

На правах рукописи

Колчинская Анастасия Михайловна

Резонансная дифракция рентгеновского излучения в монокристаллах железо-иттриевого граната и оксида цинка

Специальность 01.04.07. – физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Москва, 2008

Работа выполнена на физическом факультете Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

Научный руководитель: доктор физико-математических наук Овчинникова Е.Н.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Беляков В.А.
доктор физико-математических наук, Ломов А.А.

Ведущая организация: Российский научный центр «Курчатовский институт»

Защита состоится 28 мая 2008 г. в ____ на заседании диссертационного совета Д 501.002.01 в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова по адресу: 119991, г. Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, физический факультет, ауд. _____.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан 28 апреля 2008 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 501.002.01

Лаптинская Т.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

Изучение атомно-кристаллической структуры и ее искажений, магнитной структуры и электронных состояний являются важнейшими задачами физики твердого тела, поскольку эти характеристики определяют основные физические свойства материалов. Резонансная дифракция рентгеновского излучения является интенсивно развивающимся методом изучения свойств конденсированных сред. Она позволяет исследовать как структуру кристаллов, так и тонкие детали магнитного, зарядового и орбитального упорядочения [1, 2]. Этот метод реализуется при энергиях падающего излучения, близких к краям поглощения атомов в веществе, и позволяет исследовать широкий класс веществ, содержащих химические элементы, которые обладают краем поглощения в интервале 1-20 КэВ. Практическая реализация данного метода стала возможной в последние десятилетия благодаря созданию синхротронов третьего поколения, сочетающих большую яркость и высокую степень поляризации излучения (синхротрон *ESRF* в Гренобле, Франция, обеспечивает яркость $\sim 10^{21}$ фотон/сек./мм²/стерад., что на 13 порядков превышает яркость рентгеновской трубки с вращающимся анодом). Большая яркость синхротронных источников дает возможность проводить измерения достаточно слабых эффектов за разумное время эксперимента, а высокая степень поляризации синхротронного излучения позволяет выполнять поляризационные измерения в рассеянном излучении, что очень важно для изучения анизотропных свойств среды.

Актуальность изучения резонансной дифракции рентгеновского излучения обусловлена также тем, что этот метод дает информацию не только о пространственном распределении электронной и спиновой плотности (дальний порядок), но и о локальном окружении резонансного

рассеивателя (ближний порядок). Вблизи краев поглощения (область *XANES*) спектры рентгеновского поглощения имеют тонкую структуру, определяемую дискретными состояниями валентных электронов. Однако они содержат вклады сразу от многих процессов, в том числе и нерезонансных.

Более информативными являются энергетические спектры, измеренные в геометрии дифракции, поскольку существуют рефлексы, вклады в которые в отдельных частях спектра дают только определенные резонансные переходы («запрещенные» или чисто резонансные рефлексы). Будучи связанными с анизотропией структурной амплитуды, «запрещенные» рефлексы обладают необычными поляризационными свойствами. Их интенсивность и поляризационные свойства могут сильно изменяться при повороте вокруг вектора обратной решетки, т.е. обладать выраженной азимутальной зависимостью. В идеальных кристаллах набор «запрещенных» рефлексов и тензорный вид их структурных амплитуд может быть определен из общих симметричных ограничений на вид тензора рентгеновской восприимчивости.

В ряде случаев анизотропия резонансного рассеяния может быть вызвана другими причинами, нарушающими пространственную симметрию кристалла, такими как тепловые колебания, точечные дефекты или несоразмерная модуляция. Они вызывают дополнительное нарушение симметрии локального окружения резонансных атомов, приводят к появлению анизотропии и, как следствие, к возникновению дополнительных отражений.

Большой интерес представляет теоретическое и экспериментальное исследование явлений, обусловленных резонансными переходами высших порядков, например, квадруполь-квадрупольным и смешанным диполь-квадрупольным переходами. Эти переходы могут вызывать появление «запрещенных» рефлексов даже в тех случаях, когда рефлексы строго

запрещены в дипольном приближении, а также порождают гиротропные свойства среды в рентгеновском диапазоне частот, в частности оптическую активность и круговой дихроизм вблизи края поглощения.

Феноменологическое рассмотрение свойств резонансной дифракции рентгеновского излучения, основанное на симметричных свойствах системы, часто является наиболее простым или единственно возможным путем изучения явлений в области *XANES*, однако для количественной интерпретации экспериментальных спектров требуется численное моделирование процесса резонансного рассеяния.

