Металлофиз. новейшие технол. / Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2017, т. 39, № 12, сс. 1669–1691 / DOI: 10.15407/mfint.39.12.1669
Оттиски доступны непосредственно от издателя
Фотокопирование разрешено только
в соответствии с лицензией

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ

PACS numbers: 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.Qq, 68.65.Ac

Статистична теоретична модель динамічної Бреґґової дифракції в двошаровій кристалічній системі з аморфним поверхневим шаром

С. В. Дмітрієв, С. В. Лізунова, М. Г. Толмачов*, Б. В. Шелудченко, О. С. Скакунова, В. Б. Молодкін, В. В. Лізунов, І. Е. Голентус, А. Г. Карпов*, О. Г. Войток*, В. П. Почекуєв*, С. П. Репецький**, І. Г. Вишивана**, Л. М. Скапа, О. В. Барабаш**, Г. О. Веліховський

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Акад. Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна
**ТОВ «Центр новітньої діагностики»,*
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна
***Київський національний університет імені Тараса Шевченка,*
вул. Володимирська, 60,
01033 Київ, Україна

З метою створення статистичної динамічної теорії розсіяння випромінення у багатошарових системах з різними за недосконалостями структури

Corresponding author: Serhiy Vasyl'ovych Dmitriev
E-mail: dsv2003@ukr.net

G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine
**LLC 'Centre of Advanced Diagnostics',*
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine
***Taras Shevchenko National University of Kyiv,*
60 Volodymyrska Str., UA-01033 Kyiv, Ukraine

Please cite this article as: S. V. Dmitriev, S. V. Lizunova, M. G. Tolmachev, B. V. Sheludchenko, O. S. Skakunova, V. B. Molodkin, V. V. Lizunov, I. E. Golentus, A. G. Karpov, O. G. Voitok, V. P. Pochekuev, S. P. Repetsky, I. G. Vyshyvana, L. M. Skapa, O. V. Barabash, and G. O. Velikhovskii, Statistical Theoretical Model of Dynamical Bragg Diffraction in a Two-Layer Crystalline System with an Amorphous Surface Layer, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 12: 1669–1691 (2017) (in Ukrainian), DOI: 10.15407/mfint.39.12.1669.

та складом кристалічними й аморфними шарами в якості найбільш загального та головного елементу такої теорії побудовано узагальнену теоретичну модель когерентного розсіяння в двошаровій кристалічній системі з аморфним поверхневим шаром і статистично розподіленими дефектами Кулонового типу в кожному шарі. Одержано вирази для когерентної складової відбивної здатности вказаної системи з використанням двох методів: методу підсумовування амплітуд і методу крайових умов, що уможливило встановити й описати механізм формування інтенсивности за рахунок ефектів багаторазовости розсіяння. Проведено аналіз одержаних результатів та їх адаптацію до деяких практично важливих випадків.

Ключові слова: динамічна дифракція, багаторазовість розсіяння, аморфний поверхневий шар.

For the goal of the creating of statistical dynamical theory of x-ray scattering in multilayer systems of crystalline and amorphous layers with differences in both the structure imperfections and the composition, as a main element of such a theory, the generalized theoretical model of coherent scattering in two-layer crystalline system with amorphous subsurface layer and statistically distributed Coulomb-type defects in each layer is developed. The expressions for coherent component of mentioned-system reflectivity are obtained using two methods: the method of amplitudes' summation and the method of boundary conditions. That allows revealing and describing the mechanism of intensity formation due to effects of multiple scattering.

Key words: dynamical diffraction, multiple scattering, amorphous surface layer.

С целью создания статистической динамической теории рассеяния излучения в многослойных системах с различными по несовершенствам структуры и составу кристаллическими и аморфными слоями в качестве наиболее общего и главного элемента такой теории построена обобщённая теоретическая модель когерентного рассеяния в двухслойной кристаллической системе с аморфным поверхностным слоем и статистически распределёнными дефектами кулоновского типа в каждом слое. Получены выражения для когерентной составляющей отражательной способности указанной системы с использованием двух методов: метода суммирования амплитуд и метода граничных условий, что позволило выявить и описать механизм формирования интенсивности за счёт эффектов многократности рассеяния.

Ключевые слова: динамическая дифракция, многократность диффузного рассеяния, аморфный поверхностный слой.

(Отримано 4 вересня 2017 р.)

1. ВСТУП

В сучасному матеріялознавстві значну роль відіграють композитні матеріяли, що складаються з кількох різних за фізичними властивостями шарів, зокрема, кристалічні двошарові структури, а також структури, що містять аморфний шар.

