

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

2437/83

10/5-83

P10-83-75

Г.Щорнак, А.Полерс, А.Рейхманн

**PBRAGG – ПРОГРАММА РАСЧЕТА
ПОЛНЫХ ОТРАЖАТЕЛЬНЫХ СПОСОБНОСТЕЙ
ПЛОСКИХ И ИЗОГНУТЫХ КРИСТАЛЛОВ
В СПЕКТРОМЕТРАХ БРЭГГА**

Направлено в журнал "Кристаллография"

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

Литература не дает достаточных сведений о полной отражательной способности кристаллов и кристаллических плоскостей в зависимости от энергий квантового излучения и порядков отражения, получаемых в экспериментах. Возникает необходимость проведения расчетов соответствующих величин, чтобы оценить светосилу применяемого кристалл-дифракционного спектрометра.

На практике используются кристаллы, очень различные по своей структуре: от идеального монокристалла до кристаллов с полной мозаичной структурой. Для расчета их полной отражательной способности в настоящее время существуют только два метода, которые трактуют предельные случаи идеального монокристалла /динамическая теория/ и кристалла с идеальной мозаичной структурой /кинематическая теория/. На основе расчетов по обоим методам можно задать интервал, в котором полная отражательная способность должна определяться в зависимости от степени мозаичности кристалла. Используя этот подход, можно предсказать ожидаемые отражательные способности. Для реализации необходимых расчетов разработана программа PBRAGG, которая позволяет рассчитать для брэгговских спектрометров полные отражательные способности плоских кристаллов в рамках кинематической и динамической теорий и соответствующие значения для изогнутых кристаллов в рамках динамической теории. Учитываются эффекты поглощения, первичной и вторичной экстинкции и влияние температуры на величины отражательной способности. Необходимые для расчетов атомные факторы рассеяний и соответственно структурные факторы рассчитываются либо на основе квантовой механики или ряда, использующего табулированные коэффициенты /1/.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Общая проблема расчета полной отражательной способности рассматриваемого кристалла состоит в вычислении интеграла

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} R(\theta) d\theta, \quad /1/$$

где $R(\theta)$ - коэффициент отражения в диапазоне области отражения вблизи максимума интенсивности. Поскольку $R(\theta)$ только в очень узком диапазоне отличается от нуля, можно интегрирование вести в пределах $\pm\infty$. В дальнейшем мы будем решать уравнения для спект-

рометров Брэгга, т.е. не рассматривается случай трансмиссионного спектрометра. При изложении нужных для расчетов формул мы используем теорию, приведенную в работе /2/.

Кинематическая теория пренебрегает процессами поглощения излучения и многократным рассеянием и является справедливой для идеального мозаичного кристалла. Если толщина кристалла такая, что происходит полное поглощение излучения, то можно написать для полной отражательной способности:

$$P_{\text{кин.}} = \int_{-\infty}^{+\infty} R(\theta) d\theta = \lambda^3 \frac{N^2}{\mu} |F(2\theta)|^2 \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta_n}{4 \sin 2\theta_n}, \quad /2/$$

где N - число ячеек на единице объема, $F(2\theta)$ - структурный фактор, λ - длина волны, μ - эффективный коэффициент поглощения, e^2/mc^2 - классический радиус электрона, θ_n описывает исправленный для случая брэгговского отражения угол Брэгга. Брэгговский закон / n - порядок отражения, d - межплоскостное расстояние/

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad /3/$$

справедлив точно только для отражения внутри кристалла. При входе излучения в кристалл и выходе из кристалла происходит преломление излучения. Возникающее при этом отклонение от закона /3/ исправляется единым декрементом индекса преломления $n = 1 - \delta$.

