

## НОВЫЕ ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

548.734

## ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В РЕНТГЕНОВСКОЙ ОПТИКЕ

**В. А. Беляков, В. Е. Дмитриенко**(Всесоюзный научно-исследовательский центр  
по изучению свойств поверхности и вакуума, ВНИИЦПВ)

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение . . . . .	679
1. Поляризационные явления при дифракции . . . . .	680
1.1. Дифракция в совершенных кристаллах (кинематическая и динамическая теории). 1.2. Тензор поляризации и интегральные поляризационные характеристики. 1.3. Дифракционное двупреломление и дихроизм. 1.4. Дифракция в несовершенных кристаллах.	
2. Анизотропия рентгеновской восприимчивости . . . . .	696
2.1. Двупреломление и дихроизм вблизи краев поглощения. 2.2. Симметричные ограничения на тензор рентгеновской восприимчивости кристаллов. 2.3. Запрещенные рефлексы. 2.4. Магнитное рассеяние.	
3. Поляризационные эффекты в рентгенооптических элементах . . . . .	710
3.1. Поляризация излучения рентгеновских источников. 3.2. Получение и анализ линейных поляризаций. 3.3. Рентгеновская пластинка $\lambda/4$ . 3.4. Маятниковые биения.	
Заключение . . . . .	717
Список литературы . . . . .	718

**Введение.** Оптика рентгеновских лучей в последние годы переживает подлинный ренессанс, обусловленный совершенствованием аппаратуры и методики измерений, в частности, не в последнюю очередь связанный с возможностями и перспективами использования синхротронных источников излучения. Одно из интересных направлений развития рентгеновской оптики—это изучение поляризационных явлений. Еще в 1906 г. поляризация рентгеновских лучей при рассеянии на  $90^\circ$  была использована для доказательства их электромагнитной природы [1]. В рентгеновской оптике наблюдались такие классические явления, как двупреломление, дихроизм и вращение плоскости поляризации [2–6], обсуждаются различные возможности создания пластины  $\lambda/4$ , преобразующей линейную поляризацию в круговую и обратно [3, 7–9].

Важно подчеркнуть, что в отличие от обычной оптики видимого света, в которой длина волны излучения гораздо больше межатомных расстояний, в оптике рентгеновских лучей существенное влияние на оптические характеристики кристалла оказывает дифракция. Так, дифракционный вклад в дихроизм, двупреломление и преобразование поляризации иногда может быть определяющим. В частности, интересно отметить, что дифракционное двупреломление, являясь фактически эффектом пространственной дисперсии, наблюдается не только в кристаллах низкой симметрии, но и в кубических кристаллах. Дифракционные поляризационные явления уже сейчас используются для изучения ха-

рактера несовершенства кристаллов [10–14], причем для полного описания этих явлений необходимы уравнения переноса для тензоров поляризаций рентгеновских пучков [15], аналогичные тем, которые применяются в теории переноса излучения в случайных средах [16–19].

Следует отметить, что поляризационные явления, вызываемые анизотропией рентгеновской восприимчивости кристаллов, довольно слабы и наблюдаются в основном вблизи краев поглощения, т. е. там, где существенны эффекты химической связи электронов в атомах. В самое последнее время было показано, что анизотропия рентгеновской восприимчивости приводит к качественно новому эффекту: возникновению дополнительных дифракционных рефлексов с необычными поляризационными свойствами, которые содержат информацию о структуре кристаллов и химических связях атомов в кристаллах [20–23] \*). Особенно интересным и перспективным представляется изучение магнитного рассеяния рентгеновских лучей [24–28], которое обусловлено слабой зависимостью рентгеновской амплитуды рассеяния от магнитного момента атома и также обладает нетривиальными и информативными поляризационными характеристиками. В связи с совершенствованием методов рентгено-дифракционных исследований и расширяющимся применением новых интенсивных источников рентгеновского излучения ожидается [26, 27], что в будущем магнитное рассеяние станет рабочим методом прямого определения магнитной структуры кристаллов, в частности, их поверхностных слоев, и сможет конкурировать с магнитной нейтронографией.

Настоящий обзор состоит из двух разделов, посвященных рассмотрению различных механизмов поляризационных эффектов, и раздела, посвященного приложениям, хотя многие приложения обсуждаются и в первых двух разделах. В нем обобщен и проанализирован большой фактический материал, разбросанный в настоящее время по многочисленным публикациям, причем основное внимание уделено тем возможностям, которые дают рентгеновские поляризационные методы для исследования структуры и свойств твердых тел. В ближайшие годы эта область несомненно получит дальнейшее развитие, особенно в связи с вводом в действие ряда специализированных источников СИ, в том числе и в нашей стране. Поляризационные измерения актуальны также для рентгеновской астрономии, однако обсуждение соответствующих вопросов выходит за рамки настоящей статьи.

**1. Поляризационные явления при дифракции.** Дифракция рентгеновского излучения на кристаллах является одним из основных методов изучения кристаллической структуры вещества и широко используется для создания рентгенооптических элементов. Так, дифракционные монохроматоры и спектрометры применяются для получения, преобразования и анализа рентгеновских пучков. В настоящем разделе будет подробно рассмотрено изменение поляризации первичного и дифрагированного пучков в процессе дифракции. Основное внимание уделено вопросам, активно развиваемым в последнее время, таким как дифракционное двупреломление и дихроизм, деполяризация дифрагирующих пучков в совершенных и несовершенных кристаллах. Подчеркнем, что в этом разделе, в отличие от раздела 2, будет традиционно предполагаться, что рентгеновская восприимчивость изотропна, с целью выделения поляризационных явлений чисто дифракционной природы.

**1.1. Дифракция в совершенных кристаллах (кинематическая и динамическая теории).** Дифракции рентге-

---

\*) Аналогичные рефлексы возможны также в квазикристаллах.

новских лучей в совершенных кристаллах посвящено огромное число работ (см., например, [29–32]), поэтому здесь мы только кратко опишем основные результаты, обращая внимание на поляризационные характеристики дифракции. Поле излучения внутри кристалла и вне его находится из решения уравнений Максвелла с соответствующими граничными условиями. Диэлектрическая проницаемость кристалла описывается трехмерно-периодическим тензором  $\hat{\epsilon}(\mathbf{r})$ :

$$\hat{\epsilon}(\mathbf{r}) = 1 + \hat{\chi}(\mathbf{r}) = 1 + \sum_{\mathbf{H}} \hat{\chi}_{\mathbf{H}} \exp(i\mathbf{H}\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

где  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  — диэлектрическая восприимчивость кристалла в рентгеновской области частот  $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$  — фурье-гармоники рентгеновской восприимчивости,  $\mathbf{H}$  — вектор обратной решетки кристалла. Если восприимчивость изотропна, то все  $\hat{\chi}_{\mathbf{H}}$  пропорциональны единичному тензору:  $(\hat{\chi}_{\mathbf{H}})_{ik} \equiv \chi_{\mathbf{H}} \delta_{ik}$ , где

$$\chi_{\mathbf{H}} = - \frac{r_e \lambda^2}{\pi V} F_{\mathbf{H}}. \quad (1.2)$$

В (1.2)  $r_e = e^2/mc^2$  — классический радиус электрона,  $\lambda$  — длина волны излучения,  $V$  — объем элементарной ячейки,  $F_{\mathbf{H}}$  — структурная амплитуда рефлекса  $\mathbf{H}$  [29–32] (для  $\lambda \sim 1$  Å величина  $|\chi_{\mathbf{H}}| \lesssim 10^{-5}$ ).

Найти решение уравнений Максвелла с диэлектрической проницаемостью (1.1) можно, только используя те или иные приближения. Ниже будем почти везде (за исключением раздела 1.3) использовать двухволновое приближение. В этом приближении предполагается, что заметную интенсивность имеют только две волны, прямая и одна дифрагированная (т. е. условие Брэгга выполняется только для одного вектора обратной решетки  $\mathbf{H}$ ). В общем случае может быть несколько дифрагированных волн, но такая, так называемая многоволновая, дифракция требует выполнения специальных условий на направление распространения первичной волны. Характерной особенностью двухволнового приближения является независимое дифракционное рассеяние излучения с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризациями ( $\sigma$ -( $\pi$ -)поляризацией называется линейная поляризация, для которой вектор электрического поля волны ортогонален (параллелен) плоскости рассеяния, образованной волновыми векторами  $\mathbf{x}_0$  и  $\mathbf{x}_{\mathbf{H}} = \mathbf{x}_0 + \mathbf{H}$  прямой и дифрагированной волн соответственно).

Для вычисления амплитуд полей в кристалле в рамках двухволнового приближения могут быть использованы кинематическая или динамическая теории дифракции. В кинематической теории кристалл предполагается настолько тонким, что можно учитывать только однократное дифракционное рассеяние (борновское приближение), тогда как в динамической теории учитывается многократное рассеяние из падающей волны в дифрагированную и обратно, особенно существенное в толстых кристаллах. Характерным параметром, разделяющим совершенные кристаллы на толстые и тонкие, является длина первичной экстинкции  $L_e^I$ :

$$L_e^I = \frac{\lambda}{|\chi_{\mathbf{H}}|}.$$

Кинематическая теория применима, если расстояния, проходимые в кристалле и падающей, и дифрагированной волнами, много меньше  $L_e^I$  (для  $\lambda \sim 1$  Å  $L_e^I \gtrsim 10$  мкм).

Поляризационные свойства дифракции оказываются особенно простыми в кинематической теории, в которой амплитуды рассеяния волн

с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризацией отличаются на поляризационный множитель  $\cos 2\Theta$  ( $2\Theta$  — угол рассеяния между  $\mathbf{x}_0$  и  $\mathbf{x}_H$ ):

$$\begin{aligned} E_{\sigma}^d &= AF_H E_{\sigma}^i, \\ E_{\pi}^d &= AF_H E_{\pi}^i \cos 2\Theta, \end{aligned} \quad (1.3)$$

где  $E_{\sigma,\pi}^i$  и  $E_{\sigma,\pi}^d$  — компоненты падающей и дифрагированной волн соответственно; множитель  $A$  зависит от геометрии дифракции, от  $\lambda$  и от отклонения  $\Delta\Theta = \Theta - \Theta_B$  угла падения  $\Theta$  от брэгговского угла  $\Theta_B$ . Существенно, что множитель  $A$  не сказывается на поляризационных свойствах кинематической дифракции, а его конкретный вид для кристалла в виде плоскопараллельной пластинки может быть получен из приведенных ниже формул динамической теории предельным переходом к малой толщине [29]. Так как угол  $\Theta$  меняется в области дифракции на очень малую величину ( $\Delta\Theta \ll 10^{-4}$ ), поляризационный множитель в (1.3) можно заменить на  $\cos 2\Theta_B$ . Выражения (1.3) удобно использовать в векторном виде  $\mathbf{E}^d = \hat{R}_k \mathbf{E}^i$ , где матрица рассеяния  $\hat{R}_k$  имеет вид

$$\hat{R}_k = AF_H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos 2\Theta_B \end{pmatrix} = AF_H \hat{K}. \quad (1.4)$$

Особенностью кинематического случая является то, что поляризация дифрагированной волны, определяемая отношением  $E_{\pi}^d/E_{\sigma}^d$ , одинакова во всей области дифракции. В частности,  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованные падающие пучки дают при дифракции также  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованные дифрагировавшие пучки: произвольно линейно поляризованные падающие пучки дают линейно поляризованные дифрагированные пучки; знак эллиптической поляризации пучка изменяется при дифракции, если  $\cos 2\Theta_B < 0$ , и не изменяется, если  $\cos 2\Theta_B > 0$ ; при рассеянии на  $90^\circ$  дифрагированная волна имеет  $\sigma$ -поляризацию.

В динамической теории поляризационные свойства оказываются намного сложнее, чем в кинематической. Физически это связано с тем, что ширина области дифракции оказывается различной для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций, и, кроме того, относительная фаза  $\sigma$ - и  $\pi$ -компонент дифрагирующих пучков изменяется в области дифракции. Как известно [29–32], в совершенном кристалле возбуждаются четыре блоховские волны (по две для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризации), каждая со своим волновым вектором. Характерная разность этих волновых векторов порядка  $1/L_e^1$ , и интерференция блоховских волн приводит к нетривиальным поляризационным свойствам. Решение динамической дифракционной задачи для плоскопараллельной пластины приводит к следующим выражениям для амплитуд дифрагированной и прошедшей сквозь кристалл волн:

$$E_{\sigma}^d = R_{\sigma\sigma} E_{\sigma}^i, \quad E_{\pi}^d = R_{\pi\pi} E_{\pi}^i, \quad (1.5)$$

$$E_{\sigma}^t = T_{\sigma\sigma} E_{\sigma}^i, \quad E_{\pi}^t = T_{\pi\pi} E_{\pi}^i. \quad (1.6)$$

В (1.5) и (1.6) коэффициенты  $R_{\gamma\gamma}$  и  $T_{\gamma\gamma}$  ( $\gamma = \sigma, \pi$ ) даются выражениями:

а) случай Брэгга (проходящая и дифрагированная волны выходят через различные поверхности пластины):

$$R_{\gamma\gamma} = \chi_H C_{\gamma} (\alpha + i\Delta_{\gamma} \operatorname{ctg} l_{\gamma})^{-1}, \quad (1.7)$$

$$T_{\gamma\gamma} = (\cos l_{\gamma} - i\alpha\Delta_{\gamma}^{-1} \sin l_{\gamma})^{-1} \exp [i\mathbf{x}_0^2 L (\chi_0 - \alpha b) (2\mathbf{x}_0 \mathbf{s})^{-1}];$$

б) случай Лауэ (проходящая и дифрагированная волны выходят через одну и ту же поверхность пластины):

$$R_{\gamma\gamma} = \chi_{\text{H}} C_{\gamma} \Delta_{\gamma}^{-1} \sin l_{\gamma} \exp [i \kappa_0^2 L (\chi_0 - \alpha b) (2 \kappa_0 s)^{-1}], \quad (1.8)$$

$$T_{\gamma\gamma} = (\cos l_{\gamma} + i \alpha \Delta_{\gamma}^{-1} \sin l_{\gamma}) \exp [i \kappa_0^2 L (\chi_0 - \alpha b) (2 \kappa_0 s)^{-1}],$$

где

$$\alpha = \frac{\text{H}^2 + 2 \kappa_0 \text{H}}{2 \kappa_0^2} + \frac{\chi_0 (1 - b)}{2b},$$

$$\Delta_{\gamma} = \left( \alpha^2 + \frac{C_{\gamma}^2 \kappa_{\text{H}} \chi_{\text{H}}}{b} \right)^{1/2},$$

$$l_{\gamma} = \frac{\Delta_{\gamma} \kappa_0^2 L}{2 \kappa_{\text{H}} s}, \quad b = \frac{\kappa_0 s}{\kappa_{\text{H}} s},$$

$C_0 = 1$ ,  $C_{\pi} = \cos 2\Theta_{\text{B}}$ ,  $s$  — внутренняя нормаль к входной поверхности образца. Параметр  $\alpha$  выражается через отклонение угла падения от брэгговского угла:

$$\alpha = (\Theta_{\text{B}} - \Theta) \sin 2\Theta_{\text{B}} + \frac{\chi_0 (1 - b)}{2b}. \quad (1.9)$$

Формулы (1.5) — (1.9) позволяют полностью проанализировать поляризационные явления в совершенных кристаллах. Из них, в частности, следует, что амплитуда и относительная фаза дифрагированных волн с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризацией изменяется внутри области дифракции (рис. 1, а, 2, а). Обычно коэффициент отражения  $|R_{\gamma\gamma}|^2$  для  $\sigma$ -поляризации больше, чем для  $\pi$ , но возможна и обратная ситуация из-за маятниковых биений, возникающих вследствие интерференции двух блоховских волн каждой из поляризаций.

В области дифракции изменяется также амплитуда и фаза прошедших сквозь кристалл волн (см. рис. 1, б, 2, б), что можно описывать как появление некоторого эффективного дифракционного двупреломления и дихроизма (см. раздел 1.3) \*). Подчеркнем, что рассматриваемый дихроизм связан не только с различием в поглощении излучения различных поляризаций (как в обычной оптике), а, в первую очередь, с различием в интенсивности дифракции  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных волн. Что же касается истинного поглощения, то оно может быть существенно для дихроизма в условиях эффекта аномального поглощения (эффект Бормана), который даже используется для получения поляризованных пучков (см. раздел 3.2).

**1.2. Тензор поляризации и интегральные поляризационные характеристики.** На практике часто возникает необходимость описания частично поляризованных пучков. Рентгеновские источники обычно дают либо частично поляризованное, либо полностью неполяризованное излучение; деполаризация возникает также, как видно ниже, при усреднении поляризационных характеристик по области дифракции и при дифракции на несовершенных кристаллах. Полное описание поляризационных свойств и интенсивности таких пучков осуществля-

\*) Отметим, что в случае Лауэ при стремлении  $\Delta\Theta$  к  $\pm\infty$  как разность фаз, так и сами фазы проходящих сквозь кристалл волн могут иметь различные пределы  $\varphi_{\pm\infty}$  и  $\varphi \rightarrow \infty$ , отличающиеся на  $360^\circ \cdot N$ , где  $N$  — целое число (см. рис. 2, б). Число  $N$  — своеобразный топологический инвариант; оно зависит от толщины кристалла и изменяется на единицу при тех толщинах, при которых либо  $T_{\sigma\sigma}$ , либо  $T_{\pi\pi}$  обращается в нуль в некоторой точке внутри области дифракции; если толщина кристалла много меньше длины первичной экстинкции, то  $N = 0$ .

ется с помощью тензора поляризации  $\hat{J}$  [15—19]:

$$J_{\beta\gamma} = \overline{E_\beta E_\gamma^*}, \quad (1.10)$$

где черта означает усреднение (по времени — на классическом языке [17] или по ансамблю фотонов — на квантовом [33]). В пучке с тензором поляризации  $\hat{J}$  интенсивность компоненты с произвольной поляризацией, характеризующейся единичным вектором  $\mathbf{e}$ , дается выражением  $(\mathbf{e} \cdot \hat{J} \mathbf{e})$ . В качестве базиса ниже будут всегда использоваться орты  $\sigma$ - и

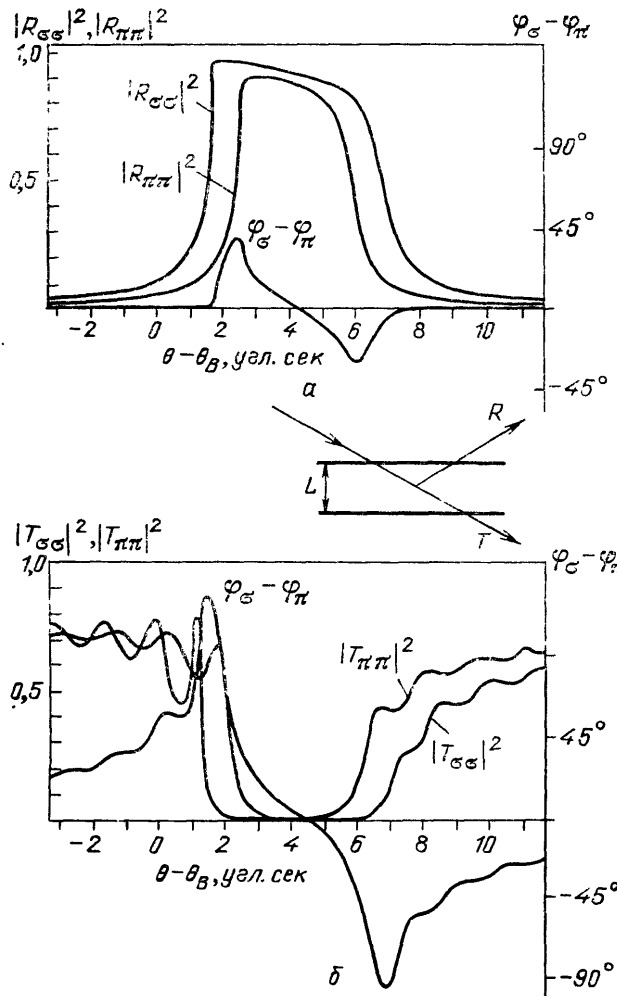


Рис. 1. *a* — Коэффициенты отражения  $|R_{\sigma\sigma}|^2$ ,  $|R_{\pi\pi}|^2$  и разность  $\varphi_\sigma - \varphi_\pi$  дифракционных добавок к фазам дифрагированных волн с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризациями в симметричном случае Брэгга; рефлекс 220 в Si, полубесконечный кристалл,  $\text{CuK}\alpha$ -излучение. *б* — Коэффициенты прохождения  $|T_{\sigma\sigma}|^2$ ,  $|T_{\pi\pi}|^2$  и разность  $\varphi_\sigma - \varphi_\pi$  дифракционных добавок к фазам прошедших волн с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризациями в симметричном случае Брэгга; рефлекс 220 в Si,  $L=10$  мкм,  $\text{CuK}\alpha$ -излучение; штриховая линия соответствует коэффициенту прохождения в отсутствие дифракции. На вставке показана геометрия дифракции

$\pi$ -поляризаций. Физический смысл элементов тензора  $\hat{J}$  в этом базисе следующий:  $J_{\sigma\sigma}$  и  $J_{\pi\pi}$  — интенсивности компонент с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризацией соответственно;  $2 \operatorname{Re} J_{\sigma\pi}$  — разность интенсивностей компонент, линейно поляризованных под  $\pm 45^\circ$  к  $\sigma$ ;  $2 \operatorname{Im} J_{\sigma\pi}$  — разность интенсивностей компонент с правой и левой круговыми поляризациями (всего четыре независимых элемента). Тензор поляризации удобен тем, что при сложении некогерентных пучков их тензоры поляризации суммируются. Выражения, связывающие интенсивность и поляризационные характеристики пучка с компонентами тензорами поляризации, приведены в табл. I. Отметим, что для описания частично поляризованных пучков широко используют также параметры Стокса [16—18] и поляризационную матрицу плотности [33] (все эти подходы, естественно, эквивалентны).

