна измениться [9]. В свою очередь теорема взаимности – следствие *T*-инвариантности, симметрии относительно обращения времени.

[2] В уравнении (2) поляризация падающего и рассеянного излучения не учитывалась, так как величины углов дифракции рентгеновского излучения от МТП предполагались малыми. В случае, когда такое допущение не справедливо, не трудно модернизировать уравнение (2), введя соответствующий поляризационный фактор.

$$V(\boldsymbol{r}) = V_0(z) + \Delta V(\boldsymbol{r}),$$

так, что решения $E_0(\boldsymbol{r})$ волнового уравнения (2) с латерально симметричной частью всего потенциала $V_0(z) = \langle V(\boldsymbol{r}) \rangle_{x,y}$ известны (ось z направлена перпендикулярно латеральным плоскостям, Рис. 1), а полные решения $E(\boldsymbol{r})$ можно получить, используя теорию возмущений.

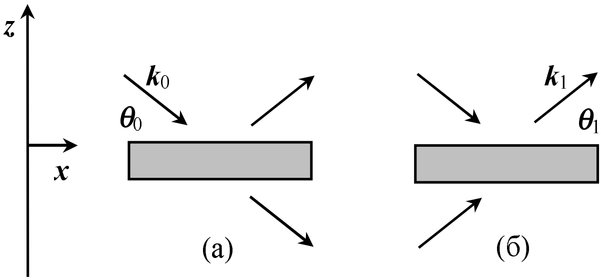

Рис. 1. Состояния $|E, \boldsymbol{k}_0 +\rangle$ (а) и $|E, \boldsymbol{k}_1 -\rangle$ (б).

Пусть основной потенциал $V_0(\boldsymbol{r})$ является вещественным, и, соответственно, основной гамильтониан $H_0 = -\Delta + V_0(z)$ эрмитов. В этом случае решения $E_0(\boldsymbol{r})$ составляют полный ортонормированный базис и амплитуду не зеркального диффузного рассеяния можно представить как простой матричный элемент перехода между двумя состояниями основного гамильтониана [14]

$$\Delta f(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{k}_1) = \frac{1}{4\pi B} \langle E, \boldsymbol{k}_1 - | \Delta V(\boldsymbol{r}) | E, \boldsymbol{k}_0 + \rangle, \qquad (3)$$

где B – коэффициент, зависящий от нормировки состояний основного гамильтониана, $B = 1$, если падающая волна представлена как $\exp(i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r})$, $|E, \boldsymbol{k}_0 +\rangle = E_{k_0}(\boldsymbol{r})$ – состояние, в котором «до рассеяния» рентгеновский фотон обладал волновым вектором $\boldsymbol{k}_0$ (Рис. 1а), а $|E, \boldsymbol{k}_1 -\rangle$ – состояние, в котором «после рассеяния» рентгеновский фотон будет обладать волновым вектором $\boldsymbol{k}_1$ (Рис. 1б). Что касается состояния $|E, \boldsymbol{k}_0 +\rangle$, то его физическая интерпретация не вызывает особых затруднений. Несколько иная ситуация в случае состояния $|E,\boldsymbol{k}_1-\rangle$, которое, строго говоря, невозможно реализовать физически. Формально, такое состояние можно построить, инвертируя во времени, что эквивалентно комплексному сопряжению, решение, в котором «до рассеяния» волновой вектор падающего излучения был $-\boldsymbol{k}_1$. Таким образом, $|E,\boldsymbol{k}_1-\rangle = |E,-\boldsymbol{k}_1+\rangle^*$, что позволяет записать амплитуду диффузного рассеяния как

$$\Delta f(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{k}_1) = \frac{1}{4\pi}\int E_{-\boldsymbol{k}_1}(\boldsymbol{r})\,\Delta V(\boldsymbol{r}) E_{\boldsymbol{k}_0}(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}\,. \tag{4}$$

Обратим внимание, что амплитуда рассеяния (4) автоматически T-инвариантна. Действительно, матричный элемент (4) можно рассматривать как амплитуду рассеяния $\Delta f(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{k}_1)$, так и как амплитуду рассеяния $\Delta f(-\boldsymbol{k}_1 \to -\boldsymbol{k}_0)$.[1]