Рентґенодифракційні методи досліджень багатошарових структур [1, 2] мають цілу низку важливих з точки зору практики переваг. Такі методи є не руйнуючими, що принципово важливо у випадках, коли руйнування (щавлення) може призвести до перерозподілу чи зникнення деформацій вихідного зразка, що унеможливлює відтворення початкової структури. Також рентґенодифракційні методи є високоінформативними і дозволяють виявляти надзвичайно малі деформації (коли відносна зміна відстані між відбивальними площинами кристалу має величину порядку 10^{-5}–10^{-6} [3]) і дефекти невеликих розмірів і концентрацій [4, 5]. Крім того, за наявности коректної теоретичної моделі можна адаптувати її до таких експериментальних схем, які дозволяють проводити експресну діягностику без втрати якости [4, 5]. Створення головної складової саме такої статистичної моделі, що враховує повністю всі ефекти багатократности розсіяння, і передбачається у представленій роботі.

2. РОЗСІЯННЯ В АМОРФНОМУ ПОГЛИНАЛЬНОМУ ШАРІ

Розглянемо розсіяння випромінення в аморфній пласкопаралельній пластині (рис. 1). Будемо вважати, що сприйнятливість в аморфному шарі є в середньому постійною. Інтенсивність хвилі, що пройшла крізь шар з постійною сприйнятливістю можна записати у вигляді:

$$I = I_0 e^{-\mu_0 l_{\mathrm{am}}}, \tag{1}$$

де I_0 — інтенсивність падаючого з вакууму на шар випромінення, μ_0 — коефіцієнт фотоелектричного поглинання, $l_{\mathrm{am}} = t_{\mathrm{am}}/\gamma_0$ — довжина шляху променю в аморфному шарі, $t_{\mathrm{am}} = t_2 - t_1$ — товщина шару, $\gamma_0 = K_{\mathrm{n}}/K = \sin\theta_{\mathrm{a}}$, θ_{a} — кут падіння хвилі на аморфну пластину.

Однак для розгляду амплітуд в багатошаровій системі необхідно мати вираз не для інтенсивности, а для амплітуди хвилі на обох поверхнях аморфного шару. Представимо сприйнятливість аморфного шару $\chi_{\mathrm{a}}(\mathbf{r})$ і амплітуду індукції в ньому $\mathbf{D}_{\mathrm{a}}(\mathbf{r})$ у вигляді інтеґралів Фур'є:

$$\chi_{\mathrm{a}}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} d\mathbf{k}\chi_{\mathbf{k}\mathrm{a}} e^{-i\mathbf{kr}}, \tag{2}$$

$$\mathbf{D}_{\mathrm{a}}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} d\mathbf{k}\mathbf{D}_{\mathbf{k}\mathrm{a}} e^{-i\mathbf{kr}}, \tag{3}$$

де $\chi_{\mathbf{k}\mathrm{a}} = (2\pi)^{-3}\int_V d\mathbf{r}\chi_{\mathrm{a}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{kr}}$, $\mathbf{D}_{\mathbf{k}\mathrm{a}} = (2\pi)^{-3}\int_V d\mathbf{r}\mathbf{D}_{\mathrm{a}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{kr}}$, V, Ω — об'єми

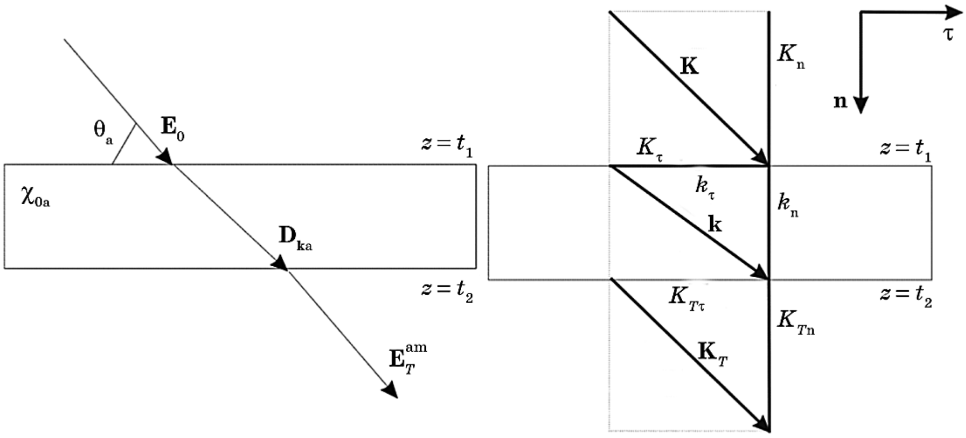

Рис. 1. Схема розсіяння в пласкопаралельній аморфній пластині (*а*) і схема відповідних хвильових векторів (*б*).

Fig. 1. Scheme of scattering in parallel-sided amorphous plate (*a*) and scheme of corresponding wave vectors (*б*).