Формулы преобразования тензора поляризаций пучков при дифракции на совершенных кристаллах получаются из приведенных выше формул для полей (1.3) — (1.8). Составляя квадратичные комбинации (1.10) из полей дифрагированной и прошедшей волн, получаем

$$\begin{aligned}\hat{J}^d &= \hat{R}\hat{J}^i\hat{R}^*, \\ \hat{J}^t &= \hat{T}\hat{J}^i\hat{T}^*,\end{aligned}\quad (1.11)$$

где диагональные компоненты матриц  $\hat{R}$  и  $\hat{T}$  даются выражениями (1.7), (1.8), а недиагональные равны нулю. Диагональный вид матрицы  $\hat{R}$  и  $\hat{T}$

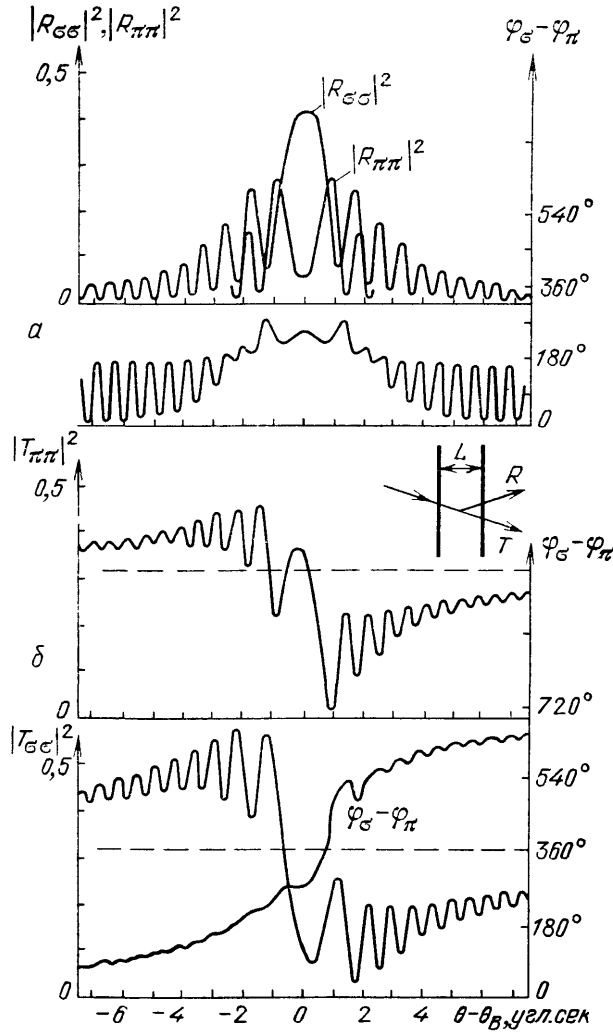


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но для симметричного случая Лауэ.  $L = 72$  мкм

приводит к тому, что каждая из компонент тензоров поляризаций  $\hat{J}^d$  и  $\hat{J}^t$  зависит только от соответствующей компоненты  $\hat{J}^i$ :

$$\begin{aligned}J_{\beta\gamma}^d &= R_{\beta\beta}R_{\gamma\gamma}^*J_{\beta\gamma}^i, \\ J_{\beta\gamma}^t &= T_{\beta\beta}T_{\gamma\gamma}^*J_{\beta\gamma}^i,\end{aligned}\quad (1.12)$$

где  $\beta = \sigma, \pi$ ,  $\gamma = \sigma, \pi$  (суммирование по повторяющимся индексам нет!).

Формулы (1.11) и (1.12) позволяют легко выяснить, как изменяется поляризация и степень поляризации пучка при дифракции. Используя выражения, приведенные в табл. I, можно, например, показать, что если

Таблица I. Поляризационные характеристики пучков ( $z = E_\pi/E_\sigma$ )

Характеристика	Поляризация	
	полная	частичная
1. Интенсивность $I$	$ E_\sigma ^2 +  E_\pi ^2$	$J_{\sigma\sigma} + J_{\pi\pi}$
2. Степень поляризации $P$	1	$\frac{[(J_{\sigma\sigma} - J_{\pi\pi})^2 + 4 J_{\sigma\pi} ^2]^{1/2}}{J_{\sigma\sigma} + J_{\pi\pi}}$
3. Отношение осей эллипса поляризации $b_e$	$-2 \operatorname{Im} z$	$\frac{2 \operatorname{Im} J_{\sigma\pi}}{J_{\sigma\sigma} + J_{\pi\pi}}$
4. Угол поворота $\psi$ большой оси эллипса относительно $\sigma$ -поляризации	$\frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{2 \operatorname{Re} z}{1 -  z ^2}$	$\frac{1}{2} \operatorname{arctg} \frac{2 \operatorname{Re} J_{\sigma\pi}}{J_{\sigma\sigma} - J_{\pi\pi}}$

$J'_{\sigma\sigma}/J'_{\pi\pi} \leq |R_{\pi\pi}|^2/|R_{\sigma\sigma}|^2$ , то при любой поляризации падающего пучка степень поляризации дифрагировавшего пучка не возрастает (т. е.  $P^d \leq P^i$ ). Изменение интенсивности и поляризации пучка при последовательных отражениях от нескольких кристаллов тоже удобно описывать с помощью последовательного применения формул (1.11), (1.12). Эта процедура становится нетривиальной, если кристаллы повернуты друг относительно друга, так что  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризации для них не совпадают. В этом случае необходимо осуществлять преобразование тензора поляризаций из одного базиса ( $\sigma, \pi$ ) в другой ( $\sigma', \pi'$ ), повернутый относительно первого на угол  $\psi'$ :

$$\hat{J}' = \hat{R}_{\psi'} \hat{J} \hat{R}_{\psi'}^{-1}, \quad (1.13)$$

где матрица поворота  $\hat{R}_{\psi'}$  дается выражением

$$\hat{R}_{\psi'} = \begin{pmatrix} \cos \psi' & \sin \psi' \\ -\sin \psi' & \cos \psi' \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

С помощью тензора поляризаций удобно также находить интегральные (по области дифракции) поляризационные характеристики, которые определяются интегральными тензорами поляризаций:

$$\bar{J}_{\beta\gamma}^d = \int J_{\beta\gamma}^i R_{\beta\beta} R_{\gamma\gamma}^* d\Theta, \quad (1.15)$$

$$\bar{J}_{\beta\gamma}^t = \int J_{\beta\gamma}^i T_{\beta\beta} T_{\gamma\gamma}^* d\Theta.$$

Из (1.15) следует, что при дифракции от толстого совершенного кристалла даже при полностью поляризованном падающем пучке возникает некоторая деполяризация пучков, если только поляризация падающего пучка не совпадает с  $\sigma$  или  $\pi$ . Физически это связано с тем, что поляризация дифрагированной и прошедшей волн меняются в области дифрак-



пии (см. рис. 1, 2), и некогерентное сложение пучков с различной поляризацией дает лишь частично поляризованный пучок.

Интегральные коэффициенты отражения и интегральные поляризационные характеристики (рис. 3) имеют осциллирующую зависимость от толщины, связанную с известными маятниковыми решениями (Pendel — lösung) для дифрагирующих в кристалле волн. Отметим, что при определенных толщинах, соответствующих  $\text{Re } R_{\sigma\sigma} R_{\pi\pi}^* = 0$ , дифрагированный

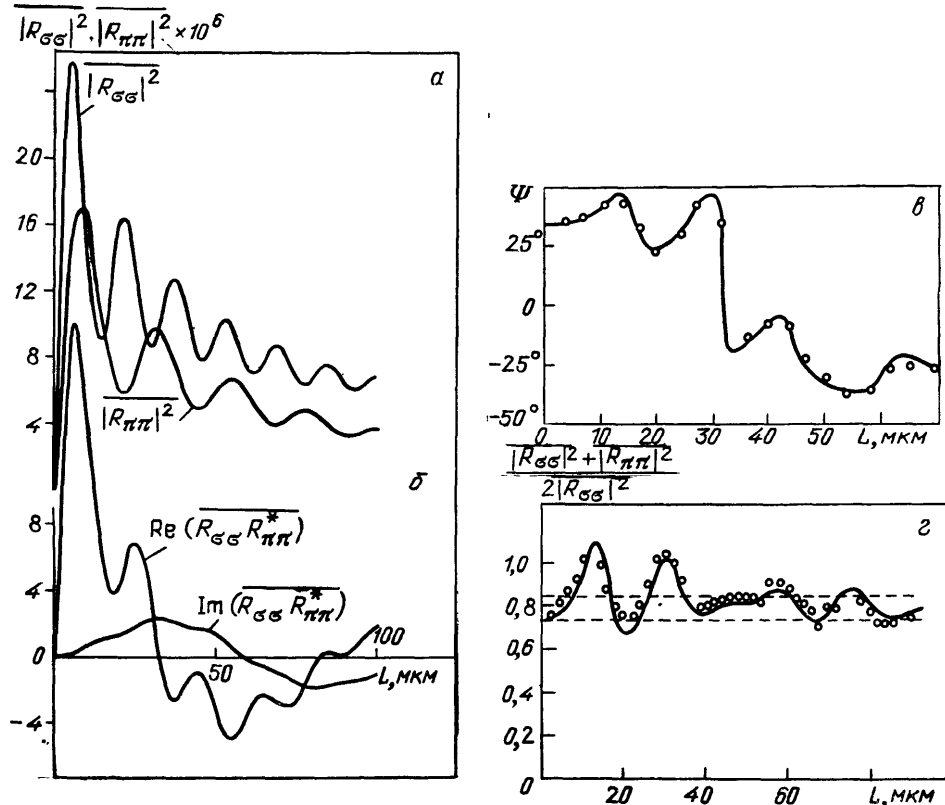


Рис. 3. Зависимость от толщины кристалла интегральных коэффициентов отражения для диагональных (а) и недиагональных (б) компонент тензора поляризации. На рис. в и г, взятых из работы [2], приведены соответствующие этим коэффициентам поляризационные характеристики — угол поворота плоскости поляризации (в) и отношение интегральных коэффициентов отражения для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций (г). Симметричный случай Лауэ, рефлекс 220 в Si,  $\text{CuK}\alpha$ -излучение. Сплошные кривые — расчет по динамической теории дифракции, точки — эксперимент для линейной поляризации под углом  $45^\circ$  к векторам  $\sigma$  и  $\pi$ , штриховые линии соответствуют  $(1 + \cos 2\theta_B)/2$  и  $(1 + \cos^2 2\theta_B)/2$

пучок имеет круговую поляризацию, если падающий пучок линейно поляризован под углом  $\Psi' = \arctg (|R_{\sigma\sigma}|^2 / |R_{\pi\pi}|^2)^{0,5}$  к направлению  $\sigma$ -поляризации; однако степень круговой поляризации, как следует из рис. 3 и табл. 1, в этом случае довольно мала ( $P \approx 0,25$  при  $L \approx 33$  мкм).

Особенно полезно использование тензоров поляризаций в несовершенных кристаллах (см. раздел 1.4).

**1.3. Дифракционное двупреломление и дихроизм.** Падающая на кристалл монохроматическая волна возбуждает в кристалле в области дифракции по две блоховские волны с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризациями, каждая со своим волновым вектором. Распространяясь в кристалле, эти волны интерferируют между собой, и в результате поляризационные ха-

характеристики прошедшей сквозь кристалл и дифрагировавшей волн весьма сложным образом меняются с толщиной кристалла, что неоднократно наблюдалось на эксперименте [2, 3, 34, 36]. Во многих случаях, однако, существенно только по одной блоховской волне для каждой из поляризаций, и возникает более простая ситуация, аналогичная обычной оптике, за исключением того, что рентгеновское двупреломление имеет дифракционную природу. Например, одним из таких случаев является дифракция на толстых поглощающих кристаллах [29].

Еще два подобных случая рассматриваются ниже: это «внебрэгговское» дифракционное двупреломление и двупреломление в мозаичных кристаллах. Первый из них, рассматриваемый в этом разделе, реализуется при достаточно больших отклонениях  $\Delta\theta$  от брэгговского угла ( $\Delta\theta = \theta - \theta_B$ ), так что можно пренебречь интенсивностью дифрагировавшей волны, которая довольно быстро (как  $|\Delta\theta|^{-2}$ ) уменьшается с ростом  $|\Delta\theta|$  (см. (1.5) — (1.8)). В этих условиях, как будет видно ниже, дифракционное двупреломление уменьшается медленно (как  $|\Delta\theta|^{-1}$ ), и при достаточно большой толщине кристалла набирается большая разность фаз между прошедшими волнами с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризациями (см. рис. 2, б). Более того, из-за такого медленного спада двупреломления вклад во «внебрэгговское» двупреломление могут дать многие рефлексy, и эта задача также рассмотрена ниже.

Дифракционные добавки к показателю преломления  $\Delta n$  в двухволновом приближении можно получить либо непосредственно из уравнений Максвелла по теории возмущений, считая амплитуду дифрагированной волны много меньше падающей [7—9], либо из выражений (1.6) для амплитуды прошедшей волны в асимптотике  $|\Delta\theta| \rightarrow \infty$ . Мы сразу приведем окончательное выражение ( $\gamma = \sigma, \pi$ ), справедливое и в случае Брэгга, и в случае Лауэ:

$$\Delta n_\gamma = - \frac{C_\gamma^2 \chi_H \chi_{\bar{H}}}{4\Delta\theta \sin 2\theta_B}. \quad (1.16)$$

Разница показателей преломления  $\delta n$  имеет вид

$$\delta n = \Delta n_\sigma - \Delta n_\pi = - \frac{\chi_H \chi_{\bar{H}} \sin 2\theta_B}{4\Delta\theta}. \quad (1.17)$$

Условием применимости выражения (1.17) является неравенство  $|\Delta\theta| \gg |\chi_H|/\sin 2\theta_B$ .

Действительная часть  $\delta n$  определяет двупреломление, а мнимая — дихроизм (т. е. различное поглощение)  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных лучей в кристалле.

Подчеркнем, что следующий из (1.17) дихроизм проявляется только в поглощающих кристаллах при условии, что  $\text{Im} \chi_H \chi_{\bar{H}} \neq 0$ . Физически он связан с различием в величине эффекта Борманна для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных волн [29—31]. Отметим, что обычно в рентгеновской области длин волн (и не слишком близко к краю поглощения)  $|\text{Re} \delta n| \gg |\text{Im} \delta n|$ . В этом случае при распространении изменяется только относительная фаза  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных волн.

В многоволновом случае решение уравнений Максвелла также может быть получено по теории возмущений [5, 7, 9]. Решение ищется в виде блоховской волны (в данном случае удобнее использовать индукцию  $\mathbf{D}$ ):

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \left( \mathbf{D}_0 + \sum_{\mathbf{h} \neq 0} \mathbf{D}_{\mathbf{h}} e^{i\mathbf{h}\mathbf{r}} \right) e^{i\mathbf{K}_0 \mathbf{r}}. \quad (1.18)$$

Подставляя (1.18) в уравнения Максвелла, обычным образом [31] получаем систему уравнений многоволновой динамической теории дифракции.

Так как нельзя заранее указать, какие поляризации будут собственными, выпишем эту систему в векторной форме, выделив уравнение для прямой волны  $\mathbf{D}_0$ :

$$\left(1 - \frac{\kappa_0^2}{\kappa_0^2} - \chi_0\right) \mathbf{D}_0 = \sum_{\mathbf{H} \neq 0} \chi_{\bar{\mathbf{H}}} \left[ \mathbf{D}_{\mathbf{H}} - \frac{\mathbf{K}_0 (\mathbf{D}_{\mathbf{H}} \mathbf{K}_0)}{\kappa_0^2} \right], \quad (1.19a)$$

$$\left(1 - \frac{\kappa_0^2}{\kappa_{\mathbf{H}}^2} - \chi_0\right) \mathbf{D}_{\mathbf{H}} = \sum_{\mathbf{G} \neq \mathbf{H}} \chi_{\mathbf{H}-\mathbf{G}} \left[ \mathbf{D}_{\mathbf{G}} - \frac{\mathbf{K}_{\mathbf{H}} (\mathbf{D}_{\mathbf{G}} \mathbf{K}_{\mathbf{H}})}{\kappa_{\mathbf{H}}^2} \right]. \quad (1.19б)$$

( $\mathbf{H} \neq 0$ ,  $\mathbf{K}_{\mathbf{H}} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ ). Считая все  $\mathbf{D}_{\mathbf{H}}$  малыми и оставляя в правой части (1.19б) только  $\mathbf{D}_0$ , найдем

$$\mathbf{D}_{\mathbf{H}} = \chi_{\mathbf{H}} \left[ \mathbf{D}_0 - \frac{\mathbf{K}_{\mathbf{H}} (\mathbf{D}_0 \mathbf{K}_{\mathbf{H}})}{\kappa_{\mathbf{H}}^2} \right] \left( 1 - \frac{\kappa_0^2}{\kappa_{\mathbf{H}}^2} - \chi_0 \right)^{-1}. \quad (1.20)$$

Подставляя найденные  $\mathbf{D}_{\mathbf{H}}$  в (1.19a), получим следующее уравнение для собственных волн в кристалле:

$$\left( 1 - \frac{\kappa_0^2}{\kappa_0^2} - \chi_0 + 2\hat{\delta}^d \right) \mathbf{D}_0 = 0, \quad (1.21)$$

где тензор  $\hat{\delta}^d$  определяется соотношением (см. также [5, 9])

$$\delta_{ik}^d = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{H} \neq 0} \frac{\chi_{\mathbf{H}} \chi_{\bar{\mathbf{H}}}}{\alpha_{\mathbf{H}} \kappa_0^2} (\kappa_{\mathbf{H}}^2 \delta_{ik} - H_i' H_k'), \quad (1.22)$$

а величина  $\alpha_{\mathbf{H}} = [\mathbf{H}^2 + 2(\kappa_0 \mathbf{H})]/2\kappa_0^2$  определяет отклонение направления распространения волны  $\mathbf{D}_0$  от брэгговского направления для рефлекса  $\mathbf{H}$ ; вектор  $\mathbf{H}' = \mathbf{H} - \kappa_0 (\kappa_0 \mathbf{H})/\kappa_0^2$ .

Диагонализируя тензор  $\hat{\delta}^d$ , можно найти собственные векторы  $\mathbf{e}_m$  ( $m=1, 2$ ) и собственные значения  $\delta_m^d$  уравнения (1.21), которые определяют соответственно поляризации и волновые векторы собственных волн в кристалле. Разность показателей преломления собственных волн определяется соотношением  $\delta n = \delta_1^d - \delta_2^d$ .

Отметим, что при наличии поглощения собственные поляризации могут быть эллиптическими и неортогональными (т. е.  $(\mathbf{e}_1^* \mathbf{e}_2) \neq 0$ ), а величины  $\delta_m^d$  — комплексными. Из (1.22) следует также, что в рассматриваемом приближении при распространении пучков вдоль осей симметрии третьего и более высоких порядков и двупреломление, и дихроизм отсутствуют.

Обсудим в качестве примера распространение рентгеновского излучения перпендикулярно плоскости (110) в кристалле с кубической решеткой. В этом случае из симметричных соображений сразу очевидны собственные поляризации — они линейны: одна —  $\mathbf{e}_1$  — параллельна направлению [001], другая —  $\mathbf{e}_2$  — параллельна направлению [110]. Зная  $\mathbf{e}_m$ , легко определить  $\delta_m^d$ , так как

$$\delta_m^d = (\mathbf{e}_m^* \hat{\delta}^d \mathbf{e}_m) \quad (1.23)$$

( $\mathbf{e}_m$  — единичные векторы). Для рассматриваемого здесь случая из (1.22) получаем следующее выражение для  $\delta n$ :

$$\delta n = \sum_{h^2+k^2+l^2 \neq 0} \frac{[(h-k)^2 - 2l^2] \chi_{hkl} \chi_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}}{4[h^2 + k^2 + l^2 - (V^2 a/\lambda)(h+k)]}, \quad (1.24)$$

где  $a$  — размер элементарной ячейки,  $h, k, l$  — индексы Миллера.

Проанализируем применение общих соотношений (1.22), (1.24) и следующую из них оценку эффекта для конкретного случая распространения  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения в кремнии. Из-за того, что в этом случае  $\sqrt{2}a/\lambda = 4,9855 \approx 5$ , основной вклад в  $\delta n$  дадут рефлексы 620 и 260, так как для них очень мал знаменатель в (1.24). Если учитывать только эти рефлексы, то  $\delta n = (1,9 + i0,24) \cdot 10^{-9}$ , тогда как с учетом остальных рефлексов  $\delta n = (2,5 + i0,27) \cdot 10^{-9}$ , т. е. далекие рефлексы дают довольно заметный вклад. При толщине кристалла  $L \approx 0,04$  см угол поворота плоскости поляризации  $\Delta\Psi$  и отношение осей эллипса поляризации  $b_e$  оказываются вполне измеримыми при существующей экспериментальной технике [3, 5] (например, при падении линейно поляризованной под углом  $45^\circ$  к  $\sigma$  и  $\pi$  волны:  $\Delta\Psi = 3,8'$  и  $b_e = 0,02$ ).

