

548.0:535

ФИЗИКА НАШИХ ДНЕЙ**КРИСТАЛЛООПТИКА ВИДИМОГО СВЕТА И РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ \*)***П. Эвальд*

В этой обзорной статье, основанной главным образом на работах автора, развит единый подход к описанию оптических свойств кристаллов как для видимого света, так и для рентгеновских лучей. Предполагается, что рассеивающие элементы кристалла — диполи. Для области внутри кристалла ищется самосогласованное состояние оптического поля и колебаний диполей. Решая затем задачу на собственные значения, можно определить фазовую скорость. Решение этой задачи позволяет также найти вынужденные колебания в полубесконечном кристалле, когда на его поверхность падает извне плоская волна, и построить теорию отражения и преломления волн. Всюду в статье основное внимание уделяется физической интерпретации математических аспектов теории. В частности, дается качественное объяснение аномального поглощения рентгеновских лучей вблизи брэгговских углов (эффект Бормана) и рассматривается механическая модель этого эффекта.

**1. ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ  
КАК СОСТАВНАЯ ЧАСТЬ ОПТИКИ**

Открытие дифракции рентгеновских лучей уже было подготовлено развитием теоретической оптики<sup>1</sup>, когда Лауэ и его сотрудники-экспериментаторы В. Фридрихс и Б. Книппинг сделали это открытие в 1912 г. Лауэ готовил статью об интерференции и дифракции для «Энциклопедии математических наук» и нашел упрощенное изложение теории двумерной дифракционной решетки. Когда он узнал о гипотезе периодического строения кристаллов, он сразу же почувствовал, что с помощью кристалла можно получить дифракционную картину, если только иметь подходящую длину волны света, порядка периода кристалла или меньше. Так как длина волны видимого света по крайней мере в 500 раз больше расстояния между атомами, обычный свет не может обнаружить периодичность строения кристалла. Однако уже тогда существовали довольно веские основания предполагать, что рентгеновские лучи имеют ту же самую природу, что и свет, только принадлежат более коротковолновой области спектра. Результаты поставленных экспериментов подтвердили и то, что

---

\*) P. P. Ewald, Crystal Optics for Visible Light and X-Rays, Rev. Mod. Phys. 37 (1), 46 (1965). Тридцать третья лекция имени Джозефа Генри, прочитанная на заседании Философского общества в Вашингтоне 29 мая 1964 г. Перевод В. К. Игнатовича.

кристаллы имеют периодическую структуру, и то, что рентгеновские лучи представляют собой очень короткие электромагнитные волны.

Эти эксперименты положили начало работам в новой области теоретической и экспериментальной оптики, которая была гораздо более тесно связана с физикой твердого тела, нежели оптика видимого света. Однако первые успехи не долго оставались в центре внимания, так как вскоре появились сведения об успешном применении дифракции рентгеновских лучей к анализу строения кристалла. Первые опыты в этом направлении были произведены У. Х. Брэггом и У. Л. Брэггом совместно с их студентами. Оказалось, что рентгеновские лучи позволяют видеть такое множество деталей в структуре твердого тела, которое превосходит всякое воображение. В течение последующих лет с их помощью было расшифровано строение почти всех кристаллов, и в результате мы подошли теперь к такому моменту, когда местоположения всех атомов более или менее определены и главная проблема состоит в том, чтобы установить геометрический и химический смысл именно таких, а не иных положений атомов в данном кристалле. В процессе своего быстрого развития теоретическая оптика почти не изменилась. Новые идеи в ней касались только отдельных пунктов. Например, была улучшена техника вычисления измеряемых интенсивностей, а группа Ж. Бижво<sup>2</sup> предложила более совершенный метод определения фаз. Однако и в этих пунктах новые идеи не выходили за рамки кинематической теории дифракции рентгеновских лучей, т. е. той довольно примитивной теории, которая побудила Лауэ произвести свои эксперименты.

Кинематическая теория состоит в следующем. Предполагается, что каждый атом, рассеивая электромагнитные волны, становится источником вторичной сферической волны. Далее предполагается, что угловое распределение при рассеянии таково, как если бы вторичная волна испускалась точечным диполем. В этом случае вторичная волна называется дипольной волной (такой диполь был впервые введен Генрихом Герцем в 1887 г. для описания осциллирующего точечного заряда). Если же считать, что угловое распределение зависит от пространственной структуры атома, то нужно ввести некоторый поправочный множитель, зависящий от угла рассеяния. Этот множитель называется «атомным фактором» или функцией атомного рассеяния. Характерной чертой кинематической теории является пренебрежение двойным и многократным рассеянием. Иными словами, в кинематической теории предполагается, что на каждый атом действует только первичная «падающая» волна и не действуют волны, рассеянные другими атомами. Пусть дипольный момент  $\mathbf{p}$ , приобретаемый отдельным атомом в электрическом поле  $\mathbf{E}$ , определяется поляризуемостью  $\alpha$ :  $\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E}$ , а амплитуда рассеянной вторичной волны определяется коэффициентом рассеяния  $\sigma$ :  $A = \sigma \mathbf{E}$ . В кинематической теории  $\alpha$  и  $\sigma$  предполагаются малыми величинами, поэтому их квадратами и более высокими степенями пренебрегают, если коэффициенты при первых степенях  $\alpha$  и  $\sigma$  отличны от нуля. Это предположение может показаться разумным, так как для фотографирования дифракционных пятен (лауэграмма) требуются многие часы экспозиции, тогда как первичный пучок дает почернение на фотопластинке за несколько секунд. В действительности такая большая разница времен экспозиции обусловлена тем, что дифрагированный луч содержит только узкую часть спектра первичной волны, поэтому и интенсивность его гораздо меньше интенсивности падающей волны. Если падающая волна монохроматична, то рассеянная волна отнюдь не мала. Это обстоятельство долгое время было неизвестно. С самого начала следовало бы привести еще одно серьезное возражение против кинематической теории: в ней нарушается закон сохранения энергии.

Энергия вторичных лучей берется из ничего, т. е. предполагается, что первичная волна не уменьшается при прохождении через кристалл. Поэтому нельзя ожидать, что кинематическая теория окажется правильной при расчете интенсивностей дифрагированных лучей.

## 2. РАБОТА ДАРВИНА (1914 г.)

Еще в 1914 г. Дарвин попытался преодолеть трудности «кинематической теории»<sup>3</sup> и рассчитать интенсивности рассеянного света. С помощью формул, выведенных Дж. Томсоном для рассеяния света на одиночном атоме, Дарвин рассчитал рассеяние света на плоскости, в которой периодически расположены атомы. При этом он пренебрег, однако, многократным рассеянием на атомах плоскости. Затем он рассмотрел, что происходит с волной, проходящей через систему таких атомных плоскостей и рассеивающейся на них. В то время в Англии бытовало мнение, что вторичные лучи получаются только в результате отражения света от плотно заполненных атомных плоскостей; поэтому Дарвин рассмотрел рассеяние только в направлениях, близких к направлению зеркального отражения. Он совершенно обошел молчанием другие направления. На самом деле, так как атомы плоскости располагаются периодически, они образуют плоскую дифракционную решетку. В направлениях, в которых волны, рассеянные каждым атомом, складываются в одинаковой фазе (направления положительной интерференции), рассеянный свет тоже будет иметь большую амплитуду.

Но несмотря на то, что работа Дарвина была в некотором отношении неполна, ему удалось получить правильную «кривую отражения» идеального кристалла. Эта кривая дает возможность найти интенсивность отраженного света не только тогда, когда первичная волна падает точно под брэгговским углом, но также и в некотором узком интервале углов по одну сторону от брэгговского угла. Более того, Дарвин вычислил полную интенсивность отраженных рентгеновских лучей, проинтегрированную по окрестности брэгговского угла, и сравнил ее с экспериментальной. Оказалось, что эксперимент дает в 10 раз большую интенсивность.

Дарвину удалось объяснить этот результат следующим удивительным образом: кристалл, на котором производился эксперимент, не совершенен, а состоит из большого числа маленьких кристаллических блоков, ориентации которых слегка различны.

Если первичная волна падает на идеальный кристалл под углом, немного отличающимся от брэгговского, то ее рассеяние, согласно кинематической теории, мало и она почти беспрепятственно проникает внутрь кристалла. В неидеальном кристалле падающая волна будет распространяться вглубь только до тех пор, пока не встретит подходящим образом ориентированного маленького кристалла, от которого она и отразится. Поэтому суммарная интенсивность рентгеновских лучей, отраженных от «мозаичного» кристалла, больше, чем у отраженных от идеального.