Это имеет особое значение для мягкого рентгеновского излучения. Вклад описанного процесса можно учитывать введением эффективной межплоскостной постоянной d_n для каждого порядка отражения:

$$n\lambda = 2d_n \sin \theta_n = 2d(1 - T) \sin \theta_n, \quad /4/$$

где d является истинным расстоянием между кристаллическими плоскостями $d(hkl)$. Корректирующий фактор T имеет вид

$$T = \delta / \sin^2 \theta_n. \quad /5/$$

Для практических расчетов в диапазоне выше края самопоглощения можно использовать выражение /2/

$$\delta \approx 2,7 \cdot 10^{-8} \frac{\rho Z_M}{M_0} \lambda^2, \quad /6/$$

где λ (в Å) подставляется в /6/, ρ - плотность кристалла в г/см³, M_0 - вес молекулы в граммах, а Z_M описывает число электронов в молекуле. Улучшенное описание для диапазона выше и ниже края самопоглощения, которое учитывает эффекты поглощения, есть /8-5/

$$\delta = 2,68 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{\rho}{M} (Z_M + Z_K \frac{\lambda^2}{\lambda_K^2} \ln |1 - \frac{\lambda_K^2}{\lambda^2}|), \quad /7/$$

где Z_K - число электронов в К-оболочке и λ_K - длина волны К-края самопоглощения.

После подстановки соотношения /5/ в /4/ получаем значение исправленного для случая брэгговского отражения угла

$$\theta_n = \arcsin \left[\frac{n\lambda}{4d} + \left(\frac{n^2 \lambda^2}{16d^2} + \delta \right)^{1/2} \right] \quad /8/$$

и

$$d_n = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta_n} \quad /9/$$

Точный расчет полной отражательной способности требует учета дополнительного члена в коэффициенте поглощения, который описывает уменьшение отражательной способности вторичной экстинкции. Эффективный коэффициент поглощения в /2/ тогда имеет вид

$$\mu_{эфф} = \mu + gQ, \quad /10/$$

где

$$Q = \lambda^3 \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 |F(2\theta)|^2 N^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta_n}{2 \sin^2 2\theta_n} \quad /11/$$

Постоянная g показывает, насколько кристалл похож на идеальный мозаичный кристалл ($g=0$). g рассчитывается по формуле

$$g \leq 2 \cot 2\theta_n (\cot^2 \theta_n - 1) \frac{d_{001}}{\lambda}, \quad /12/$$

где d_{001} - межплоскостное расстояние в направлении z -оси кристалла.

Идеальные монокристаллы рассматриваются в рамках динамической теории, которая учитывает также потери отражательной способности за счет многократного рассеяния. Полная отражательная способность рассчитывается по Дарвину /8/:

$$R'_{дин.} = \int_{-\infty}^{+\infty} R(\theta) d\theta = \frac{4}{3\pi} \lambda^2 N |F(2\theta)| \frac{1 + |\cos 2\theta_n|}{\sin 2\theta_n} \quad /13/$$

При отражении от идеального монокристалла, если угол падения луча θ находится в диапазоне полного отражения, интенсивность

падающего луча сильно уменьшается при пересечении кристалла из-за первичной экстинкции. Амплитуда падающего луча уменьшается в $e^{-\xi}$ раз и интенсивность излучения - в $e^{-2\xi}$ раз при пересечении каждой плоскости. Средний коэффициент поглощения излучения описывается формулой

$$2\xi = \frac{\pi}{4} \lambda N d |F(2\theta)| \left(\frac{e^2}{mc^2} \right) \frac{1 + |\cos 2\theta_n|}{\sin \theta}, \quad /14/$$

и уравнение /13/ приобретает вид

$$R_{дин.} = R'_{дин.} \cdot e^{-2\xi} \quad /15/$$

Найденные в /2/ и /15/ зависимости описывают полную отражательную способность плоских кристаллов с учетом поглощения и экстинкции. Поскольку интерес представляет и переход к изогнутому кристаллу, подход к оценке отражательной способности изогнутого кристалла в динамической теории дан в /2/. Отражательная способность здесь есть

$$R_{дин.}(R) = [1 - \exp(-\bar{\mu}_e R \Omega \sec \theta_n)] \times \\ \times \left\{ \Omega + \frac{\cos \theta_n}{2\mu R} [1 - \exp(-2\mu t \operatorname{cosec} \theta_n)] \right\}, \quad /16/$$