прямого і оберненого просторів відповідно. Для вирішення задачі розсіяння Рентґенових променів в середовищі розглянемо рівняння для амплітуд:

$$\Delta\mathbf{D}_{\mathrm{a}}(\mathbf{r}) + K^2\mathbf{D}_{\mathrm{a}}(\mathbf{r}) + \mathrm{rotrot}(\chi_{\mathrm{a}}(\mathbf{r})\mathbf{D}_{\mathrm{a}}(\mathbf{r})) = 0, \qquad (4)$$

де $K = 2\pi/\lambda$ — модуль хвильового вектору падаючої хвилі у вакуумі, λ — довжина хвилі падаючого випромінення. Підставивши (2) і (3) в (4) одержимо:

$$(K^2 - k^2)\mathbf{D}_{\mathbf{k}\mathrm{a}} - \int\limits_{\Omega} d\mathbf{q}\chi_{\mathbf{q}\mathrm{a}}(\mathbf{k}\times\mathbf{k}\times\mathbf{D}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\ \mathrm{a}}) = 0. \qquad (5)$$

Враховуючи, що ця стаття обмежується лише розглядом когерентної складової розсіяння (перший етап), то в аморфному шарі $\chi_{\mathrm{a}}(\mathbf{r}) = \chi_{0\mathrm{a}} = \mathrm{const}$ і для Фур'є-компоненти $\chi_{\mathbf{q}\mathrm{a}}$ одержимо:

$$\chi_{\mathbf{q}\mathrm{a}} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_{V} d\mathbf{r}\chi_{\mathrm{a}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \frac{\chi_{0\mathrm{a}}}{(2\pi)^3}\int\limits_{V} d\mathbf{r}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \chi_{0\mathrm{a}}\delta(\mathbf{q}).$$

Таким чином, для кожного стану поляризації з (5) одержимо:

$$(K^2 - k^2)D_{\mathbf{k}\mathrm{a}} + \chi_{0\mathrm{a}}k^2D_{\mathbf{k}\mathrm{a}} = 0. \qquad (6)$$

У випадку $D_{\mathbf{k}\mathrm{a}} \neq 0$ з (6) одержимо:

$$(K^2 - k^2) + \chi_{0a} k^2 = 0. \qquad (7)$$

Рівняння (7) є дисперсійним рівнянням для визначення хвильових векторів $\mathbf{k}$ в середовищі. Враховуючи, що для Рентґенових променів $|\chi_{0a}| << 1$, з (7) можна одержати:

$$k = K(1 + \chi_{0a}/2). \qquad (8)$$

Константа χ_{0a} в (8) є комплексною, її можна представити у вигляді:

$$\chi_{0a} = \chi_{0r\,a} + i\chi_{0i\,a}. \qquad (9)$$

Слід зазначити, що $\chi_{0r\,a}, \chi_{0i\,a} < 0$.

Для знаходження амплітуди хвилі (у вакуумі), що пройшла крізь шар, скористаємось відповідними крайовими умовами:

$$D_{\mathbf{k}a} e^{-i\mathbf{kr}} = E_0 e^{-i\mathbf{Kr}}\Big|_{z=t_1}, \qquad (10)$$

$$E_T^{\mathrm{am}} e^{-i\mathbf{K}_T\mathbf{r}} = D_{\mathbf{k}a} e^{-i\mathbf{kr}}\Big|_{z=t_2}. \qquad (11)$$

Розкладемо хвильові вектори в вакуумі та в пластині на танґенційну і нормальну складові:

$$\mathbf{K} = K_\tau \mathbf{e}_\tau + K_n \mathbf{e}_n, \qquad (12)$$

$$\mathbf{k} = k_\tau \mathbf{e}_\tau + k_n \mathbf{e}_n. \qquad (13)$$

Оскільки танґенційні компоненти хвильових векторів на вхідній поверхні мають збігатися (див. рис. 1, *б*), то

$$\mathbf{K} = \mathbf{k} + (K_n - k_n)\mathbf{e}_n. \qquad (14)$$

З (8) можна одержати:

$$K_n - k_n \approx -K \frac{\chi_{0a}}{2\gamma_0}. \qquad (15)$$

Підставляючи (15) в (14), одержимо взаємозв'язок хвильових векторів в середовищі і вакуумі:

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_T = \mathbf{k} - K \frac{\chi_{0a}}{2\gamma_0} \mathbf{n}. \qquad (16)$$

Рівність хвильових векторів $\mathbf{K} = \mathbf{K}_T$ випливає з того, що $|\mathbf{K}| = |\mathbf{K}_T|$ і $K_\tau = K_{T\tau}$.