Своей статьей Дарвин заложил фундамент в изучении строения кристаллов. А укреплению этого фундамента больше всего способствовали последующие экспериментальные работы манчестерской школы. По мере того как все большее применение находили кристаллические структуры, в которых положения атомов не определялись однозначно одними лишь элементами внутренней симметрии, становилось необходимым более точно измерять интенсивности и более правильно интерпретировать экспериментальные данные. На свете существует очень мало кристаллов, к которым была бы приложима теория идеального кристалла. Мозаичных же кристаллов гораздо больше, и их легко готовить, шлифуя грани соответ-

ствующим образом. Поэтому кристаллографы интересовались больше мозаичными, нежели идеальными, кристаллами. И даже само существование идеального кристалла находилось под вопросом в течение многих лет.

### 3. КОЭФФИЦИЕНТ ПРЕЛОМЛЕНИЯ С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Однако для теоретической оптики идеальный кристалл всегда был очень привлекателен. Идеальный кристалл поддается точному математическому описанию, в противоположность мозаичному, который однороден только в статистическом смысле. А разве найдется экспериментатор, который при решении тонких оптических задач не предпочел бы совершенную дифракционную решетку? Я использовал модель идеального кристалла с 1910 г., изучая ее оптические свойства в видимом свете. Точнее говоря, по предложению Зоммерфельда я исследовал вопрос о том, нельзя ли с помощью резонаторов, расположенных периодически в пространстве получить двойное лучепреломление, если периоды между резонаторами вдоль трех взаимно перпендикулярных направлений  $a$ ,  $b$ ,  $c$  (как в ромбическом кристалле), а сами резонаторы изотропны, т. е. не имеют предпочтительного направления поляризации. Кроме того, нужно было выяснить, будет ли этот эффект (если он вообще будет иметь место) сравним по величине с наблюдаемым двойным лучепреломлением. Положительный ответ был получен в 1911 г. и служил хорошим подтверждением периодического строения кристаллов, которое считалось в то время еще гипотетическим.

Параллельно с решением основной задачи мне удалось более полно раскрыть некоторые понятия теории оптических свойств твердого тела, в частности понятие коэффициента преломления  $n$ . Это удалось сделать благодаря исключительной математической точности модели. Я обнаружил, что  $n$  можно искать как собственное значение некоторого оператора. Эта задача аналогична нахождению собственных частот колебаний механической системы. В теориях Друде, Лоренца и Планка, господствовавших в то время, проблема нахождения коэффициента преломления рассматривалась с точки зрения вынужденных колебаний, когда на каждый резонатор действуют и первичная (падающая извне) волна, и волны, отраженные от других резонаторов. В этих теориях роль первичной волны была весьма непоятна. В моей же теории внешним силам не остается места, так как я предположил кристалл неограниченным в пространстве и для него вообще нет никакой внешней среды. В этом неограниченном кристалле на каждый резонатор действует только совокупность вторичных волн, идущих от всех других резонаторов. А вторичная волна, которую излучает сам кристалл, в свою очередь вносит вклад в поле около других резонаторов. Практически мы ищем самосогласованное состояние колебаний резонаторов и их излучения: поле регулирует колебания резонаторов, а резонаторы дают вторичные волны в нужном соотношении. Из этого условия самосогласованности и находится коэффициент преломления  $n$ . Иными словами, если задана частота  $\nu$ , то условие самосогласованности определяет длину волны  $\lambda$  или скорость оптической волны в теле  $q$  ( $n = c/q = \lambda_0/\lambda$ ,  $\nu\lambda = q$ ).

### 4. ИЛЛЮСТРАЦИЯ САМОСОГЛАСОВАНИЯ НА МЕХАНИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Проиллюстрируем условия самосогласования на некоторой механической модели. Пусть имеется струна с натяжением  $T$  и на ней нанизаны бусинки на расстоянии  $a$  друг от друга (рис. 1). Будем изучать распространение поперечных волн вдоль струны. Положим еще, что струна

бесконечна в обоих направлениях. Пусть каждая бусинка совершает простые гармонические колебания с частотой  $\nu$ , которую мы считаем заданной, и с амплитудой  $A$ . Тогда максимальное ускорение бусинки равно  $\nu^2 A$ . Неодинаковые смещения соседних бусинок приводят к изгибу в струне, который вместе с общим натяжением  $T$  создает силу, заставляющую бусинки двигаться в сторону положения равновесия. Эта сила должна иметь правильную величину — такую, чтобы бусинка совершала полное колебание за отведенное ей время  $1/\nu$ . Таким образом, движение бусинок создает изгиб в струне и, значит, приводит к возникновению силы, а сила заставляет бусинки двигаться. Будем называть систему самосогласованной, если движение бусинок создает такую силу, какая требуется для получения именно заданного движения. Для малых амплитуд колебаний как требуемое ускорение, так и результирующая сила в изгибе пропорциональны амплитуде колебания, поэтому заданием амплитуды нельзя добиться самосогласования.

Однако можно увеличить или уменьшить силу за счет изменения крутизны изгиба струны, которая зависит от длины волны, распространяющейся вдоль цепочки.

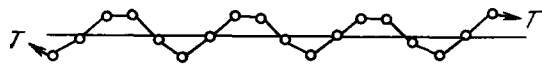


Рис. 1. Самосогласование колебаний цепочки бусинок.

Таким образом, систему можно сделать самосогласованной, если подобрать такую длину волны, при которой сила, возникающая в изгибе, будет заставлять бусинки колебаться именно с заданной частотой. Следовательно, для каждой частоты  $\nu$  существует вполне определенная длина волны  $\lambda$ . Уравнение, выражающее зависимость  $\lambda$  от  $\nu$ , называется уравнением дисперсии. Так как для бегущих волн обычно выполняется соотношение  $\nu\lambda = q$ , где  $q$  — фазовая скорость, то можно сказать, что дисперсия выражает зависимость  $q$  от  $\nu$ . Приведенный пример показывает, что подбором фазовой скорости можно привести в соответствие восстанавливающую силу и требуемое ускорение. Все движение цепочки (во всяком случае в центральной части, если цепочка ограничена) происходит совершенно без вмешательства внешних сил — это свободные, а не вынужденные колебания.

### 5. ЗАВИСИМОСТЬ АМПЛИТУДЫ ПОЛЯ ВНУТРИ КРИСТАЛЛА ОТ ФАЗОВОЙ СКОРОСТИ

В оптике именно фазовой скоростью определяется связь между вторичными волнами каждого резонатора и результирующим полем, которое заставляет резонаторы излучать свои вторичные волны. Каким же образом  $q$  может регулировать напряженность поля, создаваемого суперпозицией многих волн? Это можно качественно понять следующим образом<sup>4</sup> (рис. 2).

Рассмотрим плоскую световую волну, распространяющуюся в направлении  $x$  с некоторой фазовой скоростью  $q$ . Пусть волна рассеивается на атомах, находящихся в одной плоскости  $x = \text{const} = X$ . Рассеянные вторичные волны на некотором расстоянии от плоскости снова дают плоскую волну, которая распространяется в направлении  $x$  со скоростью  $s$ . Так как один слой атомов создает слабое поле, то новую волну мы будем называть «плоской вторичной волной». Поле в точке наблюдения  $x_0$  образуется наложением плоских вторичных волн, идущих от всех атомных плоскостей, расположенных как вблизи, так и далеко от  $x_0$ . Если фазовая скорость  $q$  равна  $s$ , то все плоские вторичные волны придут в точку  $x_0$  в одинаковой фазе и, не имея возможности гасить друг друга,

создадут в точке  $x_0$  очень большую, даже бесконечную амплитуду. Но если фазовая скорость будет хоть немного отличаться от  $c$ , между различными плоскими вторичными волнами, приходящими в точку  $x_0$ , появится разность фаз, и благодаря деструктивной интерференции амплитуда перестанет неограниченно расти. По мере того как разность  $c - q$  увеличивается, число плоских вторичных волн, приходящих в точку  $x_0$  в одинаковой фазе, уменьшается. При данном значении  $q$  суммарная амплитуда пропорциональна  $1/(c^2 - q^2)$ . Поэтому разумный выбор  $q$  позволяет получить именно такую амплитуду поля, какая необходима для самосогласованного режима.