где R - радиус изгиба кристалла, t - толщина кристалла, а

$$\bar{\mu}_e = \frac{3}{4} \mu_e = \frac{3}{4} 2\xi \frac{\sin \theta}{d} \quad /17/$$

Ω есть $4/3$ области полного отражения $\Delta\theta$ от идеального кристалла,

$$\Omega = \frac{4}{3} \Delta\theta = \frac{4}{3} (\theta - \theta_n) \frac{F(2\theta)}{F(0)} (1 + |\cos 2\theta_n|), \quad /18/$$

где $F(0)$ - структурный фактор излучения, рассеивающегося в направлении падающей волны, а $F(2\theta)$ - структурный фактор рассеяния излучения на угол 2θ .

Структурный фактор характеризует интенсивности отражения в зависимости от атомной структуры элементарной ячейки. Для кристаллической плоскости (hkl) его можно представлять в виде

$$F_{hkl}(2\theta) = \sum_j (f_{0j} + \Delta f'_j(\lambda) + \Delta f''_j(\lambda)) e^{2\pi i n (hx_j + ky_j + lz_j)} e^{-B_j (n/2d_n)^2}, \quad /19/$$

где суммирование идет по всем атомам j элементарной ячейки с координатами (x_j, y_j, z_j) . Атомный фактор рассеяния имеет вид ^{/7/}

$$f = f_0 + \Delta f'(\lambda) + \Delta f''(\lambda), \quad /20/$$

где f_0 - атомный фактор рассеяния для частот, значительно превышающих частоты любого края самопоглощения, и $\Delta f'(\lambda)$, $\Delta f''(\lambda)$ - реальная и мнимая части поправки для аномальной дисперсии. Величины $\Delta f'$ и $\Delta f''$ берутся из ^{/1/}.

Атомный фактор рассеяния описывает только рассеивающую способность покоящихся атомов. Однако атомы в кристаллической решетке колеблются вокруг своего состояния равновесия вследствие теплового движения. Амплитуда колебаний растет с температурой и вызывает гофрировку кристаллических плоскостей. Влияние температуры учитывается введением фактора e^{-M} в ^{/19/}. M равняется:

$$M = 2B \left(\frac{n}{2d} \right)^2, \quad /21/$$

где значение B , как правило, указано в таблицах работы ^{/1/}. С увеличением температуры e^{-M} падает и связанная с ней полная отражательная способность кристалла. В диапазоне температур, представляющих практический интерес, поправок, как правило, можно не вводить ^{/2/}.

3. ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ PBRAGG

Для расчета полной отражательной способности и других характеристик кристалла, являющихся функцией энергии квантового излучения и порядка отражения различных кристаллов и плоскостей, разработана программа PBRAGG, которая служит для вычисления упомянутых величин в геометрии Брэгга. Расчеты ведутся на основе теории, данной в разделе 2. Существующая программа позволяет рассчитать полные отражательные способности плоских кристаллов в кинематической и динамической теории и для изогнутых кристаллов в динамической теории. Основой всех расчетов является симметричная геометрия Брэгга, т.е. случай, когда отражающие кристаллические плоскости (hkl) расположены параллельно к кристаллической поверхности.

На рис.1 указана схема программы PBRAGG. После чтения некоторых управляемых параметров $NI (I = 1, \dots, 5)$ считываются величины STOFF - название соединения; TYP - тип структуры; Z - число электронов в молекуле; ρ - плотность кристалла; M - масса молекулы; H, K, L - индексы Миллера для выбранной плоскости; A, B, C - координаты элементарной ячейки; α, β, γ - углы элементарной ячейки. Подпрограмма ABST определяет объем элементарной ячейки:

