

комбинационное) света, оптич. активность, эффект Керра и т. д. Изучение П. и её теория тесно связаны с исследованием межмолекулярных взаимодействий, структуры молекул, особенно таких сложных, как полимеры, в частности белки.

В сильных электр. полях зависимость  $p(E)$  становится нелинейной (см. *Нелинейные восприимчивости*).

А. А. Гусев.

**ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ РЕНТГЕНОВСКАЯ** — способность вещества поляризоваться под действием внеш. поля рентг. эл.-магн. волны; количественно равна коэф. пропорциональности  $\chi$  между поляризацией  $P$  единицы объёма вещества и единицей напряжённости внеш. электр. поля  $E$ . Свойства П. р. существенно отличаются от поляризуемости атомов, ионов и молекул в поле оптич. диапазона, где при переходе к описанию диэлектрич. свойств вещества вводится понятие диэлектрич. восприимчивости. В рентг. диапазоне длин волн значения этих величин практически совпадают, поэтому обычно ограничиваются введением лишь понятия П. р.

Специфич. особенности П. р. обусловлены 4 причинами: длина волны  $\lambda$  излучения, радиус атома  $r_a$  и параметр решётки кристалла  $a$  связаны соотношением  $\lambda < r_a \lesssim a$ ; частота излучения  $\omega$  обычно того же порядка, что и частота атомного  $K$ - или  $L$ -уровня (для элементов с ат. номером  $Z \gtrsim 25$ ); все уровни энергии атома, лежащие выше  $K$ - и  $L$ -оболочек, заняты, и переходы на них невозможны; внутр. электронные оболочки атомов, с  $k$ -рыми наиб. сильно взаимодействуют рентг. излучение, целиком заполнены, сферически симметричны и имеют высокие значения энергий связи. Хим. связь или внеш. воздействия оказывают на внутр. электронные оболочки слабое влияние, поэтому можно считать, что они незначительно отличаются от таких же оболочек свободных атомов.

В рентг. диапазоне введение ср. П. р. теряет смысл. Обычно проводимое усреднение диэлектрич. свойств вещества в объёме с линейными размерами  $l \ll \lambda$  невозможно по двум причинам: вследствие малой плотности содержащихся в таком объёме зарядов, а также характерного масштаба локальных изменений электронной плотности,  $k$ -рый порядка или больше  $\lambda$ . Поэтому поляризацию единицы объёма среды  $P(r)$  вычисляют в каждой точке пространства с радиусом-вектором  $r$ , проводя лишь квантовомеханич. усреднение по электронным состояниям. В этом случае в линейном по полю приближении связь между векторами поляризации среды и напряжённостью поля имеет вид

$$P(r) = \hat{\chi}(r)E(r), \quad (1)$$

где П. р.  $\hat{\chi}(r)$  — тензорная величина и является  $\phi$ -цией координат:

$$\chi(r) = -r_0 \lambda^2 \hat{\rho}(r),$$

где  $r_0 = e^2/(mc^2)$  — классич. радиус электрона,  $\hat{\rho}(r)$  — электронная плотность,  $\lambda = \lambda/(2\pi)$ .

Наиб. ярко особенности П. р. проявляются для кристаллов, где материальный тензор  $\hat{\chi}(r)$  из-за трёхмерной периодичности кристаллич. решётки также является трёхмерно-периодической  $\phi$ -цией координат:  $\hat{\chi}(k + R) = \hat{\chi}(r)$ , где  $R$  — любой вектор трансляции кристаллич. решётки. При рассмотрении отклика среды на возмущение в виде плоской монохроматич. волны необходимо в (1) перейти к фурье-компонентам. Ввиду пространств. периодичности тензора П. р.  $\hat{\chi}(r)$  фурье-образ (1) имеет вид

$$P_i(k, \omega) = \sum_H \chi_{ij}^H(k, \omega) E_j(k + H, \omega), \quad (2)$$

где  $H$  — векторы *обратной решётки* кристалла. Сумма в правой части  $\phi$ -лы (2) означает, что в плоскую волну поляризации среды с амплитудой  $P_i(k, \omega)$  и волновым вектором  $k$  дают вклад все поля  $E_j(k + H, \omega)$ ,  $k$ -рые распространяются в направлениях  $k' = k + H$ , от-

