

УДК 548.732

ДИФРАКЦИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ: ТЕНЗОРНЫЙ ПОДХОД

© 2023 г. А. П. Орешко¹, Е. Н. Овчинникова^{1,*}, В. Е. Дмитриенко²

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, Россия

*E-mail: ovtchin@gmail.com

Поступила в редакцию 10.01.2023 г.

После доработки 10.01.2023 г.

Принята к публикации 18.01.2023 г.

Использование рентгеновского синхротронного излучения позволяет наблюдать поляризационные, спектральные и угловые зависимости дифракционных отражений, теоретическое изучение которых требует применения тензорного подхода к описанию взаимодействия рентгеновского излучения с атомами вещества. Рассмотрены различные представления тензорной атомной амплитуды рассеяния, экспериментальные наблюдения анизотропии резонансного рассеяния рентгеновского излучения, а также связь электрических и магнитных мультипольных моментов на атомах со свойствами запрещенных резонансных отражений.

DOI: 10.31857/S0023476123700029, EDN: ХАКУРО

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение

1. Сечение рассеяния рентгеновского излучения

2. Экспериментальные исследования мультипольных вкладов в брэгговские отражения

Заключение

ВВЕДЕНИЕ

Дифракция рентгеновского излучения (РИ) до сих пор остается наиболее востребованным экспериментальным методом исследования структуры конденсированных сред, применяемым как в фундаментальных исследованиях, так и для контроля качества материалов в заводских лабораториях. Со времен Г.В. Вульфа российские ученые оказали существенное влияние на развитие различных рентгеновских методов и их распространение. Значительный вклад в воспитание специалистов в этой области внесла кафедра физики твердого тела, одна из старейших на физическом факультете МГУ, на которой трудились такие известные ученые, как профессора С.Т. Конобеевский, Г.С. Жданов, В.И. Иверонова, М.И. Захарова, М.М. Уманский, А.С. Илюшин [1–5]. Несмотря на различие экспериментальных техник и методов описания, рентгеновская дифракция дает информацию только о распределении электронной плотности, которая является скалярной величиной [6]. Изучение более сложной вектор-

ной функции – спиновой плотности – длительное время было предметом исследования дифракции медленных нейтронов [7].

В 60–70-х гг. XX столетия возник большой интерес к мессбауэровской спектроскопии и дифракции, позволяющим изучать не только магнитную структуру, но и градиент электрического поля на ядрах. При дифракции мессбауэровского излучения проявляется анизотропия резонансного ядерного рассеяния, приводящая, в частности, к появлению магнитных и квадрупольных отражений, запрещенных правилами погасаний пространственных групп кристаллов [8–11]. Свой вклад в изучение этого вопроса внесли профессор кафедры физики твердого тела МГУ Р.Н. Кузьмин и М.А. Андреева [12]. Экспериментально квадрупольные отражения впервые в мире обнаружены при мессбауэровской дифракции на кристалле теллура [13]. Тогда же появился термин “мессбауэрография” [14] как метод исследования структуры магнитных и электрических полей на ядрах атомов кристаллов. К сожалению, метод мессбауэровской дифракции не нашел в те годы широкого практического применения в силу слабой интенсивности радиоактивных источников. Большой вклад в развитие теории взаимодействия РИ с веществом внесли сотрудники кафедры физики твердого тела А.В. Колпаков, В.А. Бушув [15].

С появлением мощных источников РИ – синхротронов – стало возможным исследовать про-

странственное распределение не только электронной и спиновой плотности, но и электрических и магнитных мультипольных моментов более высоких порядков.

Поиск чувствительности РИ к магнитному упорядочению в кристаллах начался практически с открытия рентгеновских лучей. Исторический обзор этого вопроса можно найти в [16]. Косвенное доказательство этого факта представлено в работе сотрудников кафедры физики твердого тела физического факультета МГУ В.А. Карчагина и Е.С. Четвериковой [17]. В настоящее время существует значительное количество синхротронных станций, занимающихся исключительно исследованием магнитных свойств кристаллов [16]. Изучение упорядочения мультипольных моментов на атомах кристаллов привело к возникновению термина “электрически упорядоченные среды” [18, 19]. Были обнаружены зарядовое и орбитальное виды упорядочения, а также упорядочение квадрупольных моментов и моментов более высокого порядка, вплоть до гексадекапольного. Обнаружение подобных тонких эффектов обязано уникальным свойствам синхротронного излучения – высокой яркости и поляризации. Описание наблюдаемых эффектов потребовало более детального изучения взаимодействия РИ с веществом и введения новых представлений об амплитуде рассеяния и коэффициенте поглощения. Основы теории были заложены в [21–24], существует достаточно большое количество теоретических работ на эту тему и исследований, подтверждающих выводы теории [24–27]. Показано, что при энергиях падающего излучения, близких к краям поглощения атомов кристалла, коэффициент поглощения [28] и амплитуда рассеяния [29] содержат анизотропные тензорные поправки. В этой области энергия падающего РИ близка к величине, необходимой для перехода электрона с внутренней электронной оболочки атома в не занятые состояния внешних оболочек или в состояния непрерывного спектра, что проявляется в анизотропии резонансного взаимодействия РИ с веществом [30–32]. Физическая причина наблюдаемой анизотропии состоит в том, что электронные состояния внешних электронных оболочек расщеплены вследствие спин-орбитального взаимодействия или взаимодействия с кристаллическим полем. В геометрии поглощения (пропускания) анизотропия проявляется в виде зависимости коэффициента поглощения от поляризации падающего излучения, а в случае квадрупольных резонансных переходов – еще и от направления волнового вектора. Подробное изложение этого вопроса, а также тензорных вкладов в коэффициент поглощения в разных группах симметрии приведено в [28].

Обычно краю поглощения соответствует скачок коэффициента поглощения при определенных энергиях, характерных для разных химических элементов. В конденсированных средах край поглощения обладает тонкой структурой, которую принято разделять на дальнюю (~30 эВ выше скачка, вплоть до 1 КэВ), ближнюю (до 30 эВ) и предкраевую (непосредственно перед скачком). Анизотропные свойства резонансного поглощения сильно проявляются в ближней области XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure), где они в основном обусловлены дипольными резонансными переходами между электронными уровнями, а также в предкраевой области, где они часто вызваны переходами более высоких порядков мультипольности. Экспериментально анизотропные свойства резонансного поглощения изучаются методами рентгеновского линейного дихроизма (XNLD, X-ray Natural Linear Dichroism) [28], рентгеновского магнитного линейного дихроизма (XMLD, X-ray Magnetic Linear Dichroism) [33, 34], рентгеновского естественного кругового дихроизма (XNCD, X-ray Natural Circular Dichroism) [35, 36], рентгеновского магнитного кругового дихроизма (XMCD, X-ray Magnetic Circular Dichroism) [37, 38]. Методы магнитного рентгеновского дихроизма используются для исследования магнитных свойств и успешно применяются для изучения различных наносистем [39–41]. В качестве эффектного применения линейного и кругового дихроизма в немагнитных веществах можно привести визуализацию распределения кристаллитов в костной ткани, полученную при сканировании наноразмерным линейно поляризованным синхротронным пучком [42], или визуализацию распределения хиральных доменов в кристалле $\text{DyFe}_3(\text{BO}_3)_4$, выполненную с помощью сканирования поверхности пучком циркулярно поляризованного излучения [43].

Синхротронное излучение дало начало развитию многочисленных методов исследования в разнообразных геометриях: малоуглового рассеяния (SAXS, Small Angle X-ray Scattering), широкоуглового рассеяния (WAXS, Wide Angle X-ray Scattering), в том числе в геометрии скользящего отражения (GISAXS, Grazing Incidence Small Angle Scattering), неупругого рассеяния (IXS, Inelastic X-ray Scattering) и т.д. Все эти методы могут быть реализованы при энергиях падающего излучения вблизи краев поглощения, где существенны резонансные эффекты.

