

# Влияние дефектов в регулярных наносистемах на процессы интерференции при переизлучении аттосекундных импульсов электромагнитного поля

В. И. Матвеев<sup>1)</sup>, Д. Н. Макаров

Северный (Арктический) федеральный университет им. Ломоносова, 163002 Архангельск, Россия

Поступила в редакцию 13 января 2016 г.

Рассмотрено влияние присутствия дефектов в наноструктурированных мишенях на интерференционные спектры при переизлучении аттосекундных импульсов электромагнитного поля. Получены общие выражения для расчетов спектральных распределений для одномерных, двумерных и трехмерных многоатомных наносистем, составленных из одинаковых сложных атомов, с дефектами типа изгибов, вакансий и разрывов. В качестве примеров, допускающих простое аналитическое представление, проведены расчеты изменений интерференционных спектров линейной цепочкой с несколькими удаленными атомами (цепочка с разрывами) и линейной цепочкой с изгибом. Развито обобщение на двух- и трехмерные наносистемы.

DOI: 10.7868/S0370274X16040147

**1. Введение.** Кристаллы и наноструктурированные мишени представляют собой естественные дифракционные решетки для рентгеновского излучения. Обычно явление дифракции рентгеновских лучей на различного рода периодических структурах описывается как рассеяние плоских волн бесконечной длительности по времени [1]. Процессы же рассеяния аттосекундных импульсов электромагнитного поля на такого рода структурах до настоящего времени исследованы мало. Вместе с тем подобные процессы могут дополнить рентгеноструктурный анализ возможностями спектроскопии с высоким временным разрешением связанной в том числе с аттосекундной спектроскопией и аттосекундной метрологией [2–6]. Тем не менее до настоящего времени лишь незначительное количество работ было посвящено исследованиям процессов интерференции при рассеянии аттосекундных импульсов различного рода регулярными мишенями. В работах [7–9] развита теория переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля произвольными многоатомными системами, составленными из изолированных сложных атомов. При использовании же в качестве мишеней регулярных структур с большим количеством атомов в спектрах перерассеяния доминирующими становятся эффекты интерференции. При этом, подбирая пространственную структуру мишеней и их различные комбинации, можно добиться значительного разделения угловых распределений падающего и рассеянного излучений.

В работе [10] развита теория переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля произвольными регулярными многоатомными системами, составленными из одинаковых сложных атомов, с учетом хаотических тепловых колебаний. Однако до настоящего времени не рассматривались процессы интерференции при переизлучении аттосекундных импульсов электромагнитного поля произвольными регулярными многоатомными системами, содержащими различного рода дефекты.

В данной работе рассмотрено влияние присутствия дефектов в наноструктурированных мишенях на интерференционные спектры при переизлучении аттосекундных импульсов электромагнитного поля. Получены общие выражения для расчетов спектральных распределений для одномерных, двумерных и трехмерных многоатомных наносистем, составленных из одинаковых сложных атомов, с дефектами типа изгибов, вакансий и разрывов. В качестве примеров, допускающих простое аналитическое представление, проведены расчеты изменений интерференционных спектров линейной цепочкой с несколькими удаленными атомами (цепочка с разрывами) и линейной цепочкой с изгибом. Развито обобщение на двух- и трехмерные наносистемы. Предложенный подход может быть непосредственно распространен на более общие типы дефектов.

В рассматриваемых нами ниже случаях считается, что длительность аттосекундных импульсов  $\tau$  значительно меньше характерного атомного време-

<sup>1)</sup>e-mail: mezon98@mail.ru

ни  $\tau_a$ , т.е.  $\tau \ll \tau_a$ . Отметим, что в настоящей работе, как и в [7–10], речь идет о излучении одного фотона всеми атомами мишени за время действия внезапного возмущения. После действия внезапного возмущения, возбужденные атомы мишени могут релаксировать с излучением фотонов, принадлежащих известным спектрам изолированных атомов. Однако если внезапное возмущение вызывает изменение скоростей атомных электронов, то и во время его действия атомы могут излучать [11]. Классическим аналогом задачи в такой постановке является известный [12] пример о спектре излучения свободного электрона при внезапном изменении скорости. После действия внезапного возмущения атомы мишени оказываются распределенными по всевозможным возбужденным состояниям. При этом они могут релаксировать с излучением фотонов (за характерное для радиационных переходов время). Очевидно, что в этом случае интерференционные эффекты будут отсутствовать. Кроме того, спектры переизлучения и спектры, испускаемые при релаксации, строго разделены по времени. Другими словами, спектр переизлучения испускается лишь за время действия аттосекундного импульса, а спектр релаксации – после действия аттосекундного импульса. Таким образом, спектры переизлучения могут быть идентифицированы по схеме совпадений с аттосекундным импульсом.