Экспериментальное исследование [37] рассмотренного выше случая распространения  $\text{CuK}_\alpha$  излучения в кремнии выявило наличие двупреломления и дихроизма, значительно превосходящих приведенные выше теоретические значения. Расхождение может быть связано с тем, что при коллимации пучка, реализованной в [37], очевидно, могли заметно возбуждаться рефлексы 260 и 620. Дифракция и эффект Бормана на этих рефлексах могли привести к значительному увеличению наблюдаемых значений дихроизма и двупреломления по сравнению с теоретическими. Последние соображения, в частности, согласуются с тем, что измерения на таком же кристалле, в которых принимались специальные меры для исключения возбуждения рефлексов 260 и 620 [5], дают существенно меньшие, чем в [37], значения эффекта (см. также [38]).

Таким образом, в рентгеновской области длин волн кристаллы обладают заметным двупреломлением и дихроизмом даже для направлений, достаточно далеких от направлений сильного дифракционного рассеяния. При этом распространение рентгеновских лучей, в отличие от случая сильного дифракционного рассеяния, может быть описано аналогично обычной оптике анизотропных сред, если в показателе преломления учтены обсуждавшиеся выше дифракционные добавки. Как показывают конкретные оценки (см. раздел 3.3), на основе «внебрэгговского» дифракционного двупреломления может быть осуществлено преобразование линейной поляризации волны в круговую и наоборот. С другой стороны, дифракционные двупреломление и дихроизм могут оказать помехой для наблюдения истинной анизотропии рентгеновской восприимчивости. Дифракционные поправки к показателю преломления могут быть также весьма существенны при прецизионных измерениях показателя преломления (на рентгеновских интерферометрах и т. п.), в которых уже достигнута точность порядка  $10^{-9}$ – $10^{-10}$ .

**1.4. Дифракция в несовершенных кристаллах.** Несовершенство кристалла, нарушения регулярной кристаллической решетки приводят к тому, что волны, дифрагирующие от разных участков, приобретают дополнительную разность фаз. Если нарушения носят случайный характер, то из-за случайной разности фаз волны становятся частично некогерентными. Ясно, что некогерентность прежде всего скажется на поляризационных свойствах дифракции, в частности, может привести к деполяризации. Теории, которая описывала бы дифракцию на кристалле с произвольным несовершенством, в настоящее время не существует; разные теоретические подходы применяются к слабо несовершенным и сильно несовершенным кристаллам. В настоящем разделе будет рассмотрена лишь одна из простейших моделей, модель мозаичного кристалла, в которой, тем не менее, проявляются многие поляризационные эффекты, специфичные для несовершенных кристаллов. В этой модели несовершенство предполагается настолько сильным, что волны, дифрагировавшие от разных блоков мозаики, полностью некогерентны между собой, а для каж-

дого блока мозаики применимо кинематическое приближение [29, 39—41].

Традиционно дифракция на мозаичных кристаллах рассматривается на основе дарвиновских уравнений переноса для интенсивностей  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных компонент [39—41]. В случае произвольной поляризации пучков уравнения для интенсивностей должны быть заменены на уравнения переноса для тензора поляризаций  $\hat{J}$  (определение  $\hat{J}$  см. в разделе 1.2). Как будет видно ниже, такое обобщение сведется к добавлению к уравнениям Дарвина, которые описывают диагональные компоненты тензоров поляризаций, еще одной системы уравнений для недиагональных компонент тензора поляризаций; их общее решение полностью определяет поляризационные свойства пучков, дифрагирующих в мозаичных кристаллах [15].

Вывод уравнений переноса для тензора поляризаций можно проиллюстрировать следующими простыми соображениями. Рассмотрим, из чего складывается изменение тензора поляризаций прямой волны  $\hat{J}^0$  по мере распространения ее в кристалле, т. е. найдем производную  $\partial \hat{J}^0 / \partial s_0$  ( $s_0$  — координата вдоль направления распространения прямой волны). Прежде всего, учтем обычное поглощение, присутствующее и вне области дифракции, вклад которого в производную имеет вид  $-\mu \hat{J}^0$ , где  $\mu$  — коэффициент поглощения. Дифракция из дифрагированной волны обратно в прямую волну описывается точно так же, как и дифракция прямой волны (см. (1.3), (1.4), (1.11)), и приводит к вкладу в искомую производную вида  $\sigma_{0H} \hat{K} \hat{J}^H \hat{K}$ , где  $\hat{J}^H$  — тензор поляризации дифрагированной волны,  $\sigma_{0H}$  — среднее сечение брэгговского рассеяния на единицу объема кристалла при данном угловом отклонении  $\Delta\theta = \theta - \theta_B$  от брэгговского угла:

$$\sigma_{0H} = \frac{\pi^2}{\lambda \sin 2\theta_B} |\chi_H|^2 W(\Delta\theta) \equiv QW(\Delta\theta). \quad (1.25)$$

В (1.25) функция  $W(\Delta\theta)$  представляет собой функцию распределения блоков мозаики по ориентациям. При получении (1.25) предполагалось, что характерный размер блоков  $L_b$  много меньше  $L_e^1$ , так что для отдельного блока справедливо кинематическое приближение, а характерный угол разориентации блоков  $\Delta\theta_b$  много больше  $\lambda/L_b$  (так называемая мозаичность типа I [40]).

Наиболее нетривиальный вид имеют члены, описывающие изменение тензора поляризации прямого пучка, вызванное убытием части излучения за счет дифракции. Кроме очевидного дифракционного ослабления пучка, в области дифракции неизбежно происходит и изменение его фазовой скорости (показателя преломления), которое связано с величиной ослабления пучка дисперсионными соотношениями [15]. Ситуация здесь совершенно аналогична случаю обычного резонансного поглощения, которое обязательно приводит к изменению действительной части показателя преломления. Сделаем поэтому небольшое отступление, чтобы понять, как может быть вычислена дифракционная добавка к показателю преломления в несовершенном кристалле.

Наиболее последовательный подход заключается в вычислении  $\Delta n_\gamma$  через амплитуду рассеяния вперед на отдельном блоке мозаики (произвольной формы) [42] с последующим усреднением по ориентациям блоков. Если, как это уже предполагалось выше,  $L_b \ll L_e^1$  и  $\Delta\theta_b \gg \lambda/L_b$ , то зависимость от формы и размеров блоков пропадает, и для  $\Delta n_\gamma$  получается следующее выражение:

$$\Delta n_\gamma = \frac{\pi C_\gamma^2 \chi_H \bar{\chi}_H}{4 \sin 2\theta_B} (\tilde{W}(\Delta\theta) + iW(\Delta\theta)), \quad (1.26)$$

где  $C_\sigma = 1$ ,  $C_\pi = \cos 2\Theta_B$ , а функция  $\tilde{W}(\Delta\Theta)$  связана с  $W(\Delta\Theta)$  дисперсионным соотношением

$$\tilde{W}(\Delta\Theta) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{W(x) dx}{x - \Delta\Theta}. \quad (1.27)$$

Необычность соотношения (1.27) состоит в том, что интегрирование в нем происходит не по частоте излучения, а по углу падения; такая замена переменных возможна потому, что частота и угол  $\Delta\Theta$  пропорциональны друг другу из-за наличия брэгговского условия (за исключением случая  $\Theta_B = 90^\circ$ !).

Соотношение (1.26) может быть получено и другими способами. Например, пренебрегая поглощением, можно заключить из закона сохранения энергии, что  $\text{Im}(\Delta n_\gamma) = \lambda \sigma_{\text{оН}} C_\gamma^2 / 4\pi$  (см. (1.25)) (т. е. сколько ubyло из одного пучка, столько прибыло в другой), и затем получить  $\text{Re}(\Delta n_\gamma)$  с помощью дисперсионных соотношений. Еще один способ [43] состоит в вычислении  $\Delta n_\gamma$  из амплитуды прошедшей сквозь кристалл волны (см. (1.6)) в пределе тонкого плоского блока мозаики с последующим усреднением по ориентациям отдельных блоков; дисперсионные соотношения (1.27) получаются при таком подходе автоматически.

Отметим, что выражение (1.26) позволяет корректно учесть взаимное влияние поглощения и дифракции; в частности, можно показать [42], что в мозаичных кристаллах в области дифракции тоже происходит частичное подавление поглощения (эффект Борманна). Однако, в отличие от совершенных кристаллов, эффект Борманна проявляется довольно слабо, и мы не будем принимать его во внимание при рассмотрении поляризационных явлений в мозаичных кристаллах (т. е. будем полагать  $\text{Im}(\chi_H \chi_{\bar{H}}) = 0$ ).

Вид функции  $W(\Delta\Theta)$  чаще всего считают гауссовым или лоренцевым; для этих случаев функции  $W(\Delta\Theta)$  и  $\tilde{W}(\Delta\Theta)$  приведены на рис. 4.

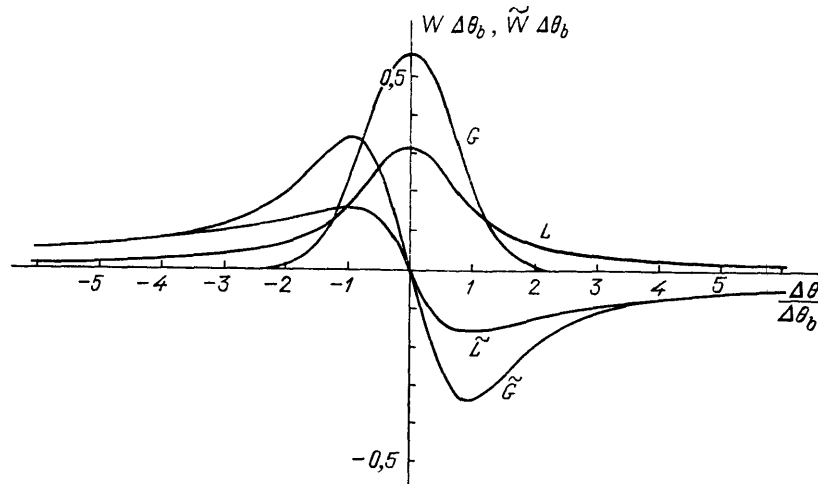


Рис. 4. Вид функций  $W(\Delta\Theta)$  и  $\tilde{W}(\Delta\Theta)$  при гауссовом ( $G$  и  $\tilde{G}$ ) и лоренцевом ( $L$  и  $\tilde{L}$ ) распределениях (нормировка выбрана так, что  $\int W_L(x) dx = \int W_G(x) dx$ )

Весьма существенно, что  $\tilde{W}(\Delta\Theta)$  медленно убывает с ростом  $|\Delta\Theta|$ :  $\tilde{W}(\Delta\Theta) \approx -(\pi \Delta\Theta)^{-1}$ , и при любом распределении блоков мозаики показатель преломления (1.26) выходит при  $|\Delta\Theta| \gg \Delta\Theta_B$  на универсальную зависимость:  $\Delta n_\gamma \approx -C_\gamma^2 \chi_H \chi_{\bar{H}} / (4\Delta\Theta \sin 2\Theta_B)$ . Таким образом, дифракционное двупреломление  $\Delta n_\sigma - \Delta n_\pi$  имеет заметную величину и вне области

сильной дифракции. Точно такое же асимптотическое поведение величины  $\Delta n_\gamma$  имеет место и в совершенных кристаллах (см. раздел 1.3). То обстоятельство, что при больших  $|\Delta\Theta|$  дифракционная добавка  $\Delta n_\gamma$  не зависит от совершенства кристалла, может быть качественно понято из следующих соображений: при больших  $|\Delta\Theta|$  существенно, чтобы кристалл обладал совершенством лишь на расстояниях порядка  $\lambda/|\Delta\Theta|$ , так как на больших расстояниях разность фаз дифрагированных волн оказывается больше  $\pi$ , и волны в среднем начинают гасить друг друга. Поэтому, если размер блока  $L_b \gg \lambda/|\Delta\Theta|$ , излучение «не чувствует» несовершенства кристалла.

Вернемся теперь к рассмотрению членов в уравнениях переноса, описывающих эволюцию тензора поляризации прямого пучка. Учитывая, что для каждой из поляризационных компонент показатель преломления дается (1.26), можно показать [15, 43], что члены, описывающие изменение тензора поляризации прямого пучка за счет дифракции, имеют вид  $-QW(\Delta\Theta)(\hat{K}^2\hat{J}^0 + \hat{J}^0\hat{K}^2) + iQ\tilde{W}(\Delta\Theta)(\hat{K}^2\hat{J}^0 - \hat{J}^0\hat{K}^2)$ . В итоге получаем уравнение для  $\partial\hat{J}^0/\partial s_0$  и аналогичное ему уравнение для  $\partial\hat{J}^H/\partial s_H$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial\hat{J}^0}{\partial s_0} = & -\mu\hat{J}^0 - QW(\Delta\Theta)(\hat{K}^2\hat{J}^0 + \hat{J}^0\hat{K}^2) + \\ & + iQ\tilde{W}(\Delta\Theta)(\hat{K}^2\hat{J}^0 - \hat{J}^0\hat{K}^2) + QW(\Delta\Theta)\hat{K}\hat{J}^H\hat{K}, \end{aligned} \quad (1.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\hat{J}^H}{\partial s_H} = & -\mu\hat{J}^H - QW(\Delta\Theta)(\hat{K}^2\hat{J}^H + \hat{J}^H\hat{K}^2) - \\ & - iQ\tilde{W}(\Delta\Theta)(\hat{K}^2\hat{J}^H - \hat{J}^H\hat{K}^2) + QW(\Delta\Theta)\hat{K}\hat{J}^0\hat{K}, \end{aligned}$$

где  $s_H$  — координата вдоль направления распространения дифрагированной волны. Система уравнений (1.28) полностью описывает поляризационные свойства дифракции в несовершенных кристаллах с мозаичностью типа I. Она распадается на четыре системы уравнений для каждого из элементов тензоров  $\hat{J}^0$  и  $\hat{J}^H$ ; уравнения для диагональных элементов совпадают с дарвиновскими уравнениями для интенсивностей  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных пучков, новыми являются лишь уравнения для недиагональных элементов. Решение этих уравнений для кристалла в виде плоскопараллельной пластинки не представляет труда; подробный анализ результатов был проведен в [15], а здесь мы только кратко обсудим основные результаты.

Основное отличие рентгеновской оптики несовершенных кристаллов от совершенных состоит в том, что даже при фиксированном угле  $\Delta\Theta$  происходит частичная деполяризация дифрагирующих пучков, если только поляризация падающего пучка отличается от  $\sigma$  и  $\pi$ . Качественно эта деполяризация может быть понята из следующих соображений: поляризация падающей волны изменяется по мере распространения в кристалле, поэтому волны, дифрагировавшие на разной глубине, имеют разную поляризацию и, складываясь некогерентно, дают частично деполяризованную волну. Заметное изменение поляризационных свойств дифрагирующих пучков происходит в мозаичных кристаллах на длине вторичной экстинкции  $L_e^{II} = 2\pi\Delta\Theta_b/Q$ . При мозаичности типа I  $L_e^{II} \gg L_e^I$ , однако  $L_e^{II}$  может быть сравнимо с длиной поглощения  $\mu^{-1}$  (т. е. может быть и  $\mu L_e^{II} \gg 1$ , и  $\mu L_e^{II} \ll 1$ ). Деполяризация еще более усиливается в интегральных по области дифракции величинах (как и в совершенных кристаллах, интегрировать нужно тензоры поляризаций пучков (см. (1.15))).

Кроме деполяризации, из-за наличия дифракционного двупреломления дифрагировавший и прошедший пучки оказываются эллиптически

поляризованными (рис. 5). При линейно поляризованном падающем пучке эллиптическая поляризация будет правой или левой в зависимости от знака  $\Delta\theta$ , и в интегральных характеристиках эллиптичность практически пропадает (в пренебрежении аномальным поглощением). Примеры дифференциальных и интегральных поляризационных характеристик приведены на рис. 5 и 6, а в табл. II проведено сравнение поляризационных характеристик совершенных и несовершенных кристаллов.

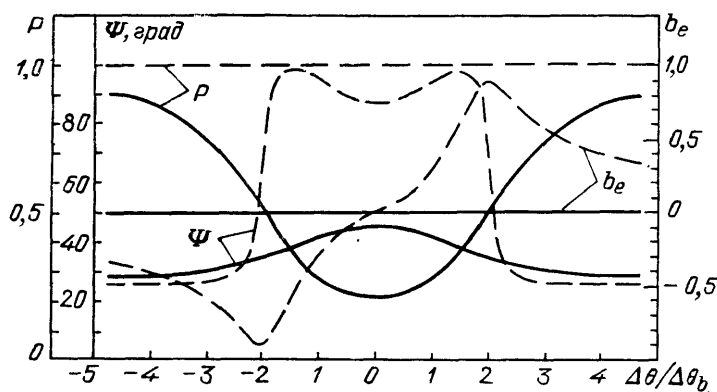


Рис. 5. Угловые зависимости степени поляризации  $P$ , отношения осей  $b_e$  и угла поворота  $\Psi$  эллипса поляризации дифрагировавшего в мозаичном кристалле пучка для геометрии Лауэ ( $\Delta\theta$  — отклонение от условий Брэгга). Сплошные и линии — симметричный случай Лауэ ( $b=1, \cos \theta_B = \sqrt{3}/2$ ), штриховые — несимметричный случай Лауэ ( $b=2, \cos \theta_B = \sqrt{3}/2$ ). Падающий пучок линейно поляризован под  $45^\circ$  к плоскости рассеяния,  $W(\Delta\theta) = W_L(\epsilon)$ , толщина кристалла  $L = 2,5 L_e^{II} = 5\pi\Delta\theta_B/Q$

Экспериментальные исследования поляризационных свойств несовершенных кристаллов еще только начинаются, но уже привели к существенным результатам. Наряду с ранними работами [10, 12, 44–46] следует особенно отметить цикл экспериментальных исследований Н. М. Олехновича с сотрудниками по поляризационным свойствам реальных кристаллов с различной плотностью дислокаций (см. [14]). Ими подробно изучены интегральные [47–49] и дифференциальные [11, 13, 50, 51] коэффициенты отражения для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций, а также наблюдались

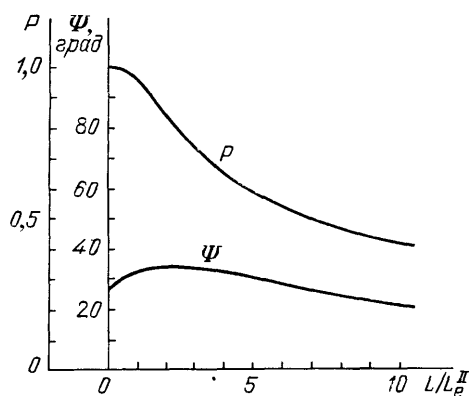


Рис. 6. Интегральные поляризационные характеристики в зависимости от толщины кристалла. Асимметричный случай Лауэ ( $b=2$ ), падающий пучок линейно поляризован под углом  $45^\circ$  к вектору  $\sigma$  [15]

дифракционное двупреломление и деполяризация [52]. Хотя эксперименты до сих пор проводились главным образом для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций, они продемонстрировали, что дарвиновская теория дифракции в мозаичных кристаллах часто не в состоянии дать количественного описания эксперимента. Например, отношение коэффициентов отражения  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризо-



Таблица II. Поляризационные свойства дифрагированной волны при поляризованной падающей

Свойства	Кристаллы		
	кинематические	динамические	мозаичные
1. Различная ширина областей дифракции $\sigma$ - и $\pi$ -компонент	Нет	Да	Да
2. Разность фаз $\sigma$ - и $\pi$ -компонент	Нет	Да	Да
3. Деполяризация (для плоской монохроматической волны)	Нет	Нет	Да
4. Деполяризация интегральная по области дифракции	Нет	Да	Да

ванных пучков (так называемый коэффициент поляризации [11, 13, 50, 51]) выходит на плато в области дифракции (рис. 7). Такое поведение можно, по-видимому, объяснить предполагая, что размеры отдельных блоков настолько велики, что становится существенной первичная экстинкция в каждом блоке [50, 51]. Однако некоторые из наблюдаемых на эксперименте особенностей не имеют даже качественного объяснения; например, сообщается [53], что при некоторой плотности дислокаций интегральный коэффициент отражения для  $\pi$ -поляризации больше, чем для  $\sigma$ -поляризации (рис. 8).

В связи со сказанным очевидно, что требуется дальнейшая разработка теории дифракции в несовершенных кристаллах, а для проверки предсказаний теории обязательно должны привлекаться поляризационные измерения как наиболее информативные. В частности, может быть обобщена на случай произвольной поляризации теория Като [54], а также ее развитие в работах [55, 56].

