

УДК 548.732

КОН В. Г.

ОБ ЭФФЕКТЕ АНОМАЛЬНО СЛАБОГО ПОГЛОЩЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В МОНОКРИСТАЛЛЕ В УСЛОВИЯХ 12-ВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ

Впервые теоретически рассмотрен случай 12-волновой дифракции рентгеновских лучей в монокристалле германия. Все векторы обратной решетки в этом случае лежат в одной плоскости и образуют многоугольник, стороны которого представляют собой шестикратное повторение векторов типа (220) и (422). Найдена аналитическая формула для собственных векторов дифракционной задачи при строгом выполнении условий Вульфа — Брэгга. Проведен расчет и классификация коэффициентов поглощения блоховских волн для всех возможных длин волны излучения и их угловой зависимости для AgK_{α} -излучения. Минимальный коэффициент поглощения полностью определяется комптоновским рассеянием и для AgK_{α} -излучения при $T=300$ К в тысячу раз меньше нормального коэффициента поглощения. Фотоэлектрическое поглощение уменьшается в 20 тысяч раз и более.

1. Введение

В последние годы многоволновая дифракция рентгеновских лучей привлекает внимание исследователей в основном из трех причин. Во-первых, из-за возможности получения нескольких когерентных пучков при дифракции в одном кристалле [1], возможности создания компактного монохроматора для синхротронного излучения [2] и рентгеновского резонатора [3]. Во-вторых, из-за новых возможностей фокусировки излучения как в плоском [4], так и в упруго изогнутом кристалле [5]. В-третьих, из-за резкого увеличения длины свободного пробега фотонов при многоволновой дифракции с большим числом дифрагированных волн [6–8].

Впервые эффект усиления аномального прохождения рентгеновских лучей в условиях трехволновой (111/111) дифракции в германии по сравнению с двухволновым (111) случаем обнаружен экспериментально Борманом и Хартвигом [9] и объяснен в ряде теоретических работ [10, 11]. Однако в этом случае минимальный коэффициент поглощения блоховской волны (МКПБВ) все же имеет значение вполне сопоставимое с двухволновым МКПБВ для других отражений (например 220). Другими словами, он пропорционален первой степени показателя экспоненты фактора Дебая — Валлера, $W=0,5h^2\langle u^2 \rangle$, т. е. среднеквадратичным смещениям атомов из положения равновесия $\langle u^2 \rangle$ (h — модуль вектора обратной решетки), и в этом смысле является линейным эффектом Бормана.

Совершенно иная ситуация имеет место в симметричных 4-волновом и 6-волновом случаях дифракции по Лауэ с четно-четными отражениями, для которых структурный фактор равен единице. Как было показано в [7], при учете лишь фотоэлектрического поглощения МКПБВ при некоторых условиях пропорционален W^2 и $2W^3$ в 4-волновом и в 6-волновом случаях соответственно. В этих случаях можно говорить о нелинейном эффекте Бормана [12]. Естественно возникает вопрос: что же происходит при дальнейшем увеличении числа дифрагированных волн? В кристаллах с решеткой типа алмаза и сфалерита возможны 8-волновая и 12-волновая дифракция с четно-четными рефлексам. Однако векторы обратной решетки в этих случаях не образуют полностью симметричную фигуру и решение, найденное в [7], здесь неприменимо. По этой же причине вопрос о дальнейшем увеличении длины свободного пробега фотонов при увеличении числа волн, но без повышения симметрии является нетривиальным.

В данной работе впервые рассмотрен случай 12-волновой дифракции рентгеновских лучей (220/462/484/2 10 8/0 10 10/7 8 12/6 6 12/8 2 10/808/

$/\sqrt{6}24/4\sqrt{2}2$), найдена аналитическая формула для собственных векторов дифракционной задачи при точном выполнении условий Вульфа — Брэгга для всех отражений, проведен расчет и классификация коэффициентов поглощения блоховских волн в кристалле германия для всех возможных длин волн излучения и их угловой зависимости в случае AgK_{α} -излучения. Векторы обратной решетки в этом случае образуют многоугольник, вписанный в окружность достаточного большого радиуса. По этой причине дифракция возможна лишь для жесткого излучения. Так, в кристалле германия максимально возможная длина волны излучения $\lambda_m = 0,0756$ нм. Расчет показал, что в областях относительных длин волн излучения λ/λ_m вблизи нуля и единицы, в которых имеет место нелинейный эффект Бормана в 4-волновом и в 6-волновом случаях, фотоэлектрический МКПВВ 12-волнового рассеяния пропорционален $2,5W^4$. Таким образом, имеет место уменьшение фотоэлектрического МКПВВ по сравнению с 6-волновым случаем еще на одну степень W . В этих условиях длина свободного пробега фотонов лимитируется комптоновским рассеянием и для AgK_{α} -излучения увеличивается в 1000 раз.

