

87,226,2

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ В РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ

А. В. Колпаков, В. А. Бушувев, Р. Н. Бузьмин

СОДЕРЖАНИЕ

1.	Введение	479
2.	Общие свойства диэлектрической проницаемости кристалла, не зависящие от модели среды	481
	а) Уравнения Максвелла и материальное уравнение для кристаллической среды (481). б) Симметричные свойства тензора диэлектрической проницаемости (482).	
3.	Элементарное классическое введение в теорию диэлектрической проницаемости и основные оптические явления в рентгеновском и гамма-диапазонах а) Поляризуемость среды, состоящей из классических осцилляторов. Электронная и ядерная части поляризуемости (485). б) Основные эффекты в оптике рентгеновских лучей (487). в) Основные явления в гамма-оптике (488). г) Поляризуемость трехмерно-периодических сред (491).	485
4.	Квантовомеханическая теория рентгеновской и гамма-диэлектрической проницаемости	493
	а) Основные уравнения теории (493). б) Рентгеновская поляризуемость электронной подсистемы (496). в) Потенциальная часть электронного вклада в поляризуемость кристалла. Структурный и атомный факторы (496). г) Дисперсионный вклад в электронную поляризуемость (497). д) Влияние неупругого рассеяния на поляризуемость (500). е) Ядерная поляризуемость кристалла (501).	
5.	Применение блоховского формализма к вычислению электронной поляризуемости кристаллов	503
	а) Блоховское представление волновых функций электронной подсистемы (503). б) Плотность тока в представлении блоховских функций (505). в) Приближение сильной связи (506).	
6.	Заключение	507
	Цитированная литература	510

«Само наличие брэгговских отражений рентгеновских лучей означает, что общепринятое описание среды — без учета пространственной периодичности диэлектрической проницаемости — неприемлемо.»

М. Ляс

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящий обзор посвящен рассмотрению современного состояния проблемы исследования диэлектрических свойств среды в рентгеновском и гамма-диапазонах. Рассмотрение проводится в рамках единого формализма тензора диэлектрической проницаемости (ТДП или, в зависимости от контекста, ДП). В обзоре обсуждается проблема введения ТДП $\epsilon_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega)$ для кристаллических сред и описываются его основные свойства — симметрия, связь с показателем преломления и амплитудой рассеяния, представления в прямом и обратном пространствах и т. д.

В рентгеновском диапазоне ТДП был введен в рассмотрение еще в тридцатых годах в работах Лауэ¹, Колера², Мольера³ в связи с развитием динамической теории дифракции. Эвальд в своих ранних исследованиях показал, что оптические свойства пространственно-периодических сред во многих отношениях весьма необычны и требуют рассмотрения именно в рамках диэлектрического формализма. Периодическое строение кристаллов ведет к тому, что в рентгеновской оптике оказывается принципиально важным учет пространственной дисперсии, которая проявляется на разных уровнях, так как обязана своим происхождением и пространственному расположению составляющих кристалл атомов и ядер, и их индивидуальным и коллективным свойствам.

В последние годы отчетливо проявилась тенденция к интенсивному исследованию оптики рентгеновского и гамма-диапазонов как в теоретическом, так и в экспериментальном планах. Эта тенденция, в частности, отразилась в создании рентгеновских интерферометров⁴ и резонаторов⁵, попытках более тщательного изучения когерентных свойств излучения в этом диапазоне⁶, в поисках путей к созданию рентгеновских и гамма-лазеров⁷ и исследовании нелинейных эффектов⁸. Рентгеновской и гамма-оптикой активно интересуются теперь исследователи, работавшие ранее в более длинноволновых областях электромагнитного спектра.

Среди причин, вызвавших повышенный интерес к оптике рентгеновского диапазона, следует назвать две главных. Во-первых, это развитие исследований по ядерному гамма-резонансу⁹ и оптике мёссбауэровского излучения вблизи частот ядерных гамма-переходов. Кристаллооптика в области частот ядерных резонансов представляет значительный интерес, поскольку в этом случае кристалл является средой с резко выраженной пространственной и частотной дисперсией и анизотропией. Результаты большого числа экспериментальных и теоретических работ (в терминах амплитуды или сечения рассеяния) по ядерной гамма-оптике просуммированы в обзорах Ханнона и Траммеля^{10, 11}, Ханнона, Кэррона и Траммеля¹² и в обзоре Белякова¹³, посвященном дифракции ядерного гамма-излучения на кристаллах, содержащих ядра мёссбауэровского изотопа. В книге Барышевского¹⁴ на языке показателя преломления рассмотрены оптические явления, возникающие при взаимодействии γ -квантов (а также нейтронов и электронов), с кристаллами, анизотропия которых обусловлена поляризацией ядерных моментов. Во-вторых, в последние годы наряду с традиционными рентгеновскими трубками в качестве источников излучения стали использовать мёссбауэровские изотопы и синхротроны. Рентгеновское синхротронное излучение уже сейчас имеет существенно более высокие спектральные и интегральные характеристики по сравнению с мощными рентгеновскими трубками¹⁵.

Отличительные особенности диэлектрических свойств среды в рентгеновском диапазоне вытекают из следующих простых обстоятельств: а) длина волны излучения $\lambda \leq a$, где a — параметр решетки кристалла; б) $\lambda \leq r$, где r — радиус атома; однако уже для элементов с номерами $Z \geq 25$ имеет место неравенство $\lambda \gg a_0$, где $a_0 = \hbar^2/mc^2Z$ — радиус первой боровской орбиты атома; в) обычно имеет место соотношение $\omega \sim \omega_i$ ($Z \geq 25$), где ω_i — одна из собственных частот самых глубоких атомных K - или L -уровней; но часто выполняется и другое соотношение $\omega \gg \omega_i^{\max}$; г) все вышележащие электронные уровни атома заняты (исключая, быть может, состояния вблизи границы непрерывного спектра), так что переходы на эти уровни запрещены в силу принципа Паули; д) если кристалл содержит мёссбауэровские ядра, то ядерная подсистема на частотах гамма-переходов также дает вклад в его диэлектрические свойства.

2. ОБЩИЕ СВОЙСТВА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ КРИСТАЛЛА, НЕ ЗАВИСЯЩИЕ ОТ МОДЕЛИ СРЕДЫ

Основная задача оптики рентгеновского диапазона состоит в исследовании распространения и дифракции плоских монохроматических (нормальных) волн в кристаллах. Распространение таких волн описывается уравнениями Максвелла и материальным уравнением, устанавливающим связь между возмущением и откликом на него через ТДП. В настоящем разделе мы рассмотрим наиболее общие свойства ТДП, не зависящие от конкретной модели кристалла.

а) Уравнения Максвелла и материальное уравнение для кристаллической среды

Макроскопические уравнения электромагнитного поля в немагнитной среде в отсутствие сторонних токов и зарядов имеют вид ¹⁶

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, & \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \mathbf{D} = 0, & \operatorname{div} \mathbf{H} = 0. \end{cases} \quad (2.1)$$

Уравнения (2.1) получены из точных микроскопических уравнений Максвелла усреднением соответствующих величин по ансамблю. Обычно проводимое в оптике видимого диапазона усреднение по физически бесконечно малым элементам объема в рентгеновском диапазоне неприемлемо, поскольку $\lambda/a \ll 1$.

Наиболее общим видом линейной связи между индукцией $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ и электрическим полем $\mathbf{E}(\mathbf{r}', t')$, удовлетворяющей принципу причинности, является следующее интегральное соотношение ¹⁷

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \hat{\varepsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') \mathbf{E}(\mathbf{r}', t'), \quad (2.2)$$

где \mathbf{P} — поляризация. Все входящие в (2.1) и (2.2) величины вещественны и являются статистически усредненными. В то же время они могут как угодно быстро изменяться в пространстве и во времени.

Для стационарных сред ядро интегрального оператора (2.2) зависит лишь от разности $t - t'$. Тогда согласно (2.2) между фурье-компонентами поля и индукции существует связь

$$D_i(\mathbf{k}, \omega) = \int d\mathbf{k}' \varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) E_j(\mathbf{k}', \omega), \quad (2.3)$$

где

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) = (2\pi)^{-3} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r} + i\mathbf{k}'\mathbf{r}'}, \quad (2.4a)$$

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \int_0^{\infty} d\tau \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) e^{i\omega\tau}. \quad (2.4b)$$

Из условия вещественности ядра $\hat{\varepsilon}$ в (2.2) следует, что

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega)^* = \varepsilon_{ij}(-\mathbf{k}^*, -\mathbf{k}'^*; -\omega^*). \quad (2.5)$$

Поскольку свойства кристалла неизменны при сдвиге на произвольный вектор решетки \mathbf{R} , ядро (2.4b) можно тождественно представить ¹⁷ в виде

суммы по векторам обратной решетки

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \varepsilon_{ij}(\mathbf{r} + \mathbf{R}, \mathbf{r}' + \mathbf{R}; \omega) = \sum_{\mathbf{H}} \varepsilon_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \omega) e^{-i\mathbf{H}\mathbf{r}'}, \quad (2.6)$$

где $\varepsilon_{ij}^{(\mathbf{H})}$ — \mathbf{H} -компонента ТДП. Из (2.4) и (2.6) следует, что

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) = \sum_{\mathbf{H}} \varepsilon_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega) \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{H}), \quad (2.7a)$$

где

$$\varepsilon_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega) = \int d\rho \varepsilon_{ij}^{(\mathbf{H})}(\rho, \omega) e^{-i\mathbf{k}\rho}. \quad (2.7b)$$

поэтому

$$D_i(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{H}} \varepsilon_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega) E_j(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega). \quad (2.8)$$

Соотношение (2.8) устанавливает нелокальную связь в пространстве волновых векторов между индукцией с волновым вектором \mathbf{k} и фурье-компонентами поля со *всеми* возможными волновыми векторами $\mathbf{k}_{\mathbf{H}} \equiv \mathbf{k} + \mathbf{H}$, что является следствием пространственной периодичности кристалла.

В оптическом диапазоне частот соотношение (2.8) приводится к более простому виду $D_i(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \omega) E_j(\mathbf{k}, \omega)$, поскольку в длинноволновом приближении ($a \ll \lambda$) кристалл пространственно-однороден¹⁷.

Присутствие в индукции (2.8) членов с $\mathbf{H} \neq 0$ ведет к центральному для оптики рентгеновских лучей явлению дифракции, состоящему в появлении рассеянных волн с направлениями распространения, отличающимися от первичного \mathbf{k} на векторы обратной решетки \mathbf{H} . При определенных условиях одновременно несколько членов $\mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega)$ в сумме (2.8) могут быть одного порядка величины с первичной волной $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$.

Подстановка материального уравнения (2.8) в (2.1) приводит к системе уравнений для амплитуд нормальных волн в кристалле с учетом анизотропии и пространственной и временной дисперсии:

$$[n_{\mathbf{k}_{\mathbf{H}}}^2 \hat{\pi}_{\mathbf{k}_{\mathbf{H}}} - \hat{\varepsilon}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)] \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) - \sum_{\mathbf{H} \neq 0} \hat{\varepsilon}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega) = 0, \quad (2.9)$$

где $n_{\mathbf{k}_{\mathbf{H}}} \equiv ck_{\mathbf{H}}/\omega$, $\hat{\pi}_{\mathbf{k}_{\mathbf{H}}} = 1 - (\mathbf{k}_{\mathbf{H}}\mathbf{k}_{\mathbf{H}}/k_{\mathbf{H}}^2)$ — оператор проектирования на плоскость, перпендикулярную $\mathbf{k}_{\mathbf{H}}$.

Решение системы уравнений (2.9) с привлечением граничных условий составляет основную проблему динамической теории дифракции рентгеновских лучей¹⁸⁻²⁰.

Случай, когда амплитуды рассеянных волн $\mathbf{E}(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega)$ в (2.8) малы по сравнению с амплитудой первичной волны $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$, называется кинематическим приближением теории дифракции¹⁸. Это приближение, как следует из решения уравнений Максвелла, справедливо при выполнении условия $l | \varepsilon^{(\mathbf{H} \neq 0)} | / a \ll 1$, где l — размер кристалла в направлении распространения первичной волны.

б) Симметричные свойства тензора электрической проницаемости

Исходя из самых общих соображений можно вывести ряд полезных соотношений симметрии для ТДП.

Условие периодичности (2.6) совместно с (2.5) приводит к соотношению $\varepsilon_{ij}^{(\mathbf{H})*}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ij}^{(-\mathbf{H})}(-\mathbf{k}^*, -\omega)$. Если кристалл является центросимметричным, т. е. $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \varepsilon_{ij}(-\mathbf{r}, -\mathbf{r}'; \omega)$, то отсюда

и из соотношений (2.7) вытекает, что

$$\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ij}^{(-H)}(-\mathbf{k}, \omega). \quad (2.10)$$

Свойства симметрии тензора ДП по отношению к перестановкам индексов i и j следуют из флуктуационно-диссипационной теоремы для распределенных систем²¹

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \varepsilon_{ji}(\mathbf{r}', \mathbf{r}; \omega).$$

Таким образом, при перестановке координат \mathbf{r} и \mathbf{r}' следует одновременно переставлять индексы i и j . Сравнение последнего соотношения и (2.4), (2.7) приводит к важному свойству симметрии в пространстве волновых векторов:

$$\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ji}^{(H)}(-\mathbf{k} - \mathbf{H}, \omega). \quad (2.11)$$

Для центросимметричного кристалла из (2.10), (2.11) следует, что

$$\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ji}^{(-H)}(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega). \quad (2.12)$$

Если выполняется соотношение (2.12), то кристалл является негиротропным, однако оно не запрещает нецентросимметричному кристаллу быть негиротропным. Соотношение (2.12) можно рассматривать как обобщение обычного определения негиротропности¹⁷ на случай пространственно-периодических сред ($\mathbf{H} \neq 0$). В изотропной негиротропной среде (2.12) приводит, в частности, к известному в дифракции рентгеновских лучей закону Фриделя¹⁸.

Рассмотрим некоторые общие соотношения симметрии для непоглощающих кристаллов. Согласно флуктуационно-диссипационной теореме среда является непоглощающей, если $\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \varepsilon_{ij}^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \omega)$ ²¹, т. е.

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) = \varepsilon_{ji}(-\mathbf{k}', -\mathbf{k}; -\omega); \quad (2.13)$$

здесь \mathbf{k} , \mathbf{k}' и ω считаются вещественными.

Далее, как следует из (2.7) и (2.13), имеют место соотношения симметрии^{*}

$$\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ji}^{(H)}(-\mathbf{k} - \mathbf{H}; -\omega) = \varepsilon_{ji}^{(-H)*}(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega). \quad (2.14)$$

Комбинация (2.11) и (2.14) приводит к новым симметричным свойствам:

$$\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, -\omega) = \varepsilon_{ij}^{(-H)*}(-\mathbf{k}, \omega). \quad (2.15)$$

Из (2.14) следует закон Фриделя для непоглощающей среды. В негиротропном непоглощающем кристалле тензор $\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega)$ согласно равенствам (2.10) и (2.15) является вещественным.

Дальнейшие соотношения симметрии можно получить разбиением ТДП $\varepsilon_{ij}^{(H)} = \varepsilon_{ij,r}^{(H)} + i\varepsilon_{ij,i}^{(H)}$ на действительную (r) и мнимую (i) части, а также на два эрмитовых тензора

$$\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_{ij}^{(H)(1)}(\mathbf{k}, \omega) + i\varepsilon_{ij}^{(H)(2)}(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.16a)$$

каждый из которых в свою очередь можно разбить на действительную и мнимую части:

$$\varepsilon_{ij}^{(H)(l)} = \varepsilon_{ij,r}^{(H)(l)} + i\varepsilon_{ij,i}^{(H)(l)} \quad (l = 1, 2). \quad (2.16b)$$

^{*} Соотношение (2.14) при $\mathbf{H} = 0$ означает эрмитовость тензора $\hat{\varepsilon}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)$. Его можно рассматривать как более общее определение эрмитовости для тензора $\hat{\varepsilon}^{(H \neq 0)}(\mathbf{k}, \omega)$.

