

Программа онлайн "ThreeWaveDiffraction"

В. Г. Кон

(Курчатовский Институт, 04.01.2011)

1. Описание работы программы

1.1 Входные данные, общая информация

Программа [ThreeWaveDif] является наиболее простым вариантом из тех, что делались мной еще в 70-х годах прошлого века. Она была заново реанимирована в 2000 году специально для трехволнового случая при условии, что оба дифрагированных пучка отражаются через входную поверхность и толщина кристалла не играет роли, но не использовалась. Современная версия слегка модифицирована с учетом новых потребностей. Программа первоначально была написана на фортране и предполагала ввод входных данных из текстового файла. Этот файл мог быть набит вручную или сгенерирован другой программой. С тех пор структура входных данных никак не изменилась. Ниже, для краткости, первый вектор обратной решетки обозначается индексом h , второй вектор – индексом g , а разность векторов g и h – индексом d . Итак, входные данные программы - это не менее 39 чисел. Для расчетного блока программы не важно как они организованы. Но некоторые дополнительные процедуры используют указанную ниже организацию входных данных, которой следует придерживаться. Итак,

Первые четыре строки текста входных данных должны содержать значения фурье-компонент восприимчивости для четырех векторов обратной решетки с индексами $0, h, g, d$. Причем отдельно задаются реальная и мнимая части для фурье-компонент от реальной и мнимой частей восприимчивости в последовательности rr, ri, ir, ii . В кристаллах с центром инверсии, если выбрать центр за начало отсчета, то второе и четвертое значения равны нулю, но в общем случае они не равны нулю из-за комплексного характера структурного фактора. Они вычисляются по показанным ниже формулам (см. также [1]). Нужные значения можно получить, используя программу онлайн [Diffraction]. Для некоторых сложных структур будут представлены специальные программы расчета всех значений входных данных. Необходимость в таком задании обусловлена тем, что нужно знать также фурье-компоненты от тех же векторов, но со знаком минус. Эти компоненты описываются теми же числами, но ri и ii в них меняют знак на противоположный. То есть, 4 строки по 4 числа в каждой строке. Все числа должны быть разделены одним или несколькими знаками пробела

Пятая строка должна содержать 6 чисел, разделенных пробелами. Числа должны быть равны значениям углов $\theta_0, \varphi_1, \varphi_2$ в градусах (см. ниже формулы (15),(16)), значению энергии фотонов E в кэВ и два нуля. Последние два числа описывали долю квадрупольных поправок и комптоновского рассеяния в поглощение, но в случае дифракции на отражение их роль пренебрежимо мала. Они важны только в условиях эффекта Бормана в случае Лауэ дифракции. Для расчета компланарной дифракции надо положить $\theta_0 = 90$. Поясню, что угол θ_0 – это угол между нормалью к плоскости векторов обратной решетки и волновым вектором падающей волны, φ_1 – это угол меж-

ду проекциями волновых векторов \mathbf{k}_0 и \mathbf{k}_h на плоскость векторов обратной решетки, φ_2 – то же самое для векторов \mathbf{k}_h и \mathbf{k}_g .

Шестая строка содержит три компоненты вектора внутренней нормали к входной поверхности кристалла в той же системе координат, в которой определяются углы θ_0 , φ_n . В частности в этой системе единичный вектор вдоль направления падающей волны равен $(\sin \theta_0, 0, -\cos \theta_0)$, а в компланарном случае $\mathbf{s}_0 = (1, 0, 0)$, $\mathbf{s}_h = (\cos \varphi_1, \sin \varphi_1, 0)$, $\mathbf{s}_g = (\cos f_2, \sin f_2, 0)$, где $f_2 = \varphi_1 + \varphi_2$. Пусть нормаль в этой системе координат равна $\mathbf{n}_0 = (n_x, n_y, n_z)$, и нам известны углы между направлениями пучков и поверхностью кристалла θ_{s0} , θ_{s1} , θ_{s2} . Тогда $\sin \theta_{s0} = (\mathbf{n}_0 \mathbf{s}_0) = n_x$, $\sin \theta_{s1} = -(\mathbf{n}_0 \mathbf{s}_h) = -n_x \cos \varphi_1 - n_y \sin \varphi_1$. Из этих двух условий сразу определяем нужные компоненты нормали

$$n_x = \sin \theta_{s0}, \quad n_y = -\frac{\sin \theta_{s1} + n_x \cos \varphi_1}{\sin \varphi_1}, \quad n_z = (1 - n_x^2 - n_y^2)^{1/2}.$$

Условие нормировки не определяет знак z -компоненты вектора нормали. Но так как нормаль необходима только для определения углов θ_{s0} , θ_{s1} , θ_{s2} , а на их значения z -компонента не влияет, то достаточно поставить любой знак. Любое значение ставить нельзя, так как компоненты нормали в программе нормируются на единицу.

Строки с седьмой по девятую должны содержать параметры цикла по каждому из углов θ_1 , θ_2 , θ_3 (см. ниже формулу (20)). Для каждого из углов необходимо задать начальное значение интервала, конечное значение интервала и число точек. Все точки на интервале определяются из условия равноудаленности, то есть с постоянным шагом. Очевидно, что число точек не может быть равно нулю, но может быть равно единице. В этом случае конечная точка интервала не учитывается. Поясню, что θ_1 , θ_2 – это угловые отклонения падающей волны от точного направления геометрической трехволновой дифракции. Углы исходно отсчитываются от стандартных направлений, но в некоторых случаях возможен поворот этих направлений.

Десятая строка содержит не менее 7-ти чисел. Условно обозначим их как: **tar, key, alm, C2, tar1, C3, C4**. При этом возможны различные режимы работы программы в зависимости от значения параметра **key**.

Если **key** = 0,1 то производится вращение осей для угловых переменных как это написано в разделе 2.4, причем угол вращения задается параметром **tar** = $\tan \varphi_a$. Такое вращение позволяет выставить оси таким образом, что один из углов будет точно соответствовать полярному углу для двухволновой дифракции на каком-то (например, на первом рефлексе). Тогда при больших значениях второго угла двухволновая дифракция на первом рефлексе не будет смещаться по первому углу, а будет всегда находиться в одном месте. Стандартные же оси выбираются из условия симметрии именно трехволновой дифракции. При этом пики расходятся в стороны при большом отклонении по какому-то углу.

Если **key** = 0, то рассчитывается весь трехмерный массив по углам θ_1 , θ_2 , θ_3 . В этом случае расчетный модуль программы не записывает результат в текстовый массив, а записывает только числовые массивы в коде компьютера по каждому пучку отдельно. Эти массивы содержат очень много точек, среди которых многие равны нулю. Чтобы ускорить расчет во всех режимах делается проверка на значение углов вращения матрицы для обоих пучков (то есть отношение недиагонального элемента матрицы к разности диагональных элементов). Если они меньше заданной величины параметра

alm, то расчет не проводится, а интенсивности отраженных пучков просто обнуляются. Реально они будут равны какой-то очень малой величине, значение которой для нас не существенно.

