

ТЕОРИЯ КОГЕРЕНТНОГО РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ РЕГУЛЯРНОЙ СИСТЕМОЙ ЯДЕР В КРИСТАЛЛЕ В УСЛОВИЯХ МНОГОВОЛНОВОЙ ДИФРАКЦИИ

В. Г. Кон

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 21 октября 1993 г.

Предложена общая теория когерентного ядерного резонансного и электронного рассеяния мессбауэровского гамма-излучения совершенным кристаллом в условиях возникновения двух и более сильных отраженных пучков, т. е. многоволновой дифракции, когда условия Брэгга выполняются одновременно для нескольких систем кристаллических плоскостей. Обсуждаются геометрические условия возможных экспериментов. Развита общий метод расчета энергетической и угловой зависимостей наблюдаемых интенсивностей дифрагированных пучков для любой геометрии эксперимента, любой толщины кристалла и в условиях сверхтонкого расщепления ядерных уровней. В качестве примера применения развитой теории рассмотрен случай трехволновой компланарной брэгговской дифракции мессбауэровского излучения с энергией 14.4 кэВ в кристаллах $^{57}\text{FeVO}_3$.

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффект многоволновой дифракции рентгеновских лучей хорошо известен в рентгеновской оптике. Он был предсказан Эвальдом в первой половине нашего столетия почти одновременно с предсказанием самого эффекта дифракции. В последние десятилетия внимание исследователей концентрировалось в основном на двух замечательных свойствах многоволновой дифракции — возможности прямого измерения фазы амплитуды рассеяния рентгеновских лучей [1, 2] и большого усиления аномального прохождения через поглощающую кристаллическую среду [1, 3–5]. Последний эффект обусловлен возникновением в кристалле блоховских волн с особой пространственной структурой, повторяющей симметрию кристалла, в которой узлы решетки поля излучения совпадают с узлами кристаллической решетки [3, 5]. Хотя эффект был предсказан теоретически [4, 5] более четверти века назад, многочисленные попытки его обнаружить при использовании лабораторных источников рентгеновских лучей заканчивались неудачей. Убедительное экспериментальное доказательство было получено совсем недавно [6] с использованием источника синхротронного излучения.

Использование синхронного излучения решает самую главную проблему экспериментального исследования многоволновой дифракции — проблему нехватки интенсивности. Действительно, для наблюдения эффекта спектрально устойчивой (систематической) многоволновой дифракции в чистом виде падающий на кристалл пучок излучения должен быть параллельным с угловой расходимостью не более угловой секунды в двух взаимно перпендикулярных плоскостях. В лабораторных условиях источниками являются отдельные атомы, излучающие сфе-

рическую волну. Необходимая плоскостная компонента при этом составляет лишь очень малую часть суммарной интенсивности, поскольку излучение от разных атомов является некогерентным. Проблема интенсивности становится практически неразрешимой при использовании лабораторных источников мессбауэровского излучения. По этой причине до сих пор не было даже попыток наблюдать многоволновую дифракцию резонансного гамма-излучения на ядрах в кристалле, в то время как случай двухволновой дифракции изучен достаточно хорошо как теоретически [7, 8], так и экспериментально с использованием как обычных источников [9, 10], так и синхронного излучения [11].

Возможность экспериментально исследовать многоволновую дифракцию резонансного ядерного гамма-излучения в совершенных кристаллах, содержащих мессбауэровские изотопы (главным образом ^{57}Fe), появилась лишь совсем недавно благодаря быстрому прогрессу в использовании очень высокоинтенсивных синхротронных источников нового типа, излучающих параллельные пучки. В качестве примера можно указать на сообщение [12], где с использованием рентгеновского ондулятора накопительного кольца TRISTAN (КЕК, Цукуба) была достигнута интенсивность дифрагированного пучка при ядерной брэгговской дифракции 777 на кристалле Fe_2O_3 с числом фотонов 20000 в секунду.

В связи с этим задача построения теории и теоретического анализа многоволновой дифракции резонансного гамма-излучения становится не только интересной, но и вполне актуальной, поскольку предварительный теоретический анализ мог бы существенно помочь в постановке достаточно сложных экспериментов. С физической точки зрения эффект многоволновой дифракции мессбауэровского гамма-излучения представляется более интересным, чем в случае рентгеновских лучей из-за того, что ядерное резонансное рассеяние зависит от двух дополнительных параметров: расстояния от резонанса (в случае энергетического разрешения) или времени после импульса излучения (при временном разрешении) и направления оси квантования в случае сверхтонкого расщепления ядерных уровней.

С точки зрения возможно более полного использования интенсивности представляется интересным рассмотреть также случаи так называемой компланарной трехволновой дифракции, когда падающий и два дифрагированных пучка лежат в одной плоскости. В этом случае двухволновая дифракция невозможна, а реализуется сразу трехволновая дифракция, но требования к угловой расходимости падающего пучка такие же, как в случае двухволновой дифракции. Но эти случаи не существуют систематически, поскольку не хватает свободных параметров для выполнения двух условий Брэгга. Для их реализации необходимо автоматическое, хотя бы приближенное, выполнение определенного соотношения между длиной волны излучения и межплоскостными расстояниями для двух систем кристаллических плоскостей. Для заданного кристалла $^{57}\text{FeBO}_3$ и мессбауэровского излучения с энергией 14.4 кэВ несколько таких случаев был найдено ван Бюрком (см., например, [13]).

В данной работе автор предлагает теорию и методы расчета многоволновой дифракции резонансного гамма-излучения, используя опыт, накопленный при исследовании многоволновой дифракции рентгеновских лучей. До сих пор в литературе существуют только две теоретические работы, посвященные этому вопросу [14, 15], в которых, по существу, рассмотрен один и тот же частный случай симметричной лауэ-дифракции при точном выполнении условий Брэгга с ис-

пользованием аналитических выражений для волновых полей, полученных в работах [4, 5], и без сверхтонкого расщепления уровней. Общий случай, включая геометрию Брэгга, сверхтонкое расщепление и угловую зависимость, может быть проанализирован лишь с использованием достаточно эффективных методов численного решения уравнений. Ниже обсуждаются геометрические условия эксперимента по дифракции на отражение (по Брэггу), дана формулировка задачи в виде, максимально удобном для численного решения, и конкретно рассмотрены компланарные случаи трехволновой дифракции.

2. ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ УСЛОВИЯ

Эффект дифракции плоской волны в совершенном кристалле условно можно формально рассматривать как упругое рассеяние с изменением волнового вектора падающей волны \mathbf{k}_0 на произвольный вектор обратной решетки \mathbf{h} , но без изменения частоты излучения, а следовательно, модуля волнового вектора «рассеянной» волны, т. е.

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}, \quad k_h^2 = k_0^2. \quad (1)$$

В двухволновом случае это условие выполняется только один раз для какого-либо заданного вектора \mathbf{h} . Трехволновый случай возникает, когда два вектора обратной решетки, например \mathbf{h} и \mathbf{g} , одновременно удовлетворяют условию Брэгга (1), а именно,

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_h &= \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}, & k_h^2 &= k_0^2, \\ \mathbf{k}_g &= \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}, & k_g^2 &= k_0^2. \end{aligned} \quad (2)$$

Формулы (2) можно рассматривать как систему уравнений для определения \mathbf{k}_0 , которая для заданной длины волны излучения $\lambda = 2\pi/k_0$ имеет только одно решение и однозначно определяет направление вектора \mathbf{k}_0 относительно кристаллической решетки образца.

