ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 548.732: 539.2

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РЕЗОНАНСНОЙ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ГЕОМЕТРИИ БРЭГГА В СОВЕРШЕННЫХ КРИСТАЛЛАХ

А. П. Орешко

(*кафедра физики твердого тела*)

Проведено точное решение задачи зеркального и дифракционного отражения рентгеновского излучения в условиях резонансной дифракции от идеального кристалла в геометрии Брэгга. Показана возможность эффекта аномального прохождения сквозь кристалл излучения с энергией, близкой к энергии $\boldsymbol{K}$-края поглощения атомов.

Введение

Резонансная дифракция (РД) рентгеновского излучения (РИ) наблюдается при энергии падающего излучения, близкой к краю поглощения какого-либо элемента, входящего в состав кристалла, и является интенсивно развивающимся методом изучения свойств кристаллов [1, 2]. Более доступным метод РД стал при появлении источников синхротронного излучения, сочетающих большую яркость и высокую степень поляризации излучения с возможностью выбора нужной длины волны.

Так как вблизи краев поглощения величина коэффициента поглощения резко увеличивается и тем самым уменьшается глубина проникновения излучения в вещество, для интерпретации полученных экспериментальных данных по РД используется кинематическое приближение теории дифракции [3]. Однако ряд наблюдаемых в последнее время явлений не может быть удовлетворительно описан в рамках кинематической теории дифракции, что вызвало необходимость развития динамической теории РД.

Впервые попытка описания динамического рассеяния РИ в условиях РД предпринята в [4], где использовался подход, аналогичный методу Дарвина [5] для описания динамического рассеяния РИ, основанный на введении амплитуды рассеяния РИ резонансным атомом и рассмотрении процессов многократного рассеяния.

В настоящей работе развивается динамическая теория резонансной дифракции рентгеновского излучения в форме, основанной на решении уравнений Максвелла в среде с периодически меняющейся поляризуемостью [6].

1. Динамическая теория резонансной дифракции

Из микроскопических уравнений Максвелла в приближении линейной связи между индукцией $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)$ и напряженностью $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ электрического поля в стационарной пространственно-однородной среде можно получить систему уравнений для Фурье-амплитуд поля в совершенном кристалле с учетом анизотропии, пространственной и временной дисперсии [7]:

$$\left[1-\frac{(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k})}{\kappa_0^2}+\tilde{\chi}^0(\omega,\boldsymbol{k})\right]\boldsymbol{E}(\omega,\boldsymbol{k})+\frac{1}{\kappa_0^2}((\boldsymbol{E}(\omega,\boldsymbol{k}),\boldsymbol{k}),\boldsymbol{k})+ +\sum_{\boldsymbol{h}\neq 0}\tilde{\chi}^{\boldsymbol{h}}(\omega,\boldsymbol{k})\boldsymbol{E}(\omega,\boldsymbol{k}+\boldsymbol{h})=0, \quad (1)$$

где $\boldsymbol{E}(\omega,\boldsymbol{k})$ — Фурье-компоненты напряженности электрического поля в кристалле, κ_0 — величина волнового вектора в вакууме. Величина $\chi_{ij}(\omega,\boldsymbol{k})$ называется диэлектрической поляризуемостью (ДП) среды, общие соотношения симметрии для тензора ДП рассмотрены в [3, 8]. Второй член выражения (1) учитывает непоперечность поля.

Решение уравнений (1) с привлечением граничных условий и является основной задачей динамической теории дифракции РИ.

В традиционной рентгеновской кристаллооптике расчет поляризуемости проводится обычно в приближении сильной связи [8], в котором не учитываются явления анизотропии и пространственной дисперсии, т. е. поляризуемости χ_{ij} считаются скалярами, а поля — поперечными. Однако вблизи краев поглощения явлением анизотропии пренебрегать нельзя.