личающихся от  $k$  на произвольный вектор  $H$  (см. *Брэгга — Вульфа условие*), т. е. имеет место нелокальное взаимодействие полей в пространстве волновых векторов. Диэлектрич. свойства кристалла, следовательно, характеризуются набором П. р.  $\chi_{ij}^H(k, \omega)$ , отвечающих возможным направлениям распространения дифракц. волн в кристалле. В  $\phi$ -ле (2) формально присутствует суммирование по всей бесконечной совокупности векторов обратной решётки  $H$ . Реально в кристалле могут распространяться одновременно лишь неск. полей  $E(k, \omega)$ , для  $k$ -рых удовлетворяются условия дифракции. Отыскание волновых векторов  $k'$  и амплитуд  $E(k', \omega)$  является задачей теории *дифракции рентгеновских лучей*.

В первом приближении теории возмущений П. р.  $\chi_{ij}^H$  многоатомного кристалла пропорциональна теплору *структурного фактора*  $F_{ij}(k, k'; \omega)$ :

$$\chi_{ij}^H = - \frac{Ne^2}{V m \omega^2} F_{ij}(k, k'; \omega) \delta_{k' - k, H}, \quad (3)$$

где *Кroneкера символ*  $\delta_{k' - k, H}$  указывает на отличие П. р. от нуля только в дифракц. направлениях  $k' = k + H$ ;  $m$  — масса атома. Согласно (3), П. р. отрицательна и по абс. величине составляет  $\sim 10^{-6}$ . Для одноатомных кристаллов тензор структурного фактора в (3) заменяется на тензор атомного фактора  $f_{ij}(k, k'; \omega)$ , в  $k$ -рый аддитивно входят разл. вклады: потенциальный  $f(k - k')$ , очень слабо зависящий от частоты  $\omega$  и дающий осн. вклад в П. р.; резонансный  $\Delta f_{ij}(k, k'; \omega) = \Delta f'_{ij}(k, k'; \omega) + \Delta f''_{ij}(k, k'; \omega)$ , заметный только на частотах, близких к характеристическим; неупругий  $\Delta f'''_{ij}(k, k'; \omega)$ ,  $k$ -рый в свою очередь складывается из теплодиффузного, комптоновского и рамановского (последний вклад имеет дисперсионную зависимость от частоты и не превышает неск. процентов).

Зависимость тензора П. р. от векторов  $k$  и  $H$  — следствие пространственной дисперсии, параметр  $k$ -рой  $a/\lambda \sim r_a/\lambda \geq 1$  чрезвычайно велик (в оптич. диапазоне  $a/\lambda \lesssim 10^{-3}$ ). Пространственная дисперсия вызывается двумя причинами: трёхмерно-периодич. расположением атомов в решётке, что ведёт к резкому пространственному перераспределению рассеянной интенсивности — дифракции; на неё накладываются монотонная и плавная зависимости П. р. от угла рассеяния, обусловленные внутр. строением атомов и тепловыми колебаниями атомов кристалла. Количественно влияние темп-ры на П. р. учитывается введением *Дебая — Уоллера фактора*.

Т. к. внутр. электронные оболочки, наиб. сильно взаимодействующие с рентг. излучением, целиком заполнены, сферически симметричны и их электроны имеют высокие значения энергии связи, в рентг. диапазоне заметных эффектов *оптической активности* и *анизотропии* нет, поэтому электронную часть П. р. обычно можно считать скаляром. Однако деформации электронных оболочек, вызванные хим. связью и анизотропией тепловых колебаний атомов, благодаря дифракции можно наблюдать. Деформация внутр. сферич. электронных оболочек ведёт к понижению симметрии кристалла и, как следствие, к появлению в дифракц. картине новых («запрещённых») дифракц. отражений с малой интенсивностью, появляющихся под иными, нежели разрешённые, углами.

Т. к., согласно (3),  $\chi_{ij}^H(k, \omega) \sim 1/m$ , ядра из-за большой массы нуклонов дают по сравнению с электронами пренебрежимо малый вклад в П. р. Однако если кристалл содержит изотопы с низколежащими ядерными резонансами (см. *Мессбауэра эффект*), то соответствующее резонансное рентг. излучение взаимодействует не только с электронами, но и с ядрами. Резонансное взаимодействие такого излучения с ядрами весьма интенсивно, так что вклад ядерной подсистемы в П. р. может на порядок превышать вклад от электронов и