**2. Общая часть.** Пусть мишень состоит из  $N$  одинаковых атомов, каждый из которых содержит  $N_e$  электронов. Положение произвольного атома с номером  $a$ , где  $a = 1, 2, \dots, N$ , будем описывать вектором  $\mathbf{R}_a$ . Обозначим как  $\mathbf{r}_{a,e}$  координаты электрона, принадлежащего атому с номером  $a$ . Координаты  $\mathbf{r}_{a,e}$  отсчитываются относительно ядра атома  $a$ . Тогда  $\mathbf{R}_{a,e} = \mathbf{R}_a + \mathbf{r}_{a,e}$  – координаты электрона атома  $a$  относительно начала системы координат. Потенциал взаимодействия электронов системы атомов с аттосекундным импульсом электромагнитного поля равен [7]

$$V(t) = \sum_{a=1}^N \sum_{e=1}^{N_e} \mathbf{E}(\mathbf{R}_{a,e}, t) \cdot \mathbf{r}_{a,e}. \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  – напряженность электрического поля импульса электромагнитного поля гауссовой формы:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2(t - \mathbf{n}_0 \mathbf{r}/c)^2} \cos(\omega_0 t - \mathbf{k}_0 \mathbf{r}), \quad (2)$$

где  $\mathbf{E}_0$  – амплитуда,  $\mathbf{k}_0 = (\omega_0/c)\mathbf{n}_0$ ,  $\mathbf{n}_0$  – единичный вектор, направленный вдоль распространения импульса,  $\mathbf{r}$  – координаты точки наблюдения,  $c$  –

скорость света, а длительность импульса  $\tau \sim 1/\alpha$ . Здесь и ниже используются атомные единицы:  $e = m_e = \hbar = 1$ , где  $e$  – заряд электрона,  $m_e$  – масса электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка. В атомных единицах скорость света  $c \approx 137$ . Отметим, что  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{E}_0 \delta(t - \mathbf{n}_0 \mathbf{r}/c)$  при  $\alpha \rightarrow \infty$ . Потенциал (1) может считаться действующим внезапно при условии внезапности действия на какой-либо атом мишени,  $\tau \sim 1/\alpha \ll \tau_a$ , и условии краткости взаимодействия  $V(t)$  со всей системой из  $N$  атомов ( $c$  характерным размером  $L$  вдоль распространения импульса, ср. [7]) по сравнению с характерным атомным временем  $\tau_a$ , или

$$\begin{aligned} \tau \sim 1/\alpha \ll \tau_a \sim 1, \\ L/c \ll \tau_a \sim 1. \end{aligned} \quad (3)$$

Падающий на систему атомов аттосекундный импульс переизлучается атомными электронами. Соответствующий спектр переизлучения при произвольной конфигурации атомов решетки в предположении внезапности действия возмущения (1) был получен в [8]. Он имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2 W}{d\Omega_{\mathbf{k}} d\omega} = \frac{|f_0(\omega)|^2}{(2\pi)^2 c^3 \omega} [N N_e G(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + \\ + N N_e (N_e - 1) F(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + N_e^2 Q(\omega, \mathbf{n}, \mathbf{n}_0) g_N(\mathbf{p})]. \end{aligned} \quad (4)$$