Рассмотрим двухволновую дифракцию полей $\boldsymbol{E}_0=\boldsymbol{E}(\omega,\boldsymbol{q}_0)$ и $\boldsymbol{E}_h=\boldsymbol{E}(\omega,\boldsymbol{q}_h)$, где $\boldsymbol{q}_0$ и $\boldsymbol{q}_h = \boldsymbol{q}_0+\boldsymbol{h}$ — волновые векторы проходящей и дифрагированной волн в кристалле, и пренебрежем эффектами пространственной дисперсии, т. е. поля будем считать поперечными. Тогда для скалярных амплитуд $\boldsymbol{E}_{0,h}^{(j)}$ проходящей $\boldsymbol{E}_0=\boldsymbol{e}_0^{(j)}E_0^{(j)}$ и дифрагированной $\boldsymbol{E}_h=\boldsymbol{e}_h^{(j)}E_h^{(j)}$ волн следуют уравнения, описывающие динамическую дифракцию первичного излучения:

$$\delta_0 \boldsymbol{e}_0^j E_0^{(j)} - \tilde{\chi}^0 \boldsymbol{e}_0^j E_0^{(j)} - \tilde{\chi}^{-\boldsymbol{h}} \boldsymbol{e}_h^j E_h^{(j)} = 0, \qquad (2)$$

$$\delta_h \boldsymbol{e}_h^j E_h^{(j)} - \tilde{\chi}^0 \boldsymbol{e}_h^j E_h^{(j)} - \tilde{\chi}^{\boldsymbol{h}} \boldsymbol{e}_0^j E_0^{(j)} = 0, \qquad (3)$$

где $\boldsymbol{e}_{0,h}^j$ $(j = 1, 2)$ — единичные векторы σ- и π-поляризации проходящего и дифрагированного излучения $(\boldsymbol{e}_0^1 = \boldsymbol{e}_h^1)$, $\boldsymbol{e}_{0,h}^3$ — единичные векторы вдоль волновых векторов $\boldsymbol{q}_{0,h}$ соответственно, а $\delta_{0,h} = [(\boldsymbol{q}_{0,h}, \boldsymbol{q}_{0,h})/\kappa_0^2] - 1$. В (2), (3) проводится суммирование по повторяющимся индексам $j = 1, 2, 3$. Схематичное пространственное расположение векторов $\boldsymbol{e}_{0,h}^j$ и $\boldsymbol{q}_{0,h}$ приведено на рис. 1. Из условия поперечности полей следует, что $E_{0,h}^{(3)} = 0$.

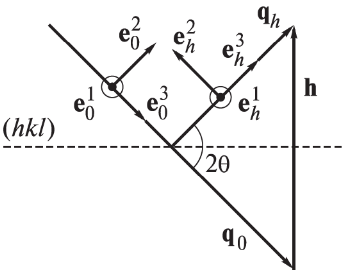

Рис. 1. Схема расположения единичных векторов $\boldsymbol{e}_{0,h}^j$, волновых векторов проходящего $\boldsymbol{q}_0$ и дифрагированного $\boldsymbol{q}_h$ излучения и вектора обратной решетки $\boldsymbol{h}$. (hkl) — отражающая плоскость

Домножив выражения (2), (3) слева на $\boldsymbol{e}_0^i$ и $\boldsymbol{e}_h^i$ $(i = 1, 2)$ и введя обозначения $C^{(i)} = (\boldsymbol{e}_0^i, \boldsymbol{e}_h^i) = \{1\,(i = 1); \cos 2\theta\,(i = 2)\}$, $C^{(3)} = \sin 2\theta$, где θ — угол между падающим излучением и отражающими плоскостями (hkl), получим следующую основную систему уравнений динамической теории РД:

$$\begin{aligned}
&(\delta_0 - \chi_{11}^0) E_0^{(1)} - C^{(1)} \chi_{11}^{-h} E_h^{(1)} - \chi_{12}^0 E_0^{(2)} - \\
&\quad - (C^{(2)} \chi_{12}^{-h} - C^{(3)} \chi_{13}^{-h}) E_h^{(2)} = 0, \\
&- C^{(1)} \chi_{11}^h E_0^{(1)} + (\delta_h - \chi_{11}^0) E_h^{(1)} - \chi_{12}^h E_0^{(2)} - \\
&\quad - (C^{(2)} \chi_{12}^0 - C^{(3)} \chi_{13}^0) E_h^{(2)} = 0, \\
&- \chi_{21}^0 E_0^{(1)} - \chi_{21}^{-h} E_h^{(1)} + (\delta_0 - \chi_{22}^0) E_0^{(2)} - \\
&\quad - (C^{(2)} \chi_{22}^{-h} - C^{(3)} \chi_{23}^{-h}) E_h^{(2)} = 0, \\
&- (C^{(2)} \chi_{21}^h - C^{(3)} \chi_{31}^h) E_0^{(1)} - (C^{(2)} \chi_{21}^0 - C^{(3)} \chi_{31}^0) E_h^{(1)} - \\
&\quad - (C^{(2)} \chi_{22}^h - C^{(3)} \chi_{32}^h) E_0^{(2)} + \\
&\quad + \{(\delta_h - [\chi_{22}^0 C^{(2)2} - \chi_{33}^0 C^{(3)2}]) + \\
&\quad + C^{(2)} C^{(3)} (\chi_{23}^0 - \chi_{32}^0)\} E_h^{(2)} = 0.
\end{aligned} \qquad (4)$$