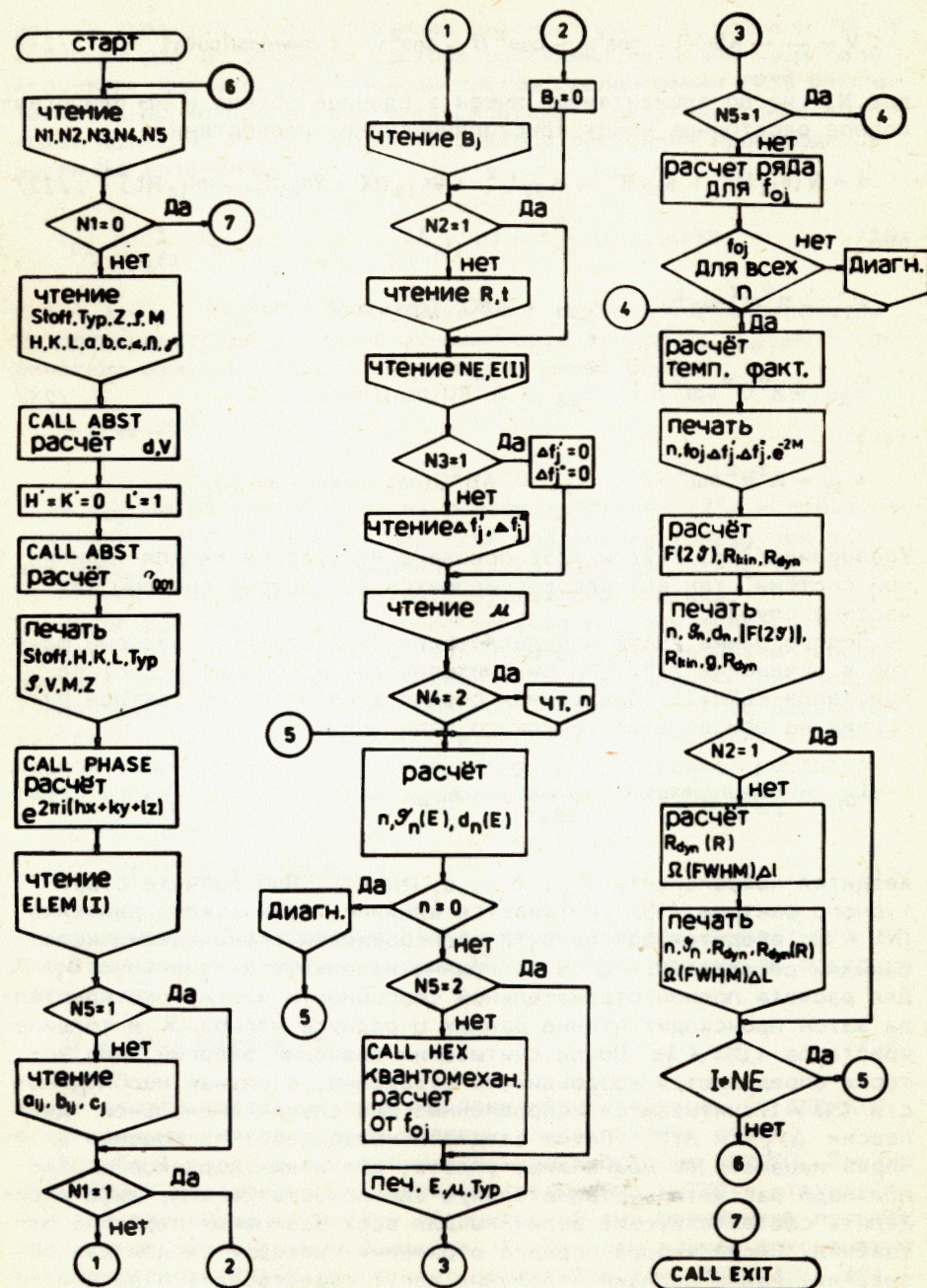


Рис.1. Схема работы программы PBRAGG.

$$V = \frac{1}{N} = ABC(1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{1/2}, \quad /21/$$