В настоящей работе сосредоточимся на резонансной дифракции, используя тензорный подход при последовательном рассмотрении взаимодействия РИ с атомами кристалла. Синхротронное излучение благодаря широкому спектру позволяет варьировать длину волны падающего излучения и измерять не только интенсивность брэгговских отражений, но и ее зависимость от

энергии падающего излучения, т.е. дифракционные спектры. При энергиях падающего излучения вблизи краев поглощения в атомной амплитуде рассеяния наблюдаются зависящие от энергии дисперсионные поправки, основной вклад в которые является скалярным и не зависит от поляризации падающего излучения. Их существование приводит к нарушению закона Фриделя [4–6] и позволяет определить фазу амплитуды рассеяния, что лежит в основе методов DAFS (Diffraction Anomalous Fine Structure) и MAD (Multiwavelength Anomalous Diffraction) [44, 45]. Однако в основном анизотропные свойства рассеяния РИ обусловлены присутствием тензорных поправок к атомному фактору и проявляются в магнитном резонансном/нерезонансном рассеянии РИ и резонансном упругом рассеянии РИ REXS (Resonant Elastic X-ray Scattering), в котором изучаются спектральные, угловые и поляризационные свойства дифракционных брэгговских отражений.

1. СЕЧЕНИЕ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Количественно принято описывать взаимодействие РИ с атомами вещества сечениями поглощения и рассеяния, при их вычислении с учетом резонансных эффектов используется гамильтониан Блюма [20, 29]. Однако гамильтониан Блюма не является полным квазирелятивистским разложением гамильтониана Дирака. Этот факт приводит к тому, что при использовании разложения гамильтониана Дирака непосредственно в сечениях поглощения [46] и рассеяния [47] появляются новые компоненты, подробно рассмотренные ниже.

Согласно [46] полный гамильтониан H связанной системы “излучение + вещество” представляет собой сумму гамильтониана H^{rad} свободного электромагнитного поля, гамильтониана H^{mat} материальной системы при отсутствии электромагнитного поля, описывающего электронную и ядерную подсистемы и взаимодействие между ними, и гамильтониана H^{in} , описывающего взаимодействие материальной системы с электромагнитным полем:

$$H = H^{rad} + H^{mat} + H^{int}. \quad (1)$$

В том случае, когда энергия фотонов электромагнитного поля не соответствует энергии возбуждения атомных ядер, что реализуется в рентгеновском диапазоне длин волн $0.1 \leq \lambda \leq 100 \text{ \AA}$, ядро можно рассматривать как точечный бесструктурный заряд, т.е. пренебречь гамильтонианом ядерной подсистемы и нуклон-нуклонным взаимодействием в ядрах.

Таким образом, система “излучение + вещество” становится системой “излучение + электроны атома вещества”, а гамильтониан этой системы представляет собой гамильтониан Дирака с добавкой векторного потенциала РИ $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t)$ в кулоновской калибровке [48]. Более того, с учетом сделанных в [47, 49] замечаний при рассмотрении взаимодействия рентгеновского синхротронного излучения с атомами вещества полный гамильтониан (1) представляет собой квазирелятивистское приближение гамильтониана Дирака и в рамках представления Фолди–Ваутхайзена имеет вид [50]:

$$H = \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + (eV + e\Phi) - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \right. \\ \left. + \frac{e\hbar}{2m^2c^2} s[\nabla\Phi \times \mathbf{p}] + \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta\Phi \right\} + \\ + \left\{ -\frac{e}{mc} A_p + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 - \frac{e\hbar}{mc} s[\nabla \times \mathbf{A}] + \right. \\ \left. + \frac{e\hbar}{2m^2c^3} s \left[\left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} \right] - \frac{e}{c} \left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{A} \right] \right] \right\} + \quad (2) \\ + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\zeta} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \left(a^+(\mathbf{q}, \zeta) a(\mathbf{q}, \zeta) + \frac{1}{2} \right) = \\ = H^{mat} + H^{int} + H^{rad},$$

где e , m , \mathbf{p} , \mathbf{s} – заряд, масса, импульс и оператор спина электрона; V – потенциальная энергия электрона вещества, взаимодействующего со всеми другими электронами и набором неподвижных ядер в определенных положениях; Φ и \mathbf{A} – скалярный и векторный потенциалы РИ; $a(\mathbf{q}, \zeta)$ и $a^+(\mathbf{q}, \zeta)$ – операторы уничтожения и рождения фотонов с волновым вектором \mathbf{q} и состоянием поляризации ζ .

Под действием возмущения H^{int} , вызванного РИ, система переходит из начального состояния $|i\rangle$, содержащего атом вещества в состоянии $|a_i\rangle$ и фотон $|\mathbf{k}_i, \mathbf{e}_{\mathbf{k}i}\rangle$ (с волновым вектором \mathbf{k}_i и поляризацией $\mathbf{e}_{\mathbf{k}i}$), в конечное состояние $|f\rangle$, содержащее атом вещества в состоянии $|a_f\rangle$ и фотон $|\mathbf{k}_f, \mathbf{e}_{\mathbf{k}f}\rangle$ (с волновым вектором \mathbf{k}_f и поляризацией $\mathbf{e}_{\mathbf{k}f}$).

В рамках нестационарной теории возмущений вероятность такого перехода за единицу времени записывается в виде [51]:

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \langle f | T_{i \rightarrow f} | i \rangle^2 \rho_f, \quad (3)$$

где $T_{i \rightarrow f}$ – оператор перехода, а ρ_f – плотность конечных состояний, нормированная на δ -функцию Дирака (от кинетической энергии фотоэлектрона) для состояний непрерывного спектра и на фактор Брейта–Вигнера $\rho(\epsilon_f = \epsilon_i + \hbar\omega_{\mathbf{k}}) =$

$= \frac{\Gamma/2}{(\varepsilon_i - \varepsilon_f + \hbar\omega_k)^2 + (\Gamma/2)^2}$ (Γ – ширина возбужденного состояния) для возбужденных состояний при резонансных переходах.

Во втором порядке теории возмущений члены оператора перехода, соответствующие уничтожению фотона, описывают поглощение, соответствующее рождению фотона, – отвечают за излучение, а члены, соответствующие уничтожению одного фотона и рождению другого, описывают процесс рассеяния.

Таким образом, рассеяние описывается оператором перехода [52]:

$$T_{i \rightarrow f}^{scatt} = \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \times \left\{ \begin{aligned} & \frac{m}{2} AA - \frac{\hbar}{2c^2} s \left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{A} \right] + \\ & + \left(Ap + \hbar s [\nabla \times \mathbf{A}] - \right. \\ & \left. - \frac{\hbar}{2mc^2} s \left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} \right] \right) \times \\ & \times G_0(E_i) \left(Ap + \hbar s [\nabla \times \mathbf{A}] - \right. \\ & \left. - \frac{\hbar}{2mc^2} s \left[\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{p} \right] \right) \end{aligned} \right\} = \quad (4)$$

$$= T_{i \rightarrow f}^{scatt,1} + T_{i \rightarrow f}^{scatt,2} + T_{i \rightarrow f}^{scatt,3},$$

где $G_0(E_i)$ – резольвента невозмущенного гамильтониана системы.

Первое $T_{i \rightarrow f}^{scatt,1}$ и второе $T_{i \rightarrow f}^{scatt,2}$ слагаемые в (4) описывают соответственно хорошо известные томсоновское и истинное магнитное рассеяние [52]. При этом величина истинной магнитной компоненты рассеяния меньше томсоновской компоненты рассеяния и в случае упругого нерезонансного рассеяния РИ, т.е. при $\hbar\omega_{ki} = \hbar\omega_{kf} \equiv \hbar\omega_k \gg E(a_n) - E(a_i)$, где a_n – промежуточное состояние атома, имеющее конечное время жизни

$$\Gamma_n, \left\langle \frac{f}{f} \left| \frac{T_{i \rightarrow f}^{scatt,2}}{T_{i \rightarrow f}^{scatt,1}} \right| i \right\rangle = \frac{\hbar\omega_k}{mc^2} < 0.02.$$

В случае нерезонансного упругого рассеяния РИ третья слагаемая в (4) имеет вид [47, 49]:

$$\langle f | T_{i \rightarrow f}^{scatt,3} | i \rangle = \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{2\pi\hbar c^2}{V} \frac{1}{\omega_k} \frac{1}{\hbar\omega_k} \times \langle a_i | [C^-(\mathbf{k}_f), C^+(\mathbf{k}_i)] | a_i \rangle, \quad (5)$$

где

$$C^\pm(\mathbf{k}) = \left\{ (\mathbf{e}_k^\pm \mathbf{p}) - i\hbar s [\mathbf{k} \times \mathbf{e}_k^\pm] + i \frac{\hbar\omega_k}{2mc^2} s [\mathbf{e}_k^\pm \times \mathbf{p}] \right\} e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (6)$$

$\mathbf{e}_k^+ \equiv \mathbf{e}_k$, $\mathbf{e}_k^- \equiv \mathbf{e}_k^*$, знак * означает комплексное сопряжение.