2. Формулировка и решение дифракционной задачи

Схема векторов обратной решетки \mathbf{h}_m рассматриваемого 12-волнового случая показана на рис. 1. Если волновой вектор \mathbf{k}_0 падающей на кристалл плоской волны ориентирован в пространстве таким образом, что $(\mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_m)^2 \approx k_0^2$ для всех векторов \mathbf{h}_m , показанных на рис. 1, то амплитуда электрического поля рентгеновской волны в кристалле представляет собой суперпозицию 24 блоховских волн

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \sum_{j=1}^{24} A_j \exp((i\epsilon_j - \mu_j)z/2\gamma_0) \sum_{ms} \mathbf{e}_{ms} B_{ms}^{(j)} e^{i\mathbf{h}_m \cdot \mathbf{r}}. \quad (1)$$

Здесь индекс m нумерует преломленный ($m=0$) и дифрагированные ($m=1, \dots, 11$) пучки, индекс $s=\pi, \sigma$ указывает состояние поляризации. Векторы поляризации \mathbf{e}_{ms} выберем так, чтобы все векторы $\mathbf{e}_{m\sigma}$ лежали в плоскости векторов обратной решетки. Векторы $\mathbf{e}_{m\pi}$ затем определяются из условия ортонормированности тройки векторов $\mathbf{e}_{m\pi}, \mathbf{e}_{m\sigma}$ и \mathbf{s}_m , где \mathbf{s}_m — единичный вектор вдоль направления m -го дифрагированного пучка. Координата z отсчитывается по нормали к поверхности кристалла ($z=0$ на входной поверхности). В симметричном лауэ-случае, который ниже рассматривается, z -компоненты всех векторов \mathbf{s}_m равны между собой и равны γ_0 .

Дисперсионная поправка ϵ_j и вектор $B_{ms}^{(j)}$ находятся из решения динамической дифракционной задачи и представляют собой собственные значения и ортонормированные собственные векторы многоволновой матрицы рассеяния для прозрачного кристалла (более подробно см. [7, 12])

$$\sum_{m's'} G_{mm's'}^{ss'} B_{m's'}^{(j)} = \epsilon_j B_{ms}^{(j)}, \quad (2)$$

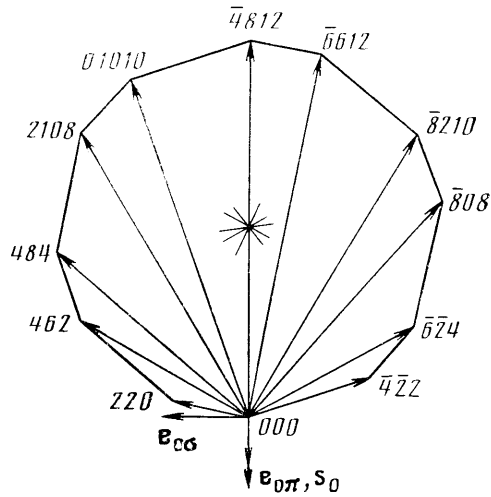


Рис. 1. Схема векторов обратной решетки 12-волнового случая дифракции. Также показаны проекции векторов поляризации \mathbf{e}_{π} и направления падающего луча \mathbf{s}_0 .

