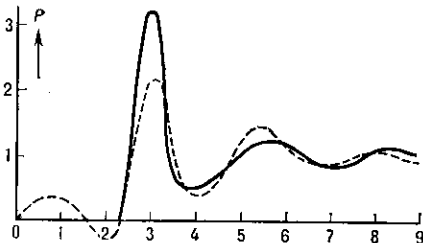


аксиально симметрична относительно первичного пучка. Дифракц. максимумы имеют вид колец, интенсивность к-рых быстро ($\sim |\sin(\theta/\lambda)|^2$) падает при возрастании угла θ . В результате слабой корреляции в расположении атомов в пространстве эти кольца имеют вид широких размытых гало, угл. положение к-рых зависит от ср. межатомных (межмолекулярных) расстояний (рис. 2). Это позволяет найти функцию радиального распределения зарядовой плотности среды $\rho(r)$ [9].

Кинематич. приближение Д. р. л. представляет собой *борновское приближение* в решении ур-ния (5) (см. ниже); причём связь между дискретным [на основе атом-

Рис. 2. Парная корреляционная функция $P(r)$ межатомных расстояний $O \dots O$ в жидкой воде, полученная с помощью рентгеновского структурного анализа.



ного фактора $f(g)$ и континуальным [на основе поляризуемости $\chi(r, w)$] описаниями взаимодействия кристалла с излучением устанавливается соотношением: $\chi_g = -4\pi(e^2/m\omega^2)V_{3D}^{-1}F(g)$, где χ_g — фурье-компонента разложения $\chi(r, w)$ в ряд по векторам обратной решётки g . Используя это соответствие, интегральную рассеивающую способность (3) можно представить в виде:

$$\frac{I_g}{I_0} = \pi^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2 \sin^2 2\theta} |\chi_g|^2 \frac{V}{\lambda}. \quad (4)$$

Кинематич. приближение становится неприменимым, если линейные размеры идеального кристалла $l > 10^{-5}$ см. Д. р. л. в этом случае описывается динамической теорией, согласно к-рой удельная и интегральная отражающие способности идеального кристалла и структура поля в его объёме полностью отличны от результатов кинематич. теории Д. р. л.

Динамич. теория Д. р. л. основана на более полном решении волнового ур-ния для вектора электрич. смещения $D(r, \omega)$ [11] с учётом обратного воздействия дифракц. луча на проходящий:

$$\Delta D + k^2 D \approx -\text{rot rot}(\chi D), \quad (5)$$

где правая часть представляет вторичные поля, наведённые в кристалле внеш. возмущением. Осн. методами решения (5) являются метод Фурье, к-рый приводит к понятию *дисперсионной поверхности* [1; 5], и метод медленно меняющихся амплитуд (ур-ний Такаги) [11].

Особенности динамич. Д. р. л. проявляются уже в простейшем случае двух волн — проходящей (0) и дифракционной (g). Наиб. важным случаем является дифракция плоской волны на кристаллич. пластине (рис. 3).

Решение ур-ния (5) резко различается для брэгговского отражения и лауэвского пропускания (см. *Брэгговское отражение*).

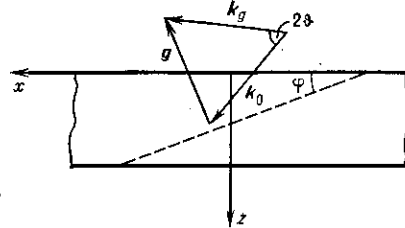
Брэгговское отражение. Его простейшим случаем является симметричное ($\varphi=0$) отражение от полубесконечного centrosимметричного непоглощающего кристалла. Решение (5) для этого случая с соответствующими граничными условиями даёт след. выражение для относит. интенсивности рассеяния на поверхности кристалла ($z=0$):

$$\frac{I^g(\eta)}{I_0} = \begin{cases} 1 & , \quad |\eta| < 1 \\ \frac{1}{(|\eta| + \sqrt{|\eta|^2 - 1})^2} & , \quad \eta < -1, \eta > 1, \end{cases}$$

где $\eta = (\alpha_g + \chi_0)/\chi_g$ — величина, пропорциональная угл. отстройке $\Delta\theta$; $\alpha_g = -\sin 2\theta \cdot \Delta\theta$. Этот результат