С учетом всех нерезонансных компонент сечение упругого рассеяния РИ записывается в виде

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 |D_1 + D_2 + D_3 + D_4|^2, \quad (7)$$

где

$$D_1 = \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | a_i \rangle (\mathbf{e}_{k_f}^* \mathbf{e}_{k_i}),$$

$$D_2 = -i \frac{\hbar\omega_k}{mc^2} \left\{ \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{i[\mathbf{q} \times \mathbf{p}]}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{P}_L + \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \mathbf{s} | a_i \rangle \mathbf{P}_s \right\},$$

$$D_3 = -\frac{1}{2} \left(i \frac{\hbar\omega_k}{mc^2} \right)^2 \times \left\{ \begin{aligned} & \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{i[\mathbf{p} \times \mathbf{s}]}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{P}_1 + \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{i(\mathbf{p}\mathbf{s})}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{P}_2 - \\ & - i \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{(\mathbf{e}_{k_i}\mathbf{p})[\mathbf{s} \times \mathbf{k}_i] - (\mathbf{s}\mathbf{e}_{k_i})[\mathbf{p} \times \mathbf{k}_f]}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{e}_{k_f}^* - \\ & - i \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{(\mathbf{e}_{k_f}^*\mathbf{p})[\mathbf{s} \times \mathbf{k}_f] - (\mathbf{s}\mathbf{e}_{k_f}^*)[\mathbf{p} \times \mathbf{k}_i]}{\hbar k^2} | a_i \rangle \mathbf{e}_{k_i} + \\ & + \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{(\mathbf{e}_{k_f}^*\mathbf{s}_i)(\mathbf{e}_{k_i}\mathbf{s}_i) - (\mathbf{e}_{k_f}^*\mathbf{s}_f)(\mathbf{e}_{k_i}\mathbf{s}_f)}{k^2} | a_i \rangle \end{aligned} \right\},$$

$$D_4 = -\frac{1}{4} \left(i \frac{\hbar\omega_k}{mc^2} \right)^3 \times \left\{ \begin{aligned} & \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{i[\mathbf{p} \times \mathbf{s}]}{\hbar k^2} \left\{ (\mathbf{e}_{k_i}\mathbf{s}_f) \mathbf{e}_{k_f}^* + (\mathbf{e}_{k_f}^*\mathbf{s}_i) \mathbf{e}_{k_i} \right\} | a_i \rangle - \\ & - \langle a_i | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{[\mathbf{e}_{k_f}^* \times \mathbf{p}]}{\hbar^2 k^2} \left\{ -\mathbf{e}_{k_i}(\mathbf{p}\mathbf{s}) + \mathbf{p}(\mathbf{s}\mathbf{e}_{k_i}) \right\} | a_i \rangle \end{aligned} \right\},$$

и введены поляризационные факторы

$$\mathbf{P}_f = [\mathbf{k}_f \times \mathbf{e}_{k_f}^*], \quad \mathbf{P}_i = [\mathbf{k}_i \times \mathbf{e}_{k_i}],$$

$$\mathbf{P}'_s = \mathbf{P}_f(\mathbf{e}_{k_i}\mathbf{k}_f) - \mathbf{P}_i(\mathbf{e}_{k_f}^*\mathbf{k}_i) - [\mathbf{P}_f \times \mathbf{P}_i],$$

$$\mathbf{P}_L = [\mathbf{e}_{k_f}^* \times \mathbf{e}_{k_i}], \quad \mathbf{P}_s = \mathbf{P}_L + \frac{\mathbf{P}'_s}{k^2},$$

$$\mathbf{P}_1 = \mathbf{e}_{k_f}^*(\mathbf{e}_{k_i}\mathbf{k}_f) + \mathbf{e}_{k_i}(\mathbf{e}_{k_f}^*\mathbf{k}_i),$$

$$\mathbf{P}_2 = -\{\mathbf{e}_{k_f}^*\mathbf{P}_i + \mathbf{e}_{k_i}\mathbf{P}_f\},$$

$$r_0 \equiv \frac{e^2}{mc^2} - \text{классический радиус электрона.}$$

Так как каждое последующее слагаемое в (7) отличается от предыдущего множителем $i \frac{\hbar\omega_k}{mc^2}$, в случае действительных векторов поляризации (т.е. при линейной поляризации падающего излу-

чения) интерференция описывается парами членов (7): D_1 и D_3 , D_2 и D_4 . В свою очередь, для комплексных векторов поляризации (т.е. при эллиптической или круговой поляризации падающего излучения и/или нецентросимметричных структур) для описания интерференции нужны все члены (7). При этом величина каждого следующего члена много меньше величины предыдущего (в $\left(\frac{\hbar\omega_{kf}}{mc^2}\right)^{-1} \sim 50$ раз), т.е. учетом слагаемых D_3 и D_4 при вычислении сечения нерезонансного рассеяния РИ атомами вещества можно пренебречь.

При резонансном упругом рассеянии РИ, т.е. когда соотношение $\hbar\omega_{\mathbf{k}} \approx \hbar\omega_{in} \equiv E(a_n) - E(a_i)$ выполняется хотя бы для одного промежуточного состояния $|a_n\rangle$, матричный элемент, описывающий рассеяние РИ, имеет вид

$$\langle f | T_{i \rightarrow f}^{scatt, 3, res} | i \rangle \approx \frac{r_0}{m} \frac{2\pi\hbar c^2}{V} \frac{1}{\omega_{\mathbf{k}}} \times \sum_{|a_n\rangle} \left(-\frac{E(a_i) - E(a_n)}{\hbar\omega_{\mathbf{k}}} \right) \frac{\langle a_i | C^-(\mathbf{k}_f) | a_n \rangle \langle a_n | C^+(\mathbf{k}_i) | a_i \rangle}{E(a_i) - E(a_n) + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}}. \quad (8)$$

Так как в рентгеновском диапазоне длин волн для большинства внутренних уровней атома выполняется условие $\mathbf{k}r \ll 1$ (\mathbf{k} – волновой вектор РИ, r – характерный размер квантовой системы) [52], экспоненциальный множитель $e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, входящий в $C^{\pm}(\mathbf{k})$, можно разложить в ряд $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \approx 1 + i\mathbf{k}\mathbf{r} + \frac{(i\mathbf{k}\mathbf{r})^2}{2} + \dots$. Тогда в приближении двух первых членов разложения сечение резонансного рассеяния запишется [45, 47]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}_{res} = r_0^2 \times \left[\begin{aligned} & A_{res}^{ele1} + A_{res}^{ele2} + A_{res}^{e2e2} + A_{res}^{e1m1} + A_{res}^{e2m1} + \\ & + A_{res}^{m1m1} + A_{res}^{e1sp1} + A_{res}^{e2sp1} + A_{res}^{m1sp1} + A_{res}^{sp1sp1} \end{aligned} \right], \quad (9)$$