Підставивши (16) в (10) та (11), одержимо:

$$D_{\mathrm{ka}} = E_0\, \mathrm{e}^{iKt_1\chi_{0\mathrm{a}}/(2\gamma_0)}, \tag{17}$$

$$E_T^{\mathrm{am}} = D_{\mathrm{ka}} e^{-iKt_2\chi_{0\mathrm{a}}/(2\gamma_0)}. \tag{18}$$

Враховуючи (9) і (17), для (18) остаточно одержимо:

$$E_T^{\mathrm{am}} = E_0 e^{-iKt_{\mathrm{am}}\chi_{0\mathrm{a}}/(2\gamma_0)} = E_0 e^{-iKt_{\mathrm{am}}\chi_{0\mathrm{r\,a}}/(2\gamma_0)} e^{-\mu_{0\mathrm{a}}t_{\mathrm{am}}/(2\gamma_0)}, \tag{19}$$

де $\mu_{0\mathrm{a}} = K|\chi_{0\mathrm{i\ a}}|$. Як видно з (19), для інтенсивности $|E_T^{\mathrm{am}}|^2$ одержимо (1). Отже, використовуючи загальний динамічний підхід, що базується на розв'язку рівняння (4), можна одержати не лише (1), а також класичний результат, який враховує заломлення і поглинання в пласкопаралельній аморфній однорідній пластині.

3. РОЗСІЯННЯ В ДВОШАРОВІЙ АМОРФНІЙ СИСТЕМІ

Розглянемо розсіяння в системі, що складається з двох аморфних шарів a і b (рис. 2). Інтенсивність випромінення, яке пройшло крізь таку систему, можна записати аналогічно до (1). Однак у випадку, коли на кристалічній підкладинці знаходяться два аморфні шари, або один шар з неоднорідним за глибиною розподілом сприйнятливости, необхідно мати вираз для амплітуди хвилі, що пройшла через кілька аморфних шарів. Крім того, результати розгляду такої системи можуть бути використані для узагальнення моделі розсіяння в некристалічних об'єктах на випадки неоднорідного за глибиною потенціялу.

Розв'язуючи рівняння (4) в кожному шарі двошарової системи,

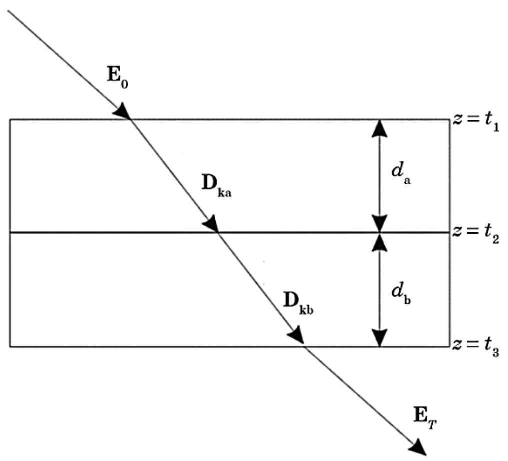

Рис. 2. Схема розсіяння в двошаровій аморфній системі.

Fig. 2. Scheme of scattering in two-layer amorphous system.

можна одержати дисперсійні рівняння, подібні до (7), куди входитиме сприйнятливість відповідного шару. З урахуванням рівности танґенційних компонент хвильових векторів на межах шарів, а також використовуючи дисперсійні рівняння, аналогічно до попереднього розгляду можна одержати наступний взаємозв'язок між хвильовими векторами падаючої і заломленої в шарі a хвиль:

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_{\mathrm{a}} - K\frac{\chi_{0\mathrm{a}}}{2\gamma_0}\mathbf{n}. \tag{20}$$

Зв'язок між хвильовим вектором $\mathbf{K}_T$ хвилі, що пройшла крізь двошарову систему, та хвильовим вектором в шарі b, з урахуванням принципу взаємности можна одержати шляхом, аналогічним до одержання (20):

$$\mathbf{K}_T = \mathbf{k}_{\mathrm{b}} - K\frac{\chi_{0\mathrm{b}}}{2\gamma_0}\mathbf{n}. \tag{21}$$

Враховуючи, що аналогічно до (16) $\mathbf{K} = \mathbf{K}_T$, для хвильових векторів в шарах a та b матимемо:

$$\mathbf{k}_{\mathrm{a}} - K\frac{\chi_{0\mathrm{a}}}{2\gamma_0}\mathbf{n} = \mathbf{k}_{\mathrm{b}} - K\frac{\chi_{0\mathrm{b}}}{2\gamma_0}\mathbf{n}. \tag{22}$$

Напишемо відповідні крайові умови (див. рис. 2):

$$D_{\mathbf{k}\mathrm{a}}e^{-i\mathbf{k}_{\mathrm{a}}\mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}}\Big|_{z=t_1}, \tag{23}$$

$$D_{\mathbf{k}\mathrm{b}}e^{-i\mathbf{k}_{\mathrm{b}}\mathbf{r}} = D_{\mathbf{k}\mathrm{a}}e^{-i\mathbf{k}_{\mathrm{a}}\mathbf{r}}\Big|_{z=t_2}, \tag{24}$$

$$E_T e^{-i\mathbf{K}_T\mathbf{r}} = D_{\mathbf{k}\mathrm{b}}e^{-i\mathbf{k}_{\mathrm{b}}\mathbf{r}}\Big|_{z=t_3}. \tag{25}$$