показывает, что в области углов $(\chi_0 - \chi_g)/\sin 2\theta < \Delta\theta < (\chi_0 + \chi_g)/\sin 2\theta$ имеет место полное отражение падающей волны (рис. 4). Угл. ширина этой области $2\chi_g/\sin 2\theta \sim 10^{-5}$ рад и определяется только диэлектрич. свойствами кристалла. Вследствие преломления эта область сдвинута на угол $\chi_0/\sin 2\theta \sim 10^{-5}$ рад от точного угла Брэгга. В пределах этой области углов интенсивности проходящего I^0 и дифракц. I^g излучения внутри кристалла экспоненциально падают с глубиной z : $I^{0,g}(z) \sim \exp(-z/l_{ext})$, где $l_{ext} = 2 \sin \theta k^{-1} \times \chi_g \chi_{-g}^{-1/2} \sim 10^4 \div 10^5$ атомных периодов. Это затухание имеет чисто интерференц. природу и наз. *пер-*

Рис. 3. Двухлучевая дифракция на кристаллической пластине: 2θ — угол между волновыми векторами проходящей k_0 и дифракционной k_g волн; φ — угол между x и атомной плоскостью (показана пунктиром) из находящегося в отражающем положении семейства атомных плоскостей; g — вектор дифракции (вектор обратной решётки).



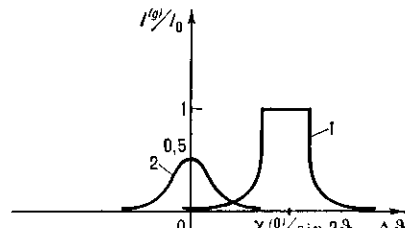
вичной экстинкцией. Расстояние l_{ext} , на к-ром $I^{0,g}(z)$ убывает в e раз, наз. длиной первичной экстинкции. Интегральная рассеивающая способность [в отличие от (4)] пропорциональна первой степени $|\chi_g|$ и имеет иную поляризац. зависимость:

$$\frac{I_g}{I_0} = a \frac{1 + |\cos 2\theta|}{2 \sin 2\theta} |\chi_g| \quad (6)$$

(коэф. $a = 8/3$).

Несмотря на существование области полного отражения, динамич. интегральная интенсивность в неск. десятков раз ниже кинематической (4) вследствие малой угловой ширины дифракц. максимума.

Рис. 4. Угловые зависимости интенсивностей дифракционных максимумов в случае непоглощающего centrosимметричного кристалла. 1. Симметричное ($\varphi=0$) брэгговское отражение от полубесконечного кристалла. Ширина области полного отражения $2\chi_g/\sin 2\theta$. Её центр сдвинут из-за преломления на угол $\chi_0/\sin 2\theta$. 2. Симметричное ($\varphi=\pi/2$) лауэвское прохождение. Максимальная интенсивность равна 1/2. Форма максимума — лоренцевская, полуширина равна $\chi_g/\sin 2\theta$. Максимум расположен в точном угле Брэгга.



Лауэвское пропускание. Относит. интенсивность рассеянной волны в симметрич. случае Лауэ ($\varphi=\pi/2$) для непоглощающего кристалла

$$\frac{I^g(\eta)}{I_0} = \frac{1 - \cos[\pi \eta / T(\eta)]}{2(1 + \eta^2)}$$

осциллирует с периодом $T(\eta) = \pi \text{ctg} \theta l_{ext} (1 + \eta^2)^{-1/2}$, к-рый определяется длиной первичной экстинкции l_{ext} ; $\eta = \alpha_g / 2\chi_g$. Дифракц. максимум расположен точно под углом Брэгга и имеет лоренцевскую форму (рис. 4) с шириной $2\chi_g/\sin 2\theta$. Если излучение падает на кристалл под углом Брэгга ($\eta=0$), то $I^g(0)/I_0$ изменяется от 0 до 1 с периодом осцилляций $T(0) = \pi \text{ctg} \theta \times l_{ext}$, т. е. вся интенсивность поля периодически сосредоточивается в дифракц. волне. Относит. интенсивность $I^g(\eta)/I_0$ осциллирует с тем же периодом, но с опережением по фазе на $\pi/2$. Поведение поля напоминает перекачку энергии при связанных колебаниях ма-