где для компонент сечения резонансного рассеяния введены обозначения:

$$A_{res}^{ele1} = \frac{m}{\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3 \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \langle a_i | \mathbf{r} | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{r} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}},$$

$$A_{res}^{ele2} = \frac{im}{2\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}} \times \left\{ \begin{aligned} & \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \langle a_i | \mathbf{r} | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{k}_i \mathbf{r}) | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} - \\ & - \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \langle a_i | (\mathbf{k}_f \mathbf{r}) | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{r} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \end{aligned} \right\},$$

$$A_{res}^{e2e2} = \frac{m}{4\omega_{\mathbf{k}}} \times \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3 \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \langle a_i | (\mathbf{k}_f \mathbf{r}) | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{k}_i \mathbf{r}) | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i}}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}},$$

$$A_{res}^{e1m1} = \frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{\omega_{in}^2}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}} \times \left\{ \begin{aligned} & \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \langle a_i | \mathbf{r} | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_i | a_i \rangle + \\ & + \langle a_i | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_f | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{r} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \end{aligned} \right\},$$

$$A_{res}^{e2m1} = \frac{i\hbar}{4\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^2}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}} \times \left\{ \begin{aligned} & \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \langle a_i | (\mathbf{k}_f \mathbf{r}) | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_i | a_i \rangle - \\ & - \langle a_i | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_f | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{k}_i \mathbf{r}) | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \end{aligned} \right\},$$

$$A_{res}^{m1m1} = \frac{\hbar^2}{4m\omega_{\mathbf{k}}} \times \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in} \langle a_i | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_f | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_i | a_i \rangle}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}}, \quad (10)$$

$$A_{res}^{e1sp1} = \frac{i\hbar}{2c^2} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}} \times \left\{ \begin{aligned} & \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \langle a_i | \mathbf{r} | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle + \\ & + \langle a_i | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \times \mathbf{r}] | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{r} | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \end{aligned} \right\},$$

$$A_{res}^{e2sp1} = \frac{\hbar}{4c^2} \sum_{|a_n\rangle} \frac{-\omega_{in}^3}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}} \times \left\{ \begin{aligned} & \mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \langle a_i | (\mathbf{k}_f \mathbf{r}) | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle - \\ & - \langle a_i | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \times \mathbf{r}] | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{k}_i \mathbf{r}) | a_i \rangle \mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \end{aligned} \right\},$$

$$A_{res}^{m1sp1} = \frac{i\hbar^2}{4mc^2} \sum_{|a_n\rangle} \frac{\omega_{in}^2}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}} \times \left\{ \begin{aligned} & \langle a_i | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_f | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle + \\ & + \langle a_i | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \times \mathbf{r}] | a_n \rangle \langle a_n | (\mathbf{L} + 2\mathbf{s}) \mathbf{P}_i | a_i \rangle \end{aligned} \right\},$$

$$A_{res}^{sp1sp1} = \frac{\hbar^2 \omega_{\mathbf{k}}}{4mc^4} \times \sum_{|a_n\rangle} \frac{\omega_{in}^3 \langle a_i | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}_f}^* \times \mathbf{r}] | a_n \rangle \langle a_n | \mathbf{s} [\mathbf{e}_{\mathbf{k}_i} \times \mathbf{r}] | a_i \rangle}{\hbar\omega_{in} + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\frac{\Gamma_n}{2}},$$

$$\mathbf{L} = \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] - \text{орбитальный момент импульса.}$$

Выражение (10) представляет собой совокупность различных компонент амплитуды рассеяния РИ. Наряду с хорошо известными компонентами амплитуды резонансного рассеяния: A_{res}^{ele1} – электрический диполь-дипольный вклад, A_{res}^{ele2} – электрический диполь-квадрупольный вклад, A_{res}^{e2e2} – электрический квадруполь-квадрупольный, A_{res}^{elm1} – электрический дипольный-магнитный дипольный, A_{res}^{e2m1} – электрический квадрупольный-магнитный дипольный и A_{res}^{m1m1} – магнитный диполь-дипольный традиционными компонентами [45, 52, 54], выражение (10) содержит спин-зависимые $A_{res}^{el spl}$, $A_{res}^{e2 spl}$, $A_{res}^{m1 spl}$ и $A_{res}^{spl spl}$ компоненты, возникающие из-за взаимодействия малых волновых функций Дирака электрона [47, 49].

Таким образом, при резонансных энергиях падающего излучения атомная амплитуда рассеяния содержит добавки, зависящие не только от энергии, но и от поляризации излучения, направлений волнового вектора, ориентации осей квантования и других факторов. Обобщая приведенные выше выражения для амплитуды рассеяния РИ и выделяя для ясности изотропную часть тензорной амплитуды рассеяния, определяемую только электронной плотностью и изотропными дисперсионными поправками, можно представить атомную амплитуду рассеяния в виде

$$f_{\alpha\beta}(E) = (f_0 + f'(E) + if''(E))\delta_{\alpha\beta} + f_{\alpha\beta}'(E) + if_{\alpha\beta}''(E) + f_{\alpha\beta}^{mag}, \quad (11)$$

где f_0 – амплитуда потенциального (томсоновского) рассеяния, f_0' и f_0'' – добавки, включающие в себя изотропную часть эффектов дисперсии и поглощения ($\sim 10^{-1}f_0$), $f_{\alpha\beta}'(E)$ и $f_{\alpha\beta}''(E)$ ($\sim 10^{-1}-10^{-3}f_0$) описывают анизотропное резонансное рассеяние, $f_{\alpha\beta}^{mag}$ ($\sim 10^{-2}-10^{-3}f_0$) – нерезонансное магнитное рассеяние, которое является тоже поляризационно- и спинзависимым. Под индексами α , β подразумеваются поляризационные индексы.

В анизотропную часть амплитуды включены все факторы, перечисленные в (10), где использовано представление анизотропной части амплитуды рассеяния в декартовых ортах. Можно также ввести понятие о тензорном атомном факторе f_{ij} , который не зависит от поляризаций, исключив зависимость от векторов поляризации падающего и рассеянного излучений:

$$f_{\alpha\beta} = -\frac{e^2}{mc^2} e_j^{*\alpha} f_{jk} e_k^\beta. \quad (12)$$

Такое представление удобно при рассмотрении симметричных преобразований, но f_{ij} зависит

от волновых векторов падающего и рассеянного излучения. Чтобы разделить вклады в амплитуду рассеяния от воздействия электромагнитного поля и самого рассеивателя, в работах многих авторов существует следующее представление атомной амплитуды рассеяния, при получении которого используется мультипольное разложение плоской волны [23–25]:

$$f = 4\pi\lambda_0 \sum_{k=0}^{2L} \sum_{q=-k}^k T_q^{(k)*}(\mathbf{e}^*, \mathbf{k}'; \mathbf{e}, \mathbf{k})_{EL} F_q^{(k)}(\omega)_{EL},$$

$$T_q^{(k)*}(\mathbf{e}^*, \mathbf{k}'; \mathbf{e}, \mathbf{k})_{EL} = \sqrt{\frac{2k+1}{2L+1}} \times$$

$$\times \sum_{MM'} C_{LM';kq}^{LM} [\mathbf{e}^* \cdot \mathbf{Y}_{lm'}(\mathbf{k}')] [\mathbf{Y}_{lm}^*(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}],$$

$$F_q^{(k)}(\omega)_{EL} = \sqrt{\frac{2k+1}{2L+1}} \sum_{M'M} C_{LM';kq}^{LM} F_{LM';LM}^{(e)}(\omega),$$

где $C_{LM';kq}^{LM}$ – коэффициенты Клебша–Гордана, $\mathbf{Y}_{lm'}(\mathbf{k})$ – сферические тензоры электрического типа. Удобство такой формы записи амплитуды рассеяния состоит в том, что она представлена в виде свертки тензоров, один из которых определяется только свойствами излучения, а другой – только свойствами среды.