Возникает интересный общий вопрос: каково максимальное число параметров, описывающих поляризационные характеристики каждого рефлекса (имеются в виду такие величины, которые могут быть измерены с помощью поляризаторов и анализаторов без измерения фаз пучков)? Оказывается, из-за того, что в каждом акте рэлеевского рассеяния не происходит смешивания  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций, независимых параметров всего четыре (каждый из них есть функция угла падения и угла отражения). В качестве таких примеров могут быть выбраны, например, коэффициенты отражения для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций и комплексный «коэффициент отражения» для недиагональной компоненты тензора поляризаций, т. е. величина, связывающая недиагональные компоненты тензоров поляризаций падающего и дифрагированного пучка. Подчеркнем,

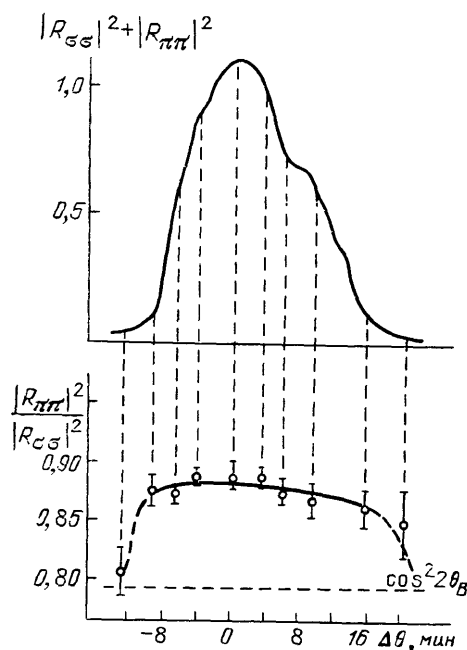


Рис. 7. Угловые зависимости коэффициента отражения неполяризованного излучения  $|R_{\sigma\sigma}|^2 + |R_{\pi\pi}|^2$  и отношения  $|R_{\pi\pi}|^2 / |R_{\sigma\sigma}|^2$  при плотности дислокаций  $3 \cdot 10^5 \text{ мм}^{-2}$ . Симметричный случай Брэгга, Ge (111),  $\text{CuK}\alpha$ -излучение [50]

что  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризации не смешиваются, если дифракция имеет двухволновой (или компланарный многоволновой) характер и отсутствуют анизотропия рентгеновской поляризуемости и вращение плоскости поляризации.

Следует отметить, что измерения поляризационных свойств дифракции в совершенных и, особенно, в несовершенных кристаллах имеет также и метрологическое значение. Так как кристаллы используются в качестве монокроматоров, то для ряда приложений (например, для структурного анализа) важно знать количественно поляризационные характеристики излучения после монокроматора. Поэтому в настоящее время по

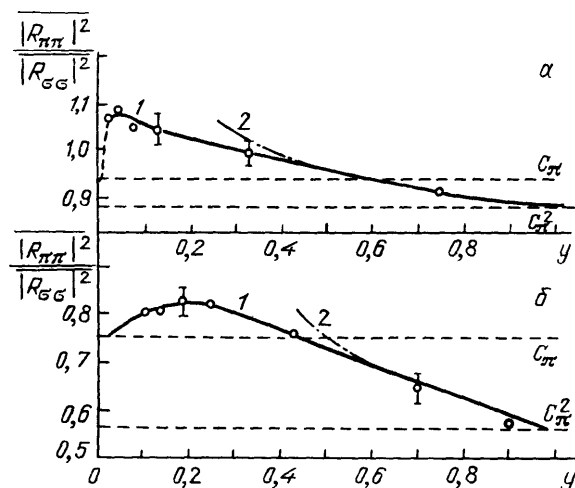


Рис. 8. Зависимость отношения интегральных коэффициентов отражения пучков с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризациями от фактора экстинкции  $y$ , характеризующего несовершенство кристалла. 200 (а)- и 400 (б)-рефлексы в LiF, CuK $\alpha$  излучение [536]. 1 — эксперимент, 2 — расчет, учитывающий только первичную экстинкцию в отдельных блоках мозаики

призыву Международного союза кристаллографов [57] проводится изучение поляризационных свойств монокроматоров и методов их измерения [58—60].

**2. Анизотропия рентгеновской восприимчивости.** Традиционное пренебрежение анизотропией рентгеновской восприимчивости при рассмотрении дифракции на кристаллах (см. раздел 1) во многих случаях вполне оправдано [61]. Однако эта анизотропия является причиной ряда качественных эффектов, таких как наличие дихроизма и двупреломления недифракционной природы (в основном вблизи краев поглощения), которые представляются довольно очевидными. Нетривиальным качественным следствием анизотропии является возникновение рефлексов, запрещенных по симметричным причинам в случае изотропной восприимчивости (т. е. появление «запрещенных» рефлексов [20—23]).

Для изучения анизотропии рентгеновской восприимчивости естественно использовать два взаимодополняющих подхода; феноменологический, основанный главным образом на симметричных соображениях, и микроскопический, учитывающий конкретную атомную структуру кристалла. Следует подчеркнуть, что симметричные ограничения на тензор рентгеновской восприимчивости отнюдь не сводятся к тем, которые известны из обычной оптики. При изучении симметричных свойств тензора восприимчивости в оптическом диапазоне кристалл рассматривается как однородная среда [62, 63]. В этом случае существенна только однородная часть восприимчивости  $\hat{\chi}_0$ , симметрия которой определяется точечной группой кристалла и хорошо известна из оптики [62, 63]. Для дифракции рентгеновских лучей существенна неоднородная (периодическая) часть  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$ , симметрия которой различна в различных точках элементар-

ной ячейки кристалла и определяется пространственной группой кристалла. Общие свойства рентгеновской диэлектрической восприимчивости подробно обсуждаются в работах [61], а симметричные ограничения на  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  — в [22, 23] (см. также ниже).

Одним из проявлений анизотропии восприимчивости является магнитное рассеяние рентгеновских лучей и магнитный дихроизм, которые имеют место в магнитоупорядоченных кристаллах и рассмотрены ниже в разделе 2.4.

**2.1. Двупреломление и дихроизм вблизи краев поглощения.** Последовательное описание анизотропии рентгеновской восприимчивости строится на основе квантовомеханической теории и требует знания атомных и кристаллических волновых функций электронов [26, 61, 64]. Для нас здесь важно лишь понять физические причины возникновения анизотропии и оценить ее величину, поэтому мы несколько упростим реальную картину взаимодействия рентгеновских лучей с кристаллами. Ясно, что анизотропия восприимчивости появляется как следствие кристаллической структуры из-за искажения волновых функций свободных атомов кристаллическими полями. Источником анизотропии являются дисперсионные (резонансные) поправки к восприимчивости, тогда как главная (потенциальная) часть восприимчивости оказывается изотропной. Наиболее сильно искажаются волновые функции внешних электронов, но они дают очень малый вклад в дисперсионные поправки, так как энергия связи внешних электронов мала по сравнению с энергией рентгеновских фотонов. Заметные дисперсионные поправки (порядка вклада в диэлектрическую проницаемость от нескольких электронов на атом) дают внутренние электроны К- и L-оболочек в случае, если энергия фотонов близка к К- или L-краям поглощения, хотя эти оболочки очень мало искажаются кристаллическими полями. В простейшем, дипольном приближении дисперсионная поправка к восприимчивости кристалла имеет вид [61, 64]

$$\Delta\chi_{ik} = -\frac{r_e c^2}{m\omega^2} \sum_{j,m,s} \left[ \frac{\langle 0 | p_i^s | m \rangle \langle m | p_k^s | 0 \rangle}{E_0 - E_m + \hbar\omega - i(\Gamma_m/2)} + \frac{\langle 0 | p_k^s | m \rangle \langle m | p_i^s | 0 \rangle}{E_0 - E_m - \hbar\omega} \right]_j \times \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (2.1)$$

где  $\mathbf{p}^s = -i\hbar\nabla^s$  — оператор импульса, действующий на координаты  $s$ -го заряда,  $|0\rangle$  — волновая функция начального и совпадающего с ним конечного состояния (рассматриваются только упругие процессы),  $|m\rangle$  — волновые функции промежуточных состояний, которые могут принадлежать как дискретному, так и непрерывному спектру. Из (2.1) видно, откуда возникает анизотропия восприимчивости: хотя волновые функции начального (и конечного) состояния искажаются мало, волновые функции промежуточных состояний  $|m\rangle$  могут быть искажены очень сильно, и произведение матричных элементов  $\langle 0 | p_i | m \rangle \langle m | p_k | 0 \rangle$  не сводится к изотропной составляющей. Отметим, что в рассматриваемом дипольном приближении собственные поляризации для тензора (2.1) оказываются линейными; действительная часть (2.1) дает двупреломление, а мнимая — дихроизм (круговые двупреломление и дихроизм отсутствуют); кроме того, дисперсионные поправки слабо зависят от переданного импульса (т. е. от рефлекса  $\mathbf{H}$ ). Последнее обстоятельство связано с тем, что для радиусов  $a_K$  и  $a_L$  оболочек К и L с энергиями, лежащими в рентгеновской области, выполняется соотношение  $a_K, a_L \ll \lambda$ , и эффекты пространственной дисперсии слабы.

Многочисленные экспериментальные [6, 20, 21, 65, 66] (см. рис. 9) и теоретические [26, 61, 64] исследования показывают, что дисперсионные поправки и связанная с ними анизотропия восприимчивости макси-

мальны в непосредственной близости ( $\sim 10$  эВ) от края поглощения (так называемая XANES—X-ray Absorption Near Edge Structure). Ниже края поглощения основной вклад в анизотропию дают связанные возбужденные состояния, а непосредственно выше края — блоховские состояния электрона в кристалле.

Существенно выше края поглощения ( $\gtrsim 100$  эВ) в области EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) анизотропия сильно убывает с ростом энергии фотонов, но еще заметна на эксперименте [20, 21]. В этой области возможно полуфеноменологическое вычисление  $\Delta\hat{\chi}$ , при

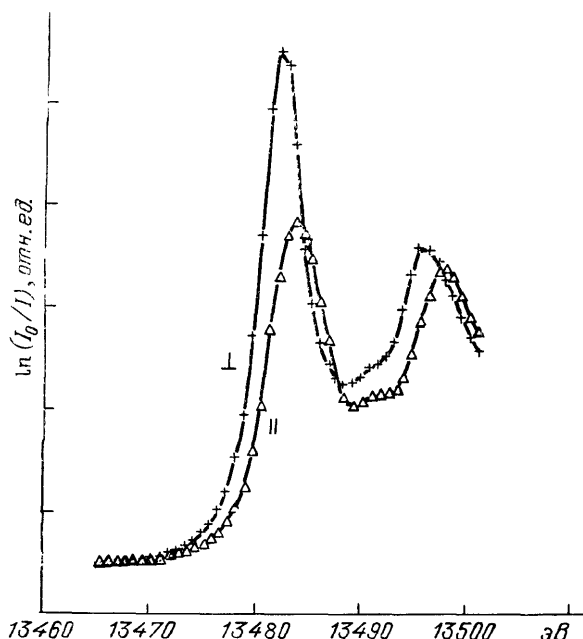


Рис. 9. Коэффициенты поглощения рентгеновских лучей в  $\text{KBrO}_3$  с поляризацией, параллельной и перпендикулярной оси третьего порядка вблизи К-края брома [20].

котором в промежуточных состояниях учитывается дифракция фотоэлектронов на атомах, окружающих данный атом, а фотоэлектроны, как известно, вылетают преимущественно в направлении поляризации падающего рентгеновского фотона. Эта дифракция сильно зависит от расстояний до ближайших атомов и от вида этих атомов; в результате анизотропия окружения данного атома заметно сказывается на анизотропии  $\Delta\hat{\chi}$  в области EXAFS. Таким образом, хотя физические причины возникновения анизотропии восприимчивости вблизи краев рентгеновского поглощения довольно очевидны, их количественный расчет достаточно сложен [61, 64]. Поэтому естественно провести симметричный анализ тензора восприимчивости, который не связан с деталями модельных предположений.

**2.2. Симметричные ограничения на тензор рентгеновской восприимчивости кристалла.** Рентгеновская восприимчивость в немагнитных кристаллах описывается симметричным тензором второго ранга  $\chi_{ik}(\mathbf{r}) = \chi_{ki}(\mathbf{r})$ , который остается неизменным при любых преобразованиях, входящих в пространственную группу кристалла. Легче всего найти общий вид такого тензора, если воспользоваться следующими наглядными соображениями. Атомы в кристалле занимают определенную правильную систему точек (одну или несколько). Поэтому достаточно: 1) определить тензор  $\hat{\chi}^b(\mathbf{r})$  только для одного базисного атома данной правильной системы точек с учетом точечной симметрии поло-

жения этого атома; 2) после этого тензор  $\hat{\chi}^j(\mathbf{r})$  для  $j$ -го атома правильной системы точек получается путем преобразования тензора  $\hat{\chi}^b(\mathbf{r})$  под действием операции симметрии, связывающей положения базисного и  $j$ -го атома в кристалле; 3) полный тензор  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  при таком подходе является суммой по всем атомам данной правильной системы точек и по всем правильным системам точек, занятых в данном кристалле атомами.

Таким образом, для нахождения общего вида  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  нам надо знать, как преобразуется тензор  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  под действием операций симметрии. Пусть в пространстве задан некоторый тензор  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$ . Если осуществить некоторое преобразование  $g$ , включающее точечное преобразование (поворот или отражение) и трансляцию, то получающийся в результате этого преобразования тензор  $\hat{\chi}_g(\mathbf{r})$  следующим образом связан с исходным тензором  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  (см., например, [67, 68]):

$$\hat{\chi}_g(\mathbf{r}) = \hat{R}_g \hat{\chi}(\mathbf{r}_g) \hat{R}_g^{-1}, \quad (2.2)$$

где  $\mathbf{r}_g = \hat{R}_g^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_g)$ ,  $\hat{R}_g$  — матрица точечного преобразования,  $\mathbf{a}_g$  — вектор трансляции. Если тензор  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  инвариантен относительно преобразования  $g$ , то  $\hat{\chi}_g(\mathbf{r}) = \hat{\chi}(\mathbf{r})$ .

Если базисный атом расположен в точке с симметрией, описываемой точечной группой  $G$ , то тензор  $\hat{\chi}^b(\mathbf{r})$ , описывающий восприимчивость этого атома, очевидно, не изменяется при любом преобразовании  $g$ , принадлежащем этой группе, т. е. в этом случае  $\hat{\chi}^b(\mathbf{r})$  должно удовлетворять следующему, вытекающему из (2.2), соотношению:

$$\hat{\chi}^b(\mathbf{r}) = \hat{R}_g \hat{\chi}^b(\hat{R}_g^{-1}\mathbf{r}) \hat{R}_g^{-1}. \quad (2.3)$$

Получить тензор, удовлетворяющий этому соотношению, можно путем усреднения произвольного симметричного тензора  $\hat{\alpha}(\mathbf{r})$  по группе  $G$  [68]:

$$\hat{\chi}^b(\mathbf{r}) = \langle \hat{\alpha}(\mathbf{r}) \rangle_G \equiv \sum_{g \in G} \hat{R}_g \hat{\alpha}(\hat{R}_g^{-1}\mathbf{r}) \hat{R}_g^{-1}. \quad (2.4)$$

Определив таким образом наиболее общий вид  $\hat{\chi}^b(\mathbf{r})$  для базисного атома, с помощью соотношения (2.2) легко находим тензоры  $\hat{\chi}^j(\mathbf{r})$  для остальных атомов данной правильной системы точек, используя в качестве  $g$  операции симметрии  $g_j$ , связывающие положение  $j$ -го атома с базисным атомом. Разумеется, все эти операции должны быть проделаны для всех правильных систем точек, в которых в данном кристалле находятся атомы.

В результате получим наиболее общий вид тензора  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$ , совместимый с пространственной группой симметрии кристалла. При этом автоматически оказывается учтенным и отличие электронной плотности атомов от сферически симметричной (будучи скаляром, электронная плотность пропорциональна шпуру тензора  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$ ).

По своим симметричным свойствам тензор  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  радикально отличается от тензора восприимчивости в оптическом диапазоне; в частности, даже в кубических кристаллах  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  не сводится к скаляру. Локальная симметрия  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  различна в различных точках элементарной ячейки. Отметим, что общий вид  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  можно найти и без обращения к конкретной атомной структуре кристалла [22], однако используемый выше подход более нагляден и, кроме того, позволяет выделить вклад в  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  от атомов разного сорта.

Используя кроме симметричных свойств еще и физическую природу происхождения анизотропии, можно получить дальнейшие ограничения на  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$ . Так, учитывая малость радиуса  $K$  и  $L$  оболочек, в дисперсионной части  $\hat{\chi}^v(\mathbf{r})$  можно положить в (2.3) и (2.4)  $\mathbf{r} = 0$ , что существенно упрощает все вычисления, а в случае расположения атомов в частных позициях может изменить вид тензора  $\hat{\chi}(\mathbf{r})$  (примеры приведены ниже).

Для нахождения интенсивности и поляризационных свойств отдельных рефлексов удобно ввести тензорную структурную амплитуду  $\hat{F}^{\mathbf{H}}$ , пропорциональную фурье-гармонике восприимчивости  $\hat{\chi}^{\mathbf{H}}$ :

$$\hat{F}^{\mathbf{H}} = -\frac{\pi V}{r_e \lambda^2} \hat{\chi}^{\mathbf{H}} \equiv -\frac{\pi}{r_e \lambda^2} \int \hat{\chi}(\mathbf{r}) \exp(-i \mathbf{H} \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.5)$$

где все обозначения как в (1.2). Амплитуду  $\hat{F}^{\mathbf{H}}$  полезно разделить на изотропную и собственно анизотропную части,

$$\hat{F}^{\mathbf{H}} = F_{\mathbf{H}} \hat{I} + \Delta \hat{F}^{\mathbf{H}}, \quad (2.6)$$

где  $F_{\mathbf{H}}$  — обычная структурная амплитуда,  $\hat{I}$  — единичная матрица, а анизотропная часть определена так, что  $\text{Sp}(\Delta \hat{F}^{\mathbf{H}}) = 0$ .

Симметричные ограничения на  $\chi(\mathbf{r})$  сказываются на тензорном виде  $\hat{F}^{\mathbf{H}}$  (см. [22, 23]). Для произвольного вектора  $\mathbf{H}$  никаких ограничений на вид  $\Delta \hat{F}^{\mathbf{H}}$  нет, и, как всякий симметричный бесследовый тензор,  $\Delta \hat{F}^{\mathbf{H}}$  имеет пять независимых комплексных компонент. Однако если вектор  $\mathbf{H}$  направлен вдоль осей симметрии, то число независимых компонент тензора  $\Delta \hat{F}^{\mathbf{H}}$  уменьшается (ось  $z$  выбираем вдоль  $\mathbf{H}$ ): если  $\mathbf{H}$  параллелен оси 2, то  $\Delta F_{xz}^{\mathbf{H}} = \Delta F_{yz}^{\mathbf{H}} = 0$ ; если  $\mathbf{H}$  параллелен осям 3, 4, 6, то  $\Delta F_{xy}^{\mathbf{H}} = \Delta F_{xz}^{\mathbf{H}} = \Delta F_{yz}^{\mathbf{H}} = 0$  и  $\Delta F_{xx}^{\mathbf{H}} = \Delta F_{yy}^{\mathbf{H}} = -1/2 \Delta F_{zz}^{\mathbf{H}}$ . Если  $\mathbf{H}$  параллелен плоскости зеркального отражения, то, выбирая ось  $x$  перпендикулярно этой плоскости, имеем  $\Delta F_{xy}^{\mathbf{H}} = \Delta F_{xz}^{\mathbf{H}} = 0$ .

Интенсивность и поляризационные свойства рефлексов с тензорной структурной амплитудой (2.6) могут быть найдены и в кинематическом, и в двухволновом динамическом приближении аналогично тому, как это уже делалось при рассмотрении дифракции мёссбауэровского излучения [69] и дифракции света в жидких кристаллах [70]. В большинстве случаев  $\Delta \hat{F}^{\mathbf{H}}$  мало по сравнению с  $F_{\mathbf{H}}$ , и все рассмотрение может быть проведено по теории возмущений. Наибольший интерес представляют рассмотренные в следующем разделе случаи, когда  $F_{\mathbf{H}} = 0$  по симметричным соображениям («запрещенные» рефлексы), а  $\Delta \hat{F}^{\mathbf{H}} \neq 0$ , т. е. учет анизотропии снимает погасание рефлексов.

**2.3. Запрещенные рефлексы.** Хорошо известно, что при дифракции рентгеновских лучей на кристаллах наблюдаются регулярные погасания рефлексов, т. е. систематическое обращение в нуль структурных амплитуд некоторых рефлексов из-за того, что атомы внутри элементарной ячейки находятся в нескольких симметрично связанных положениях [32]. Совокупность таких запрещенных рефлексов определяется пространственной группой кристалла и приведена в [71]. Однако приведенные в [71] условия, ограничивающие возможные рефлексы, получены в предположении, что атомные факторы одинаковы у всех атомов, находящихся в эквивалентных положениях, т. е. фактически предполагается, что образующие кристалл атомы сферически симметричны. На самом деле из-за взаимодействия друг с другом атомы в кристалле не сферически симметричны, что приводит к их неэквивалентности в рассеянии и может приводить к появлению «запрещенных» рефлексов. Более точно

можно сказать, что атомы, находящиеся в эквивалентных кристаллографических положениях, могут быть неэквивалентны с точки зрения их взаимодействия с электромагнитным (рентгеновским) излучением, и амплитуды рассеяния на таких атомах могут оказаться различными.

Имеется несколько физических причин, приводящих к различию амплитуд рассеяния на кристаллографически эквивалентных атомах. Наиболее известными причинами являются несферичность электронной плотности атома, а также анизотропия и ангармонизм тепловых колебаний атомов [72—74] (хорошо известный пример — рефлекс 222 в кристаллах со структурой алмаза). Другой пример дает зависимость амплитуды рассеяния от спина электрона, которая приводит к очень слабым магнитным рефлексам при дифракции рентгеновских лучей в магнитоупорядоченных кристаллах (см. раздел 2.4). Анизотропия рентгеновской восприимчивости также может приводить к различию амплитуд рассеяния, так как кристаллографически эквивалентные атомы могут быть связаны операцией симметрии, содержащей поворот, а при поворотах тензор анизотропии может изменить ориентацию своих главных осей.