В настоящей работе рассматриваются возможные причины появления чисто резонансных рефлексов при дифракции СИ в оксиде цинка, которые могут объяснить наблюдаемые в эксперименте особенности, а также развиваются подходы, позволяющие провести численное моделирование уже измеренного спектра. Также рассматривается набор запрещенных рефлексов в железо-иттриевом гранате, которые интересны тем, что каждый из них соответствует отдельной подрешетке железа, т.е. позволяет исследовать эти подрешетки по отдельности

Цель работы:

Основной целью данной работы являлось развитие новых теоретических подходов к описанию возникновения и поведения «запрещенных» отражений в монокристаллах железо-иттриевого граната и оксида цинка.

1) Исследование особенностей резонансной дифракции синхротронного излучения в системе с двумя кристаллографически неэквивалентными позициями резонансных атомов. Изучение возможности разделения вкладов от разных позиций с помощью наблюдения чисто резонансных отражений.

2) Изучение влияния тепловых колебаний и дефектов, индуцирующих дополнительную локальную анизотропию тензора атомного фактора на резонансную дифракцию синхротронного излучения.

3) Развитие методов численного моделирования, позволяющих рассчитывать вклады в резонансный атомный фактор, обусловленные тепловыми колебаниями и дефектами.

4) Количественная интерпретация на основе развитых подходов спектра экспериментально измеренного на синхротроне *ESRF* спектра чисто резонансного отражения 115 для различных температур.

Научная новизна работы.

1. Предсказано появление чисто резонансных отражений, которые должны возникать при резонансной дифракции рентгеновского излучения в монокристалле железо-иттриевого граната, в которых возможно наблюдать вклады от каждой из двух кристаллографически неэквивалентных подрешеток железа.

2. Предложены несколько способов численного расчета спектров чисто резонансных отражений, которые содержат вклады от тепловых колебаний атомов и дефектов. Они основаны как на полуфеноменологическом подходе, в котором проводится квантовомеханический расчет коэффициентов, входящих в соответствующие теоретические выражения, так и на моделировании мгновенных атомных конфигураций.

3. Показано, что энергетические спектры чисто резонансных отражений являются результатом сложной интерференции излучения, рассеянного через разные электронные уровни, в том числе искаженные за счет тепловых колебаний и дефектов.

Научная и практическая значимость работы.

1. Полученные в диссертации результаты дают возможность развития теоретических и экспериментальных методов электронных свойств кристаллов на основе резонансной дифракции синхротронного излучения.

2. Разработан метод исследования электронных свойств двух неэквивалентных подрешеток в ферритах на основе изучения различных чисто резонансных отражений;

3. Предложенный метод изучения изменения электронных валентных состояний под действием тепловых колебаний, а также точечных дефектов с малой концентрацией;

4. Результаты исследований, вошедших в диссертацию, могут быть использованы в работе станций синхротронного излучения, позволяющих вести работы по резонансной дифракции мессбауэровского и рентгеновского излучения в кристаллах.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Результаты теоретического исследования резонансной дифракции рентгеновского излучения в железо-иттриевом гранате, позволяющего наблюдать чисто резонансные отражения, создаваемые атомами двух кристаллографически неэквивалентных подрешеток по отдельности.

2. Вывод о возможности наблюдения при длинах волн, близких к краям поглощения, чисто резонансных рефлексов, индуцированных тепловыми колебаниями атомов и статистически распределенными точечными дефектами с малой концентрацией и теоретические выражения, описывающие соответствующие вклады в оксиде цинка.

3. Методы количественного расчета резонансных вкладов в запрещенные отражения, обусловленных тепловыми колебаниями и дефектами, том числе: 1) метод, основанный на квантовомеханическом

расчете коэффициентов, входящих в феноменологические формулы; 2) метод, основанный на компьютерном моделировании мгновенных атомных конфигураций с помощью программ молекулярной динамики и расчетов *ab initio*.

Апробация работы.

По теме диссертации были сделаны доклады на следующих конференциях: International Workshop on Resonant X-Ray Scattering in Electrically-Ordered System (2004 г., Grenoble, France); Международное рабочее совещание «Рентгеновская оптика – 2004» (2004 г., Нижний Новгород, Россия); XV Российская конференция по использованию синхротронного излучения (2004 г., Новосибирск); XII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов – 2005» (2005 г., МГУ Москва, Россия); V Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов «РСНЭ-2007» (2007 г., Москва, Россия); VI Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов «РСНЭ-2007» (2007 г., Москва, Россия); Международная конференция «Электронная микроскопия и многомасштабное моделирование материалов» «ЕМММ-2007» (2007 г., Москва, Россия); Конференция по физике конденсированного состояния, сверхпроводимости и материаловедению (2007 г., Москва, Россия).