Если **key** = 1, то программа записывает текстовый массив, который содержит три колонки, которые затем показывает на графике. Первая колонка – это просто номер точки, вторая колонка – интенсивность первого рефлекса, третья колонка – интенсивность второго рефлекса, умноженная на коэффициент **C2**. Таким образом, для получения правильных значений он должен быть равен 1. Но иногда так бывает, что первый рефлекс сильный, а второй – очень слабый. Чтобы на графике он был заметен, можно задавать коэффициент **C2** больше 1. В качестве аргумента в текстовый массив записывается номер точки в том порядке как она вычисляется. Впоследствии аргумент можно подставить на основе входных данных. Очевидно, что пользоваться таким массивом удобно лишь в том случае, когда выделяется цикл по какой-либо одной переменной, а остальные два цикла содержат только одну точку.

Важным частным случаем является компланарный случай, в котором интенсивности не зависят от угла θ_1 , и цикл по нему надо задавать с одной точкой и нулевым значением. В этом случае **tar** = $\tan \varphi_a = 0$. Соответственно угол θ_2 сразу задает угловую зависимость отражения.

Если **key** = 2, то программа в цикле по θ_3 одновременно изменяет значение угла θ_2 так, что $\theta_{2c} = \theta_2 - C(\theta_3 - \theta_{3m})$, где $C = \tan \theta_{Bm}$, и все значения, полученные в цикле по θ_3 , суммируются в одну точку, причем предполагается, что спектральная линия имеет лоренцевый закон убывания интенсивности, отсчитываемой от среднего значения θ_{3m} интервала по θ_3 . То есть суммирование идет с заданным весом. Этот режим специально был разработан для моделирования схемы эксперимента по компланарной дифракции с рентгеновской трубкой и с одним монохроматором. В этом случае зависимость от угла θ_1 отсутствует, но на плоскости углов (θ_2, θ_3) монохроматор вырезает линию. Полуширина этой линии $2\theta_{3d}$ вычисляется из заданного интервала по θ_3 , то есть Δ_3 , делением этого интервала на параметр **C2** и умножением на 2. Все точки на этой линии суммируются с весом $1/(1 + ((\theta_3 - \theta_{3m})/\theta_{3d})^2)$, после чего остается одномерный массив зависимости от θ_2 . То есть программа реально вычисляет двумерный массив. При этом цикл по θ_3 идет в указанных пределах. Но внутри этого цикла одновременно изменяется значения угла θ_{2c} по указанному выше закону, отсчитывая от текущего значения θ_2 цикла по θ_2 . Коэффициент C задается параметром **tar**. То есть в этом случае параметры **tar** и **C2** имеют другое значение, чем обычно. Параметр **alm** имеет тот же самый смысл, что и выше. Параметр **tar1** задает угол вектора поляризации для поляризованного излучения относительно стандартных осей. В случае синхротронного излучения его надо задавать и обычно он совпадает с параметром **tar**. Но в данном случае его надо положить равным нулю, что означает неполяризованное излучение. В случае поляризованного излучения в пи-направлении вместо нуля надо задавать маленькое число.

Результат также записывается в текстовый массив, причем в качестве аргумента записывается угол θ_2 отсчитываемый от среднего значения (чтобы не записывать слишком большие числа если интервал сильно сдвинут). Интервал значений по энергии можно задавать сдвинутым из нуля, что будет соответствовать отклонению от трехволновой точки. Интервал по углу θ_2 всегда необходимо настраивать на какой-либо рефлекс, так чтобы условия Брэгга для него выполнялись. Выполнение условия Брэгга для обоих

рефлексов происходит только вблизи трехволновой точки. Так, например, полуширина спектральной линии $\text{MoK}\alpha_1$ равна 340 мкрад [2], поэтому для правильного расчета интервал по энергии может быть равен $\Delta_3 = 1700$ при $\mathbf{C2} = 10$. Этот интервал должен проходиться с мелким шагом не менее 1, в то время как интервал по углу θ_2 можно проходить с более крупным шагом. Для сравнения с экспериментом полученную кривую надо свернуть с кривой отражения монохроматора. Полуширина кривой отражения монохроматора (которая аппроксимируется гауссовой функцией) определяется параметром $\mathbf{C4}$, а параметр $\mathbf{C3}$ используется для увеличения слабого отражения, то есть интенсивность слабого отражения умножается на $\mathbf{C3}$. Важное замечание – свертка вычисляется методом двойного преобразования Фурье, поэтому число точек в числе по θ_2 должно быть либо 128, либо 256.

Параметр **tar1** во всех случаях задает поляризацию падающего излучения как тангенс угла между вектором реальной поляризации и вектором $\mathbf{e}_{оп}$ стандартной поляризации. Если он равен нулю, то вычисляется результат для неполяризованного излучения. Поэтому π -поляризованную волну надо задавать очень маленьким, но ненулевым значением тангенса.

Описанные выше параметры характеризуют процессы вычисления, которые могут быть весьма разнообразны. Однако, конкретная реализация того или другого варианта требует адекватной выдачи результатов в виде графиков. Поэтому рассмотрим конкретные варианты, реализованные в программе полностью, то есть вместе с графикой.

1.2 Варианты конкретных возможных расчетов

Вариант 1. Компланарная дифракция в схеме с рентгеновской трубкой и одним кристаллом-монохроматором. Этот случай уже достаточно подробно описан выше. При этом цикл по θ_1 имеет одну точку, цикл по θ_2 является основным и выдается на график, для выполнения свертки он должен иметь 128, 256 или 512 точек, цикл по θ_3 должен содержать весь спектр излучения и проходиться с достаточно мелким шагом. Хотя реально энергию в рентгеновской трубке менять нельзя, но в расчете можно сдвигать центр цикла из точки компланарной дифракции на любое значение. Параметры 10-й строки равны: **tar** = $\tan \theta_{Bm}$, **key** = 2, **C2** определяет θ_{zd} (см. выше), **tar1** = 0, **C3** умножается на интенсивность слабого отражения, **C4** задает полуширину гауссовой функции для свертки с результирующими кривыми в мкрад, **alm** имеет обычное значение 0.01 или меньше. Этот случай весьма специфичен, но он использовался в публикации [3] и он как раз показывает опубликованные рисунки.