Следствием эрмитовости тензоров $\varepsilon_{ij}^{(H)(1)}$ и $\varepsilon_{ij}^{(H)(2)}$ являются следующие соотношения симметрии:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ij,r}^{(H)(1)}(\mathbf{k}, \omega) &= \varepsilon_{ji,r}^{(-H)(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega), \\ \varepsilon_{ij,i}^{(H)(1)}(\mathbf{k}, \omega) &= -\varepsilon_{ji,i}^{(-H)(1)}(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega),\end{aligned}\quad (2.16\text{в})$$

Если среда негиротропна, т. е. выполняется (2.12), то из (2.16) следует действительность эрмитовых тензоров в (2.16б):

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ij}^{(H)(1)} &= \varepsilon_{ij,r}^{(H)(1)} = \varepsilon_{ij,r}^{(H)}, & \varepsilon_{ij,i}^{(H)(1)} &= 0, \\ \varepsilon_{ij}^{(H)(2)} &= \varepsilon_{ij,r}^{(H)(2)} = \varepsilon_{ij,r}^{(H)}, & \varepsilon_{ij,i}^{(H)(2)} &= 0.\end{aligned}$$

В непоглощающей среде согласно (2.14) и (2.16) второй эрмитов тензор в (2.16а) обращается в ноль, но тензор $\varepsilon_{ij}^{(H)}$ в общем случае остается комплексным, что определяется расположением атомов в элементарной ячейке и наличием пространственной дисперсии. Если, к тому же, кристалл и негиротропен, то мы вновь приходим к заключению о вещественности тензора $\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega)$.

Рассмотренные выше соотношения отражают симметрию ТДП относительно перестановки тензорных индексов и операций инверсии пространства. ТДП обладает также симметричными свойствами, которые следуют из симметрии кристаллического пространства. ТДП в прямом пространстве пропорционален зарядовой плотности $\rho(\mathbf{r})$ и, следовательно, его симметрия описывается 230 фёдоровскими пространственными группами симметрии Φ . Если в месте расположения атома присутствует произвольная совокупность полей или взаимодействий $\{V\}$, то симметрия такой решетки оказывается существенно неклассической и описывается группами обобщенной симметрии $G^{(p)}$, $G^{(q)}$ или $G^{(w)}$. Наиболее общей конструкцией в теории групп обобщенной симметрии являются группы сплетений $G^{(w)}$, которые строятся следующим образом²²: $G^{(w)} = (P^{g_1} \otimes \dots \otimes P^{g_n} \otimes G$, где g_i — операторы преобразования геометрического пространства, а операторы p_i группы P описывают локальные операции изменения физического свойства (например, поворот вектора магнитного поля или изменение угла между вектором магнитного поля и осями тензора градиента электрического поля), \otimes — прямое, а \otimes — полупрямое произведение.

В обратном пространстве группам Φ в общем случае соответствуют группы сплетений $G^{(w)}$. Из рассмотрения симметричных свойств обратного пространства также можно получить соотношения типа (2.12), (2.14). Группам симметрии прямого пространства $G^{(p)}$, $G^{(q)}$ и $G^{(w)}$ в обратном пространстве соответствуют группы двукратной обобщенной симметрии $G^{(w_\Phi, w_M)}$, $= [(P_\Phi P_M)^{g_1} \otimes \dots \otimes (P_\Phi P_M)^{g_n}] \otimes G$, где P_Φ — операция изменения фазы структурной амплитуды, а P_M — операция изменения ее модуля²³. В этом случае для ТДП справедливо следующее соотношение²³:

$$\varepsilon_{ij}^{(\hat{g}\mathbf{H}_l)}(g^{(p1)}\mathbf{k}; g^{(p2)}\{\mathbf{V}\}) = p_{\Phi, M}(\hat{g}\mathbf{H}_l, \{\mathbf{V}\}) \varepsilon_{ij}^{(H_l)}(\mathbf{k}; \{\mathbf{V}\}),$$

согласно которому для centrosymmetric кристалла $\varepsilon_{ij}^{(-H)}(-\mathbf{k}; \{\mathbf{V}\}) = \varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}; \{-\mathbf{V}\})$, а для неcentrosymmetric

$$\varepsilon_{ij}^{(-H)}(-\mathbf{k}; \{\mathbf{V}\}) = \varepsilon_{ij}^{(H)*}(\mathbf{k}; \{-\mathbf{V}\}).$$

Эти соотношения являются обобщением симметричных соотношений (2.11), (2.12), (2.14) и (2.15) на случай присутствия произвольной совокупности полей $\{V\}$.

Отметим, наконец, что в обратном пространстве имеют место статистические соотношения симметрии между фурье-компонентами ТДП с различными \mathbf{H} , являющиеся следствием статистических связей между структурными факторами $F(\mathbf{H})$ ²⁴.

В ядре интегрального оператора в (2.2) удобно выделить единичный оператор \hat{I} . Тогда связь между поляризацией $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ и полем $\mathbf{E}(\mathbf{r}', t')$ устанавливается с помощью тензора поляризуемости $\hat{\chi} = (\hat{\epsilon} - \hat{I})/4\pi$ ^{*}. Согласно (2.4) и (2.7) \mathbf{H} -компоненты тензоров ДП и поляризуемости связаны следующим образом:

$$\epsilon_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega) = \delta_{ij}\delta_{\mathbf{H}0} + 4\pi\chi_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.17)$$

В силу аналитичности и ограниченности $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$ и $\mathbf{D}(\mathbf{k}, \omega)$ матрица $\hat{\chi}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega)$ (2.17) как функция комплексной переменной ω также аналитична и ограничена. Вследствие этого, действительная и мнимая части $\hat{\chi}^{(\mathbf{H})}$ удовлетворяют соотношениям Крамера — Кронига ²⁵

$$\operatorname{Re}[e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{R}}\hat{\chi}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega)] = \frac{2}{\pi} \int \frac{\omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \operatorname{Im}[e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{R}}\hat{\chi}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega')], \quad (2.18a)$$

справедливым для рассеяния на произвольный угол рассеивателем радиуса R . При рассеянии на нулевой угол ($\mathbf{k}' = \mathbf{k}$) (2.18a) принимает хорошо известный в оптике видимого диапазона вид

$$\operatorname{Re}\hat{\chi}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2}{\pi} \int \frac{\omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \operatorname{Im}\hat{\chi}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega'). \quad (2.18b)$$

Соотношение (2.18b) представляет особый интерес в сочетании с оптической теоремой ²⁶, которая связывает мнимую часть $\chi^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)$ с полным сечением поглощения $N\sigma_{\text{полн}}(\mathbf{k}, \omega)$ среды

$$\operatorname{Im}\chi^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{N\sigma_{\text{полн}}(\mathbf{k}, \omega)}{4\pi k}.$$

В случае дифракции показатель экспоненты в (2.18a) кратен 2π , поскольку $\mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{H}$ и \mathbf{R} — целочисленный вектор прямой решетки, так что мы вновь приходим к соотношению типа (2.18b), но уже для случая дифракционного рассеяния, т. е. для $\chi^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega)$.

3. ЭЛЕМЕНТАРНОЕ КЛАССИЧЕСКОЕ ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ И ОСНОВНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В РЕНТГЕНОВСКОМ И ГАММА-ДИАПАЗОНАХ

а) Поляризуемость среды, состоящей из классических осцилляторов. Электронная и ядерная части поляризуемости

Пусть среда состоит из непрерывно распределенных классических осцилляторов с собственными частотами ω_l и малыми константами затухания γ_l . Эти осцилляторы могут соответствовать атомным электронам и (или) мёссбауэровским ядрам. Поляризация среды $P_i(\omega) = \chi_{ij}(\omega) E_j(\omega)$, где тензор $\chi_{ij}(\omega)$ представляет собой сумму по всем

^{*} Иногда в литературе по теории рассеяния рентгеновских лучей под поляризуемостью понимают величину $4\pi\chi$ (см. монографию ⁹) или $4\pi\chi/\varepsilon$ (см., например, монографии ^{18, 20}). Последнее определение применимо только в случае изотропных сред.

собственным частотам *)

$$\chi_{ij}(\omega) = \frac{Ne^2}{m} \sum_l \frac{g_{ij}(\omega_l)}{\omega_l^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_l}; \quad (3.1)$$

здесь m — масса электрона (или протона), N — плотность зарядов, g_{ij} — сила осциллятора. Выражение (3.1) удобно представить в несколько ином виде, выделив член, который будем называть в дальнейшем потенциальной или главной частью поляризуемости:

$$\chi_{ij}(\omega) = -\frac{Ne^2}{m\omega^2} \delta_{ij} + \frac{Ne^2}{m\omega^2} \sum_l \frac{\omega_l^2 g_{ij}(\omega_l)}{\omega_l^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_l} \quad (3.2)$$

Второй, дисперсионный, член в (3.2) имеет заметную величину только когда $\omega \approx \omega_l$. Если частота внешнего воздействия ω значительно превышает максимальную частоту ω_p^{\max} , то вкладом второго члена в тензор χ_{ij} можно пренебречь. При этом ДП принимает вид $\epsilon(\omega) = 1 - (\omega_p^2/\omega^2)$, где $\omega_p = \sqrt{4\pi Ne^2/m}$ — так называемая плазменная частота; и становится скаляром. Поскольку в рентгеновском диапазоне $\omega \gg \omega_p$, то ДП $\epsilon < 1$.

Оценка величины потенциального члена в (3.2), например, для гамма-излучения Co^{57} ($\lambda = 0,86 \text{ \AA}$) и среды, состоящей из атомов железа ($N = N_{\text{ат}}Z$, где $N_{\text{ат}} = 8,47 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$, и $Z = 26$) дает значение $\chi = -1,2 \cdot 10^{-6} < 0$. Поэтому фазовая скорость рентгеновского излучения в среде $c_{\text{ф}} \approx c(1 - 2\pi\chi)$ больше скорости света в вакууме, а групповая скорость $c_{\text{гр}} \approx c(1 + 2\pi\chi)$ меньше c . Следовательно, в этом диапазоне частот среда оптически менее плотна, чем вакуум.

Как уже упоминалось, ядерная подсистема дает вклад в поляризуемость только на частотах вблизи мёссбауэровских резонансов. Главная особенность мёссбауэровских резонансов состоит в том, что их константы затухания γ необычайно малы. Поэтому положение спектральной линии ядерного γ -перехода на шкале частот, форма и другие ее характеристики оказываются очень чувствительными к внешним по отношению к ядру условиям. Внешние и внутренние кристаллические магнитные поля и градиенты электрического поля приводят к зеемановскому и квадрупольному расщеплениям ядерных уровней⁹, причем величина расщепления может значительно превышать естественную ширину линии γ . В этом случае в (3.2) необходимо суммирование по всем сверхтонким компонентам l .

В отсутствие расщепления при $\omega \gg \omega_{\text{эл}}^{\max}$ в окрестности частоты ω_0 ядерного перехода поляризуемость среды складывается из двух членов:

$$\chi(\omega) = \chi_{\text{эл}}(\omega) + \chi_{\text{яд}}(\omega) = -N_{\text{ат}}Zr_0\lambda^2 + (4\pi)^{-1}N_{\text{яд}}c\sigma_0\gamma(\omega_0'^2 - \omega^2 - i\omega\gamma)^{-1}, \quad (3.3)$$

где

$$\sigma_0 = \frac{\lambda^2}{2\pi} \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \frac{f}{1 + \alpha}$$

— максимальное сечение ядерного резонансного поглощения; I_1, I_2 — спины основного и возбужденного состояний ядра; f — фактор безотдачного испускания⁹; α — коэффициент внутренней конверсии; $\lambda = \lambda/2\pi$; $r_0 = e^2/mc^2$.

Максимальная величина отношения $|\chi_{\text{эл}}/\text{Re } \chi_{\text{яд}}|$ для изотопа Fe^{57} близка к 10. Поэтому в области частот $\omega < \omega_0$, в противоположность

*) Для простоты в разделах а), б) и в) этой главы вместо $\chi_{ij}^{(0)}$ будем писать просто χ_{ij} .

обычной ситуации, $\chi > 0$, фазовая скорость меньше скорости света в вакууме. Это приводит, в частности, к возможности эффекта Вавилова — Черенкова в рентгеновском диапазоне частот²⁷.

Электронная ДП является скаляром и не обладает пространственной дисперсией, если не говорить о малых поправках вблизи собственных частот ω_i , которые могут быть заметны только для тяжелых элементов. Ядерная же часть ДП, наоборот, приводит к оптике с пространственной дисперсией и в присутствии сверхтонких расщеплений является тензором.

б) Основные эффекты в оптике рентгеновских лучей

Наиболее характерные особенности рентгеновской оптики проявляются в условиях дифракции. Поскольку рассмотрение дифракционных явлений выходит за рамки этого обзора, мы отсылаем читателя к монографиям¹⁸⁻²⁰ и обзору¹³. Подробное изложение ранних экспериментов по исследованию преломления и отражения рентгеновского излучения, которые были исторически первыми опытами в рентгеновской оптике, см. в монографиях^{13, 28}. Изучение явления преломления может быть проведено по отклонению от закона Брэгга — Вульфа. Подобные измерения требуют большой тщательности из-за малости величины электронной поляризуемости χ , поскольку изменение угла скольжения ψ при переходе волны из одной среды в другую крайне незначительно: $\Delta\psi = 2\pi\chi t \operatorname{tg} \psi \approx 10^{-6} - 10^{-4}$ рад.

Другой метод исследования показателя преломления основан на изучении явления полного внешнего отражения. Этот метод, в отличие от предыдущего, должен обязательно учитывать поглощение, если $\omega \approx \omega_i$. Поглощение размывает границу возникновения явления полного отражения и найти правильное значение критического угла ψ_K оказывается затруднительно. Другая особенность явления полного внешнего отражения состоит в том, что коэффициент отражения

$$R = \left| \frac{1 - \sqrt{1-r}}{1 + \sqrt{1-r}} \right|^2, \quad (3.4)$$

где $r = 4\pi |\chi| \cos^2 \psi$, с точностью до членов $\sim |\chi|^2$ совпадает для параллельной (π) и перпендикулярной (σ) плоскости падения поляризации. Поэтому преимущественной поляризацией отраженное излучение не обладает. Типичное значение критического угла $\psi_K = \sqrt{N r_0 / \pi} / \lambda \sim 10^{-3} - 10^{-4}$ рад.

Помимо прямого измерения показателя преломления можно обратиться к определению частотной зависимости коэффициента поглощения $\mu(\omega) = 4\pi(\omega/c) \chi''(\omega)$ среды, что является основной задачей рентгеновской спектроскопии²⁹. Полную поляризуемость среды $\chi(\omega)$ при этом можно восстановить из спектроскопических данных по поглощению с помощью соотношения Крамерса — Кронига (2.186). В мнимую часть поляризуемости χ'' дают вклад различные механизмы, отражающие электронное строение твердого тела, что проявляется в виде тонкой структуры края поглощения³⁰.

Ввиду того, что в рентгеновском диапазоне частот электронная поляризуемость $\chi(\omega)$ практически является скаляром, а параметр пространственной дисперсии мал (см. гл. 5), то сказанным и ограничиваются возможности рентгеновской оптики без учета периодического строения кристаллической среды. Оптика этого диапазона становится существенно более интересной, если включить в рассмотрение ядерную подсистему кристалла.

в) Основные явления в гамма-оптике

Существенной особенностью взаимодействия резонансных γ -квантов с ядрами при сверхтонком расщеплении является поляризационная зависимость сечения поглощения. Исследование поляризационных зависимостей ядерного эффекта Зеемана на ядрах изотопа Fe^{57} было проведено Фрауэнфельдером с сотр.³¹ Однако, Блюм и Кистнер³² впервые обратили внимание на то, что в подобных задачах необходимо более детальное рассмотрение процесса распространения излучения в толще среды. Действительно, доля излучения, которое поглощается в поверхностном слое, с определенной вероятностью затем может быть вновь испущена в прямом направлении. Переизлученная радиация в общем случае имеет поляризацию, отличающуюся от поляризации первичного пучка. В результате, по мере распространения в среде суммарной волны, меняются ее поляризационные характеристики и процесс взаимодействия с ядрами в каждом последующем слое*).

Действительная часть тензора поляризуемости описывает эффекты ядерного двулучепреломления, явление Фарадея, эффект Коттон — Мутона и т. д., в то время как мнимая часть ответственна за селективное поглощение определенных поляризаций. Сравнивая действительную и мнимую части $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ (3.3), можно видеть, что селективное поглощение существенно вблизи точного резонанса, а эффекты двулучепреломления наиболее ярко проявляются на несколько сдвинутых от ω_0 частотах.