Публикации: основные результаты работы опубликованы в 12 печатных работах: 3 статьях и 9 тезисах докладов на международных и всероссийских конференциях, список которых приводится в конце автореферата.

Структура и объем работы.

Диссертационная работа изложена на 124 страницах машинописного текста, включая 66 рисунков и 2 таблицы, и состоит из введения, трех глав, выводов, списка литературы из 95 наименований. Работа выполнена на кафедре физики твердого тела физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулирована цель работы и изложены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава является литературным обзором. В ней дан обзор теоретических и экспериментальных работ, посвященных исследованию «запрещенных» рефлексов, наблюдаемых в различных монокристаллах. Описана схема эксперимента, необходимого для наблюдения этого типа рефлексов. Показаны возможные причины их возникновения: вклады в тензорный атомный фактор, возникающий от высших порядков, а также термоиндуцированный вклад и вклад от точечных дефектов.

Приведены различные методы расчета энергетических спектров поглощения и рассеяния рентгеновского излучения, используемые в дальнейшей работе для обработки энергетических спектров «запрещенных» рефлексов. Описаны программы, при помощи которых в данной работе проводилось численное моделирование спектров и сопоставление их с экспериментальными данными.

Вторая глава диссертации посвящена «запрещенным» чисто резонансным отражениям в монокристалле железо-иттриевого граната (ЖИГ), проводится моделирование резонансных спектров поглощения и дифракции синхротронного излучения.

В первом параграфе второй главы описывается кристаллическая структура ЖИГ. Она такова, что атомы железа занимают в нем две кристаллографически неэквивалентные позиции 16(a) и 24(c), каждая из которых дает свой вклад в «запрещенные» рефлексy. Это дает возможность исследовать спектры чисто резонансных рефлексов от каждой позиции отдельно.

Во втором параграфе второй главы приводятся результаты численного моделирования энергетических спектров поглощения железа и иттрия (рис. 1). Эксперимент проведен на Курчатовском источнике синхротронного излучения группой Артемьева.

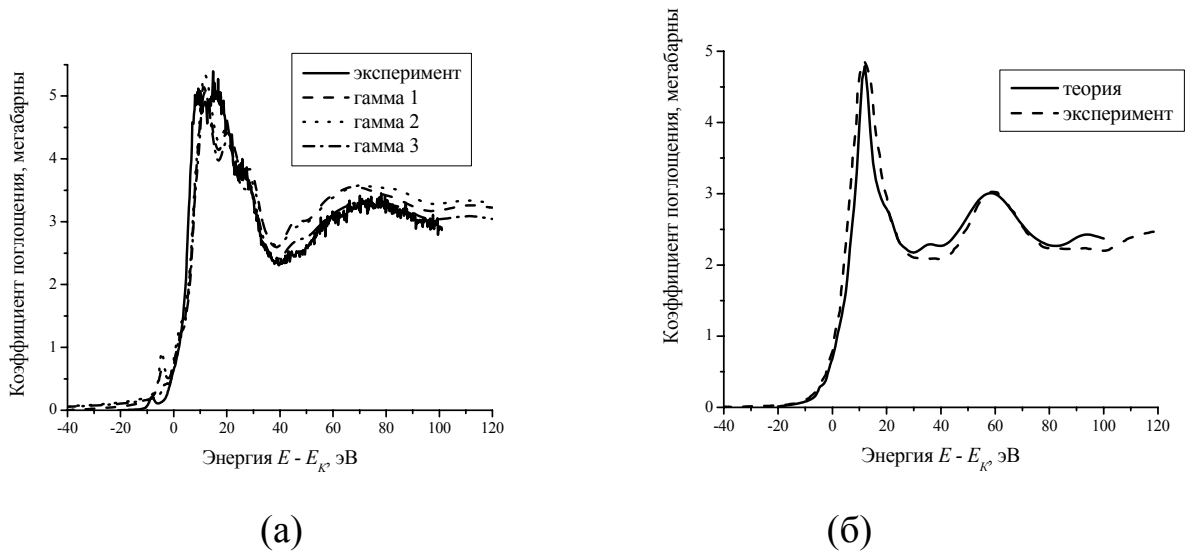


Рис. 1. Сопоставление результатов моделирования ближней тонкой структуры К-края поглощения железа (а) и иттрия (б) с экспериментальными данными.

Поскольку кристаллическая структура ЖИГ описывается несимметричной пространственной группой, возможно появление «запрещенных» чисто резонансных отражений вблизи краев поглощения железа и иттрия. В третьем параграфе приведены полученные феноменологические выражения тензорных структурных факторов двух рефлексов 110 и 600 в диполь-дипольном приближении, вклад в которые

дают различные позиции Fe и Y, а также приводятся выражения для интенсивности этих рефлексов.