Вариант 2. Это модельный расчет, не соответствующий никакой экспериментальной схеме. В этом варианте два из трех циклов (любые) должны иметь одну точку, а оставшийся цикл может иметь много точек и так раз эта зависимость и показывается. В десятой строке **tar** = $\tan \varphi_a$, **key** = 1, **C2** = 1, **tar1** определяет направление поляризации, **C3** – масштабный множитель, **C4** = 0, **alm** имеет обычное значение 0.01 или меньше. Результаты расчета в этом случае выдаются точно в таком же виде, как и в предыдущем варианте. Но в основном он предназначен для показа собственных кривых в случае плоской монохроматической падающей волны. При этом от свертки можно отказаться делая нулевой полуширину гауссовой кривой либо задавая неправильное число точек (то есть отличное от 128, 256 или 512).

Вариант 3. Это модельный расчет двумерной зависимости дифракции плоских монокроматических волн. Результат расчета не показывается в виде таблицы чисел, а сразу показывается графически в виде карты почернения. Могут быть различные варианты. Если число точек в первом цикле не равно 1, то показывается матрица точек, вычисленных в первом и втором циклах. При этом третий цикл должен иметь число точек, равным 1. Если же число точек в первом цикле равно 1, то показывается матрица по двум последним циклам. Параметры десятой строки при этом имеют такой смысл: **tar** = $\tan \varphi_a$, **key** = 0, **C2** = 1, 2, 3 или -1, -2, -3, **tar1** определяет направление поляризации, **C3** = 0, **C4** = 1, 2, ... , **alm** имеет обычное значение 0.01 или меньше. Смысл параметра **C4** следующий: матрица точек имеет размеры, равные числам точек в циклах, причем первый цикл изображается вертикальной осью, а второй – горизонтальной. Каждая расчетная точка может соответствовать одной или нескольким точкам экрана и параметр **C4** как раз и показывает – сколько точек экрана приходится на одну расчетную точку. Так если в цикле используется 201 точка и **C4** = 1, то размер картинки будет 201 пиксел, но если **C4** = 2, то размер картинки будет 402 пикселей, и так далее. Параметр **C2** задает стиль показа картинки. Модуль этого параметра задает характер изображения зависимости, то есть пропорциональности почернения расчетному значению. Если **C2** = 1, то зависимость линейная, если 2, то логарифмическая, если 3, то корневая. В данном случае логарифмическую зависимость использовать нельзя, так как в матрице вычисленных значений есть нулевые. Знак параметра **C2** задает контраст. Если он положительный, то минимум черный, максимум белый, а если отрицательный, то наоборот.

Вариант 4. Компланарная дифракция в схеме с источником синхротронного излучения (СИ) и одним кристаллом монохроматором, а также щелью. В этом случае азимутальная расхожимость не существенна и цикл по θ_1 имеет одну точку, цикл по θ_2 является основным и выдается на график, для выполнения свертки он должен иметь 128, 256 или 512 точек, цикл по θ_3 должен содержать весь спектр излучения и проходить с достаточно мелким шагом. Особенность состоит в том как вычислять спектр излучения. В данном варианте предполагается, что спектр излучения имеет гауссовый вид с полушириной, в 3 раза меньшей, чем указанный в цикле по θ_3 интервал и с максимумом в середине интервала. Программа сначала вычисляет двумерный массив по θ_2 и θ_3 . Затем при каждом значении θ_2 все значения θ_3 суммируются с указанным гауссовым весом и трехколоночная таблица записывается точно так же как в варианте 2. Графики показываются точно так же, как в варианте 1. Параметры 10-й строки равны: **tar** = 0, **key** = 0, **C2** = 5, **tar1** = 0, **C3** умножается на интенсивность слабого отражения, **C4** задает полуширину гауссовой функции для свертки с результирующими кривыми в мкрад, **alm** имеет обычное значение 0.01 или меньше. Этот случай также достаточно специфичен, но он соответствует проведенному эксперименту, результаты которого будут опубликованы.

Вариант 5. Некомпланарная дифракция монокроматического излучения. В этом случае зависимость от частотного угла отсутствует и цикл по θ_3 имеет одну точку, цикл по θ_2 является основным и выдается на график, для выполнения свертки он должен иметь 128, 256 или 512 точек, цикл по θ_1 должен содержать интервал по азимутальному углу, который пропускает монохроматор. Предполагается, что весь интервал имеет одинаковый вес, то есть весовая функция похожа на прямоугольник. Программа сначала

вычисляет двумерный массив по θ_1 и θ_2 . Затем при каждом значении θ_2 все значения θ_1 суммируются с указанным равным весом и трехколоночная таблица записывается точно так же как в варианте 2. Графики показываются точно так же, как в варианте 1. Параметры 10-й строки равны: **tar** = $\tan \varphi_a$, **key** = 0, **C2** = 6, **tar1** = tar, **C3** умножается на интенсивность слабого отражения, **C4** задает полуширину гауссовой функции для свертки с результирующими кривыми в мкрад, **alm** имеет обычное значение 0.01 или меньше. Этот случай соответствует схеме эксперимента с двумя кристаллами монохроматорами в плоскости полярного угла, которые сильно монохроматизируют и коллимируют излучение, и одним кристаллом в плоскости азимутального угла, который коллимирует излучение в некоторых пределах. Эксперимент такого типа был выполнен в работе [4].

1.3 Результаты расчета

Результаты расчета зависят от конкретного случая. Так в **варианте 1** программа предлагает на выбор два текстовых массива и график. В первом текстовом массиве содержится **log-data**, то есть записи, которые делает расчетный модуль программы. В них содержатся компоненты векторов поляризации и падающего пучка, действительная и мнимая части динамической матрицы рассеяния, а также коэффициенты при трех углах в формуле для параметра отклонения от условия Брэгга для каждого пучка. Эта информация выдается при всех режимах и она всегда одна и та же, так что ее не всегда имеет смысл смотреть. Во втором текстовом массиве содержатся три колонки чисел: угол и два коэффициента отражения в таком виде как их выдает расчетный модуль, то есть без умножения слабой интенсивности и без свертки с гауссовой функцией монохроматора. Эти вычисления проводятся АСЛ программой и показываются только на графике. Первый график до вычисления свертки показывается при любом числе точек. Второй, после вычисления свертки только при числе точек 128, 256 или 512 и при полуширине гауссовой кривой больше 0.01 мкрад.

В **варианте 2** форма выдачи результатов та же, только во втором текстовом массиве в первой колонке стоит просто номер точки. Однако на графиках уже стоят реальные значения полярного угла.

В **варианте 3** предлагается на выбор один текстовый массив и две картинки отдельно по каждому пучку. Текстовый массив тот же самый, что и первый массив рассмотренных вариантов. Картинки содержат карты почернения, показывающие двумерное распределение интенсивности. Числа двумерного распределения не показываются, так как их очень много и они практически нигде не используются. Этот случай разумно использовать только в иллюстративных целях.