где N - число элементарных ячеек в единице объема и d - неисправленное расстояние между кристаллическими плоскостями

$$d = V(s_{11}H^2 + s_{22}K^2 + s_{33}L^2 + 2s_{12}HK + 2s_{23}KL + 2s_{13}HL)^{-1/2}, \quad /22/$$

где

$$\begin{aligned} s_{11} &= B^2 C^2 \sin^2 \alpha, & s_{12} &= ABC^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma), \\ s_{22} &= A^2 C^2 \sin^2 \beta, & s_{23} &= A^2 BC (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha), \\ s_{33} &= A^2 B^2 \sin^2 \gamma, & s_{13} &= AB^2 C (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta). \end{aligned} \quad /23/$$

Уравнения /21/, /22/ и /23/ основаны на уравнениях для триклинной системы, так как здесь содержатся все другие системы как частные случаи.

Подпрограмма PHASE определяет для ряда структур фазовый фактор в уравнении /19/. Потом считывается информация о составе кристалла ELEM(I). Для случая определения атомного фактора рассеяния на основе аналитического ряда формы /1/

$$f_{0j} = \sum_{i=1}^4 a_{ij} \exp(-b_{ij} (\frac{n}{2d_n})^2) + c_j, \quad /24/$$

вводятся коэффициенты a_{ij} , b_{ij} , c_j ($N_5 = 2$). При расчете структурного фактора /19/ учитывается влияние термического движения ($N_1 \neq 1$), вводится фактор B_j . В пренебрежении термическими колебаниями решетки ($N_1 = 1$) в программе используется значение $B_j = 0$. Для расчета полной отражательной способности изогнутого кристалла затем происходит чтение данных о радиусе изгиба R и толщине кристалла t ($N_2 \neq 1$). После считывания значений энергий, для которых определяются коэффициенты отражения, в случае необходимости ($N_3 \neq 1$) считываются исправленные для случая аномальной дисперсии $\Delta f'_j$ и $\Delta f''_j$. Потом вводится коэффициент поглощения μ . Через параметр N_4 можно либо учесть, для каких порядков отражения надо рассчитать отражательную способность ($N_4 = 2$), либо определить соответствующие величины для всех возможных порядков отражения. После выбора порядка отражения проверяется для данной энергии, какие порядки отражения могут существовать в рассматриваемом случае, и определяются соответствующие углы θ_n и поправки на расстояние между кристаллическими плоскостями. Если для определенной энергии не удовлетворяется условие $n\lambda/2d < 1$, на

печать выдается соответствующая диагностика. При условии $N_2 \neq 2$ возможен расчет атомного фактора рассеяния методами квантовой механики. Для этого при помощи систем подпрограммы HEXB рассчитываются по методу Дирака-Фока-Слейтера /8/ релятивистские волновые функции. Расчет атомного фактора рассеяния производится затем по уравнению

$$f_{0j} = \sum_{nlj} f_{nlj}(\mu) = \sum_{nlj} \int_0^\infty (A_{nlj}^2(r) + B_{nlj}^2(r)) j_0(\mu r) dr, \quad /25/$$

где $A_{nlj}(r)$, $B_{nlj}(r)$ - умноженные на r малые и большие компоненты релятивистской волновой функции орбитали (nlj); $j_0(\mu r)$ - сферические функции Бесселя. Параметр μ имеет форму

$$\mu = 4\pi \frac{\sin \theta}{\lambda}. \quad /26/$$

Если f_{0j} не рассчитывается на основе уравнения /25/, используется уравнение /24/. Поскольку ряд /24/ справедлив только при условии $\sin \theta_n / \lambda < 2^{1/2}$, при повышении этого предела расчет f_{0j} не выполняется и печатается соответствующая диагностика.