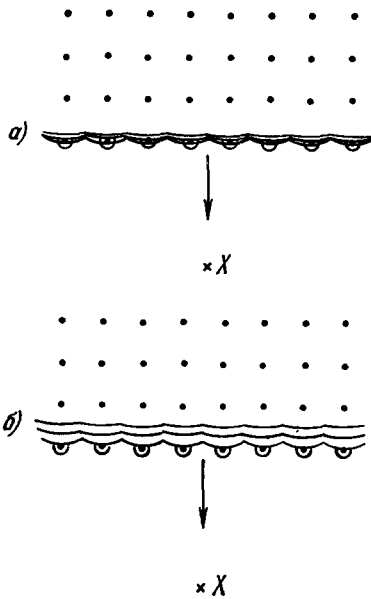


Рис. 2. Происхождение резонансного множителя.

В свете всего вышесказанного становится ясным физическое происхождение коэффициента преломления. В дальнейшем мы используем такие же рассуждения и для рентгеновских волн в кристалле.

### 6. ГЕОМЕТРИЯ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ. ПРОСТРАНСТВО ФУРЬЕ

Оптику рентгеновских лучей лучше всего формулировать в пространстве Фурье<sup>5</sup>, поскольку, как легко заметить, дифракция представляет собой физический аналог фурье-преобразования. Это будет

ясно уже на простейшем примере геометрической теории дифракции, где нам потребуется найти только направления дифракционных максимумов, т. е. направления, вдоль которых все рассеянные вторичные волны идут вместе в одинаковой фазе.

Пусть плоская волна падает под углом  $\alpha_0$  на некоторую прямую, вдоль которой расположены резонаторы на расстоянии  $a$  друг от друга. Будем наблюдать рассеяние на большом расстоянии под углом  $\alpha$  к прямой. Вместо того чтобы обозначать направления падения и наблюдения углами  $\alpha_0$  и  $\alpha$ , будем обозначать их волновыми векторами  $\mathbf{K}_0$  и  $\mathbf{K}$  соответственно. Пусть каждый из векторов имеет длину  $1/\lambda$  (\*). Напишем теперь условие того, чтобы  $l$ -й и  $(l + 1)$ -й резонаторы излучали вторичные волны в одинаковой фазе в направлении наблюдения. Из рис. 3 видно, что оптические пути волн,

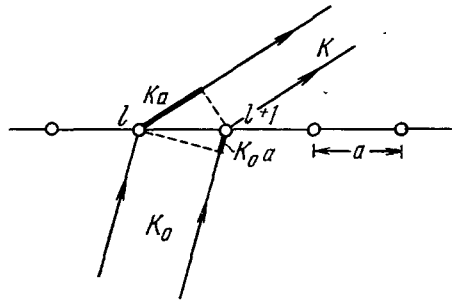


Рис. 3. Геометрическая теория дифракции одномерной решетки в физическом пространстве.

\*) Волновая функция плоской волны, распространяющейся в направлении  $\mathbf{K}$ , имеет вид

$$\exp [j (-vt + \mathbf{Kx})],$$

где  $\nu$  — частота,  $\mathbf{x}$  — радиус-вектор точки поля,  $\mathbf{K}$  — волновой вектор,  $\mathbf{Kx}$  — скалярное произведение двух векторов, а  $j = 2\pi i = 2\pi\sqrt{-1}$ .

рассеиваемых на  $l$ -м и  $(l + 1)$ -м резонаторах, отличаются на отрезки  $\mathbf{K}_0\mathbf{a}$  и  $\mathbf{Ka}$ , обозначенные жирными линиями.  $\mathbf{K}_0\mathbf{a}$  показывает, насколько отстает возбуждение  $(l + 1)$ -го резонатора, а  $\mathbf{Ka}$  — насколько его излучение в направлении наблюдения опережает излучение  $l$ -го резонатора. В сумме  $(l + 1)$ -я вторичная волна опережает  $l$ -ю на  $\mathbf{Ka} - \mathbf{K}_0\mathbf{a}$ , или на  $(\mathbf{K} - \mathbf{K}_0)\mathbf{a}$  длин волн. (Вспомним, что длина вектора  $\mathbf{K}$  равна  $1/\lambda$ , и заметим, что  $\mathbf{Ka}$  и  $\mathbf{K}_0\mathbf{a}$  — просто скалярные произведения волновых векторов на период трансляции.) Если  $(l + 1)$ -я вторичная волна опережает  $l$ -ю на целое число длин волн, то они будут складываться в одинаковой фазе и, значит, усиливать друг друга. Более того, вторичные волны от других резонаторов тоже будут складываться, так как они все будут идти в одинаковой фазе в данном направлении. Это значит, что амплитуда волны, идущей в данном направлении, максимальна. Назовем этот максимум дифракционным максимумом порядка  $h$ . Соответствующий волновой вектор  $\mathbf{K}_h$  определим условием

$$(\mathbf{K}_h - \mathbf{K}_0)\mathbf{a} = h, \quad (1)$$

где  $h$  — целое число.

Условие (1) можно легко представить геометрически (рис. 4). Пусть  $\mathbf{K}_0$  и  $\mathbf{a}$  — заданные векторы. Нам нужно геометрически найти вектор  $\mathbf{K}_h$  дифрагированной волны. Чтобы это сделать, мы нарисуем обратное пространство, расстояния в котором означают обратные длины, т. е. изме-

ренные в  $\text{см}^{-1}$  или в  $\text{Å}^{-1}$ . Иначе говоря, изобразим систему эквидистантных плоскостей, перпендикулярных  $\mathbf{a}$  и отстоящих друг от друга на расстоянии  $1/|\mathbf{a}|$ . В этом пространстве можно рисовать векторы длины  $1/\lambda$ . Мы расположим вектор  $\mathbf{K}_0$  так, чтобы его конец был в точке  $O$ , тогда его начало будет фиксировано в точке  $T$ . Мы назовем  $T$  узловой точкой. Вокруг  $T$  построим сферу, проходящую через  $O$ . Эта сфера пересечет некоторое количество плоскостей по окружностям, центры которых лежат на прямой, параллельной  $\mathbf{a}$  и проходящей через точку  $T$ . Сферическая поверхность, называемая обычно сферой отражения, является геометрическим местом концов векторов  $\mathbf{K}$ , имеющих такую же длину, что и  $\mathbf{K}_0$ . Равенство двух этих векторов должно иметь место, так как при классическом рассеянии длина волны не меняется.

Назовем плоскость, на которой находится точка  $O$ , нулевой, тогда все плоскости можно занумеровать положительными и отрицательными числами. Система плоскостей является геометрическим местом концов векторов  $\mathbf{K}$ , для которых выполняется условие (1). Таким образом, геометрическим местом концов векторов  $\mathbf{K}$ , для которых выполняются как условие (1), так и условие  $|\mathbf{K}_h| = |\mathbf{K}_0|$ , является окружность, по которой сфера отражения пересекается с  $h$ -й плоскостью. Дифракционный максимум порядка  $h$  образует круговой конус, ось которого направлена по периоду трансляции  $\mathbf{a}$ . Чем больше порядок максимума, тем меньше его угол с направлением  $\mathbf{a}$ . Ось конуса нулевого порядка направлена по  $\mathbf{K}_0$ , т. е. этот конус содержит рассеянную волну, которая распространяется в том же направлении, что и падающая. Эту рассеянную волну мы будем также называть первичной. Итак, в случае периодической

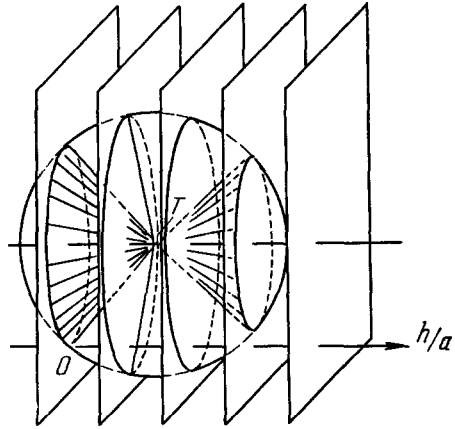


Рис. 4. Геометрическая теория одномерной решетки в фурье-пространстве.

