

При суммировании по спине выражения (8), (9) переходят в соответствующие выражения, найденные по волновым функциям Клейна—Гордона.

Для осцилляторных потенциалов (7) интегралы (9) находятся точно (см. [4, 5]). В этом случае  $|\Phi_2|^2$  и  $|\Phi_3|^2$  как в членах без переворота спина, так и в членах с переворотом спина не зависят от начальной ориентации спина  $\xi$ . Таким образом, для потенциалов (7) радиационной самополяризации электронов не происходит. Это связано, по-видимому, с тем, что состояние электрона, описываемое волновой функцией (4), в декартовой системе координат не характеризуется выделенным моментом вращения.

В заключение автор считает своим приятным долгом поблагодарить за помощь в работе профессоров И. М. Тернова и В. Г. Багрова.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Кумахов М. А. ДАН СССР, 1976, 290, с. 1077. [2] Базылев В. А. и др. ЖЭТФ, 1981, 80, с. 608. [3] Байер В. Н., Катков В. М., Страховенко В. М. Препринт № 80-03 ИЯФ. Новосибирск, 1980. [4] Жеваго Н. К. ЖЭТФ, 1978, 75, с. 1390. [5] Базылев В. А., Глебов В. И., Жеваго Н. К. ЖЭТФ, 1980, 78, с. 62. [6] Багров В. Г. и др. Точные решения релятивистских волновых уравнений. Новосибирск: Наука, 1982. [7] Синхротронное излучение. Под ред. А. А. Соколова и И. М. Тернова. М.: Наука, 1966. [8] Ternov I. M., Bagrov V. G., Kharaev A. M. Ann. Phys., 1968, 22, p. 25.

Поступила в редакцию  
06.09.83

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1984, т. 25, № 2

УДК 537.531:535.3

#### О ТОНКОЙ СТРУКТУРЕ АТОМНЫХ ФАКТОРОВ РАССЕЯНИЯ В ДАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ $K$ -КРАЕВ ПОГЛОЩЕНИЯ

Ю. В. Пономарев, Ю. А. Турутин

(кафедра общей физики и волновых процессов)

Анализ дальней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (*EXAFS*) в последнее время стал эффективным методом исследования локальной атомной структуры [1]. При использовании традиционной методики поглощения наблюдаются осцилляции мнимой части атомного фактора рассеяния  $f''$ , но аналогичная тонкая структура присутствует и его действительной части. Методы рентгеновской интерферометрии, в отличие от *EXAFS*, дают информацию о тонкой структуре действительной дисперсионной части атомного фактора рассеяния  $f'$  [2], а в спектрах полного внешнего отражения [3] и брэгговской дифракции [4] отражается тонкая структура как  $f''$ , так и  $f'$ . В данном сообщении обсуждается вопрос теоретического описания тонкой структуры атомного фактора рассеяния для целей получения структурной информации из спектров рассеяния рентгеновских лучей. Рассматриваются отличия тонкой структуры полного внешнего отражения (*ReflexAFS*) от *EXAFS*.

Задачу описания тонкой структуры мнимой части атомного фактора рассеяния, линейно связанной с коэффициентом поглощения, можно считать решенной [5]. Для  $f'$  можно попытаться найти разумное приближение из дисперсионного соотношения общего вида (типа соотношений Крамерса—Кронига). В переменных  $\omega$  и  $\mathbf{h}$  (вектор рассея-

ния) дисперсионное соотношение для постоянного передаваемого импульса [6] имеет вид

$$\operatorname{Re} [f(\omega, h)] = -\frac{2\omega^2}{\pi} \text{v. p.} \int_0^{\infty} \frac{\operatorname{Im} [f(\omega', h)]}{\omega'(\omega'^2 - \omega^2)} d\omega'.$$

Выделяя вклад электронов  $K$ -оболочки, получим следующую формулу для дисперсионной поправки к атомному фактору рассеяния:

$$f'_K(\omega, h) = -\frac{1}{\pi} \int_{\omega_K}^{\infty} \frac{f''_K d\omega'}{\omega' + \omega} - \frac{1}{\pi} \int_{\omega_K}^{\infty} \frac{f''_K d\omega'}{\omega' - \omega}. \quad (1)$$

Тонкая структура  $f''$  почти периодична по волновому числу фотоэлектрона; представим ее по аналогии с методом EXAFS в виде

$$\Delta f''_K = \operatorname{Im} \left[ \int_0^{\infty} dx \cdot A(x) e^{i(ax + \Phi)} \right], \quad A = A^*, \quad (2)$$

где  $a = \sqrt{\omega - \omega_K}$ ,  $\omega > \omega_K$ . Подставляя (2) в (1) и интегрируя, найдем осциллирующую часть  $f'_K$ . Первое слагаемое и плавная часть  $f''_K$  в (1) не дают осцилляций  $f'_K$ , что приводит к выражению

$$\Delta f'_K = \operatorname{Re} \left[ \int_0^{\infty} dx A(x) e^{i(ax + \Phi + \pi)} \right] - \int_0^{\infty} dx \cdot A(x) \left\{ \left[ 1 - \frac{2}{\pi} \operatorname{Si}(ax) \right] \sin ax + \frac{2}{\pi} \operatorname{Ci}(ax) \cos ax \right\} \sin \Phi, \quad (3)$$