После расчета температурного фактора по уравнению /21/ определяется структурный фактор /19/ и полные отражательные способности в кинематической /уравнение /2// и в динамической теории /уравнение /15// для данной энергии. Если $N_2 \neq 1$, то рассчитывается отражательная способность изогнутого кристалла в динамической теории по /16/. Для получения дополнительной характеристики изогнутого кристалла вычисляется угловая полуширина дифракционного отражения

$$\Omega' = \Omega + \ln 2 \cos \theta_n / 2\mu R, \quad /27/$$

которая может быть полезна при оценке светосилы конкретного спектрометра, и линейная ширина Δl на длине окружности фокального круга

$$\Delta l = R\Omega + \ln 2 \cos \theta_n / 2\mu. \quad /28/$$

После печати названных величин происходит переход к расчету всех величин для следующей энергии или окончание счета.

В табл.1 указаны все входные данные программы PBRAGG. Параметр STOFF характеризует название соединения и ТУР - структурный тип элементарной ячейки. Структурный тип определяет положение атомов в элементарной ячейке. Координаты атомов фиксированы в подпрограмме PHASE для структурных типов A01, A02, A03, A04, A09, B02, B03, S04. Существует возможность расширить этот список в случае необходимости. Предусмотрено, что соединение содержит максимум 5 элементов, название и возможные степени их ионизации

Таблица 1

Входной поток данных для программы PBRAGG

Номер карты	Условие	Параметры	Формат	Замечания
1		N1, N2, N3, N4, N5	5I1	
2		STOFF, TYP, NZ, RHO, XMOLM	A8, 2X, A4, 6X, I4, 6X, 2F10.0	NZ - число электронов в молекуле, RHO - плотность, XMOLM - масса молекулы
3		H, K, L, A, B, C, AL, BE, GA	3I2, 4X, 6F10.0	AL - α , BE - β , GA - γ
4		ELEM(J), J=1, N	5A4	N - число различных элементов в ячейке,
5	N5 \neq 1	AFAK(I, J), J=1, 4	8F10.0	карты 5-7 читаются N раз
6	N5 \neq 1	BEXP(I, J), J=1, 4	8F10.0	a_{ij}, b_{ij}, c_j для определения f_{oj}
7	N5 \neq 1	CSUM(I)	8F10.0	
8	N1 \neq 1	B(I), I=1, N	8F10.0	B(I) - коэффициент для определения температурного фактора
9	N2 \neq 1	NBIEG	I2	NBIEG - число различных радиусов изгиба
10	N2 \neq 1	XBIEGRA(I) I=1, NBIEG	8F10.0	радиусы изгиба кристалла
11	N2 \neq 1	T	8F10.0	толщина кристалла
12		NE	I2	число различных энергий излучения
13		E(I), I=1, NE	8F10.0	энергии излучения
14	N3 \neq 1	DISP1(I, J) DISP2(I, J) I=1, N; J=1, NE	8F10.0	поправки для аномального рассеяния
15		XMY(I), I=1, NE	8F10.0	коэффициент поглощения излучения
16	N4 \neq 2	NBX, NBEUGX(I)	40I2	NBX - число рассматриваемых порядков отражения

Номер карты	Условие	Параметры	Формат	Замечания
				NBEUGX - рассматриваемые порядки отражения, если N4=2, рассматриваются первые 99 порядков отр.
17	N5= 1			N раз повторяются входные данные программы HEXB/8/ для различных элементов в ячейке

указываются параметрами ELEM(I). Необходимо следить за тем, чтобы чтение параметров a_{ij}, b_{ij}, c_j, B_j происходило в той же самой последовательности, в какой они пробиты на перфокарте. Поскольку значение линейного коэффициента поглощения зависит от энергии, считывается необходимое количество коэффициентов и наблюдается соответствующая последовательность. Члены, описывающие вклад аномальной дисперсии, тоже зависят от энергии и номера элемента. Считываются сначала значения для одного элемента при различных энергиях, потом аналогичные данные для следующего элемента. Единицы измерения отдельных величин указаны в табл.2.