одномерной решетки, простирающейся до бесконечности в обе стороны, можно получить при помощи такого построения все соотношения между падающим и диффрактированным лучами. Система плоскостей с интервалом  $1/|a|$  представляет собой фурье-преобразование одномерной решетки. Но решетка образуется резонаторами, поэтому она описывается функцией распределения рассеивающей материи. Если мы назовем пространство, в котором находится решетка, физическим пространством, то обратное пространство называется фурье-пространством, и можно сказать, что система плоскостей является фурье-преобразованием плотности распределения материи в физическом пространстве.

Исходя из сказанного, можно получить геометрическую теорию дифракции на трехмерной решетке. Трехмерная решетка обладает тремя периодами трансляции:  $a_1, a_2, a_3$ , которые образуют ребра параллелепипеда, называемого элементарной ячейкой. Если мы выберем направление наблюдения так, чтобы три атома на концах векторов  $a_1, a_2, a_3$  и атом, находящийся в вершине, излучали вторичные волны в одинаковой фазе, то мы можем с уверенностью сказать, что и все другие атомы решетки будут в этом направлении излучать вторичные волны в той же самой фазе. Совокупность всех вторичных волн образует плоскую волну с волновым вектором  $K$ . Если теперь потребовать выполнения условия максимального усиления (1) в каждом из трех направлений  $a_i$ , то легко получить известные уравнения Лауэ для определения вектора  $K$ :

$$(K - K_0) a_1 = h_1, \quad (K - K_0) a_2 = h_2, \quad (K - K_0) a_3 = h_3. \quad (2)$$

Здесь  $h_1, h_2, h_3$  — три целых числа, которые характеризуют порядок дифракционного максимума. Волновой вектор, получаемый из этих уравнений, обозначается  $K_{h_1 h_2 h_3}$ , или короче,  $K_h$ .

$K_h$  легко выразить алгебраически через векторы  $a_i$ , порядковые числа  $h_i$  и вектор падающей волны  $K_0$ . Однако мы предпочтем геометрическое рассмотрение в фурье-пространстве.

Геометрическим местом векторов  $K$ , удовлетворяющих первому уравнению из условия (2), является система плоскостей, перпендикулярных  $a_1$ , с интервалом  $1/|a_1|$ . Аналогичная система плоскостей, перпендикулярных  $a_2$ , соответствует второму уравнению условия (2). Эти системы плоскостей пересекаются по прямым, перпендикулярным плоскости векторов  $a_1, a_2$ . Все вторичные волны, излучаемые атомами, находящимися в плоскости  $a_1, a_2$ , распространяются вдоль этих прямых с одинаковой фазой. Периодическую систему прямых в фурье-пространстве можно рассматривать как преобразование функции плоского распределения материи в физическом пространстве. Наконец, третье уравнение условия (2) определяет систему плоскостей, перпендикулярных оси  $a_3$ , с интервалом  $1/|a_3|$ . Эти плоскости пересекают систему параллельных прямых в точках, образующих так называемую «обратную решетку». И снова мы можем рассматривать «обратную решетку» как преобразование Фурье функции распределения рассеивающей материи в физическом пространстве. Каждая точка обратной решетки несет, по построению, индекс из трех целых чисел  $h_1 h_2 h_3$ . Если соединить узловую точку  $T$  с какой-нибудь точкой  $h$ , то вектор  $K_h = Th$  будет волновым вектором плоской волны, которая образована вторичными волнами, распространяющимися с одинаковой фазой (когерентными вторичными волнами). Однако вектор  $K_h$  будет иметь, вообще говоря, длину, отличающуюся от длины вектора падающей волны  $K_0$ . А этого не должно быть, так как мы имеем дело с классическим рассеянием, которое не изменяет длину волны падающего света. Поэтому мы должны наложить еще одно условие на вектор  $K_h$ . Вектор  $K_h$  должен кончатся на сфере радиуса  $|K_0|$  с центром в точке  $T$ . Поэтому для того,



чтобы существовал вектор  $\mathbf{K}_h$ , соответствующий дифракционному максимуму, необходимо, чтобы сфера отражения проходила через точки обратной решетки. А так как это условие выполняется далеко не всегда, наблюдать дифракцию монохроматических рентгеновских лучей можно только либо при достаточно широком угле падения первичных лучей, либо при вращении кристалла и связанной с ним обратной решетки (при этом волновой вектор первичной волны и сфера отражения остаются неподвижными).

Если рассмотреть модель, в которой на каждую элементарную ячейку в кристалле приходится по одному точечному рассеивателю, то плотность распределения материи в физическом пространстве описывается периодической  $\delta$ -функцией. Ее фурье-образ в фурье-пространстве есть тоже периодическая  $\delta$ -функция и соответствует точкам обратной решетки, взятым с одинаковым весом. Если, однако, рассеивающие центры распределены в кристаллической ячейке каким-либо иным образом — непрерывно или дискретно, то периодическая функция плотности записывается в виде ряда Фурье, в котором коэффициенты  $F(h_1, h_2, h_3)$  уже не равны между собой. Припишем эти коэффициенты точкам обратной решетки как «веса». Тогда фурье-преобразованием плотности распределения материи в физическом пространстве будет в фурье-пространстве обратная решетка с этими весами. Если в физическом пространстве нарушается также периодичность, например, из-за того, что кристалл имеет конечные размеры, или из-за дислокаций, то ряд Фурье заменяется интегралом Фурье, точки обратной решетки размазываются и веса заменяются непрерывными функциями  $F(\mathbf{h})$ , где  $\mathbf{h}$  — радиус-вектор, пробегаящий все фурье-пространство. Однако все равно направление и амплитуда рассеянных волн (при классической дифракции) определяются пересечением сферы отражения с фурье-преобразованием функции распределения материи (структурной амплитудой)  $F(\mathbf{h})$ . Конечно, здесь уже нельзя совершить построение в рамках геометрической теории, как для идеальной периодической решетки. Теперь для расчета дифракции нужно прибегнуть к помощи кинематической теории, которая рассматривает суперпозицию вторичных волн не только в направлениях максимального усиления. Основное предположение кинематической теории опять-таки заключается в том, что на резонаторы действует только первичная волна. При этом резонаторы совершают вынужденные колебания под действием падающей волны и не оказывают никакого влияния друг на друга.

## 7. ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ

В динамической теории задача о дифракции рентгеновских лучей решается так же, как задача о дисперсии в оптике, т. е. рассматриваются свободные колебания системы резонаторов, которые оказывают друг на друга воздействия через ими же созданное поле. Для учета этого поля рассмотрим снова плоскую волну с частотой  $\nu$  и направлением распространения вдоль вектора  $\mathbf{K}_0$ . В противоположность геометрической и кинематической теориям длина вектора  $\mathbf{K}_0$  неизвестна и должна быть найдена из условий самосогласования. Если через кристалл проходят только одиночные волны, то мы имеем дело с чисто оптической проблемой, решение которой годится и для рентгеновских волн, когда длина их не очень мала, т. е. не очень велик вектор  $\mathbf{K}_0$ . Таким образом, для рентгеновских волн с достаточно высокой частотой справедливы обычные дисперсионные формулы. Из них следует, что оптическая плотность среды  $n^2 - 1$  для видимого света порядка единицы, а для мягких и жестких рентгеновских лучей она составляет соответственно всего лишь  $10^{-5}$ ,  $10^{-6}$ . Именно поэтому

Рентген, а вслед за ним и многие другие исследователи не могли обнаружить никакого отражение или преломление рентгеновских лучей. Только в 1922 г. А. Комpton<sup>6</sup> смог наблюдать отражение от кристаллических поверхностей и стекла, а двумя годами позже Ларсен, Зигбан и Валлер<sup>7</sup> обнаружили преломление рентгеновских лучей стеклянной призмой. Этими экспериментами была доказана применимость дисперсионной формулы не только к видимому свету, но и к рентгеновским лучам.