В [8] при получении этой формулы поле ультракороткого импульса учитывалось точно в рамках приближения внезапных возмущений. Кроме того, учитывались все возможные возбуждения электронов мишени. Процесс же излучения фотона описывался по теории возмущений. Формула (4) описывает полный (просуммированный по поляризациям фотона и по всем возможным конечным состояниям электронов атомов системы) спектр излучения фотона частоты  $\omega$  в телесный угол  $d\Omega_{\mathbf{k}}$  (описанный вокруг направления импульса фотона  $\mathbf{k}$ ) в течение времени действия внезапного возмущения  $V(t)$ . Здесь  $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$  – единичный вектор направления вылета фотона,  $\mathbf{p} = \mathbf{k} - (\omega/\omega_0)\mathbf{k}_0 = (\omega/c)(\mathbf{n} - \mathbf{n}_0)$  имеет смысл изменения импульса фотона при перерасеянии. Отметим, что число  $N$  атомов в системе произвольно. В частности, при  $N = 1$  формула (4) описывает спектр переизлучения одного атома, при  $N = 2$  – спектр переизлучения системы из двух атомов и т.д. (ср. [7, 8]). Напомним, что при произвольных  $N$  необходимо следить за выполнением условий внезапности (3).

В формуле (4) первые два слагаемых в правой части представляют собой умноженный на число атомов в системе спектр излучения отдельного атома и соответствуют некогерентному (пропорциональному

$N$ ) процессу переизлучения. Важно, что в (4) лишь множитель  $g_N(\mathbf{p})$  зависит от взаимного пространственного расположения атомов системы, а функции  $G$ ,  $F$  и  $Q$  зависят лишь от характеристик изолированных атомов независимо от места их расположения. Поэтому конкретные выражения для этих функций являются несущественными для дальнейшего рассмотрения. Однако отметим, что общий вид и выражения для функций  $G$ ,  $F$  и  $Q$ , а также фурье-образа  $f_0(\omega)$  приводятся в статье [8]. Там же приводится и необходимый нам фактор  $g_N(\mathbf{p})$ , ответственный за явление интерференции:

$$g_N(\mathbf{p}) = \sum_{a,b(a \neq b)} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)} = \sum_{a,b} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_a - \mathbf{R}_b)} - N. \quad (5)$$

Это общее выражение для интерференционного фактора наносистемы, имеющей произвольную геометрию и составленной из одинаковых атомов. Предметом настоящей работы являются процессы интерференции при переизлучении аттосекундных импульсов электромагнитного поля произвольными регулярными многоатомными наносистемами, содержащими дефекты типа вакансий и изменения геометрии наносистемы. Поэтому необходимо исследовать изменения фактора  $g_N(\mathbf{p})$  в сравнении с его значениями в регулярных наноструктурах. Будем считать, что дефектную наноструктуру можно представить в виде нескольких регулярных подсистем, геометрически расположенных произвольным образом друг относительно друга. К такого рода дефектам можно отнести, например, разрывы и изгибы либо их различные комбинации. Рассмотрим для простоты расчет фактора  $g_N(\mathbf{p})$  в случаях, когда наноструктура (мишень) состоит из двух регулярных подсистем, расположенных произвольным образом друг относительно друга. В формуле (5) проводится суммирование по всем атомам наносистемы. Номера атомов, относящихся к первой подсистеме с числом атомов  $N_1$ , обозначим как  $a1$  и  $b1$ , а ко второй подсистеме с числом атомов  $N_2$  – как  $a2$  и  $b2$ . Общее число атомов в мишени  $N = N_1 + N_2$ . Тогда (5) удобно представить в виде

$$g_N(\mathbf{p}) = g_{N_1}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) + g_{N_2}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) + \Delta g_N(\mathbf{p}), \quad (6)$$

где  $g_{N_1}^{(\text{reg})}(\mathbf{p})$  – интерференционный фактор для первой регулярной подсистемы, равный

$$g_{N_1}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) = \sum_{a1,b1} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_{a1} - \mathbf{R}_{b1})} - N_1, \quad (7)$$

$g_{N_2}^{(\text{reg})}(\mathbf{p})$  – интерференционный фактор для второй регулярной подсистемы, равный

$$g_{N_2}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) = \sum_{a2,b2} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_{a2} - \mathbf{R}_{b2})} - N_2, \quad (8)$$

а  $\Delta g_N(\mathbf{p})$  имеет смысл изменения общего интерференционного фактора из-за наличия в мишени двух подсистем:

$$\Delta g_N(\mathbf{p}) = \sum_{a1,a2} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_{a1} - \mathbf{R}_{a2})}. \quad (9)$$