Использование любого из способов описания вклада анизотропии в амплитуду рассеяния позволяет предсказать эффекты, возникающие при дифракции синхротронного излучения с энергиями вблизи краев поглощения атомов. В кристаллах для описания свойств брэгговских отражений необходимо вычислить структурную амплитуду с учетом того, что тензорные части атомных амплитуд кристаллографически неэквивалентных атомов различны. Причиной различия являются разные направления осей квантования, определяемых кристаллическим полем или спин-орбитальным взаимодействием. Поскольку вклады тензорных поправок в амплитуду рассеяния существенно меньше, чем амплитуда рассеяния без их учета, наиболее ярко анизотропные свойства резонансного рассеяния проявляются в тех случаях, когда структурная амплитуда рассеяния вне резонансной области энергий мала или отсутствует. Последнее возможно, когда для томсоновского рассеяния выполняются законы погасаний или магнитная структура обладает периодичностью, отличной от кристаллической решетки. В первом случае возникают так называемые запрещенные отражения, во втором – спутники, которым соответствуют дробные миллеровские индексы. В настоящее время проведено огромное количество экспериментальных исследований, позволяющих не только установить наличие вклада анизотропии в амплитуду рассеяния, но и выяснить причину этой анизотропии. Чтобы от-

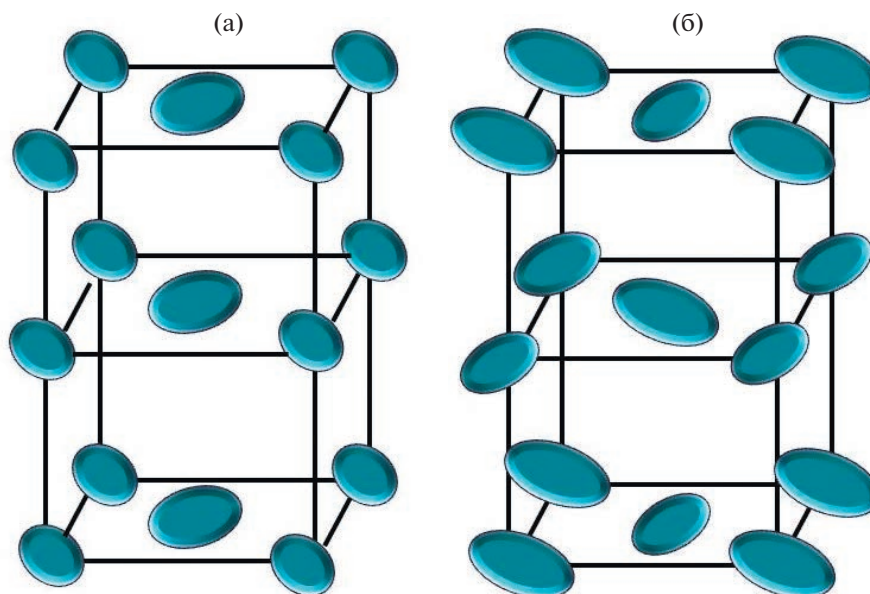


Рис. 1. Примеры антиферро-квадрупольного упорядочения мультипольных моментов на атомах. Подобный тип упорядочения моментов Q_{xy} (а) и Q_{yz} (б) наблюдался на атомах урана в кристалле UPd_3 и получен из анализа спектров отражений (104) и (103) на M_4 -крае поглощения урана при $T = 5.2$ К [75].

разить связь особенностей, проявляющихся в резонансном поглощении и рассеянии РИ, с той структурой на атомном уровне, которая приводит к появлению этих особенностей, в ряде работ было введено понятие об эффективном операторе как о математической величине, описывающей локальную структуру [55–57]. Так, появление сигнала магнитохирального дихроизма в кристалле Cr_2O_3 показало существование атомного анапольного момента, который является причиной магнитоэлектрического эффекта в этом кристалле [58].

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ МУЛЬТИПОЛЬНЫХ ВКЛАДОВ В БРЭГГОВСКИЕ ОТРАЖЕНИЯ

Экспериментальные исследования отражений, обусловленных анизотропией рассеяния рентгеновских лучей, начались в 80-е гг. прошлого столетия, когда доступными стали источники синхротронного излучения. Были обнаружены магнитные нерезонансные [60], магнитные резонансные отражения [61–64], а также теоретически предсказаны [65–67] и измерены запрещенные отражения в немагнитных кристаллах [68, 69], обусловленные расщеплением электронных состояний в кристаллическом поле. Основной особенностью всех этих отражений является возможность существования канала рассеяния при изменении поляризации, отсутствующего в томсоновском рассеянии. С тех пор были обнаружены разнообразные типы магнитных и немагнит-

ных отражений, их описание можно найти в обзорах [26, 27, 71–73]. Наиболее сильными и распространенными являются отражения, обусловленные диполь-дипольным резонансным рассеянием, но также наблюдались диполь-квадрупольные, квадруполь-квадрупольные отражения, отражения, обусловленные орбитальным упорядочением, тепловыми колебаниями и совокупностью различных каналов рассеяния, что приводит к появлению интерференционных эффектов. Для описания поляризационных, спектральных и угловых свойств этих отражений необходимо использовать тензорное описание амплитуды рассеяния, но из сопоставления экспериментальных данных и теоретического рассмотрения стараются извлечь информацию о том, упорядочение каких мультиполей на атомном уровне приводит к появлению обнаруженных свойств [18, 74–77]. На рис. 1 показаны примеры антиферро-квадрупольного упорядочения мультипольных моментов на атомах, которые изображены как эллипсоиды, оси которых по-разному ориентированы на разных атомах. Подобный тип упорядочения моментов Q_{xy} и Q_{yz} наблюдался на атомах урана в кристалле UPd_3 и получен из анализа спектров отражений (104) и (103) на M_4 -крае поглощения урана при $T = 5.2$ К [75].

Интерференционные эффекты возникают тогда, когда существует несколько причин (каналов) возникновения анизотропии, что делает резонансные отражения очень чувствительными к изменению отдельных вкладов в тензорный атом-

ный фактор [79, 80]. Эта чувствительность используется для изучения физических свойств конденсированных сред на атомном уровне и их изменения при внешних воздействиях. В качестве внешнего воздействия в разных исследованиях были использованы температура, магнитное и электрическое поля, а также акустические колебания. Так, изучение перестройки спектра отражений (113) в кристаллах со структурой вюртцита ZnO и GaN [80] позволило определить корреляционные функции, описывающие относительные смещения атомов металла и неметалла в зависимости от температуры [81]. В этом случае перестройка спектра была связана с интерференцией температурно-независимой диполь-квадрупольной и диполь-дипольной термоиндуцированной компонент амплитуды рассеяния. Еще более интересная информация была получена для кристаллов RDP и KDP, где наблюдался скачок интенсивности отражений $00l$ ($l = 4n + 2$) при фазовом переходе в результате запрета на диполь-дипольное рассеяние при возникновении сегнетоэлектрического упорядочения. В параэлектрической фазе перестройка энергетических спектров запрещенных отражений с температурой связана с интерференцией трех мультипольных компонент: диполь-квадрупольной, диполь-дипольной термоиндуцированной и компоненты, обусловленной мгновенными конфигурациями, образованными атомами водорода. Сопоставление численного моделирования и экспериментальных данных позволило определить частоты задействованной в образовании запрещенного отражения фононной моды, а также энергии активации различных водородных конфигураций [82, 83].

В [84] интерференция квадрупольного резонансного и магнитного нерезонансного рассеяния используется для определения знака взаимодействия Дзялошинского–Мории (ДМ) в кристалле слабого ферромагнетика бората железа FeBO_3 . С этой целью с помощью внешнего магнитного поля осуществлялся поворот магнитных моментов на атомах железа на 180° , при этом менялся знак магнитного вклада в структурный фактор отражения. На рис. 2а представлена схема эксперимента, а на рис. 2б – изменение формы энергетического спектра отражения (009) и рассчитанные действительная и мнимая части амплитуд квадрупольного и магнитного нерезонансного рассеяния, а также экспериментально измеренные азимутальные зависимости отражения для двух противоположных направлений магнитного поля. Сопоставление теоретического рассуждения с результатами эксперимента позволило определить абсолютное направление магнитных моментов на атомах и установить соответствующий знак взаимодействия ДМ. Продолжением этой работы явилось исследование знака

взаимодействия ДМ в серии изоструктурных кристаллов с разными переходными металлами. Сопоставление экспериментальных данных с результатами DFT-расчетов позволило связать знак взаимодействия ДМ со степенью заполнения d -оболочки переходных элементов [85, 86].

Во всех перечисленных случаях изучались запрещенные отражения, в которых отсутствовала потенциальная компонента амплитуды рассеяния РИ. Однако интерференция нерезонансного и резонансного каналов рассеяния РИ дает полезную информацию и в том случае, когда амплитуда потенциального рассеяния РИ отлична от нуля, но мала. Так, изучение отражения (222) в кристалле германия позволило определить абсолютное значение фазы резонансного рассеяния благодаря тому, что значение слабой потенциальной компоненты, вызванной асимметрией электронной плотности, было хорошо известно ранее [87].

