

## КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ 6. РАССЕЯНИЕ НА $F$ -ЦЕНТРАХ

Quantum Theory of X-Ray Scattering. 6. Scattering by  $F$ -Centers

Ф. А. Бабушкин

Коми Государственный педагогический институт, кафедра физики,  
г. Сыктывкар\*

(Поступила в редакцию 20 сентября 1971 г.)

Дается квантовая теория рассеяния рентгеновских лучей на  $F$ -центрах в щелочно-галогидных кристаллах. Начальное состояние электрона в вакантном узле ( $F$ -центре) аппроксимируется волновой функцией  $s$ -типа с вариационным параметром, конечное состояние электрона в зоне проводимости — блоховской орбиталью. Полученное выражение для дифференциального сечения рассеяния состоит из двух слагаемых, одно из которых сходно с сечением комбинационного рассеяния, второе слагаемое специфично для данного вида рассеяния.

Работа стимулирована сообщением Александропулоса об экспериментальном обнаружении данного рассеяния.

A quantum-theoretical description of X-ray scattering by  $F$ -centers in alkali halide crystals is given. The initial state of an electron in a vacancy ( $F$ -center) is approximated by an  $s$ -type wave function with a variable parameter, whereas the final electron state in the conduction band by a Bloch orbital. The expression obtained for the differential scattering cross-section consists of two components, one of which corresponds to the combination scattering cross-section, while the other is specific for the type of scattering under study.

This work was stimulated by the detection of this kind of scattering, as reported by N. G. Alexandropoulos.

В работе Александропулоса [1] при экспериментальном изучении рассеяния рентгеновских лучей в щелочно-галогидном кристалле LiF была получена новая линия с длинноволновой стороны спектра рассеяния. Энергия, соответствующая этой линии, отличается на 5 эВ от энергии падающих рентгеновских квантов.

---

\* Адрес: Коми Государственный педагогический институт, кафедра физики, г. Сыктывкар, U.S.S.R.

Причиной возникновения новой линии в спектре рассеяния, по мнению Александропулоса, является неупругое рассеяние рентгеновских лучей на  $F$ -центрах в LiF, соответствующее переходу электрона из основного состояния  $F$ -центра в зону проводимости.

В данной работе дается квантовая теория неупругого рассеяния рентгеновских лучей на  $F$ -центрах щелочно-галогидных кристаллов.

Двойное дифференциальное сечение рассеяния рентгеновских лучей дается хорошо известным выражением:

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_f \cdot d\Omega} = \sigma_0 \cdot \frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_i} \cdot \sum_{f,i} \varrho_i \left| \langle n'_{q,s}, \varphi' | \sum_{\alpha} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{\alpha}} | n_{q,s}, \varphi \rangle \right|^2 \cdot \delta(E_f - E_i). \quad (1)$$

При рассмотрении рассеяния на  $F$ -центрах суммирование  $\sum_{\alpha}$  должно проводиться по всем  $F$ -центрам в кристалле, т.е. по всем электронам, захваченным в вакантные узлы кристаллической решетки. По данным Александропулоса в их экспериментах число  $F$ -центров достигало величины  $10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$ .

Решетку LiF можно рассматривать как примитивную ромбоэдрическую и положение электрона  $\vec{r}_{\alpha}$  в вакантном узле ( $F$ -центре) определяется следующим образом

$$\vec{r}_{\alpha} = \vec{n}_{\alpha} + \delta\vec{n}_{\alpha} + \vec{r} \quad (2)$$

$\vec{n}_{\alpha}$  — вектор решетки, индекс  $\alpha$  соответствует вакансии,

$\delta\vec{n}_{\alpha}$  — тепловое смещение,

$\vec{r}$  — положение электрона относительно вакантного узла решетки.

Матричный элемент, соответствующий рассматриваемому рассеянию имеет вид (мы принимаем, что  $n'_{q,s} = n_{q,s}$ , т.е. процесс рассеяния идет без изменения числа фононов)

$$\begin{aligned} & \langle n'_{q,s}, \varphi' | \sum_{\alpha} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{\alpha}} | n_{q,s}, \varphi \rangle = \\ & = \sum_{\alpha} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}_{\alpha}} \cdot \langle n_{q,s} | e^{i\vec{k}\cdot\delta\vec{n}_{\alpha}} | n_{q,s} \rangle \cdot \langle \varphi' | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \varphi \rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

В качестве волновой функции начального состояния электрона можно взять  $s$ -подобную волновую функцию основного состояния  $F$ -центра [2,3]

$$|\varphi\rangle = \frac{\kappa^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\kappa\cdot r} \quad (4)$$

значение вариационного параметра  $\kappa$  для  $F$ -центра LiF можно найти в вышеуказанных работах.

Волновую функцию конечного состояния электрона в зоне проводимости выберем в виде плоской волны с учетом периодичности

$$\langle \varphi' | = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}_{\alpha}} \cdot \frac{1}{\sqrt{V}} \cdot e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (5)$$

Используя волновые функции (4) и (5), можно легко вычислить последний интеграл в выражении (3)

$$\langle \varphi' | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \varphi \rangle = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{n}_z} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{V}} \cdot \frac{8\kappa^{5/2}}{[\kappa^2 + (\vec{K} - \vec{k})^2]^2}. \quad (6)$$

Двойное дифференциальное сечение рассеяния в данном приближении принимает вид:

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_f \cdot d\Omega} = \sigma_0 \cdot \frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_i} \cdot e^{-2w} \cdot \frac{64\pi\kappa^5}{V} \cdot \sum_f \left| \sum_{\alpha} e^{i(\vec{K} - \vec{k})\cdot\vec{n}_{\alpha}} \right|^2 \cdot \frac{\delta(E_f - E_i)}{[\kappa^2 + (\vec{K} - \vec{k})^2]^4}. \quad (7)$$

Сумма по конечным состояниям  $\sum_f$  означает суммирование по всем значениям квазиимпульса  $\vec{k}$ , выбитого в зону проводимости электрона. Для проведения суммирования прежде всего необходимо вычислить „структурный фактор“  $F$ -центров в щелочно-галогидных кристаллах

$$\left| \sum_{\alpha} e^{i(\vec{K} - \vec{k})\cdot\vec{n}_{\alpha}} \right|^2. \quad (8)$$

В „структурном факторе“ (8) суммирование должно проводиться по вакантным узлам, распределенным случайным образом по кристаллической решетке.