Отличие системы уравнений (4) от хорошо известной основной системы динамической теории состоит в наличии недиагональных элементов тензора ДП χ. Если предположить, что χ — скалярная величина, то система (4) совпадает с традиционной основной системой динамической теории [6].

Система основных уравнений имеет нетривиальное решение только в случае равенства нулю детерминанта этой системы:

$$\det A = 0, \qquad (5)$$

где A — матрица коэффициентов (4). Дисперсионное уравнение (5) позволяет с привлечением граничных условий для волновых векторов на границе раздела двух сред найти величины волновых векторов $\mathrm{q}_{0,h}$ в кристалле.

В немагнитных кристаллах тензор ДП имеет вид $\chi_{ij} = (\chi_0 + \chi_0' + i\chi_0'')\delta_{ij} + \chi_{ij}'$, χ_0 вызван потенциальным вкладом в диэлектрические свойства кристалла; χ_0', χ_0'' — добавки, включающие в себя изотропную часть эффектов дисперсии и поглощения; а χ_{ij}' вызван анизотропным резонансным вкладом [1, 8, 9]:

$$\begin{aligned}
\chi_{jm}' = \chi_{jm}^{\mathrm{dd}} + i\chi_{jmn}^{\mathrm{dqs}}(k_n' - k_n) + i\chi_{jmn}^{\mathrm{dqa}}(k_n' + k_n) + \\
+ \chi_{jnmp}^{\mathrm{qq}} k_n' k_p + \ldots,
\end{aligned} \qquad (6)$$

где $\boldsymbol{k}$ и $\boldsymbol{k}'$ — волновые векторы соответственно падающей и рассеянной волн; χ_{jm}^{dd}, χ_{jmn}^{dq} и $\chi_{jnmp}^{\mathrm{qq}}$ — диполь-дипольный (ДД), диполь-квадрупольный (ДК) и квадруполь-квадрупольный вклады в резонансную часть ДП, а верхние индексы «s» и «a» отвечают симметричной и антисимметричной частям ДК-вклада.

Последовательное описание тензора ДП строится на основе квантово-механической теории, требует знания атомных и кристаллических волновых функций электронов [8–10] и выходит за рамки настоящей работы. Необходимо отметить, что компоненты тензора ДП вычисляются предварительно (вычисление тензора χ_{ij} можно провести, например, при помощи программы FDMNES [11]) и затем считаются постоянным в расчетах по динамической теории дифракции.

Перейдем к анализу дисперсионного уравнения (5). В силу непрерывности тангенциальных (вдоль поверхности) составляющих волновых векторов падающей на кристалл волны $\boldsymbol{k}_0$ и проходящей волны в среде $\boldsymbol{q}_0$, вектор $\boldsymbol{q}_0$ получает приращение только вдоль нормали к поверхности $\boldsymbol{n}$ (направленной в глубь среды) т. е. $\boldsymbol{q}_0 = \boldsymbol{k}_0 + k_0\varepsilon\boldsymbol{n}$, где ε — так называемая аккомодация [6], подлежащая дальнейшему определению.

Таким образом, подставив тензор ДП в виде (6) в (5), получим, что дисперсионное уравнение является уравнением восьмой степени относительно величины аккомодации ε и внутри кристалла может распространяться 8 проходящих и 8 дифрагированных волн. При этом в случае толстого кристалла следует выбирать только такие решения, для которых $\mathrm{Im}\,\varepsilon_j > 0$.

2. Геометрия Брэгга

Рассмотрим задачу о зеркальном и дифракционном отражении плоской монохроматической волны $\boldsymbol{E}_0 \exp(i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r})$ от идеального монокристалла в условиях РД. Решение задачи будем проводить в наиболее общем случае скользящей некомпланарной брэгговской дифракции [12, 13].