В **вариантах 4 и 5** форма выдачи результатов такая же, как в варианте 2.

2. Конкретные примеры

2.1 вариант 1: компланарная (220, 371) дифракция в парателлурите.

-6.9285 0. 0.18206 0.
-3.1446 0. 0.14762 0.
0.4380 -0.5144 -0.03054 0.04764
0.7191 -0.8835 -0.04281 0.05777
90. 24.074 44.514 17.48 0. 0.
0.20854 -0.97801 0.
0 0 1
-192. 192. 256
-650. 1050. 1701
0.188 2 0.01 10. 0. 50. 10.

2.2 вариант 2: тот же случай, но собственные кривые

-6.9285 0. 0.18206 0.
-3.1446 0. 0.14762 0.
0.4380 -0.5144 -0.03054 0.04764
0.7191 -0.8835 -0.04281 0.05777
90. 24.074 44.514 17.48 0. 0.
0.20854 -0.97801 0.
0 0 1
-192. 192. 256
0. 0. 1
0. 1 0.01 1. 0. 50. 0.

2.3 вариант 3: тот же случай, но двумерные распределения

-6.9285 0. 0.18206 0.
-3.1446 0. 0.14762 0.
0.4380 -0.5144 -0.03054 0.04764
0.7191 -0.8835 -0.04281 0.05777
90. 24.074 44.514 17.48 0. 0.
0.20854 -0.97801 0.
0 0 1
-100. 100. 201
-100. 100. 201
0. 0 0.01 1. 0. 0. 0.

2.4 вариант 4: тот же случай, но синхротронное излучение

-6.9285 0. 0.18206 0.
-3.1446 0. 0.14762 0.
0.4380 -0.5144 -0.03054 0.04764
0.7191 -0.8835 -0.04281 0.05777
90. 24.074 44.514 17.48 0. 0.
0.20854 -0.97801 0.
0 0 1
-150. 150. 256
-122. 148. 541
0. 0 0.01 5. 0. 10. 10.

2.5 вариант 5: дифракция (222, 113) в кристалле германия

-3.1474 0. 0.096274 0.
0. 0. 0. 0.
-1.0538 1.0538 0.045883 -0.045883
-1.3308 1.3308 0.047511 -0.047511
8.866 159.95 58.992 25. 0. 0.
0.29889 -0.052838 0.
20.8 23.2 11
-46. 54. 512
0. 0. 1
-5.5893 0. 0.01 6 -5.5893 1 0.3

3. Расчетные формулы

3.1 Общие формулы

В этом разделе даны основные теоретические формулы, которые использовались при написании программы. К настоящему времени теория многоволновой дифракции рентгеновских лучей разработана достаточно полно, включая не только угловую зависимость коэффициентов когерентного отражения [3-8], но и выход вторичных излучений в результате некогерентных процессов рассеяния в условиях многоволновой дифракции рентгеновских лучей [8-10]. Опубликованы также некоторые результаты экспериментальной проверки теории [11-17], хотя эти результаты пока немногочисленны. Естественно, что в первых экспериментальных работах изучались простые однокомпонентные кристаллы германия и кремния. Вместе с тем интересные ситуации могут быть и в многокомпонентных кристаллах

Ниже рассматривается N -волновой случай, когда плоская монохроматическая поляризованная рентгеновская волна $\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t) = E_{i0} \mathbf{e}_{0p} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r} - i\omega t)$ с волновым вектором

\mathbf{k}_0 , энергией $E = \hbar\omega$ и единичным вектором поляризации \mathbf{e}_{0p} , падает на совершенный кристалл в форме плоскопараллельной пластины, ориентированный таким образом, что приближенно выполняется одновременно $N - 1$ условий Брэгга на векторах обратной решетки кристалла \mathbf{h}_m , $m = 1, \dots, N - 1$, причем N больше двух. Электрическое поле рентгеновского излучения в кристалле представляет собой систему когерентных суперпозиций преломленной и дифрагированных плоских волн (стоячие волны), каждая из которых является собственным решением уравнений Максвелла в кристалле. Всего существуют $2N$ таких суперпозиций в результате решения системы из $2N$ линейных однородных уравнений.

Волновое поле в кристалле описывается выражением

$$\mathbf{E}_p(\mathbf{r}, t) = \exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} - i\omega t) \sum_j \lambda_j^{(p)} \exp\left([- \mu_j + i\varepsilon_j] \frac{z}{2}\right) \sum_{m,s} E_{ms}(j) \exp(i\mathbf{h}_m\mathbf{r}) \mathbf{e}_{ms} \quad (1)$$

Здесь индекс j принимает значения от 1 до N и нумерует различные стоячие рентгеновские волны (СРВ), которые описываются суммой по индексам m и s , причем индекс m принимает значения от 0 до $N - 1$ и нумерует преломленную ($m = 0$) и дифрагированные ($m > 0$) волны, а индекс $s = \pi, \sigma$ нумерует состояния поляризации каждой волны. Единичные векторы поляризации \mathbf{e}_{ms} в каждой волне могут быть выбраны произвольно, но они должны быть перпендикулярны между собой и перпендикулярны волновому вектору волны $\mathbf{k}_m = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_m$. Если ввести единичный вектор $\mathbf{s}_m = \mathbf{k}_m / |\mathbf{k}_m|$, то тройка векторов $\mathbf{e}_{m\pi}$, $\mathbf{e}_{m\sigma}$ и \mathbf{s}_m образует декартовый базис.

Каждая СРВ возбуждается в кристалле с различной степенью в зависимости от ориентации кристалла относительно падающей волны и состояния поляризации падающей волны. Степень возбуждения описывается параметром $\lambda_j^{(p)}$, который находится из граничных условий сшивки поля $\mathbf{E}^{(p)}(\mathbf{r}, t)$ с полем $\mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t)$ на входной поверхности кристалла, при условии, что поле на противоположной грани отсутствует. Можно рассматривать и более сложную задачу, когда поле на противоположной грани также не равно нулю из-за дифракции на других кристаллах. Это приводит лишь к более сложным граничным условиям, хотя общая теория не меняется. Ниже мы ограничимся случаем дифракции на одном кристалле.

Каждая СРВ при распространении в глубь кристалла от входной поверхности изменяет свою фазу и поглощается вследствие преломления на входной поверхности и поглощения из-за неупругих процессов. Эти процессы описываются экспоненциальным фактором $\exp([- \mu_j + i\varepsilon_j] z/2)$, где z – координата, отсчитываемая от входной поверхности кристалла по направлению внутренней нормали к ней. Можно показать, что коэффициент поглощения каждой СРВ пропорционален интенсивности выхода вторичных излучений для данной СРВ.