Підставляючи (20) в (23), одержимо:

$$D_{\mathbf{k}\mathrm{a}} = E_0 e^{iK(\chi_{0\mathrm{a}}/2\gamma_0)t_1}. \tag{26}$$

З (24) з урахуванням (22) матимемо:

$$D_{\mathbf{k}\mathrm{b}} = D_{\mathbf{k}\mathrm{a}}\exp\left(iK\left(\frac{\chi_{0\mathrm{b}}}{2\gamma_0} - \frac{\chi_{0\mathrm{a}}}{2\gamma_0}\right)t_2\right). \tag{27}$$

Підставляючи (21), (26) і (27) в (25), для амплітуди хвилі, що пройшла двошарову аморфну систему, одержимо:

$$E_T = E_0\exp\left(-iK\frac{\chi_{0\mathrm{a}}}{2\gamma_0}d_{\mathrm{a}}\right)\exp\left(-iK\frac{\chi_{0\mathrm{b}}}{2\gamma_0}d_{\mathrm{b}}\right), \tag{28}$$

де $d_a = t_2 - t_1$, $d_b = t_3 - t_2$ — товщини відповідних шарів.

Одержаний результат легко узагальнити на випадок системи, що складається з N аморфних шарів:

$$E_T^{(N)} = E_0 \exp\left(-i\frac{K}{2\gamma_0}\sum_{j=1}^{N}\chi_{0j}d_j\right). \tag{29}$$

З (29) граничним переходом $d_j \to 0$ одержимо вираз для неперервного за глибиною неоднорідного розподілу сприйнятливости $\chi_{0a}(z)$:

$$E_T^{(N)} = E_0 \exp\left(-i\frac{K}{2\gamma_0}\int_0^{t_{am}}\chi_{0a}(z)dz\right). \tag{30}$$

4. РОЗСІЯННЯ В МОНОКРИСТАЛІЧНІЙ ПЛАСКОПАРАЛЕЛЬНІЙ ПЛАСТИНІ

Для подальшого розгляду розсіяння в двошаровій системі, що включає в себе один (або кілька) кристалічних шарів, необхідно привести основні результати динамічної теорії когерентного розсіяння в пласкопаралельній пластині.

Амплітуди хвиль в кристалі можна знайти з основної системи динамічних рівнянь для випадку двохвильової дифракції [6]:

$$\begin{cases}(-2\varepsilon_0 + \chi_0)D_0 + C\chi_{-H}D_H = 0,\\ C\chi_H D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0)D_H = 0,\end{cases} \tag{31}$$

де D_0, D_H — амплітуди прямої і дифрагованої хвиль, χ_0, χ_H — Фур'є-компоненти сприйнятливости кристалу, C — поляризаційний множник ($C = 1$, $\cos(2\theta_B)$ для σ- та π-поляризації відповідно, θ_B — кут Бреґґа), ε_0, ε_H — похибки збудження.

З умови існування нетривіяльного розв'язку системи рівнянь (31) можна одержати наступне дисперсійне рівняння для знаходження помилок збудження:

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0)(-2\varepsilon_H + \chi_0) - C^2\chi_H\chi_{-H} = 0. \tag{32}$$

Враховуючи, що

$$\varepsilon_H = \varepsilon_0\gamma_H / \gamma_0 - \alpha, \tag{33}$$

де γ_0 і γ_H — направляючі косинуси падаючого і дифрагованого променів відповідно,

$$\alpha = \Delta\theta \sin(2\theta_B), \tag{34}$$

$\Delta\theta$ — кутове відхилення напрямку падаючої хвилі від напрямку, що точно задовольняє умові Вульфа–Бреґґа, з (32) можна одержати:

$$\varepsilon_0^\delta = \gamma_0 \Delta_\delta, \tag{35}$$

$$\Delta_\delta = \frac{\chi_0}{2\gamma_0} + \frac{\lambda}{2\Lambda}\left[y + (-1)^\delta \sqrt{y^2 - 1}\right], \tag{36}$$

де довжина екстинкції

$$\Lambda = \lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_{\mathbf{H}}|} / \sigma, \tag{37}$$

$$y = -(\alpha + \alpha_0)\sqrt{b} / \sigma, \tag{38}$$

$$\sigma^2 = C^2 \chi_{\mathbf{H}} \chi_{-\mathbf{H}}, \ \alpha_0 = (\chi_0/2)(1 + 1/b), \ b = \gamma_0 / |\gamma_{\mathbf{H}}|, \ \delta = 1, 2.$$

Враховуючи (33), (35) і (36), з будь-якого з рівнянь системи (31) можна одержати:

$$D_{\mathbf{H}}^\delta = c_\delta D_0^\delta, \tag{39}$$

$$c_\delta = \sqrt{b\zeta}\left(y + (-1)^\delta \sqrt{y^2 - 1}\right), \tag{40}$$

де $\zeta = (\chi_{\mathbf{H}} / \chi_{-\mathbf{H}})^{1/2}$.