Таблица 2

Единицы измерения отдельных величин			
Величина	Единица измерения	Величина	Единица измерения
RHO	г/см ³	B	Å^{-1}
XMOLM	г/мол	XBIEGRA, T	мм
A, B, C	нм	XMY	см ⁻¹
AL, BE, GA	градусы	E	кэВ

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

В качестве примера мы приведем некоторые результаты, полученные при помощи программы PBRAGG. На рис.2 показано изменение полной отражательной способности кристалла LiF(200) при энергии квантов 20 и 100 кэВ для первых восьми порядков отражения. Для LiF(200) на рис.3 представлен ход кривой полной отражательной способности в зависимости от энергии квантов. Обратим внимание на пересечение кривых для кинематической и динамической теории при $n=1$. Эти данные в некоторой степени противоречат большинству известных из литературы данных, свидетельствующих о том, что

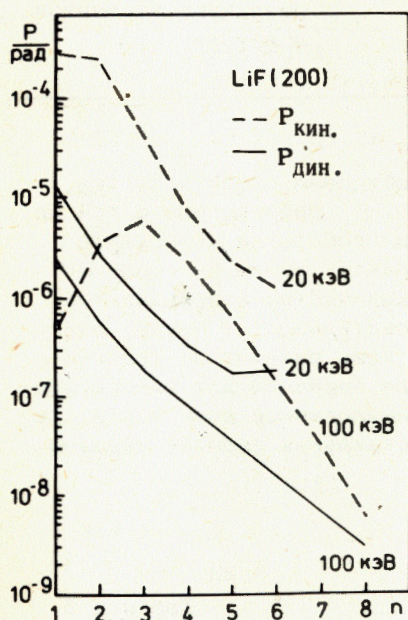


Рис.2. Изменение полной отражательной способности P кристалла LiF(200) при различных энергиях квантов E для первых восьми порядков отражения n . $P_{кин.}$ - кинематическая теория, $P_{дин.}$ - динамическая теория.

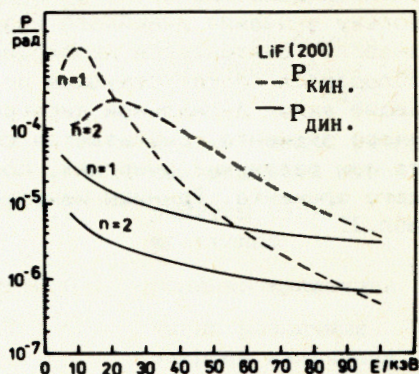


Рис.3. Зависимость полной отражательной способности P кристалла LiF(200) от энергии квантового излучения E для порядков отражения $n=1, 2$. $P_{кин.}$ - кинематическая теория, $P_{дин.}$ - динамическая теория.

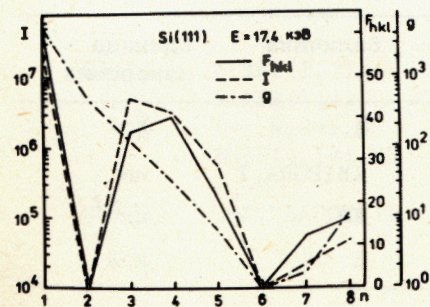


Рис.4. Зависимость структурного фактора F_{hkl} и измеряемых относительных отражательных способностей $I^{1/9}$ кристалла Si(111) от порядка отражения n . Для объяснения фактора g см. уравнение /12/.

результаты кинематической теории всегда выше результатов динамической теории. Этот факт является следствием учета эффектов поглощения и экстинкции квантового излучения в кристалле. Наблюдаемый нами эффект тоже виден из рис.2, где у кривых при $E = 100$ кэВ значение полной отражательной способности для динамической теории при $n=1$ превышает соответствующее значение для кинематической теории. На рис.4 сравниваются величины изменения рассчитанного структурного фактора F_{hkl} с измеренными относительными значениями полной отражательной способности кристалла Si(111)^{9/} при энергии рентгеновских квантов $E = 17,4$ кэВ как функции порядка отражения. Как правило, наблюдается хорошее совпадение между общим ходом полной относительной отражательной способности и структурным фактором. Разногласие для $n = 3$ объясняется влиянием вторичной экстинкции, характеризуемой фактором g /см. /10//.