Условия, определяющие для кристалла с данной пространственной группой возможные брэгговские рефлексы, могут быть, как известно, различны для общих и частных положений атомов в элементарной ячейке [32, 71]. Если учитывать несферичность атомной электронной плотности или тепловое движение атомов, то условия для частных положений нарушаются, а для общих — нет. Однако последние могут тоже нарушаться, если принять во внимание анизотропию восприимчивости. Ясно, что те условия, которые связаны с центрированностью решеток, остаются справедливыми и в этом случае, так как при чистых трансляциях трансформационные свойства тензоров и скаляров совпадают. Но ограничения на рефлексы, возникающие из-за наличия плоскостей скольжения или винтовых осей, больше не справедливы [20—24], и мы это строго докажем, но вначале дадим наглядную интерпретацию этого явления.

Пусть в кристалле имеется плоскость скольжения (рис. 10, *a*), т. е. например, отражение относительно плоскости  $yz$  и смещения вдоль оси  $z$

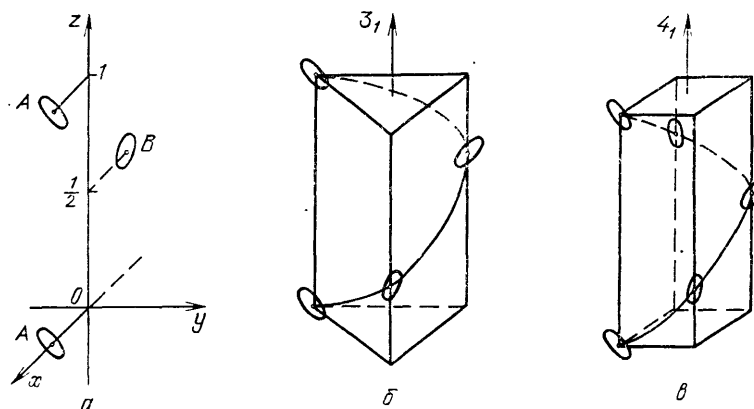


Рис. 10. Действие элементов симметрии на атомы, обладающие анизотропией восприимчивости. *a* — Плоскость скольжения  $c$ , *б* — ось  $3_1$ , *в* — ось  $4_1$

на полпериода оставляет структуру неизменной. Атомы в положениях *A* и *B* кристаллографически эквивалентны, но соответствующие им тензоры восприимчивости (символически изображенные эллипсоидами) повернуты друг относительно друга, и эти атомы по-разному поляризуются полем падающей рентгеновской волны. В случае рефлексов  $00l$  с  $l = 2n+1$  эти атомы рассеивают в противофазе; если не учитывать анизотропию вос-

приимчивости, то рассеянные от этих атомов волны гасят друг друга, и рефлексы оказываются запрещенными; при учете анизотропии волны, рассеянные атомами  $A$  и  $B$ , отличаются и по интенсивности, и по поляризации, вследствие чего погасание рефлексов снимается. Аналогичный механизм может приводить к снятию запретов с рефлексов, «запрещенных» винтовыми осями (рис. 10, б, в).

Перейдем теперь к детальному симметричному рассмотрению. При всех преобразованиях симметрии, входящих в пространственную группу кристалла, кристалл переходит сам в себя; следовательно, структурные амплитуды  $\hat{F}^H$  должны оставаться неизменными. В случае рассмотренной выше плоскости скользящего отражения смещение на полпериода вдоль оси  $z$  приводит к умножению структурной амплитуды рефлекса  $0kl$  на  $\exp(i\pi l) = (-1)^l$ ; отражение относительно плоскости  $yz$  (т. е.  $x \rightarrow -x$ ) приводит к изменению знака  $x$ - и  $xz$ -компонент тензорной структурной амплитуды. Из условия инвариантности структурной амплитуды при рассматриваемом преобразовании получаем, что для  $l = 2n$  (разрешенные рефлексы) в структурной амплитуде должны зануляться  $x$ - и  $xz$ -компоненты, тогда как для  $l = 2n + 1$  («запрещенные» рефлексы), наоборот, зануляются все компоненты, кроме  $x$  и  $xz$ . Таким образом, симметрия не требует полного обращения в нуль структурных амплитуд рефлексов с  $l = 2n + 1$ , и запрещение с этих рефлексов снимается, но только при наличии анизотропии восприимчивости.

Аналогичным образом можно рассмотреть рефлексы, «запрещенные» из-за наличия винтовых осей. Пусть винтовая ось  $N_j$  направлена вдоль оси  $z$ , т. е. кристалл инвариантен относительно совместной операции поворота на угол  $\varphi = 2\pi/N$  относительно оси  $z$  и смещения вдоль  $z$  на  $j/N$  части периода ( $N = 2, 3, 4, 6; j = 1, \dots, N-1$ ). При повороте тензорная структурная амплитуда  $\hat{F}^{00l}$  преобразуется в  $R_\varphi \hat{F}^{00l} \hat{R}_\varphi^{-1}$ , а при смещении приобретает дополнительный множитель  $\exp(2\pi i l j / N)$ ; следовательно, инвариантность  $\hat{F}^{00l}$  относительно этой операции требует выполнения условия

$$\hat{F}^{00l} = \hat{R}_\varphi \hat{F}^{00l} \hat{R}_\varphi^{-1} \exp(2\pi i l j N^{-1}), \quad (2.7)$$

где матрица поворота  $\hat{R}_\varphi$  имеет вид

$$\hat{R}_\varphi = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Если анизотропия отсутствует, то из (2.7) следует, что  $\hat{F}^{00l} = 0$  при  $l \neq Nn/j$  ( $n$  — произвольное целое число), т. е. все эти рефлексы являются запрещенными [71]. С учетом анизотропии из (2.7) следует, что запрет с этих рефлексов, за редким исключением, снимается (табл. III). Из табл. III видно, что для каждого «запрещенного» рефлекса все компоненты тензора  $\hat{F}^H$  выражаются максимум через два независимых параметра,  $F_1$  и  $F_2$ ; эти параметры могут быть комплексными. Во избежание недоразумения подчеркнем, что эти параметры различны для различных рефлексов; они зависят, вообще говоря, от длины волны, а их численное значение может быть вычислено из микроскопической теории. Из рассматриваемой здесь феноменологической теории следует лишь, что эти параметры не обязаны быть равными нулю, если в кристалле есть только винтовая ось или только плоскость скользящего отражения. Наличие других элементов симметрии может привести к дополнительным соотношениям между параметрами  $F_1$  и  $F_2$  и, в частности, обратить их (или один из них) в нуль. Например, в кубических кристаллах остаются запрещенными рефлексы с  $|h| = |k| = |l|$  [23]. Кроме того, эти параметры могут зануляться из-за



того, что атомы, которые дают вклад в анизотропию, находятся в положениях с достаточно высокой симметрией.

Из табл. III следует, что для различных типов рефлексов тензор  $\hat{F}^H$  имеет различный вид, и можно ожидать, что свойства этих типов рефлексов также различны (см. ниже). Интересно отметить, что некоторые рефлексы, связанные с винтовыми осями, остаются запрещенными. Так, в случае оси  $6_3$  обязательное наличие оси 3 приводит к отсутствию анизотропии в плоскости  $xu$ , и поэтому запрет на рефлексы с  $l=2n+1$  не снимается и для них  $\hat{F}^{00l}=0$ ; для осей  $6_1$  и  $6_2$  рефлексы с  $l=6n+3$  также

Таблица III. Компоненты тензорной структурной амплитуды  $\hat{F}^H$  и индекс  $l$  для «запрещенных» рефлексов (остальные компоненты:  $F_{yy}^H = -F_{xx}^H$ ,  $F_{zz}^H = 0$ ,  $F_{yx}^H = F_{xy}^H$ ,  $F_{zy}^H = F_{yz}^H$ ,  $F_{zx}^H = F_{xz}^H$ ),  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Винт. оси или плоск. скольж.	$F_{xx}^H$	$F_{xy}^H$	$F_{xz}^H$	$F_{yz}^H$	$l$	Тип рефлексов
$2_1$	0	0	$F_1$	$F_2$	$2n+1$	I
$3_1$	$F_2$	$\pm iF_2$	$F_1$	$\mp iF_1$	$3n+1$	II
$3_2$	$F_2$	$\mp iF_2$	$F_1$	$\pm iF_1$	$3n+1$	II
$4_1$	0	0	$F_1$	$\mp iF_1$	$4n+1$	I
$4_2$	$F_1$	$F_2$	0	0	$4n+2$	II
$4_3$	$F_1$	$F_2$	0	0	$2n+1$	II
$4_4$	0	0	$F_1$	$\pm iF_1$	$4n+1$	I
$4_5$	$F_1$	$F_2$	0	0	$4n+2$	II
$6_1$	0	0	$F_1$	$\mp iF_1$	$6n+1$	I
$6_2$	$F_1$	$\mp iF_1$	0	0	$6n+2$	II
$6_3$	0	0	0	0	$6n+3$	
$6_4$	$F_1$	$\mp iF_1$	0	0	$3n+1$	II
$6_5$	0	0	0	0	$2n+1$	
$6_6$	$F_1$	$\pm iF_1$	0	0	$3n+1$	II
$6_7$	0	0	$F_1$	$\pm iF_1$	$6n+1$	I
$6_8$	$F_1$	$\pm iF_1$	0	0	$6n+2$	II
$6_9$	0	0	0	0	$6n+3$	
$c$	0	$F_1$	$F_2$	0	$2n+1$	II

остаются запрещенными. При учете квадрупольного взаимодействия эти рефлексы могут стать разрешенными, и это обстоятельство может быть использовано для обнаружения квадрупольного механизма взаимодействия рентгеновских лучей с атомами кристаллов.

Учет анизотропии изменяет интенсивность и особенно поляризационные свойства рефлексов. Для разрешенных рефлексов эти изменения имеют характер поправок (исключение составляет возможность  $90^\circ$  рассеяния  $\pi$ -поляризованной волны) и могут быть найдены как в кинематической, так и в динамической теории. Для запрещенных рефлексов поляризационные свойства радикальным образом отличаются и оказываются весьма необычными: например,  $\sigma$ -поляризованная падающая волна может дать  $\pi$ -поляризованную дифрагировавшую и наоборот. Так как структурная амплитуда этих рефлексов довольно мала, для них можно использовать кинематическое приближение. В этом приближении амплитуда дифрагировавшей волны дается выражением

$$E^d = A \hat{F}^H E^i, \quad (2.9)$$

где множитель  $A$  такой же, как в (1.3). Выражение (2.9) позволяет вычислить интенсивность и поляризацию дифрагировавшей волны при любой поляризации падающей. Для этого удобно ввести величину  $I_{\alpha\beta}$ , описывающую интенсивность компоненты с произвольной ( $\beta$ ) поляризацией в отраженном пучке при произвольной ( $\alpha$ ) поляризации падающего

пучка:

$$I_{\alpha\beta} = |A|^2 |\beta^* \hat{F}^H \alpha|^2, \quad (2.10)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — векторы соответствующих поляризаций. Поляризация дифрагировавшей волны определяется единичным вектором  $\beta^d = \mathbf{E}^d / |\mathbf{E}^d|$ . Отметим, что вектор  $\beta^d$  может зависеть, а может и не зависеть от вектора поляризации падающего пучка (см. ниже).

Если падающее излучение  $\sigma$ - или  $\pi$ -поляризовано или неполяризовано, то интенсивность рефлекса определяется соответственно соотношениями

$$I_\sigma = I_{\sigma\sigma} + I_{\sigma\pi}, \quad (2.11)$$

$$I_\pi = I_{\pi\sigma} + I_{\pi\pi}, \quad (2.12)$$

$$I_H = \frac{1}{2} (I_\sigma + I_\pi), \quad (2.13)$$

где

$$I_{\sigma\sigma} = |A|^2 |\sigma \hat{F}^H \sigma|^2, \quad (2.14)$$

$$I_{\pi\pi} = |A|^2 |\pi_H \hat{F}^H \pi_0|^2,$$

$$I_{\sigma\pi} = I_{\pi\sigma} = |A|^2 |\pi_H \hat{F}^H \sigma|^2 = |A|^2 |\sigma \hat{F}^H \pi_0|^2.$$

Рассмотрим, например, свойства запрещенных рефлексов, связанных с наличием винтовых осей. Из табл. III видно, что все эти рефлексы можно разделить на два основных типа: тип I — рефлексы, для которых  $F_{xx}^H$ ,  $F_{yy}^H$  и  $F_{xy}^H$  равны нулю, и тип II — все остальные рефлексы. Покажем, что поляризационные свойства этих типов рефлексов существенно различны.

Наиболее простые поляризационные свойства у рефлексов I типа. Из выражений (2.9) — (2.14) и из табл. III сразу следует, что для всех рефлексов I типа  $I_{\sigma\sigma} = I_{\pi\pi} = 0$  и  $I_H = I_\sigma = I_\pi = I_{\sigma\pi} = I_{\pi\sigma}$ , причем для оси 2, интенсивность  $I_{\sigma\pi}$  дается выражением

$$I_{\sigma\pi} = |A|^2 \cos^2 \Theta_B [|F_1|^2 \sin^2 \varphi_H + |F_2|^2 \cos^2 \varphi_H - \operatorname{Re} (F_1 F_2^*) \sin 2\varphi_H], \quad (2.15)$$

где  $\varphi_H$  — азимутальный угол поворота относительно вектора  $\mathbf{H}$  (ось  $z$ ), отсчитываемый от оси  $x$ , а для осей 4<sub>1</sub>, 4<sub>3</sub>, 6<sub>1</sub>, 6<sub>5</sub>  $I_{\sigma\pi}$  имеет более простой вид:

$$I_{\sigma\pi} = |A|^2 \cos^2 \Theta_B |F_1|^2. \quad (2.16)$$

Таким образом, для рефлексов I типа  $\sigma$ -поляризованный падающий пучок всегда дает  $\pi$ -поляризованный дифрагировавший, и наоборот; неполяризованный пучок дает также неполяризованный дифрагировавший. Рефлексы I типа пропадают при дифракции назад (так как при этом  $\cos \Theta_B = 0$ ). В случае осей 4<sub>1</sub>, 4<sub>3</sub>, 6<sub>1</sub> и 6<sub>5</sub> интенсивность этих рефлексов не зависит от азимутального угла  $\varphi_H$ .

Интенсивность рефлексов II типа для различных винтовых осей определяется следующими выражениями, вытекающими из (2.9) — (2.14) и табл. III:

для осей 3<sub>1</sub> и 3<sub>3</sub>

$$I_\sigma = |A|^2 \{ |F_1|^2 \cos^2 \Theta_B + |F_2|^2 (1 + \sin^2 \Theta_B) + \sin 2\Theta_B [\operatorname{Re} (F_1 F_2^*) \cos 3\varphi_H \mp \operatorname{Im} (F_1 F_2^*) \sin 3\varphi_H] \}, \quad (2.17)$$

$$I_\pi = I_\sigma - |A|^2 |F_2|^2 \cos^2 \Theta_B (1 + \sin^2 \Theta_B);$$

для осей  $4_1$ ,  $4_2$  и  $4_3$

$$I_\sigma = |A|^2 |F_1|^2 B(\varphi_H) + |F_2|^2 C(\varphi_H) + \operatorname{Re}(F_1 F_2^*) \cos^2 \Theta_B \sin 4\varphi_H, \quad (2.18)$$

$$I_\pi = |A|^2 \sin^2 \Theta_B |F_1|^2 C(\varphi_H) + |F_2|^2 B(\varphi_H) - \operatorname{Re}(F_1 F_2^*) \cos^2 \Theta_B \sin 4\varphi_H,$$

$$B(\varphi_H) = 1 - \cos^2 \Theta_B \sin^2 2\varphi_H,$$

$$C(\varphi_H) = 1 - \cos^2 \Theta_B \cos^2 2\varphi_H;$$

для осей  $6_1$ ,  $6_2$ ,  $6_4$  и  $6_5$

$$I_\sigma = |A|^2 |F_1|^2 (1 + \sin^2 \Theta_B), \quad (2.19)$$

$$I_\pi = I_\sigma \sin^2 \Theta_B$$

(верхний и нижний знаки в (2.17) соответствуют двум возможностям  $F_{xy}^H = \pm iF_{xx}^H$  (см. табл. III)). В отличие от рефлексов I типа интенсивность рефлексов II типа различна для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных пучков. Как видно из (2.18) и (2.19), при малых брэгговских углах сильнее отражаются  $\sigma$ -поляризованные пучки. Для винтовых осей третьего и шестого порядков рефлексы II типа оказываются «киральными», т. е. их интенсивность различна для правой и левой круговых поляризаций падающего пучка. Например, при брэгговском отражении назад ( $\Theta_B = 90^\circ$ ) из выражений (2.9) следует, что только компонента с определенной круговой поляризацией (правой, если  $F_{xy}^H = -iF_{xx}^H$ , и левой, если  $F_{xy}^H = iF_{xx}^H$ ) испытывает дифракционное отражение (причем дифрагировавший пучок имеет такую же круговую поляризацию). Волна с противоположной круговой поляризацией не дифрагирует. Таким образом, при  $\Theta_B = 90^\circ$  кристалл «работает» как круговой поляризатор, и при любой поляризации падающего пучка дифрагировавший пучок имеет определенную круговую поляризацию, зависящую от индекса  $l$  и от того, правая ли или левая винтовая ось (см. табл. III). При  $\Theta_B < 90^\circ$  поляризации для этих рефлексов II типа являются не круговыми, а эллиптическими. Для винтовых осей шестого порядка отношение осей эллипса поляризации равно  $\sin \Theta_B$ , причем большая ось эллипса параллельна вектору  $\sigma$ , а знак поляризации (правая или левая) определяются, как и для  $\Theta_B = 90^\circ$ . Для винтовых осей третьего порядка отношение осей эллипса поляризации сложным образом зависит от  $\Theta_B$  и от соотношения между параметрами  $F_1$  и  $F_2$ , и мы его приводить не будем. Для винтовых осей четвертого порядка рефлексы II типа киралины, если  $\operatorname{Im}(F_1 F_2^*) \neq 0$ .

Следует особо отметить наличие азимутальной зависимости интенсивности «запрещенных» рефлексов (даже в случае неполяризованного падающего пучка). Изучение этой зависимости позволяет определить величину компонент тензора  $\hat{F}^H$  (параметров  $F_1$  и  $F_2$ ) и их относительную фазу. В [23] было показано, что из азимутальной зависимости могут быть селективно определены координаты атомов, дающих вклад в анизотропию.

Поясним сказанное на примере рефлексов  $00l$  ( $l = 2n+1$ ) в кристалле с пространственной группой  $P2_13$ , содержащем 4 атома в частных позициях (a) с точечной симметрией  $3$  и с координатами  $x, x, x; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x, \bar{x}; \frac{1}{2} - x, \bar{x}, \frac{1}{2} + x; \bar{x}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - x$ . Анизотропия восприимчивости атомов, находящихся в позициях с такой симметрией, характеризуется разностью восприимчивостей  $\chi_{||} - \chi_{\perp}$  (параллельно и перпендикулярно оси 3). Следовательно, обе величины  $F_1$  и  $F_2$  выражаются через  $\chi - \chi_{\perp}$  и через координату  $x$ ; можно показать, что  $F_1/F_2 = i \operatorname{tg}(2\pi lx)$ ,

и интенсивность рефлексов  $00l$  ( $l = 2n+1$ ) оказывается пропорциональной  $(1 - \cos 4\pi l x \cos 2\varphi_H)$ . Таким образом, из азимутальной зависимости интенсивности «запрещенных» рефлексов может быть определена координата  $x$ , что и было убедительно продемонстрировано в недавней работе [21] (рис. 11) на примере кристалла  $\text{NaBrO}_3$ .

Кроме определения координат атомов возможны и другие применения «запрещенных» рефлексов: они могут быть полезны при интерпретации спектров вблизи края поглощения (причем в отличие от коэффициента поглощения эти рефлексы дают информацию не только о мнимой,

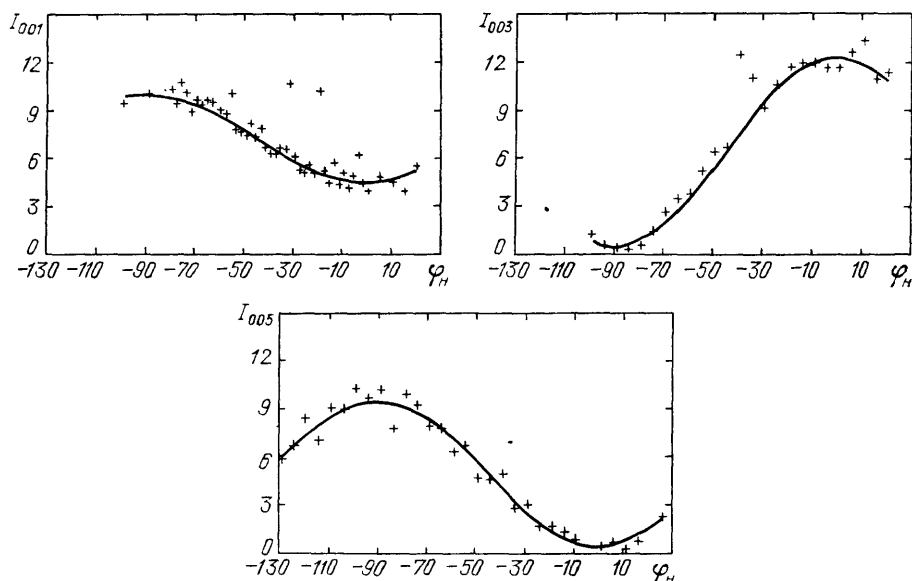


Рис. 11. Наблюдаемая (точки) и вычисленная (линии) азимутальные зависимости интенсивности «запрещенных» рефлексов  $00l$  ( $l = 1, 3, 5$ ) в  $\text{NaBrO}_3$  [21]; неполяризованное излучение с энергией 13474 эВ (ниже К-края Вг). Точки, сильно отклоняющиеся от теоретической кривой, соответствуют рефлексам Реннигера

но и о действительной части атомных факторов, к тому же не усредненную по элементарной ячейке); с их помощью можно определять фазы некоторых рефлектов [75]; с помощью поляризационных измерений может быть установлена абсолютная конфигурация право-левонесимметричных кристаллов; в кубических кристаллах эти рефлексы дают, по-видимому, единственную возможность наблюдения анизотропии восприимчивости отдельных атомов.