Тем не менее, из-за высокой симметрии кристалла в ряде случаев может иметь место вырождение, когда вместе с заданными двумя векторами обратной решетки условию (1) автоматически удовлетворяют другие векторы. В этом случае трехволновая дифракция невозможна, а вместо нее реализуется многоволновая дифракция с числом волн > 3 . Наглядно эту ситуацию можно представить себе следующим образом. Два вектора обратной решетки можно вписать в круг, проходящий через три узла обратной решетки и представляющий собой сечение сферы Эвальда. Если на этом круге оказываются дополнительные узлы обратной решетки, то это и есть спектрально устойчивое вырождение, т. е. независимое от длины вектора \mathbf{k}_0 — радиуса сферы Эвальда. При определенном соотношении между длиной волны и параметром кристаллической решетки может иметь место дополнительное спектрально неустойчивое вырождение. Частным случаем спектрально неустойчивого вырождения двухволнового случая в трехволновый и более является компланарный случай, когда вектор \mathbf{k}_0 лежит в плоскости векторов обратной решетки \mathbf{h} и \mathbf{g} .

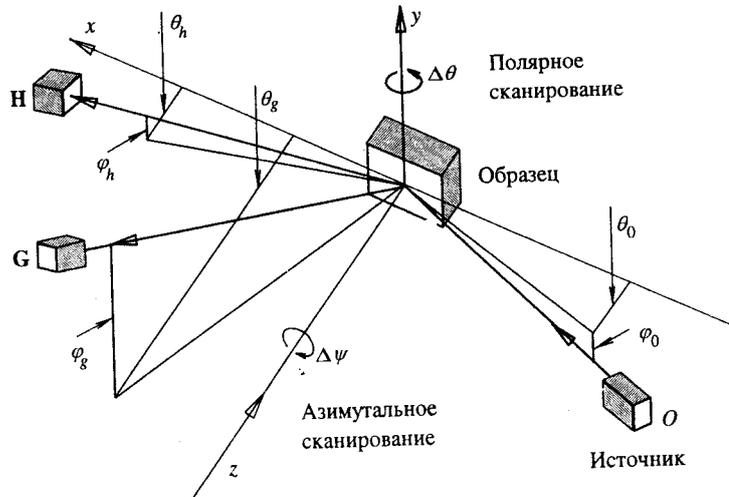


Рис. 1. Геометрическая схема возможного эксперимента

Рассмотрим, например, два несимметричных отражения брэгговского типа, когда все пучки находятся по одну сторону от пластины кристалла. На рис. 1 показаны стандартные оси вращения кристалла-образца и направляющие углы для падающего и дифрагированных пучков. Плоскость xz выбрана перпендикулярно поверхности кристалла. Углы θ образуются между осью x и проекциями волновых векторов на плоскость xz . Углы φ — это углы между самими векторами и их проекциями. С точки зрения постановки эксперимента первая задача — определение углов θ и φ для заданной конфигурации дифракции. Эти углы связывают декартовы координаты волновых векторов следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_0 &= K [\mathbf{X} \cos \varphi_0 \cos \theta_0 + \mathbf{Y} \sin \varphi_0 + \mathbf{Z} \cos \varphi_0 \sin \theta_0], \\ \mathbf{k}_f &= K [\mathbf{X} \cos \varphi_f \cos \theta_f + \mathbf{Y} \sin \varphi_f - \mathbf{Z} \cos \varphi_f \sin \theta_f], \end{aligned} \quad (3)$$

где $f = h, g$; $K = 2\pi/\lambda$, \mathbf{X} , \mathbf{Y} , \mathbf{Z} — единичные векторы в направлении соответствующих осей.

Если известны декартовы координаты векторов обратной решетки \mathbf{h} и \mathbf{g} в заданной системе координат (см. рис. 1), то шесть углов $\theta_0, \varphi_0, \theta_h, \varphi_h, \theta_g, \varphi_g$ можно определить из шести уравнений, следующих из (2). Так, для вектора \mathbf{h} имеем

$$\begin{aligned} h_x/K &= \cos \varphi_h \cos \theta_h - \cos \varphi_0 \cos \theta_0, \\ h_y/K &= \sin \varphi_h - \sin \varphi_0, \\ h_z/K &= -\cos \varphi_h \sin \theta_h - \cos \varphi_0 \sin \theta_0. \end{aligned} \quad (4)$$

Аналогичные уравнения имеем для вектора \mathbf{g} .

Ось z декартовой системы координат задается нормалью к поверхности кристалла однозначно, но в самом общем случае остается свобода в выборе осей x и y . Мы можем вращать пластину кристалла вокруг нормали к поверхности до

тех пор, пока вектор \mathbf{h} не ляжет в плоскости xz . При этом $h_y = 0$ и в соответствии с (4) $\varphi_h = \varphi_0$. Рассмотрим далее более простой, но важный случай, когда величина h_x тоже равна нулю (симметричное отражение). В этом случае $\theta_h = \theta_0$, а дополнительная возможность вращения вокруг вектора \mathbf{h} позволяет положить $\varphi_h = \varphi_0 = 0$. Остальные углы определяются в инвариантной форме следующим образом:

$$\sin \theta_0 = h/2K, \quad \operatorname{tg} \theta_g = A \cos \theta_0 / (1 - B^2), \quad \cos \varphi_g = A / \sin \theta_g, \quad (5)$$

где

$$A = (2\mathbf{hg} - h^2)/2hK, \quad B^2 = (2g^2 + h^2 - 2\mathbf{hg})/(2K)^2, \quad (6)$$

Компланарный случай реализуется, когда $\varphi_g = 0$. Согласно (5) и (6), в этом случае должно выполняться условие

$$\frac{1}{(2K)^2} = \frac{h^2 g^2 - (\mathbf{hg})^2}{h^2 g^2 (\mathbf{h} - \mathbf{g})^2} = \frac{\sin^2 \Phi_{hg}}{(\mathbf{h} - \mathbf{g})^2} \quad (7)$$

и, кроме того, имеет место формула

$$\sin \left(\frac{\theta_0 + \theta_g}{2} \right) = \frac{g}{2K}. \quad (8)$$

Рассмотрим теперь параметры, характеризующие степень выхода из условий дифракции, т. е. степень невыполнения условий Брэгга. Существуют два способа это сделать. В первом при заданных направлениях пучков вращают кристаллическую пластину. Так обычно поступают в эксперименте. Во втором изменяют направление падающего пучка. Это удобно при учете угловой расходимости падающего пучка. В первом случае мы изменяем направление векторов обратной решетки \mathbf{h} и \mathbf{g} при неизменном направлении падающего пучка \mathbf{k}_0 . При этом

$$\alpha_f = (k_f^2 - k_0^2)/K^2 \approx 2\mathbf{k}_f \Delta \mathbf{f} / K^2, \quad (9)$$

где $\mathbf{f} = \mathbf{h}, \mathbf{g}$. Стандартными осями вращения являются ось y (полярное угловое сканирование) и ось z (азимутальное угловое сканирование), как показано на рис. 1. Используя известную формулу для изменения вектора \mathbf{f} при вращении на малый угол $\Delta\phi$ вокруг оси \mathbf{l} : $\Delta \mathbf{f} = [\mathbf{l}\mathbf{f}]\Delta\phi$ получаем в рассматриваемом нами случае

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{h} &= \mathbf{X}h_z \Delta\theta, \\ \Delta \mathbf{g} &= \mathbf{X}(g_z \Delta\theta - g_y \Delta\psi) + \mathbf{Y}g_x \Delta\psi - \mathbf{Z}g_x \Delta\theta. \end{aligned} \quad (10)$$

Подставляя (10) в (9), имеем

$$\begin{aligned} \alpha_h &= -2\Delta\theta \sin 2\theta_0, \\ \alpha_g &= -2\Delta\theta \sin(\theta_0 + \theta_g) \cos \varphi_g - 2\Delta\psi \cos \theta_0 \sin \varphi_g. \end{aligned} \quad (11)$$

В компланарном случае $\varphi_g = 0$ и оба параметра зависят только от $\Delta\theta$.