Пусть теперь основной потенциал $V_0(z)$ будет оптическим и, соответственно, основной гамильтониан $H_0 = -\Delta + V_0(z)$ становится не эрмитовым. Это приводит к нескольким важным последствиям. Во-первых, обращенное во времени состояние $E^*_{-\boldsymbol{k}_1}(\boldsymbol{r})$ уже не является решением волнового уравнения (2) с $V(\boldsymbol{r}) = V_0(z)$. Во-вторых, амплитуду рассеяния уже невозможно представить как простой матричный элемент перехода между двумя собственными состояниями основного гамильтониана. В-третьих, плотность потока для решений основного гамильтониана уже не является инвариантом пространственных координат. Безусловно, все эти последствия взаимосвязаны и не позволяют напрямую использовать выражение (4) для вычисления амплитуды рассеяния. Однако, хотя состояние $E^*_{-\boldsymbol{k}_1}(\boldsymbol{r})$ уже не является решением, построить решение волнового уравнения $|E,\boldsymbol{k}_1-\rangle$, в котором «после рассеяния» рентгеновский фотон будет иметь волновой вектор $\boldsymbol{k}_1$ не представляет особого труда. Для этого достаточно инвертировать во времени решение волнового уравнения (2) с комплексно сопряженным потенциалом $V(\boldsymbol{r}) = V_0^*(z)$, в котором «до рассеяния» фотон имел волновой вектор $-\boldsymbol{k}_1$,

[1] Небольшая асимметрия, известная как геометрический фактор, может возникнуть как результат разных пределов интегрирования в выражении (4).

$$\left| E, \boldsymbol{k}_1 - \right\rangle = E^*_{-\boldsymbol{k}_1}(V_0^*, \boldsymbol{r}) .$$

Заметим, что при таком построении решение $\left| E, \boldsymbol{k}_1 - \right\rangle$ нормировано так, что «выходная» волна представлена как $\exp(i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r})$. Отсюда очевидна возникающая проблема перенормировки построенного таким способом состояния $\left| E, \boldsymbol{k}_1 - \right\rangle$. Подчеркнем, что простым умножением этого состояния на некоторую константу эта проблема не может быть решена. Можно ожидать, однако, что амплитуду диффузного рассеяния можно представить в виде:

$$\Delta f(\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{k}_1) = \frac{1}{4\pi} \int C(z) E_{-\boldsymbol{k}_1}(V_0^*, \boldsymbol{r}) \Delta V(\boldsymbol{r}) E_{\boldsymbol{k}_0}(V_0, \boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r} , \tag{5}$$

где $C(z)$ – коэффициент перенормировки, зависящий только от координаты z в силу того, что основной гамильтониан зависит только от этой координаты. Таким образом, задача состоит как в обосновании выражения (5), так и в отыскании перенормировочного коэффициента.

Заметим, что выражению для амплитуды рассеяния (3) можно придать достаточно очевидный физический смысл. Подынтегральное выражение можно рассматривать как произведение амплитуд вероятностей для трех событий: амплитуды вероятности побывать в точке $\boldsymbol{r}$ фотону с импульсом $\boldsymbol{k}_0$ «до рассеяния», тоже для фотона с импульсом $\boldsymbol{k}_1$ «после рассеяния» и амплитуды вероятности перехода $\left| E, \boldsymbol{k}_0 + \right\rangle \to \left| E, \boldsymbol{k}_1 - \right\rangle$ в точке $\boldsymbol{r}$, вычисленной в простом борновском приближении. Суммирование по всем точкам дает полную амплитуду рассеяния.[1] Преимущество такого подхода заключается в том, что его вполне можно применить к амплитуде рассеяния (5) с уточнениями, которые достаточно очевидны с физической точки зрения. Первое обстоятельство заключается в том, что величина $E^*_{-\boldsymbol{k}_1}(V_0^*, \boldsymbol{r})$ не вполне точно отражает амплитуду вероятности «побывать» в точке $\boldsymbol{r}$ фотону, который *уже* попал в конечное состояние свободного гамильтониана $\left| \boldsymbol{k}_1 \right\rangle$, так как часть фотонов перешедших из состояния $\left| E, \boldsymbol{k}_0 + \right\rangle$ в состояние $\left| E, \boldsymbol{k}_1 - \right\rangle$ в точке $\boldsymbol{r}$ в последующем поглотились. Для корректного учета этого факта матричный элемент в подынтегральном выражении (3)

---

[1] Такая интерпретация в духе интегралов по траекториям [15] оказывается весьма полезной для описания диссипативных квантовых систем [16].

необходимо умножить на $a(z)$ – амплитуду вероятности для фотона, совершившего переход $|E,\boldsymbol{k}_0+\rangle \to |E,\boldsymbol{k}_1-\rangle$ в точке $\boldsymbol{r}$, «добраться» в последующем до своего конечного состояния $|\boldsymbol{k}_1\rangle$. Второе обстоятельство заключается в том, что, даже сделав вышеупомянутую коррекцию, выражение (3) будет давать не амплитуду рассеяния в точке $\boldsymbol{r}$, а амплитуду вероятности перехода $|E,\boldsymbol{k}_0+\rangle \to |E,\boldsymbol{k}_1-\rangle$ в этой точке. Чтобы это учесть, матричный элемент (3) надо еще раз умножить на $a(z)$. Отсюда видно, что коэффициент перенормировки, $C(z)$, имеет простой физический смысл, как *вероятность* для фотона в состоянии $|E,\boldsymbol{k}_1-\rangle$, находящемуся в точке с координатой z, «добраться» в последующем до своего конечного состояния $|\boldsymbol{k}_1\rangle$ не поглотившись.