Излучение падает из вакуума под произвольным углом скольжения φ_0 по отношению к поверхности так, что одновременно имеет место дифракционное отражение от атомно-кристаллических плоскостей, составляющих угол ψ по отношению к нормали $\mathbf{n}$, направленной в глубь кристалла вдоль оси z.

Поле в вакууме над поверхностью кристалла ($z \leqslant 0$) состоит из трех волн:

$$\boldsymbol{E}_{\text{vac}}(\boldsymbol{r}) = A_0 \exp(i\boldsymbol{k}_0\boldsymbol{r}) + A_S \exp(i\boldsymbol{k}_S\boldsymbol{r}) + A_h \exp(i\boldsymbol{k}_h\boldsymbol{r}), \tag{7}$$

где A_0, A_S и A_h — амплитуды падающей, зеркально отраженной и дифрагированной волн соответственно, $|\boldsymbol{k}_0| = |\boldsymbol{k}_S| = |\boldsymbol{k}_h| = k_0$, $k_0 = 2\pi/\lambda$, $k_{Sz} = -k_{0z}$. Рентгеновская волна возбуждает в кристалле когерентную суперпозицию проходящей и дифрагированной волн

$$\boldsymbol{E}_{\text{cr}}(\boldsymbol{r}) = E_0 \exp(i\boldsymbol{q}_0\boldsymbol{r}) + E_h \exp(i\boldsymbol{q}_h\boldsymbol{r}), \tag{8}$$

где $E_{0,h}$ — амплитуды, $\boldsymbol{q}_{0,h}$ — волновые векторы проходящей и дифрагированной волн в кристалле. Амплитуды E_0, E_h в (8) удовлетворяют системе динамических уравнений (4), а величина ε определяется из уравнения (5).

Анализ корней дисперсионного уравнения показывает, что в геометрии Брэгга только 4 корня ε_j удовлетворяют условию $\operatorname{Im}\varepsilon_j > 0$, и в кристалле могут распространяться 4 проходящих и 4 дифрагированных волны.

Для определения амплитуд полей в (7), (8) нужно записать условия непрерывности тангенциальных компонент электрических и магнитных полей на границе кристалл–вакуум. В итоге получим систему уравнений

$$A_0^\sigma + A_s^\sigma = \sum_{j=1}^{4} E_{0j}^\sigma, \quad \gamma_0\left(A_0^\sigma - A_s^\sigma\right) = \sum_{j=1}^{4} \Gamma_{0j} E_{0j}^\sigma,$$

$$A_h^\sigma = \sum_{j=1}^{4} R_{hj}^\sigma E_{0j}^\sigma, \quad -\gamma_h A_h^\sigma = \sum_{j=1}^{4} \Gamma_{hj} R_{hj}^\sigma E_{0j}^\sigma, \tag{9}$$

$$A_0^\pi + A_s^\pi = \sum_{j=1}^{4} R_{0j}^{\sigma\pi} E_{0j}^\sigma, \quad \gamma_0\left(A_0^\pi - A_s^\pi\right) = \sum_{j=1}^{4} \Gamma_{0j} R_{0j}^{\sigma\pi} E_{0j}^\sigma,$$

$$A_h^\pi = \sum_{j=1}^{4} R_{hj}^\pi R_{0j}^{\sigma\pi} E_{0j}^\sigma, \quad -\gamma_h A_h^\pi = \sum_{j=1}^{4} \Gamma_{hj} R_{hj}^\pi R_{0j}^{\sigma\pi} E_{0j}^\sigma, \tag{10}$$

где верхний индекс σ отвечает σ-компоненте, а π — π-компоненте, $\gamma_0 = k_{0z}/k_0$, $\gamma_{h0} = (\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{h})_z/k_0$. Если φ_0 — скользящий угол падения излучения на кристалл, то $\gamma_0 = \sin\varphi_0$, $\gamma_{h0} = \gamma_0 - \psi_B$, где $\psi_B = 2\sin\psi\sin\theta_B$ — эффективный параметр угла наклона отражающих плоскостей ($\psi > 0$, $h_z < 0$), а θ_B — угол Брэгга, который определяется из соотношения $h = 2k_0\sin\theta_B$.