Кристаллографическая позиция	Приближение	110	600
24(<i>d</i>)	<i>dd</i>	-	+
	<i>dq</i>	+	+
	<i>qq</i>	+	+
16(<i>a</i>)	<i>dd</i>	+	-
	<i>dq</i>	-	-
	<i>qq</i>	+	-

Табл. 1. Наличие чисто резонансных отражений 110 и 600 в диполь-дипольном, диполь-квадрупольном и квадруполь-квадрупольном приближениях для различных

кристаллографических позиций Fe.

Рассмотрены вклады в «запрещенные» рефлексy, обусловленные вкладом высших порядков – диполь-квадрупольным и квадруполь-квадрупольным. Результаты приведены в табл. 1. Показано, что в чисто резонансное отражение 600 дает вклад только кристаллографическая позиция железа 24(*d*), а в отражение 110 дают вклад обе позиции Fe. Отсутствие диполь-дипольного (*dd*), диполь-квадрупольного (*dq*) и квадруполь-квадрупольного (*qq*) вкладов от позиции 16(*a*) в рефлекс 600 обусловлен тем, что симметрия этой позиции содержит центр инверсии.

В четвертом параграфе приводятся результаты численного моделирования энергетической и азимутальной структуры «запрещенных» чисто резонансных отражений 110 и 600 в ЖИГ (Рис. 2). Моделирование, как и для спектров поглощения, проводилось при помощи программы *FDMNES*. Приводятся результаты численного моделирования спектров резонансного отражения 110 и 600 с учетом диполь-дипольного вклада и вкладов высших порядков для различных позиций и результаты моделирования азимутальной зависимости (зависимость интенсивности отражения от угла поворота вокруг нормали к поверхности кристалла).

Данные, полученные из квантово-механических расчетов, находятся в согласии с данными, полученными при помощи феноменологического подхода.

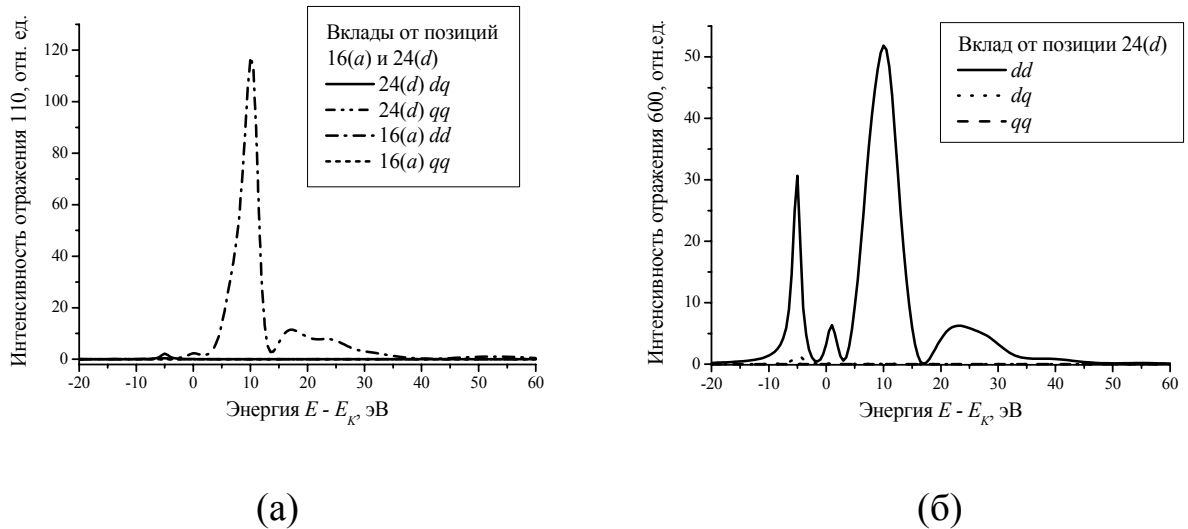


Рис. 2. Вклад в чисто резонансные рефлексy 110 (а) и 600 (б) высших порядков для позиций 16(*a*) и 24(*d*) вблизи *K*-края поглощения железа.

Третья глава посвящена изучению чисто резонансных «запрещенных» отражений в монокристалле оксида цинка ZnO. В этом монокристалле «запрещенные» чисто резонансные отражения не возникают в диполь-дипольном приближении. Однако на Европейском источнике синхротронного излучения (*ESRF*) группой Коллинза получены экспериментальные спектры поглощения и резонансного рассеяния чисто резонансного рефлекса 115, обладающего аномальной температурной зависимостью [3]. В данной главе приводятся различные модели, описывающие возможные причины появления «запрещенных» отражений в ZnO, и результаты численного моделирования, проведенного в приближении этих моделей.