где

$$G_{mm'}^{ss'} = \frac{2\pi}{\lambda} [\chi_r(|\mathbf{h}_{mm'}|) (\mathbf{e}_{ms}\mathbf{e}_{m's'}) - \alpha_m \delta_{mm'}^{ss'}]. \quad (3)$$

Здесь $\chi_r(h)$ — фурье-компонента действительной части поляризуемости кристалла $\chi = \chi_r + i\chi_i$, λ — длина волны излучения, $\mathbf{h}_{mm'} = \mathbf{h}_m - \mathbf{h}_{m'}$, $\delta_{mm'}^{ss'}$ — символ Кронекера (единичная матрица), параметры

$$\alpha_m = \frac{(\mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_m)^2 - k_0^2}{k_0^2} \approx 2(\gamma_0^{-2} - 1)^{1/2} [(\mathbf{e}_{0\pi}\mathbf{e}_{m\pi} - 1)\theta_1 + (\mathbf{e}_{0\sigma}\mathbf{e}_{m\pi})\theta_2] \quad (4)$$

определяют отклонение от условий Брэгга при отклонении направления вектора \mathbf{k}_0 от точного многоволнового направления на углы θ_1 и θ_2 в плоскостях $(\mathbf{e}_{0\pi}, \mathbf{s}_0)$ и $(\mathbf{e}_{0\sigma}, \mathbf{s}_0)$ соответственно.

Величина A_j в (1) определяет степень возбуждения j -й блоховской волны и находится из граничных условий. Если плоскость поляризации падающей волны составляет угол φ с вектором $\mathbf{e}_{0\pi}$, то

$$A_j = B_{0\pi}^{(j)} \cos \varphi + B_{0\sigma}^{(j)} \sin \varphi. \quad (5)$$

В случае неполяризованного излучения следует усреднить интенсивность по углу φ .

Коэффициенты поглощения блоховских волн (КПБВ) μ_j выражаются через мнимую часть поляризуемости χ_i , которая в общем случае учета всех процессов неупругого рассеяния рентгеновских фотонов представляет собой тензор. При этом

$$\mu_j = \sum_{\substack{mm' \\ ss'}} B_{ms}^{(j)} M_{mm'}^{ss'} B_{m's'}^{(j)}, \quad (6)$$

где введена матрица

$$M_{mm'}^{ss'} = \frac{2\pi}{\lambda} \sum_{kl} e_{ms}^k \chi_{imm'}^{kl} e_{m's'}^l. \quad (7)$$

Суммирование в (7) проводится по векторным индексам. Формула (6) справедлива при условии $|\chi_{i0}| \ll |\chi_{r0}|$, которое всегда выполняется для рентгеновских лучей.

Наиболее вероятным неупругим процессом является фотоэлектрическое поглощение, причем достаточно учесть только дипольный (D) и квадрупольный (Q) члены мультипольного разложения [13]. В этом случае

$$\hat{M} = \hat{M}^D + \hat{M}^Q = \mu_0 e^{-W(\mathbf{h}_{mm'})} [\tau^D \mathbf{e}_{ms}\mathbf{e}_{m's'} + \tau^Q ((\mathbf{e}_{ms}\mathbf{e}_{m's'}) (\mathbf{s}_m \mathbf{s}_{m'}) - (\mathbf{e}_{ms} \mathbf{s}_{m'}) (\mathbf{s}_m \mathbf{e}_{m's'}))]. \quad (8)$$

Здесь μ_0 — нормальный коэффициент поглощения, $\exp(-W(\mathbf{h}_{mm'}))$ — фактор Дебая — Валлера для вектора обратной решетки $\mathbf{h}_{mm'}$, причем параметр $W(h) = 0,5h^2 \langle u^2 \rangle$ в изотропном приближении зависит лишь от модуля вектора обратной решетки, $\tau^D = 1 - \tau^Q$ и τ^Q есть относительные вклады дипольного и квадрупольного членов в нормальный коэффициент поглощения. Более слабые процессы теплового диффузного и комптоновского рассеяния обсуждаются в разделе 5.

При точном многоволновом направлении падения плоской волны на кристалл, когда угловые отклонения θ_1 и θ_2 в (4) равны нулю, все параметры $\alpha_m = 0$ и матрица рассеяния имеет симметрию многоугольника векторов обратной решетки (рис. 1), в частности ось шестого порядка. Рассуждая так же, как в работе [7] при анализе полностью симметричного б-волнового случая, сразу получаем общую формулу для компонент собственных векторов матрицы рассеяния \hat{G} , которую можно представить в виде