Однако, как мы знаем из кинематической теории, бывает, что в кристалле существует не одна, а сразу несколько связанных друг с другом волн. Это имеет место только для некоторых направлений  $\mathbf{K}_0$ , когда сфера отражения проходит более чем через одну точку обратной решетки. Практически требуется выполнение более слабого условия: сфера отражения

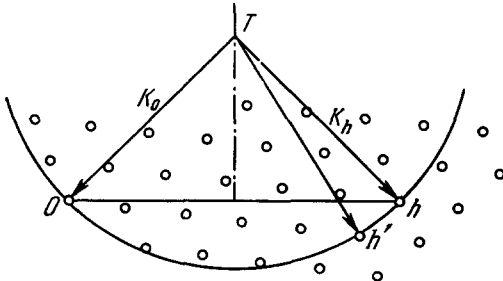


Рис. 5. Геометрическая теория дифракции на трехмерной решетке в фурье-пространстве.

должна проходить вблизи нескольких точек обратной решетки. На рис. 5 показан как раз такой случай, когда на сфере отражения или вблизи нее лежат кроме точки  $O$  еще две точки  $h$  и  $h'$ .  $TO$  — обозначает заданный вектор  $\mathbf{K}_0$  падающей, вернее, первичной волны,  $Th$  и  $Th'$  обозначают волновые векторы двух вторичных волн. Из рисунка видно, что общая картина будет одной и той же независимо от того, какую волну

считать первичной. Это обстоятельство иллюстрирует теорему взаимности<sup>18</sup>. Все три волны связаны друг с другом узловой точкой и образуют единое целое, которое мы будем называть элементарным оптическим полем.

Хотя мы по-прежнему будем рассуждать геометрически, тем не менее «сейчас мы подошли к такому моменту, когда», как неоднократно повторял лорд Кельвин в Балтиморских лекциях, «расход мела экономит мозги». Давайте, следуя этому августейшему примеру, посмотрим, какую напряженность электрического поля создает «дипольная волна» с волновым вектором  $\mathbf{K}_1$ . Под «дипольной волной» мы понимаем следующее распределение диполей во времени и пространстве:

$$\mathbf{p}_l = \mathbf{p}(\mathbf{X}_l, t) = \mathbf{p} \exp [j(-\nu t + \mathbf{K}_1 \mathbf{X}_l)]. \quad (3)$$

Напряженность в точке  $X$  будет создаваться вторичными волнами, приходящими от всех диполей  $\mathbf{p}_l$ . Вторичные волны распространяются здесь, как в пустом пространстве, т. е. их волновое число есть  $|\mathbf{K}_0| = \nu/e$ . Предполагается, что  $|\mathbf{K}_1|$  отличается от  $k_0$ , но в случае рентгеновских лучей отличие не очень большое. После некоторых математических преобразований выражение для  $\mathbf{E}(x)$  можно записать в следующем виде:

$$\mathbf{E}(x) = \frac{1}{v_a} \sum_h \mathbf{p}_\perp(\mathbf{K}_h) \frac{k_0^2}{K_h^2 - k_0^2} \exp(j\mathbf{K}_h x), \quad (4)$$

где  $v_a$  — объем элементарной ячейки кристалла,  $\mathbf{K}_h$  — вектор из узловой точки  $T$  в точку  $h$  обратной решетки и сумма берется по всем точкам обратной решетки. Временной фактор  $\exp(-j\nu t)$  опущен в обеих частях равенства. Наконец, от дипольного момента  $\mathbf{p}$  входит только часть  $\mathbf{p}_\perp(\mathbf{K}_h)$ , которая перпендикулярна  $\mathbf{K}_h$ .

Из этой формулы видно, что электрическое поле состоит из суперпозиции бесконечного числа плоских волн, среди которых есть волны с очень

большой амплитудой. Это те волны, у которых конец волнового вектора  $\mathbf{K}_h$  лежит вблизи сферы отражения, а значит, мала разность  $\mathbf{K}_h^2 - \mathbf{k}_0^2$ . Из формулы видно, что нужно делать четкое различие между радиусом сферы отражения, который всегда равен  $k_0$ , и расстоянием от точки  $h$  обратной решетки до узловой точки  $T$ , которое равно  $\mathbf{K}_h$ , и, в частности,  $k_0$  для точки  $O$ . Мы уже обсуждали ранее физический смысл резонансных множителей  $(\mathbf{K}_h^2 - \mathbf{k}_0^2)^{-1}$  или  $(c^2 - q_h^2)^{-1}$ . Но раньше речь шла о видимом свете, где существует только одна-единственная «сильная волна» — волна с волновым вектором  $\mathbf{K}_1$ . Теперь же, в случае рентгеновских волн, эти резонансные множители означают, что оптическое поле состоит практически из нескольких «сильных» компонент, которые легко найти геометрически.

Одно важное следствие вытекает из структуры поля рентгеновских лучей. Когда мы фиксируем узловую точку, отношение амплитуд плоских волн, из которых состоит суммарное элементарное поле, также фиксируется. Это отношение определяется расстоянием от сферы отражения до соответствующих точек обратной решетки. Правда, оно неоднозначно, так как в зависимости от направления  $\mathbf{p}$  (т. е. поляризации дипольной волны) поперечные компоненты  $\mathbf{p}_\perp(\mathbf{K}_h)$  могут быть различными.

Цель динамической теории заключается в том, чтобы найти такие положения узловой точки, при которых оптическое поле становится самосогласованным. Условие самосогласования выделяет в фурье-пространстве целую поверхность, которая является геометрическим местом узловых точек. Эта поверхность называется поверхностью дисперсии. Я не буду выводить здесь ее уравнение, а только попытаюсь сделать правдоподобными результаты вычисления в простейшем (и самом важном) случае, когда оптическое поле имеет только две сильные компоненты: первичную волну с волновым вектором  $\mathbf{K}_1$  и вторичную — с волновым вектором  $\mathbf{K}_h$ . Очевидно, что этот случай распадается на два независимых, когда  $\mathbf{p}$  лежит в плоскости  $\mathbf{K}_1$  и  $\mathbf{K}_h$  и когда  $\mathbf{p}$  перпендикулярен плоскости  $\mathbf{K}_1$  и  $\mathbf{K}_h$ . Второй случай более прост, так как уравнение (4) становится однокомпонентным. При этом связь первичной и вторичной волн определяется целым вектором  $\mathbf{p}$  и потому гораздо сильнее, чем в том случае, когда вектор  $\mathbf{p}$  лежит в плоскости лучей  $\mathbf{K}_1$  и  $\mathbf{K}_h$ .

Если на кристалл падает только один первичный луч, то его поверхностью дисперсии является сфера, проведенная из центра  $O$  радиуса  $|\mathbf{K}_0| = n_0 k_0$ . Здесь, согласно вышесказанному, коэффициент преломления  $n_0$  определяется обычной дисперсионной формулой Лоренца и отличается от единицы только на одну стотысячную или миллионную долю. Благодаря теореме взаимности мы можем и вторую волну рассматривать как первичную. Предположим, что теперь она единственная сильная волна, и построим для нее поверхность дисперсии, чтобы найти возможные узловые точки. Поверхностью дисперсии снова будет сфера радиуса  $|\mathbf{K}_0|$ , но с центром в точке  $h$ . Теперь у нас есть две сферы с центрами в точках  $O$  и  $h$ . Мы назовем их лоренцевскими сферами, а точку их пересечения, лежащую в плоскости двух векторов, — лоренцевской точкой  $L_0$ . Подобным же образом можно вокруг точек  $O$  и  $h$  построить две сферы радиуса  $k_0$ . Эти сферы мы назовем лауэвскими, а точку их пересечения — лауэвской точкой  $L_a$ . Лауэвские сферы можно было бы рассматривать как поверхности дисперсии в такой кинематической теории, где фазовая скорость всех волн равна  $c$  (рис. 6).

Нас больше всего интересует область, близкая к  $L_a$  и  $L_0$ , потому что именно здесь два луча существуют одновременно. Нужно все время помнить, что радиусы лоренцевских и лауэвских сфер отличаются только на малые величины порядка  $1/10^5$  или  $1/10^6$ . Поэтому интересующая нас

область очень мала, и на рис. 6 приходится рисовать ее в гораздо большем масштабе, чем остальную часть обратной решетки. Если расстояние  $La - Lo$  порядка миллиметра, то  $k_0$  и  $|K_0|$  должны быть в километр длиной. В связи с этим сферические поверхности вблизи  $La$  и  $Lo$  можно заменить касательными плоскостями, а линии их пересечения с плоскостью векторов  $K_1, K_h$  — прямыми линиями (рис. 7).