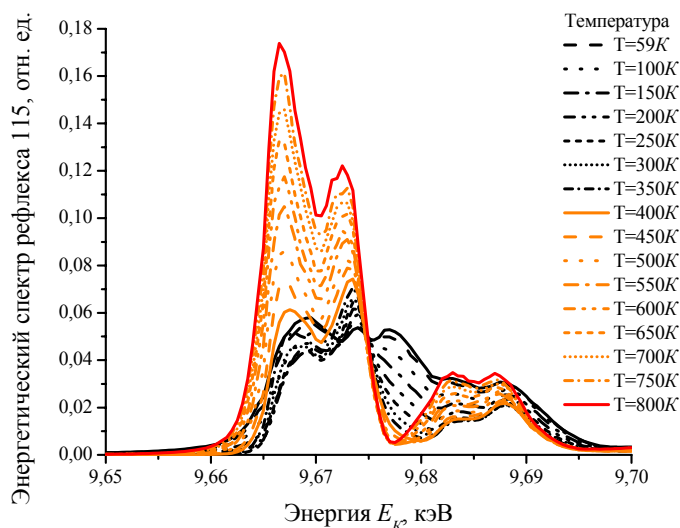


Рис. 3. Энергетические спектры рефлекса 115 в ZnO для различных температур (умноженные на коэффициент поглощения).

В первом параграфе приводится описание кристаллической структуры оксида цинка. Он имеет структуру вюрцита и пространственную группу $P6_3mc$.

Во втором параграфе описывается эксперимент, проведенный группой Коллинза на *ESRF* (рис. 2) [3], а также приводится предложенная им модель возникновения «запрещенных» чисто резонансных рефлексов в ZnO. Согласно этой модели, учитывается температурно-независимый диполь-квадрупольный вклад и температурно-зависимый вклад, индуцированный тепловыми колебаниями атомов.

В третьем параграфе приводятся полученные феноменологические выражения, описывающие различные вклады в «запрещенные» чисто резонансные рефлексы в ZnO. Температурно-независимый вклад возникает благодаря вкладу высшего порядка – диполь-квадрупольному. Термоиндуцированный вклад обусловлен тепловыми колебаниями атомов и дефектами. В работе рассматривается только вклад от точечных дефектов, а именно – от вакансий кислорода, так как атомы кислорода являются ближайшим окружением для атомов цинка.

Рассматриваются различные модели возникновения «запрещенных» отражений. Первой рассматривается модель изотропных колебаний,

предложенная в работе [3]. В приближении этой модели считается, что «запрещенные» рефлексy возникают благодаря диполь-дипольному вкладу и вкладам высших порядком – диполь-квадрупольному и квадруполь-квадрупольному – которые возникают при изотропных колебаниях рассеивающего атома Zn. Получено феноменологическое выражение, использованное в дальнейшем для численной обработки спектров рассеяния в приближении этой модели.

Следующей моделью, рассмотренной в работе, является модель анизотропных колебаний. В приближении этой модели, помимо вкладов высших порядков возникает вклад от оптических мод колебаний E_1 , E_{2l} и E_{2h} , получено феноменологическое выражение (1):

$$\begin{aligned}
 F(hhl, l = 2n + 1) = & i[c_2^2 u_{o2}^2 \coth \frac{\hbar \omega_2}{2kT} (f_{yx}^{(0)} - k_2 f_{yx}^{(1)} - k_2 f_{yx}^{(2)}) + \\
 & + c_5^2 u_{o5}^2 \coth \frac{\hbar \omega_5}{2kT} (f_{yx}^{(0)} - k_5 f_{yx}^{(1)} + k_5 f_{yx}^{(2)}) + \\
 & + c_6^2 u_{o6}^2 \coth \frac{\hbar \omega_6}{2kT} (f_{yx}^{(0)} + k_6 f_{yx}^{(1)} - k_6 f_{yx}^{(2)}) + f_{yx}^{dq}] \begin{pmatrix} \sqrt{3}h & h & 0 \\ h & -\sqrt{3}h & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

где u_{0i} – амплитуды нулевых колебаний в каждой моде, атомы 1 и 2 принадлежат первой координационной сфере и той же элементарной ячейке, что и рассеивающий атом, k_i – отношение смещений атомов Zn и O в i -й моде колебаний, а нижние индексы соответствуют порядковому номеру моды в (моды E_1 соответствует индекс 2, E_{2l} – 5, E_{2h} – 6). Учитывается, что корреляторы для разных мод равны нулю, а для каждой моды: $\overline{u_i(p,0)u_j(p',0)} = \frac{1}{2}u_p^2$ и $\overline{u_i(p,n)u_j(p',0)} = \frac{k}{2}u_p^2$. Проводится численное моделирование спектров чисто резонансного рефлекса 115 в приближении данной модели. Показывается, что спектры являются результатом сложной

интерференции от различных вкладом: с ростом температуры растёт вклад от мод колебаний (причем наибольший вклад дает мода E_{2l}), а также от точечных дефектов, в то время как влияние диполь-квадрупольного вклада становится достаточно малым.