Для анализа ядерных эффектов вращений поляризации удобно перейти к собственным волнам резонансной среды, которые в общем случае не ортогональны³². Проблема нахождения собственных волн тесно связана с проблемой диагонализации матрицы ТДП. Этот тензор в общем случае неэрмитов и привести одновременно к диагональному виду его действительную и мнимую части невозможно. Однако иногда удается использовать симметричные представления, чтобы указать условия, при которых матрица ТДП диагонализуется. Хаусли, Грант и Гонзер³³ показали, что диагонализация возможна при распространении излучения в некоторых высокосимметричных направлениях в кристалле. При этом следует, если рассматривается магнитоупорядоченный кристалл, учитывать и его магнитную симметрию³⁴.

Векторы поляризации собственных волн среды $\mathbf{e}_\mu(\mathbf{k}, \omega)$, используя которые можно найти поляризационные характеристики прошедшей волны, определяются из решения задачи на собственные значения¹¹ $\|\hat{\chi} - \lambda \mathbf{e}\| = \lambda \mathbf{e}$, где $\hat{\mathbf{e}}$ — столбцовая матрица из двух элементов. Решение этого уравнения дает следующие собственные значения и поляризации:

$$\lambda_\mu = \frac{1}{2}(\chi_{xx} + \chi_{yy}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\chi_{xx} - \chi_{yy})^2 + \chi_{xy}\chi_{yx}} \quad (\mu = 1, 2), \quad (3.5)$$

$$\mathbf{e}_\mu(\mathbf{k}, \omega) = \alpha_\mu \left[\mathbf{e}_x + \frac{\mathbf{e}_y(\lambda_\mu - \chi_{xx})}{\chi_{xy}} \right],$$

$$1/\alpha_\mu = \sqrt{1 + \left| \frac{\lambda_\mu - \chi_{xx}}{\chi_{xy}} \right|^2}.$$

Явный вид векторов собственной поляризации несколько произволен, поскольку $\det \|\hat{\chi} - \lambda\| = 0$. Из (3.5) следует, что разность поляри-

*) В цитированной работе³² и в ряде последующих работ других авторов в качестве характеристики среды вводится матрица коэффициента преломления. Она имеет размерность 2×2 и описывает изменение поляризации волны в плоскости, перпендикулярной к направлению распространения.

зюемостей для собственных волн равна

$$\Delta\chi_{1,2} = \chi_1 - \chi_2 = \sqrt{(\chi_{xx} - \chi_{yy})^2 + 4\chi_{xy}\chi_{yx}}$$

Действительная часть $\Delta\chi_{1,2}$ описывает эффекты двулучепреломления, а мнимая, как упоминалось выше, — селективное поглощение. При подходящих условиях мнимая часть $\lambda_1(\mathbf{k}, \omega)$ согласно (3.5) может оказаться значительно больше, чем $\lambda_2(\mathbf{k}, \omega)$. Тогда соответствующая волна будет сильнее поглощаться средой, что приведет к возрастанию степени поляризации прошедшего излучения.

Первое экспериментальное исследование ядерного эффекта Фарадея было проведено на чистом железе Имбертом³⁵. Угол поворота поляризации в его эксперименте составлял $14,3^\circ$ (рис. 1). Результаты Имберта показали, например, что более правильным значением коэффициента внутренней конверсии является $\alpha = 9,94$ вместо принятого ранее значения $\alpha = 15$ (в настоящее время считается, что $\alpha = 9$). Хаусли и Гонзер³⁶ исследовали также эффект Фарадея в частично обращенной ферромагнитной шпинели магнезиоферрита (MgFe_2O_4). Величина фарадеевского вращения в этом соединении складывается из вращения ядрами изотопа Fe^{57} , находящимися в тетраэдрической и октаэдрической позициях. Из данных по углу вращения авторы нашли относительную долю атомов Mg, занимающих тетраэдрические позиции. Позднее Грант, Хаусли и Гонзер³⁷ использовали результаты расчета работы³⁶ для экспериментального определения величины среднеквадратичного смещения положения иона железа в решетке нитропрусида натрия, а также для уточнения параметра асимметрии тензора градиента электрического поля на ядрах атомов железа в этом соединении. Гибб³⁸ исследовал поляризационную зависимость поглощения в монокристаллах аммонийного сульфата железа с целью

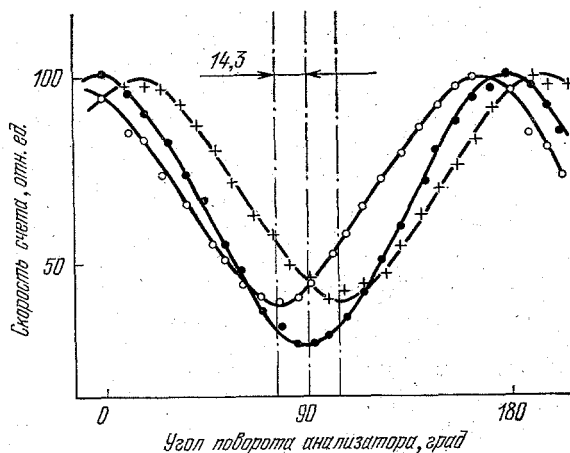


Рис. 1. Зависимость интенсивности прошедшего через дисперсионную среду излучения от угла поворота анализатора (по³⁵).

корректного определения параметров и ориентации тензора градиента электрического поля. Гольданский, Макаров, Суздаев и Виноградов³⁹ экспериментально изучили поляризационные явления при квадрупольном расщеплении ядерных уровней изотопа Fe^{57} в одноосных монокристаллах сидерита FeCO_3 . Это позволило им определить анизотропию эффекта Мёссбауэра в этом соединении. Лабушкин, Иванов и Чечин⁴⁰ обнаружили и исследовали экспериментально явление двулучепреломления поляризованного γ -излучения в монокристаллах гематита ниже точки Морина, где гематит — антиферромагнетик.

Айвазян и Беляков⁴¹ рассмотрели проблему отыскания собственных поляризаций и соответствующих им комплексных показателей преломле-

ния для разрешенного зеемановского спектра в магнитоупорядоченных кристаллах с различной магнитной структурой: ферромагнетик, слабый ферромагнетик, антиферромагнетик, зонтичные и геликоидальные структуры. Позднее Айвазян⁴² распространил эти результаты на случай произвольной структуры электрических и магнитных полей на резонансных ядрах. Общее теоретическое рассмотрение поляризационных эффектов в рамках метода S -матрицы и матрицы плотности было проведено Крисманом⁴³.

В парамагнитных кристаллах проблема вычисления показателя преломления значительно усложняется из-за явления электронной релаксации⁴⁴. В промежуточном случае, когда частоты электронной парамагнитной релаксации порядка обратного времени жизни возбужденного состояния ядра, картина расщепления ядерных уровней становится сложной и зависит от электронных заселенностей атома. То обстоятельство, что дисперсионная зависимость показателя преломления очень чувствительна к времени релаксации и разности заселенностей электронных уровней, позволяет исследовать природу парамагнитного состояния. В работе¹⁴ приведено общее выражение для ядерной части тока в присутствии зависящего от времени низкочастотного электромагнитного возмущения, которым может быть как внешнее радиочастотное поле, так и переменное внутрикристаллическое поле в условиях электронной парамагнитной релаксации.

Явление полного отражения гамма-излучения особенно интересно в присутствии сверхтонкого расщепления ядерных уровней. Коэффициент отражения для γ -лучей имеет вид (3.4), где $r = 4\pi | \chi_{эл} + \chi_{яд} | / \psi^2$. Поскольку в поляризуемость дают вклад как электроны, так и ядра, то возникает интерференция рэлеевской (электронной) и резонансной (ядерной) составляющих. Явление полного отражения при зеемановском сверхтонком расщеплении ядерных уровней теоретически и экспериментально исследовали Бернштейн и др.⁴⁵ Наиболее интересные результаты, полученные в этих работах — это значительное изменение поляризации излучения при отражении и появление зависящих от частоты фазовых сдвигов между рэлеевской и резонансной составляющими. Интерференция между электронной и ядерной компонентами отраженного излучения может быть конструктивной и деструктивной, когда рассеянная интенсивность соответственно больше или меньше суммы интенсивностей, рассеянных каждым каналом в отдельности. В такого рода экспериментах можно анализировать не только угловую зависимость интегральной интенсивности отраженного излучения (рис. 2, а), но и его частотный спектр (рис. 2, б), что дает прямую информацию о дисперсии электронной и ядерной поляризуемостей.

При написании выражения (3.1) для ядерной поляризуемости молчаливо предполагалось, что диэлектрические свойства среды можно получить суммированием независимых вкладов отдельных ядер. Это предположение отнюдь не самоочевидно. На самом деле путем многократного резонансного рассеяния возбуждение любого ядра может передаваться другим ядрам. Следовательно, возможно образование коллективного возбужденного состояния всей системы ядер в целом⁴⁶.

Учет коллективных эффектов приводит к появлению комплексной поправки Γ к частоте перехода ω_0 и в основном сводится к некоторой перенормировке постоянной распада (или ширины линии резонансного уровня: $\gamma' = \gamma + \text{Im}\Gamma$) ядра, в то время как сдвиг $\text{Re}\Gamma$ положения резонансной линии можно считать малым. Поэтому можно вновь рассматривать среду как совокупность отдельных осцилляторов, но уже с несколько измененными свойствами. Для произвольного (не брэгговского) направления

в монокристалле учет коллективных эффектов ведет к изменению ширины резонанса на некоторую постоянную величину, в то время как для поли-

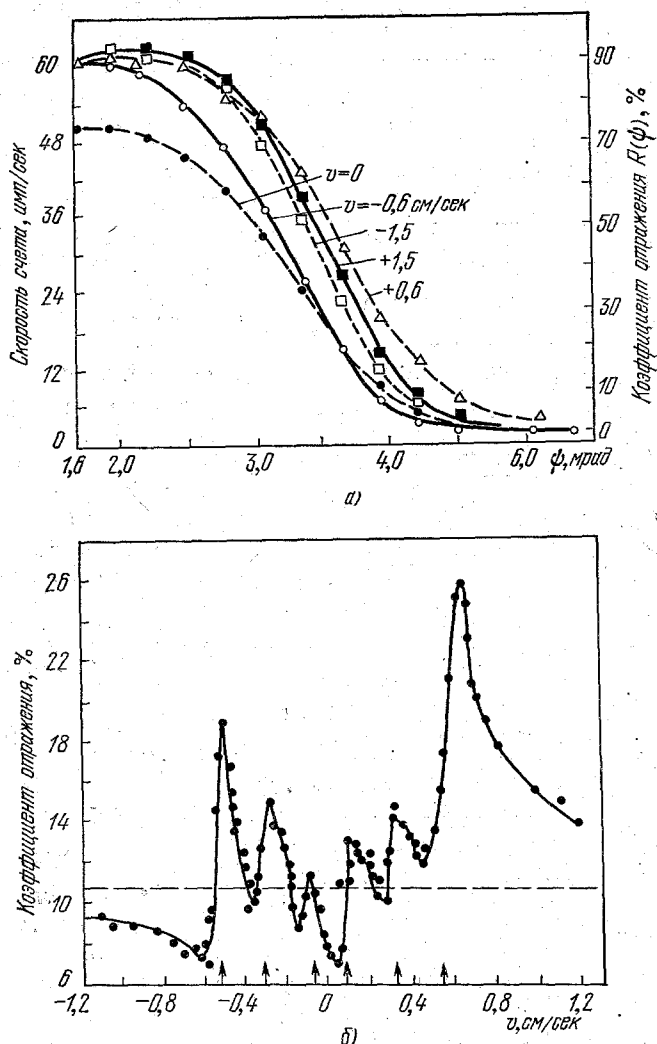


Рис. 2. а) Интенсивность отраженного излучения в зависимости от величины угла падения ψ для различных скоростей движения источника излучения (по ⁴⁵); б) экспериментальная зависимость коэффициента отражения при заданном угле падения $\psi = 4 \cdot 10^{-3}$ рад от скорости движения источника. Штриховой линией показан электронный вклад в коэффициент отражения (по ⁴⁵).

кристалла это сложная функция отношения λ/a , которая может значительно изменить ⁴⁷ обычную дисперсионную форму (3.1).

г) Поляризуемость трехмерно-периодических сред

При элементарном рассмотрении обычно полагают, что поле E' , действующее в каждой точке среды, равно среднему полю E , фигурирующему в уравнениях Максвелла. В действительности локальное (действующее) поле в месте нахождения диполя отличается от среднего (в кубических

кристаллах, например, $\mathbf{E}' = \mathbf{E} + (4\pi/3)\mathbf{P}$, где $4\pi\mathbf{P} = (\epsilon - 1)\mathbf{E}$. В оптике учет эффектов действующего поля приводит к известной формуле Лорентц — Лоренца⁴⁸. Однако в рентгеновском диапазоне, где важную роль играют дифракционные явления, определение поляризации среды под действием эффективного поля составляет лишь часть проблемы, поскольку формула Лорентц — Лоренца не указывает на характер распространения волновых полей в кристаллической среде. Строгое рассмотрение этого вопроса, который составляет содержание теоремы погашения Эвальда — Озеена⁴⁹, было дано для периодических сред Эвальдом⁵⁰.

В среде помимо первичной падающей волны существуют вторичные волны от диполей среды, которые также оказывают влияние на характер установившегося поля. Поляризация в некоторой точке \mathbf{r}_0 среды равна

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}_0) = \chi [\mathbf{E}_0(\mathbf{r}_0) + \sum_i \hat{F}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_i) \mathbf{E}_g(\mathbf{r}_i)], \quad (3.6)$$

где \mathbf{E}_0 — поле падающей волны, \mathbf{E}_g — поле, создаваемое i -м диполем среды, функция $\hat{F}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_i)$ описывает влияние всех диполей кристалла на диполь, находящийся в точке \mathbf{r}_0 , поляризуемость χ определяется как сумма поляризуемостей α отдельных диполей в единице объема. Каждый член суммы в (3.6) можно выразить через потенциал Герца $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ $\mathbf{P}(\mathbf{r}') = \text{rot rot } \mathbf{P}(\mathbf{r}') \exp(i\omega R/c) R^{-1}$, где $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Переходя к непрерывному распределению диполей в среде вместо (3.6) можно написать интегро-дифференциальное уравнение для определения поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \chi \left[\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \int_{\sigma}^{\Sigma} (\text{rot rot } \mathbf{P}(\mathbf{r}') e^{i(\omega/c)RR^{-1}} d\mathbf{r}' \right]. \quad (3.7)$$

Интегрирование следует проводить по всему объему среды, ограниченному поверхностью Σ , исключая малый объем вблизи точки \mathbf{r}' среды, ограниченный поверхностью σ . Впоследствии σ нужно устремить к нулю. Операция дифференцирования выполняется в точке среды \mathbf{r} . Уравнение (3.7) для определения поляризации в кристалле представляет собой точный результат, основанный на суммировании полей отдельных диполей среды и использовании микроскопических уравнений Максвелла. Учитывая трансляционную инвариантность свойств кристалла, а также соотношения (2.6) — (2.8), интегральное уравнение (3.7) сводится к уравнениям для фурье-амплитуд поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{k}_{\Pi}, \omega)$. Решение этих уравнений приводит к следующему результату: для амплитуды с $\mathbf{H} = 0$ интеграл разбивается на две части, одна из которых погашает первичную волну в среде (первый член в правой части (3.7)), так что от границы среды в глубь ее распространяется только дипольная волна возбуждения с волновым вектором $k = (\omega/c) \sqrt{\epsilon}$ и фазовой скоростью $c_{\phi} = c/\sqrt{\epsilon}$, а поляризуемость среды и диэлектрическая проницаемость, например, в кубическом кристалле, оказываются связанными соотношением $(4\pi/3)\chi = (\epsilon - 1)/(\epsilon + 2)$, что совпадает с результатом Лорентц — Лоренца. Все остальные волны с $\mathbf{H} \neq 0$ также представляют собой дипольные волны в среде с волновыми векторами \mathbf{k}_{Π} .