Каждая СРВ является решением уравнения Максвелла. Ниже теория описана в дипольном приближении, в котором уравнение Максвелла имеет наиболее простой вид

$$[-\nabla^2 - K^2(1 + \chi(\mathbf{r}, \omega))]\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad K = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2)$$

где $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ – зависящая от координат поляризуемость кристалла для частоты ω рентгеновской волны, равная $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) - 1$, где $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ – диэлектрическая функция. В совершенном кристалле $\chi(\mathbf{r}, \omega)$ является периодической функцией и пропорциональна периодической плотности электронов. Для жестких рентгеновских лучей поляризуемость

весьма мала и мы будем измерять ее в мкрад = 10^{-6} . Соответственно ε_j и μ_j во столько же раз меньше K . Подставим выражение (1) в уравнение (2) и пренебрежем членами второго порядка по малому параметру $\chi(\mathbf{r})$ (ниже второй аргумент для простоты опущен). В результате получаем

$$\sum_{m',s'} [k_{m'}^2 + k_{m'z}(\varepsilon_j + i\mu_j) - K^2 - K^2\chi(\mathbf{r})] E_{m's'}(j) \mathbf{e}_{m's'} \exp(i\mathbf{k}_{m'}\mathbf{r}) = 0 \quad (3)$$

Умножим это векторное уравнение скалярно на $\mathbf{e}_{ms} \exp(-i\mathbf{k}_m\mathbf{r})$ и усредним по объему элементарной ячейки кристаллической решетки. Эта процедура приводит к системе $2N$ линейных однородных уравнений для компонент многоволнового вектора СРВ, которую удобно записать в виде

$$(\varepsilon_j + i\mu_j) E_{ms}(j) = \frac{K}{\gamma_m} \sum_{m',s'} [\chi_{mm'}^{ss'} - \alpha_m \delta_{mm'}^{ss'}] E_{m's'}(j) \quad (4)$$

где $\gamma_m = k_{mz}/K$ – геометрический параметр, равный синусу угла между направлением m -го дифрагированного пучка и поверхностью кристалла,

$$\begin{aligned} \chi_{mm'}^{ss'} &= (\mathbf{e}_{ms}\mathbf{e}_{m's'}) \frac{1}{V_0} \int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r}) \exp(-i[\mathbf{k}_m - \mathbf{k}_{m'}]\mathbf{r}), \\ \alpha_m &= (k_m^2 - K^2)/K^2, \quad \delta_{mm'}^{ss'} = \delta_{mm'} \delta_{ss'} \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнения (4) и (5) полностью определяют все $2N$ линейно независимых решений для комплексных собственных значений $(\varepsilon_j + i\mu_j)$ и комплексных собственных векторов $E_{ms}(j)$ СРВ, пронумерованных индексом j .

Степени возбуждения различных СРВ, то есть параметры $\lambda_j^{(p)}$ находятся из граничных условий, которые можно записать на каждой поверхности кристалла и для каждой дифрагированной волны. Имеем

$$\begin{aligned} \sum_j \lambda_j^{(p)} E_{0s}(j) &= E_{i0} \delta_{sp}, \\ \sum_j \lambda_j^{(p)} E_{ms}(j) &= 0, \quad m > 0, \gamma_m > 0 \\ \sum_j \lambda_j^{(p)} E_{ms}(j) \exp\left([- \mu_j + i\varepsilon_j] \frac{z_c}{2}\right) &= 0, \quad m > 0, \gamma_m < 0 \end{aligned} \quad (6)$$

где z_c – толщина кристаллической пластины.

Из общих свойств системы уравнений (6) следует, что в чистом Лауэ случае, когда все параметры $\gamma_m > 0$, вектор Пойнтинга во всех СРВ направлен в глубь кристалла и все СРВ затухают с ростом z . Другими словами все коэффициенты μ_j положительны. В этом случае граничная задача имеет простой вид и может быть решена аналитически. В смешанном Лауэ-Брэгг случае, когда часть параметров $\gamma_m < 0$ (заметим, что всегда $\gamma_0 > 0$) это не так. Для части СРВ вектор Пойнтинга направлен из глубины на поверхность кристалла. Для таких СРВ коэффициенты μ_j отрицательны и поле возрастает при движении от верхней до нижней границы. Более того, как следует из численных расчетов и из общих соображений, число СРВ с отрицательными значениями μ_j строго

равно числу отрицательных параметров γ_m , умноженному на 2. Заметим, что строгое математическое доказательство этого факта до сих пор получить не удалось. Можно показать, что хотя эти СРВ возрастают с ростом z , у самой поверхности они очень малы, потому что степени их возбуждения, то есть параметры $\lambda_j^{(p)}$ имеют очень малые значения с таким расчетом, чтобы на нижней поверхности эти СРВ имели значения, сравнимые со значениями других (затухающих) СРВ. В предельном случае очень толстого кристалла, когда интерес представляет лишь область вблизи входной поверхности кристалла этими СРВ можно пренебречь.

В данной работе мы рассмотрим предел очень толстого кристалла. При этом мы будем полагать $\lambda_j^{(p)} = 0$ для СРВ с $\mu_j < 0$. В результате достаточно определить $\lambda_j^{(p)}$ только для СРВ с $\mu_j > 0$. Последние находятся из укороченной системы уравнений

$$\sum_j \lambda_j^{(p)} E_{ms}(j) = E_{i0} \delta_{m0} \delta_{sp}, \quad \gamma_m > 0, \quad \mu_j > 0. \quad (7)$$

Таким образом, приведенные выше уравнения описывают все параметры СРВ и полное волновое поле излучения в кристалле.

Выпишем также формулу для коэффициентов отражения рентгеновских лучей по Брэггу, то есть для волн, отраженных в обратном направлении ($\gamma_m < 0$),

$$R_m^{(p)} = \frac{|\gamma_m|}{\gamma_0 I_0} \sum_s \left| \sum_j \lambda_j^{(p)} E_{ms}(j) \right|^2, \quad I_0 = |E_{i0}|^2 \quad (8)$$

В случае, когда падающее излучение неполяризовано, необходимо усреднить эту формулу по состояниям поляризации, то есть фактически просуммировать оба состояния поляризации с весом $1/2$.