При этом в (9) суммирование по  $a1$  проводится по атомам только первой подсистемы, а по  $a2$  – по атомам только второй. Очевидно, что если  $\Delta g_N(\mathbf{p}) = 0$ , то обе подсистемы рассеивают ультракороткий импульс независимо друг от друга. Следует отметить, что только в одномерной наносистеме вакансия может быть интерпретирована как разрыв, так что не все дефекты типа вакансий в двух- и трехмерных мишенях можно представлять в виде разрывов между регулярными подсистемами. В таких случаях может быть предложен следующий подход. Пусть при формальном заполнении всех вакансий (общим числом  $N_D$ ) в дефектной наноструктуре из  $N$  атомов мы получаем регулярную наносистему, состоящую из  $N + N_D$  одинаковых атомов. Тогда интерференционный фактор для наносистемы с такими дефектами можно, очевидно, рассчитать путем суммирования по всем атомам регулярной системы с последующим вычитанием лишних слагаемых, появившихся при заполнении вакансий. В результате имеем

$$g_N(\mathbf{p}) = g_{N+N_D}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) - \delta g_N(\mathbf{p}), \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \delta g_N(\mathbf{p}) = & \sum_{a_D, b_D} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_{a_D} - \mathbf{R}_{b_D})} - N_D + \\ & + \sum_{a_D, a} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{R}_{a_D} - \mathbf{R}_a)}, \end{aligned} \quad (11)$$

$a_D$  и  $b_D$  – номера атомов, фиктивно вставленных в вакансии, а  $a$  – номера атомов исходной дефектной системы.

**3. Дефекты линейной цепочки.** Для моделирования интересующих нас дефектов линейной цепочки рассмотрим две линейные цепочки: расположенную по оси  $x$  и состоящую из  $N_1$  одинаковых атомов и состоящую из  $N_2$  одинаковых атомов, расположенную под углом  $\alpha$  к первой на расстоянии  $\mathbf{L}_1$ . Соответствующая конструкция изображена на рис. 1. Рассчитаем входящие в интерференционный фактор (6) слагаемые. Интерференционный фактор для прямой линейной регулярной цепочки из одинаковых атомов легко вычисляется. Он приведен в работах [7, 8]. Таким образом, в формуле (6)

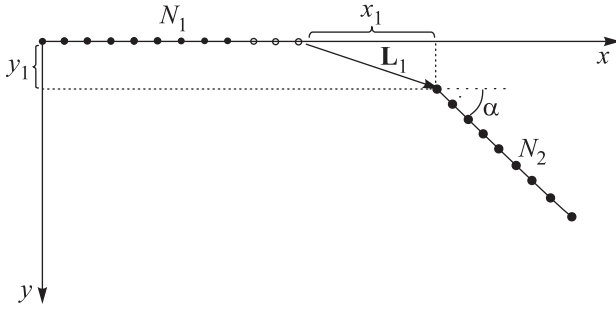


Рис. 1. Мишень, состоящая из двух регулярных прямолинейных цепочек. Первая цепочка расположена по оси  $x$  и состоит из  $N_1$  атомов. Вторая цепочка из  $N_2$  атомов расположена под углом  $\alpha$  к первой

$$g_{N_1}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) = \frac{\sin^2(\mathbf{pd}_1 N_1/2)}{\sin^2(\mathbf{pd}_1/2)} - N_1 \quad (12)$$

и

$$g_{N_2}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) = \frac{\sin^2(\mathbf{pd}_2 N_2/2)}{\sin^2(\mathbf{pd}_2/2)} - N_2, \quad (13)$$