Пусть φ_h — угол выхода дифрагированного излучения в вакуум по отношению к поверхности, тогда z-проекция $k_{hz} = -k_0\gamma_h$, где $\gamma_h = \sin\varphi_h$ ($\varphi_h > 0$). Дифракционное отражение в область $z < 0$ (геометрия Брэгга) реализуется при таких углах скольжения φ_0, что $\gamma_0 < \psi_B$, т.е. $\gamma_{h0} < 0$. Угол выхода φ_h при заданных углах φ_0 и ψ определяется выражением [12] $\gamma_h = (\gamma_{h0}^2 + \alpha)^{1/2}$, где параметр $\alpha = 1 - (\boldsymbol{k}_0 + \boldsymbol{h})^2/k_0^2 = 2\Delta\theta\sin 2\theta_B$ характеризует угловую отстройку падающего излучения от угла Брэгга, а условие $\alpha > -\gamma_{h0}^2$ задает допустимые отклонения $\Delta\theta = \theta - \theta_B$ от точного угла Брэгга.

В (9), (10) введены обозначения $\Gamma_{0j} = \gamma_0 + \varepsilon_j$, $\Gamma_{hj} = \gamma_{h0} + \varepsilon_j$ ($j = 1$–4) и учтены связи между амплитудами дифрагированных и проходящих волн в кристалле: $E_{hj}^\sigma = R_{hj}^\sigma E_{0j}^\sigma$, $E_{hj}^\pi = R_{hj}^\pi E_{0j}^\pi$, $E_{0j}^\pi = R_{0j}^{\sigma\pi} E_{0j}^\sigma$, следующие из (4).

Решение системы (9), (10) для амплитуд зеркально отраженных и дифрагированных волн имеет вид

$$A_s^\sigma = \frac{1}{2\gamma_0}\sum_{j=1}^{4}(\gamma_0 - \Gamma_{0j})\left(T_j^\sigma A_0^\sigma + T_j^\pi A_0^\pi\right), \tag{11}$$

$$A_s^\pi = \frac{1}{2\gamma_0}\sum_{j=1}^{4}(\gamma_0 - \Gamma_{0j}) R_{0j}^{\sigma\pi}\left(T_j^\sigma A_0^\sigma + T_j^\pi A_0^\pi\right), \tag{12}$$

$$A_h^\sigma = \sum_{j=1}^{4} R_{hj}^\sigma\left(T_j^\sigma A_0^\sigma + T_j^\pi A_0^\pi\right), \tag{13}$$

$$A_h^\pi = \sum_{j=1}^{4} R_{hj}^\pi R_{0j}^{\sigma\pi}\left(T_j^\sigma A_0^\sigma + T_j^\pi A_0^\pi\right), \tag{14}$$

где введены следующие обозначения:

$$T_1 = G_{41}G_{52} - G_{51}G_{42}, \quad T_1^\sigma = -2\gamma_0 G_{42}/T_1,$$
$$T_1^\pi = 2\gamma_0 G_{52}/T_1, \quad T_2^\sigma = 2\gamma_0 G_{41}/T_1, \quad T_2^\pi = -2\gamma_0 G_{51}/T_1,$$
$$G_{1j} = \{R_{hj}^\sigma(\gamma_h + \Gamma_{hj})\}/\{R_{h4}^\sigma(\gamma_h + \Gamma_{h4})\},$$
$$G_{2j} = \{R_{hj}^\sigma R_{0j}^{\sigma\pi}(\gamma_h + \Gamma_{hj})\}/\{R_{h4}^\sigma R_{0j}^{\sigma\pi}(\gamma_h + \Gamma_{h4})\},$$
$$G_{3j} = (G_{2j} - G_{1j})/(G_{23} - G_{13}),$$
$$G_{4j} = R_{0j}^{\sigma\pi}(\gamma_0 + \Gamma_{0j}) - R_{03}^{\sigma\pi}(\gamma_0 + \Gamma_{03})G_{3j} - - R_{04}^{\sigma\pi}(\gamma_0 + \Gamma_{04})\{G_{1j} - G_{13}G_{3j}\},$$
$$G_{5j} = (\gamma_0 + \Gamma_{0j}) - (\gamma_0 + \Gamma_{03})G_{3j} - - (\gamma_0 + \Gamma_{04})\{G_{1j} - G_{13}G_{3j}\}.$$

Соотношения (11)–(14) представляют собой точное решение задачи зеркального и дифракционного отражения РИ от идеального кристалла в геометрии Брэгга. Они справедливы для любых углов

φ_0 при $\gamma_0 \leqslant \psi_B$ и любых допустимых отклонений $\alpha \geqslant -(\gamma_0 - \psi_B)^2$ от точного угла Брэгга и, как легко показать, в случае диагонального тензора ДП сводятся к полученным ранее соотношениям в нерезонансной теории [13].