3.2 Преобразование к расчетным формулам

Система уравнений (4) несимметрична относительно индексов m и m' из-за геометрического множителя γ_m . По этой причине удобно перейти к новому вектору СРВ $B_{ms}(j)$ используя представление

$$E_{ms}(j) = E_{i0} \left(\frac{\gamma_0}{\gamma_m} \right)^{1/2} B_{ms}(j) \quad (9)$$

При этом решение системы уравнений (4) сводится к задаче на собственные решения

$$(\varepsilon_j + i\mu_j) B_{ms}(j) = \sum_{m's'} G_{mm'}^{ss'} B_{m's'}(j) \quad (10)$$

симметричной матрицы

$$G_{mm'}^{ss'} = \frac{K s_{mm'}}{(|\gamma_m \gamma_{m'}|)^{1/2}} [\chi_{mm'}^{ss'} - \alpha_m \delta_{mm'}^{ss'}] \quad (11)$$

где фактор $s_{mm'}$ равен 1 если $\gamma_m > 0$ и $\gamma_{m'} > 0$, равен -1 если $\gamma_m < 0$ и $\gamma_{m'} < 0$ и равен $-i$ если $\gamma_m \gamma_{m'} < 0$.

Соответственно граничные условия (7) принимают более простой вид

$$\sum_j \lambda_j^{(p)} B_{ms}(j) = \delta_{m0} \delta_{sp}, \quad \gamma_m > 0, \quad \mu_j > 0 \quad (12)$$

так же как и формула для коэффициентов отражения

$$R_m^{(p)} = \sum_s \left| \sum_j \lambda_j^{(p)} B_{ms}(j) \right|^2, \quad \gamma_m < 0 \quad (13)$$

3.3 Геометрические параметры

В случае систематической многоволновой дифракции, когда все векторы обратной решетки лежат в одной плоскости (в трехволновом случае всегда так) удобный выбор векторов поляризации был предложен в работе [20]. Чтобы описать суть выбора, перенесем начала всех векторов обратной решетки в одну точку $\mathbf{0}$, тогда концы векторов вписываются в окружность, представляющую собой сечение сферы Эвальда. В трехволновом случае имеем два вектора обратной решетки \mathbf{h}_1 и \mathbf{h}_2 . В более общем случае дополнительные векторы обозначим \mathbf{h}_i . Из центра окружности проведем радиусы в точки $\mathbf{0}$, \mathbf{h}_1 и т. д. Обозначим единичные векторы в направлении этих радиусов \mathbf{r}_0 , \mathbf{r}_1 , и т. д. Введем также единичный вектор по нормали к плоскости векторов обратной решетки \mathbf{n}_h , направление которого составляет тупой угол с направлениями пучков (это необязательно, просто традиция). Тогда единичные векторы по направлениям дифрагированных пучков можно выразить через один угол θ_0

$$\mathbf{s}_m = \mathbf{r}_m \sin \theta_0 - \mathbf{n}_h \cos \theta_0 \quad (14)$$

В системе координат с осью X вдоль \mathbf{r}_0 и осью Z вдоль \mathbf{n}_h даже не нужно знать связь этих векторов с векторами обратной решетки. Достаточно лишь знать углы между \mathbf{r}_0 и \mathbf{r}_1 , между \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 и т. д. Обозначая эти углы φ_1 , φ_2 и т. д. имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_{m\pi} &= (\cos \theta_0 \cos f_m, \quad \cos \theta_0 \sin f_m, \quad \sin \theta_0), \\ \mathbf{e}_{m\sigma} &= (\sin f_m, \quad -\cos f_m, \quad 0), \\ \mathbf{s}_m &= (\sin \theta_0 \cos f_m, \quad \sin \theta_0 \sin f_m, \quad -\cos \theta_0) \end{aligned} \quad (15)$$

где $f_0 = 0$, $f_1 = \varphi_1$, $f_2 = \varphi_1 + \varphi_2$ и т. д.

При таком выборе все векторы сигма-поляризации лежат в одной плоскости вместе с векторами обратной решетки и никогда не равны друг другу, как в двухволновом случае. Углы θ_0 и φ_m находятся из соотношений

$$\sin \frac{\varphi_m}{2} = \frac{|\mathbf{h}_m|}{2R}, \quad \sin \theta_0 = \frac{R}{K} \quad (16)$$

где R – радиус окружности векторов обратной решетки, который легко вычислить по обычным формулам треугольника, используя модули векторов обратной решетки. Для расчета геометрических параметров γ_m необходимо знать координаты вектора нормали

к входной поверхности кристалла в этой же системе координат. Проще всего сначала выразить нормаль через векторы обратной решетки, а затем использовать представление векторов обратной решетки $\mathbf{h}_m = R(\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_0)$, $\mathbf{r}_m = (\cos f_m, \sin f_m, 0)$

Хотя расчет проводится с указанными выше стандартными векторами поляризации, можно без труда пересчитать результат на другое направление вектора поляризации \mathbf{e}_{0p} в падающей волне, составляющее произвольный угол φ_p с вектором $\mathbf{e}_{0\pi}$, а именно, $\mathbf{e}_{0p} = \mathbf{e}_{0\pi} \cos \varphi_p + \mathbf{e}_{0\sigma} \sin \varphi_p$. В этом случае поляризационная матрица определяется следующим образом

$$\Lambda_{jj'}^{(p)} = \bar{\Lambda}_{jj'} + \Lambda_{jj'}^C \cos(2\varphi_p) + \Lambda_{jj'}^S \sin(2\varphi_p), \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{\Lambda}_{jj'} &= \frac{1}{2} [\lambda_{j'}^{(\pi)*} \lambda_j^{(\pi)} + \lambda_{j'}^{(\sigma)*} \lambda_j^{(\sigma)}], \\ \Lambda_{jj'}^C &= \frac{1}{2} [\lambda_{j'}^{(\pi)*} \lambda_j^{(\pi)} - \lambda_{j'}^{(\sigma)*} \lambda_j^{(\sigma)}], \\ \Lambda_{jj'}^S &= \frac{1}{2} [\lambda_{j'}^{(\pi)*} \lambda_j^{(\sigma)} + \lambda_{j'}^{(\sigma)*} \lambda_j^{(\pi)}] \end{aligned} \quad (18)$$

Для направления, перпендикулярного заданному достаточно изменить знак перед членами с $\cos(2\varphi_p)$ и с $\sin(2\varphi_p)$.

3.4 Угловая и частотная зависимости

В реальном эксперименте обычно вращают кристалл относительно падающего пучка, однако в теории удобно изменять направление падающего пучка относительно неподвижного кристалла. При измерении интегральной интенсивности это не меняет результатов. В случае систематической дифракции для каждой длины волны излучения существует однозначное многоволновое направление падающего пучка, задаваемое единичным вектором \mathbf{s}_0 (см. выше). Для этого направления параметры отклонения от кинематического условия Брэгга α_m (5) для всех дифрагированных волн равны нулю. Отклонения от этого направления можно задать прибавляя к волновому вектору $K\mathbf{s}_0$ маленькую добавку \mathbf{q} в плоскости, перпендикулярной \mathbf{s}_0 . Но если направление задано, то небольшое изменение длины волны излучения относительно базовой длины волны также приводит к отклонению от кинематического условия Брэгга за счет компоненты \mathbf{q} вдоль \mathbf{s}_0 . Естественно в качестве базиса в перпендикулярной плоскости выбрать векторы стандартных поляризаций $\mathbf{e}_{0\pi}$ и $\mathbf{e}_{0\sigma}$.