Для знаходження амплітуд D_0^δ, $D_{\mathbf{H}}^\delta$ необхідно використати крайові умови, які пов'язують між собою амплітуди хвиль в кристалі і вакуумі (в геометрії дифракції за Бреґґом):

$$\sum_\delta D_0^\delta e^{-i\mathbf{K}_0^\delta \mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}}\Big|_{z=t_1}, \tag{41}$$

$$\sum_\delta D_{\mathbf{H}}^\delta e^{-i\mathbf{K}_{\mathbf{H}}^\delta \mathbf{r}} = 0\Big|_{z=t_2}. \tag{42}$$

Хвильові вектори прямої і дифрагованої хвиль в кристалі пов'язані з відповідними хвильовими векторами падаючої і дифрагованої хвиль у вакуумі співвідношеннями:

$$\mathbf{K}_0^\delta = \mathbf{K} + K(\varepsilon_0^\delta / \gamma_0)\mathbf{n} = \mathbf{K} + K\Delta_\delta \mathbf{n}, \tag{43}$$

$$\mathbf{K}_{\mathbf{H}}^\delta = \mathbf{K}'_{\mathbf{H}} + K(\varepsilon_{\mathbf{H}}^\delta / \gamma_{\mathbf{H}})\mathbf{n} = \mathbf{K}'_{\mathbf{H}} + K(\Delta_\delta - \alpha / \gamma_{\mathbf{H}})\mathbf{n}, \tag{44}$$

де $\mathbf{n}$ — внутрішня нормаль до поверхні кристалу, $\mathbf{K}'_{\mathbf{H}}$ — хвильовий вектор дифрагованої хвилі у вакуумі. З урахуванням (39), (43) і (44) з (41) і (42) матимемо:

$$\begin{cases} D_0^{(1)} e^{-iK\Delta_1 t_1} + D_0^{(2)} e^{-iK\Delta_2 t_1} = E_0, \\ c_1 D_0^{(1)} e^{-iK\Delta_1 t_2} + c_2 D_0^{(2)} e^{-iK\Delta_2 t_2} = 0. \end{cases} \quad (45)$$

З системи рівнянь (45) для амплітуд $D_0^{(1)}$ і $D_0^{(2)}$ можна одержати:

$$D_0^{\delta} = (-1)^{\delta} E_0 \frac{c_{\delta'} e^{-iK\Delta_{\delta'} d}}{c_1 e^{-iK\Delta_1 d} - c_2 e^{-iK\Delta_2 d}} e^{iK\Delta_{\delta} t_1}, \quad (46)$$

$\delta \neq \delta'$, $d = t_2 - t_1$. Для знаходження амплітуди дифрагованої хвилі у вакуумі необхідно використати відповідну крайову умову:

$$\sum_{\delta} D_{\mathbf{H}}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{\mathbf{H}}^{\delta}\mathbf{r}} = E_{\mathrm{S}} e^{-i\mathbf{K}'_{\mathbf{H}}\mathbf{r}} \Big|_{z=t_1}, \quad (47)$$

звідки з урахуванням (39) і (44):

$$E_{\mathrm{S}} = \eta(t_1) \sum_{\delta} c_{\delta} D_0^{\delta} e^{-iK\Delta_{\delta} t_1} = E_0 \eta(t_1) b\zeta \frac{e^{-iK\Delta_1 d} - e^{-iK\Delta_2 d}}{c_1 e^{-iK\Delta_1 d} - c_2 e^{-iK\Delta_2 d}}, \quad (48)$$

де

$$\eta(t_1) = \exp(iK\alpha t_1 / \gamma_{\mathbf{H}}). \quad (49)$$

Для амплітудного коефіцієнта відбивання можна записати:

$$r_{\mathbf{H}}(t_1) = \frac{E_{\mathrm{S}}}{\sqrt{b} E_0} = \eta(t_1) \sqrt{b} \zeta \frac{e^{-iK\Delta_1 d} - e^{-iK\Delta_2 d}}{c_1 e^{-iK\Delta_1 d} - c_2 e^{-iK\Delta_2 d}}. \quad (50)$$

В наближенні напівнескінченного кристалу формула (50) прийме вигляд:

$$r_{\mathbf{H}}(t_1) = \eta(t_1)(y - \mathrm{sgn}(\mathrm{Re}(y))\sqrt{y^2 - 1}). \quad (51)$$