Помехой для наблюдения «запрещенных» рефлексов могут быть так называемые рефлексы Реннигера, т. е. окольное возбуждение «запрещенных» рефлексов через разрешенные рефлексы [72, 76]. Однако такая многоволновая дифракция возможна только при определенных азимутальных углах  $\varphi_H$ , которые легко вычисляются (именно из-за окольного возбуждения возникли отдельные выбросы точек на кривых рис. 11). Более того, благодаря интерференции с рефлексами Реннигера может быть определена фаза тензорной структурной амплитуды «запрещенных» рефлексов (для скалярного случая такой метод решения «фазовой проблемы» уже применялся [77–79]).

**2.4. Магнитное рассеяние.** Главный вклад в рассеяние рентгеновских лучей дает томсоновский механизм рассеяния на заряде электронов, который на классическом языке можно представить как дипольное излучение заряда, ускоренного в электрическом поле рентгеновской

волны. Однако кроме заряда электрон обладает собственным магнитным моментом  $-2\mu_B s$ , а также магнитным моментом, связанным с орбитальным движением в атоме,  $-\mu_B l$ , и взаимодействие рентгеновской волны с этими моментами приводит к магнитному рассеянию, чувствительному к магнитной структуре вещества. Основные каналы такого магнитного рассеяния на классическом языке можно представить следующим образом (рис. 12) [25, 80]: 1) магнитно-квадрупольное излучение магнитного момента  $\mu$ , движущегося ускоренно за счет силы  $-eE$ ; 2) электрическое дипольное излучение заряда, ускоренного силой  $-\nabla(\mu H)$ ; 3) магнитное дипольное излучение магнитного момента за счет поворота моментом сил  $[\mu H]$ . Кроме того, в магнитном рассеянии могут проявляться резонансные явления [81], так называемое «резонансное магнитное рассеяние», идущее через атомные уровни, расщепленные обменным взаимодействием (аналог зеемановского расщепления).

Из сказанного ясно, что поляризационные свойства магнитного рассеяния рентгеновских лучей резко отличаются от рэлеевского рассеяния. На феноменологическом языке наличие магнитного рассеяния соответствует добавкам к восприимчивости вида  $ie_{jkn}S_n$  ( $e_{jkn}$  — абсолютно антисимметричный единичный тензор) и к добавкам, явно зависящим от волновых векторов падающей и рассеянной волн (что эквивалентно учету пространственной дисперсии). Такого рода члены приводят, в частности, к различному рассеянию право- и левополяризованных волн и к вращению плоскости поляризации (эффекту Фарадея).

По абсолютной величине амплитуда магнитного рассеяния на одном электроны оказывается в  $\hbar\omega/(mc^2)$  раз меньше амплитуды рэлеевского рассеяния, а некоторые члены — в  $p/(mc)$  раз меньше, где  $p$  — характерный импульс электрона в атоме; для рентгеновской области обе оценки дают  $\sim 10^{-2}$ . С учетом того, что в атоме только небольшое количество электронов имеют нескомпенсированный момент и что формфактор для таких электронов быстро падает с ростом угла рассеяния, получаем, что амплитуда магнитного рассеяния меньше рэлеевского на атоме на 3–4 порядка. Использование синхротронного излучения, несмотря на слабость магнитного рассеяния, позволяет сделать его рабочим методом исследования магнитных свойств твердых тел.

Для количественного описания магнитного рассеяния необходим, естественно, квантовомеханический подход. Хотя соответствующие формулы, содержащие зависимость сечения рассеяния фотона от спина электрона, были известны достаточно давно (как для свободных, так и для связанных электронов [33, 80, 82]), предложение об их использовании для исследования магнитных свойств твердых тел было сделано только в 1970 г. [24]. Так, для свободного электрона (комптоновское рассеяние) из-за наличия спина сечение рассеяния оказывается различным для параллельной (+) и антипараллельной (–) спину круговых поляризаций [33]:

$$\frac{d\sigma^\pm}{d\sigma} = \frac{r_e^2}{2} \left[ 1 + \cos^2 \theta \pm \frac{2\hbar\omega}{mc^2} \cos \theta (\cos \theta - 1) \right], \quad (2.20)$$

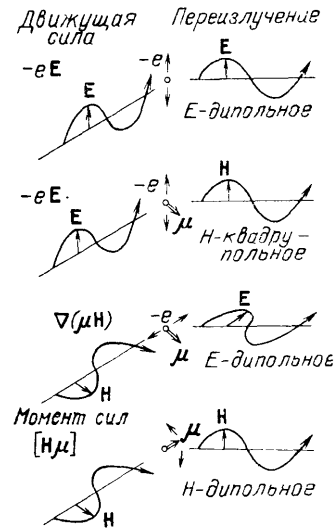


Рис. 12. Магнитное рассеяние фотона на атоме в рамках классической электродинамики [25]

где  $\theta$  — угол рассеяния (формула (2.20) получена в нерелятивистском приближении  $\hbar\omega \ll mc^2$ ). Первые эксперименты по комптоновскому рассеянию поляризованных рентгеновских лучей были проведены Сакаи и Оно с использованием  $\gamma$ -квантов с энергией 122 кэВ от радиоактивного источника  $\text{Co}^{57}$  [83]. Эта работа показала принципиальную возможность наблюдения магнитного комптоновского рассеяния и его применения для изучения распределения по импульсам поляризованных электронов в кристалле (см. также [84, 85], где использовалось поляризованное по кругу синхротронное излучение). Более детально теория магнитного комптоновского рассеяния на связанных электронах представлена в [86, 87].

Рассмотрим теперь подробнее когерентное упругое рассеяние, в котором после акта рассеяния атомная система остается в начальном состоянии [24–27, 33]. Для этого можно воспользоваться нерелятивистским гамильтонианом взаимодействия электрона с электромагнитным полем:

$$H_1 = \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 - \frac{e}{mc} \mathbf{p} \mathbf{A} - [\boldsymbol{\mu} \mathbf{H}] = \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 - \frac{e}{mc} \mathbf{p}' \mathbf{A}, \quad (2.21)$$

где  $\mathbf{p}' = \mathbf{p} + (mc/e) [\boldsymbol{\mu} \nabla]$ ,  $\mathbf{p}$  и  $\boldsymbol{\mu}$  — операторы импульса и магнитного момента электрона,  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал поля. Член с  $\mathbf{A}^2$  дает в первом приближении теории возмущений томсоновское рассеяние, а член  $\mathbf{p}' \mathbf{A}$  во втором приближении дает дисперсионные поправки к амплитуде рассеяния, которые автоматически включают магнитное рассеяние [33]:

$$\Delta f = \left( \frac{e}{mc} \right)^2 \sum_{m,s} \left[ \frac{\langle 0 | \mathbf{p}'^s \mathbf{A}_1^* | m \rangle \langle m | \mathbf{p}'^s \mathbf{A}_0 | 0 \rangle}{E_0 - E_m + \hbar\omega - (i\Gamma_m/2)} + \frac{\langle 0 | \mathbf{p}'^s \mathbf{A}_0 | m \rangle \langle m | \mathbf{p}'^s \mathbf{A}_1^* | 0 \rangle}{E_0 - E_m - \hbar\omega} \right] \quad (2.22)$$

(ср. с (2.1)). Подробный анализ магнитного рассеяния как на основе (2.21), так и с учетом следующих релятивистских поправок проведен в работах [26, 27].

Рассмотрим, например, случай больших частот  $\hbar\omega \gg (E_m - E_0)$ . В этом случае суммирование по промежуточным состояниям  $|m\rangle$  проводится в (2.22) элементарно, и в  $\Delta f$  выделяются два члена, спиновый и орбитальный, зависящие от векторов  $\mathbf{S}$  и  $\mathbf{P}$  соответственно:

$$\Delta f = r_e \left( \frac{\mathbf{P} \mathbf{C}}{mc} - i \frac{\hbar\omega}{mc^2} \mathbf{S} \mathbf{B} \right), \quad (2.23)$$

где

$$\mathbf{P} = \left\langle 0 \left| \sum_s e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} \mathbf{p}_s \right| 0 \right\rangle, \quad \mathbf{S} = \left\langle 0 \left| \sum_s e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_s} \mathbf{s}_s \right| 0 \right\rangle,$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{e}_0 (\hat{\mathbf{k}}_0 \mathbf{e}_1^*) + \mathbf{e}_1^* (\hat{\mathbf{k}}_1 \mathbf{e}_0), \quad \mathbf{B} = [\mathbf{e}_1^* \mathbf{e}_0] + [\hat{\mathbf{k}}_1 \mathbf{e}_1^*] (\hat{\mathbf{k}}_1 \mathbf{e}_0) - [\hat{\mathbf{k}}_0 \mathbf{e}_0] (\hat{\mathbf{k}}_0 \mathbf{e}_1^*) - [[\hat{\mathbf{k}}_1 \mathbf{e}_1^*] [\hat{\mathbf{k}}_0 \mathbf{e}_0]], \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0.$$

Существенно, что спиновый и орбитальный члены имеют разную зависимость как от поляризаций  $\mathbf{e}_0$  и  $\mathbf{e}_1$ , так и от направлений  $\hat{\mathbf{k}}_0 = \mathbf{k}_0/|\mathbf{k}_0|$  и  $\hat{\mathbf{k}}_1 = \mathbf{k}_1/|\mathbf{k}_1|$  падающего и рассеянного пучков, что позволяет разделить вклад от этих членов, а также выделить магнитное рассеяние на фоне рэлеевского. Например, магнитное рассеяние, вообще говоря, различно для право- и левополяризованных пучков, поэтому при его учете  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризации уже не являются собственными и т. д. Более подробный анализ поляризационных свойств магнитного рассеяния может быть проведен точно так же, как в разделе 2.3 (см. также [88]). Отметим,

что в практическом отношении для описания магнитных дифракционных рефлексов почти всегда достаточно кинематической теории (ввиду наличия поглощения), хотя выполнено и динамическое рассмотрение [89, 90].

Магнитное рассеяние рентгеновских лучей в ближайшие годы несомненно станет рабочим методом исследования магнитных свойств твердых тел. Несмотря на то, что сечение рентгеновского магнитного рассеяния на 4–5 порядков меньше, чем сечение магнитного рассеяния нейтронов, высокая интенсивность синхротронного излучения позволяет преодолеть трудности, связанные с этой малостью [91]. Если пионерские работы [25, 92] по наблюдению магнитных рефлексов в  $\text{NiO}$  и  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  с использованием обычных рентгеновских трубок требовали огромных усилий (см. также работу [93]), то использование синхротронного излучения позволяет исследовать даже детали магнитной структуры. В качестве примера можно привести исследование спиральной магнитной структуры в гольмии [28, 94–96]. Из-за того, что в гольмии период спирали много больше кристаллического, возникают дополнительные рефлексы (сателлиты) вблизи кристаллических рефлексов, которые и были объектом исследования в [28, 90]. Причиной этих сателлитов может быть как магнитное рассеяние, так и магнитоупругие эффекты, что можно различить по поляризационным свойствам [28, 88]. Проведенное в работах [28, 94–96] детальное изучение положений, ширин и поляризационных свойств сателлитов позволило выделить ряд нетривиальных особенностей магнитного упорядочения в гольмии.

Кроме магнитного рассеяния, в рентгеновской области могут иметь место магнитные дихроизм и двупреломление, в частности, магнитное вращение плоскости поляризации (эффект Фарадея). Эти явления описываются магнитными поправками к рентгеновской восприимчивости, которые пропорциональны магнитным поправкам к амплитуде рассеяния вперед на магнитных атомах. Нетрудно убедиться, что приближения, в котором получено (2.23), в этом случае недостаточно, так как для рассеяния вперед амплитуда (2.23) обращается в нуль [82, 97]. Ненулевые эффекты получаются либо в случае следующих поправок порядка  $\alpha^2 = (e^2/\hbar c)^2$ , либо в резонансном случае (вблизи края поглощения), когда существенны дисперсионные поправки. Первый случай теоретически рассмотрен Барышевским, Думбрайсом и Любошицем [98] (см. также [82]), и полученные результаты дают количественное описание для фарадеевского вращения  $\gamma$ -квантов с энергией  $\approx 200$  кэВ [99]; для рентгеновского диапазона ( $\text{CuK}_\alpha$ ) их теория дает угол поворота плоскости поляризации в железе примерно 0,008 град/см, тогда как самые современные эксперименты дают для вращения в железе только ограничения сверху  $< 50$  град/см [38], а наблюдаемое вращение в никеле порядка  $2\div 5$  град/см [4]. Более существенными в рентгеновской области могут быть дисперсионные поправки [100–104]; при использовании частичной круговой поляризации синхротронного излучения было показано [103], что в железе круговой дихроизм сильно изменяется (в том числе по знаку) вблизи края поглощения и в непосредственной окрестности края поглощения ( $\approx 10$  эВ) может достигать  $5 \cdot 10^{-4}$  при толщине  $2$  мг/см<sup>2</sup>, т. е.  $2,5$  мкм; в области EXAFS ( $\approx 100$  эВ) наблюдался дихроизм порядка  $10^{-4}$ . Так как дихроизм наблюдается в виде отдельных полос, из дисперсионных соотношений следует, что вращение плоскости поляризации в этих полосах должно быть того же порядка, что и дихроизм, т. е.  $\sim 5 \cdot 10^{-4}/2,5 \cdot 10^{-4} \approx 2$  см<sup>-1</sup>  $\approx 100$  град/см.

Магнитное рассеяние рентгеновских лучей обладает рядом достоинств в исследовании магнитных свойств по сравнению с рассеянием нейтронов (последнее см. в [105]). Например, использование СИ позволяет достичь лучшего разрешения в  $k$ -пространстве (в перспективе до

$10^{-4} \text{ Å}^{-1}$ ), что особенно важно при исследовании длиннопериодических структур [27, 28, 94–96]. Принципиальные преимущества возникают при использовании резонансных эффектов — появляется возможность селективного изучения магнитных свойств атомов определенного сорта, в том числе магнитных свойств незаполненных состояний. Применение поляризационных измерений позволяет разделить спиновой и орбитальный вклады в распределении намагниченности, а в случае резонансных эффектов — разобраться в структуре атомных и кристаллических уровней [26, 88, 106–108]. В области EXAFS магнитное рассеяние и дихроизм дают информацию о магнитной структуре ближайшего окружения атома (сам атом может быть и немагнитным); напомним, что осцилляции в EXAFS возникают из-за обратного рассеяния фотоэлектронов, которое зависит от спина фотоэлектрона и магнитного момента рассеивающего атома. Дополнительную информацию может дать интерференция магнитного рассеяния с рэлеевским и с рассмотренным выше рассеянием на анизотропной части рентгеновской восприимчивости. Особенно перспективно применение рентгеновских лучей для исследования магнитной структуры тонких пленок, поверхности и поверхностей раздела твердых тел [27, 109, 110].

В заключение этого раздела подчеркнем, что для успешного изучения анизотропии рентгеновской восприимчивости и магнитного рассеяния решающее значение будет иметь совершенствование техники поляризационных измерений, особенно измерений круговых поляризаций.

### 3. Поляризационные эффекты в рентгенооптических элементах.

В настоящем разделе рассматриваются способы получения и преобразования рентгеновской поляризации. Так как устройства преобразования поляризации основаны на дифракционных эффектах, все изложение существенно опирается на теорию, изложенную в разделе 1.

**3.1. Поляризация излучения рентгеновских источников.** В традиционных рентгеновских источниках—рентгеновских трубках—излучение может быть либо тормозным, либо характеристическим. Тормозное излучение, как известно [18, 33], поляризовано, но реально степень поляризации довольно мала из-за того, что направление движения электронов, испущенных катодом трубки, после попадания в твердое тело быстро изотропизируется. Излучение частично поляризовано вдоль пучка электронов, степень поляризации составляет всего несколько процентов и возрастает в коротковолновую сторону [111]. Характеристическое излучение от поликристаллов неполяризовано. В монокристаллах наблюдается частичная поляризация рентгеновских характеристических спектров (особенно L- и M-серий), что служит источником информации об анизотропии окружения атомов, их химических связях и т. п. (см., например, [112]), однако для получения поляризованного излучения названные эффекты не применяются. Поэтому для получения поляризованного рентгеновского пучка излучение от трубок поляризуют, как правило, дифракционными поляризаторами, что, однако, позволяет получать только линейную поляризацию (см. ниже).

Настоящей находкой для рентгеновской оптики стало синхротронное излучение электронов, движущихся с ультрарелятивистскими скоростями в магнитном поле [113–116]. Синхротронное излучение в накопительных кольцах и виглерах обладает огромной интенсивностью, непрерывным спектром, сосредоточено в основном в плоскости орбиты электронов (расходимость в направлении, перпендикулярном плоскости орбиты  $\Delta\psi$ , порядка  $mc^2/E \sim 10^{-4}$  при  $E \approx 5 \text{ ГэВ}$ ) и обладает уникальными поляризационными свойствами. В частности, синхротронное излучение электрона, движущегося по круговой траектории, имеет в плоскости ор-



биты 100%-ную линейную поляризацию с электрическим вектором, лежащим в плоскости орбиты. Выше и ниже плоскости орбиты (в пределах угла  $\Delta\psi$ ) излучение эллиптически поляризовано вправо или влево в зависимости от знака проекции направления излучения на угловую скорость электрона. Распределение интенсивности для линейных и круговых компонент синхротронного излучения приведено на рис. 13. Излучение с высокой степенью круговой поляризации может быть получено в специально сконструированных виглерах [117].

Исключительные возможности для получения поляризованного излучения с наперед заданными видом и степенью поляризации дают специальные устройства для генерации СИ — ондуляторы [116, 118—119]

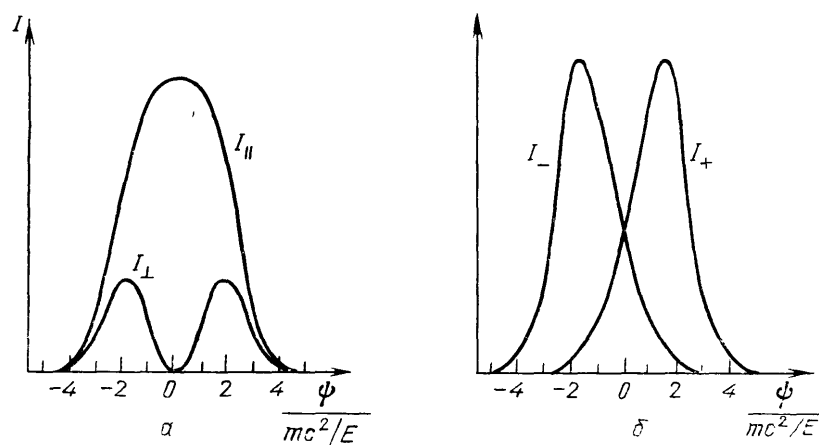


Рис. 13. Угловая зависимость интенсивности линейных (а) и круговых (б) компонент поляризации синхротронного излучения

(хотя в них технически сложно получить достаточно жесткое рентгеновское излучение [120]). В плоских ондуляторах, установленных в прямолинейных промежутках накопителей электронов, излучение всегда имеет линейную поляризацию. В спиральных ондуляторах электрон движется по спирали, и излучение имеет круговую поляризацию. В работах [121—123] было предложено использовать два повернутых и сдвинутых друг относительно друга плоских ондулятора; когерентное сложение двух линейно поляризованных волн со сдвигом фазы в такой системе ондуляторов позволяет получать практически любую поляризацию и легко изменять ее в процессе эксперимента. Отметим также, что по своей природе близким к ондуляторному излучению является излучение частиц, каналированных в кристаллах [124—126].

В реальных ускорителях синхротронное излучение частично деполаризуется из-за конечных размеров пучка и из-за имеющегося разброса в направлениях движения электронов [127—129]. Другим источником деполаризации могут быть кристалл-монокроматоры [130]. Отметим, что из-за различия в отражении  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций кристалл-монокроматоры могут быть использованы для изменения поляризации СИ, в частности, для «подправления» эллиптической поляризации до круговой. Однако, как подробно обсуждалось в разделе 1, следует иметь в виду, что при дифракции возникает дополнительная разность фаз между  $\sigma$ - и  $\pi$ -компонентами, и может иметь место частичная деполаризация (исключение составляет случай кинематической дифракции). Оценки и количественный учет этих эффектов могут производиться по формулам, приведенным в разделе 1, однако в случае несовершенных кристалл-монокроматоров эти оценки не очень надежны в связи с тем, что, как пра-

вило, количественные характеристики несовершенства кристаллов-монокроматоров известны недостаточно точно.