где  $\mathbf{d}_1$  – вектор, направленный по оси  $x$  и равный по величине межатомному расстоянию первой цепочки, а  $\mathbf{d}_2$  – вектор, направленный вдоль второй цепочки и равный по величине ее межатомному расстоянию. Отметим, что вектор  $\mathbf{d}_2$  повернут на угол  $\alpha$  относительно вектора  $\mathbf{d}_1$ . Для того чтобы рассчитать  $\Delta g_N(\mathbf{p})$ , нужно просуммировать выражение (9) по всем парам атомов, находящихся в разных цепочках. Введем радиус-вектор  $\mathbf{R}_{1,n} = d_1(n-1)\mathbf{i}$ , задающий положение атома с номером  $n$  в первой цепочке и радиус-вектор  $\mathbf{R}_{2,m} = d_1(N_1-1)\mathbf{i} + x_1\mathbf{i} + d_2 \cos(\alpha)(m-1)\mathbf{i} + d_2 \sin(\alpha)(m-1)\mathbf{j} + y_1\mathbf{j}$ , задающий положение атома с номером  $m$  во второй цепочке (здесь  $\mathbf{i}$  и  $\mathbf{j}$  – орты осей  $x$  и  $y$ ,  $x_1$  и  $y_1$  – проекции вектора  $\mathbf{L}_1$  на оси  $x$  и  $y$ ; см. рис.1). В итоге для расчета  $\Delta g_N(\mathbf{p})$  нужно произвести суммирование независимо по всем атомам первой и второй цепочек, т.е.  $\Delta g_N(\mathbf{p}) = 2 \sum_{n=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \cos(\mathbf{p}\Delta\mathbf{R}_{n,m})$ , где  $\Delta\mathbf{R}_{n,m} = \mathbf{R}_{2,m} - \mathbf{R}_{1,n} = d_1(N_1-n)\mathbf{i} + x_1\mathbf{i} + d_2 \cos(\alpha)(m-1)\mathbf{i} + d_2 \sin(\alpha)(m-1)\mathbf{j} + y_1\mathbf{j}$ . Двойная сумма вычисляется точно (путем представления в виде суммы экспонент и последующего суммирования двух геометрических прогрессий). В результате получим

$$\Delta g_N(\mathbf{p}) = 2 \frac{\sin\left(\frac{N_1 \mathbf{pd}_1}{2}\right) \sin\left(\frac{N_2 \mathbf{pd}_2}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\mathbf{pd}_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\mathbf{pd}_2}{2}\right)} \times \cos\left[\frac{(N_1-1)\mathbf{pd}_1}{2} + \frac{(N_2-1)\mathbf{pd}_2}{2} + \mathbf{pL}_1\right], \quad (14)$$

где  $\mathbf{L}_1 = x_1\mathbf{i} + y_1\mathbf{j}$ . Из выражения (14) видно, что если  $\mathbf{pd}_1$  или  $\mathbf{pd}_2$  кратно  $2\pi n$  (где  $n$  – целые числа), то возникают максимумы  $\Delta g_N(\mathbf{p}) = 2N_1N_2(-1)^{n(N_1+N_2-2)} \cos(\mathbf{pL}_1)$ . При этом максимальные значения (главные интерференционные максимумы) для  $g_{N_1}(\mathbf{p})$  и  $g_{N_2}(\mathbf{p})$  равны  $N_1^2 - N_1$  и  $N_2^2 - N_2$  соответственно. Таким образом, наличие дефектов может приводить к существенному изменению интерференционной картины по сравнению с двумя независимыми цепочками. Отметим, что если формально (при выполнении условий (3)) развести цепочки на большое расстояние друг от друга ( $L_1 \gg 1$ ), то  $\cos(\mathbf{pL}_1)$  окажется быстро осциллирующей функцией, имеющей на небольшом интервале углов наблюдения нулевое среднее значение, и рассеяние импульса будет происходить как на двух независимых цепочках. Для иллюстрации влияния разрывов в регулярной системе мы провели расчеты интерференционного фактора  $g_N(\mathbf{p}) = g_{N_1}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) + g_{N_2}^{(\text{reg})}(\mathbf{p}) + \Delta g_N(\mathbf{p})$  для дефектной (разорванной) прямолинейной цепочки из тридцати атомов, образованной из регулярной прямолинейной цепочки из сорока атомов путем удаления части цепочки из десяти атомов. В результате  $N = 30$ ,  $N_1 = 10$ ,  $N_2 = 20$ , причем  $\mathbf{d}_1 = \mathbf{d}_2 = \mathbf{d}$ . Соответствующие зависимости от безразмерного параметра  $\mathbf{pd}$  приведены на рис. 2. Как видно из