3. Аномальное прохождение

Рассмотрим частный случай дифракционного отражения от совершенного монокристалла, обладающего кристаллической решеткой с кубической симметрией. В этом случае тензор ДП диагональный, а система уравнений (4) однородна относительно состояний поляризации. Для упрощения задачи учтем только главный ДД-вклад в резонансную часть ДП (6).

Таким образом, фурье-компоненты тензора ДП примут вид $\tilde{\chi}^{0,\pm h} = \chi^{0,\pm h}\delta_{ij} + \chi_{ii}^{0,\pm h}\delta_{ij}$ $(i, j = 1, 2, 3)$, где опущены верхние индексы «dd» у элементов χ_{ii}, а система уравнений динамической теории РД (4) — вид

$$\begin{gathered}(\delta_0 - \chi^0)E_0^{(1)} - \chi_{11}^0 E_0^{(1)} - \chi^{-h}E_h^{(1)} - \chi_{11}^{-h}E_h^{(1)} = 0,\\ -\chi^h E_0^{(1)} - \chi_{11}^h E_0^{(1)} + (\delta_h - \chi^0)E_h^{(1)} - \chi_{11}^0 E_h^{(1)} = 0,\\ (\delta_0 - \chi^0)E_0^{(2)} - \chi_{22}^0 E_0^{(2)} - C^{(2)}\chi^{-h}E_h^{(2)} - \\ - C^{(2)}\chi_{22}^{-h}E_h^{(2)} = 0,\\ C^{(2)}\chi^h E_0^{(2)} - C^{(2)}\chi_{22}^h E_0^{(2)} + (\delta_h - \chi^0)E_h^{(2)} - \\ - (\chi_{22}^0 C^{(2)2} - \chi_{33}^0 C^{(3)2})E_h^{(2)} = 0. \qquad (15)\end{gathered}$$

Пренебрегая квадратичными по величине ε членами (не рассматриваем скользящие схемы дифракции) для корней ε_i первого и второго уравнений (15), получим

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1,2} &= \big[\{\eta^0(\gamma_0 + \gamma_{h0}) + \gamma_0\alpha\} \pm \\ &\pm \{[\eta^0(\gamma_0 - \gamma_{h0}) + \gamma_0\alpha]^2 + 4\gamma_0\gamma_{h0}\eta^h\eta^{-h}\}^{1/2}\big]/4\gamma_0\gamma_{h0}, \qquad (16)\end{aligned}$$

где $\eta^{0,\pm h} = \chi^{0,\pm h} + \chi_{11}^{0,\pm h}$. Видно, что если параметр

$$\Delta = \eta^0\eta^0 - \eta^h\eta^{-h} = 0, \qquad (17)$$

то при точном выполнении условия Брэгга $(\alpha = 0)$ корень ε_2 обращается в нуль и одна из волн будет распространяться без поглощения. Ситуации, в которых для одного из корней $\operatorname{Im}\varepsilon_j = 0$, будем называть случаями аномального прохождения. Ранее в [14] исследовался эффект аномального прохождения γ-квантов, резонансно взаимодействующих с ядрами в кристалле.

Возникает вопрос, возможна ли ситуация, при которой параметр Δ (17) обращается в нуль или хотя бы достигает своего минимального значения. В качестве примера на рис. 2 приведены расчетные энергетические зависимости действительной и мнимой частей параметра Δ для отражения Ge(224) вблизи K-края поглощения германия. Вычисления проводились при помощи программы FDMNES [11] для кластера Ge, состоящего из 100 атомов [15].