$$\begin{aligned} (n\pi): \quad B_{m\pi} &= C \cos\left(\frac{\pi n}{3} k + \varphi_{l\pi}\right), & B_{m\sigma} &= -D \sin\left(\frac{\pi n}{3} k + \varphi_{l\sigma}\right), \\ (n\sigma): \quad B_{m\pi} &= C \sin\left(\frac{\pi n}{3} k + \varphi_{l\pi}\right), & B_{m\sigma} &= D \cos\left(\frac{\pi n}{3} k + \varphi_{l\sigma}\right). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь используется запись $m=2k+l$, где $k=0, \dots, 5$, $l=0, 1$, отражающая тот факт, что фигура рис. 1 переходит сама в себя при сдвиге индекса m на 2, n есть целый делитель 6, т. е. $n=1, 2, 3, 6$. Фазы $\varphi_{1\pi}$ и $\varphi_{1\sigma}$ удовлетворяют дополнительному условию

$$\varphi_{0\pi} + \varphi_{1\pi} = \varphi_{0\sigma} + \varphi_{1\sigma}, \quad (10)$$

а амплитуды C и D — условию нормировки

$$C^2 + D^2 = 1/12. \quad (11)$$

Так же, как и раньше в 6-волновом случае [7], решения $(n\pi)$ и $(n\sigma)$ для $n=1, 2$ вырождены. При этом фазы $\varphi_{1\sigma}$ определены с точностью до произвольной постоянной. В частности, можно положить $\varphi_{0\pi}=0$. Оставшиеся четыре неизвестных параметра: C/D , $\varphi_{0\sigma}$, $\varphi_{1\pi}$ и ε находятся из любых четырех уравнений системы (2). Это дает четыре решения, которые будем нумеровать индексом j в порядке возрастания $|\varepsilon|$ и обозначать как $n\pi_j$, $n\sigma_j$.

Решения для $n=3, 6$ невырождены. Легко сообразить, что при этом для $(n\pi)$ решений $\varphi_{0\pi}=0$, $\varphi_{1\pi}=\pi$, $\varphi_{0\sigma}=\varphi_{1\sigma}=\pi/2$, а для $(n\sigma)$ решений $\varphi_{0\pi}=\varphi_{1\pi}=\pi/2$, $\varphi_{0\sigma}=0$, $\varphi_{1\sigma}=\pi$. Неизвестные параметры C/D и ε находятся из любых двух уравнений системы. В этом случае индекс j принимает два значения, а решения обозначаются как $(n\pi_j)$ и $(n\sigma_j)$.

Таким образом, из соображений симметрии следует, что из 24 решений оказывается восемь невырожденных и восемь пар двукратно вырожденных. Дополнительное вырождение может быть лишь по случайным причинам. Хотя собственные значения ε для невырожденных решений определяются в аналитической форме, как решения квадратного уравнения, в случае вырожденных решений их аналитическая форма имеет уже весьма громоздкий вид. Поэтому, не приводя аналитических формул для коэффициентов, перейдем сразу к анализу результатов численного счета. Отметим лишь, что из (5) и (11) легко сразу определить степень возбуждения соответствующей зоны в случае неполяризованного излучения $E_j = \langle A_j^2 \rangle_\varphi = 0,5 \left((B_{0\pi}^{(j)})^2 + (B_{0\sigma}^{(j)})^2 \right)$. Для невырожденных решений $E_j = 1/24$, а для дважды вырожденных — в два раза больше.

3. Анализ эффекта anomalно слабого поглощения блховских волн

На рис. 2 показана зависимость фотоэлектрических КПЭВ от длины волны излучения для кристалла германия в дипольном приближении, т. е. при $\tau^q=0$. Расчет был выполнен по общим формулам (2), (6), (8) в точке $\theta_1=\theta_2=0$. В этом случае единственным свободным параметром остается длина волны излучения λ в диапазоне $0 < \lambda < \lambda_m$. Отношение λ/λ_m точно совпадает с синусом угла θ между волновыми векторами дифрагированных волн и нормалью к плоскости векторов обратной решетки, совпадающей с поверхностью кристалла. При этом отношение μ^D/μ_0^D зависит лишь от этого параметра через z -компоненту векторов поляризации $e_{m\pi}$.

Необходимо отметить, что поскольку для МКПЭВ отношение μ^D/μ_0^D весьма мало, то расчет необходимо проводить с большой точностью. В данной работе для этой цели использовалась мини ЭВМ «Искра-226», оперирующая с 13-разрядными числами. Задача на собственные значения (2) решалась методом Хаусхолдера и QL -методом (процедуры tred 2 и tql 2 справочника [14], стр. 195 и 208) с машинной точностью. Данные для расчета были взяты из [7]. По этой же причине отношение μ/μ_0 на рис. 2—4 дано в логарифмическом масштабе.