Відбивну здатність можна обчислити за допомогою виразу:

$$R_{\mathrm{coh}}(\Delta\theta) = |r_{\mathbf{H}}(t_1)|^2. \quad (52)$$

Використовуючи крайову умову для хвилі, що пройшла крізь пласкопаралельну пластину

$$\sum_{\delta} D_0^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_0^{\delta}\mathbf{r}} = E_T e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} \Big|_{z=t_2},$$

з урахуванням (43) і (46), можна одержати вираз для коефіцієнта проходження:

$$r_0 = \frac{E_T}{E_0} = e^{-iK(\Delta_1+\Delta_2)d} \frac{c_1 - c_2}{c_1 e^{-iK\Delta_1 d} - c_2 e^{-iK\Delta_2 d}}. \tag{53}$$

Для врахування статистично розподілених дефектів необхідно у формулах (31)–(53) зробити заміни [7]:

$$C\chi_{\mathrm{H}} \to CE\chi_{\mathrm{H}} + \Delta\chi_{\mathrm{H}0},$$
$$C\chi_{-\mathrm{H}} \to CE\chi_{-\mathrm{H}} + \Delta\chi_{0\mathrm{H}},$$
$$\chi_0 \to \chi_0 + \Delta\chi_{00},$$

де $\Delta\chi_{00}$, $\Delta\chi_{0\mathrm{H}}$ і $\Delta\chi_{\mathrm{H}0}$ — дисперсійні поправки до сприйнятливостей за рахунок дифузного розсіяння за наявности в кристалі дефектів. Можна покласти $\Delta\chi_{00} \approx -i\mu_{\mathrm{ds}}/K$, $\Delta\chi_{0\mathrm{H}} = \Delta\chi_{\mathrm{H}0} \approx 0$, де μ_{ds} — коефіцієнт екстинкції за рахунок дифузного розсіяння, E — Кривоглазів фактор (статичний фактор Дебая–Валлера) [8].

При цьому слід відмітити, що у випадку кристалу з дефектами, крім когерентного розсіяння (52) з врахуванням екстинкції (μ_{ds}), також необхідно враховувати безпосередній внесок від самого дифузного розсіяння у відбивну здатність (ці результати будуть представлені в окремій роботі).

Розглянемо кінематичне наближення ($d << \Lambda$) виразів (50) і (53). Одержимо асимптотичне значення виразу (48) при $t \to 0$. В такому випадку при $|y| >> 1$ $c_1 \to 0$, $c_2 \to 2y(b\zeta)^{1/2}$, і в результаті вираз (49) зводиться до:

$$E_{\mathrm{H}}^{\mathrm{kin}} = E_0 \eta(t_1)\sqrt{b\zeta}\,\frac{1 - e^{2iA_{\mathrm{k}}y}}{2y}, \tag{54}$$

$A_{\mathrm{k}} = \pi d/\Lambda$. У випадку $|y| \sim 1$ у (48) можна провести розклад експонент за малим параметром d. Розклавши вказаний вираз з точністю до другого порядку малости d^2, одержимо:

$$E_{\mathrm{H}}^{\mathrm{kin}} = -E_0 \eta(t_1)\,\frac{\sqrt{b\zeta}}{2y}\,(2iA_{\mathrm{k}}y + (2iA_{\mathrm{k}}y)^2/2). \tag{55}$$

Враховуючи, що при $x \to 0$ $e^x - 1 \approx x + x^2/2$, вираз (55) зводиться до (54). Отже, у всьому діяпазоні зміни y вираз для динамічної амплітуди дифрагованої хвилі (48) зводиться до кінематичної амплітуди дифрагованої хвилі з врахуванням поглинання і заломлення (54) при граничному переході $d \to 0$.

Вираз (53) при $|y| >> 1$ зводиться до (19). При $|y| \sim 1$ і $d \to 0$ (53) в першому порядку малости по d зводиться до (19), тоді як в другому порядку по d з'являється екстинкційний доданок. Однак такий доданок неправильно поширювати на весь кутовий діяпазон, оскільки він діє лише поблизу Бреґґового кута. Тому, у виразі (53) можна розкладати в ряд лише експоненти, що містять Δ_1, тоді як показники експонент з Δ_2 будуть немалими при $|y| >> 1$, і їх неможна розкладати в ряд по d. Враховуючи сказане, для врахування впливу ефектів екстинкції на пряму хвилю за рахунок перетікання частини інтенсивности в дифраґований промінь доцільно користуватись загальним виразом (53).

5. РОЗСІЯННЯ В ДВОШАРОВІЙ СИСТЕМІ З АМОРФНИМ І КРИСТАЛІЧНИМ ШАРАМИ

Розглянемо розсіяння в двошаровій системі, що складається з поверхневого аморфного шару і монокристалічної підкладинки (рис. 3).