В табл.3 сравниваются результаты расчетов и измерений из работы /2/ для полных отражательных способностей изогнутых Si(400) кристаллов для $MoK_{\alpha 1}$ -излучения с результатами наших расчетов, полученными с использованием программы PBRAGG. Результаты наших расчетов отклоняются от экспериментальных в среднем на 9,6%, тогда как для результатов других авторов подобное отклонение составляло в среднем 26,3%.

Таблица 3

Сравнение расчетных $P_{рас}$ и экспериментальных $P_{экс}$ величин полных отражательных способностей изогнутых Si(400) -кристаллов для $MoK_{\alpha 1}$ -излучения из работы /1/ с величинами P , полученными по программе PBRAGG.
 R - радиус изгиба

$R/см$	$P_{экс}/10^{-5}рад$	$P_{рас}/10^{-5}рад$	$P/10^{-5}рад$
39	15,0	19,5	16,5
50	14,6	18,9	16,0
100	13,0	16,3	13,8
200	9,9	12,3	10,5
500	5,5	6,7	6,0
1000	3,0	3,8	3,5

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данная программа позволяет провести расчеты полной отражательной способности различных кристаллов при разных энергиях и порядках отражения с учетом поглощения и экстинкции квантового излучения и влияния аномальной дисперсии и температуры.

Таким образом, существует возможность провести предварительные оценки применения того или иного кристалла в дифракционных спектрометрах с целью анализа спектра длин волн интересующего нас излучения. Базируясь на получаемых данных, можно оценить светосилу спектрометра и ее изменение при переходе к более высоким порядкам отражения при увеличении диапазона измеряемой длины волны.

Авторы выражают благодарность профессору Г.Музиолу за полезные дискуссии во время подготовки настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. International Tables for X-Ray Crystallography. Kynoch Press, Birmingham, England, 1974.
2. Cauchois Y., Bonnelle C. X-Ray Diffraction Spectrometry. In: Atomic Inner-Shell Processes, Academic Press, New York-London-Berlin, 1975, vol.II.
3. Kallman H., Mark H. Naturwiss., 1926, 14, p.648.
4. Kallman H., Mark H. Ann.d.Phys., 1927, 82, p.585.
5. Prins J.A. Z.Phys., 1928, 47, p.479.
6. Darwin C.G. Phil.Mag., 1914, 27, p.315,675.
7. James R.W. The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays. Bell, London, 1948.
8. Liberman D.A., Cromer D.T., Waber J.T. Comp.Phys.Commun., 1971, 2, p.107.
9. Полерс А., Щорнак Г. ОИЯИ, P13-81-794, Дубна, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
9 февраля 1983 года.

Щорнак Г., Полерс А., Рейхманн А. P10-83-75
PBRAGG - программа расчета полных отражательных способностей плоских и изогнутых кристаллов в спектрометрах Брэгга

Разработана программа для расчетов полной отражательной способности плоских и изогнутых кристаллов в геометрии Брэгга. Полные отражательные способности рассчитываются в кинематической /идеальный мозаичный кристалл/ и динамической /идеальный монокристалл/ теории с учетом эффектов поглощения и экстинкции квантового излучения, а также с учетом влияния аномальной дисперсии и температуры. В качестве примера приводятся результаты, полученные с использованием программы PBRAGG для кристаллов LiF(200), Si(111) и Si(400).

Работа выполнена в Отделе новых методов ускорения ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Zschornack G., Pohlars A., Reichmann A. P10-83-75
PBRAGG - a Programme to Calculate Integral Reflecting Powers of Flat and Curved Bragg-Crystal Diffraction Spectrometers

A programme was written to calculate integral reflecting powers of flat and curved crystals in the Bragg-geometry. The integral reflecting powers are calculated in the kinematic (ideal mosaic crystal) and in the dynamic (ideal single crystal) theory with considering the radiation absorption and extinction and also the influence of anomalous dispersion and the temperature. As examples, some computed results for LiF(200), Si(111) and Si(400) are discussed.

The investigation has been performed at the Department of New Acceleration Methods, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод Т.Н.Самолетовой.