Поскольку в рентгеновском диапазоне диэлектрическая проницаемость по величине очень близка к единице, то с высокой степенью точности вместо формулы Лорентц — Лоренца можно использовать более простое соотношение $\epsilon - 1 = 4\pi\chi$, где $\chi = N\alpha$, что и было положено в основу рассмотрения в начале этого раздела (см. (3.1)). По существу, это означает (см. также гл. 5) переход к приближению локального взаимодействия, когда в (2.2) можно положить $\hat{\epsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \hat{\epsilon}(\mathbf{r}, \omega) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Рентгенов-

ская ДП в силу пространственной периодичности электронной плотности $N = N(\mathbf{r})$ (см. (3.4)) также является пространственно-периодической функцией и поэтому может быть представлена в виде ряда Фурье $\hat{\epsilon}(\mathbf{r}, \omega) = \sum_{\mathbf{H}} \hat{\epsilon}^{(\mathbf{H})}(\omega) \exp(i\mathbf{H}\mathbf{r})$, что приводит к системе уравнений для амплитуд поля $\mathbf{E}(\mathbf{k}_H, \omega)$ (2.9).

Таким образом, в рентгеновском диапазоне кристалл характеризуется набором проницаемостей $\hat{\chi}^{(\mathbf{H})}$, соответствующих различным дифракционным направлениям, что является одной из главных особенностей оптики рентгеновского диапазона частот.

4. КВАНТОМЕХАНИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ И ГАММА-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ

а) Основные уравнения теории

Квантовомеханическую теорию диэлектрических свойств кристаллов для излучения рентгеновского диапазона частот впервые рассмотрел Колер². Подробное изложение его подхода можно найти в монографии Лауэ⁵¹. Отклик системы зарядов, составляющих кристалл, на внешнее электромагнитное возмущение обычно рассматривается в квазиклассическом приближении:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} \psi, \tag{4.1a}$$

$$\text{rot rot } \mathbf{E} + c^{-2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -4\pi c^{-2} \frac{\partial \langle \mathbf{j} \rangle}{\partial t}. \tag{4.1б}$$

Ток в правой части уравнения (4.1б) представляет собой квантовомеханическое среднее по состояниям от операторов элементарных токов, индуцированных внешним воздействием.

Полный гамильтониан кристалла $\hat{\mathcal{H}}$ в (4.1а) описывает электронную и ядерную подсистемы, а также взаимодействие между ними. Отдельные члены этого гамильтониана имеют следующий вид⁵²:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{эл}} = \sum_s \frac{\hat{\mathbf{p}}_s^2}{2m_s} + \frac{1}{2} \sum_{s \neq s'} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_{s'}|} \text{ — гамильтониан электронной подсистемы кристалла,}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{яд}} = \sum_s \frac{\hat{\mathbf{p}}_s^2}{2M_s} + \frac{1}{2} \sum_{s \neq s'} V(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{s'}) \text{ — гамильтониан ядерной подсистемы кристалла,}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{эл.-яд}} = \sum_{s, s'} V(\mathbf{r}_s - \mathbf{R}_{s'}) \text{ — гамильтониан взаимодействия } s\text{-го электрона с ядром } s',$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{нукл.-нукл}} = \frac{1}{2} \sum_{s \neq s'} V(\boldsymbol{\rho}_s - \boldsymbol{\rho}_{s'}) \text{ — гамильтониан взаимодействия нуклонов в ядре.}$$

В гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}$ следует также включить член $\hat{\mathcal{H}}_\mu = \hat{\boldsymbol{\sigma}}_s \mathbf{H}(\mathbf{r}_s)$, описывающий взаимодействие магнитного момента s -го заряда σ_s с магнитным полем \mathbf{H} в точке \mathbf{r}_s , где находится этот заряд⁵³.

Не все члены общего гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}$ имеют при вычислении ДП одинаковое значение^{52, 10, 11}. На первом этапе решения можно не рассматривать фоновые колебания в кристалле, что означает пренебрежение в общем гамильтониане членом $\hat{\mathcal{H}}_{\text{яд}}$. Внутрядерные взаимодействия, например, при вычислении электронного вклада в ДП также можно не учитывать. Далее, вместо парного кулоновского взаимодействия электронов друг с другом и с ядрами можно ввести эффективный самосогласован-

ный потенциал $V_0(\mathbf{r})$ и решать одноэлектронную задачу. Отметим, что в зависимости от того, оставляем ли мы в гамильтониане член $\sum_{s,s'} V(\mathbf{r}_s - \mathbf{R}_{s'})$ или же $(1/2) \sum_{s \neq s'} (e^2/|\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_{s'}|)$, в рассмотрение вводятся либо сильно локализованные атомные электроны, либо в значительной степени коллективизированные частицы, принадлежащие валентной зоне или зоне проводимости. Если на ядрах атомов в кристалле присутствуют сверхтонкие взаимодействия, они должны быть включены в гамильтониан $\mathcal{H}_{\text{яукл.}}$.

При вычислении ДП электронную и ядерную подсистемы можно рассматривать как независимые, так что полная волновая функция системы распадается на произведение волновых функций электронной подсистемы, в которые координаты ядер входят как параметры, и ядерной подсистемы (адиабатическое приближение). В рамках этого приближения ДП представляет собой сумму двух вкладов — электронной части и ядерной, поэтому дальнейшее общее рассмотрение в этом разделе в равной степени относится как к электронной, так и к ядерной подсистемам.

Возмущение $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, которое имеет вид плоской монохроматической волны с волновым вектором \mathbf{k} и частотой ω , действительно и имеет вид $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = (1/2) \mathbf{E}^0 \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)] + \text{к.с.}$, так что векторный потенциал

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -\frac{ic}{2\omega} \mathbf{E}^0 \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)] + \text{к.с.} \quad (4.2)$$

В присутствии возмущения (4.2) импульсы зарядов следует обобщить ⁵³ $\hat{\mathbf{p}}_s \rightarrow \hat{\mathbf{p}}_s - (e/c) \mathbf{A}(\mathbf{r}_s, t)$ и сделать соответствующую замену в гамильтониане \mathcal{H} . Добавка к гамильтониану невозмущенной системы \mathcal{H}'_0 , равна

$$\mathcal{H}'_{\text{эл}} = -\sum_s^N \frac{e}{2mc} [\hat{\mathbf{p}}_s \mathbf{A}(\mathbf{r}_s, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}_s, t) \hat{\mathbf{p}}_s], \quad (4.3)$$

где N — полное число электронов в кристалле объема V , а $\hat{\mathbf{p}}_s = -i\hbar \nabla_s$ — оператор импульса, действующий на координаты s -го заряда. Если учесть еще и нулевые колебания поля ⁵⁴, то под векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r}_s, t)$ следует понимать (см., например, работу ⁵⁵) сумму $\mathbf{A} + \mathbf{A}_0$ вектор-потенциала \mathbf{A} , связанного с классическим полем, и отвечающего квантовым флуктуациям квантовомеханического оператора потенциала $\hat{\mathbf{A}}_0$:

$$\hat{\mathbf{A}}_0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}_1} [\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}_1) e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} + \hat{\mathbf{A}}^\dagger(\mathbf{k}_1) e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}}], \quad \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{k}_1) = \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}_1} V_1} \right)^{1/2} \sum_{\lambda} \epsilon_{\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}_1, \lambda}, \quad (4.4)$$

где $\hat{a}_{\mathbf{k}_1, \lambda}$ — оператор уничтожения фотона с волновым вектором \mathbf{k}_1 и единичным вектором поляризации ϵ_{λ} .

В первом приближении по возмущению волновые функции системы зарядов в кристалле имеют следующий вид:

$$\tilde{\psi}_n = \psi_n + \delta\psi_n, \quad (4.5)$$

где добавка к невозмущенной волновой функции ψ_n в состоянии n равна

$$\delta\psi_n = \frac{i}{2\omega\hbar} \sum_{m \neq n} \left[\frac{\langle m | \mathbf{E}^0 \mathbf{J}(\mathbf{k}) | n \rangle}{\omega_{mn} - \omega} e^{-i\omega t} + \frac{\langle m | \mathbf{E}^0 \mathbf{J}(-\mathbf{k}) | n \rangle}{\omega_{mn} + \omega} e^{i\omega t} \right] \psi_m, \quad (4.6a)$$

$$\langle m | \mathbf{E}^0 \mathbf{J}(\mathbf{k}) | n \rangle = \int \psi_m^* \sum_s^N (\mathbf{E}^0 \hat{\mathbf{j}}^s(\mathbf{k})) \psi_n d\mathbf{r}_s, \quad (4.6b)$$

$$\hat{\mathbf{j}}^s(\mathbf{k}) = i\hbar \frac{e}{2m} (\nabla_s e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} \nabla_s). \quad (4.6b)$$

Частота ω_{mn} соответствует переходу системы из состояния m в состояние n . В выражении (4.6а) под суммированием по промежуточным состояниям m следует понимать не только сумму по дискретному спектру, но и интегрирование по непрерывному.

Невозмущенные волновые функции ψ_n являются в силу симметрии среды собственными функциями оператора трансляции \hat{T} на произвольный вектор решетки \mathbf{R} . Следовательно, при действии оператора \hat{T} волновая функция может приобрести лишь фазовый множитель вида $\exp(i\mathbf{H}_m\mathbf{r})$, где \mathbf{H}_m — произвольный вектор обратной решетки. Поэтому матричные элементы в (4.6б) получают фазовые множители вида $\mathbf{H}_m - \mathbf{H}_n \pm \mathbf{k}$, которые должны быть равны одному из векторов обратной решетки \mathbf{H} , чтобы матричные элементы также обладали трансляционной симметрией.

Фурье-компонента симметризованного оператора плотности тока в общем случае имеет вид суммы отдельных вкладов

$$\hat{\mathbf{j}} = \sum_{l=1}^4 \hat{\mathbf{j}}_l(\mathbf{k}, \omega), \quad (4.7)$$

где

$$\hat{\mathbf{j}}_1 = -\frac{e^2}{mc} \sum_s^N \mathbf{A}(\mathbf{r}_s, \omega) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} \quad (4.8a)$$

— потенциальная часть тока;

$$\hat{\mathbf{j}}_2 = \frac{e}{2m} \sum_s^N (\hat{\mathbf{p}}_s e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} + e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} \hat{\mathbf{p}}_s) \quad (4.8б)$$

— резонансная часть тока;

$$\hat{\mathbf{j}}_3 = -\frac{e^2}{mc} \sum_s^N \hat{\mathbf{A}}_0(\mathbf{r}_s, \omega) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} \quad (4.8в)$$

— часть тока, учитывающая влияние процессов неупругого рассеяния на характер линейного по классическому полю $\mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega)$ отклика среды. В работе Афанасьева и Кагана⁵⁶ были учтены комптоновский и теплодиффузный вклады в линейную поляризуемость;

$$\hat{\mathbf{j}}_4(\mathbf{k}, \omega) = i \frac{e}{2m} \sum_s^N ([\hat{\mathbf{p}}_s \hat{\sigma}^s] e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} - e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} [\hat{\mathbf{p}}_s \hat{\sigma}^s]) \quad (4.8г)$$

— магнитная часть тока. Для электронной подсистемы магнитный ток⁵⁶, а для ядерной — потенциальный, ввиду малости могут быть опущены.

Среднее значение оператора плотности тока (4.7) в состоянии n с учетом (4.5) имеет вид

$$\mathbf{j}^{(n)}(\mathbf{k}, \omega) = \langle \psi_n | \hat{\mathbf{j}}_1(\mathbf{k}, \omega) | \psi_n \rangle + \sum_{i=2}^4 \langle \delta\psi_n | \hat{\mathbf{j}}_i(\mathbf{k}, \omega) | \psi_n \rangle. \quad (4.9)$$

Далее, эту плотность тока следует, очевидно, усреднить по всем возможным начальным состояниям n системы, что удобнее всего провести с помощью формализма матрицы плотности (см. раздел б) гл. 5).

Дальнейшее обсуждение требует конкретизации модели, поэтому мы перейдем к последовательному рассмотрению электронного и ядерного вкладов в рентгеновскую поляризуемость кристалла.

б) Рентгеновская поляризуемость
электронной подсистемы

Связь между поляризацией и током в фурье-представлении устанавливается известным соотношением $\mathbf{j} = -i\omega\mathbf{P}$. С учетом трансляционной симметрии кристалла согласно (4.6), (4.8) и (4.9) среднее значение поляризации в кристалле в состоянии n равно

$$P_i(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{H}} \chi_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega) E_j(\mathbf{k} + \mathbf{H}, \omega), \quad (4.10)$$

где тензор поляризуемости

$$\chi_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{N_{\text{эл.яд}}}{V} \frac{e^2}{m\omega^2} [f(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \Delta f_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \omega) + \Delta f_{ij}^{(\text{HP})}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \omega)] \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{H}}. \quad (4.11)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$f(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \sum_s \langle n | e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}_s} | n \rangle, \quad (4.11a)$$

$$\Delta f_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \omega) = \frac{\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}_s, s'} \sum_{m \neq n} \left[\frac{(\hat{B}_i^s(\mathbf{k}))_{mn} (\hat{B}_j^{s'}(-\mathbf{k}'))_{nm}}{\omega_m - \omega_n - \omega - (i\gamma/2)} + \frac{(\hat{B}_i^s(-\mathbf{k}'))_{mn} (\hat{B}_j^{s'}(\mathbf{k}))_{nm}}{\omega_m - \omega_n + \omega - (i\gamma/2)} \right], \quad \hat{B}_i^s = -\frac{im}{\hbar e} \hat{j}_i^s, \quad (4.11б)$$

$$\Delta f_{ij}^{(\text{HP})}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \omega) = \frac{2\pi e^2}{mV} \sum_{m \neq n, s, \mathbf{k}_1} \frac{(e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})\mathbf{r}_s})_{mn} (e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}_1)\mathbf{r}_s})_{nm}}{\omega_{\mathbf{k}_1} [\omega - \omega_{mn} - \omega_{\mathbf{k}_1} + (i\gamma/2)]} (\hat{\pi}_{\mathbf{k}_1})_{ij}. \quad (4.11в)$$

Таким образом, тензор поляризуемости (4.11) представляет собой сумму потенциального (4.11a), резонансного (4.11б) и неупругого (4.11в) вкладов в диэлектрические свойства кристалла.

Структура слагаемых в (4.11) различна и поэтому ниже они будут рассмотрены по отдельности.

в) Потенциальная часть электронного вклада
в поляризуемость кристалла.
Структурный и атомный факторы

Согласно выражению (4.11a) потенциальная часть поляризуемости пропорциональна сумме членов следующего вида:

$$f_s(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \int |\Psi_n(\mathbf{r}_s)|^2 e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}_s} d\mathbf{r}_s, \quad (4.12)$$

где интегрирование ведется по объему элементарной ячейки v . Радиус-вектор s -го электрона в элементарной ячейке можно представить в виде суммы $\mathbf{r}_s = \mathbf{r}_l + \mathbf{r}_{l, \alpha}$, где \mathbf{r}_l — радиус-вектор центра тяжести l -го атома в элементарной ячейке, $\mathbf{r}_{l, \alpha}$ — радиус-вектор α -го электрона в этом атоме. Такое представление после подстановки в (4.12) волновых функций электронов в атоме (приближение сильной связи) и суммирования по электронам в элементарной ячейке приводит к следующему выражению:

$$F(\mathbf{H}) = \sum_s f_s(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \sum_l \left[\sum_{\alpha} f_{l, \alpha}(\mathbf{H}) \right] e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}_l}, \quad (4.13)$$

которое называется структурным фактором¹⁸. Структурный фактор $F(\mathbf{H})$ учитывает фазовые соотношения между токами, индуцированными на различных атомах внутри элементарной ячейки. Интенсивности дифракционных максимумов при рассеянии рентгеновских лучей в кинематическом приближении пропорциональны квадрату модуля структурного фактора $|F(\mathbf{H})|^2$. Сумма матричных элементов (4.12) по всем электронам l -го атома называется атомным структурным фактором $f_l(\mathbf{H})$ ¹⁸:

$$f_l(\mathbf{H}) = \sum_{\alpha} f_{l,\alpha}(\mathbf{H}) = \int_{v_{\text{ат}}} |\psi_n(\mathbf{r})|^2 e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (4.14)$$

Очевидно, что основной вклад в $f_l(\mathbf{H})$ согласно (4.14) дают наиболее сильно локализованные внутренние электроны.