Для учета угловой расходимости и некогерентности падающего пучка удобно при неизменных векторах обратной решетки добавить к вектору \mathbf{k}_0 некоторое приращение \mathbf{q} ($\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_0 + \mathbf{q}$). При этом

$$\alpha_f = (k_f^2 - k_0^2)/K^2 \approx 2\mathbf{f}\mathbf{q}/K^2. \quad (12)$$

Вводя опять угол $\Delta\theta$ в плоскости xz и угол $\Delta\varphi$ в плоскости $(\mathbf{k}_0, \mathbf{Y})$, а также относительное изменение частоты излучения $(\Delta\omega/\omega)$, вектор \mathbf{q} можно записать в виде

$$\mathbf{q} = K [(-X \sin \theta_0 + Z \cos \theta_0) \Delta\theta - Y \Delta\varphi + (X \cos \theta_0 + Z \sin \theta_0) (\Delta\omega/\omega)]. \quad (13)$$

Подставляя (13) и (4) в (12), получаем

$$\begin{aligned} \alpha_h &= -2\Delta\theta \sin 2\theta_0 - 4(\Delta\omega/\omega) \sin^2 \theta_0, \\ \alpha_g &= -2\Delta\theta \sin(\theta_0 + \theta_g) \cos \varphi_g - 2\Delta\varphi \sin \varphi_g - \\ &\quad - 2(\Delta\omega/\omega) [1 - \cos(\theta_0 + \theta_g) \cos \varphi_g]. \end{aligned} \quad (14)$$

Легко видеть, сравнивая (11) и (14), что полярное сканирование и горизонтальная расходимость пучка приводят к одному и тому же результату для α_f . Что касается азимутального сканирования и вертикальной расходимости, то они приводят к результатам, отличающимся лишь масштабным множителем $\cos \theta_0$.

Как следует из (14), в систематическом случае дифракции ($\varphi_g \neq 0$) изменение частоты излучения может быть скомпенсировано изменением углов $\Delta\theta$, $\Delta\varphi$ и условиям $\alpha_h = \alpha_g = 0$ можно удовлетворить в достаточно широкой области значений длин волн. В компланарном случае ($\varphi_g = 0$) только угол $\Delta\theta$ влияет на условия Брэгга и

$$\begin{aligned} \alpha_h &= -2 \sin 2\theta_0 [\Delta\theta + (\Delta\omega/\omega) \operatorname{tg} \theta_0], \\ \alpha_g &= -2 \sin(\theta_0 + \theta_g) \left(\Delta\theta + \frac{\Delta\omega}{\omega} \operatorname{tg} \frac{\theta_0 + \theta_g}{2} \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Согласно (15), вертикальная расходимость пучка не расстраивает условия Брэгга, а сдвиг частоты излучения (или изменение параметра кристаллической решетки, например, при изменении температуры) приводит к распаду трехволновой дифракции на двухволновые, т.е. условия $\alpha_h = 0$ и $\alpha_g = 0$ выполняются при различных значениях $\Delta\theta$. Эта разница определяется следующим выражением:

$$\Delta\theta_h - \Delta\theta_g = \left(\operatorname{tg} \frac{\theta_0 + \theta_g}{2} - \operatorname{tg} \theta_0 \right) \frac{\Delta\omega}{\omega}. \quad (16)$$

С экспериментальной точки зрения компланарные случаи интересны еще и тем, что, даже если условие (7) не выполняется достаточно точно и трехволновой случай невозможен, тем не менее, можно получить два физически различных двухволновых случая дифракции в одной экспериментальной схеме и за одно угловое сканирование.

3. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ

Для формулировки теории ниже используется подход, предложенный Каганом и Афанасьевым [16], в котором прохождение электромагнитной волны в кристалле описывается уравнением Максвелла для компоненты Фурье вектора амплитуды электрического поля $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$:

$$(k^2 - K^2)\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) - \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)) = (4\pi i \omega / c^2)\mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega), \quad (17)$$

где $K = \omega/c = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны излучения, c — скорость света, $\mathbf{j}(\mathbf{k}, \omega)$ — компонента Фурье индуцированной плотности тока, равная квантовомеханическому среднему от компоненты Фурье оператора плотности тока по основному состоянию кристалла в присутствии внешнего поля. С учетом периодичности кристаллической решетки в линейном по \mathbf{E} приближении имеем в самом общем случае

$$j^i(\mathbf{k}_0, \omega) = (c^2 K^2 / 4\pi i \omega) \sum_{mj} g_{\omega}^{ij}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_m) E^j(\mathbf{k}_m, \omega), \quad (18)$$

где $\mathbf{k}_m = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}_m$, \mathbf{h}_m — умноженный на 2π вектор обратной решетки, $g_{\omega}^{ij}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_m)$ — умноженная на 4π компонента Фурье тензора поляризуемости кристалла, в которой учитываются все возможные процессы как резонансного взаимодействия гамма-излучения с ядрами, так и взаимодействия с атомными электронами.

Пусть плоская волна с волновым вектором \mathbf{k}_0 удовлетворяет условиям многоволновой дифракции. В кристалле, имеющем форму пластины, вектор \mathbf{k}_0 может изменить лишь z -компоненту (по нормали к поверхности). Это изменение запишем в виде

$$\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_0 + K \frac{\varepsilon}{2\gamma_0} \mathbf{Z}, \quad \gamma_0 = \frac{k_{0z}}{K}. \quad (19)$$

Так как взаимодействие гамма-излучения с кристаллом мало, то в линейном приближении поперечность электрического поля сохраняется. Это позволяет ввести две скалярные амплитуды для каждого пучка:

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}_m, \omega) = \sum_s E_{ms} \mathbf{e}_{ms}, \quad (20)$$

где индекс $s = \pi, \sigma$ описывает состояние поляризации, \mathbf{e}_{ms} — единичный вектор поляризации, причем векторы $\mathbf{e}_{m\pi}$, $\mathbf{e}_{m\sigma}$ и $\mathbf{s}_m = \mathbf{k}_m/K$ образуют правовинтовой прямоугольный базис, а индекс $m = 0, h, g, \dots$ нумерует лишь сильные волны, удовлетворяющие условиям Брэгга (1).

После подстановки (18) и (19) в (17) с учетом (20) и отбрасывания всех слабых волн задача сводится к задаче на собственные решения матрицы, элементами которой являются амплитуды кинематического рассеяния:

$$\varepsilon E_{ms} = \sum_{m's'} G_{mm'}^{ss'} E_{m's'}, \quad (21)$$

где

$$G_{mm'}^{ss'} = \beta_m \left[g_{mm'}^{ss'} - \alpha_m \delta_{mm'}^{ss'} \right], \quad \beta_m = \gamma_0 / \gamma_m, \quad \gamma_m = k_{mz} / K, \\ g_{mm'}^{ss'} = \sum_{ij} e_{ms}^i g_{\omega}^{ij}(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}_{m'}) e_{m's'}^j = p_{mm'}^{ss'}(\omega) + \chi_{mm'}^{ss'}, \quad (22)$$

$\delta_{mm'}^{ss'}$ — символ Кронекера, а параметры невыполнения условий Брэгга α_m рассмотрены в предыдущем разделе.