Получить строгое выражение для вычисления такой вероятности не является целью настоящей работы. Приближенно, коэффициент перенормировки может быть вычислен по формуле:

$$C(z) = \left| E_{-\boldsymbol{k}_1}(V_0, \boldsymbol{r}) / E_{-\boldsymbol{k}_1}(\mathrm{Re}(V_0), \boldsymbol{r}) \right|^2 .$$

В случае, когда угол рассеяния не равен брэгговскому углу и дифракцией можно пренебречь,

$$C(z) = \exp\left(\frac{\mu}{\sin\theta_1} z\right), \tag{6}$$

где $\mu > 0$ – линейный коэффициент фотопоглощения, θ_1 – угол рассеяния (Рис. 1). Отметим следующий интересный факт, что в общем случае коэффициент перенормировки может быть не равен единице в точке $z = 0$,[1] и падать в глубину МТП существенно быстрее по сравнению с (6). В соответствии с эффектом Бормана, возможна и обратная ситуация, когда $C \cong 1$ при любых z.

Достаточно очевидно, что в общем случае T-инвариантность в выражении для амплитуды диффузного рассеяния (5) нарушается, поскольку коэффициент перенормировки не зависит от состояния рентгеновского фотона «до рассеяния» на возмущающем потенциале. Однако в некоторых

---

[1] Это легко понять, принимая во внимание тот факт, что источники диффузного рассеяния могут находиться не только внутри МТП, но и на поверхности в виде «грязи» ($\Delta V \neq 0$ при $z > 0$). Рассеявшись на такой «грязи» рентгеновский фотон, очевидно, имеет вероятность в последующем поглотиться внутри МТП.

случаях, за счет дополнительной симметрии соотношение (1) может оставаться справедливым. Рассмотрим два частных важных примера общей задачи рассеяния, допускающих наглядную физическую интерпретацию. Первый из них – рассеяние в условиях сильного фотопоглощения, когда динамическим характером зеркальной дифракцией можно пренебречь, то есть углы падения и рассеяния не равны брэгговскому. В приближении постоянного показателя преломления внутри МТП, в том числе его мнимой части, не трудно получить следующие выражения:

$$\left|E,\boldsymbol{k}_0+\right\rangle = \exp(ik_{0x}x+ik_{0y}y+ik_{0z}z+\frac{\mu}{2\sin\theta_0}z)\,,\quad \left|E,\boldsymbol{k}_1-\right\rangle = \exp(ik_{1x}x+ik_{1y}y+ik_{1z}z-\frac{\mu}{2\sin\theta_1}z)\,,$$

$$C(z)=\exp(\frac{\mu}{\sin\theta_1}z) \qquad \text{и} \qquad \Delta f(\boldsymbol{k}_0\to\boldsymbol{k}_1)=\frac{1}{4\pi}\int\Delta V(\boldsymbol{r})\exp(-i\boldsymbol{qr}+\frac{\mu}{2}(\sin^{-1}\theta_0+\sin^{-1}\theta_1)z)d\boldsymbol{r}\,,$$

где θ_0 – угол падения (Рис. 1) и $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{k}_0$ – переданный импульс. Легко видеть, что полученная амплитуда рассеяния сохраняет условие (1) справедливым, что имеет простой физический смысл. Действительно, рассмотрим рассеяние от дефекта, расположенного в МТП на глубине h. Амплитуда рассеяния на таком дефекте должна быть пропорциональна амплитуде падающей волны, претерпевающей ослабление за счет фотопоглощения на длине пути $h\sin^{-1}\theta_0$. Амплитуда рассеянной волны ослабляется на пути $h\sin^{-1}\theta_1$. Полный путь, $h(\sin^{-1}\theta_0+\sin^{-1}\theta_1)$, оказывается одинаковым как для рассеяния $\boldsymbol{k}_0\to\boldsymbol{k}_1$, так и для рассеяния $-\boldsymbol{k}_1\to-\boldsymbol{k}_0$. Таким образом, выполнение условия (1) обеспечено тем, что сечение фотопоглощения не зависит от направления распространения рентгеновской волны в МТП.