Сопоставление (4.11а) и (4.13) приводит к известному соотношению для поляризуемости кристалла при $\omega \gg \omega_{mn}$:

$$\chi^{(\mathbf{H})} = -\frac{e^2}{m\omega^2} \frac{N_{\text{эл.-яд}}}{V} F(\mathbf{H}). \quad (4.15)$$

Таким образом, в случае многоатомного кристалла потенциальная или главная часть поляризуемости выражается через структурный фактор $F(\mathbf{H})$, а в случае одноатомного — через атомный фактор $f(\mathbf{H})$. В принятом приближении отклик кристалла на внешнее возмущение выражается через индивидуальные свойства составляющих его атомов⁵⁷. Согласно (4.15) поляризуемость $\chi^{(\mathbf{H}=0)}$ пропорциональна усредненной по объему элементарной ячейки электронной плотности

$$\chi^{(\mathbf{H}=0)} = v^{-1} \int \chi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}} |_{\mathbf{H}=0} d\mathbf{r} = -n_0 r_0 \lambda^2 = -(4\pi)^{-1} \frac{\omega_p^2}{\omega^2}.$$

Проблема вычисления атомного фактора (4.14) сводится к выбору адекватной модели распределения электронной плотности в атоме. Сводку экспериментальных и теоретических исследований по этой проблеме можно найти в монографиях^{18, 28, 51}.

При использовании волновых функций свободных атомов, атомный фактор (4.14) действителен и сферически-симметричен. Деформация валентных электронных оболочек за счет влияния химических связей ведет к несферичности атомного фактора. При этом он, как следует из (4.14), становится комплексным. Впервые экспериментально влияние этой деформации наблюдал Реннингер⁵⁸ (подробнее см. в работах⁵⁹). Следует подчеркнуть, что возникающая таким образом комплексность атомного фактора (так же как и комплексность структурного фактора в нецентросимметричных кристаллах) не имеет ничего общего с истинным фотоэлектрическим поглощением излучения. Деформация электронных оболочек атома может быть в принципе вызвана и внешними воздействиями. Однако эти воздействия, например, с помощью электрических полей, в настоящее время еще недостаточно интенсивны, чтобы создать заметную деформацию внутренних электронных оболочек⁶⁰.

г) Дисперсионный вклад в электронную поляризуемость

Вклад дисперсионных членов (4.11б) в поляризуемость становится заметным, когда частота внешнего воздействия приближается к одной из собственных частот атома ω_{mn} . Для интересующего нас диапазона частот это K -, L -электронные оболочки для элементов со средними атомными весами и M -оболочки для наиболее тяжелых элементов. Под-

робное обсуждение ранних теоретических и экспериментальных результатов исследования дисперсионных поправок можно найти в монографиях 18, 28, 51. Результаты более поздних расчетов содержатся в работах 61. Краткий критический обзор современного состояния в этой области сделал Вагенфельд 62.

Дисперсионная часть (4.116) тензора поляризуемости строится на волновых функциях, принадлежащих всему кристаллу. Возникающая при этом пространственная дисперсия будет исследована ниже (см. гл. 5) Здесь мы ограничимся приближением сильной связи, которое является вполне удовлетворительным, в особенности для не слишком легких элементов. В этом приближении матричные элементы в (4.116) значительно упрощаются, поскольку длины волн излучения, соответствующие частотам, близким к K -краю поглощения, значительно превосходят радиус a_K области, в которой локализованы K -электроны. Действительно, $a_K/\lambda \approx \alpha Z$, где $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$ — постоянная тонкой структуры. Поэтому в матричных элементах (4.116) экспоненты обычно заменяют на единицу. В этом приближении дисперсионная часть тензора $\hat{\chi}$ в предположении сферической симметрии волновых функций K -электронов становится скаляром

$$\chi^{(H)}(\omega) = -\frac{e^2}{m\omega^2} \frac{\hbar}{mV} \sum_s \sum_{m \neq n} \left[\frac{(\hat{B}^s(0))_{mn} (\hat{B}^s(0))_{mn}}{\omega_{mn} - \omega} + \frac{(\hat{B}^s(0))_{mn} (\hat{B}^s(0))_{mn}}{\omega_{mn} + \omega} \right]. \quad (4.16)$$

В предположении сильной локализации внутренних электронов токи в матричных элементах (4.16) относятся к одному и тому же атому, что снимает двойное суммирование по электронам в (4.116). Это означает, что потенциал $\sum_{s, s'} V(\mathbf{r}_s - \mathbf{R}_{s'})$ в уравнении (4.1а) разбивается на сумму слагаемых, соответствующих каждому атому в отдельности, и уравнение, таким образом, распадается на систему независимых уравнений.

При сделанных выше упрощающих предположениях матричные элементы в выражении (4.16) равны, следовательно,

$$\chi^{(H)}(\omega) = -\frac{e^2}{m\omega^2} \frac{N_{эя}}{V} \frac{\hbar}{m} \sum_l \left[\frac{2(\omega_m^l - \omega_n^l)}{(\omega_m^l - \omega_n^l)^2 - \omega^2} |(\hat{B}^l(0))_{mn}|^2 \right] e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}_l}. \quad (4.17)$$

Сумма по l представляет собой дисперсионную поправку к структурному фактору $F(\mathbf{H})$. Выражение (3.2), полученное из элементарных соображений, совпадает с (4.17), если положить

$$g_{mn} = \frac{2\hbar}{m\omega_{mn}} |(\hat{B}(0))_{mn}|^2, \quad (4.18)$$

где g_{mn} — сила осциллятора 63. Переходя в (4.17) от суммирования по дискретному набору частот к интегрированию по непрерывному спектру с учетом (4.18), приходим к известному выражению, полученному Кроингом 64, для дисперсионной добавки к главной части атомного фактора

$$\Delta f_K = \int_{\omega_K}^{\infty} d\omega' \frac{\omega'^2}{\omega'^2 - \omega^2} \frac{dg_K}{d\omega'^2} \quad (4.19)$$

где $dg/d\omega'$ — плотность сил осцилляторов. Интеграл g_K от плотности сил осцилляторов по частотам должен давать полное число электронов на соответствующей оболочке. Так, для K -электронов следует ожидать, что $g_K = 2$. В действительности, как показали Принс и Вильямс 65, $g_K \approx 1.3$.

Это связано с тем, что занятые дискретные состояния в силу принципа Паули не дают вклада в матричные элементы (4.18).

Дисперсионная поправка к атомному фактору Δf_K с учетом затухания в знаменателях (4.16) является, в общем случае, комплексной величиной: $\Delta f_K = \Delta f'_K + i\Delta f''_K$. Мнимая часть $\Delta f''_K$ описывает фотоэлектрическое поглощение излучения. Вдали от краев поглощения дисперсионные поправки $\Delta f'_K$ и $\Delta f''_K$ численно малы по сравнению с атомным фактором $f(\text{H})$.

Проблема вычисления дисперсионной добавки сводится, таким образом, к отысканию функции распределения $dg/d\omega$. Крониг⁶⁴, Кальманн и Марк⁶⁶ предложили полуэмпирический метод, основанный на связи между атомным коэффициентом поглощения $\mu_a(\omega)$ на частоте ω и плотностью осцилляторов: $dg/d\omega = (mc/2\pi^2e^2)\mu_a(\omega)$. Частотную зависимость $\mu_a(\omega)$ можно найти экспериментально и представить с помощью эмпирических формул. В частности, для K -края

$$\mu_a(\omega) = \begin{cases} 0, & \omega < \omega_K, \\ (\omega_K/\omega)^n \mu_a(\omega_K), & \omega > \omega_K, \end{cases}$$

где показатель степени n близок к 3.

Дисперсионную добавку (4.116) можно найти⁶² по экспериментальным данным о частотной зависимости коэффициента поглощения с помощью оптической теоремы и соотношений Крамерса — Кронига.

Прямой метод определения дисперсионной добавки, как упоминалось выше, состоит в вычислении матричных элементов в (4.17). Эти расчеты были проделаны Сугиурой и Хёнлем⁶⁷.

Учет переходов на оптические атомные уровни и уровни рентгеновских экситонных состояний ведет к появлению тонкой структуры края поглощения^{29,30}.

Замена экспоненты единицей в матричных элементах (4.116) является приближенной и, в принципе, следует провести мультипольное разложение. Наибольший вклад дают дипольный $\Delta f_D + i\Delta f''_D$ и квадрупольный $\Delta f_Q + i\Delta f''_Q$ члены разложения^{18,68}. Только при учете высших мультиполей электронная поляризуемость становится тензором и появляется пространственная дисперсия. Однако вклад, который дают высшие мультиполи, составляет не более нескольких процентов по оценкам Вагенфельда⁶² и находится на пределе точности современных экспериментальных измерений.

Известно, что тепловые колебания атомов в решетке кристалла изменяют интенсивность упругих дифракционных максимумов на множитель $\exp[-2W(\mathbf{k}' - \mathbf{k})]$, который называется фактором Дебая — Валлера⁶⁹.

Задача учета фононных колебаний в поляризуемости кристалла состоит в анализе матричных элементов вида

$$\langle\langle n^0 | \exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \mathbf{u}_s] | n^0 \rangle\rangle_T \quad (4.20a)$$

для потенциальной части тока, и суммы вида

$$\left\langle \sum_{\{n\}} \frac{\langle n^0 | \exp(i\mathbf{k}' \mathbf{u}_s) | n \rangle \langle n | \exp(-i\mathbf{k} \mathbf{u}_s) | n^0 \rangle}{\omega_{mn} - \omega + \sum_j (n_j - n_j^0) \omega_j + (i\gamma/2)} \right\rangle_T \quad (4.20b)$$

для резонансной. Операция $\langle \dots \rangle_T$ означает усреднение по начальным состояниям фононной системы. Вектор \mathbf{u}_s представляет смещение центра тяжести s -го атома из положения равновесия \mathbf{r}_s^0 и может быть разложен в ряд по нормальным модам колебаний атомов в решетке⁷⁰; $|n\rangle$ — волновая функция фононной подсистемы кристалла, n^0, n — фононные числа заполнения в начальном и промежуточном состояниях, j — номер коле-

бания. В гармоническом приближении усреднение оператора $\exp [i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{u}_s]$ в (4.20а) по фоновым числам заполнения n^0 приводит к следующему выражению для показателя экспоненты фактора Дебая — Валлера

$$W(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) = \frac{1}{2} \langle [(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \mathbf{u}_s]^2 \rangle_T = 8\pi^2 \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right)^2 \langle u_{s\perp}^2 \rangle, \quad (4.21)$$

где $u_{s\perp}$ — составляющая смещения s -го атома из положения равновесия в направлении вектора обратной решетки \mathbf{H} .

Далее для вычисления среднеквадратичных смещений $\langle u_{s\perp}^2 \rangle$ следует обратиться к конкретной модели фононного спектра кристалла⁶⁹.

Сложность, которая возникает при попытке проделать аналогичную процедуру с выражением (4.20б), состоит в том, что нельзя провести суммирование по промежуточным состояниям системы фононов из-за присутствия энергии фононов в знаменателе. Однако, поскольку для рентгеновских переходов $\gamma \sim 10^{16} \text{ сек}^{-1}$, а $\omega_j^{\max} \sim 10^{13} \text{ сек}^{-1}$, то за время взаимодействия в резонансном канале атом не успевает сместиться из мгновенного положения, поэтому фононной суммой в знаменателе (4.20б) можно пренебречь, что вновь приводит к температурному фактору Дебая — Валлера (4.21).

Таким образом, потенциальный и резонансный вклады в поляризуемость с учетом фононных колебаний принимают вид

$$\chi^{(H)}(\mathbf{k}, \omega)_{(T)} = \chi^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) \exp \left[-W \left(\frac{\sin \theta}{\lambda} \right) \right].$$

д) Влияние неупругого рассеяния на поляризуемость

При вычислении поляризуемости обычно ограничиваются первым порядком теории возмущений. Между тем из простых физических соображений легко понять, что неупругие процессы также должны давать вклады в поляризуемость. Действительно, неупругое рассеяние, т. е. процесс второго порядка, приводит к дополнительному недиссипативному затуханию $\mu_{\text{нп}}$ (экстинкции) падающей волны, что эквивалентно дополнительному вкладу в мнимую часть поляризуемости*), а в соответствии с соотношениями Крамерса — Кронига — и в действительную часть χ .

Афанасьев и Каган⁵⁵ показали, что вклад комптоновского рассеяния и ТДР в поляризуемость определяется выражением (4.11в), где в последнем случае необходим учет фононных колебаний решетки. Вектор-потенциал A_0 (4.4) характеризует поле неупругого рассеяния со смещенными от частоты воздействия частотами $\omega_{\mathbf{k}_1}$, а суммирование по \mathbf{k}_1 в (4.11в) отвечает усреднению линейной (относительно классического вектор-потенциала A) поляризуемости по всем возможным частотам и направлениям распространения неупруго рассеянных волн.

Учет комптоновского и теплодиффузного рассеяний приводит⁵⁵ к некоторой перенормировке рентгеновских поляризуемостей (коэффициентов динамической теории). При этом неупругое рассеяние на фононах экспериментально должно проявляться в отклонении температурной зависимости структурного фактора от дебай-валлеровской. Действительно, Ефимов⁷², а впоследствии Балдвин и др.⁷³ и Сао и др.⁷⁴ обнаружили, что температурное поведение коэффициента аномального пропускания отличается от дебай-валлеровской зависимости. Вклад в поглощение за

*) В оптическом диапазоне вблизи длинноволнового края экситонной полосы поглощения добавка $\mu_{\text{нп}}$ за счет комбинационного рассеяния на фононах является определяющей⁷¹.

счет фононного рассеяния может составлять $\sim 4\%$ в кристаллах кремния и германия для излучений CuK_α или MoK_α в первом порядке отражения^{72, 55, 75}.

Феноменологически влияние многофотонных процессов неупругого рассеяния на поляризуемость можно объяснить⁷⁶, если ввести в рассмотрение нелинейные поляризуемости среды. Тогда полная поляризуемость на частоте падающего излучения равна сумме обычной линейной поляризуемости χ и добавочной нелинейной поляризуемости $\Delta\chi_{\text{нп}}$, которая зависит от квадратичной и кубичной нелинейностей среды и пропорциональна интенсивности $I_{\mathbf{k}_1} = \mathbf{E}(\mathbf{k}_1) \mathbf{E}(\mathbf{k}_1)^+$ неупруго рассеянной волны $\mathbf{E}(\mathbf{k}_1)$. В случае спонтанного неупругого рассеяния, когда число рассеянных в моду квантов много меньше единицы, можно заменить $I_{\mathbf{k}_1}$ на интенсивность вакуумных флуктуаций $2\hbar\omega_{\mathbf{k}_1}\Omega^{-1}[1 + N(\omega - \omega_{\mathbf{k}_1})]$, где $N(\omega) = [\exp(\hbar\omega/kT) - 1]^{-1}$. После усреднения $\Delta\chi_{\text{нп}}$ по конечным состояниям \mathbf{k}_1 этот добавочный член приобретает смысл поправки к обычной линейной поляризуемости за счет влияния неупругих процессов на проходящее поле.

е) Ядерная поляризуемость кристалла

Для ядерной подсистемы связь между полем и поляризацией также устанавливается, согласно (4.10), через тензор поляризуемости $\chi_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega)$. В операторе плотности тока ядерной подсистемы следует сохранить два члена — резонансный (4.8б) и магнитный (4.8г).

Аналогично случаю электронной поляризуемости ядерную поляризуемость можно выразить через индивидуальные свойства ядер, составляющих кристалл:

$$\chi_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{e^2}{M\omega^2} \frac{N}{V} f_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \omega), \quad (4.22)$$

где M — масса протона, а $f_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k}; \omega)$ — тензор ядерного структурного фактора, определяемый выражением (4.11б). Полная ширина линии γ , которая входит в знаменатель выражения (4.11б), складывается из радиационной ширины линии γ_r , которая определяет вероятность распада возбужденного состояния ядра путем испускания гамма-кванта, и конверсионной ширины γ_α , связанной с вероятностью передачи энергии возбуждения атомному электрону. Ядерные мёссбауэровские переходы — это, как правило, переходы чистой мультипольности $M1$, $E2$ или их смесь. Основное $|m\rangle = |m_0 I_0\rangle$ и возбужденное $|n\rangle = |m_1 I_1\rangle$ состояния ядра характеризуются полными моментами I_0 и I_1 и магнитными квантовыми числами m_0 и m_1 .