**3.2. Получение и анализ линейных поляризаций.** Так как большинство источников рентгеновского излучения не дает полностью поляризованного излучения, то естественно широкое использование дифракционных поляризационных явлений для получения, анализа и преобразования поляризованных пучков. Наиболее широко используются в настоящее время дифракционные поляризаторы (и соответственно анализаторы) с  $2\Theta_B = 90^\circ$  [2–5, 10–14, 131–133], хотя, по-видимому, наиболее перспективны поляризаторы, использующие эффекты динамической дифракции: эффект Борманна [129, 134, 135] и различную ширину областей отражения для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризаций [136–138] (возможна также поляризация излучения, основанная на пространственном разделении  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных отраженных пучков [139]). Достоинством 90-градусных поляризаторов является их простота и то, что свойство рассеивать под  $90^\circ$  только  $\sigma$ -поляризацию не зависит от степени совершенства и толщины кристалла. Недостаток таких поляризаторов заключается в необходимости подбора для каждой длины волны кристалла и рефлекса с  $2\Theta_B = 90^\circ$ ; кроме того, для  $\lambda \approx 1 \text{ \AA}$  рефлексы оказываются довольно высокого порядка (например, 333 в Ge для излучения  $\text{CuK}_\alpha$ ) и, следовательно, довольно слабыми, что уменьшает светосилу поляризатора.

В поляризаторах на эффекте Борманна (эффекте аномального прохождения) используется тот факт, что поглощение блоховских волн в области дифракции сильно отличается от поглощения плоской волны. Это отличие связано с тем, что блоховские волны, являясь суперпозицией двух (или большего числа) плоских волн, образуют в кристалле стоячую волну. Поглощение такой стоячей волны зависит от того, где расположены ее пучности — на атомах или в промежутках между ними (в первом случае поглощение возрастает, а во втором — существенно ослабляется). Для нас сейчас существенно, что для  $\sigma$ -поляризации можно подобрать условия, когда поле блоховской волны на атомах обращается в нуль, тогда как для  $\pi$ -поляризации такой возможности нет из-за того, что векторы  $\pi$ -поляризации имеют разное направление для прямой и дифрагированной волны, и полная компенсация не достигается. В результате  $\pi$ -поляризованная компонента поглощается сильнее даже в условиях аномального прохождения, и, выбирая достаточно толстый кристалл, можно добиться полной  $\sigma$ -поляризации и прошедшего, и дифрагировавшего пучка (в случае Лауэ). Главным достоинством такого метода поляризации является то, что эффект Борманна наблюдается для всех  $\Theta_B$  и легко перестраивается с одной длины на другую; кроме того, этот эффект наиболее ярко проявляется как раз для сильных рефлексов. Недостатки здесь следующие: а) требуется высокое совершенство кристаллов; б) при малых  $\Theta_B$  коэффициенты аномального поглощения для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризации мало отличаются и приходится использовать кристаллы большой толщины, что ведет к поглощению к «полезной»  $\sigma$ -поляризации; в) эффект Борманна проявляется в небольшой части области отражения с угловыми размерами  $\lesssim 1^\circ$ . Все это приводит к ограниченности эффективного применения поляризаторов на эффекте Борманна.

По-видимому, более перспективными являются поляризаторы Харта — Родригеса [136, 137], использующие различия в ширинах областей отражения для  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных пучков в случае Брэгга (см. рис. 1, а). Такие поляризаторы — монокроматоры состоят из двух почти параллельных кристаллов, разориентированных на угол  $\Delta\Theta$ , больший, чем угловая ширина области отражения для  $\pi$ -поляризованного пучка, но меньший, чем угловая ширина области отражения для  $\sigma$ -поляризо-

ванного пучка. В результате последовательного двукратного отражения от кристаллов  $\pi$ -поляризация существенно подавляется (рис. 14); любого требуемого подавления  $\pi$ -поляризации можно достичь путем многократного отражения [136]. Практически поляризаторы Харта — Родригеса выпиливаются из единого монокристалла, а разориентация на угол

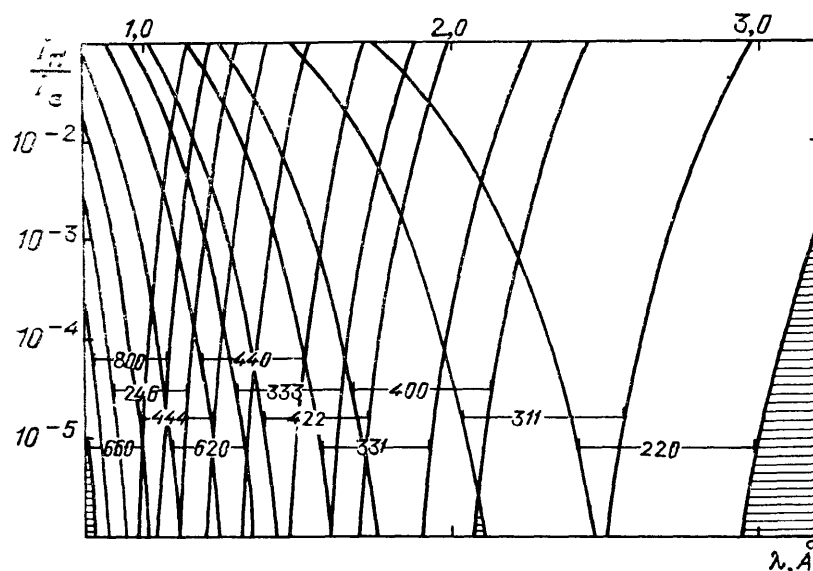


Рис. 14. Поляризационное отношение  $|R_{\pi\pi}|^2/|R_{00}|^2$ , достижимое на поляризаторе Харта — Родригеса при четырехкратном отражении от Si (в различных диапазонах длин волн удобно использовать различные рефлексы, индексы которых указаны на рисунке) [136]

$\Delta\Theta$  достигается за счет управляемой упругой деформации (рис. 15). Такие поляризаторы легко перестраиваются с одной длины волны на

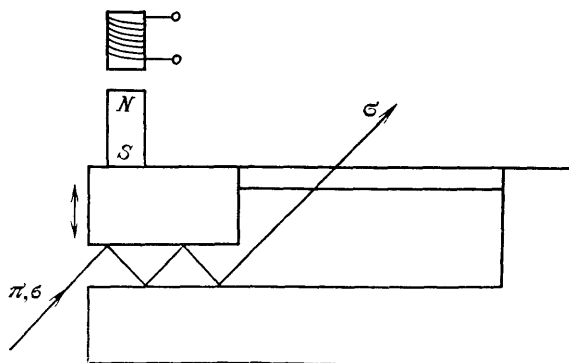


Рис. 15. Схема поляризатора Харта — Родригеса [136]

другую, и всего нескольких рефлексов позволяют перекрыть весь используемый рентгеновский диапазон. Применение в поляризаторах многократных отражений дает ряд дополнительных преимуществ: а) подавляются «хвосты» кривых отражения; б) подавляются высшие гармоники ( $\lambda/2$ ,  $\lambda/3$ , ...), которые имеют более узкую область отражения; в) при четном числе отражений не изменяется направление распространения пучка, что часто оказывается удобным в рентгенооптических измерениях; г) даже в отсутствие разориентации кристаллов  $\pi$ -поляризация довольно сильно подавляется.

Отметим, что все дифракционные поляризаторы обладают общим существенным недостатком: угловая расходимость поляризованного пучка мала в направлении, перпендикулярном направлению поляризации (порядка угловой ширины области отражения), тогда как расходимость в направлении поляризации обычно больше и определяется расходимостью падающего пучка. Эту разницу необходимо учитывать при дифракционных экспериментах с поляризованными пучками, где она может быть источником систематических погрешностей (подробный анализ трехкристалльных дифракционных систем приведен в [140]). Избавиться от многих систематических погрешностей и повысить точность поляризационных измерений позволяет схема со скрещенными поляризатором и анализатором, подробно проанализированная Хартом [3].

**3.3. Рентгеновская пластинка  $\lambda/4$ .** Несмотря на то, что использование синхротронного и ондуляторного излучения позволяет получать практически любую поляризацию, в рентгеновской области существует проблема получения и особенно анализа произвольно поляризованных пучков, в частности, преобразования линейной поляризации в круговую и обратно, т. е. стоит вопрос о создании четвертьволновой пластины. Как уже отмечалось, в рентгеновской области обычное двупреломление очень мало, и основные надежды на создание четвертьволновой пластины возлагаются на использование двупреломления, возникающего в области брэгговской дифракции (см. раздел 1), и реальность этих надежд уже подтверждена экспериментально [3, 85, 103, 141, 142]. Заметим, однако, что непосредственно в области сильного дифракционного рассеяния реализация этой идеи сталкивается с практическими трудностями. Основная трудность состоит в том, что из-за сильного изменения фаз и интенсивностей волн в области дифракции (см. рис. 1, 2) для получения высокой степени поляризации необходимо использовать пучки с очень малой ( $\lesssim 1''$ ) угловой расходимостью.

В разделе 1 уже обращалось внимание на то, что дифракционное двупреломление сравнительно медленно убывает при отклонении направления распространения пучка от брэгговского угла. Покажем, что использование этого двупреломления вне области сильного дифракционного отражения дает вполне реальную возможность для преобразования поляризации проходящего сквозь кристалл пучка и, в частности, для создания пластины  $\lambda/4$  [7—9].

Величина двупреломления  $\delta n$  в этой области углов дается формулой (1.17) и в случае Лауэ, и в случае Брэгга, а интенсивность дифрагированной волны очень мала (порядка  $|\chi_H/\Delta\Theta|^2$ ). Таким образом, в данном случае ситуация во многом аналогична обычной оптике анизотропных сред, с тем исключением, что величина двупреломления сильно зависит от направления распространения волны.

Наличие двупреломления (1.17) приводит к тому, что по мере распространения первичной волны между ее  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованными компонентами возникает разность фаз  $\Delta\varphi = 2\pi \text{Re}(\delta n)L/\lambda$ , где  $L$  — длина пути в кристалле. Линейно поляризованная под углом  $45^\circ$  к векторам  $\sigma$  и  $\pi$  волна преобразуется в волну с круговой поляризацией при  $\Delta\varphi = \pm\pi/2$ , т. е. при длине пути  $L_c = \lambda/[4\text{Re}(\delta n)]$ .

Для того чтобы рассматриваемое двупреломление можно было реально использовать для преобразования поляризации, необходимо, чтобы на толщине  $L_c$  поглощение не было слишком велико, т. е.

$$\mu L_c \equiv \frac{\mu\lambda\Delta\Theta_c}{\sin 2\Theta_B \text{Re}(\chi_H\chi_{\bar{H}})} \lesssim 1 \quad (3.1)$$

( $\mu$  — коэффициент поглощения). Так как  $\chi_H$  зависит от  $\Theta_B$  (через атом-

ный фактор), то для выполнения (3.1) существует некоторый оптимальный угол, который находится из условия максимальности выражения  $\operatorname{Re}(\chi_H \chi_H^*) \sin 2\Theta_B$ . Далее, так как  $\mu \sim Z^4$ , а  $\chi_H \sim Z$  ( $Z$  — атомный номер), то для выполнения (3.1) выгодно брать кристаллы из атомов с малым  $Z$ .

Рассмотрим в качестве примера распространение  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения ( $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$ ) в алмазе вблизи рефлекса 111. С помощью (1.17) получаем  $L_c = 2,6 \cdot 10^2 \Delta\Theta_c$ , где  $L_c$  выражено в сантиметрах, а  $\Delta\Theta_c$  — радианах. При  $\Delta\Theta_c = 0,5' = 1,45 \cdot 10^{-4}$ ,  $L_c = 0,038 \text{ см}$  и  $\exp(-\mu L_c) = 0,5$ . В интервале длин волн от  $\approx 3 \text{ \AA}$  до  $0,5 \text{ \AA}$  отклонение  $\Delta\Theta_c$ , при котором  $\mu L_c = 1$ , изменяется от  $\Delta\Theta_c \approx 1'$  до  $\Delta\Theta_c \approx 0,13'$  соответственно, и условия применимости рассматриваемого приближения хорошо выполнены (интенсивность дифрагированной волны меньше 1% от падающей). Аналогичные результаты получаются для рефлекса 220, а также для рефлекса 200 в LiF (рис. 16), тогда как для кремния  $\Delta\Theta_c \sim 1'$  при  $\mu L_c \sim 5-10$ .

Рассмотрим теперь, к чему приводит и насколько существенна угловая расходимость пучка (немонохроматичность может быть учтена аналогичным образом). Из-за наличия расходимости отклонение от брэгговского угла  $\Delta\Theta$  не строго фиксировано, и, следовательно, прошедшая сквозь кристалл волна будет суперпозицией волн с различной поляризацией, т. е. будет частично деполаризована. Пусть на кристалл падает линейно поляризованная под углом  $45^\circ$  к векторам  $\sigma$  и  $\pi$  волна, и отклонение от брэгговского угла изменяется от  $\Delta\Theta_c - (\Delta\Theta'/2)$  до  $\Delta\Theta_c + (\Delta\Theta'/2)$ , причем в этом интервале все углы равновероятны. Среднее отклонение  $\Delta\Theta_c$  выбрано таким, чтобы при нем происходило преобразование линейной поляризации в круговую. Как можно показать, степень поляризации в этом случае определяется соотношением

$$P = \left| \int_{-1/2}^{1/2} \exp\left(i \frac{\pi}{2} \frac{\Delta\Theta_c}{\Delta\Theta_c + x\Delta\Theta'}\right) dx \right|. \quad (3.2)$$

В случае  $\Delta\Theta' \ll |\Delta\Theta_c|$  на (3.2) можно получить приближенное выражение

$$P = 1 - \frac{\pi^2}{96} \left( \frac{\Delta\Theta'}{\Delta\Theta_c} \right)^2. \quad (3.3)$$

Из (3.3) следует, что  $\Delta\Theta'$  может быть не слишком мало по сравнению с  $|\Delta\Theta_c|$ ; даже при  $\Delta\Theta' \approx 0,5 |\Delta\Theta_c|$  из (3.2) получается достаточно высокая степень поляризации  $P \approx 0,97$ .

Таким образом, может быть реально осуществлено преобразование поляризации рентгеновского излучения (в частности, линейной в круговую и обратно) с небольшой потерей в интенсивности. Следует отметить, что рассматриваемый здесь случай в практическом отношении обладает достоинствами, отсутствующими при использовании двупреломления непосредственно в области сильной дифракции. Действительно, дифракционная добавка к показателю преломления резко меняется внутри области сильного дифракционного отражения (см. рис. 1, 2),

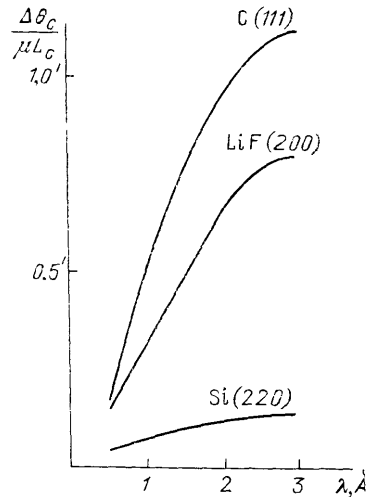


Рис. 16. Рассчитанная зависимость угла отстройки  $\Delta\Theta_c$  от длины волны для четвертьволновой пластинки в случае различных рефлексов (угол отстройки  $\Delta\Theta_c$  может быть увеличен за счет увеличения толщины  $L_c$ ).

и в этом случае для получения определенной поляризации необходимо, чтобы расходимость падающего пучка  $\Delta\theta'$  была много меньше угловой ширины области дифракционного отражения, т. е. должна быть порядка долей секунды. В рассматриваемом же здесь случае должно быть выполнено менее жесткое неравенство  $\Delta\theta' \ll |\Delta\theta_c|$ , что легче осуществить, так как  $|\Delta\theta_c|$  может быть порядка угловых минут. К тому же в области дифракции имеется еще целый ряд усложняющих факторов (см. раздел 1): наличие нескольких волн, эффект Борманна и т. п., тогда как в рассматриваемом случае ситуация аналогична обычной оптике.

Еще одно достоинство рассматриваемого подхода заключается в том, что вне области дифракционного отражения двупреломление слабо зависит от совершенства кристалла (см. раздел 1). Поэтому приведенными выражениями можно пользоваться и в случае сравнительно несовершенных кристаллов, если используемое отклонение от брэгговского угла много больше, чем ширина их кривой отражения.

В заключение этого раздела отметим, что эллиптическая поляризация может быть получена из линейной и при дифракции в геометрии Брэгга за счет использования разности фаз дифрагированных волн с  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризациями (см. рис. 1, а) [143, 144]. Однако практическая реализация преобразования поляризации сталкивается с определенными трудностями; например, для получения круговой поляризации в такой геометрии требуется несколько последовательных отражений [143].

**3.4. Маятниковые биения.** Одним из ярких динамических эффектов являются маятниковые биения (Pendellösung), возникающие при дифракции из-за интерференции блоховских волн. Напомним (см. раздел 1), что каждой поляризации ( $\sigma$  и  $\pi$ ) соответствуют две собственные блоховские волны с различными волновыми векторами; из-за этой разности и возникают биения интенсивности как прошедшей сквозь кристалл, так и дифрагированной волны (см. (1.7), (1.8)). Эти биения могут наблюдаться в зависимости от угла отклонения от условий Брэгга и от пройденного в кристалле пути, причем биения в зависимости от толщины остаются и в интегральных характеристиках (см. рис. 2, 3). Существенно, что из-за различия в амплитудах рассеяния  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризованных волн периоды осцилляции для них различны, что может приводить к взаимному погашению осцилляции [34, 145, 146], если падающее излучение неполяризовано, или имеет круговую поляризацию, или поляризовано под углом  $45^\circ$  к векторам  $\sigma$  и  $\pi$ . Как известно, маятниковые биения используются для точного измерения структурных амплитуд; поэтому для повышения контрастности интерференционной картины (и повышения точности измерения структурных амплитуд) желательно использовать  $\sigma$ - или  $\pi$ -поляризованное излучение [147].

Маятниковые биения испытывают также поляризационные характеристики пучков [2], такие как угол поворота и отношение осей эллипса поляризации (если поляризация падающего пучка отличается от  $\sigma$  и  $\pi$ ), тогда как в степени поляризации биения менее выражены.

В заключение этого раздела вкратце перечислим некоторые еще не упоминавшиеся области применения поляризованного рентгеновского излучения. Это, прежде всего, топография почти совершенных кристаллов. В этом случае для наблюдения очень малых искажений решетки требуется, чтобы ширина кривой отражения была как можно меньше, что достигается применением  $\pi$ -поляризованного излучения (в [148] показано, что можно наблюдать относительные искажения решетки порядка  $10^{-8}$ ). Дифракция  $\pi$ -поляризованного излучения при углах  $2\theta_b$ , близких к  $90^\circ$ , позволяет исключить экстинкцию при точном измерении структурных амплитуд [149, 150]. Отсутствие рассеяния  $\pi$ -поляризованного излучения под углом  $90^\circ$  используется также для улучшения от-

ношения сигнал — шум в рентгеновском флуоресцентном анализе [151, 152] и при мёссбауэровской фильтрации синхротронного излучения [153]. Несомненно, что область применения рентгеновских поляризационных явлений будет и дальше расширяться.

**Заключение.** Обсуждавшиеся выше поляризационные явления в рентгеновской области длин волн и их применения (возможные и уже реализованные) показывают информативность и перспективность этого метода исследования твердых тел. И хотя практическая реализация этого метода требует усложнения рентгеновской аппаратуры (вплоть до применения синхротронов), все окупается уникальностью получаемой информации. Чтобы лучше представить пути развития этой области в будущем, полезно сформулировать еще не решенные проблемы. Это, прежде всего, проведение полного поляризационного измерения для рентгеновских пучков (т. е. измерение всех трех поляризационных характеристик: степени поляризации, ориентации и отношения осей эллипса поляризации). В настоящее время главная трудность здесь состоит в получении и особенно в анализе круговых поляризаций. Преодолению этой трудности будет способствовать создание удобной в работе пластинки  $\lambda/4$ . Для анализа круговых поляризаций могут также использоваться «запрещенные» рефлексы — как магнитные, так и связанные с анизотропией восприимчивости (см. разделы 2.3 и 2.4). Отметим, что проблема полного поляризационного измерения успешно решается в случае мёссбауэровского излучения, которое, как известно, также лежит в рентгеновской области. Для мёссбауэровского излучения созданы поляризаторы и анализаторы для любой поляризации [154—158]. Рентгеновские поляризационные явления и в обычных (немёссбауэровских) кристаллах можно изучать, применяя мёссбауэровскую технику детектирования, а в качестве источника излучения вместо рентгеновской трубки — мёссбауэровский источник (область применимости такого метода ограничивается дискретностью используемых длин волн [159] и, главным образом, малой интенсивностью мёссбауэровских источников).

Слабо изучены поляризационные явления в условиях многоволновой дифракции [160—165]. При некомпланарной многоволновой геометрии собственные поляризации практически всегда отличаются от  $\sigma$  и  $\pi$  и, более того, изменяются в области дифракции; можно ожидать, например, преимущественного отражения определенной круговой поляризации и других необычных эффектов. Отметим также, что при некомпланарной многоволновой дифракции в несовершенных кристаллах необходимо использовать уравнения для тензоров поляризации даже при вычислении интенсивностей дифрагированных волн. По существу, только начато изучение поляризации рентгеновских пучков в резонаторах [166—168] и при дифракционной фокусировке [169—170]. Недостаточно исследована поляризация рентгеновских лучей, испытавших неупругое рассеяние и рассеяние на дефектах: поляризация комптоновских фотонов несет информацию об импульсном распределении поляризованных электронов, а по поляризации диффузно рассеянных лучей можно судить о наличии динамических эффектов [171]. Мало изучены поляризационные эффекты при дифракции в условиях полного внешнего отражения [172—175]. Находится на ранней стадии своего исследования вопрос о вращении плоскости поляризации рентгеновского излучения в оптически активных средах [3, 5, 38, 176]. Не решены некоторые технические проблемы, например отсутствует метрологическое обеспечение поляризационных измерений в рентгеновской области [177, 178]. Учитывая наблюдавшийся рост числа источников синхротронного излучения и совершенствование техники традиционных рентгеновских измерений, следует в ближайшее время ожидать интенсивного развития исследований и при-

менений поляризационных эффектов в рентгеновской оптике и быстрого прогресса в перечисленных выше областях.