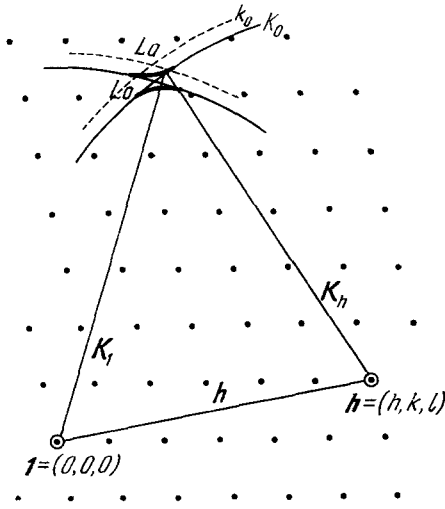


Рис. 6. Поверхность дисперсии для двух сильных лучей.  
 $La$  — лауэвская точка;  $Lo$  — лоренцевская точка.

Геометрическим местом узловых точек самосогласованных полей является гиперболический цилиндр. Этот цилиндр пересекает плоскость векторов  $K_1, K_h$  по двум гиперболам, которые на рис. 7 обозначены сплошными линиями. Лоренцевская точка является центром гипербол, а асимптотами их служат касательные к лоренцевским сферам. Верхняя гипербола достигает лауэвской точки только в том случае, когда решетка кристалла состоит из точечных диполей. Связь между первичной и вторичной волнами пропорциональна расстоянию между вершинами гипербол; поэтому, когда вектор  $p$  лежит в плоскости  $K_1, K_h$ , то связь между вол-

нами слабее и, значит, расстояние между гиперболами больше. Если в кристаллической ячейке рассеиватели распределены непрерывно, то связь между волнами пропорциональна произведению структурных амплитуд  $F_h$  и  $F_{-h}$  и никогда не больше, а обычно меньше, чем связь между волнами в дискретном кристалле, в кристаллической ячейке которого имеется один точечный рассеиватель. Поэтому расстояние между вершинами гипербол в непрерывном кристалле пропорционально  $F_h F_{-h}$ .

Для таких узловых точек, как  $T_1$  и  $T'_1$ , удаленных от центра, сильна только первая волна. Для точек же  $T_2$  и  $T'_2$  велика амплитуда второй волны. Если точка  $T$  совпадает с одной из вершин гипербол, то обе волны будут иметь одинаковые амплитуды.

Величина амплитуды определяется резонансным фактором  $(K_h^2 - k_0^2)^{-1}$ , поэтому мы можем рассматривать резонансный множитель как коэффициент преобразования данной амплитуды дипольной волны в амплитуду поля с волновым вектором  $K_h$ . Когда узловые точки лежат на верхней гиперболе вблизи вершины, а значит, и вблизи лауэвской точки, коэффициент преобразования гораздо больше, чем для узловых точек, лежащих на нижней гиперболе. Если элементарная ячейка кристалла состоит из одного точечного диполя и вектор  $p$  перпендикулярен плоскости лучей,

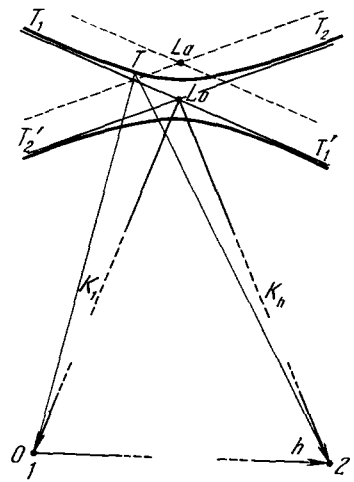


Рис. 7. Детали поверхности дисперсии для двух лучей.

то верхняя ветвь гиперболы проходит через лауэвскую точку и коэффициент преобразования становится бесконечным. Конечно, в природе такого не бывает, так как пространственные размеры атома имеют такой же порядок, что и длина волны рентгеновских лучей, и поэтому необходимо учитывать «атомный фактор». Однако для физического понимания рентгеновской оптики такая идеализированная ситуация служит хорошим пробным камнем. Коэффициент преобразования становится бесконечным, когда фазовая скорость стремится к  $c$ . Тогда все вторичные волны, идущие в одном направлении, складываются в одинаковой фазе, и в неограниченном кристалле даже бесконечно малая амплитуда дипольной волны дает конечную амплитуду поля.

Поверхность дисперсии в рентгеновской оптике играет такую же роль, как и различные поверхности в кристаллооптике видимого света. В том случае, когда сфера отражения проходит вблизи нескольких (более двух) точек обратной решетки, ситуация становится более сложной, нежели разобранный выше. В частности, если таких точек окажется  $N$ , поверхность дисперсии состоит из  $2N$  ветвей, которые получаются с помощью пересечения и расщепления лоренцевских сфер, центрами которых служат эти  $N$  точек (множитель 2 появляется из-за двух возможных направлений поляризации в каждой сильной волне). Но как в простых, так и в сложных случаях поверхность дисперсии позволяет определить всевозможные характеристики самосогласованного поля: направления и длины волновых векторов, направление поляризации и отношение амплитуд составляющих волн. Конечно, общий нормировочный множитель остается неопределенным, как и во всякой задаче на собственные колебания.

Теперь мы знаем достаточно много, чтобы приступить к решению неоднородной задачи, связанной с вынужденными колебаниями.

Для этого рассмотрим полубесконечный кристалл, который заполняет только нижнюю половину пространства и на поверхность которого падает извне плоская волна.

Для формального построения общего решения задачи достаточно знать все самосогласованные состояния, которые задаются  $2N$  ветвями поверхности дисперсии. Общее решение связывает внутреннее поле в кристалле с внешним и выражает интенсивности отраженного и дифрагированного лучей в зависимости от условия падения. При этом интенсивности очень хорошо согласуются с экспериментальными величинами, измеренными на самых идеальных кристаллах, какие только могут быть выращены в настоящее время зонной плавкой или другими способами.

## 8. ЭФФЕКТ БОРМАНА<sup>9</sup>

До сих пор мы не рассматривали поглощения рентгеновских лучей, хотя это явление раньше бросается в глаза, чем преломление. Со времени открытия Рентгена и почти до наших дней считалось, что поглощение зависит только от массы поглотителя. До Лауэ единственной характеристикой как жестких, так и мягких рентгеновских лучей была глубина проникновения. Ни плотность упаковки, ни химические связи в молекулах, казалось, не влияют на величину энергии, теряемой рентгеновскими лучами при столкновении с отдельным атомом. Более поздние исследования показали, что эта энергия идет на выбивание из атома фотоэлектронов или на излучение рентгеновских волн другой частоты. Чтобы понять, какое смятение в умах произвели эксперименты Бормана, начавшиеся в 1941 г., нужно все время помнить о существовавшей в те времена твердой уверенности, что поглощение определяется только массой. К 1950 г. Борман провел настолько точные эксперименты, что удалось получить

фотографии монохроматической линии меди  $K_\alpha$  после прохождения через кристалл кальция толщиной  $0,27 \text{ см}$ <sup>10</sup>. Экспозиция длилась целый час. Если бы поглощение зависело только от массы, то падающий поток после прохождения через кристалл должен бы был уменьшиться в  $10^{12}$  раз. Эксперименты же показали, что ослабление равно  $10^4$ . Это происходило всякий раз, когда кристалл находился в таком положении, что его кристаллические плоскости давали дифракционный максимум порядка  $(2, 0, 0)$ . Однако, помимо удивительного факта сравнительно легкого прохождения рентгеновских лучей через кристалл, было обнаружено также, что все выходящие пучки имели очень узкие угловые размеры и выходили из таких областей кристалла, в которые поток энергии может пройти от места падения первичной волны, только распространяясь вдоль кристаллической плоскости.