В отсутствие сверхтонкого расщепления резонансный знаменатель в (4.11б) не зависит от магнитного квантового числа m и поэтому его можно вынести из-под знака суммы, после чего необходимо лишь просуммировать выражение

$$\sum_{m \neq n} \overline{(\hat{B}_i(\mathbf{k}))_{mn}} (\hat{B}_j(-\mathbf{k}'))_{nm}, \quad (4.23)$$

где черта сверху означает усреднение по начальным состояниям. Вычисление суммы (4.23) (см. ⁷⁸) приводит к следующему результату⁷⁷:

$$\left. \begin{aligned} b \left[(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') \delta_{ij} + k'_i k_j - \frac{1}{2} k_i k'_j \right] & \text{ для перехода } E2, \\ b [(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}') \delta_{ij} - k'_i k_j] & \text{ для перехода } M1, \end{aligned} \right\} \quad (4.24)$$

где

$$b = \frac{c^5}{4\omega_0^3} \frac{2I_2 + 1}{2I_1 + 1} \gamma_r \frac{M^2}{\hbar e^2}.$$

Для рассеяния вперед ($\mathbf{k}' = \mathbf{k}$ и $\mathbf{k} = s\mathbf{k}$) из (4.24) получаем соответственно $bk^2 [\delta_{ij} - s_i s_j] + \frac{4}{3} s_i s_j$ и $bk^2 (\delta_{ij} - s_i s_j)$. Член $\delta_{ij} - s_i s_j$ является оператором проектирования на плоскость, перпендикулярную к вектору $\mathbf{s} = \mathbf{k}/k$. Следовательно, можно ввести поперечную поляризуемость $\chi_{\perp} \propto bk^2 (\delta_{ij} - s_i s_j)$. Член $(4/3) bk^2 s_i s_j$ описывает отклик на продольное поле и пропорционален продольной поляризуемости χ_{\parallel} , которая отлична от нуля для перехода $E2$. Таким образом, в отсутствие сверхтонких расщеплений среда обладает пространственной дисперсией, является изотропной и негиротропной. Аналогично, рассмотрение случая $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{H}$ показывает, что это остается верным для перехода $M1$, а для перехода $E2$, поскольку вектор \mathbf{H} выделяет некоторое направление в пространстве, возникает анизотропия.

Если ядро находится во внешнем поле, которое снимает вырождение по величине и знаку магнитного квантового числа, для вычисления (4.116) следует провести мультипольное разложение операторов плотности тока. Это приводит к следующему выражению для ядерной поляризуемости:

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega) &= \frac{e^2 Z^2 N}{V} \frac{2\pi}{k^3} \sum_{L', L, \lambda} \sum_{L, \lambda} C(I_0 L' I; m_0 M m) \times \\ &\quad \times C(I_0 L I; m_0 M m) \hat{Y}_{L'M'}^{(L')}(\mathbf{k}') \hat{Y}_{LM}^{(L)*}(\mathbf{k}) \times \\ &\quad \times \sqrt{\gamma_r(L'L') \gamma_r(L\lambda)} [\omega(j_n, m_0 + M) - \omega(j_0, m_0) - (i\gamma/2)]^{-1}, \quad (4.25) \end{aligned}$$

где $M = m - m_0$, $(L, 1) \equiv E(L)$ — электрический 2^L -поль, $(L, 0) \equiv M(L)$ — магнитный 2^L -поль. $\hat{Y}_{LM}^{(L)}$ — векторные сферические гармоники; остальные обозначения стандартные (см. ⁷⁹). Ядерная поляризуемость, таким образом, является тензором с выраженной пространственной дисперсией и согласно (4.25) выражается через ширины γ_r радиационных ядерных гамма-переходов. Более подробное обсуждение этого вопроса имеется в обзоре Ханнона и Трамеля ¹¹ и в работе Блюма и Кистнера ³². Выражение (4.25) справедливо в предельном случае очень медленной, сравнительно с временем жизни возбужденного состояния, электронной парамагнитной релаксации. Общее выражение для ядерного тока в присутствии зависящего от времени внешнего возмущения приведено в работе ¹⁴.

В работах ^{11, 32, 36, 37, 41, 45}, посвященных оптике мёсбауэровского излучения, вводится показатель преломления среды на частотах ядерных переходов. При этом, следуя Фолди ⁸⁰ и Лэксу ⁵⁷, показатель преломления выражают через когерентную амплитуду вероятности рассеяния излучения вперед, т. е. вводят тензор рассеяния (см. ⁷⁸). Амплитуда рассеяния фотона с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией \mathbf{e} в фотон \mathbf{k}' , \mathbf{e}' дается следующим выражением:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{e}'; \mathbf{k}, \mathbf{e}) = e_i^* N_{ij}^s(\mathbf{k}, \mathbf{k}) e_j, \quad (4.26)$$

где N_{ij}^s — тензор рассеяния s -го ядра. В представлении циркулярной поляризации $\eta(\pm) = \mp (\hat{\mathbf{e}}_0 \pm \hat{\mathbf{e}}_{\phi})/\sqrt{2}$ сферические функции в (4.25) можно выразить через D -матрицы вращения

$$\begin{aligned} \hat{\eta}_{\mu}^* \hat{Y}_{L'M'}^{(L')}(\mathbf{k}') \hat{Y}_{LM}^{(L)*}(\mathbf{k}) \hat{\eta}_{\mu} &= (8\pi)^{-1} (\mu')^{\lambda'+1} (\mu)^{\lambda+1} \times \\ &\quad \times \sqrt{(2L'+1)(2L+1)} D_{\mu'M'}^{(L')}(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{z}}) D_{\mu M}^{(L)*}(\hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{z}}) \quad (\mu, \mu' = \pm 1). \quad (4.27) \end{aligned}$$

В частности, для магнитного дипольного перехода выражения (4.116), (4.25) и (4.27) дают следующий результат ⁸¹:

$$\frac{2k_0}{\gamma_r} f_{m, m'} = \frac{1}{2I_1 + 1} \sum_{m_0} \sum_{\mu} \frac{3}{2} D_{\mu m}^{(1)}(\hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{z}}) D_{\mu m}^{(1)}(\hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{z}}) \frac{C^2(I_1 I'; m_0 \mu)}{\omega - \omega(m_0, m_0 + \mu) + i\gamma/2}$$

Блюм и Кистнер ³² вычислили общее выражение для амплитуды ядерного рассеяния вперед в присутствии магнитного поля. Хаусли, Грант и Гонзер ³³ распространили эти результаты на случай электрического квадрупольного взаимодействия.

Учет влияния фононных колебаний на поляризуемость ядерной подсистемы приводит к несколько иному результату, чем для электронной подсистемы. В случае взаимодействия гамма-квантов с ядрами в кристалле между временами фононных колебаний и временем жизни возбужденного состояния ядра имеет место соотношение ($\gamma \sim 10^7 \text{сек}^{-1}$) $\gamma \ll \omega_i^{\text{max}}$, обратное случаю резонансного взаимодействия с электронной подсистемой (см. раздел г) гл.4). В этом случае необходимо последовательно вычислять каждый член суммы (4.20б). Наибольший вклад дает первый бесфононный член суммы

$$\langle (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{u}_n})_{\{n0\} \{n0\}} (e^{i\mathbf{k}'\mathbf{u}_n})_{\{n0\} \{n0\}} \rangle_T.$$

Результат усреднения этого выражения по начальным состояниям вновь приводит к экспоненте (фактор Лэмба — Мёссбауэра) $\exp [-(W(\mathbf{k}) + W(\mathbf{k}'))]$, температурная зависимость показателя которой в точности совпадает с дебай-валлеровской. Особенность фактора Лэмба — Мёссбауэра состоит в том, что в то время как фактор Дебая — Валлера (4.21) зависит от разности $|\mathbf{k}' - \mathbf{k}| \propto \sin \vartheta/\lambda$, он зависит от волновых векторов \mathbf{k}' и \mathbf{k} порознь ⁸¹.

5. ПРИМЕНЕНИЕ БЛОХОВСКОГО ФОРМАЛИЗМА К ВЫЧИСЛЕНИЮ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ КРИСТАЛЛОВ

а) Блоховское представление волновых функций электронной подсистемы

Последовательный подход к вычислению поляризуемости кристаллов, очевидно, должен опираться на представление о блоховском характере поведения электронов в твердом теле. Основы такого подхода были заложены Адлером ⁸² и Визером ⁸³. Бломеберген с сотр. ⁸⁴ Ченг и Миллер ⁸⁵ и Пайн ⁸⁶ применили этот метод для расчета поляризуемостей следующих порядков. Общий формализм, развитый в работах ⁸²⁻⁸⁶, можно распространить и для вычисления поляризуемости на рентгеновских частотах. Основанием для этого является следующее соображение. Несмотря на то, что деформации внешних электронных оболочек, возникающие при образовании химической связи, малы, они вполне обнаружимы экспериментально, поскольку проявляются благодаря пространственной периодичности кристаллов как самостоятельные эффекты, в частности, в виде новых дифракционных максимумов. Поэтому для строгого описания влияния химической связи на диэлектрическую проницаемость необходимо перейти от приближения сильной связи, которое использовалось в разделах (4.в) и (4.г), к описанию, учитывающему эффекты зонной структуры.

Следуя работе Пайна ⁸⁶, наметим основные моменты вычисления поляризуемости кристалла. Как уже упоминалось в разделе а) гл. 4,

можно ввести одноэлектронный самосогласованный потенциал $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{r}) + \hat{\mathcal{H}}'(\mathbf{r}, t)$, где $\hat{\mathcal{H}}_0 = (\mathbf{p}^2/2m) + V(\mathbf{r})$ — периодический блоховский гамильтониан, а возмущение $\hat{\mathcal{H}}'$ линейно по вектор-потенциалу:

$$\hat{\mathcal{H}}'(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{2mc} [\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \mathbf{p} + \mathbf{p} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]. \quad (5.1)$$

При разложении всех величин в ряд Фурье удобно выделять в явном виде приведенный к первой зоне волновой вектор \mathbf{q} , так что любой волновой вектор \mathbf{k} равен сумме вектора \mathbf{q} и дополняющего его вектора обратной решетки \mathbf{Q} . Тогда любую функцию координат $V(\mathbf{r}, t)$ можно представить в виде разложения

$$V(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}, \omega} V(\mathbf{q}, \mathbf{Q}; \omega) \exp [i(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) \mathbf{r} - i\omega t], \quad (5.2)$$

где

$$V(\mathbf{q}, \mathbf{Q}; \omega) = (2\pi\Omega)^{-1} \int d\mathbf{r} \int dt V(\mathbf{r}, t) \exp [-i(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) \mathbf{r} + i\omega t].$$

Невозмущенному гамильтониану $\hat{\mathcal{H}}_0$ соответствует полный набор ортонормированных собственных функций $\varphi_{\mathbf{k}m}(\mathbf{r}) \equiv |\mathbf{k}, m\rangle$ и собственных значений $\varepsilon_{\mathbf{k}m}^*$, где волновой вектор \mathbf{k} электрона лежит в первой зоне Бриллюэна, m — номер энергетической зоны. Согласно теореме Блоха⁸⁷, волновая функция $\varphi_{\mathbf{k}m}(\mathbf{r})$ имеет следующий вид:

$$\varphi_{\mathbf{k}m}(\mathbf{r}) = \Omega^{-1/2} u_{\mathbf{k}m}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}},$$

где $u_{\mathbf{k}m}(\mathbf{r}) \equiv v^{-1/2} |\mathbf{k}m\rangle$ и Ω — объем нормировки.

Данный подход позволяет включить в рассмотрение частично коллективизированные электроны валентной зоны и полностью коллективизированные электроны зоны проводимости.

Решение уравнения Шрёдингера $\psi(\mathbf{r}, t)$ может быть представлено в виде ряда по невозмущенным волновым функциям, $\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}m} C_{\mathbf{k}m}(t) \varphi_{\mathbf{k}m}(\mathbf{r})$, коэффициенты которого определяют матрицу плотности $\langle \mathbf{k}'m' | \rho | \mathbf{k}m \rangle = \langle C_{\mathbf{k}'m'} C_{\mathbf{k}m}^* \rangle$, где в правой части равенства проведено усреднение по ансамблю. Динамика электронной системы описывается уравнением Лиувилля для матрицы плотности ρ :

$$i\hbar \dot{\rho} = [\hat{\mathcal{H}}, \rho] + \frac{i\hbar}{\tau} (\rho_0 - \rho). \quad (5.3)$$

Матрицу плотности $\rho(\mathbf{r}, t)$ можно представить в виде суммы невозмущенной части ρ_0 и возмущенной части $\rho_1(\mathbf{r}, t)$, линейной по вектор-потенциалу $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Матрица ρ_0 диагональна в представлении Блоха, а ее собственные значения есть функция распределения Ферми — Дирака $n(\varepsilon_{\mathbf{k}m}) = \{\exp [(\varepsilon_{\mathbf{k}m} - \varepsilon_F)/kT] + 1\}^{-1}$.

* Указание индексов при $\varepsilon_{\mathbf{k}m}$ не должно приводить к путанице с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega)$.

б) Плотность тока в представлении блоховских функций

Среднее по ансамблю от оператора плотности тока равно

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}qmn} \left[\frac{e\hbar}{2mi} (\varphi_{\mathbf{k}m}^* (\nabla \varphi_{\mathbf{k}+q, n}) - (\nabla \varphi_{\mathbf{k}m}^*) \varphi_{\mathbf{k}+q, n}) - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \varphi_{\mathbf{k}m}^* \varphi_{\mathbf{k}+q, n} \right] \langle \mathbf{k}+q, n | \rho(\mathbf{r}, t) | \mathbf{k}m \rangle. \quad (5.4)$$

Периодичность функций $u_{\mathbf{k}m}(\mathbf{r})$ и $\nabla u_{\mathbf{k}m}(\mathbf{r})$ позволяет достаточно просто перейти в (5.4) к фурье-компонентам тока:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{q}, \mathbf{Q}; \omega) = \Omega^{-1} \sum_{\mathbf{k}mn} & \left(\left[\frac{e}{m} (\mathbf{k}m | \left\{ \mathbf{p} + \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. + \hbar \left[\mathbf{k} + \frac{1}{2} (\mathbf{q} + \mathbf{Q}) \right] \right\} e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}} | \mathbf{k}+q, n \rangle \langle \mathbf{k}+q, n | \rho_1(\mathbf{r}, \omega) | \mathbf{k}m \rangle \right] - \right. \\ & \left. - \left[\sum_{\mathbf{q}'\mathbf{Q}'\omega'} \frac{e^2}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{q}-\mathbf{q}', \mathbf{Q}-\mathbf{Q}'; \omega') \times \right. \right. \\ & \left. \left. \times (\mathbf{k}m | e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}} | \mathbf{k}+\mathbf{q}', n \rangle \langle \mathbf{k}+\mathbf{q}', n | \rho_0(\mathbf{r}; \omega-\omega') | \mathbf{k}m \rangle \right] \right), \quad (5.5) \end{aligned}$$

где $(\mathbf{k}m | B | \mathbf{k}'m') = v^{-1} \int_0^d d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}m}^*(\mathbf{r}) B(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'m'}(\mathbf{r})$ — приведенный матричный элемент. Выражение для ρ_1 определяется из уравнения (5.3) и имеет следующий вид:

$$\langle \mathbf{k}+q, n | \rho_1(\mathbf{r}, \omega) | \mathbf{k}m \rangle = -\frac{e}{2mc} R(\mathbf{k}+q, n; \mathbf{k}, m; \omega) \langle \mathbf{k}+q, n | \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{p} + \mathbf{p} \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) | \mathbf{k}m \rangle, \quad (5.6)$$

$$R(\mathbf{k}', m'; \mathbf{k}, m; \omega) = \frac{n(\varepsilon_{\mathbf{k}'m'}) - n(\varepsilon_{\mathbf{k}m})}{\varepsilon_{\mathbf{k}'m'} - \varepsilon_{\mathbf{k}m} - \hbar\omega - (i\hbar/\tau)}. \quad (5.6')$$

В рамках схемы приведенных зон связь между поляризацией и полем устанавливается через тензор поляризуемости, явно зависящий от векторов обратной решетки \mathbf{Q} и \mathbf{Q}' :

$$P_i(\mathbf{q}, \mathbf{Q}; \omega) = \sum_{\mathbf{Q}'} \chi_{ij}^{\mathbf{Q}, \mathbf{Q}'}(\mathbf{q}, \omega) E_j(\mathbf{q}, \mathbf{Q}'; \omega), \quad (5.7)$$

где согласно (5.5) и (5.6)

$$\begin{aligned} \chi_{ij}^{\mathbf{Q}, \mathbf{Q}'}(\mathbf{q}, \omega) = & -\frac{e^2}{m\omega^2\Omega} \sum_{\mathbf{k}mn} \left[n(\varepsilon_{\mathbf{k}m}) (\mathbf{k}m | e^{-i(\mathbf{Q}-\mathbf{Q}')\mathbf{r}} | \mathbf{k}n \rangle \delta_{mn} \delta_{ij} + \right. \\ & \left. + m^{-1} R(\mathbf{k}+q, n; \mathbf{k}, m; \omega) (\mathbf{k}m | \left\{ \mathbf{p} + \hbar \left[\mathbf{k} + \frac{1}{2} (\mathbf{q} + \mathbf{Q}) \right] \right\}_i e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{r}} | \mathbf{k}+q, n \rangle \times \right. \\ & \left. \times (\mathbf{k}+q, n | e^{i\mathbf{Q}'\mathbf{r}} \left\{ \mathbf{p} + \hbar \left[\mathbf{k} + \frac{1}{2} (\mathbf{q} + \mathbf{Q}') \right] \right\}_j | \mathbf{k}m \rangle \right]. \quad (5.8) \end{aligned}$$

В отличие от определения тензора поляризуемости $\chi_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega)$ в (2.8), поляризуемость (5.8) так же можно рассматривать, как тензор по индексам \mathbf{Q} и \mathbf{Q}' .