В третьей модели помимо вышеперечисленных вкладов учитывается также вклад от точечных дефектов на примере вакансий кислорода. С ростом температуры количество дефектов должно возрастать, что соответствует аномальной температурной зависимости «запрещенного» отражения. Наилучшее совпадение с экспериментом дает именно эта модель.

В четвертом параграфе при помощи программы *FDMNES* проводится численное моделирование спектров ближней тонкой структуры K -края поглощения цинка, результаты моделирования сопоставляются с экспериментальными данными. При этом подбираются параметры, используемые в дальнейшем для моделирования спектров рассеяния. Приводятся рассчитанные спектры азимутальной зависимости для ZnO.

В пятом параграфе проводится численное моделирование спектра «запрещенного» чисто резонансного отражения 115 в оксиде цинка при различных температурах в приближении описанных ранее моделей. Первой рассматривается модель изотропных колебаний. Однако результаты численного моделирования показывают, что достаточно хорошего совпадения с экспериментальными данными она не дает.

Второй рассматривается модель, учитывающая температурно-независимый (диполь-квадрупольный) и различные температурно-зависимые вклады. Проведено численное моделирование спектров чисто резонансного отражения 115 для температур от 30 K до 800 K (Рис. 4). Данная модель дает хорошее согласие с экспериментальными данными. Также приведены температурные зависимости коэффициентов,

характеризующих изменение интенсивности того или иного вклада с ростом температуры. Температурный рост термоиндуцированного вклада происходит медленнее, чем температурно-зависимый вклад, использованный в работе [3], который соответствует 5 моде колебаний. Реальные коэффициенты и коэффициенты, использованные при фиттировании, позволяют сделать заключение о том, что вплоть до температуры 300K расчеты адекватно описывают эксперимент с помощью только термоиндуцированного и диполь-квадрупольного вкладов. Начиная с 300K для хорошего согласия с экспериментальными данными необходимо учитывать вклад от дефектов. Получена зависимость этого вклада от температуры, которая может быть интерпретирована как возникновение однократно заряженной вакансии кислорода.

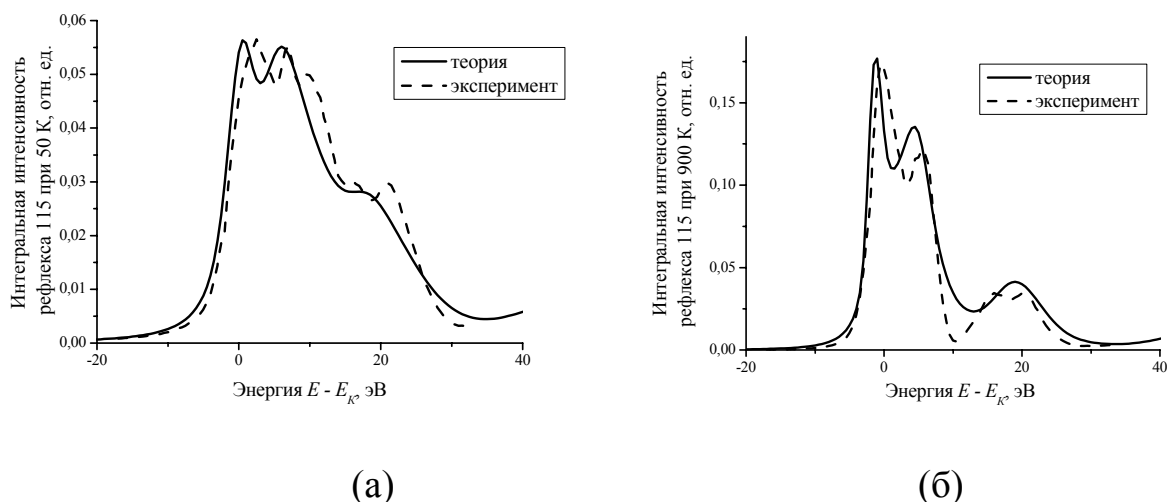


Рис. 4. Сравнение расчетного и экспериментального энергетических спектров отражения 115 при температуре 50K (а) и 800K (б).