Итак, реальный вектор

$$\mathbf{k}_0 = K\mathbf{s}_0 + \mathbf{q}, \quad \mathbf{q} = K[\theta_1\mathbf{e}_{0\pi} + \theta_2\mathbf{e}_{0\sigma} + \theta_3\mathbf{s}_0], \quad (19)$$

где $\theta_3 = \Delta\omega/\omega_0$. Подставляя это представление в формулу (5) легко находим

$$\alpha_m = \frac{(K\mathbf{s}_m + \mathbf{q})^2 - (K\mathbf{s}_0 + \mathbf{q})^2}{K^2} \approx 2 \frac{(\mathbf{s}_m\mathbf{q}) - (\mathbf{s}_0\mathbf{q})}{K} = \alpha_{m1}\theta_1 + \alpha_{m2}\theta_2 + \alpha_{m3}\theta_3, \quad (20)$$

где

$$\alpha_{m1} = 2(\mathbf{s}_m\mathbf{e}_{0\pi}), \quad \alpha_{m2} = 2(\mathbf{s}_m\mathbf{e}_{0\sigma}), \quad \alpha_{m3} = 2[(\mathbf{s}_m\mathbf{s}_0) - 1] \quad (21)$$

Используя полученные выше формулы для компонент векторов поляризаций и направлений дифрагированных волн легко найти коэффициенты перед угловыми отклонениями.

Так же, как и выше, можно пересчитать коэффициенты на другой базис \mathbf{e}_{0p} , \mathbf{e}_{0s} , составляющий произвольный угол φ_a с вектором $\mathbf{e}_{0\pi}$, а именно, $\mathbf{e}_{0p} = \mathbf{e}_{0\pi} \cos \varphi_a + \mathbf{e}_{0\sigma} \sin \varphi_a$. Однако в данном случае удобнее фиксировать базисные коэффициенты, а вместо базиса пересчитывать углы перед расчетом коэффициентов отражения и выхода вторичных излучений по формуле

$$\theta_1 = \Delta\theta \cos \varphi_a - \Delta\varphi \sin \varphi_a, \quad \theta_2 = \Delta\theta \sin \varphi_a + \Delta\varphi \cos \varphi_a \quad (22)$$

где теперь угловые отклонения $\Delta\theta$ и $\Delta\varphi$ являются независимыми параметрами. В частности для того, чтобы параметр α_1 не зависел от $\Delta\varphi$ достаточно выбрать $\tan \varphi_a = \alpha_{12}/\alpha_{11}$. В этом случае $\Delta\theta$ имеет смысл полярного угла для первого отражения, а $\Delta\varphi$ имеет смысл азимутального угла для первого отражения. Так как коэффициенты α_{m1} и α_{m2} распечатываются программой, то вычислить нужный угол φ_a не представляет труда. В случае компланарной дифракции $\alpha_{m1} = 0$ для всех пучков и результат не зависит от угла θ_1 . Но можно использовать преобразование переменных θ_2 и θ_3 к новым $\Delta\theta_r$ и $\Delta\theta_d$ так, чтобы параметр α_1 не зависел, от $\Delta\theta_d$. В этом случае при использовании монохроматора, установленного в бездисперсионном положении относительно первого кристалла, полоса монохроматора также не будет зависеть от $\Delta\theta_d$ и экспериментальная кривая может быть получена полным суммированием по $\Delta\theta_d$ и вычислением свертки с кривой отражения монохроматора по $\Delta\theta_r$. Очевидно, что при этом первый рефлекс будет давать кривую точно совпадающую с двухволновой, а второй рефлекс будет давать дисперсионную кривую, так как для него интегрирование по переменной $\Delta\theta_d$ будет проводиться в ограниченных пределах. Но можно проводить вычисления и в исходной системе переменных на прямоугольной области и потом суммировать результат по заданной сложным образом области в зависимости от свойств монохроматора. При этом, если ориентироваться на отраженные пучки, то можно сразу определять значения параметров α_1 и α_2 и если они оба превышают заданное значение, то в такой точке расчет не проводить, а просто обнулять интенсивности отраженных пучков. Реально в программе проверяется отношение недиагонального элемента к разности диагональных для пи-пи поляризации. В кинематическом случае это отношение примерно равно верхнему пределу для коэффициенту отражения в данной точке.

3.5 Амплитуды кинематического рассеяния

Согласно формуле (5) матрица рассеяния выражается через Фурье-коэффициенты поляризуемости $\chi_{mm'}^{ss'} = (\mathbf{e}_{ms}\mathbf{e}_{m's'})\chi(\mathbf{h}_{m-m'})$. Для фурье-коэффициентов поляризуемости стандартным считается приближение в виде суммы по атомам в элементарной ячейке кристалла

$$\chi(\mathbf{h}) = -\frac{\lambda^2 r_0}{\pi V_0} \sum_a \exp(-i\mathbf{h}\rho_a) [f_a(s) + \Delta f'_a - i\Delta f''_a] \exp(-W_a(s)) \quad (23)$$

где

$$r_0 = \frac{e^2}{mc^2} = 2.818 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}, \quad s = \frac{\sin \theta_B}{\lambda} = \frac{|\mathbf{h}|}{4\pi}, \quad (24)$$

ρ_a – координата атома относительно начала элементарной ячейки, $f_a(s)$ – атомный фактор рассеяния (Фурье-компонента электронной плотности в атоме), $\Delta f' - i\Delta f''$ – резонансная добавка к атомному фактору из-за процессов фотоэлектрического поглощения. Фактор Дебая-Валлера $\exp(-W_a(s))$ обычно разный для разных положений даже одного и того же атома. Но если этим пренебречь, то в многокомпонентных кристаллах удобно выделить сумму по атомам одного сорта от фазовых множителей в отдельную функцию, называемую структурным фактором

$$S_a(\mathbf{h}) = \frac{1}{N_a} \sum_j \exp(-i\mathbf{h}\rho_j), \quad \text{если } f_j(s) = f_a(s). \quad (25)$$

где N_a – число атомов сорта a в элементарной ячейке. В результате формула (23) преобразуется к виду

$$\chi(\mathbf{h}) = -\frac{\lambda^2 r_0}{\pi V_0} \sum_a N_a S_a(\mathbf{h}) [f_a(s) + \Delta f'_a - i\Delta f''_a] \exp(-W_a(s)) \quad (26)$$

где теперь суммирование идет лишь по различным сортам атомом образующих кристалл.