Интересные результаты приведены в [88], где изучались спектры слабых брэгговских отражений в титанате стронция SrTiO_3 и их изменение при приложении внешнего электрического поля. Хотя кристалл принадлежит кубической центрально-симметричной группе симметрии и не может обладать пьезоэлектрическими свойствами, при приложении поля вблизи поверхности электрода возникает слой другой фазы с тетрагональной симметрией (MFP), которая является пьезоэлектрической. Причиной возникновения MFP-фазы является миграция заряженных вакансий кислорода в электрическом поле, и процесс является обратимым. Эта работа демонстрирует возможность создания функциональных материалов с управляемыми физическими свойствами. Недавно с помощью изучения изменения запрещенных отражений получены данные о влиянии стоячих акустических волн на электронные состояния в кристаллах парателлурита TeO_2 [89].

Что касается перспектив исследований магнитной дифракции РИ, то она в первую очередь касается кристаллов с неколлинеарными магнитными моментами и необычным магнитным упорядочением. К ним относится большая группа кристаллов (MnSi , FeGe и др.) со структурой $B20$ и пр. гр. $P2_13$, в которых наблюдаются спиральные магнитные структуры, скирмионы и т.п. [90]. К этой же группе относится кристалл RhGe , в котором недавно обнаружено сосуществование сверхпроводимости и необычного магнетизма [91]. Расчеты из первых принципов (пакет Quantum ESPRESSO) показывают, что в этом кристалле сложное тороидальное магнитное упорядочение может возникать не только вокруг атома переходного элемента Rh, но и вокруг Ge (рис. 3). И магнитная дифракция РИ будет, несомненно,

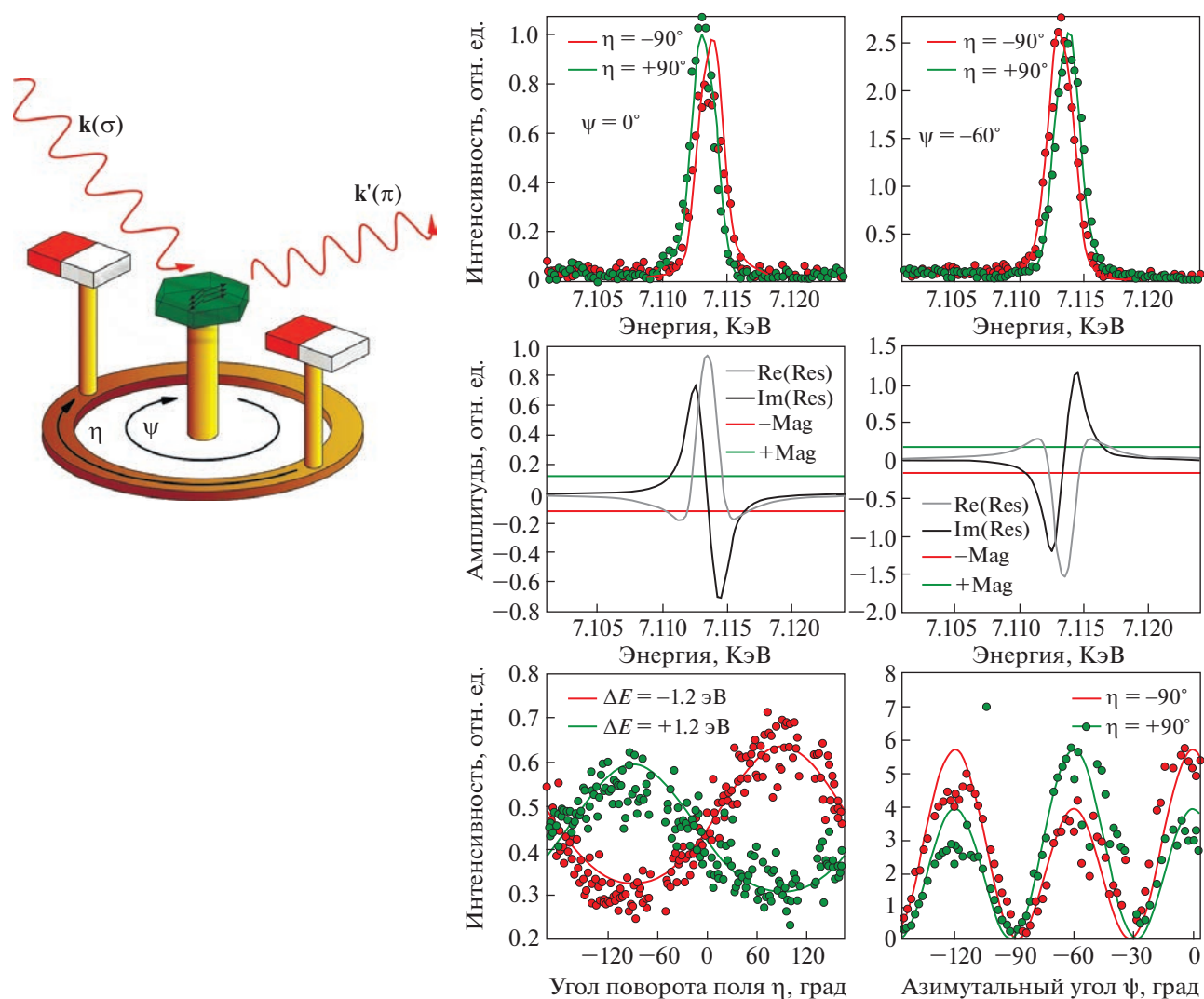


Рис. 2. Схема эксперимента по измерению знака взаимодействия ДМ в борате железа FeBO_3 : а – в центре расположен кристалл, вокруг которого могут вращаться два постоянных магнита (угол поворота η). Стрелками показаны два направления антиферромагнитных моментов атомов железа; Ψ – азимутальный угол, описывающий вращение кристалла вокруг нормали к отражающей плоскости, \mathbf{k} – волновой вектор падающей волны круговой (σ) поляризации, \mathbf{k}' – волновой вектор отраженной линейно (π) поляризованной волны; б (верхняя панель) – энергетические спектры отражения (009) в борате железа FeBO_3 для двух противоположных направлений магнитного поля ($\eta = \pm 90^\circ$) при значениях азимутального угла $\psi = 0^\circ$ и 60° ; б (средняя панель) – рассчитанные действительная и мнимая части амплитуд резонансного квадрупольного (Res) и магнитного нерезонансного (Mag) рассеяния для двух значений азимутального угла; б (нижняя панель) – экспериментально измеренные зависимости интенсивности отражения (009): слева – в зависимости от угла поворота кристалла при значениях энергии падающего излучения на $\Delta E = 1.2$ эВ, выше $\Delta E = -1.2$ эВ ниже резонанса, справа – азимутальные зависимости интенсивности для двух противоположных направлений магнитного поля и без магнитного поля.

востребована в исследованиях подобных кристаллов.

Резонансная рентгеновская дифракция оказывается полезным физическим методом, позволяющим изучать влияние внешних воздействий на локальные на атомном уровне свойства конденсированной среды. К сожалению, большинство практически значимых функциональных материалов описывается группами симметрии, в которых нет погасаний, следовательно, невозможно

наблюдение запрещенных отражений с целочисленными индексами Миллера. Одним из выходов в данной ситуации является поляризационное выделение только канала с измененной $\sigma \rightarrow \pi$ -поляризацией, что требует, однако, либо очень хорошей монохроматизации излучения, либо использования брэгговских отражений, вклад от зарядового рассеяния в которые мал [92]. Интересные перспективы в этом направлении дает использование в дифракционных исследованиях РИ кру-

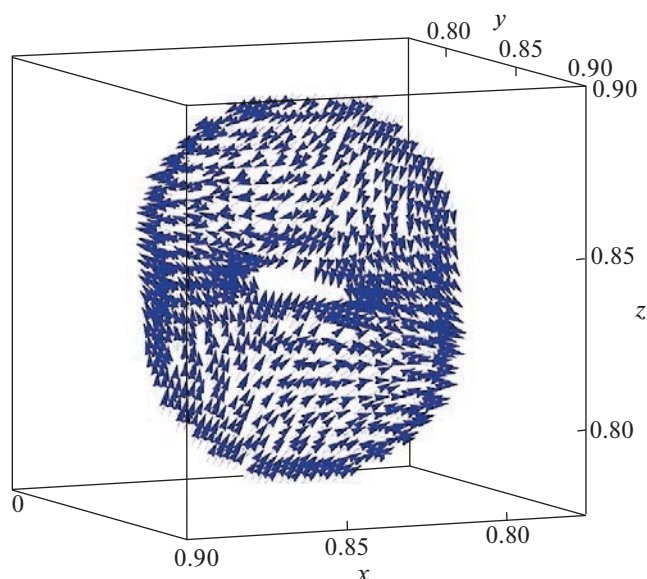


Рис. 3. Тороидальное распределение магнитных моментов вокруг атома Ge в кубическом кристалле RhGe, вычисленное из первых принципов [88] (пакет Quantum ESPRESSO). Стрелки показывают направления локальной намагниченности на уровне половинности от максимальной.