Как следует из рис. 2, отношение минимального коэффициента поглощения к нормальному в зависимости от $\sin \theta = \lambda/\lambda_m$ может в десять раз изменить свое значение. Наибольшей величины это отношение достигает при $\lambda \approx 0,8\lambda_m$, а наименьшей — на краях рассматриваемого интервала. Минимальное значение отношения $\mu^D/\mu_0^D \approx 4,1 \cdot 10^{-6}$, в то время как в двухволновом случае (220) дифракции оно приблизительно равно $W_1 = 0,0357$.

В пересчете на W_1 минимум отношения μ^D/μ_0^D в 12-волновом случае равен $2,5W_1^4$ по сравнению с $2W_1^3$ в симметричном 6-волновом случае, т. е. можно говорить об уменьшении отношения μ/μ_0 на еще одну степень W_1 . Это эквивалентно обращению в ноль в узлах кристаллической решетки амплитуды волнового поля одновременно с первой, второй и третьей производными по координате.

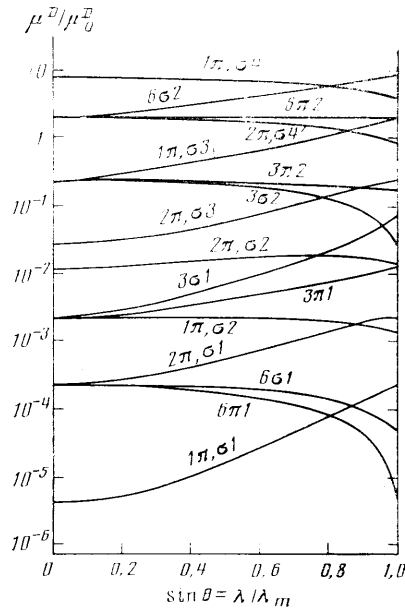


Рис. 2

Рис. 2. Фотоэлектрические коэффициенты поглощения блоховских волн в дипольном приближении

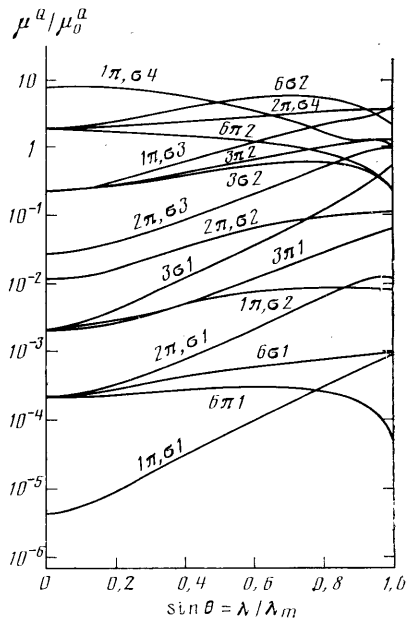


Рис. 3

Рис. 3. Квадрупольная часть фотоэлектрических коэффициентов поглощения блоховских волн

Конкретно сравнение 12-волнового и 6-волнового случаев следует проводить с учетом разницы в значениях величины λ_m . Так, для кристалла германия $\lambda_m^{(12)} = 0,0756$ нм, в то время как $\lambda_m^{(6)} = 0,2$ нм. Поэтому, например, длина волны AgK_α -линии $\lambda = 0,0559$ нм оказывается малой по сравнению с $\lambda_m^{(6)}$, но достаточно большой по сравнению с $\lambda_m^{(12)}$. При этом $(\mu_m^D)_{12}/\mu_0^D = 5,0 \cdot 10^{-5}$ всего в 4,4 раза меньше $(\mu_m^D)_6/\mu_0^D = 2,2 \cdot 10^{-4}$, где μ_m^D — дипольная часть фотоэлектрического МКПБВ. Прохождение излучения через кристаллическую пластинку определенной толщины зависит также от пути, который проходят пучки в кристалле. Поэтому коэффициент поглощения по нормали к поверхности отличается от указанных выше на фактор $\gamma_0^{-1} = (\cos \theta)^{-1}$. С учетом этого фактора получаем увеличение длины свободного пробега фотонов для AgK_α -линии всего в 3 раза. Тем не менее сам факт усиления эффекта имеет место практически при всех длинах волн $\lambda < \lambda_m^{(12)}$.