Матрица $p_{mm'}^{ss'}(\omega)$ описывает резонансное рассеяние гамма-квантов. В случае сверхтонкого расщепления основного и возбужденного ядерных уровней она имеет следующий вид:

$$p_{mm'}^{ss'}(\omega) = \sum_{ge} A_{mm'}^{ss'}(ge) \frac{\Gamma/2}{\hbar(\omega - \omega_{eg}) + i\Gamma/2}, \quad (23)$$

где

$$A_{mm'}^{ss'}(ge) = -\frac{8\pi\eta}{\omega^2 V_0 \Gamma_0 (2I_0 + 1)} \sum_a \exp\{i(\mathbf{k}_{m'} - \mathbf{k}_m) \mathbf{r}_a\} f_{am}^{1/2} f_{am'}^{1/2} \times \\ \times \langle g | \hat{j}_a^s(\mathbf{k}_m) | e \rangle \langle e | \hat{j}_a^{*s'}(\mathbf{k}_{m'}) | g \rangle. \quad (24)$$

Здесь индекс g нумерует уровни основного состояния ядра, а индекс e — возбужденного, I_0 — ядерный спин основного состояния, ω_{eg} — частоты разрешенных переходов между уровнями основного и возбужденного состояний, Γ — полная ширина линии с учетом неоднородного уширения, Γ_0 — естественная ширина линии, V_0 — объем элементарной ячейки, индекс a нумерует атомы внутри элементарной ячейки, \mathbf{r}_a — смещение атома с номером a из начала элементарной ячейки, $f_{am} = \exp[-\langle (\mathbf{u}_a \mathbf{k}_m)^2 \rangle]$ — зависящий от температуры фактор Лэмба-Мессбауэра, $\hat{j}_a(\mathbf{k})$ — компонента Фурье оператора плотности тока для атома с номером a , η — концентрация резонансного изотопа.

При вычислении матричных элементов от оператора плотности тока обычно используется разложение последних в ряд по мультиполям, причем, как правило, для переходов из низколежащих возбужденных состояний достаточно учесть лишь первый член разложения. Ниже ограничимся рассмотрением $M1$ -переходов. В этом случае оператор плотности тока имеет вид

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{k}) = ic [\mathbf{k} \hat{\mathbf{m}}], \quad (25)$$

где $\hat{\mathbf{m}}$ — оператор магнитного дипольного момента, матричные элементы которого равны [17]

$$\langle g | \hat{\mathbf{m}} | e \rangle = -i \left[\frac{3(2I + 1)\Gamma_1}{4K^3} \right]^{1/2} (-1)^M \begin{pmatrix} I_0 & 1 & I \\ -M_g & M & M_e \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n}_M. \quad (26)$$

Здесь I — спин возбужденного состояния ядра, $\Gamma_1 = \Gamma_0/(1 + \alpha)$ — ширина линии, связанная с радиационным переходом, α — коэффициент конверсии, $M = -1, 0, 1$ — «магнитное» квантовое число излучения, M_g, M_e — квантовые числа проекции ядерных спинов в основном и возбужденном состояниях на ось квантования, причем в соответствии с правилами отбора разрешенными являются лишь переходы, удовлетворяющие условию $M_g = M_e + M$, $\mathbf{n}_0 = \mathbf{n}_z$ — единичный вектор в направлении оси квантования (внутреннее магнитное поле на ядрах), $\mathbf{n}_{\pm 1} = \mp(\mathbf{n}_x \pm i\mathbf{n}_y)/\sqrt{2}$ — взаимно перпендикулярные единичные векторы в плоскости, перпендикулярной оси квантования, $\begin{pmatrix} I_0 & 1 & I \\ -M_g & M & M_e \end{pmatrix}$ — $3j$ -символы [18].

Подставляя формулы (25), (26) в (24), получаем

$$A_{mm'}^{ss'}(ge) = -\frac{6\pi\eta}{(1+\alpha)V_0K^3} \frac{(2I+1)}{(2I_0+1)} \begin{pmatrix} I_0 & 1 & I \\ -M_g & M & M_e \end{pmatrix}^2 \times \\ \times \sum_a \exp\{i(\mathbf{k}_{m'} - \mathbf{k}_m)\mathbf{r}_a\} f_{am}^{1/2} f_{am'}^{1/2} P_{mm'}^{ss'}(aM), \quad (27)$$

где

$$P_{mm'}^{ss'}(aM) = (\mathbf{m}_{ms}\mathbf{n}_M)(\mathbf{m}_{m's'}\mathbf{n}_M)^*, \quad \mathbf{m}_{ms} = [\mathbf{s}_m \mathbf{e}_{ms}]. \quad (28)$$

Здесь используются единичные векторы поляризации магнитного поля \mathbf{m}_{ms} , зависимость от индекса a обусловлена тем, что направления оси квантования на разных атомах могут различаться. Поляризационную матрицу удобно выразить через направление магнитного поля на ядрах. Легко непосредственно проверить, что [19]

$$P_{mm'}^{ss'}(aM) = \begin{cases} (\mathbf{m}_{ms}\mathbf{n}_0)(\mathbf{m}_{m's'}\mathbf{n}_0), & M = 0 \\ \{(\mathbf{m}_{ms}\mathbf{m}_{m's'}) - (\mathbf{m}_{ms}\mathbf{n}_0)(\mathbf{m}_{m's'}\mathbf{n}_0) \mp \\ \mp i[(\mathbf{m}_{ms}\mathbf{m}_{m's'}]\mathbf{n}_0\}/2, & M = \pm 1. \end{cases} \quad (29)$$

Матрица $\chi_{mm'}^{ss'}$ описывает рассеяние гамма-квантов на атомных электронах. Она зависит лишь от «переданного импульса» $\mathbf{k}_{m'} - \mathbf{k}_m$, равного вектору обратной решетки $\mathbf{h}_{m'm}$. Определяющий вклад дает $E1$ -рассеяние. В этом случае, как хорошо известно из теории рассеяния рентгеновских лучей [3],

$$\chi_{mm'}^{ss'} = (\mathbf{e}_{ms}\mathbf{e}_{m's'}) \sum_a \left\{ -\frac{4\pi r_0}{V_0K^2} [f_a(\mathbf{h}_{m'm}) + \Delta f'_a] + i \frac{1}{V_0K} \sigma_a^D \right\} \times \\ \times \exp\{-i\mathbf{h}_{m'm}\mathbf{r}_a - W_a(\mathbf{h}_{m'm})\}. \quad (30)$$

Здесь $r_0 = e^2/mc^2$, f_a — формфактор (компонента Фурье электронной плотности атома), $\Delta f'_a$ — дисперсионная поправка к формфактору, σ_a^D — дипольный вклад в сечение фотопоглощения, $\exp(-W_a)$ — фактор Дебая-Валлера, $W_a(\mathbf{h}) = 0.5\langle(\mathbf{u}_a\mathbf{h})^2\rangle$.

Рассмотрим теперь задачу N -волновой дифракции на кристалле в форме пластины в самом общем случае. Пусть на верхнюю поверхность кристалла падают плоские волны лауэ-типа, для которых $\gamma_m > 0$, а на нижнюю поверхность — волны брэгг-типа, для которых $\gamma_m < 0$, и амплитуды этих волн известны. Построим из них вектор D_{ms} . В результате дифракции из верхней поверхности кристалла выходят волны брэгг-типа, а из нижней — лауэ-типа и амплитуды этих волн требуется определить. Построим из них вектор R_{ms} . Необходимо определить матрицу, преобразующую вектор \mathbf{D} в вектор \mathbf{R} . Для этого на первом этапе необходимо найти все собственные решения задачи (21). В N -волновом случае матрица имеет ранг $2N$ и уже для $N = 3$ эта задача может быть решена лишь численно с использованием компьютеров. Как известно, матрица ранга $2N$ имеет $2N$ собственных значений ε_j и собственных векторов E_{ms}^j .

Реальное поле в кристалле является суперпозицией этих решений с весовыми множителями λ_j , которые находятся из граничных условий. Последние с учетом введенных выше определений запишем в виде

$$\sum_j E_{ms}^j \exp(i\varepsilon_j l_m) \lambda_j = D_{ms}, \quad (31)$$

где $l_m = 0$, если γ_m положительно, и $l_m = Kt/2\gamma_0$, если γ_m отрицательно, t — толщина кристалла. После того как вычислены степени возбуждения собственных решений (блоховских волн), искомые амплитуды дифрагированных волн находятся по формуле

$$R_{ms} = \sum_j E_{ms}^j \exp(i \varepsilon_j b_m) \lambda_j, \quad (32)$$

где $b_m = 0$, если γ_m отрицательно, и $b_m = Kt/2\gamma_0$, если γ_m положительно.