где  $\operatorname{Si}$ ,  $\operatorname{Ci}$  — интегральные синус и косинус. Первое слагаемое в (3) имеет тот же фурье-спектр, что и (2). Последнее слагаемое имеет значительную амплитуду при малых  $ax$  и падает по относительной величине до уровня 0,1 при  $ax=8$ . Поскольку функции  $\operatorname{Si}$  и  $\operatorname{Ci}$  квазипериодичны с тем же периодом, что и  $\sin$ , то последнее слагаемое дает вклад на удвоенной частоте в фурье-спектр тонкой структуры; оно исчезает при чисто синусной тонкой структуре  $\Delta f''_K$  (при  $\Phi = m\pi$ ). Из анализа (1) также следует, что, несмотря на нелокальность связи  $f'$  и  $f''$ , осцилляции  $f'$  наблюдаются за краем поглощения и отсутствуют до края поглощения.

Таким образом, в дальней области края поглощения приближенно имеем

$$\Delta f''_K = \operatorname{Im} \left[ \int_0^{\infty} dx \cdot A(x) e^{i(ax + \Phi)} \right],$$

$$\Delta f'_K = \operatorname{Im} \left[ \int_0^{\infty} dx \cdot A(x) e^{i(ax + \Phi + 3\pi/2)} \right].$$

Учитывая, что межатомные расстояния, определяющие период EXAFS, не менее 1,5 Å, получаем, что данное приближение справедливо в области волновых чисел фотоэлектрона  $k > 3 \text{ \AA}^{-1}$ ; это соответствует также области применимости теории EXAFS [5]. Условие  $h = \text{const}$ , при котором справедливо использованное дисперсионное соотношение, выполняется, например, в брэгговской спектроскопии и спектроскопии

зеркального отражения. Приближение справедливо также при малоугловом рассеянии и в интегральной спектроскопии.

Анализ *RefLEXAFS* в качестве первого приближения может быть выполнен на основе формул Френеля. Осциллирующую часть коэффициента отражения  $R$  можно представить в виде

$$\chi_R = \frac{\Delta R}{R} = \frac{\partial \ln R_0}{\partial f'} \Delta f' + \frac{\partial \ln R_0}{\partial f''} \Delta f''$$

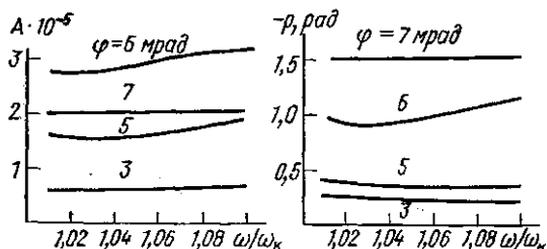
из-за малости амплитуды тонкой структуры ( $R_0$  — плавная часть  $R$ ). Использование *RefLEXAFS* приводит к появлению дополнительного фазового сдвига в тонкой структуре:

$$\rho = -\arctg \frac{\partial R_0}{\partial f'} \left( \frac{\partial R_0}{\partial f''} \right)^{-1}.$$

Этот фазовый сдвиг усложняет проблему экспериментального определения положения края поглощения и может привести к изменению периода тонкой структуры, по которому определяются межатомные расстояния. Амплитуда *RefLEXAFS* оказывается пропорциональной величине

$$A = \sqrt{\left( \frac{\partial \ln R_0}{\partial f'} \right)^2 + \left( \frac{\partial \ln R_0}{\partial f''} \right)^2},$$

которая также может зависеть от волнового числа фотозлектрона, что усложняет нормировку спектров. Осцилляции в  $A(k)$  могут привести к появлению пиков в фурье-спектрах *RefLEXAFS*, не связанных с наличием координационных сфер соответствующих радиусов. Для оценки значимости этих особенностей на рисунке приведены расчетные зависимости  $A(\omega)$  и  $\rho(\omega)$  для



ряда постоянных значений угла скольжения  $\varphi$ . Эти данные показывают, что в области тонкой структуры  $A$  и  $\rho$

Амплитуда  $A(\omega)$  и фазовый сдвиг  $\rho(\omega)$  тонкой структуры спектров полного внешнего отражения (расчет для меди по формулам Френеля)

практически постоянны. При  $\varphi$  порядка критического угла полного внешнего отражения изменения  $A$  равны примерно 20% по всему спектру. Ошибка при определении межатомных расстояний из-за фазового сдвига  $\rho$  при обработке спектров *RefLEXAFS* по методам, развитым в спектроскопии *EXAFS*, не превышает 0,03 Å, а при  $\varphi$ , меньшем критического угла, значительно меньше. Таким образом, в пределах точности эксперимента и теории [5] сложностей в интерпретации *RefLEXAFS* не возникает. Особенности реального отражения могут учитываться модельным образом.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Lee P. A. et al. *Rev. Mod. Phys.*, 1981, 53, p. 769. [2] Hart M. *Nucl. Instrum. Meth.*, 1980, 172, p. 209. [3] Martens G., Rabe P. J. *Phys.*, 1981, C14, p. 1523. [4] Barrus D. M. et al. *Phys. Rev.*, 1980, B22, p. 4022. [5] Lee P. A., Pendry J. B. *Phys. Rev.*, 1975, B11, p. 2795. [6] Нуссенцевейг Х. М. Причинность и дисперсионные соотношения. М.: Мир, 1976.

Поступила в редакцию  
07.09.83