Известно, что для идеальной решетки обычный структурный фактор, когда суммирование проводится по всем узлам решетки, отличен от нуля только в узлах обратной решетки и при условии, что  $\vec{K} - \vec{k} = \vec{\tau}$ , где  $\vec{\tau}$  — вектор обратной решетки. При наличии вакансии в узлах кристаллической решетки вышеуказанное условие сохраняется, но кроме того, структурный фактор может быть отличен от нуля и в тех точках обратной решетки, для которых  $\vec{K} - \vec{k} \neq \vec{\tau}$ .

В случае  $\vec{K} - \vec{k} = \vec{\tau}$  „структурный фактор“ (8) вычисляется тривиально

$$\left| \sum_{\alpha} e^{i(\vec{K} - \vec{k})\cdot\vec{n}_{\alpha}} \right|^2 = N_F^2 \quad (9)$$

где  $N_F$  — число  $F$ -центров в кристалле.

Для вычисления (8) при условии, что  $\vec{K} - \vec{k} \neq \vec{\tau}$ , можно воспользоваться готовыми результатами вычисления структурного фактора для ионов замещения бинарного сплава в случае растворов замещения, когда ионы обоих видов находятся в узлах идеальной решетки [4]. Постановка задачи по вычислению структурного фактора и ее решение в этом случае полностью аналогично нашему рассматриваемому случаю.

Структурный фактор для ионов замещения в случае конечной концентрации их ( $a$  в нашем случае он будет соответствовать „структурному фактору“  $F$ -центров) дается выражением:

$$\left| \sum_{\alpha} e^{i\vec{q}\cdot\vec{n}_{\alpha}} \right|^2 = N_F + N_F^2 \cdot \left\{ \frac{1}{N} \sum_j e^{i\vec{q}\cdot\vec{n}_j} \right|^2 - \frac{1}{N} \right\} \quad (10)$$

здесь  $N$  — полное число узлов кристаллической решетки, суммирование по  $j$  проводится по всем узлам кристаллической решетки. Из (10) для случая  $\vec{K}-\vec{k} \neq \vec{\tau}$  получаем

$$\left| \sum_{\alpha} e^{i(\vec{K}-\vec{k}) \cdot \vec{r}_{\alpha}} \right|^2 = N \left( \frac{N_F}{N} - \frac{N_F^2}{N^2} \right) = N \cdot c(1-c) \quad (11)$$

где  $c$  — концентрация  $F$ -центров.

Таким образом, двойное дифференциальное сечение рассеяния рентгеновских лучей на  $F$ -центрах представляется в виде двух слагаемых

$$\frac{d^2\sigma}{d\varepsilon_f \cdot d\Omega} = \sigma_0 \cdot \frac{\varepsilon_f}{\varepsilon_i} \cdot e^{-2w} \cdot \frac{64\pi\kappa^5}{V} \cdot \left\{ \frac{2 \cdot N_F^2}{[\kappa^2 + \tau^2]^4} + \right. \\ \left. + N \cdot c(1-c) \int d\vec{k} \cdot 2 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{[\kappa^2 + (\vec{K}-\vec{k})^2]^4} \right\} \cdot \delta(E_f - E_i) \quad (12)$$

первое из которых соответствует случаю  $\vec{K}-\vec{k} = \vec{\tau}$  (в сумме по всем  $\vec{k}$  остались члены с  $\vec{k} = \vec{K}-\vec{\tau}$ ), второе — случаю  $\vec{K}-\vec{k} \neq \vec{\tau}$ .

Интеграл во втором слагаемом вычисляется элементарно, но получается довольно громоздкое выражение и по этой причине в данной работе не приводится. Если по условиям эксперимента знание этого слагаемого будет необходимым, то его всегда можно будет легко вычислить.

Первое слагаемое в (12) имеет такой же вид и сходную угловую зависимость, как и в случае комбинационного рассеяния на  $K$ -электронах [5]. Различие только в численных множителях.

Второе слагаемое в (12) специфично только для данного вида рассеяния. Ни в случае Комpton-рассеяния, ни в случае Раман-рассеяния подобного слагаемого в сечении рассеяния нет.

К сожалению, из-за скудности экспериментальных данных пока нет возможности провести детальное сравнение экспериментальных данных с предлагаемой теорией, можно надеяться, что в самое ближайшее время это удастся сделать.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] N. G. Alexandropoulos, *Phys. Rev.*, **V1**, 4115 (1970).
- [2] С. И. Пекар, *Исследования по электронной теории кристаллов*, ГИТТЛ, Москва 1951.
- [3] B. S. Gourary, F. J. Adrian, *Phys. Rev.*, **105**, 1180 (1957).
- [4] У. Харрисон, *Псевдопотенциалы в теории металлов*, Мир, Москва 1968;  
W. A. Harrison, *Pseudopotentials in the Theory of Metals*, Benjamin, New York—Amsterdam 1966.
- [5] Ф. А. Бабушкин, *Изв. ВУЗ ов, физика*, **9**, 32 (1971).