Для объяснения этих явлений Лауэ (см.<sup>11</sup>) ввел в рамках своей динамической теории комплексную величину диэлектрической проницаемости кристалла. Впоследствии его сотрудник М. Колер (см.<sup>12</sup>) обосновал это, исходя из квантовомеханических соображений. Вместо комплексной диэлектрической проницаемости можно с одинаковым правом ввести комплексную поляризуемость диполей  $\alpha$ . Комплексная поляризуемость приводит к разности фаз между моментом диполя и окружающим его полем. А разность фаз при корректном вычислении приводит к поглощению диполем энергии из оптического поля. Возможность объяснить поглощение с помощью комплексной поляризуемости уже давно известна из теории дисперсии классической оптики. Поэтому, когда я в 1918 г. опубликовал динамическую теорию дифракции рентгеновских лучей, то подумал о том, чтобы учесть поглощение этим же методом, но отказался от этого шага только ради упрощения выкладок. Через двенадцать лет была обнаружена угловая асимметрия кривых отражения и Принс<sup>13</sup> показал, что эту асимметрию можно объяснять с помощью комплексного  $\alpha$ . Но объяснять с помощью комплексного  $\alpha$  поглощение рентгеновских лучей в те времена никто не решался, так как тогда существовало убеждение, что поглощение определяется главным образом квантовомеханическим эффектом — испусканием фотоэлектронов. Комплексное же  $\alpha$  означает просто введение диссипативного члена в классическое уравнение движения диполя. Поэтому, когда я, собираясь стать лектором Мюнхенского университета в 1917 г., сформулировал нижеследующий тезис, то сделал это с оговоркой. Тезис, который я предполагал защищать перед аудиторией, гласил:

«Если поглощение рентгеновских лучей, как и поглощение видимого света, определяется диссипацией энергии в колеблющихся диполях, то существуют такие условия, при которых кристалл не будет поглощать вовсе».

Я теперь очень сожалею, что никто из слушателей не напомнил мне о моем заявлении, тогда бы оно, вероятно, не выскочило у меня полностью из памяти. На самом же деле я совершенно забыл о нем и вспомнил только через четыре года, когда случайно натолкнулся на гранки приглашительного билета на мою вступительную лекцию, где оно было напечатано на второй странице.

Идея, которая побудила меня к этому заявлению, до сих пор кажется мне наиболее естественным объяснением эффекта Бормана. Она заключается в следующем. Мы уже видели, что чем ближе узловая точка к лауэвской, тем больше резонансный множитель  $(K_\alpha^2 - k_0^2)^{-1}$  и тем больше коэффициент преобразования амплитуды дипольной волны в амплитуду поля. Рассмотрим теперь кристалл, на поверхность которого падает извне первичная волна с определенной амплитудой  $E_0$ . Поле внутри кристалла должно быть «согласовано» с величиной  $E_0$ ; поэтому, если коэффициент

преобразования велик, то для достижения согласования амплитуда дипольной волны должна быть малой, а если мала амплитуда колебания диполей, то мала и диссипация энергии в них, т. е. мало поглощение. В предельном случае, когда  $T$  совпадает с лауэвской точкой, для получения нужной конечной амплитуды поля внутри кристалла достаточно исчезающе малых колебаний диполей и поглощение равно нулю. Это и есть то самое «такое условие», которое было упомянуто в тезисе. Конечно, этот предельный случай, как уже отмечалось ранее, не может осуществляться на атомах с конечными размерами, поэтому он является только логическим следствием модели кристалла, состоящего из точечных диполей.

Чтобы быть ближе к  $La$ , точка  $T$  должна лежать на верхней ветви поверхности дисперсии. На нижней ветви коэффициент преобразования мал и поглощение велико. В то время как вблизи места падения внешней волны существуют поля, соответствующие обеим ветвям поверхности дисперсии, после прохождения через кристалл остается только наименее поглощаемое поле. Это и объясняет чрезвычайно узкие угловые размеры, спектр и поляризацию выходящих лучей в эффекте Бормана.

Возвращаясь к предельному случаю, когда  $T$  совпадает с  $La$ , спросим себя: каким образом исчезающе малые дипольные моменты создают конечное внутреннее поле, соответствующее внешнему? Или иначе: как могут диполи находиться в покое во внутреннем поле конечной амплитуды? Лауэ дал следующий ответ на этот вопрос: внутреннее поле представляет собой совокупность двух волн—бегущей вдоль кристаллической плоскости и стоячей в перпендикулярном направлении. Узлы и пучности стоячей волны располагаются в плоскостях, параллельных кристаллическим плоскостям. Причем если с атомной плоскостью совпадает плоскость узлов, то атомы находятся в покое и не только не колеблются, но и не испускают фотоэлектронов. Если же с атомной плоскостью совпадает плоскость пучностей, то поглощение становится больше нормального.

Рассмотрим идеально симметричный случай (рис. 8), когда  $T$  и  $T^*$  лежат в вершинах поверхности дисперсии и, значит, амплитуды первичной и дифрагированной волн равны. Мы можем разложить волновые векторы на две компоненты, одна из которых идет из точки  $T$  ( $T^*$ ) в середину вектора  $\mathbf{h}$ , а другая равна  $\pm \mathbf{h}/2$ . Первая компонента одинакова у обеих волн и дает волну, бегущую в направлении, перпендикулярном  $\mathbf{h}$ , т. е. вдоль отражающих плоскостей; вторая компонента  $\pm \mathbf{h}/2$  соответствует волнам, распространяющимся в положительном и отрицательном направлениях нормали к отражающим плоскостям. Так как волны, соответствующие вторым компонентам, имеют одинаковые амплитуды, они складываются и образуют стоячую волну типа косинуса или синуса с расстоянием между узлами  $1/|\mathbf{h}|$  или  $d/n$ , где  $d$  — период трансляции отражающих плоскостей, а  $n$  — коэффициент преломления. Для точки  $T$ , элементарное поле которой имеет наименьшее поглощение, плоскости узлов совпадают с центрами наиболее сильно поглощающих атомов. А для точки  $T^*$  с атомными плоскостями совпадают плоскости пучностей. Так как стоячие волны не переносят энергию, перенос энергии происходит только вдоль отражающих плоскостей.

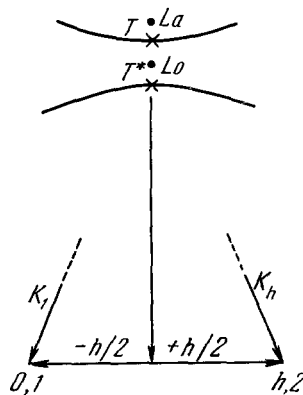


Рис. 8. Полностью симметричное отражение и эффект Бормана.

Вблизи входной поверхности кристалла существуют оба элементарных поля с узловыми точками, лежащими на обеих ветвях поверхности дисперсии, так как только их сумма может дать поле, равное полю падающей внешней волны. Энергия, содержащаяся в сильно поглощаемом поле, быстро рассеивается при проникновении внутрь кристалла, и остается одно-единственное поле, если только оно вообще образуется, у которого плоскости узлов совпадают с атомными плоскостями.

Электромагнитные поля, подобные рассмотренным выше, хорошо известны из теории волноводов, где существует такое понятие, как «отношение амплитуд стоячих волн». Это понятие может быть с успехом использовано и в рентгеновской оптике, когда при небольшом смещении узловых точек  $T$  и  $T^*$  в сторону от вершин амплитуды волновых компонент становятся различными.

Поистине замечательным является тот факт, что электромагнитные волны должны устанавливаться между атомными плоскостями с высокой степенью точности, как в волноводе. Поэтому нет ничего удивительного в том, что любая нерегулярность в кристаллической решетке сильно уменьшает эффект Бормана. Это позволяет использовать эффект Бормана для изучения распределения температур и градиентов напряжения при изгибах, дислокациях и наличии примесных атомов.

Лауэ, Борман и впоследствии Н. Като<sup>14</sup> посвятили много времени исследованию энергетического потока. Они показали, что для элементарного поля, соответствующего единственной узловой точке, вектор Пойнтинга лежит между волновыми векторами компонент  $\mathbf{K}$  и  $\mathbf{K}_h$ . Это можно легко увидеть без всяких вычислений, если воспользоваться понятием групповой скорости применительно к данному случаю. Кроме того, можно показать, что для каждой данной узловой точки вектор потока энергии всегда направлен перпендикулярно поверхности дисперсии в этой точке<sup>15</sup>.

В мои намерения не входит детально останавливаться на расчетах или экспериментах, проведенных в последнее десятилетие в этой бывшей некогда весьма обособленной области рентгеновской оптики. По этим вопросам есть превосходные обзоры, написанные самим Борманом<sup>16</sup>, Джеймсом<sup>17</sup> и Баттерманом и Коуле<sup>18</sup>. Однако давайте зададимся вопросом: присущ ли борман-эффект только рентгеновской оптике или же он является общим свойством всех систем осцилляторов?