Квадрупольные вклады в КПБВ в единицах μ_0^Q показаны на рис. 3. Там же, как и в 6-волновом случае, уменьшение μ^D сопровождается уменьшением μ^Q , причем в области $\lambda \ll \lambda_m$ отношения μ^D/μ_0^D и μ^Q/μ_0^Q почти совпадают, а в целом квадрупольное взаимодействие не портит эффекта уменьшения поглощения. Причины те же, что и в 6-волновом случае [7].

Интересно отметить, что симметрия решения дифракционной задачи (2), реализующего МКПБВ в 12-волновом случае, отличается от таковой

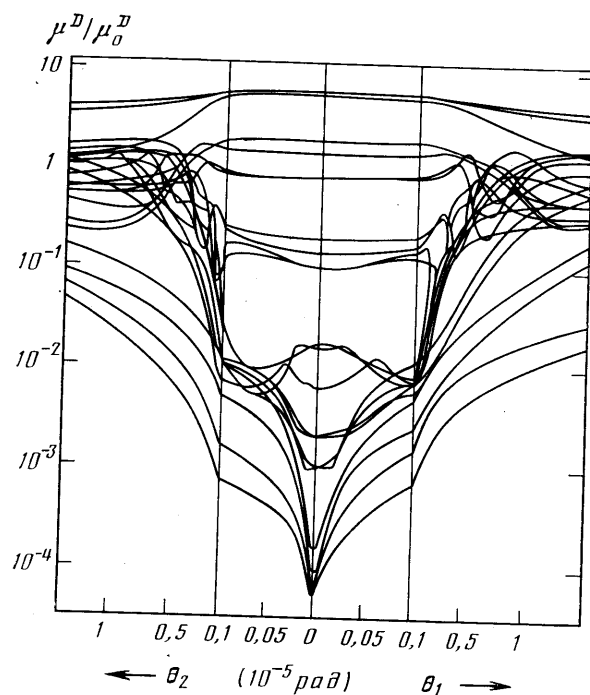


Рис. 4. Угловая зависимость коэффициентов поглощения блоховских волн

в 6-волновом случае. Если в 6-волновом случае μ_{\min} при $\lambda \ll \lambda_m$ соответствует $(2\pi, \sigma_1)$ решению, то в 12-волновом случае это имеет место для $(1\pi, \sigma_1)$ решения. Аналогично при $\lambda = \lambda_m$ $\mu_{\min}^{(6)}$ соответствует $(3\pi_1)$ решению, а $\mu_{\min}^{(12)}$ — $(6\pi_1)$ решению.

4. Угловая зависимость коэффициентов поглощения блоховских волн

Чтобы оценить чувствительность рассматриваемого эффекта к угловому отклонению от точного многоволнового направления падения плоской волны на рис. 4 показаны результаты расчета угловой зависимости отношения μ^D/μ_0^D для AgK_α -излучения на линиях $\theta_1=0$ и $\theta_2=0$. Так как дисперсионная поверхность имеет центр инверсии, то коэффициенты поглощения не меняются при изменении знака углового отклонения на этих линиях. Поэтому на рис. 4 справа показана зависимость от θ_1 на линии $\theta_2=0$ в области $0 < \theta_1 < 1,5 \cdot 10^{-5}$ рад, а слева — зависимость от θ_2 на линии $\theta_1=0$ в области $0 < \theta_2 < 1,4 \cdot 10^{-5}$ рад, причем в центральной части шаг в 4 раза меньше, чем на краях.

Как следует из рисунка, угловая зависимость минимальных и максимальных коэффициентов поглощения имеет относительно плавный, монотонный характер в отличие от промежуточных зон дисперсионной поверхности. На линии $\theta_1=0$ строго выполняется условие двухволновой дифракции для рефлекса $(\bar{4} \ 8 \ 12)$ с максимальным по модулю вектором обратной решетки. При этом в пределе $\theta_2 \rightarrow \infty$ 4 из 24 КЛБВ стремятся к своим двухволновым значениям $\mu^D = \mu_0^D (1 \pm 0,368)$ и $\mu^D = \mu_0^D (1 \pm 0,033)$, а для остальных $\mu^D/\mu_0^D \rightarrow 1$. На линии $\theta_2=0$ отношение $\mu^D/\mu_0^D \rightarrow 1$ для всех зон в пределе $\theta_1 \rightarrow \infty$, но так как эта линия проходит под малым углом к двухволновой (220) линии $\theta_2 = 0,13\theta_1$, то на рисунке заметна тенденция к установлению двухволнового режима. В целом можно сделать вывод, что эффект резкого уменьшения поглощения имеет место в довольно узкой угловой области. МКЛБВ возрастает на порядок при отклонении \mathbf{k}_0 от многоволнового направления на 10^{-6} рад и на два порядка при отклонении на 10^{-5} рад.