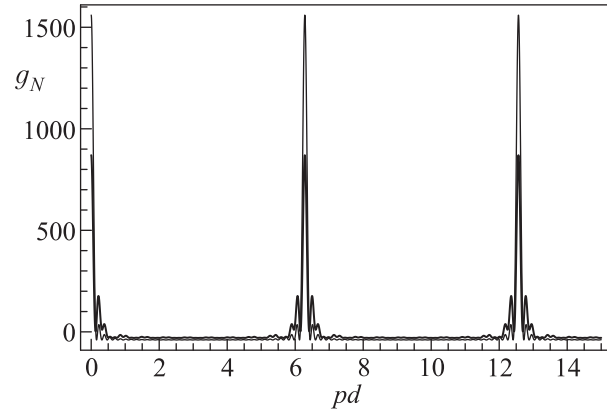


Рис. 2. Интерференционный фактор  $g_N(\mathbf{p})$  как функция безразмерного параметра  $\mathbf{pd}$  для регулярной прямолинейной цепочки из  $N = 40$  атомов (тонкая линия) и дефектной прямолинейной цепочки с общим числом атомов  $N = 30$ , образованной из регулярной прямолинейной цепочки из  $N = 40$  атомов путем удаления как целого цепочки из десяти атомов, так что в левой части оставшейся системы находится 10 атомов, а в правой – 20 (жирная линия)

рисунка, существенное изменение (по сравнению с регулярной прямолинейной цепочкой из сорока

атомов) претерпевают как главные максимумы, так и максимумы тонкой структуры.

Рассмотрим теперь изогнутую линейную цепочку без вакансий. Для иллюстрации зависимости спектра переизлучения от угла изгиба  $\alpha$  на рис. 3 приведены

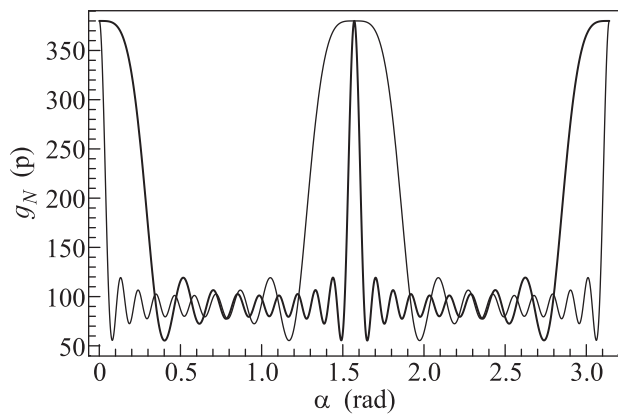


Рис. 3. Зависимости фактора  $g_N(\mathbf{p})$  от угла излома цепочки  $\alpha$ : жирная линия – аттосекундный импульс падает по оси  $x$ , тонкая – по оси  $y$

результаты расчета фактора  $g_N(\mathbf{p})$  в случае  $N = 20$ ,  $N_1 = 10$ ,  $N_2 = 10$  при  $|\mathbf{d}_1| = |\mathbf{d}_2| = |\mathbf{d}|$ . Такая цепочка получается из изображенной на рис. 1, если считать  $\mathbf{L}_1 = \mathbf{d}_2$ . Спектр зависит как от угла падения импульса на систему, так и от угла наблюдения переизлученного поля. Поэтому мы выбрали фиксированные значения этих углов так, чтобы при  $\alpha = 0$  наблюдался максимум спектра для прямолинейной цепочки, и далее рассматривали его поведение с ростом угла изгиба от нуля до  $2\pi$ . Таким образом, переизлученный импульс регистрировался в направлении, перпендикулярном плоскости изломанной цепочки, а падающий импульс считался распространяющимся либо по оси  $x$ , либо по оси  $y$ . Соответственно  $\mathbf{pd}_1 = 2\pi$ ,  $\mathbf{pd}_2 = 2\pi \cos(\alpha)$  в случае, когда импульс падает по оси  $x$ , и  $\mathbf{pd}_1 = 0$ ,  $\mathbf{pd}_2 = 2\pi \sin(\alpha)$  в случае, когда импульс падает по оси  $y$ . Как видно из рис. 3, наблюдаются значительные изменения формы и величины максимума с изменением угла изгиба цепочки. Таким образом, по интерференционной картине можно судить о дефектах, переломах, изгибах цепочки одинаковых атомов.