Приведенные выше формулы решают поставленную задачу неявным образом. Чтобы получить решение в явном виде, используем алгебру матриц. Далее для упрощения обозначений будем считать, что индекс m содержит как номер пучка, так и поляризацию, и вместо ms будем писать просто m . Собственные векторы образуют матрицу E_{mj} порядка $2N$, а амплитуды λ_j , D_m и R_m — векторы в том же пространстве. При записи этих величин без индексов все операции сложения и умножения понимаются как обобщенные в $2N$ -мерном пространстве. При этом уравнения (21), (31) и (32) записываются в следующем виде:

$$E \cdot \varepsilon = G \cdot E, \quad X \cdot \lambda = D, \quad R = Y \cdot \lambda, \quad (33)$$

где $\varepsilon_{jj'} = \varepsilon_j \delta_{jj'}$ — диагональная матрица. Явный вид решения теперь легко получается в форме умножения на обратную матрицу:

$$R = Y \cdot X^{-1} \cdot D = M \cdot D, \quad M = Y \cdot X^{-1}. \quad (34)$$

Назовем матрицу $M_{mm'}$ матрицей динамического рассеяния. В отличие от матрицы кинематического рассеяния $G_{mm'}$ она зависит от толщины кристалла. Очевидно, в пределе $t = 0$ имеем равенство $X = Y$ и $M = I$, где I — единичная матрица. Можно показать, что при малой толщине кристалла

$$M_{mm'} \approx \delta_{mm'} + i \frac{Kt}{2\gamma_0} \text{sign}(\gamma_m) G_{mm'}, \quad (35)$$

т. е. динамическая матрица просто пропорциональна кинематической.

Формула (34) дает удовлетворительное решение задачи лишь в случае чистой лауэ-геометрии, когда брэгг-пучки отсутствуют. При дифракции в смешанной геометрии Брэгга–Лауэ даже в случае относительно нетолстых кристаллов формула (34) непригодна для численного решения задачи, не говоря уже о предельном переходе к случаю $t \rightarrow \infty$. Дело в том, что при наличии отражения по Брэггу часть собственных значений имеет отрицательную мнимую компоненту ε_j'' . Более того, если число Брэгг-пучков равно N_B , то число таких решений точно равно $2N_B$. Физическая природа таких решений достаточно простая. Каждому собственному решению соответствует блоховская волна с определенным направлением потока энергии. В решениях с $\varepsilon_j'' < 0$ поток энергии имеет отрицательную z -компоненту и эти волны затухают при движении снизу вверх. Естественно назвать эту группу решений блоховскими волнами брэгг-типа, а остальные решения с положительными значениями ε_j'' — блоховскими волнами лауэ-типа.

Решение в форме, пригодной для численных расчетов, не должно содержать возрастающих экспонент. Чтобы получить такое решение, упорядочим значения

индекса m по убыванию γ_m , а индекс j — по убыванию ε_j'' . Для сокращения записи обозначим всю совокупность значений индексов лауэ-типа одной буквой L , а все значения брэгг-типа одной буквой B . Введем также диагональные матрицы

$$C_{LL} = \exp\left(i \frac{Kt}{2\gamma_0} \varepsilon_j\right) \delta_{jj'}, \quad j \in L, \quad C_{BB} = \exp\left(i \frac{Kt}{2\gamma_0} \varepsilon_j\right) \delta_{jj'}, \quad j \in B. \quad (36)$$

В новых обозначениях система уравнений (31) разбивается на две подсистемы и записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} E_{LL} \cdot \lambda_L + E_{LB} \cdot \lambda_B &= D_L, \\ E_{BL} \cdot C_{LL} \cdot \lambda_L + E_{BB} \cdot C_{BB} \cdot \lambda_B &= D_B. \end{aligned} \quad (37)$$

Здесь E_{LL} и E_{BB} — квадратные матрицы размером $2N_L \times 2N_L$ и $2N_B \times 2N_B$, где $N_L = N - N_B$, а матрицы E_{LB} и E_{BL} в общем случае прямоугольные. Эта система используется для нахождения векторов λ_L и λ_B , причем решение должно быть записано в виде, содержащем только убывающие экспоненты, т. е. вместо матрицы C_{BB} нужно использовать обратную матрицу C_{BB}^{-1} . Простой расчет приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} \lambda_L &= Z_{LL}^{-1} \cdot (D_L - E_{LB} \cdot C_{BB}^{-1} \cdot E_{BB}^{-1} \cdot D_B), \\ \lambda_B &= C_{BB}^{-1} \cdot Z_{BB}^{-1} \cdot (D_B - E_{BL} \cdot C_{LL} \cdot E_{LL}^{-1} \cdot D_L), \end{aligned} \quad (38)$$

где

$$\begin{aligned} Z_{LL} &= E_{LL} - E_{LB} \cdot C_{BB}^{-1} \cdot E_{BB}^{-1} \cdot E_{BL} \cdot C_{LL}, \\ Z_{BB} &= E_{BB} - E_{BL} \cdot C_{LL} \cdot E_{LL}^{-1} \cdot E_{LB} \cdot C_{BB}^{-1}. \end{aligned} \quad (39)$$

Формула (32) в новых обозначениях переписывается в виде

$$\begin{aligned} R_L &= E_{LL} \cdot C_{LL} \cdot \lambda_L + E_{LB} \cdot C_{BB} \cdot \lambda_B, \\ R_B &= E_{BL} \cdot \lambda_L + E_{BB} \cdot \lambda_B. \end{aligned} \quad (40)$$

Подставляя найденное решение для вектора λ (38) в (40), получаем окончательно

$$R_L = M_{LL} \cdot D_L + M_{LB} \cdot D_B, \quad R_B = M_{BL} \cdot D_L + M_{BB} \cdot D_B, \quad (41)$$

где блоки динамической матрицы рассеяния имеют вид

$$\begin{aligned} M_{LL} &= E_{LL} \cdot C_{LL} \cdot Z_{LL}^{-1} - E_{LB} \cdot Z_{BB}^{-1} \cdot E_{BL} \cdot C_{LL} \cdot E_{LL}^{-1}, \\ M_{LB} &= E_{LB} \cdot Z_{BB}^{-1} - E_{LL} \cdot C_{LL} \cdot Z_{LL}^{-1} \cdot E_{LB} \cdot C_{BB}^{-1} \cdot E_{BB}^{-1}, \\ M_{BL} &= E_{BL} \cdot Z_{LL}^{-1} - E_{BB} \cdot C_{BB}^{-1} \cdot Z_{BB}^{-1} \cdot E_{BL} \cdot C_{LL} \cdot E_{LL}^{-1}, \\ M_{BB} &= E_{BB} \cdot C_{BB}^{-1} \cdot Z_{BB}^{-1} - E_{BL} \cdot Z_{LL}^{-1} \cdot E_{LB} \cdot C_{BB}^{-1} \cdot E_{BB}^{-1}. \end{aligned} \quad (42)$$

Легко непосредственно проверить, что, несмотря на относительно громоздкий вид, эти формулы весьма удобны для численного счета независимо от толщины кристалла и особенно в пределе $t \rightarrow \infty$.

В стандартной геометрии на отражение на кристалл падает одна волна с волновым вектором \mathbf{k}_0 и измеряются брэгг-пучки (см. рис.1). Этот случай описывает блок M_{BL} . В нулевом порядке теории возмущений по малым экспонентам имеем

$$(M_{BL})_{t \rightarrow \infty} \approx E_{BL} \cdot E_{LL}^{-1}. \quad (43)$$

Этот результат в теории многоволновой дифракции рентгеновских лучей был получен впервые в работах [20, 21].

