

Рассеивающие свойства кристалла зависят от его размера и строения. Рассеяние излучения идеальным мозаичным кристаллом (см. *Мозаичность кристаллов*) и поликристаллом со ср. размером зерна  $\lambda \ll 10^{-5}$  см описывается кинематич. приближением теории Д. р. л. [1, 5]. В кинематич. теории Д. р. л. предполагается, что интенсивность рассеянной кристаллич. блоком волны мала по сравнению с интенсивностью первичного поля. Такое приближение вполне допустимо для мн. кристаллов. Согласно классич. электродинамике, электрич. поле  $E_0$  падающей на кристалл волны излучения с частотой  $\omega$  и волновым вектором  $k_0$  вызывает возникновение переменного дипольного момента атомов, в результате чего каждый атом становится источником вторичной сферич. волны, амплитуда к-рой определяется рассеивающей способностью атома, а фаза — его положением в кристаллич. структуре. Амплитуда вектора напряжённости электрич. поля, рассеянного одним атомом, равна:

$$E_j(s) = \frac{1}{R} [k_s [k_s E_0]] (e^2/m\omega^2) f(s) \exp[i(s \cdot r_j)],$$

где  $f(s)$  — атомный фактор, в к-рый включён также и Дебая — Уоллера фактор;  $r_j = ma + nb + pc$  — радиус-вектор положения  $j$ -го атома;  $m, n, p$  — целые числа;  $s = k_s - k_0$  — вектор рассеяния,  $s = 4\pi \sin \theta / \lambda$ ;  $2\theta$  — угол между векторами  $k_0$  и  $k_s$  (угол рассеяния; угол  $\theta$  наз. углом Брегга); двойное векторное произведение определяет поляризац. зависимость  $E_j(s)$ ;  $R$  — расстояние от точки рассеяния до точки наблюдения. Полная амплитуда рассеянного поля  $E(s)$  равна сумме  $E_j(s)$  по всем  $N$  атомам кристалла:  $E(s) = \sum_{j=1}^N E_j(s)$ .

Относит. интенсивность рассеянного в единичный телесный угол излучения равна:

$$\frac{I_s}{I_0} = \int |E(s)|^2 R^2 d\Omega = \sigma_e P(\theta) |f(s)|^2 \times \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \exp[i(s \cdot r_j - r_k)], \quad (2)$$

где  $I_0$  — интенсивность первичного излучения,  $\sigma_e = (e^2/mc^2)^2$  — сечение рассеяния излучения электроном ( $e$  и  $m$  — его заряд и масса,  $c$  — скорость света);  $P(\theta)$  — поляризац. множитель. Для неполяризованного излучения  $P(\theta) = (1 + \cos^2 2\theta)/2$ ;  $\sigma_e P(\theta) |f(s)|^2$  — сечение рассеяния атомом; экспоненты в (2) учитывают пространственные сдвиги фаз между волнами, рассеянными  $j$ -м и  $k$ -м атомами. Для кристаллов с неск. атомами в элементарной ячейке  $f(s)$  в (2) следует заменить на структурный фактор  $F(s)$ , тогда  $r_j$  — радиус-вектор положения  $j$ -й элементарной ячейки.

Для идеального кристалла суммы в (2) являются геом. прогрессиями. Если кристалл имеет вид правильного параллелепипеда, содержит  $N = N_a N_b N_c$  элементарных ячеек ( $N_a, N_b, N_c$  — число периодов вдоль векторов элементарных трансляций  $a, b$  и  $c$ ), то суммирование (2) приводит к интерференц. ф-ции Лауэ:

$$\frac{\sin^2 [N_a (sa/2)]}{\sin^2 (sa/2)} \cdot \frac{\sin^2 [N_b (sb/2)]}{\sin^2 (sb/2)} \cdot \frac{\sin^2 [N_c (sc/2)]}{\sin^2 (sc/2)},$$

макс. значения к-рой (т. н. гл. дифракц. максимумы) равны  $(N_a N_b N_c)^2$ , т. е.  $\sim V^2$  ( $V$  — объём кристалла), при значениях  $s, a, b, c$ , удовлетворяющих условиям, эквивалентным ур-ниям Лауэ (1):  $(sa) = 2\pi H$ ,  $(sb) = 2\pi K$ ,  $(sc) = 2\pi L$ . Эти условия показывают, что вектор рассеяния  $s$  для дифракц. направления равен вектору обратной решётки  $g$ , так что  $k_g = k_0 + g$ . Угл. ширина дифракц. максимума в плоскости падения равна  $2\pi/N_g$ , где  $N_g$  — число периодов решётки кристалла вдоль вектора  $g$ . Если, напр.,  $N_g \sim 10^4$ , то угл. ширина максимума  $\sim 10^{-4}$  рад. При увеличении объёма кристалла интенсивность гл. дифракц. максимумов

возрастает  $\sim V^2$ , а их ширины уменьшаются  $\sim V^{-2/3}$  (рис. 1).