говой поляризации [93–96]. Как показано в [97], в дифракционных запрещенных отражениях может наблюдаться круговой дихроизм, который невозможен в отсутствие канала рассеяния с изменением поляризации. Совершенствование экспериментальной техники [98] и методов расчетов показывает, что уже существует возможность проводить качественные поляризационные измерения для выявления анизотропных вкладов в коэффициент поглощения и амплитуду рассеяния и последующего детального изучения магнитных, фононных, электронных свойств конденсированных сред на атомном уровне.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При энергиях падающего излучения, близких к краям поглощения атомов вещества, появляется необходимость тензорного описания свойств амплитуды рассеяния рентгеновского излучения, которые обусловлены расщеплением электронных состояний атомов в конденсированных средах вследствие локальной анизотропии положений резонансных атомов.

Тензорные свойства рентгеновской амплитуды рассеяния хорошо проявляются в различных экспериментальных методах и дают детальную информацию об электронных, фононных, магнитных, орбитальных и других свойствах изучаемых объектов, а также подтверждают возмож-

ность управления этими свойствами с помощью внешних воздействий.

Во многих случаях одновременно возникают несколько возможных каналов рассеяния и чтобы их разделить, необходимо использовать специальные методы исследования, подбирая их таким образом, чтобы либо подавить какие-то каналы, либо использовать их интерференцию. До сих пор не все возможные анизотропные компоненты рентгеновской амплитуды рассеяния были экспериментально обнаружены, что требует новых идей и дальнейшего совершенствования экспериментальной техники.

Авторы выражают благодарность В.А. Чижикову за помощь в создании рис. 3.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки и образования Российской Федерации, грант № 075-15-2021-1353. Работа В.Е. Дмитриенко выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Конобеевский С.Т. // Успехи физ. наук. 1951. Т. 44. С. 21.
2. Жданов Г.С. Рентгеновы лучи. Л.: Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1949. 33 с.
3. Жданов Г.С., Илюшин А.С., Никитина С.В. Дифракционный и резонансный структурный анализ. М.: Наука, 1980. 254 с.
4. Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. М.: Изд-во МГУ, 1972. 278 с.
5. Уманский М.М. Аппаратура рентгеноструктурных исследований. М.: Физматгиз, 1960. 348 с.
6. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: Изд-во иностр. лит., 1950. 572 с.
7. Изюмов Ю.А., Озеров Р.П. Магнитная нейтронография. М.: Наука, 1966. 532 с.
8. Trammell G.T. // Phys. Rev. 1962. V. 126. P. 1045.
9. Каган Ю., Афанасьев А.М. // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. С. 1504.
10. Афанасьев А.М., Каган Ю. // Письма в ЖЭТФ. 1965. Т. 2. С. 130.
11. Blume M., Kistner O.C. // Phys. Rev. 1968. V. 171. P. 417.
12. Андреева М.А., Кузьмин Р.Н. Мессбауэровская гамма-оптика. М.: Изд-во МГУ, 1982. 227 с.
13. Засимов В.С., Кузьмин Р.Н., Александров А.Ю., Фиров А.И. // Письма в ЖЭТФ. 1972. Т. 15. С. 394.
14. Zhdanov G.S., Kuz'min R.N. // Acta Cryst. B. 1968. V. 24. P. 10. <https://doi.org/10.1107/S0567740868001639>
15. Колпаков А.В., Бушуев В.А., Кузьмин Р.Н. // Успехи физ. наук. 1978. Т. 126. С. 479.

16. Rogalev A., Wilhelm F., Jaouen N. et al. Magnetism and Synchrotron Radiation. Pt. 4 / Eds. Beaurepaire E. et al. 2001. 402 p.
17. Kartschagin W., Tschetverikowa E. // Z. Phys. 1926. B. 39. S. 886.
18. Amara M., Morin P. // J. Phys.: Condens. Matter. 1998. V. 10. P. 9875. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/10/43/032>
19. Murakami Y., Kawada H., Kawata H. et al. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 1932. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.1932>
20. Blume M. // J. Appl. Phys. 1985. V. 57. P. 3615. <https://doi.org/10.1063/1.335023>
21. Platzman P.M., Tzoar N. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. P. 3556. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.2.3556>
22. de Bergevin F., Brunel M. // Acta Cryst. A. 1981. V. 37. P. 314. <https://doi.org/10.1107/S0567739481000739>
23. Hannon J.P., Trammell G.T., Blume M., Gibbs D. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 1245. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.1245>
24. Lovesey S.W., Balcar E., Knight K.S., Fernández Rodríguez J. // Phys. Rep. 2005. V. 411. P. 233. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2005.01.003>
25. Grenier S., Joly Y. // J. Phys.: Conf. Ser. 2014. V. 519. P. 012001. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/519/1/012001>
26. Dmitrienko V.E., Ishida K., Kirfel A. // Acta Cryst. A. 2005. V. 61. P. 481. <https://doi.org/10.1107/S0108767305018209>
27. Paolazini L. // Collection SFN. 2014. V. 13. P. 03002. <https://doi.org/10.1051/sfn/20141303002>
28. Brouder Ch. // J. Phys.: Condens. Matter. 1990. V. 2. P. 701. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/2/3/018>
29. Blume M. // Resonant Anomalous X-ray Scattering / Eds. Materlik G. et al. Amsterdam: Elsevier, 1994. P. 495.
30. Carra P., Thole T. // Rev. Mod. Phys. 1994. V. 66. P. 1509. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.66.1509>
31. Feil D. // Cryst. Rev. 2002. V. 8. P. 95. <https://doi.org/10.1080/0889311021000049770>
32. Kirfel A., Petcov A., Eichhorn K. // Acta Cryst. A. 1991. V. 47. P. 180. <https://doi.org/10.1107/S010876739001159X>
33. Van der Laan G., Thole B.T., Sawatzky G.A. et al. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. P. 6529. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.6529>
34. Thole B.T., Van der Laan G., Sawatzky G.A. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. P. 2086. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.55.2086>
35. Alagna L., Prospero T., Turchini S. et al. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 4799. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.4799>
36. Goulon J., Rogalev A., Wilhelm F. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. P. 237401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.237401>
37. Carra P., Thole B.T., Altarelli M., Wang X. // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 70. P. 694. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.70.694>
38. Altarelli M. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 597. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.597>
39. Gambardella P., Dallmeyer A., Maiti K. et al. // Nature. 2002. V. 416. P. 301. <https://doi.org/10.1038/416301a>
40. Enders A., Skomski R., Honolka J. // J. Phys.: Condens. Matter. 2010. V. 22. № 433001 (32 p). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/43/433001>
41. Scholl A., Ohldag H., Nolting F. et al. Magnetic Microscopy of Nanostructures. NanoScience and Technology / Eds. Hopster H., Oepen H.P. Berlin; Heidelberg: Springer, 2005.
42. Stiffler A., Wittig K.N., Sassi M. et al. // J. Am. Chem. Soc. 2018. V. 140. P. 11698. <https://doi.org/10.1021/jacs.8b05547>
43. Platunov M.S., Gudim I.A., Ovchinnikova E.N. et al. // Crystals. 2021. V. 11. P. 1. <https://doi.org/10.3390/cryst11050531>
44. Hodeau J.L., Favre-Nicolin V., Bos S. et al. // Chem. Rev. 2001. V. 101. P. 1843. <https://doi.org/10.1021/cr0000269>
45. Terwilliger T.C., Berendzen J. // Acta Cryst. D. 1999. V. 55. Pt. 4. P. 849. <https://doi.org/10.1107/S0907444999000839>
46. Bouildi N., Brouder C. // Eur. Phys. J. B. 2017. V. 90. P. 246. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2017-80266-5>
47. Орешко А.П. // ЖЭТФ. 2021. Т. 160. С. 459. <https://doi.org/10.31857/S0044451021100011>
48. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М.: Изд-во иностр. лит., 1956.
49. Орешко А.П. // Вестн. МГУ. Сер. 3: Физика и астрономия. 2021. № 4. С. 3.
50. Silenko A.J. // Phys. Rev. A. 2016. V. 93. P. 022108. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.93.022108>
51. Шифф Л. Квантовая механика. М.: Изд-во иностр. лит., 1959.
52. Altarelli M. // Magnetism: a synchrotron radiation approach / Eds. Beaurepaire E. et al. Berlin: Springer, 2006. P. 201.
53. Altarelli M. // Magnetism and synchrotron radiation: towards the fourth generation light sources / Eds. Beaurepaire E. et al. Springer-Verlag, 2013. P. 95.
54. de Groot F. // Coord. Chem. Rev. 2005. V. 249. P. 31. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2004.03.018>
55. Goulon J., Rogalev A., Wilhelm F. et al. // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. С. 445.
56. Carra P., Jerez A., Marri I. // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. P. 045111. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.045111>
57. Carra P., Benoist R. // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. R7703. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.R7703>
58. Goulon J., Rogalev A., Wilhelm F. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. P. 237401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.237401>