В случае прямого наблюдения эффекта подавления неупругих каналов ядерной реакции интерес представляет интенсивность лауэ-пучков на нижней грани толстого кристалла. Эту ситуацию описывает блок M_{LL} . В первом порядке теории возмущений непосредственно из (42) имеем

$$(M_{LL})_{t \rightarrow \infty} \approx (E_{LL} - E_{LB} \cdot E_{BB}^{-1} \cdot E_{BL}) \cdot C_{LL} \cdot E_{LL}^{-1}. \quad (44)$$

Этот результат был впервые получен в работе [22].

В отличие от приближенных формул общие формулы (42) могут быть использованы для расчета многослойных кристаллических систем. Соответствующие рекуррентные формулы применительно к теории дифракции рентгеновских лучей были получены в работе [23]. Однако в случае дифракции мессбауэровских гамма-квантов эта задача не столь актуальна из-за отсутствия образцов. Пожалуй, единственная ситуация, которую можно было бы смоделировать — это кристаллы при наложении градиента температуры по нормали к поверхности.

После того как найдены амплитуды отражения, коэффициент отражения волны $m's$ в волну $m's'$ определяется по формуле

$$J(m's', ms) = \frac{|\gamma_{m'}| |R_{m's'}|^2}{|\gamma_m| |D_{ms}|^2}. \quad (45)$$

В стандартных условиях эту величину нужно просуммировать по индексу s' , а в случае неполяризованного излучения — усреднить по индексу s .

4. РАССЕЯНИЕ В КРИСТАЛЛЕ БОРАТА ЖЕЛЕЗА

Кристалл $FeBO_3$ является наиболее перспективным для наблюдения дифракционных эффектов мессбауэровского гамма-излучения (см., например, [24]). Он имеет ромбоэдрическую элементарную ячейку с длиной ребра $a = 5.520 \text{ \AA}$. Углы между ближайшими ребрами равны $\varphi = 49.54^\circ$. Объем элементарной ячейки $V_0 = 89.52 \text{ \AA}^3$, плотность $\rho = 4.27 \text{ г/см}^3$. Эти данные взяты из работы [25]. В элементарной ячейке имеется два атома Fe, два атома В и шесть атомов О. Обратная решетка кристалла также ромбоэдрическая с длиной ребра $b = 0.259 \text{ \AA}^{-1}$. Угол между ребрами $\varphi_{rh} = 113.18^\circ$ (косинус угла равен $C = -0.3936$).

В этом случае формулу (30) для амплитуды электронного рассеяния гамма-квантов удобно преобразовать к сумме по разным сортам атомов и ввести структурный фактор для каждого сорта атомов

$$S_{bh} = \frac{1}{N_b} \sum_{a=b} \exp\{-i h r_a\}, \quad (46)$$

где суммирование проводится лишь по координатам атомов сорта b , N_b — число таких атомов. В результате

$$\chi_h = \sum_b [C_r (f_b(\mathbf{h}) + \Delta f'_b) + i C_i \sigma_b^{D'}] N_b e^{-W_{bh}} S_{bh}, \quad (47)$$

$$C_r = -\frac{\lambda^2 r_0}{\pi V_0 g}, \quad C_i = \frac{\lambda \cdot 10^{-3}}{2\pi V_0 g}.$$

Здесь в качестве единиц измерения используются угловые секунды, а $g = 0.4848 \cdot 10^{-5}$ рад/с.

Структурные факторы для каждого сорта атомов в борате железа строго вещественны и равны

$$S_{Fe} = \cos^2(f_{hkl}), \quad S_B = \cos(f_{hkl}), \quad (48)$$

$$S_O = \frac{1}{3} \{ \cos[f_{hkl} + z(h-k)] + \cos[f_{hkl} + z(k-l)] + \cos[f_{hkl} + z(l-h)] \},$$

где $f_{hkl} = 0.5\pi(h+k+l)$, $z = 0.5962\pi$.

Атомный формфактор $f_b(\mathbf{h})$ — это табличная функция от аргумента $\sin \theta_B / \lambda = h/4\pi$, таблицы значений атомного фактора можно найти в работе [26]. Фактор Дебая–Валлера в изотропном приближении равен $\exp(-W_h) = \exp(-0.5\langle u^2 \rangle h^2)$. Константу $\langle u^2 \rangle$ можно получить усреднением данных, приведенных в работе [25]. Мы используем значение $\langle u^2 \rangle = 0.0026$. Константы C_r и C_i в данном конкретном случае ($\lambda = 0.861 \text{ \AA}$) равны $C_r = -1.5322 \cdot 10^{-2}$, $C_i = 3.157 \cdot 10^{-6}$. Значения дисперсионных поправок можно получить в работе [27], а сечения фотопоглощения — в работе [28]. Для рассматриваемой длины волны дисперсионная поправка составляет $\Delta f_{Fe}^r \approx 0.4$, а соответствующими значениями для О и В можно пренебречь. Значения для дипольной части сечения фотопоглощения равны соответственно $\sigma_{Fe}^D = 6085$, $\sigma_O^D = 55$, $\sigma_B^D = 9$.

Ядерное рассеяние происходит только на атомах железа, причем на двух атомах в элементарной ячейке направления внутреннего магнитного поля на ядрах можно приближенно считать прямо противоположными. Рассеяние происходит возбуждением состояния со спином $I = 3/2$ и переизлучением при переходе в основное состояние со спином $I_0 = 1/2$. Соответственно, $M_g = 1/2, -1/2$, а $M_e = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$. Здесь порядок расположения квантовых чисел соответствует возрастанию энергии уровней. Правилами отбора разрешены шесть переходов, показанные ниже вместе со значениями квантового числа M , квадратами значений соответствующих $3j$ -символов и энергией перехода в единицах Γ , отсчитанной от среднего значения, а также со знаком константы квадрупольного расщепления:

n	Переход	M	$(3j)^2$	$\Delta E_{0n}/\Gamma$	β_n
1	$-3/2 \rightarrow -1/2$	1	3/12	-54.93	1
2	$-1/2 \rightarrow -1/2$	0	2/12	-31.79	-1
3	$+1/2 \rightarrow -1/2$	-1	1/12	-8.64	-1
4	$-1/2 \rightarrow +1/2$	1	1/12	8.64	-1
5	$+1/2 \rightarrow +1/2$	0	2/12	31.79	-1
6	$+3/2 \rightarrow +1/2$	-1	3/12	54.93	1

Фактор Лэмба–Мессбауэра в изотропном приближении равен

$$f_{am} = f_{LM} = \exp(-\langle u^2 \rangle K^2) = 0.8707$$

независимо от индекса m . Кроме того, в конкретных расчетах использовались значения $\eta = 0.95$, $\alpha = 8.21$. Полные энергии переходов определяются по формуле

$$\frac{E_n}{\Gamma} = \frac{E_{0n}}{\Gamma} h + \frac{\Delta}{2} \beta_n + C, \quad (50)$$

где $h = 1 + \varepsilon$, $\varepsilon \ll 1$ — поправка на эффективное поле на ядре, $\Delta = 1.95$ — константа квадрупольного расщепления, $C = 3$ — химический сдвиг.