Интегральная по углам рассеивающая способность кристалла при прохождении им отражающего положения пропорциональна его объёму  $V$ , т. е. относит. интегральная интенсивность

$$I_{\text{ин}}^g / I_0 = Q(g) V, \quad (3)$$

где  $Q(g) = K \sigma_e P(\theta) L(\theta) |F(g)|^2 \lambda^3 / V_{\text{эл}}^2$  — уд. рассеивающая способность кристалла;  $\lambda$  — длина волны излучения;  $V_{\text{эл}}$  — объём элементарной ячейки; значения константы  $K$  и фактора интегральности

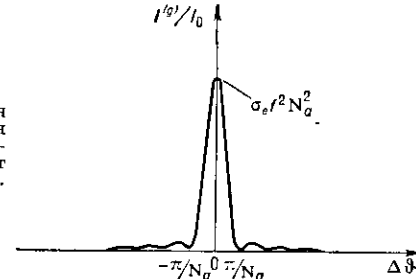


Рис. 1. Одномерная интерференционная функция Лауэ;  $\theta$  — угловая отстройка от точного угла Брегга.

$L(\theta)$  определяются схемой дифракции. Для кристалла с заметным поглощением в  $Q(g)$  нужно учитывать экстинкционное ослабление проходящего и рассеянного лучей в объёме кристалла. При Д. р. л. в мозаичном кристалле имеет место явление вторичной экстинкции.

В случае кинематич. Д. р. л. кристаллов с нарушениями периодичности строения, а также в аморфных телах, стёклах и жидкостях интенсивность находят, усредняя (2) по всем возможным конфигурациям атомов в пространстве, вероятность реализации к-рых задаётся ф-цией корреляции  $w(r_{jk})$  [8, 9]:

$$\begin{aligned} \langle I_s / (I_0 \sigma_e P(\theta) |f(s)|^2) \rangle &= \\ &= N + N(N-1) \int_0^V \int_0^V \exp[i(s \cdot r_j - r_k)] \frac{dv_j}{V} \frac{dv_k}{V} - \\ &- N(N-1) \int_0^V \int_0^V w(r_{jk}) \exp[i(s \cdot r_j - r_k)] \frac{dv_j}{V} \frac{dv_k}{V}. \end{aligned}$$

Член  $\sim N$  описывает рассеяние излучения неупорядоченным скоплением, состоящим из  $N$  атомов. Второй член — квадрат модуля фурье-образа формы кристалла — описывает Фраунгофера дифракцию на рассеивателе в целом, к-рая приводит к очень слабому дифракц. размытию прошедшего пучка излучения на угол  $\Delta\theta \sim \lambda/D$  (где  $D$  — диаметр рассеивателя), заметному лишь при рассеянии на микроскопич. и субмикроскопич. объектах (напр., биол. молекулах, для к-рых  $D \geq 10^{-6}$  см и  $\Delta\theta \geq 10^{-3}$  рад), что используется для исследования их формы (см. *Малогоуголовое рассеяние*). Третий член определяется корреляцией в пространственном расположении атомов в рассеивателе и, следовательно, заключает в себе информацию о координатах атомов в элементарной ячейке кристалла (см. *Рентгеновский структурный анализ*). Этот механизм близок к *рассеянию света* на флуктуациях параметров среды. Нарушения периодичности строения кристаллов проявляются в уменьшении интенсивности осн. дифракц. максимумов по сравнению с их интенсивностью для идеального кристалла и появлению дополнит. фона, плавно зависящего от угла рассеяния (см. *Диффузное рассеяние рентгеновских лучей*). Исследование диффузного рассеяния позволяет установить характер искажений структуры кристалла [7].

Для некристаллич. объектов ф-ция  $w(r_{jk})$  обычно изотропна, поэтому дифрагированная интенсивность