Авторы благодарны М. А. Андреевой, В. А. Бушуеву, В. М. Каганеру, А. В. Колпакову, В. Г. Лабушкину, М. М. Никитину, Е. Н. Овчинниковой, Е. В. Смирнову за полезные замечания.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Barkla C G // Proc Roy Soc 1906 V 77 P 247
- 2 Михайлюк И. П., Кшевецкий С. А., Остапович М. В., Шафранюк В. П. // Укр физ ж 1977 Т 22 С 61
- 3 Hart M // Phil Mag Ser B 1978 V 38 P 41
- 4 Hrdý J, Krousky E, Renner O // Phys Stat Sol Ser a 1979 V 53 P 143
- 5 Пономарев Ю. В., Турутин Ю. А. // ЖТФ 1982 Т 52 С 185
- 6 Azaroff L V, Pease D M // X ray Spectroscopy / Ed by L V Azaroff — New York McGraw Hill, 1974 — P 284
- 7 Баранова Н. Б., Зельдович Б. Я. // ЖЭТФ 1980 Т 79 С 1779
- 8 Дмитриенко В. Е., Беляков В. А. // Письма ЖТФ 1980 Т 6 С 1440
- 9 Беляков В. А., Дмитриенко В. Е. // Кристаллография 1982 Т 27 С 14
- 10 Chandrasekhar S // Adv Phys 1960 V 9 P 363
- [11] Олехнович Н. М., Маркович В. Л. // Кристаллография 1978 Т 23 С 658
- 12 Jennings L D // Acta Cryst Ser A 1968 V 24 P 584
- 13 Олехнович Н. М. // Изв АН БССР Сер физ мат наук 1980 № 4 С 57
- 14 Олехнович Н. М. Дифракционная поляризация и динамическое рассеяние рентгеновских лучей в реальных кристаллах Автореферат диссертации доктора физ мат наук — Киев, 1987
- 15 Dmitrienko V E, Belyakov V A // Acta Cryst Ser A 1980 V 36 P 1044
- 16 Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии — М. ИЛ, 1953
- 17 Розенберг Г. В. // УФН 1955 Т 56, С 77, 1977 Т 121 С 97
- 18 Гинзбург В. Л. Теоретическая физика и астрофизика — М. Наука, 1981
- 19 Барабаненков Ю. Н. // УФН 1975 Т 117 С 49
- 20 Templeton D H, Templeton L K // Acta Cryst Ser A 1980 V 36 P 237, 1985 V 41 P 133
- [21] Templeton D H, Templeton L K // Ibidem 1986 V 42 P 478
- 22 Dmitrienko V E // Ibidem 1983 V 39 P 29
- 23 Dmitrienko V E // Ibidem 1984 V 40 P 89
- 24 Platzman P M, Tzoar N // Phys Rev Ser B 1970 V 2 P 3556
- 25 De Bergevin F, Brunel M // Acta Cryst Ser A 1981 V 37 P 314
- Brunel M, de Bergevin F // Ibidem P 324
- 26 Жижимов О. Л., Хриплович И. Б. // ЖЭТФ 1984 Т 87 С 547.
- 27 Blume M // J App Phys 1985 V 57 P 3615
- 28 Gibbs D, Moncton D E, D'Amico K L, Bohr J, Grier B H // Phys Rev Lett 1985 V 55 P 234
- 29 Иверонова В. И., Ревкевич Г. П. Теория рассеяния рентгеновских лучей — М. Изд во Моск ун та, 1978
- 30 Каули Дж. Физика дифракции — М. Мир, 1979
- [31] Пинскер З. Г. Рентгеновская кристаллооптика — М. Наука, 1982
- 32 Вайнштейн Б. К. Современная кристаллография Т 1 — М. Наука, 1979
- 33 Ахизер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика — М. Наука, 1969
- 34 Scalicky P, Malgrange C // Acta Cryst Ser A 1972 V 28 P 501
- 35 Annaka S // J Phys Soc Japan 1982 V 51 P 1927
- 36 Annaka S, Suzuki T, Onoue K // Acta Cryst Ser A 1980. V 36 P 151
- 37 Cohen G G, Kuriyama M // Phys Rev Lett 1978. V 40 P 957
- 38 Hart M, Rodrigues A R D // Phil Mag Ser B 1981. V 43 P 321
- 39 Darwin C G // Phil Mag 1922. V 43 P 800
- 40 Zahariasen W H // Acta Cryst 1967 V 23 P 558
- [41] Becker P // Ibidem Ser A 1977 V 33 P 243
- 42 Дмитриенко В. Е. // Кристаллография 1982 Т 27 С 213
- 43 Дмитриенко В. Е., Беляков В. А. // ЖЭТФ 1977 Т 73 С 681
- 44 Ramaseshan S, Ramachandran G N // Acta Cryst 1953 V 6 P 364
- 45 Chandrasekhar S // Ibidem 1956 V 9 P 954
- 46 Chandrasekharan K S // Ibidem 1959 V 12 P 916
- 47 Олехнович Н. М. // Кристаллография — 1969 Т 14 С 840, 1973 Т 18 С 1240, ДАН СССР 1973 Т 213 С 560 ДАН БССР 1974 Т 18 С 696
- 48 Олехнович Н. М., Шмидт М. П. // Изв АН БССР Сер физ-мат наук 1974. № 4 С 115, 1975. № 4 С 110, 1977 № 1 С 118



- 49 Олехнович Н М, Рубцов В А, Шмидт М П // Кристаллография 1975. Т 20 С 796
- 50 Olekhnovich N M, Markovich V L, Olekhnovich A I // Acta Cryst Ser A 1980 V 36 P 989
- [51] Олехнович Н М, Маркович В Л, Олехнович А И // Кристаллография 1982 Т 27 С 886
- Олехнович Н М, Карпей А Л, Олехнович А И // Изв АН БССР. Сер физ мат наук 1983 № 5 С 43
- 52 Олехнович Н М, Пушкарев А В // ДАН БССР 1985 Т 29 С 38
- 53 Olekhnovich N M, Karpei A L, Markovich V L // Krist und Techn 1978. Bd 13 S 1463
- Олехнович Н М, Пушкарев А В // Изв АН БССР Сер физ мат наук 1983 № 6 С 53
- 54 Kato N // Acta Cryst Ser A 1976 V 32 P 453, 458, 1979. V 35 P 9 1980. V 36 P 171, 763, 770
- 55 Дарбинян С П, Вартамянц И А, Чуховский Ф Н // Физика 1987. № 8—9 С 67
- 56 Бушуев В А // Кристаллография 1989 Т 34 С 279
- 57 Jennings L D // Acta Cryst Ser A 1981 V 37, P 584, 1984 V 40 P 12
- 58 Le Page Y, Gabe E J, Calvert L D // J App Cryst 1979 V 12 P 25
- Vincent M G, Flack H D // Ibidem 1980 V 36 P 610, 614
- 59 Mathieson A McL // Acta Cryst Ser A 1978 V 34 P 404
- Flack H D, Vincent M G // Ibidem P 620
- Lawrence J L // Ibidem 1982 V 38 P 859
- Suortti P, Kvick A, Emge T J // Ibidem 1986 V 42 P 184
- 60 Виноградов А В, Кожевников И В — Препринт ФИАН СССР № 102 — Москва, 1987
- [61] Колпаков А В, Бушуев В А, Кузьмин Р Н // УФН 1978 Т 126 С. 479
- Колпаков А В, Овчинникова Е Н, Кузьмин Р Н Дел — М ВИНТИ АН СССР 1978 — № 155 — 78 Дел
- 62 Борн М, Вольф Э Основы оптики — М Наука, 1970
- 63 Ландау Л Д, Лифшиц Е М Электродинамика сплошных сред — М Наука, 1982
- 64 Anomalous Scattering/Ed by S Ramaseshan, S C Abrahams — Copenhagen Munksgaard, 1975
- 65 Hahn J E, Hodgson K O // Inorganic Chemistry Toward the 21st Century — Washington, 1983 — P 431
- 66 Templeton D H, Templeton L K // Acta Cryst Ser A 1985 V 41 P 365
- 67 Корн Г, Корн Т Справочник по математике — М Наука, 1978
- 68 Шубников А В, Копчик В А Симметрия в науке и искусстве — М Наука, 1972
- 69 Беляков В А // УФН 1975 Т 115 С 553
- 70 Беляков В А, Дмитриенко В Е, Орлов В П // УФН 1979 Т 127 С 221
- [71] International Tables for X Ray Crystallography V 1 — Birmingham, Great Britain Kynoch Press, 1952
- 72 Renninger M // Zs Phys 1937 Bd 106 S 141
- 73 Dawson B // Proc Roy Soc 1967 V 298 P 255 264 379
- 74 Беляков В А // ФТТ 1971 Т 13 С 3320
- 75 Templeton D H, Templeton L K // Acta Cryst Ser A 1987 V 43 P 573
- 76 Терминасов Ю С, Тузов Л В // УФН 1964 Т 83 С 223
- 77 Post B, Ladell J // Acta Cryst Ser A 1987 V 43 P 173
- 78 Tischler J Z, Shen Q, Colella R // Ibidem 1985 V 41 P 451
- 79 Ковьев Э К, Симонов В И // Письма ЖЭТФ 1986 Т 43 С 244
- 80 Gell Mann M, Goldberger M L // Phys Rev 1954 V 96 P 1433
- [81] Nakikawa K, Ando M, Nakajima T, Kawata H // J Phys Soc Japan. 1985 V 54 P 4099
- 82 Low F E // Phys Rev 1954 V 96 P 1428
- 83 Sakai N, Ono K // Phys Rev Lett 1976 V 37 P 351
- 84 Cooper M J, Laundry D, Cardwell D A, Timms D N, Holt R S, Clark G // Phys Rev Ser B 1986 V 34 P 5984
- 85 Mills D M // Ibidem 1987 V 36 P 6178
- 86 Platzman P M, Tzoar N // J Appl Phys 1985 V 57 P 3623
- 87 Grotch H, Kazer E, Bhatt G, Owen D A // Phys Rev Ser A 1983 V 27 P 243
- 88 Lovesev S W // J Phys Ser C 1987. V 20 P 5625
- 89 Бабушкин Ф А Динамическая теория магнитного рассеяния рентгеновских лучей в антиферромагнетиках — Л Изд во Ленингр ун та, 1979
- 90 Durbin S M // Phys Rev Ser A 1987 V 36 P 639
- [91] Brunel P M, Patrat G et al // Acta Cryst Ser A 1983 V 39 P 84
- 92 De Bergevin F, Brunel M // Phys Lett Ser A 1972 V 39 P 141

- 93 Faleyev N N, Lomov A A, Labushkin V G//Acta Cryst Ser A 1981. Suppl V 37 P C-374
- 94 Gibbs D, Moncton D E, D'Amico K L//J Appl Phys 1985 V 57 P 3619
- 95 Moncton D E, Gibbs D, Bohr J//Nucl Instrum and Meth Ser A 1986. V 246 P 839
- 96 Bohr J, Gibbs D, Moncton D E, D'Amico K L//Physica Ser A 1986. V 140 P 349
- 97 Kambersky V, Kaczer J//Acta Phys Slov 1980 V 30 P 329
- 98 Барышевский В Г, Думбрайс О В, Любошиц В Л//Письма ЖЭТФ. 1972 Т 15, С 113
- 99 Лобашов В М, Попеко Л А, Смотрицкий Л М, Серебров А П, Коломенский Э А//Письма ЖЭТФ 1971 Т 14 С 373
- 100 Thole B T, van der Laan G, Sawatzky G A//Phys Rev Lett 1985. V 55 P 2086
- [101] Барышевский В Г, Максименко С А//Опт и спектр 1986. Т 61 С 970
- 102 Van der Laan G, Thole B T, Sawatzky G A, Goedkoop J B, Fuggle J C, Esteve J M, Karnatak R, Remeika J P, Dabkowska H A//Phys Rev Ser B 1986 V 34 P 6529
- 103 Schutz G, Wagner W, Wilhelm W, Kienle P, Zeller R, Frahm R, Materlik G//Phys Rev Lett 1987 V 58 P 737
- 104 Goedkoop J B, Thole B T, van der Laan G, Sawatzky G A, de Groot F M F, Fuggle J C//Phys Rev Ser B 1988 V 37 P 2086.
- 105 Изюмов Ю А, Нанш В Е, Озеров Р П Нейтринография магнетиков — М Атомиздат, 1981
- 106 Blume M, Gibbs D//Phys Rev Ser B 1988 V 37 P 1779
- 107 Gibbs D, Harshman D R, Isaacs E D, McWhan D B, Mills D, Vettier C//Phys Rev Lett 1988 V 61 P 1241
- 108 Hannon J P, Trammel G T, Blume M, Gibbs D//Ibidem P 1245
- 109 Weinert M, Freeman A J, Ohnishi S, Davenport J W//J App Phys 1985 V 57 P 3641
- 110 Vettier C, McWhan D B, Gyorgy E M, Kwo J, Buntschuh B M, Batterman B W//Phys Rev Lett 1986 V 56 P 757
- [111] Блохин М А Физика рентгеновских лучей — М Гостехиздат 1957
- 112 Майзель А, Леонхардт Г, Сарган Р Рентгеновские спектры и химическая связь — Киев Наукова думка, 1981
- 113 Кулипанов Г Н, Скрипский А Н//УФН 1977 Т 122 С 369
- 114 Тернов И М, Михайлин В В, Хатиллов В Р Синхротронное излучение и его применения — М Изд во Моск ун-та, 1980
- 115 Синхротронное излучение/Под ред К Кунца — М Мир 1981
- 116 Никитин М М, Эпп В Я Ондulatoryное излучение — М Энергоатомиздат, 1988
- 117 Goulon J, Elleaume P E, Raoux D//Nucl Instrum and Meth Ser A 1987. V 254 P 192
- 118 Алферов Д Ф, Башмаков Ю А, Бессонов Е Г//Тр ФИАН СССР 1975 Т 80 С 100 ЖТФ, 1976, Т 46, С 2392
- 119 Алферов Д Ф, Башмаков Ю А, Черенков П А//УФН, 1989 Т 157, С 389
- 120 Gluskin E S, Gaponov S V, Gusev S A, Dhez P, Ilyinsky P P, Platonov Yu Ya, Salashchenko N N, Shatunov Yu M Preprint INP 83 163 — Novosibirsk 1983
- [121] Моисеев М Б, Никитин М М, Федосов Н И//Изв вузов СССР Сер «Физика» 1978, № 3 С 76
- 122 Kim K J//Nucl Instrum and Meth Ser A 1984 V 219 P 425
- 123 Onuki H//Ibidem 1986 V 246 P 94
- 124 Барышевский В Г Канализирование, излучение и реакции в кристаллах при высоких энергиях — Минск Изд во Бел ун та, 1982
- 125 Кумахов М А Излучение канализированных частиц в кристаллах — М Энергоатомиздат, 1986
- 126 Базылев В А, Жеваго Н К Излучение быстрых частиц в веществе и во внешних полях — М Наука 1987
- 127 Materlik G, Suortti P//J App Cryst 1984 V 17 P 7
- 128 Derenbach H, Malutzki R, Schmidt V//Nucl Instrum and Meth Ser A 1983 V 208 P 845
- 129 Templeton D H, Templeton L K//J App Cryst 1988 V 21 P 151
- 130 Caciuffo R, Melone S, Rustichelli F, Boeuf A//Phys Rep 1987. V 152 P 1
- [131] Riehle F//Nucl Instrum and Meth Ser A 1986 V 246 P 385
- 132 Gluskin E S, Gaponov S V, Dhez P, Ilyinsky P P, Salashchenko N N, Shatunov Yu M, Trakhtenberg E M//Ibidem P 394
- 133 Dhez P//Ibidem 1987 V 261 P 66
- 134 Cole H, Chambers F W, Wood C G//J Appl Phys 1961. V 32 P 1942

- 135 Staudenmann J L, Chapman L D, Murphy W J, Horning R D, Liedel G L // *Ibidem* 1985 V 18 P 519
- Staudenmann J L, Chapman L D, et al // *Ibidem* P 724
- 136 Hart M, Rodrigues A R D // *Phil Mag Ser B* 1979. V 40 P 149
- 137 Hart M // *Lect Not Phys* 1980 V 112 P 325
- 138 Аветисян Г Г // *Изв АН АрмССР Сер техн наук* 1986 Т 39, № 4 С 47
- 139 Андреев А В, Горшков В Е, Ильинский Ю А // *ЖТФ* 1987 Т 57. С 511
- 140 Hrdy J, Krousky E // *Czech J Phys Ser B* 1973 V 23 P 966
- [141] Golovchenko J A, Kincaid B M, Levesque R A, Meixner A E, Kaplan D R // *Phys Rev Lett* 1986 V 57 P 202
- 142 Brummer O, et al // *Zs Naturforsch* 1982 Bd 37a S 524
- 143 Григорян А Г, Безирганян П А, Аладжаджян С А // *Всесоюзное совещание по методам и аппаратуре для исследований когерентного взаимодействия излучения с веществом Тезисы докладов — М ИАЭ, 1980 — С 66*
- 144 Brummer O, Eisenschmidt Ch, Hoche H R // *Acta Cryst Ser A* 1984. V 40 P 394
- 145 Hattori H, Kuriyama H, Kato N // *J Phys Soc Japan* 1965 V 20 P 1047
- 146 Hart M, Lang A R // *Acta Cryst* 1965 V 19 P 73
- 147 Утемисов К, Шильштейн С Ш, Соменков В А // *Кристаллография* 1981 Т 26 С 182
- 148 Bonse U, et al // *Nucl Instrum and Meth Ser A* 1983 V 208 P 711
- 149 Mathieson A McI // *Acta Cryst Ser A* 1977 V 33 P 133
- 150 Yelon W B, van Laar B // *Ibidem* 1984 V 40 P 261
- [151] Duzubeg T G, Jarrett B V, Jaklevic J M // *Nucl Instrum and Meth* 1974 V 115 P 297
- 152 Ryon R W, Zahrt J D // *Adv X ray Anal* 1979 V 22 P 453
- 153 Беляков В А // *УФН* 1987 Т 151 С 699
- 154 Лабушкин В Г, Иванов С Н, Чечин Г В // *Письма ЖЭТФ* 1974 Т 20, С 349
- 155 Gonser U, Fisher H // *Mossbauer Spectroscopy II. The Exotic Side of the Method* / Ed by U Gonser — Berlin a o Springer-Verlag, 1981, перевод // *Мессбауэровская спектроскопия. Необычные применения метода — М Мир* 1984 — С 125
- 156 Бокун Р Ч // *II Всесоюзное совещание по методам и аппаратуре для исследования когерентного взаимодействия излучения с веществом Тезисы докладов — М ИАЭ 1982 — С 77*
- 157 Sharma A L, Alimuddin, Reddy K R // *Nuovo Cimento Ser D* 1985 V 5 P 147
- 158 Коваленко П П, Лабушкин В Г, Саркисов Э Р, Овсепян А К, Толпекин И Г // *ПТЭ* 1986. № 3 С 64
- 159 Kolk B // *Phys Lett Ser A* 1975 V 50 P 457
- 160 Чжан Ш // *Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах — М Мир, 1987*
- [161] Afanasiev A M, Kohn V G // *Phys Stat Sol Ser a* 1975 V 28 P 61, *Acta Cryst Ser A* 1977 V 33 P 178
- 162 Феранчук И Д // *Изв АН БССР Сер физ-мат наук* 1981 № 4 С 109
- 163 Кшевецкий С А и др // *Кристаллография* 1985 Т 30 С 468
- 164 Juretschke H J // *Phys Stat Sol Ser b* 1986. V 135 P 455
- 165 Colella R // *Z Naturforsch Ser a* 1982, Bd 37 S 437
- 166 Егиазарян А М, Безирганян П А // *Изв АН АрмССР Сер физ* 1979. Т 14 С 261
- 167 Кшевецкий С А, Кшевецкая М Л и др // *Укр физ ж* 1980 Т 25 С 781.
- 168 Кшевецкий С А и др // *Ibidem* 1986 Т 31 С 1059
- 169 Kushnir V I et al // *Acta Cryst Ser A* 1985 V 41 P 17
- 170 Баскаков В А, Зельдович Б Я // *Препринт ФИАН СССР № 191 — Москва, 1978*
- [171] Дмитриенко В Е, Каганер В М // *Металлофизика* 1987 Т 9 № 1 С 71
- 172 Барышевский В Г // *Письма ЖТФ* 1976 Т 2 С 112
- 173 Андреева М А, Борисова С Ф // *Кристаллография* 1985 Т 30 С 849
- 174 Андреев А В // *УФН* 1985 Т 145 С 113
- 175 Афанасьев А М, Александров П А, Иمامов Р М // *Рентгеновская структурная диагностика в исследовании поверхностных слоев монокристаллов — М Наука* 1986
- 176 Sauvage M, Malgrange C, Petroff J E // *J Appl Cryst*, 1983 V 16, P 14
- 177 Волкова Е А // *Поляризационные измерения — М Изд во стандартов, 1974*
- 178 Fischer J et al // *Nucl Instrum and Meth Ser A* 1986 V 246 P 404