5. Роль других каналов неупругого рассеяния

Помимо рассмотренного выше фотоэлектрического поглощения определенным вклад в поглощение рентгеновских лучей вносят неупругие процессы теплового диффузного рассеяния (ТДР) и комптоновского рассеяния (КР). В обычных условиях их вклад весьма мал, но когда коэффициент фотоэлектрического поглощения резко сокращается из-за особой структуры распределения интенсивности волнового поля излучения в кристаллической решетке, их роль, вообще говоря, может возрасти. В случае двухволнового рассеяния роль ТДР исследовалась в [15] в рамках развитой Афанасьевым и Каганом теории [16]. Было показано, что даже в исключительных случаях, когда фотоэффект сильно ослаблен (возле скачка поглощения) и имеет место эффект Бормана, вклад ТДР в общее поглощение рентгеновских лучей не превосходит 4%. К такому же результату привели расчеты вклада ТДР в 6-волновом случае [17]. Поэтому есть основание предполагать, что роль ТДР в рассматриваемом 12-волновом случае незначительна, т. е. особая структура волнового поля, приводящая к уменьшению фотоэлектрического поглощения, уменьшает также и ТДР.

Следует отметить также, что в условиях сильного уменьшения коэффициента фотоэлектрического поглощения (в 10^{-3} раз) казалось бы необходимо учесть поправки к амплитудам волнового поля за счет узлов обратной решетки, не лежащих на сфере Эвальда, имеющих такой же порядок величины. Однако детальный анализ с учетом симметрии матриц \hat{G} и \hat{M} показывает, что их вклад мал и не меняет полученной оценки для вклада фотоэффекта в общий коэффициент поглощения.

Что касается комптоновского рассеяния, то здесь ситуация отличается коренным образом. Так как рассеяние происходит в основном на внешних электронных оболочках атомов, то перестройка волнового поля излучения неспособна сильно подавить этот процесс. Применительно к двухволновому случаю это обстоятельство было отмечено в [18], а общие формулы получены в [19]. Развитый в [19] формализм позволяет легко оценить вклад КР в КНБВ для состояний с малыми КНБВ. Действительно, матрица \hat{M}^{KP} , входящая в формулу (6), в этом случае может быть представлена в следующем виде:

$$\hat{M}^{KP} = \frac{8\pi r_0^2 N}{3a^3} e^{-W(h_{mm'})} \left\{ f(h_{mm'}) (\mathbf{e}_{ms} \mathbf{e}_{m's'}) - \frac{3}{8\pi} \int ds [(\mathbf{e}_{ms} \mathbf{e}_{m's'}) - (\mathbf{e}_{ms} s)(s \mathbf{e}_{m's'})] \left[\sum_{\alpha\beta} \tilde{f}_{\alpha\beta}(s - s_m) \tilde{f}_{\beta\alpha}(s_{m'} - s) \right] \right\}. \quad (12)$$

Здесь $r_0 = e^2/mc^2$, a — постоянная решетки, N — число атомов в элементарной ячейке, s — единичный вектор, интегрирование проходит по всем направлениям этого вектора. Функция

$$\tilde{f}_{\alpha\beta}(s) = \left\langle \alpha \left| \sum_i \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda} s \rho_i\right) \right| \beta \right\rangle, \quad (13)$$

где $\langle \alpha | \dots | \beta \rangle$ означает матричный элемент между занятыми электронными состояниями α и β атома, а суммирование проводится по всем электронам атома. Атомный фактор рассеяния $f(h_{mm'}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha\alpha}(s_m - s_{m'})$ пред-

ставляет собой фурье-компоненту электронной плотности атома. Формула (12) применима к кристаллам с одним сортом атомов и к рефлексам с равным единице структурным фактором.