Рассмотрим теперь случай, когда динамический характер дифракции существенен, и будем полагать комплексную часть потенциала постоянной внутри МТП. Например, пусть угол падения равен брэгговскому, а угол рассеяния, соответственно, отличается от брэгговского угла. В отсутствии фотопоглощения, согласно условию (1), сечения для рассеяния $\boldsymbol{k}_0\to\boldsymbol{k}_1$ и $-\boldsymbol{k}_1\to-\boldsymbol{k}_0$ должны быть равны. Тем не менее, эти случаи существенно отличаются тем, что «средний путь» фотона в МТП для рассеяния $\boldsymbol{k}_0\to\boldsymbol{k}_1$ должен быть заметно меньшим вследствие двух причин. Во-первых, за счет быстрого затухания вглубь МТП основной волны в условиях динамической дифракции при брэгговском угле падения. Во-вторых, фотон, перешедший внутри МТП в состояние с брэгговскими углами распространения, оказывается в «ловушке» и прежде, чем добраться до своего конечного состояния, должен претерпеть многократные отражения. Следовательно, вероятность поглотиться у фотона в случае рассеяния $\boldsymbol{k}_0 \to \boldsymbol{k}_1$ заметно меньше,[1] что и приводит к нарушению условия (1).

Резюмируя, полученное выражение для амплитуды рассеяния (5) с соответствующим коэффициентом перенормировки позволяет корректно использовать метод DWBA для расчетов дифракции на оптическом потенциале от МТП. В общем случае, T-инвариантность сечений рассеяния в этом случае не сохраняется, причем тем сильнее, чем существеннее динамический характер дифракции.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 03-02-16259.

Литература

[1] *S. K. Sinha, E. B. Sirota, S. Garoff et al.,* Phys. Rev. B**38**, 2297 (1988).

[2] *R. Pynn,* Phys. Rev. B**45**, 602 (1992).

[3] *V. Holý, J. Kubena, I. Ohlídal et al.,* Phys. Rev. B**47**, 15896 (1993).

[4] *D. K. G. de Boer,* Phys. Rev. B**49**, 5817 (1994).

[5] *V. Holý and T. Baumbach,* Phys. Rev. B**49**, 10668 (1994).

[6] *D. K. G. de Boer,* Phys. Rev B**51**, 5297 (1995).

[7] *M. Kopecky,* J. Appl. Phys. **77**, 2380 (1995).

[8] *D. K. G. de Boer and A. J. G. Leenaers,* Physica B**221**, 18 (1996).

[9] *Р. Джеймс,* Оптические принципы диффракции рентгеновских лучей, Москва: Издательство иностранной литературы (1950). [*R. W. James,* The Optical Principles of the Diffraction of X-rays, London: Bell (1950).]

[10] *V. A. Chernov, E. D. Chkhalo, N. V. Kovalenko et al.,* Nucl. Instrum. and Meth. A**448**, 276 (2000).

[11] *V. A. Chernov, V. I. Kondratiev, N. V. Kovalenko et al.,* Nucl. Instrum. and Meth.. A**470**, 145 (2001).

[1] Как уже упоминалось выше, в случае, когда альтернативные слои МТП имеют разные мнимые составляющие коэффициента преломления, за счет эффекта стоячей волны ситуация может оказаться обратной.

[12] *V. A. Chernov, V. I. Kondratiev, N. V. Kovalenko et al.*, J. Appl. Phys. **92**, 7593 (2002).

[13] *V. A. Chernov, N. V. Kovalenko, S. V. Mytnichenko et al.*, Acta Cryst. A**59**, 551 (2003).

[14] *Дж. Тейлор*, Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений, Москва: «МИР» (1975). [*J. R. Taylor*, Scattering Theory. The Quantum theory on Nonrelativistic Collisions, New York: John Wiley (1972).]

[15] *Р. Фейнман, А. Хибс*, Квантовая механика и интегралы по траекториям, Москва: «МИР» (1968). [*R. P. Feynman and A. R. Hibbs*, Quantum Mechanics and Path Integrals, New York: McGraw-Hill (1965).]

[16] *М. Б. Менский*, УФН **173**, 1199 (2003).

С. В. Мытниченко

Борновское приближение искаженных волн
в случае оптического основного потенциала

S. V. Mytnichenko

Distorted-wave Born approximation
in the case of optical basic potential

ИЯФ 2004-25

Ответственный за выпуск А.М. Кудрявцев
Работа поступила 14.11. 2004 г.

Сдано в набор 20.11.2004 г.
Подписано в печать 22.11.2004 г.
Формат 60х90 1/16 Объем 1.7 печ.л., 1.4 уч.-изд.л.
Тираж 100 экз. Бесплатно. Заказ № 25

Обработано на IBM PC и отпечатано
На ротапринте ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН,
Новосибирск., 630090, пр. Академика Лаврентьева, 11