Развит еще один подход к численному моделированию чисто резонансных рефлексов, состоящий в получении мгновенных атомных конфигураций при различных температурах с помощью первопринципных расчетов. Полученные мгновенные атомные конфигурации используются в дальнейшем для расчета амплитуды резонансного рассеяния. Каждый

атом полагается рассеивателем, а структурная амплитуда получается усреднением амплитуды рассеяния по значительному числу атомных конфигураций. В наших расчетах усреднение проведено по 48 конфигурациям. Приведены спектры «запрещенного» чисто резонансного отражения 115 для различных температур, полученных при помощи данного подхода. Такая модель также дает хорошее согласие с экспериментальными данными.

Полученные результаты показывают, что анизотропия тензорного атомного фактора, обусловленная тепловыми колебаниями и дефектами, достаточно велика, что необходимо учитывать при математической обработке спектров дифракционных рефлексов в разнообразных структурах, что обычно не делается.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Показано, что при резонансной дифракции рентгеновского излучения в ЖИГ могут возникать чисто резонансные отражения, обусловленные отдельными кристаллографически неэквивалентными позициями атомов железа. На основе симметричного рассмотрения предсказано появление при энергиях, близких к K -краю железа, рефлексов типа $(2n + 1, 2n' + 1, 0)$ и $(2n, 2n, 4n')$, обусловленных резонансным рассеянием атомами железа в подрешетке $16(a)$ и рефлексов типа $(4n + 2, 4n', 4n'')$, обусловленных резонансным рассеянием атомами железа в подрешетке $24(d)$. При энергиях, близких к краю поглощения иттрия, возможно появление чисто резонансных рефлексов типа $(4n + 2, 4n', 4n'')$. Проведено численное моделирование энергетической и азимутальной зависимости рефлексов 110 и 600, подтверждающее результаты симметричного анализа. Показано, что селективность метода относительно позиции атома может быть использована для определения распределения примесей по неэквивалентным позициям.

2. Получены феноменологические выражения, описывающие резонансные вклады в тензорный атомный фактор ZnO, обусловленные тепловыми колебаниями атомов и точечными дефектами. Эти вклады являются причиной появления чисто резонансных рефлексов и отражают изменение волновых функций валентных электронов резонансных атомов при наличии дефектов и тепловых смещений. Вклад в интенсивность термоиндуцированного вклада, в основном, дают колебания, соответствующие оптической фононной ветви. Показано, что оба резонансных вклада обладают аномальной температурной зависимостью, т.е. их интенсивность растет с температурой.

3. Разработаны два метода численных расчетов резонансных вкладов в тензор структурного фактора ZnO, обусловленных тепловыми колебаниями атомов, точечными дефектами и вкладами высших порядков. Первый состоит в использовании программ компьютерного моделирования для расчета коэффициентов, входящих в полученные ранее феноменологические выражения. Второй состоит в получении мгновенных атомных конфигураций при различных температурах с помощью программ, основанных на первопринципных расчетах, и использовании этих конфигураций для расчета резонансного вклада. Адекватность обоих методов продемонстрирована на примере обработки экспериментальных спектров чисто резонансного рефлекса в оксиде цинка в широком интервале температур.

4. На основе развитых методов проведено численное моделирование энергетического экспериментального спектра чисто резонансного отражения 115 в монокристалле оксида цинка при температурах в интервале от 59 K до 800 K. Объяснена перестройка энергетического спектра рефлекса 115 с температурой. Показано, что при низкой температуре преобладающим является диполь-квадрупольный вклад, в дальнейшем сильно увеличивается термоиндуцированный вклад, а при

высоких температурах (выше 500 K) необходим учет вклада от дефектов. Таким образом, уже при комнатной температуре тепловые колебания атомов оказывают существенное влияние на энергетические спектры «запрещенных» отражений, что необходимо всегда учитывать при обработке спектров.

СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- [1] *Орешко А.П., Дмитриенко В.Е., Д.Кабаре, Коллинз С.П., Колчинская А.М., Лонди Д., Овчинникова Е.Н.* Моделирование температурных эффектов в спектрах “запрещенных” рентгеновских отражений при резонансной дифракции в ZnO. // Сборник докладов рабочего совещания “Рентгеновская оптика-2004”. Нижний Новгород, ИФМ РАН, 2-6 мая 2004 г. С. 193-197.
- [2] *Ovchinnikova E.N., Dmitrienko V.E., Joly Y., Koltchinskaya A.M., Oreshko A.P., Artemyev A.N., Sarkisyan V.A.* “Forbidden” reflections in Resonant X-ray Diffraction by Itrrium-Iron Garnet (YIG). // International Workshop on Resonant X-ray scattering in Electrically-Ordered Systems. Grenoble. ESRF. 2004. February. P. 26.
- [3] *Дмитриенко В.Е., Колчинская А.М., Константинова А.Ф., Овчинникова Е.Н., Соболева Л.В., Вильгельм Ф., Гулон Ж., Рогалев А.* Моделирование спектров естественного кругового дихроизма для кристалла CuCsCl_3 в рентгеновском диапазоне длин волн. // Сборник докладов рабочего совещания «РСНЭ-2005». Москва, 9-11 ноября, 2005 год, с. 281.
- [4] *Овчинникова Е.Н., Дмитриенко В.Е., Колчинская А.М.* Расчет комбинированного вклада в запрещенные рефлексy в резонансной дифракции СИ. // Сборник докладов XV Российской конференции по использованию синхротронного излучения. Новосибирск, июль, 2004 г.

- [5] *Колчинская А.М., Дмитриенко В.Е., Коллинз С., Лонди Д., Овчинникова Е.Н., Орешко А.П.* Моделирование температурной зависимости энергетических спектров «запрещенных» отражений в оксиде цинка. // Сборник докладов рабочего совещания «РСНЭ-2005». Москва, 9-11 ноября, 2005 год, с. 311.
- [6] *Колчинская А.М.* Резонансная дифракция синхротронного излучения в оксиде цинка: термоиндуцированные «запрещенные» отражения. // Сборник докладов XII Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов-2005", 2005 год, 13 апреля.
- [7] *Колчинская А.М., Дмитриенко В.Е., Овчинникова Е.Н., Орешко А.П.* Методы численного моделирования энергетических спектров чисто резонансных рефлексов, индуцированных тепловыми колебаниями. // Сборник докладов рабочего совещания «РСНЭ-2005». Москва, 12-17 ноября, 2007 год, с. 426.
- [8] *Дмитриенко В.Е., Овчинникова Е.Н., Колчинская А.М., Орешко А.П., Мухамеджанов Э.Х.* Исследование структурных, электронных и фононных свойств кристаллов с помощью резонансной дифракции рентгеновского излучения. // Сборник докладов конференции по физике конденсированного состояния, сверхпроводимости и материаловедению. Москва, 26-30 ноября, 2007 год, с. 187.
- [9] *Dmitrienko V.E., Ovchinnikova E.N., Kolchinskaya A.M., Kozlovskaya K.A., Kokubun J., Ishida K., Mukhamedzhanov E.K., Orechko A.P.* Resonant diffraction of X-rays as a probe for structural, electronic and phononic properties. // Сборник докладов конференции «ЕМММ-2007». Москва, 3-7 сентября 2007 года, с.
- [10] *Орешко А.П., Дмитриенко В.Е., Д.Кабаре, Коллинз С.П., Колчинская А.М., Лонди Д., Овчинникова Е.Н.* Моделирование температурных эффектов в спектрах “запрещенных” рентгеновских отражений при

резонансной дифракции в ZnO. // Известия российской академии наук. Серия физическая. 2005 год, том 69, № 2, с. 250-254.

[11] Колчинская А.М., Артемьев А.Н., Дмитриенко В.Е., Забелин Ф.В., Маевский А.Г., Овчинникова Е.Н., Орешко А.П., Саркисян В.А., Жоли И. Численное моделирование экспериментальных спектров резонансного поглощения и дифракция синхротронного излучения в железо-иттриевом гранате. // Кристаллография, 2006 год, том 51, №2, с. 218-227.

[12] Колчинская А.М., Дмитриенко В.Е., Овчинникова Е.Н., Орешко А.П. Условия возникновения и температурная зависимость «запрещенных» рефлексов при резонансной дифракции рентгеновского излучения в монокристалле оксида цинка. // Кристаллография, 2007 год, том 52, № 4, с. 679-685.

Список цитируемой литературы.

[1] Hodeau J.L., Favre-Nicolin V., Bos S, Renevier H., Lorenzo E., Berar J.-F. Resonant Diffraction. // Chem. Rev. 2001. V. 101. P. 1834 – 1867.

[2] Tonnerre J.-M. X-ray magnetic scattering. // Proceedings of the International School “Magnetism and Synchrotron Radiation”. 1996. P. 245 – 273.

[3] Collins S.P., Laundry D., Dmitrienko V.E., Mannix D., Thompson P. Temperature-dependent forbidden resonant x-ray scattering in zinc oxide. // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 064110-1 - 064110-4.