В обычных условиях оба члена в фигурных скобках формулы (12) имеют близкие значения. Однако в состояниях с малыми КНБВ вклад второго (интегрального) члена сильно сокращается аналогично случаю фотоэффекта и им можно пренебречь. Что касается первого члена, то ему соответствует матрица, отличающаяся от матрицы упругого рассеяния \hat{G}

**Вклады различных механизмов неупругого рассеяния в КПБВ в см⁻¹
и суммарный КПБВ для нескольких зон дисперсионной поверхности
с малым КПБВ, а также теоретическое значение нормального коэффициента
поглощения μ_0 и степень возбуждения зоны неполяризованным
излучением E**

Вклады	μ^D	μ^Q	μ^{KP}	$\Sigma\mu$	μ_0	E
1л, σ_1	0.008	0.001	0.164	0.173	172	1/12
6л1	0.017	0.002	0.166	0.185	172	1/24
6 σ_1	0.026	0.005	0.178	0.209	172	1/24
2л, σ_1	0.167	0.030	0.205	0.402	172	1/12
1л, σ_2	0.330	0.060	0.233	0.623	172	1/12

(3) при $\theta_1 = \theta_2 = 0$ лишь на постоянный множитель $K = -4\pi r_0 / 3\lambda = -1,18 \cdot 10^{-4} / \lambda$, где λ измеряется в ангстремах (0,1 нм). Поэтому оценку этого вклада можно получить без дополнительных расчетов.

Абсолютные вклады в КПБВ от различных процессов для нескольких зон дисперсионной поверхности с малыми КПБВ в случае дифракции Ag K_α -излучения в кристалле германия показаны в таблице. Как следует из таблицы, МКПБВ определяется фактически полностью комптоновским рассеянием. Вклад этого процесса в 16 раз превосходит вклад фотоэлектрического поглощения, тогда как в нормальных условиях он более, чем в 500 раз меньше. С учетом комптоновского рассеяния длина свободного пробега фотонов увеличивается не более, чем в 1000 раз. Аналогичная ситуация имеет место и в симметричном δ -волновом случае.

Литература

1. *Craeff W., Bonse U.* // Z. Phys. 1977. B27. N 1. S. 19.
2. *Gabrielyan R. Z., Kohn V. G.* // Phys. status solidi. a. 1980. V. 59. № 2. P. 697.
3. *Ростомян А. Г., Безиргянц П. А.* Докл. АН СССР. 1978. Т. 238. № 1. С. 73.
4. *Кон В. Г.* ФТТ. 1977. Т. 19. № 12. С. 3567.
5. *Kushnir V. I., Kaganer V. M., Suvorov E. V.* // Acta cryst. A. 1985. V. 41. № 1. P. 17.
6. *Joko T., Fukuhara A.* // J. Phys. Soc. Jap. 1967. V. 22. № 2. P. 597.
7. *Afanasev A. M., Kohn V. G.* // Acta cryst. A. 1977. V. 33. № 1. P. 178.
8. *Besirganyan P. A., Gabrielyan R. Ts., Kohn V. G., Toneyan A. H.* Phys. status solidi a. 1984. V. 85. № 2. P. 349.
9. *Borrmann G., Hartwig W.* // Z. Kristallogr. 1965. B. 121. № 6. S. 401.
10. *Hildebrandt G.* // Phys. status solidi. 1967. V. 24. № 1. P. 245.
11. *Penning P.* // Advances in X-ray analysis. V. 10. N. Y.: Plenum Press. 1967, P. 67.
12. *Пинскер Э. Г.* Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982. 390 с.
13. *Hildebrandt G., Stephenson J. D., Wagenfeld H.* // Z. Naturforsch. a. 1975. B. 30. N 6-7. S. 697.
14. *Уилкинсон, Райнш.* Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976. 390 с.
15. *Кон В. Г.* // Кристаллография. 1970. Т. 15. № 1. С. 20.
16. *Afanasev A. M., Kagan Yu.* // Acta cryst. A. 1968. V. 24. № 1. P. 163.
17. *Кон В. Г.* // Пленарные докл. Всесоюз. совещ. Проблемы рентгеновской диагностики несовершенства кристаллов. Ереван, 1985, с. 254.
18. *Giardina M. D., Merlini A.* // Z. Naturforsch. a. 1973. B. 28. № 8. P. 1360.
19. *Sano H., Ohtaka K., Ohtsuki Y.-H.* // J. Phys. Soc. Jap. 1969. V. 27. № 5. P. 1254.

Институт атомной энергии
им. И. В. Курчатова

Поступила в редакцию
16.VI.1985