59. *Goulon J., Rogalev A., Wilhelm F. et al.* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2003. V. 15. P. S633.
<http://stacks.iop.org/0953-8984/15/S633/c30516.pdf>
60. *Brunel M., de Bergevin F.* // *Acta Cryst. A.* 1981. V. 37. P. 324.
<https://doi.org/10.1107/S0567739481000740>
61. *Namikawa K., Ando M., Nakajima T., Kawata H.* // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1985. V. 54. P. 4099.
<https://doi.org/10.1143/JPSJ.54.4099>
62. *Gibbs D., Moncton D.E., D'Amico K.L.* // *J. Appl. Phys.* 1985. V. 57. P. 3619.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.8182>
63. *Gibbs D., Harshman D.R., Isaaks E.D. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V. 61. P. 1241.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.1241>
64. *Vettier C.* // *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* 2001. V. 117–118. P. 113.
[https://doi.org/10.1016/S0368-2048\(01\)00250-X](https://doi.org/10.1016/S0368-2048(01)00250-X)
65. *Dmitrienko V.E.* // *Acta Cryst. A.* 1983. V. 39. P. 29.
<https://doi.org/10.1107/S0108767383000057>
66. *Dmitrienko V.E.* // *Acta Cryst. A.* 1984 V. 40. P. 89.
<https://doi.org/10.1107/S0108767384000209>
67. *Беляков В.А., Дмитриенко В.Е.* // *Успехи физ. наук.* 1989. Т. 158. С. 679.
68. *Templeton D.H., Templeton L.K.* // *Acta Cryst. A.* 1982. V. 38. P. 62.
<https://doi.org/10.1107/S0567739482000114>
69. *Templeton D.H., Templeton L.K.* // *Acta Cryst. A.* 1985. V. 41. P. 365.
<https://doi.org/10.1107/S0108767385000782>
70. *Templeton D.H., Templeton L.K.* // *Acta Cryst. A.* 1986. V. 42. P. 478.
<https://doi.org/10.1107/S0108767386098859>
71. *Дмитриенко В.Е., Овчинникова Е.Н.* // *Кристаллография.* 2003. Т. 48. С. S59.
72. *Овчинникова Е.Н., Мухамеджанов Э.Х.* // *Кристаллография.* 2016. Т. 61. С. 735.
<https://doi.org/10.1134/S1063774516050175>
73. *Борисов М.М., Дмитриенко В.Е., Козловская К.А. и др.* // *Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исследования.* 2019. № 10. С. 42.
<https://doi.org/10.1134/S1027451019050239>
74. *Usui T., Tanaka Y., Nakajima H. et al.* // *Nat. Mater.* 2014. V. 13. P. 611.
<https://doi.org/10.1038/nmat3942>
75. *Lovesey S.W., Scagnoli V. Chirality* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2009. V. 21. P. 474214.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/47/474214>
76. *Matsumara T., Okuyama D., Oumi N. et al.* // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2005. V. 74. P. 1500.
<https://doi.org/10.1143/JPSJ.74.1500>
77. *Fernandez-Rodríguez J., Lovesey S.W., Blanco J.A.* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2010. V. 22. № 022202 (6 p).
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/2/022202>
78. *Ji S., Song C., Koo J. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 257205.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.257205>
79. *Ovchinnikova E.N., Dmitrienko V.E.* // *Acta Cryst. A.* 2000. V. 56. P. 2.
<https://doi.org/10.1107/S0108767399010211>
80. *Oreshko A.P., Ovchinnikova E.N., Beutier G. et al.* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2012. V. 24. P. 245403.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/24/24/245403>
81. *Ovchinnikova E.N., Dmitrienko V.E., Oreshko A.P. et al.* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2010. V. 22. P. 355404.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/35/355404>
82. *Richter C., Novikov D.V., Mukhamedzhanov E.Kh. et al.* // *Phys. Rev. B.* 2014. V. 89. P. 094110.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.094110>
83. *Beutier G., Collins S.P., Nisbet G. et al.* // *Phys. Rev. B.* V. 92. P. 1.
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/519/1/012006>
84. *Dmitrienko V.E., Ovchinnikova E.N., Collins S.P. et al.* // *Nat. Phys.* 2014. V. 10. P. 202.
<https://doi.org/10.1038/nphys2859>
85. *Pincini D., Fabrizi F., Beutier G. et al.* // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 98. P. 104424.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.104424>
86. *Beutier G., Collins S.P., Dimitrova O.V. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 119. P. 167201-1.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.167201>
87. *Мухамеджанов Э.Х., Борисов М.М., Морковин А.Н. и др.* // *Письма в ЖЭТФ.* 2007. Т. 86. С. 897.
<https://doi.org/10.1134/S0021364007240071>
88. *Richter C., Zschornak M., Novikov D. et al.* // *Nat. Commun.* 2018. V. 9. P. 1.
<https://doi.org/10.1038/s41467-017-02599-6>
89. *Элиович Я.А., Овчинникова Е.Н., Козловская К.А. и др.* // *Письма в ЖЭТФ.* 2022. Т. 115. С. 492.
<https://doi.org/10.1134/S0021364022100368>
90. *Чижииков В.А.* // *ЖЭТФ* 2021. Т. 159. С. 656.
<https://doi.org/10.31857/S0044451021040076>
91. *Tsyvashchenko A.V., Sidorov V.A., Petrova A.E. et al.* // *J. Alloys Compd.* 2016. V. 686. P. 431.
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.06.048>
92. *Овчинникова Е.Н., Дмитриенко В.Е., Козловская К.А., Розалев А.* // *Письма в ЖЭТФ.* 2019. Т. 110. С. 563.
<https://doi.org/10.1134/S0370274X19200098>
93. *Овчинникова Е.Н., Козловская К.А., Дмитриенко В.Е., Орешко А.П.* // *Кристаллография.* 2022. Т. 67. С. 885.
<https://doi.org/10.31857/S0023476122060200>
94. *Goulon J., Jaouen N., Rogalev A. et al.* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2007. V. 19. P. 156201.
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/15/156201>
95. *Tanaka Y., Takeuchi T., Lovesey S.W. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 2008. V. 100. P. 1.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.145502>
96. *Tanaka Y., Collins S.P., Lovesey S.W. et al.* // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2012. V. 24.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.145502>
97. *Ovchinnikova E.N., Rogalev A., Wilhelm F. et al.* // *J. Synchrotron Rad.* 2021. V. 28. P. 1455.
<https://doi.org/10.1107/S1600577521005853>
98. *Schmitt A.T., Joly Y., Schulze K.S. et al.* // *Optica.* 021. V. 8. P. 56.
<https://doi.org/10.1364/OPTICA.410357>