## 9. СУЩНОСТЬ ЭФФЕКТА БОРМАНА

Аномально низкое поглощение было найдено также при дифракции нейтронов и электронов. Но так как теории нейтронной и электронной дифракции исходят прежде всего из теории дифракции рентгеновских лучей, для изучения сути эффекта Бормана лучше всего найти другую модель. В искомой модели должен существовать аналог двух волн  $1$  и  $h$ , идущих через кристалл, и эти волны должны иметь одинаковую диссипацию энергии, когда они существуют поодиночке. Однако вблизи брэгговского условия поглощение должно резко уменьшаться и даже вовсе исчезать. Пусть наша модель будет механической. В ней аналогом распространяющихся волн служат колебания грузов.

Пусть волне  $1$ , распространяющейся в пустом пространстве  $k_0$ , соответствуют колебания подвешенного на пружине груза с частотой  $\nu_0$ . Подсоединим теперь к грузу амортизатор, поддерживаемый второй пружиной (пружины и амортизатор предполагаются невесомыми). После подсоединения амортизатора собственная частота колебаний груза изменится и станет не  $\nu_0$ , а  $N_0$ . Теперь движения груза соответствуют волне  $\mathbf{K}_0$ , распространяющейся через поглощающий кристалл. Подвесим



теперь второй такой же груз, который представляет волну с волновым вектором  $K_h$ . Пусть два груза будут связаны невесомым стержнем, а системе амортизатора вместе с его пружиной будем подсоединять к различным точкам стержня. Различные точки стержня соответствуют выбору различных узловых точек  $T$  (см. рис. 7) вдоль своего листа поверхности дисперсии. Если амортизатор присоединен точно под одной из масс, то эта масса оказывается не связанной с другой, так как из-за небольшой амплитуды вертикальных смещений невесомый стержень только поворачивается около другой массы и не производит на нее никакого действия. Если же амортизатор присоединен к невесомому стержню в промежуточной точке  $\tau$ , то колебания обоих грузов оказываются связанными друг с другом. Если бы  $\tau$  была неподвижна в пространстве, то грузы колебались бы с частотой  $\nu_0$  и отношение их амплитуд было бы точно определено. Но на самом деле  $\tau$  не неподвижна в пространстве, поэтому на оба груза действует и нижняя пружина, а ее действие зависит и от положения точки  $\tau$ , и от величины силы, действующей со стороны амортизатора. Поэтому при изменении положения точки  $\tau$  меняется не только частота (от  $\nu_0$  до  $N_0$ ), но и диссипация энергии, аналогично тому как меняются длины волновых векторов и поглощение рентгеновских лучей при смещении узловой точки  $T$  вдоль поверхности дисперсии.

Если мы рассмотрим связанную систему, но без трения, т. е. вставим в амортизатор булавку, препятствующую внутреннему движению, то мы будем иметь два вида колебаний: симметричное, в котором оба груза колеблются в одинаковой фазе, и антисимметричное, в котором грузы колеблются с противоположными фазами. Разумеется, частоты обоих видов колебаний различны. Когда амортизатор подсоединен к середине стержня, амплитуды колебаний обеих масс становятся равными. Этому случаю соответствует поле, состоящее из двух элементарных полей с узловыми точками  $T$  и  $T^*$  — вершинами гипербола. Причем для каждого из элементарных полей амплитуды компонент равны, но длины волновых векторов для  $T$  и  $T^*$  разные. Совершенно очевидно, что симметричное колебание механической системы имеет более высокую частоту, чем антисимметричное, потому что при симметричном колебании амортизатор также вносит свой вклад в возвращающую силу. Для антисимметричного же колебания амортизатор и центр бруска остаются неподвижными. Они останутся неподвижными, даже если вынуть булавку из амортизатора. Следовательно, антисимметричное колебание имеет частоту  $\nu_0$ , не затухает и соответствует элементарному полю, узловая точка которого совпадает с лауэвской точкой  $La$ . Рассмотренная выше механическая модель помогает хорошо понять многие идеи динамической теории и освобождает эффект Бормана от всякой мистики, окружавшей его в свое время.

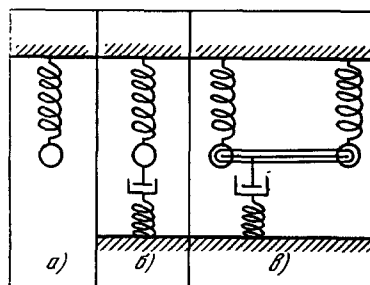


Рис. 9. Механическая модель эффекта Бормана.

#### 10. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Оглядываясь на историю развития основных представлений кристаллической оптики, мы не можем не быть удовлетворены внутренним единством теории. Различные свойства видимого света и рентгеновских лучей, теория диэлектрической проницаемости в кристалле, теория электронной

и нейтронной дифракции — все это описывается в рамках единого метода. Однако в динамическую теорию еще с 1918 г. заложено большое количество предпосылок, которые до сих пор не могли быть хорошо проверены либо из-за недостаточной точности экспериментов, либо из-за несовершенных методов выращивания кристаллов. В некоторых направлениях динамическая теория требует своего дальнейшего развития, и этим занимается большой коллектив ученых. Например, необходимо более строго учитывать динамику решетки, особенно при исследовании влияния температуры на дифракцию. Н. Като предложил изучать дифракцию сферических, а не плоских падающих волн. Для теории дифракции электронов важной проблемой является распространение энергии в многокомпонентном поле. Эта проблема важна, например, при изучении рассеяния медленных электронов и в кристаллооптике видимого света, так как в обоих этих случаях нельзя адекватно описать поле с помощью небольшого числа «сильных» компонент. Поэтому применение более быстро сходящихся приближенных методов позволит решать подобные проблемы гораздо лучше<sup>19</sup>.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. P. P. Ewald, Fifty Years of X-ray Diffraction, A. Oosthoek Publ., Utrecht, 1962. Рис. 3—6 взяты из этой книги.
2. J. M. Bijvoet, Koninkl. Ned. Akad. Wetenschap 52, 313 (1949); A. F. P e e r d e m a n, A. J. v a n B o m m e l and J. M. B i j v o e t, ibid. 54, 3 (1951).
3. C. G. Darwin, Phil. Mag. 27, 315, 675 (1914).
4. P. P. Ewald, Fortsch. Chemie, Phys. und phys. Chem., Ser. B18, Heft 8 (1925); Physica 4, 234 (1924).
5. См.<sup>1</sup>, гл. III.
6. A. H. Compton, Bull. Natl. Res. Council USA 20, 48 (1922).
7. A. Larsson, M. Siegbann and I. Waller, Naturwiss. 52, 1212 (1924).
8. P. P. Ewald, Phys. Zs. 14, 465 (1913).
9. G. Borrmann, Phys. Zs. 42, 157 (1941); Zs. Phys. 127, 297 (1950).
10. См. M. V. Laue, Röntgenstrahlinterferenzen, Akademische Verlagsgesellschaft, Frankfurt, 1960, стр. 426.
11. M. V. Laue, Acta Cryst. 2, 106 (1909).
12. M. Kohler, Sitzb. Press Akad. Wiss., Phys.-Math. Kl, 334 (1935).
13. J. A. Prins, Zs. Phys. 63, 447 (1930).
14. См.<sup>11, 16-18</sup>, а также: N. Kato, Acta Cryst. 11, 885 (1958).
15. P. P. Ewald, Acta Cryst. 11, 887 (1958).
16. G. Borrmann, Beitrage zur Physik und Chemie des 20. Jahrhunderts, Friedr. Vieweg und Sohn, Braunschweig, Germany, 1959, стр. 262.
17. K. W. James, Solid State Phys. 15, 53 (1963).
18. B. W. Batterman und H. Cole, Rev. Mod. Phys. 36, 681 (1964).
19. Настоящая статья основана на следующих материалах, опубликованных автором: Zur Begründung der Kristalloptik: I. Dispersionstheorie, Ann. Phys. 49, 1 (1916); II. Theorie der Reflexion und Brechung, ibid. 49, 117 (1916); III. Kristalloptik der Röntgenstrahlen, ibid. 54, 519 (1917); IV. Aufstellung einer allgemeinen Dispersionsbedingung, insbesondere für Röntgenfelder. Zs. Krist. A97 (1937); Optique cristalline (lumiere et rayons X), Ann. Inst. H. Poincaré 8, 79 (1938).