Но если известен фактор Дебая Валлера по каждой позиции, то его тоже можно ввести в структурный фактор. Но удобнее атомы в тех позициях, в которых факторы Дебая Валлера различаются, формально считать разными атомами. Тогда структурный фактор определяется как обычно. В общем случае $S_a(\mathbf{h}) = S'_a(\mathbf{h}) + iS''_a(\mathbf{h})$ является комплексной величиной, и с учетом этого выделяют 4 вещественных характеристики

$$\begin{aligned} \chi_{rr}(\mathbf{h}) &= -\frac{\lambda^2 r_0}{\pi V_0} \sum_a N_a S'_a(\mathbf{h}) [f_a(s) + \Delta f'_a] \exp(-W_a(s)), \\ \chi_{ri}(\mathbf{h}) &= -\frac{\lambda^2 r_0}{\pi V_0} \sum_a N_a S''_a(\mathbf{h}) [f_a(s) + \Delta f'_a] \exp(-W_a(s)), \\ \chi_{ir}(\mathbf{h}) &= \frac{\lambda^2 r_0}{\pi V_0} \sum_a N_a S'_a(\mathbf{h}) \Delta f''_a \exp(-W_a(s)), \\ \chi_{ii}(\mathbf{h}) &= \frac{\lambda^2 r_0}{\pi V_0} \sum_a N_a S''_a(\mathbf{h}) \Delta f''_a \exp(-W_a(s)) \end{aligned} \quad (27)$$

Такое разделение удобно в связи с разным поведением мнимых частей структурного фактора и резонансной поправки при изменении знака \mathbf{h} . А именно

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{h}) &= [\chi_{rr}(\mathbf{h}) - \chi_{ii}(\mathbf{h})] + i[\chi_{ir}(\mathbf{h}) + \chi_{ri}(\mathbf{h})], \\ \chi(-\mathbf{h}) &= [\chi_{rr}(\mathbf{h}) + \chi_{ii}(\mathbf{h})] + i[\chi_{ir}(\mathbf{h}) - \chi_{ri}(\mathbf{h})] \end{aligned} \quad (28)$$

Таким образом, проблема сводится к вычислению фактора Дебая-Валлера, а также атомного фактора рассеяния и резонансных поправок для каждого сорта атомов в элементарной ячейке. Что касается структурных факторов, то их легко вычислить для каждого отражения (индексов Миллера) используя координаты атомов для известной структуры.

Следующая проблема – вычисление атомного фактора рассеяния. Существует несколько публикаций, где приведены результаты расчетов Фурье-образа электронной плотности атомов как функции одной переменной s в виде таблиц. Наиболее точными считаются расчеты, выполненные с использованием релятивистских Хартри-Фоковских волновых функций электронов в атоме и опубликованные в работе [21]. Однако, для практических целей более удобны аналитические аппроксимации этих расчетов. В программе Степанова "x0h" [22] используется следующая аналитическая аппроксимация

$$f_a(s) = \sum_{i=1}^4 \alpha_{ai} \exp(-\beta_{ai}s^2) + \gamma_a \quad (29)$$

с 9-ю параметрами для каждого атома. Коэффициенты приведены в частности в работе [21] и в других работах и известны для всех практически важных атомов.

Третья проблема – определение резонансных поправок. Если для мнимой части существуют аналитические аппроксимации McMaster et al., основанные на экспериментальных результатах, то для действительной части в настоящее время существуют только таблицы Ненке. Эти таблицы опубликованы в Интернете и легко могут быть получены на любой компьютер. Существуют адреса в Интернете, по которым можно сразу получить резонансные поправки в интерактивном режиме. Я использую линейную интерполяцию таблиц Ненке со своего компьютера. Это наиболее точно, особенно вблизи скачков поглощения.

* * *

Список литературы

- [1] В. Г. Кон, Кристаллография, 2006, т. 51, N. 6, с. 1001-1005.
- [2] М. А. Блохин, И. Г. Швейцер, "Рентгеноспектральный справочник М., Наука, 1982
- [3] А. Е. Благов, М. В. Ковальчук, В. Г. Кон, Ю. В. Писаревский, П. А. Просеков, Кристаллография, 2010, т. 55, N.1, с. 1159-1164
- [4] A Kazimirov, V G Kohn, Acta Cryst. A., 2010, v. 66, N. 4, p. 451-457
- [5] З. Г. Пинскер, Рентгеновская кристаллооптика, "Наука", М., 1982
- [6] Shin-Lin Chang, Multiple Diffraction of X-Rays in Crystal, Springer, Heidelberg, 1984; русск. перев.: Ш. Чжан, Многоволновая дифракция рентгеновских лучей в кристаллах, "Мир", М., 1987
- [7] V. G. Kohn, phys. stat. sol. (a), **54**, 375 (1979)
- [8] V. G. Kohn, J. Moscow Phys. Soc., **1**, 425 (1991)
- [9] В. Г. Кон, ЖЭТФ, **105**, 665 (1994)
- [10] А. Ю. Казимиров, М. В. Ковальчук, В. Г. Кон, Кристаллография, **39**, 258 (1994)
- [11] В. Г. Кон, ФТТ, **28**, 3028 (1986)

- [12] V. G. Kohn, *phys. stat. sol. (a)* **106**, 31 (1988)
- [13] Э. К. Ковьев, В. И. Симонов, *Письма в ЖЭТФ*, **43**, 244 (1986)
- [14] N. Greiser, G. Materlik, *Z. Phys. B*, **66**, 83 (1987)
- [15] A. Yu. Kazimirov, M. V. Kovalchuk, V. G. Kohn, I. Yu, Kharitonov, L. V. Samoiloa, T. Ishikawa, S. Kikuta, K. Hirano, *phys. stat. sol. (a)*, **135**, 507 (1993)
- [16] A. Yu. Kazimirov, M. V. Kovalchuk, V. G. Kohn, T. Ishikawa, S. Kikuta, K. Hirano, *Europhys. Lett.* **24**, 211 (1993)
- [17] M. V. Kovalchuk, A. Kazimirov, V. Kohn, A. Kreines, L. Samoiloa, *Physica B*, **221**, 445 (1996)
- [18] M. J. Bedzyk, G. Materlik, M. V. Kovalchuk, *Phys. Rev. B*, **30**, 2453 (1986)
- [19] А. М. Афанасьев, В. Г. Кон, *ЖЭТФ*, **74**, 300 (1978)
- [20] T. Joko, A. Fukuhara, *J. Phys. Soc. Japan*, **22**, 597 (1967)
- [21] P. A. Doyle, P. S. Turner, *Acta cryst.* **A24**, 390 (1968)
- [22] С. А. Степанов, "<http://sergey.bio.aps.anl.gov>"