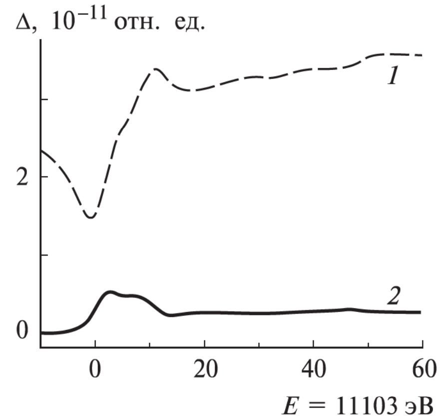

Рис. 2. Энергетическая зависимость действительной (*1*) и мнимой (*2*) части параметра Δ (17) для «запрещенного» отражения (224) вблизи K-края поглощения Ge ($E_K = 11\,103$ эВ)

Видно, что при энергии падающего излучения, примерно на 1 эВ меньшей энергии K-края поглощения, параметр Δ принимает свое минимальное значение. Таким образом, действительно можно говорить о том, что на левом краю K-края поглощения Ge возможно наблюдение эффекта аномального прохождения.

Амплитудный коэффициент дифракционного отражения в рассматриваемом случае определяется выражением $R_{1,2} = (2\gamma_0\varepsilon - \eta^0)/\eta^{-h}$, и кривая дифракционного отражения (КДО) в РД, так же как и в нерезонансной, имеет вид пика с практически плоской вершиной в области углов $\Delta\theta_0 - \Delta\theta_B \leqslant \Delta\theta \leqslant \Delta\theta_0 + \Delta\theta_B$, где выражение под знаком квадратного корня в (16) отрицательно:

$$\begin{aligned}\Delta\theta_0 = &- \operatorname{Re}(\chi^0)(1+b)/2b\sin 2\theta_B - \\ &- \operatorname{Re}(\chi_{11}^0)(1+b)/2b\sin 2\theta_B \qquad (18)\end{aligned}$$

— смещение брэгговского максимума от угла θ_B в результате преломления РИ, а $\Delta\theta_B = \operatorname{Re}(\{\eta^h\eta^{-h}\}^{1/2})/b^{1/2}\sin 2\theta_B$ — полуширина КДО на половине высоты. Второе слагаемое в выражении (18) описывает дополнительное смещение брэгговского максимума за счет эффектов РД.

Таким образом, в настоящей работе построена динамическая теория резонансной дифракции рентгеновского излучения в совершенных кристаллах. Показано, что основные уравнения динамической теории дифракции являются частным случаем резонансной динамической теории. Показана возможность явления аномального прохождения сквозь кристалл излучения с энергией, близкой к энергии краев поглощения атомов.

Автор выражает глубокую благодарность М. А. Андреевой, В. А. Бушуеву и Е. Н. Овчинниковой за интерес к работе и плодотворные обсуждения полученных результатов. Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 04-02-16866 и 05-02-16770).

Литература

1. *Дмитриенко В.Е., Овчинникова Е.Н.* // Кристаллография. 2003. **48**, № 6. С. 59.
2. *Hodeau J.L., Favre-Nicolin V., Bos S.* et al. // Chem. Rev. 2001. **101**. P. 1843.
3. *Беляков В.А., Дмитриенко В.Е.* // УФН. 1989. **158**, № 4. С. 679.
4. *Ведринский Р.В., Козырев В.Э., Новакович А.А., Гончар А.А.* // Исследовано в России. 2005. **129**. С. 1311 (http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2005/129.pdf).
5. *Darwin C.G.* // Phil. Mag. 1917. **19**. P. 315, 675.
6. *Пинскер З.Г.* Рентгеновская кристаллооптика. М., 1982.
7. *Агранович В.М., Гинзбург В.Л.* Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М., 1979.
8. *Колпаков А.В., Бушуев В.А., Кузьмин Р.Н.* // УФН. 1978. **126**, № 3. С. 479.
9. *Blume M.* Resonant anomalous X-Ray scattering / Eds. G. Materlik, C.J. Sparks, K. Fisher. Amsterdam, 1994. P. 495.
10. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. М., 1992.
11. http://www-cristallo.polycnrs-gre.fr/Themes_de_recherche/Simul/ .
12. *Александров П.А., Афанасьев А.М., Степанов С.А.* // Кристаллография. 1984. **29**, № 2. С. 197.
13. *Бушуев В.А., Орешко А.П.* // ФТТ. 2001. **43**, № 5. С. 906.
14. *Афанасьев А.М., Каган Ю.* // ЖЭТФ. 1973. **64**, № 3. С. 1558.
15. *Орешко А.П., Дмитриенко В.Е., Жоли Ив* и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2004. **68**, № 4. С. 578.

Поступила в редакцию
15.05.06