Из сравнения определений (2.8), (2.17) и (5.7) следуют соотношения, связывающие тензоры $\hat{\chi}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega)$ и $\hat{\chi}^{\mathbf{Q}\mathbf{Q}'}(\mathbf{q}, \omega)$:

$$\chi_{ij}^{(\mathbf{H})}(\mathbf{k}, \omega) = \chi_{ij}^{\mathbf{Q}, \mathbf{Q}+\mathbf{H}}(\mathbf{k}-\mathbf{Q}, \omega) \quad (5.9)$$

и обратно,

$$\chi_{ij}^{Q, Q'}(\mathbf{q}, \omega) = \chi_{ij}^{(Q'-Q)}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, \omega),$$

где $\mathbf{k} = \mathbf{q} + \mathbf{Q}$.

Свойства симметрии тензора $\chi_{ij}^{Q, Q'}$, не зависящие от модели среды, вытекают из общих соотношений для тензора $\chi_{ij}^{(H)}$, полученных ранее в разделе 2б). Например, условие эрмитовости тензора $\chi_{ij}^{(Q'-Q)}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}, \omega)$ приводит к соотношению

$$\chi_{ij}^{Q, Q'}(\mathbf{q}, \omega) = [\chi_{ji}^{Q', Q}(\mathbf{q}, \omega)]^*,$$

которое показывает, что тензор $\chi_{ij}^{Q, Q'}$ эрмитов одновременно как по индексам i и j , так и по индексам Q и Q' .

Строгое вычисление поляризуемости (5.8) требует знания для каждой конкретной кристаллической структуры блоховских функций, которые обычно рассчитываются численно с применением различных моделей псевдопотенциалов. Общее выражение (5.8) для электронной поляризуемости включает в себя часто используемые в теории предельные случаи свободных и сильно связанных электронов.

Обстоятельное рассмотрение диэлектрической проницаемости вырожденного газа свободных электронов, свойства которого наиболее интересны в ультрафиолетовом диапазоне частот ($\omega \lesssim \omega_p \lesssim 10^{16}$ гц), имеется в монографии ⁸².

в) Приближение сильной связи

В приближении сильной связи волновую функцию гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}_0$ можно представить в виде суперпозиции собственных волновых функций свободных атомов. Строго говоря, приближение сильной связи в этой формулировке не может привести к точному решению одноэлектронного уравнения Шрёдингера, поскольку волновые функции связанных состояний в атоме не образуют полной системы функций. Это происходит из-за перекрытия электронных орбиталей соседних атомов в решетке. Указанной трудности можно избежать, построив ортогональную систему локализованных функций Ванье ⁸⁸. Рассматриваемое приближение оправдано лишь для электронов, находящихся на достаточно глубоких атомных оболочках, радиус орбиты которых мал по сравнению с межатомным расстоянием. Однако именно эти электроны дают основной вклад в поляризуемость на рентгеновских частотах (см. разделы в), г) гл.4).

Пусть в элементарной ячейке кристалла содержится n_s атомов с координатами \mathbf{r}_s . Тогда блоховская функция

$$\varphi_{qm} = N^{-1/2} \sum_l \sum_s e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_l} \psi_m(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l - \mathbf{r}_s), \quad (5.10)$$

$$\int \psi_m^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l - \mathbf{r}_s) \psi_{m'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{l'} - \mathbf{r}_{s'}) d\mathbf{r} = \delta_{mm'} \delta_{ll'} \delta_{ss'},$$

где φ_m — волновая функция электрона в состоянии m с энергией ε_m , \mathbf{r}_l — радиус-вектор элементарной ячейки. Матричные элементы по атомным функциям ψ_m обозначим следующим образом:

$$[\mathbf{V}(\mathbf{r})]_{mn} = \int_{\Omega} \psi_m^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{V}}(\mathbf{r}) \psi_n(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Используя определение (5.10) и переходя в (5.8) от матричных элементов $(\mathbf{k}m | \mathbf{V} | \mathbf{k}'m')$ к $[\mathbf{V}]_{mm'}$, для поляризуемости с учетом (5.9) получим

следующее соотношение:

$$\chi_{ij}^{(H)}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{Ne^2}{m\omega^2} F_{ij}(\mathbf{H}, \mathbf{k}; \omega), \quad (5.11)$$

где F_{ij} — тензор структурного фактора

$$F_{ij}(\mathbf{H}, \mathbf{k}; \omega) = \sum_s e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}_s} f_{ij}^{(s)}(\mathbf{H}, \mathbf{k}; \omega),$$

$$f_{ij}^{(s)}(\mathbf{H}, \mathbf{k}; \omega) = f_0^{(s)}(\mathbf{H}) \delta_{ij} + \Delta f_{ij}^{(s)}(\mathbf{H}, \mathbf{k}; \omega),$$

$f_{ij}^{(s)}$ — атомный фактор s -го атома, $f_0^{(s)}(\mathbf{H}) = \sum_m n(\epsilon_m) [e^{i\mathbf{H}\mathbf{r}_m}]_{mm}^{(s)}$ — потенциальная часть атомного фактора, $\Delta f_{ij}^{(s)}$ — дисперсионная поправка, которая имеет вид

$$\Delta f_{ij}(\mathbf{H}, \mathbf{k}; \omega) = m^{-1} \sum_{mn} R_{mn} [B_i(-\mathbf{k})]_{mn} [B_j(\mathbf{k} + \mathbf{H})]_{nm}, \quad (5.12)$$

где

$$\mathbf{B}(\mathbf{k}) \equiv e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar\mathbf{k}}{2} \right), \quad R_{mn} \equiv \frac{n(\epsilon_m) - n(\epsilon_n)}{\hbar [\omega_{mn} - \omega - (i/\tau)]}.$$

Появление слагаемого $\hbar\mathbf{k}/2$ в выражении для оператора $\mathbf{B}(\mathbf{k})$ в (5.12) (сравни с (4.116)) связано с представлением блоховской волновой функции (5.10) в виде суперпозиции локализованных атомных волновых функций.

На основе конкретного вида поляризуемости (5.11) легко проверить справедливость общих соотношений симметрии (2.12), (2.13) и (2.14). Согласно (5.11), (5.12) эффекты пространственной дисперсии заключены только в Δf_{ij} .

Величина этого слагаемого значительна лишь для излучения с частотой $\omega \approx \omega_{mn}$. Как следует из (5.12) и выражения для $\mathbf{B}(\mathbf{k})$, параметр пространственной дисперсии равен $\hbar k/p \approx Z/137$, где $p \approx \omega_{mn} m a_0$. В случае легких атомов, следовательно, пространственная дисперсия выражена слабо и ею можно пренебречь. Тогда выражение (5.12) принимает более простой вид

$$\Delta f_{ij}(\omega) = \sum_{m \neq n} n(\epsilon_m) \frac{\omega_{mn}^2 g_{ij}^{mn}}{\omega_{mn}^2 - \omega^2 - (2i\omega/\tau)}$$

и является обобщением приведенных ранее выражений (4.17), (4.19) для дисперсионной поправки.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящем обзоре основное внимание уделено последовательному введению тензора диэлектрической проницаемости в рентгеновском диапазоне частот и описанию его свойств, основанному на использовании наиболее фундаментального свойства кристаллов — пространственной периодичности. Изучение диэлектрических свойств среды в рентгеновском диапазоне позволяет описать ее кристаллическую, электронную структуру и структуру внутренних электрических и магнитных полей, аналогично тому, как исследование распространения и рассеяния света дает информацию об атомно-молекулярном строении вещества.

Обзор современного состояния исследований диэлектрических свойств среды в рентгеновском и гамма-диапазонах показывает, что наряду со значительными экспериментальными и теоретическими достижениями имеются проблемы принципиального характера, которые еще ждут своего решения. Диэлектрический формализм дает универсальное описание

свойств среды при взаимодействии с электромагнитным полем и поэтому прогресс в изучении диэлектрических свойств должен сопровождаться дальнейшим развитием этого аппарата. Отсутствовавшая в течение многих лет потребность в этом отражала лишь соответствие достигнутой стадии развития рентгеновского эксперимента приближению сильной связи *). Поскольку источников излучения с высокими когерентными свойствами не было, а внешние воздействия были недостаточно мощными, казалось, что мы не в состоянии исследовать более тонкие эффекты и направленно влиять на диэлектрические свойства среды в этом диапазоне. В настоящее время есть все основания ожидать значительного прогресса в этой области. Ниже мы остановимся на некоторых наиболее важных направлениях развития эксперимента и теории в области взаимодействия рентгеновского и гамма-излучения со средой.

а) С экспериментальной точки зрения прежде всего необходимы источники рентгеновского и изотопного гамма-излучения, которые имели бы на 2—4 порядка лучшие по сравнению с имеющимися спектральные (частотные и пространственные) характеристики **). В качестве примера того, что может дать повышение когерентных свойств излучения, напомним, что известная дарвиновская кривая отражения от совершенного кристалла, предсказанная за много лет до экспериментального подтверждения динамической теории дифракции, впервые в чистом виде наблюдалась лишь при использовании чрезвычайно монохроматического излучения мёссбауэровского изотопа Co^{57} . По-видимому, наиболее реальный сегодня путь получения излучения с существенно более высокими когерентными свойствами — это использование синхротронного излучения, которое уже сейчас успешно применяется для исследований по физике твердого тела. В настоящее время в ряде стран, в том числе и в Советском Союзе, строятся и вводятся в действие синхротроны с характеристиками, которые удовлетворяют поставленному выше условию. Помимо высокой яркости, синхротронное излучение обладает высокой степенью поляризации, что особенно важно для исследования анизотропии кристаллов, а возможность плавной перестройки частоты в широком интервале делает его незаменимым средством исследования эффектов частотной дисперсии. Свойства и возможности применения синхротронного излучения рентгеновского диапазона анализируются в обзоре Кулипанова и Скринского⁸⁹.

б) В последнее время отчетливо проявляется тенденция к исследованию диэлектрических свойств кристаллов в рентгеновском диапазоне в присутствии активного внешнего воздействия на среду, что, очевидно, является новым этапом в развитии этой области физики. В качестве внешних воздействий могут использоваться постоянные и переменные электромагнитные поля, лазерное облучение, ультразвук, пучки заряженных частиц и т. д.

В ряде недавних публикаций рассмотрено влияние некоторых из упомянутых воздействий на процесс динамической дифракции⁹⁰ и фотоэлектрического поглощения⁹¹. В работе⁹⁰ экспериментально наблюдалось

*) Как уже отмечалось выше, в приближении сильной связи перекрытие внешних электронных оболочек не учитывается и, тем самым, оставляются в стороне эффекты химической связи. Между тем при наличии анизотропных химических связей необходимо использовать общие тензорные выражения для дисперсионной части ТДП (4.116) и (5.8). Целенаправленное экспериментальное исследование влияния анизотропии химических связей на диэлектрические свойства среды, проведенное в работе⁹⁶, показало, что и в рентгеновском диапазоне частот наблюдаются явления анизотропии поглощения и вращения поляризации.

**) Это сразу же возродило бы интерес к таким старым проблемам, как, например «магнитное» рассеяние рентгеновских лучей в магнитоупорядоченных кристаллах

резонансное уменьшение интегральной интенсивности отражения дифрагированного по Лауэ рентгеновского излучения в пластинке кремния, находящейся в поле ультразвуковой волны, которая модулирует электронную плотность кристалла и тем самым влияет на его диэлектрическую проницаемость.

Один из возможных механизмов влияния на диэлектрические свойства среды в рентгеновском диапазоне частот при облучении ее лазерной волной состоит в изменении волновых функций электронов в конечном состоянии. При этом зависимость сечения поглощения от параметров лазерного излучения позволяет получить сведения о структуре частично занятых и полностью свободных электронных состояний среды. Согласно оценкам⁹¹, мнимая часть ДП, ответственная за поглощение, при использовании достижимых в настоящее время мощностей лазеров может возрасти на порядок.

В разделе г) гл. 4 отмечалось, что занятые электронные состояния атомов не дают вклад в дисперсионные члены. Однако при действии достаточно интенсивного внешнего электронного или рентгеновского излучения эти состояния могут освобождаться, что должно приводить к появлению дополнительных резонансных вкладов в ДП. Возможность использования этого эффекта для генерации когерентного рентгеновского излучения при прохождении через кристалл заряженных частиц теоретически обсуждалась в работе⁹².

в) В области развития теории следует указать следующие моменты. Во-первых, необходимо дальнейшее последовательное развитие и использование аппарата теории диэлектрического формализма при рассмотрении всего комплекса задач взаимодействия рентгеновских и гамма-лучей со средой. Из представленного в обзоре материала следует, что современная теория не свободна от приближений, ограничивающих пределы ее применимости. Теория тензора ДП строится в приближении безграничного идеального кристалла, которое для определенного круга задач можно считать довольно хорошим. Однако с принципиальной точки зрения оно неудовлетворительно, поскольку реальные кристаллы ограничены, как правило, содержат значительное число дефектов, имеют мозаичную структуру и лишь весьма приближенно могут рассматриваться как идеальные. Все это свидетельствует о необходимости построения теории тензора ДП реальных кристаллов. Можно наметить следующий путь построения такой теории.

В модели Дарвина реальные кристаллы представляют собой совокупность малых кристаллов, слегка разориентированных и (или) смещенных друг относительно друга. Для ограниченного монокристалла соотношение (2.7а) переходит в аналогичное, где вместо δ -функции, возникающей из предположения о безграничности кристалла, появляется функция

$$\delta_V = (2\pi)^{-3} \int_V \exp [i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{H}(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{r}] d\mathbf{r}. \text{ Зависимость } \mathbf{H} \text{ от } \mathbf{r} \text{ отвечает}$$

учету локального искажения кристаллической решетки.

При интегрировании в пределах объема, где кристалл может считаться достаточно совершенным (объем когерентности), δ_V есть не что иное, как интерференционная функция Лауэ с конечной шириной $\Delta k \propto \propto l^{-1}$, где l — характерный параметр области когерентности. При этом диаграмма направленности δ_V -функции для каждого блока мозаики имеет свое, несколько отличающееся от других, направление. Интегрирование по области сильных искажений (межблочные границы и др.) приводит к условию $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$, которое отвечает бездифракционному распространению излучения вперед. С другой стороны, нерегулярность межблочных границ ведет к частичной или полной потере фазовых соотношений между различ-

ными блоками мозаики. Иными словами, корреляция между токами, индуцированными в разных объемах когерентности среды, нарушается, в результате чего полный ток, а следовательно и ДП, приобретают зависимость от координат с характерным масштабом порядка линейных размеров объема когерентности.