С учетом вышесказанного матрицу ядерного рассеяния можно записать в виде

$$\hat{p} = g_0 \left[\left(\frac{3}{4} f_1 + \frac{1}{4} f_4 \right) \hat{P}_{+1} + (f_2 + f_5) \hat{P}_0 + \left(\frac{1}{4} f_3 + \frac{3}{4} f_6 \right) \hat{P}_{-1} \right], \quad (51)$$

где $f_n = [2\hbar(\omega - \omega_n)/\Gamma + i]^{-1}$ — резонансные множители для шести указанных переходов,

$$g_0 = -\frac{2\pi\eta f_{LM}}{g(1+\alpha)V_0K^3} \frac{(2I+1)}{(2I_0+1)} = -6.692, \quad (52)$$

$$\hat{P}_{-1} = \hat{P}_A - \hat{P}_0 + i\hat{P}_B, \quad \hat{P}_{+1} = \hat{P}_A - \hat{P}_0 - i\hat{P}_B, \quad (53)$$

$$\hat{P}_0 = \frac{1}{2} [1 + (-1)^{h+k+l}] (\mathbf{m}_{ms} \mathbf{n}_0) (\mathbf{m}_{m's'} \mathbf{n}_0),$$

$$\hat{P}_A = \frac{1}{2} [1 + (-1)^{h+k+l}] (\mathbf{m}_{ms} \mathbf{m}_{m's'}),$$

$$\hat{P}_B = \frac{1}{2} [1 - (-1)^{h+k+l}] ([\mathbf{m}_{ms} \mathbf{m}_{m's'}] \mathbf{n}_0). \quad (54)$$

Здесь h, k, l — индексы вектора обратной решетки $\mathbf{h}_{m'm}$.

В формулах (53), (54) вектор \mathbf{n}_0 определяет ориентацию магнитного поля на атоме железа с координатами $(0,0,0)$. Этот вектор строго перпендикулярен направлению $(1,1,1)$ обратной решетки кристалла, т. е. лежит в плоскости поверхности образца. Однако в самой плоскости он может иметь произвольное направление. Введем угол φ_H и определим направление вектора \mathbf{n}_0 следующим образом:

$$\mathbf{n}_0 = \mathbf{a} \sin \varphi_H + \mathbf{b} \cos \varphi_H, \quad (55)$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{A}/A, \quad \mathbf{A} = [\mathbf{Z} \mathbf{s}_0], \quad \mathbf{b} = [\mathbf{a} \mathbf{Z}]. \quad (56)$$

Здесь, как и раньше, \mathbf{Z} — единичный вектор внутренней нормали к поверхности кристалла.

5. ГЕОМЕТРИЯ ДИФРАКЦИИ. ПОЛЯРИЗАЦИИ

Для расчета полной матрицы кинематического рассеяния необходимо определить конкретные выражения для тройки векторов $\mathbf{e}_{m\pi}$, $\mathbf{e}_{m\sigma}$, \mathbf{s}_m в каждом пучке, $m = 0, h, g$. Эту задачу проще всего решить, используя формулы из книги Пинскера [3]. Векторы обратной решетки \mathbf{h} и \mathbf{g} определяют круг с радиусом R . Введем вектор \mathbf{R} из центра круга в точку O . Очевидно,

$$\mathbf{R} = a\mathbf{h} + b\mathbf{g}, \quad (\mathbf{R} + \mathbf{h})^2 = R^2, \quad (\mathbf{R} + \mathbf{g})^2 = R^2. \quad (57)$$

Из этих условий легко найти коэффициенты a и b :

$$a = -\frac{g^2(h^2 - hg)}{2[h^2g^2 - (hg)^2]}, \quad b = -\frac{h^2(g^2 - hg)}{2[h^2g^2 - (hg)^2]}. \quad (58)$$

В общем случае $Ks_0 = R + cp$, где $p = P/P$ — единичный вектор в направлении $P = [hg]$. Очевидно, $c = \pm\sqrt{K^2 - R^2}$, а знак определяется из условия $s_{0z} > 0$. В компланарном случае $c = 0$. Искомые векторы вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} s_m &= s_0 + h_m/K, & e_{m\pi} &= E/E, & E &= [p s_m], \\ e_{m\sigma} &= [s_m e_{m\pi}], & \gamma_m &= s_{mz}. \end{aligned} \quad (59)$$

Таким образом, все геометрические величины, необходимые для расчета поляризационных матриц, могут быть вычислены автоматически. Необходимо задать только индексы двух отражений h, k, l и h', k', l' и координаты внутренней нормали к входной поверхности в базе обратной решетки Z_h, Z_k, Z_l . Последние практически всегда равны $-1, -1, -1$. Выбор векторов поляризации в виде, заданном формулами (59), удобен в том смысле, что для компланарного случая все векторы $e_{m\sigma} = p$ совпадают с таковыми для двухволнового случая. Векторы поляризации магнитного поля равны $m_{m\pi} = e_{m\sigma}$, $m_{m\sigma} = -e_{m\pi}$.

6. КОНКРЕТНЫЙ ПРИМЕР

Развитая выше теория позволяет изучить методом численного моделирования любые многоволновые конфигурации. Детальный анализ всего многообразия возникающих при этом эффектов выходит за рамки настоящей статьи. Здесь же в качестве примера применения теории рассмотрен один случай компланарной трехволновой дифракции на плоскостях 1,1,1 и 3,3,10 [13] мессбауэровского излучения с энергией 14.4 кэВ ($\lambda = 0.861 \text{ \AA}$) в кристалле FeVO_3 . Геометрические параметры показаны на рис. 2. Этот случай интересен тем, что отражение 1,1,1 (H) структурно запрещено, т. е. амплитуда электронного рассеяния для него равна нулю, а ядерное рассеяние происходит с изменением состояния поляризации и только для четырех крайних линий сверхтонкой структуры. Отражение 3,3,10 (G) является структурно разрешенным. В этом случае наряду с электронным рассеянием происходит ядерное рассеяние без изменения состояния поляризации.

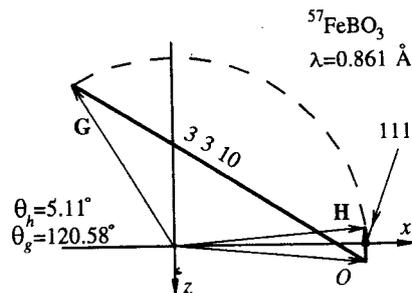


Рис. 2. Геометрия компланарной трехволновой дифракции

Такой качественно различный характер рассеяния на двух системах плоскостей в принципе невозможен в случае рентгеновских лучей и ни разу не рассматривался в теории. Кроме того, характер взаимодействия для различных компонент сверхтонкой структуры весьма сильно зависит от ориентации магнитного поля на ядре. Новым элементом является еще и то, что коэффициент перед резонансным множителем в амплитуде рассеяния с изменением поляризации является чисто мнимым, в то время как в случае рассеяния без изменения поляризации он строго вещественный. Очевидно, что это обстоятельство должно резко ослабить многоволновое взаимодействие. Кроме того, если H -отражение является симметричным, т. е. падающий и дифрагированный пучки образуют с поверхностью одинаковые углы, то G -отражение, напротив, резко асимметрично (коэффициент $\beta_g = -0.1034$). Как следует из уравнения (22), это приводит к тому, что амплитуда G -волны в кристалле примерно в десять раз меньше амплитуды H -волны, и, следовательно, ее влияние на H -волну гораздо слабее, чем обратное влияние H -волны на G -волну.

Отмеченные выше особенности этого случая, которые могут быть получены с помощью предварительного анализа, полностью подтверждаются результатами прямого численного расчета коэффициентов отражения в зависимости от энергетического положения между резонансами (энергетических спектров) при различных отклонениях от угла Брэгга. Были проведены расчеты двумерных массивов энергия-угол для различных значений поляризации падающего излучения (пили или сигма-) и ориентации магнитного поля на ядре. Наиболее сильное взаимодействие возникает в случае сигма-поляризованного падающего пучка при ориентации магнитного поля в плоскости рассеяния ($\varphi_H = 0$). На рис. 3 показаны результаты расчетов для этого случая. Вычислялись коэффициенты отражения поляризованного излучения

$$R_{ms} = \sum_{s'} J(ms', 0s), \quad (60)$$

где $m = h, g$, $s = \pi, \sigma$. При этом с целью наглядно показать результат многоволнового взаимодействия на двух графиках одного ряда показаны кривые для двух- и трехволнового случаев. Необходимо отметить, что при указанных углах отстройки от угла Брэгга двухволновый случай невозможен. Экспериментально его можно осуществить, изменяя частоту падающего излучения или параметр кристаллической решетки (например, температурой) при других углах. Данные кривые носят чисто условный характер и получены прямым обнулением матричных элементов, соответствующих второму отражению.