**4. Обобщение на дву- и трехмерные структуры.** В качестве примера влияния дефектов в регулярных двумерных наносистемах на интерференционные спектры, допускающего простое аналитическое представление, рассмотрим мишень, состоящую из двух прямоугольных регулярных решеток (подсистем), расположенных произвольным образом друг относительно друга. В узлах обеих решеток распо-

ложены одинаковые атомы. Соответствующие обозначения и общий вид такой мишени приведены на рис. 4. Нам удобно ввести две системы координат:

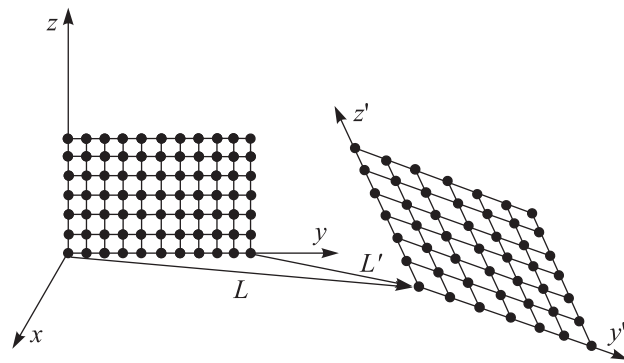


Рис. 4. Мишень, состоящая из двух регулярных непересекающихся прямоугольных решеток (подсистем)

для первой решетки – оси  $x, y, z$ , а для второй –  $x', y', z'$ . Расстояние между началами этих систем координат равно  $L$ . Период первой решетки по оси  $y$  равен  $d_1$ . Число атомов на этой оси  $N_1$ . По оси  $z$  период первой решетки равен  $d_2$ . Число атомов на этой оси  $N_2$ . В результате общее число атомов в первой решетке  $N_1 N_2$ . В системе координат  $x' y' z'$  период второй решетки по оси  $y'$  равен  $d'_1$ . Число атомов на этой оси  $N'_1$ . По оси  $z'$  период второй решетки равен  $d'_2$ . Число атомов на этой оси  $N'_2$ . В результате общее число атомов во второй решетке  $N'_1 N'_2$ . Далее рассчитаем по формуле (6) интерференционный фактор. Для этого воспользуемся полученными в [8] результатами для интерференционных факторов регулярных прямоугольных наносистем и представим интерференционный фактор дефектной мишени в виде

$$g_N(\mathbf{p}) = \frac{\sin^2(\mathbf{pd}_1 N_1/2)}{\sin^2(\mathbf{pd}_1/2)} \frac{\sin^2(\mathbf{pd}_2 N_2/2)}{\sin^2(\mathbf{pd}_2/2)} - N_1 N_2 + \frac{\sin^2(\mathbf{pd}'_1 N'_1/2)}{\sin^2(\mathbf{pd}'_1/2)} \frac{\sin^2(\mathbf{pd}'_2 N'_2/2)}{\sin^2(\mathbf{pd}'_2/2)} - N'_1 N'_2 + \Delta g_N(\mathbf{p}), \quad (15)$$

где  $N = N_1 N_2 + N'_1 N'_2$  – общее число атомов в мишени,  $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \mathbf{d}'_1, \mathbf{d}'_2$  – вектора периодов решеток, направленные по осям  $y, z, y', z'$  соответственно,  $\Delta g_N(\mathbf{p})$  – фактор, связывающий интерференцию на первой и второй решетках. Очевидно, что если  $\Delta g_N(\mathbf{p}) = 0$ , то две решетки рассеивают ультракороткий импульс независимо друг от друга. Для того чтобы рассчитать  $\Delta g_N(\mathbf{p})$ , нужно просуммировать выражение (9) по всем парам атомов, находящихся в разных решетках. Введем радиус-вектор

$\mathbf{R}_{1,n,m} = d_1(n-1)\mathbf{j} + d_2(m-1)\mathbf{k}$ , задающий положение атома первой решетки, находящегося в узле на пересечении столбца  $m$  со строкой  $n$ . Соответственно  $\mathbf{R}_{2,n',m'} = \mathbf{L} + d'_1(n'-1)\mathbf{j}' + d'_2(m'-1)\mathbf{k}'$  – радиус-вектор, задающий положение атома второй решетки, находящегося в узле с номерами  $m'$  и  $n'$ . Если ввести  $\Delta\mathbf{R}_{n,m,n',m'} = \mathbf{R}_{2,n',m'} - \mathbf{R}_{1,n,m}$ , то для расчета  $\Delta g_N(\mathbf{p})$  необходимо найти сумму

$$\Delta g_N(\mathbf{p}) = 2 \sum_{n=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \sum_{n'=1}^{N'_1} \sum_{m'=1}^{N'_2} \cos(\mathbf{p}\Delta\mathbf{R}_{n,m,n',m'}).$$