Одним из возможных подходов к рассмотрению диэлектрических свойств кристалла с дефектами является подход, развитый Афанасьевым и Коном⁹³ при построении динамической теории брэгговской дифракции в таких кристаллах. Авторы рассматривали дефекты как особые области, где нарушается регулярная периодичность кристалла, и ввели поляризуемость, зависящую от локальной степени искажения кристаллической решетки.

Итак, аппарат ДП, являющийся общепризнанным и наиболее действенным инструментом исследования в оптическом диапазоне спектра, может быть последовательно развит и в рентгеновской и гамма-оптике с учетом специфики этого диапазона. Основываясь на общих чертах, присущих диэлектрическому подходу в этих областях спектра, можно поставить вопрос о развитии новых направлений исследования в рентгеновском диапазоне, аналогичных направлениям, уже получившим развитие в оптике. Одним из них, в частности, может быть поиск добавочных волн в рентгеновском диапазоне, например, для узких мёссбауэровских или рентгеновских экситонных линий.

Плодотворность такого рода аналогий уже была продемонстрирована при описании процессов неупругого рассеяния рентгеновских лучей в кристаллах⁹⁴. При рассмотрении дифракции видимого света в некоторых типах жидких кристаллов Беляков и Дмитриенко⁹⁵, наоборот, использовали методы динамической теории дифракции рентгеновских лучей, исходя из того, что в указанном случае параметр a/λ также может быть порядка единицы.

Другой фундаментальной экспериментальной и теоретической проблемой, которая стимулируется уже имеющимися экспериментальными исследованиями, является проблема построения рентгеновской ДП неравновесных сред, примером которых могут служить высокотемпературная плазма и плазма твердого тела при высоких уровнях возбуждения, а также активная среда рентгеновского или гамма-лазера.

Развитие когерентной рентгеновской и гамма-оптики, таким образом, в настоящее время зависит от повышения точности эксперимента, увеличения спектральной интенсивности источников излучения и дальнейшего детального развития теории диэлектрических свойств кристаллов (и не только кристаллов) в этом диапазоне длин волн.

В заключение авторы выражают глубокую признательность М. А. Андреевой, С. Ф. Борисовой, Е. Н. Овчинниковой и Ю. П. Хапачеву за многочисленные плодотворные дискуссии по изложенным в обзоре проблемам.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Laue M. v. — *Ergeb. exakt. Naturwiss.*, 1931, Bd. 10, S. 133.
 2. Kohler M. — *Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. K1. Math. und Phys.*, 1935, S. 334.
 3. Molière G. — *Ann. d. Phys.*, 1939, Bd. 35, S. 272, 297; Bd. 36, S. 265.
 4. Bonse U., Hart M. — *Zs. Phys.*, 1966, Bd. 194, S. 1.
Hart M. — *Proc. Roy. Soc. Ser. A*, 1975, v. 346, p. 1.
Bonse U., Graeff W., Materlink G. — *Rev. Phys. Appl.*, 1976, v. 11, p. 83.
- Эйрамджян Ф. О., Труни К. Г., Безиргянц П. А. — Уч. зап. Ерев. ун-та. Естеств. науки, 1974, № 3 (217), с. 49.

5. Ривлин Л. А.—Вопросы радиоэлектрон. Сер. 1, 1962, вып. 6, с. 60.
Kolpakov A. V., Kuz'min R. N., Ryabov V. M.—*J. Appl. Phys.*, 1970, v. 41, p. 3549.
Fisher R. A.—*Appl. Phys. Lett.*, 1974, v. 24, p. 598.
Yariv A.—*Ibid.*, v. 25, p. 105.
Ляхов Г. А.—*Квант. электрон.*, 1976, т. 3, с. 838.
6. Колпаков А. В., Галямов Б. Ш., Кузьмин Р. Н.—*Вестн. Моск. ун-та. Сер. физ.-астрон.*, 1973, № 3, с. 369.
Инденбом В. Л. *Кристаллография*, 1976, т. 21, вып. 3, с. 479.
7. Молчанов А. Г.—*УФН*, 1972, т. 106, с. 165.
Бушуев В. А., Кузьмин Р. Н.—*Ibid.*, 1974, т. 114, с. 677.
Baldwin G. C., Khokhlov R. V., *Phys. Today*, Feb. 1975, p. 32.
Бушуев В. А., Кузьмин Р. Н.—Проблемы создания лазеров рентгеновского диапазона длин волн.—М.: Знание, 1976.
8. Freund I., Levin B. F.—*Phys. Rev. Lett.*, 1969, v. 23, p. 854; 1970, v. 25, p. 1241.
Eisenberger P., McCall S. L.—*Ibid.*, 1971, v. 26, p. 684.
Jha S. S., Woo J. W. F.—*Nuovo Cimento. Ser. B*, 1972, v. 10, p. 229.
Краснов И. В., Шапарев Н. Я.—*Квант. электрон.*, 1975, т. 2, с. 2604.
9. Шпинель В. С. *Резонанс гамма-лучей в кристаллах*.—М.: Наука, 1969.
10. Hannon J. P., Trammell G. T.—*Phys. Rev.*, 1968, v. 169, p. 315.
11. Hannon J. P., Trammell G. T.—*Ibid.*, 1969, v. 186, p. 306.
12. Hannon J. P., Carron N. J., Trammell G. T.—*Ibid. Ser. B*, 1974, v. 9, p. 2791, 2810.
13. Беляков В. А.—*УФН*, 1975, т. 115, с. 553.
14. Барышевский В. Г. *Ядерная оптика поляризованных сред*.—Минск: Изд-во Белорус. ун-та, 1976.
15. Rosenbaum G., Holmes H. C., Witz J.—*Nature*, 1971, v. 230, No. 5294, p. 434.
Hart M.—*J. Appl. Cryst.*, 1975, v. 8, p. 436.
Bordas J., Galazer A. M., Hauser H.—*Phil. Mag.*, 1975, v. 32, p. 471.
16. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.—*Электродинамика сплошных сред*.—М.: Гостехиздат, 1957.
17. Агранович В. М., Гинзбург В. Л. *Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов*.—М.: Наука, 1965.
18. Джеймс Р. *Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей*.—М.: ИЛ, 1950.
19. Иверонова В. И., Ревкевич Г. П. *Теория рассеяния рентгеновских лучей*.—М.: Изд-во Моск. ун-та, 1972.
20. Пинскер Э. Г. *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах*.—М.: Наука, 1974.
21. Левин М. Л., Рытов С. М. *Теория равновесных тепловых флуктуаций в электродинамике*.—М.: Наука, 1967.
22. Копчик В. А., Коцев И. Н. *Сообщения ОИЯИ*.—Дубна, 1974.—Р 4-8067, Р 4-8068.
Kortsik V. A.—*Kristall und Technik*, 1975, Bd. 10, S. 231.
23. Колпаков А. В., Овчинникова Е. Н., Кузьмин Р. Н.—*Кристаллография*, 1975, т. 20, с. 223; 1977, т. 22, с. 901.
24. Бюргер М. *Структура кристаллов и векторное пространство*.—М.: ИЛ, 1961.
25. Нуссенвейг Х. М. *Причинность и дисперсионные соотношения*.—М.: Мир, 1976.
26. Ньютон Р. *Теория рассеяния волн и частиц*.—М.: Мир, 1969.
27. Колпаков А. В.—*ЯФ*, 1972, т. 16, с. 1003.
28. Комптон А., Алисон С. *Рентгеновские лучи*/Пер. под ред. Д. Д. Гогоберидзе.—М.—Л., Гостехиздат, 1941.
29. Блохин М. А. *Физика рентгеновских лучей*.—М.: Гостехиздат, 1957.
30. Mahan G. D.—*Phys. Rev.*, 1967, v. 163, p. 612.
Nozieres P., De Dominicis C. T.—*Ibid.*, 1969, v. 178, p. 1097.
Ausman G. A., Jr., Glick A. J.—*Ibid.*, 1969, v. 183, p. 687.
Peterson H.—*Phys. Rev. Lett.*, 1975, v. 35, p. 1363.
Майсте А. А., Саар А. М. Э., Эланго М. А.—*ФТТ*, 1974, т. 16, с. 1720.
Караханян К. И., Казарян Э. М., Безирганян П. А.—*ФТТ*, 1976, т. 18, с. 511.
31. Frauenfelder H., Nagle D. E., Taylor R. D., Cochran D. R. F., Visscher W. M.—*Phys. Rev.*, 1962, v. 126, p. 1065.
32. Blume M., Kistner O. C.—*Ibid.*, 1968, v. 171, p. 417.
33. Housley R. M., Grant R. W., Gonser U.—*Ibid.*, 1969, v. 178, p. 514.
34. Изюмов Ю. А., Озеров Р. П. *Магнитная нейтронография*.—М.: Наука, 1966.

35. Imbert P.—Phys. Lett., 1964, v. 8, p. 95; J. de Phys., 1966, t. 27, p. 429.
36. Housley P. M., Gonser U.—Phys. Rev., 1968, v. 171, p. 480.
37. Grant R. W., Housley P. M., Gonser U.—Ibid., 1969, v. 178, p. 523.
38. Gibb T. C., J. Phys. Ser. C, 1974, v. 7, p. 1001.
39. Гольданский В. И., Макаров Е. Ф., Суздаев И. П., Виноградов И. А.—ЖЭТФ, 1970, т. 58, с. 760.
40. Лабушкин В. Г., Иванов С. Н., Чечин Г. В.—Письма ЖЭТФ, 1974, т. 20, с. 349.
41. Айвазян Ю. М., Беляков В. А.—ФТТ, 1971, т. 13, с. 968.
42. Айвазян Ю. М.—Изв. АН Арм. ССР. Сер. «Физика», 1974, т. 9, с. 374.
43. Chrisman B. L.—Nucl. Phys. Ser. A, 1972, v. 186, p. 264.
44. Mitin A. V.—Phys. Stat. Sol. Ser. b, 1972, Bd. 53, S. 93.
Hartman-Boutron F.—J. Phys., 1976, t. 37, p. 537, 549.
Varb D., Rogalski M.—Ibid., 1976, t. 37, p. 47.
45. Bernstein S., Campbell E. C.—Phys. Rev., 1963, v. 132, p. 1625.
Bernstein S., Campbell E. C., Nestor C. W. Jr.—J. Phys. and Chem. Sol., 1965, v. 26, p. 883.
46. Афанасьев А. М., Каган Ю.—Письма ЖЭТФ, 1965, т. 2, с. 130.
Каган Ю., Афанасьев А. М. ЖЭТФ, 1966, т. 50, с. 271.
Афанасьев А. М., Каган Ю.—Ibid., 1967, т. 52, с. 191.
47. Фам Зуи Хиен.—Ibid., 1970, т. 59, с. 201; 1971, т. 61, с. 359.
48. Агранович В. М.—УФН, 1974, т. 112, с. 143.
49. Борн М., Вольф Э. Основы оптики.—М.: Наука, 1970.
50. Ewald P. P.—Ann. d. Phys., 1916, Bd. 49, S. 1.
51. Von Laue M.—Röntgenstrahlinterferenzen.—Frankfurt/M.: 1960.
52. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах.—М.: Мир, 1965.
53. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика.—М.: Физматгиз, 1963.
54. Гайтлер В. Квантовая теория излучения.—М.: ИЛ, 1956.
55. Afanas'ev A. M., Kagan Yu., Acta Cryst., Ser. A, 1967, v. 24, p. 163.
56. Keating D. T.—Phys. Rev., 1969, v. 178, p. 732.
Jha S. S., Woo J. W. F.—Nuovo Cimento. Ser. B, 1972, v. 10, p. 229.
57. Lax M.—Rev. Mod. Phys., 1951, v. 23, p. 287.
58. Renninger M.—Zs. techn. Phys., 1935, Bd. 16, S. 440.
59. Конобеевский С. Т.—УФН, 1951, т. 44, с. 21.
Dowson B., Sanger P.—Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1967, v. 301, p. 195.
Stukel D. J., Euwema R. N.—Phys. Rev. Ser. B, 1970, v. 1, p. 1635.
Vertoni C. M., Bortolani V., Calandra C., Nizzoli F.—J. Phys. Ser. C, 1973, v. 6, p. 3612.
Розенберг Ю. А., Клецинский Л. И.—ФТТ, 1976, т. 18, с. 2687.
60. Bueckingham A. D.—Acta Cryst., 1964, v. 17, p. 960.
61. Saravia L. R., Caticha-Ellis S.—Ibid., 1966, v. 20, p. 927.
Cromer D. T.—Ibid., 1965, v. 18, p. 17.
Cromer D. T., Liberman D.—J. Chem. Phys., 1970, v. 53, p. 1891.
62. Wagenfeld H.—In: Anomalous Scattering: Proceedings of an Inter-Congress Conference. Spain, Madrid, 22–26 April 1974.—Copenhagen: 1975.
63. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. Т. 2.—М.: Гостехиздат, 1956.
64. De Kroonig R. L.—J. Opt. Soc. Am., 1926, v. 12, p. 547.
65. Prins J. A.—Zs. Phys., 1928, Bd. 47, S. 479.
Williams E. J.—Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1934, v. 143, p. 358.
66. Kallmann H., Mark H.—Naturwissenschaften, 1926, Bd. 14, S. 648; Ann. d. Phys., 1927, Bd. 82, S. 585.
67. Sugiyra Y.—J. Phys. et Radium, 1927, t. 8, p. 113.
Hönl H.—Zs. Phys., 1933, Bd. 84, S. 1.
68. Wagenfeld H.—Phys. Rev., 1966, v. 144, p. 216.
69. Марадудин А., Монтролл Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении.—М.: Мир, 1965.
70. Борн М., Хуан Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток.—М.: ИЛ, 1958.
71. Агранович В. М., Конобеев Ю. В.—ФТТ, 1961, т. 3, с. 360.
72. Eftimov O. N.—Phys. Stat. Sol., 1967, Bd. 22, S. 297.
73. Baldwin T. O., Young F., Merlini A.—Phys. Rev. Ser. A, 1967, v. 163, p. 591.
74. Sano H., Ohtaka K., Ohtsuki Y.-H.—J. Phys. Soc. Japan, 1969, v. 27, p. 1254.
75. Кон В. Г.—Кристаллография, 1970, т. 15, с. 20.
76. Бушуев В. А., Кузьмин Р. Н.—ЖЭТФ, 1974, т. 44, с. 194.
77. Каган Ю., Афанасьев А. М.—ЖЭТФ, 1965, т. 49, с. 1504.

78. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Релятивистская квантовая теория. Ч. 1. М.: Наука, 1968.
79. Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика.— М.: Наука, 1969.
80. Foldy L. L.— Phys. Rev., 1945, v. 67, p. 107.
81. Trammell G. T.— Ibid., 1962, v. 126, p. 1045.
82. Adler S. L.— Ibid., p. 413.
83. Wiser N.— Ibid., 1963, v. 129, p. 62.
84. Armstrong J. A., Bloembergen N., Ducuing J., Pershan P. S.— Ibid., 1962, v. 127, p. 1918.
85. Cheng H., Miller P. B.— Ibid., 1964, v. 134, p. A683.
86. Pine A. S.— Ibid., 1965, v. 139, p. A 901.
87. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел.— М.: Наука, 1967.
88. Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры.— М.: Мир, 1969.
89. Кулипанов Г. Н., Скринский А. Н.— УФН, 1977, т. 122, с. 369.
90. Эптин И. Р.— Письма ЖЭТФ, 1977, т. 26, с. 392.
91. Tzoar N., Jain M.— Optics Comm., 1976, v. 19, p. 417.
Jain M., Tzoar N.— Phys. Rev. Ser. A, 1977, v. 15, p. 147.
92. Ахманов С. А., Гришанин Б. А.— Письма ЖЭТФ, 1976, т. 23, с. 562.
93. Afanas'ev A. M., Kohn V. G.— Acta Cryst. Ser. A, 1971, v. 27, p. 421.
94. Бушуев В. А., Кузьмин Р. Н.— УФН, 1977, т. 122, с. 81.
95. Беляков В. А., Дмитриенко В. Е.— ФТТ, 1976, т. 18, с. 2880.
96. Cohen G. G., Kuriyama M.— Phys. Rev. Lett., 1978, v. 40, p. 957.