Как следует из расчетов, в области углов, соответствующих трехволновой дифракции, интенсивность H -пучка меняется крайне слабо, в то время как интенсивность G -пучка меняется весьма заметно в сторону уменьшения. Уменьшение отражения при дифракции по Брэггу при переходе от двухволнового случая к трехволновому является стандартным эффектом в случае рентгеновских лучей [1, 3] и объясняется обычно законом сохранения энергии (100-процентное отражение переходит в 50-процентное, но в два пучка). В данном случае коэффициенты отражения не столь велики и эффект имеет фазовую природу, т. е. комплексные амплитуды волн, рассеянных из O - и H -пучков в G -пучок, обладают разными фазами, что и приводит к их погасанию. Нужно отметить еще, что уменьше-

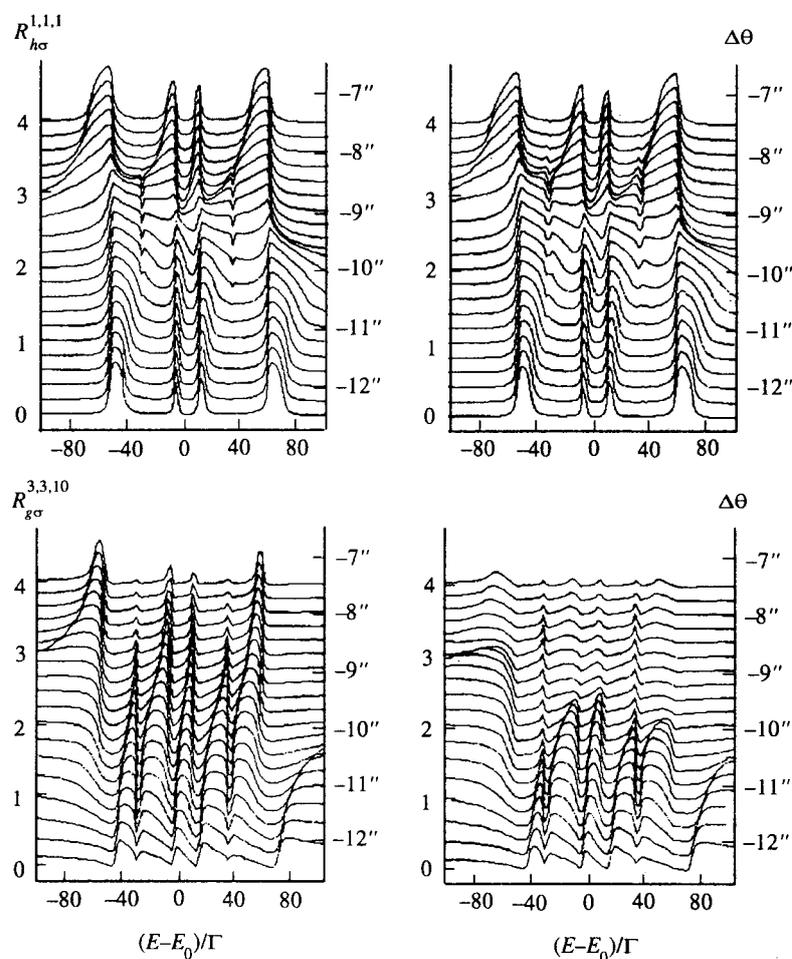


Рис. 3. Энергетическая и угловая зависимость коэффициентов отражений 1,1,1 и 3,3,10 сигма-поляризованной плоской волны в двухволновом (слева) и трехволновом (справа) случаях

ние имеет место лишь со стороны углов, больших по сравнению с динамическим углом Брэгга, который соответствует $\Delta\theta \approx -10''$. Со стороны малых углов, наоборот, наблюдается слабое увеличение отражения.

Главным эффектом многоволновой дифракции вообще и рассматриваемого случая в частности является возможность одновременно изучать различные по своему характеру дифракционные отражения как по отдельности, так и в их взаимосвязи. Большое число параметров, описывающих взаимодействие и геометрию дифракции превращает изучение каждого конкретного случая в самостоятельное исследование, а объем извлекаемой из эксперимента информации намного выше, чем в двухволновом случае. Основным результатом данной статьи является общая формулировка проблемы и разработка методической основы для анализа конкретных физических ситуаций.

Автор благодарен У. ван Бюрку, Г. В. Смирнову и А. И. Чумакову за помощь при выполнении данной работы и интерес к ней. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 93-02-2590.

Литература

1. S.L. Chang, *Multiple Diffraction of X-Rays in Crystals, Springer series in Solid State Sciences*, Springer, Berlin (1984), vol. 50; Cryst. Rev. **1**, 87 (1987).
2. Э.К. Ковьев, В.И. Симонов, Письма в ЖЭТФ **43**, 244 (1986).
3. З.Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика*, Наука, Москва (1982).
4. T. Joko and A. Fukuhara, J. Phys. Soc. Jap. **22**, 587 (1967).
5. A.M. Afanasev and V.G. Kohn, Acta Cryst. A **33**, 178 (1977).
6. A.Yu. Kazimirov, M.V. Kovalchuk, V.G. Kohn, et al., *Photon Factory Activity Report* (1991), p. 238; Europhys. Lett. **24**, 211 (1993).
7. А.М. Афанасьев, Ю. Каган, ЖЭТФ **64**, 1958 (1973).
8. Yu. Kagan, A.M. Afanasev, and V.G. Kohn, Phys. Lett. A **68**, 339 (1978); J. Phys. C: Solid State Phys. **12**, 615 (1979).
9. G.V. Smirnov, Нур. Int. **27**, 203 (1986).
10. U. van Bürck, Нур. Int. **27**, 219 (1986).
11. R. Rüffer, E. Gerdau, M. Grote, et al., Нур. Int. **61**, 1279 (1990).
12. S. Kikuta, in *Proc. Int. Conf. on Anomalous Scattering, ICAS-92, Malente* (1992).
13. U. van Bürck and R.L. Mössbauer, Нур. Int. **71**, 1333 (1992).
14. Yu. Kagan, in *Proc. Int. Conf. on Mössbauer Spectroscopy, Cracow* (1975), vol. 2, p.17.
15. J.T. Hutton, J.P. Hannon, and G.T. Trammell, Phys. Rev. A **37**, 4269 (1988).
16. А.М. Афанасьев, Ю. Каган, ЖЭТФ **48**, 327 (1965).
17. Yu. Kagan and A.M. Afanasev, Z. Naturforsch. A **28**, 1351 (1973).
18. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматгиз, Москва (1963).
19. U. van Bürck, G.V. Smirnov, R.L. Mössbauer, et al., J. Phys. C: Solid State Phys. **11**, 2305 (1978).
20. V.G. Kohn, Phys. Stat. Sol. A **54**, 375 (1979).
21. S.L. Chang, Acta Cryst. A **35**, 543 (1979).
22. А.Г. Тонейн, В.Г. Кон, Р.Н. Кузьмин, Кристаллография **29**, 203 (1984).
23. V.G. Kohn, J. Moscow Phys. Soc. **1**, 425 (1991).
24. G.V. Smirnov, Yu.V. Shvyd'ko, U. van Bürck, and R.L. Mössbauer, Phys. Stat. Sol. (b) **134**, 465 (1986).
25. R. Diehl, Solid State Commun. **17**, 743 (1975).
26. P.A. Doyle and P.S. Turner, Acta Cryst. A **24**, 390 (1968).
27. T. Cromer, Acta Cryst. **18**, 17 (1965).
28. G. Hildebrandt, J.D. Stephenson, and H. Wagenfeld, Z. Naturforsch. A **30**, 697 (1975).