В итоге получим выражение

$$\begin{aligned} \Delta g_N(\mathbf{p}) = & 2 \frac{\sin\left(\frac{N_1\mathbf{p}\mathbf{d}_1}{2}\right) \sin\left(\frac{N_2\mathbf{p}\mathbf{d}_2}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{d}_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{d}_2}{2}\right)} \times \\ & \times \frac{\sin\left(\frac{N'_1\mathbf{p}\mathbf{d}'_1}{2}\right) \sin\left(\frac{N'_2\mathbf{p}\mathbf{d}'_2}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{d}'_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{d}'_2}{2}\right)} \times \\ & \times \cos\left[\frac{(N_1-1)\mathbf{p}\mathbf{d}_1}{2} + \frac{(N_2-1)\mathbf{p}\mathbf{d}_2}{2} + \right. \\ & \left. + \frac{(N'_1-1)\mathbf{p}\mathbf{d}'_1}{2} + \frac{(N'_2-1)\mathbf{p}\mathbf{d}'_2}{2} + \mathbf{p}\mathbf{L}\right]. \quad (16) \end{aligned}$$

Из выражения (16) видно, что если  $\mathbf{p}\mathbf{d}_1$ ,  $\mathbf{p}\mathbf{d}_2$ ,  $\mathbf{p}\mathbf{d}'_1$ ,  $\mathbf{p}\mathbf{d}'_2$  кратны  $2\pi n$  (где  $n$  – целые числа), то возникают максимумы. Это приводит к существенному изменению интерференционной картины по сравнению с двумя независимыми решетками, входящими в состав мишени. Таким образом, по интерференционной картине можно судить о разрывах и изгибах плоскости, состоящей из одинаковых атомов, поскольку она существенно зависит от фактора  $\Delta g_N(\mathbf{p})$ . Очевидно, что формулы типа (16) могут быть получены и для случаев вакансий, разрывов и искажения геометрии трехмерных регулярных прямоугольных наносистем. Однако здесь мы их не приводим из-за громоздкости

соответствующих выражений. Как уже отмечалось, в двух- и трехмерных случаях не все вакансии в регулярных наносистемах сводятся к разрывам между регулярными наносистемами. В таких случаях следует использовать формулу (10). Отметим, что это могут быть не только одномерные и прямоугольные двух- и трехмерные регулярные наноструктуры. При этом в качестве моделей различных наносистем (колец, нанотрубок, в том числе многослойных и “леса” из нанотрубок) могут быть использованы интерференционные факторы различных регулярных двух- и трехмерных наноструктур, найденные в работах [8, 9] для плоских и цилиндрических конструкций.

Работа выполнена в рамках КГЗ Министерства образования и науки РФ #3.1726.2014/К при частичной поддержке РФФИ (грант # 15-02-01894) и стипендии Президента РФ (СП-1800.2015.1).

1. J. M. Cowley, *Diffraction Physics*, North-Holland, Amsterdam (1975).
2. P. Agostini, *Rep. Prog. Phys.* **67**, 813 (2004).
3. P. V. Corkit and F. Krausz, *Nat. Phys.* **3**, 381 (2007).
4. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009).
5. А. М. Желтиков, *УФН* **181**, 33 (2011) [А. М. Zheltikov, *Phys. Usp.* **54**, 29 (2011)].
6. J. Fink, E. Schierle, E. Weschke, and J. Geck, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 056502 (2013).
7. В. И. Матвеев, Д. У. Матрасулов, *Письма в ЖЭТФ* **96**, 700 (2012).
8. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, *ЖЭТФ* **144**, 905 (2013).
9. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, *Опт. Спектроск.* **116**, 179 (2014).
10. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 677 (2015).
11. В. И. Матвеев, *ЖЭТФ* **124**, 1023 (2003).
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, М. (1988), 512 с.