Напишемо крайову умову на вхідній поверхні:

$$D_{\mathbf{ka}} e^{-i\mathbf{kr}} = E_0 e^{-i\mathbf{Kr}}\Big|_{z=t_1}. \qquad (56)$$

Зв'язок між хвильовими векторами в вакуумі і в середовищі визначається виразом (16). Підставляючи (16) в (56), одержимо (17).

Напишемо крайову умову для падаючої хвилі на межі між аморфним шаром і кристалом:

$$\sum_{\delta} D_{0c}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_{c0}^{(\delta)}\mathbf{r}} = D_{\mathbf{ka}} e^{-i\mathbf{kr}}\Bigg|_{z=t_2}. \qquad (57)$$

Зв'язок між хвильовими векторами падаючої з аморфного шару хвилі $\mathbf{k}$ і хвилі в кристалі $\mathbf{K}_{c0}^{(\delta)}$ можна одержати наступним чином. Нехай на аморфний шар з вакууму падає хвиля $\mathbf{K}$, тоді її зв'язок з хвильовим вектором $\mathbf{k}$ в аморфному шарі визначатиметься виразом (16). Нехай хвиля з таким самим хвильовим вектором у вакуумі $\mathbf{K}$ падає на монокристалічну пластину. Тоді зв'язок хвильового век-

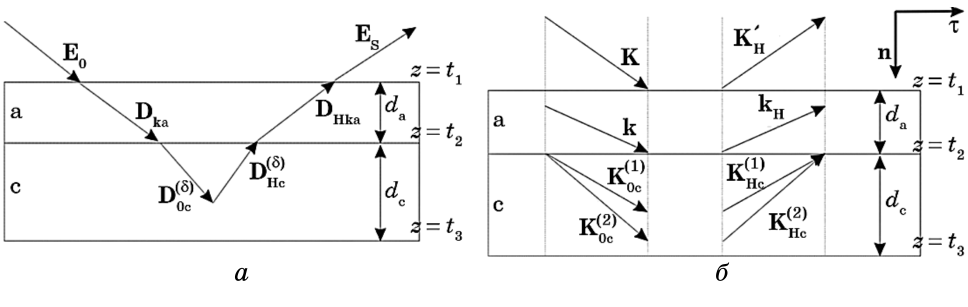

Рис. 3. Дифракція в двошаровій системі з аморфним і кристалічним шарами: схема для амплітуд (*а*), схема для хвильових векторів (*б*).

Fig. 3. Diffraction in two-layer system with amorphous and crystalline layers: scheme for amplitudes (*а*), scheme for the wave vectors (*б*).

тору $\mathbf{K}$ в вакуумі і хвильових векторів в кристалі $\mathbf{K}_0^{(\delta)}$ буде визначатись виразом (43). Прирівнюючи (16) і (43), одержимо:

$$\mathbf{K}_{0c}^{(\delta)} = \mathbf{k} - K(\Delta_a - \Delta_{c\delta})\mathbf{n}, \qquad (58)$$

де $\Delta_a = \chi_{0a}/(2\gamma_0)$.

Крайова умова для дифрагованої в кристалічному шарі хвилі на вихідній поверхні має вигляд:

$$\sum_\delta D_{\mathbf{H}c}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_{\mathbf{H}c}^{(\delta)}\mathbf{r}} = 0 \Big|_{z=t_3}, \qquad (59)$$

Зв'язок між хвильовими векторами дифрагованої хвилі в кристалі і відповідної хвилі у вакуумі, згідно з (44), можна записати у вигляді:

$$\mathbf{K}_{c\mathbf{H}}^{(\delta)} = \mathbf{K}_\mathbf{H} + K\Delta_{c\delta}\mathbf{n} - (K\alpha_c / \gamma_\mathbf{H})\mathbf{n}. \qquad (60)$$

Підставляючи (58) в (57) і (60) в (59), з урахуванням (17) і (39) одержимо:

$$\begin{cases} D_{0c}^{(1)} e^{-iK\Delta_{c1}t_2} + D_{0c}^{(2)} e^{-iK\Delta_{c2}t_2} = E_0 e^{-iK\Delta_a d_a}, \\ c_1 D_{0c}^{(1)} e^{-iK\Delta_{c1}t_3} + c_2 D_{0c}^{(2)} e^{-iK\Delta_{c2}t_3} = 0. \end{cases} \qquad (61)$$

Розв'язуючи систему (61) відносно $D_{0c}^{(1)}$ і $D_{0c}^{(2)}$, одержимо:

$$D_{0c}^{(\delta)} = (-1)^\delta E_0 e^{-iK\Delta_a d_a} \frac{c_{\delta'} e^{-iK\Delta_{c\delta'} d_c}}{c_1 e^{-iK\Delta_{c1} d_c} - c_2 e^{-iK\Delta_{c2} d_c}} e^{iK\Delta_{c\delta} t_2}. \qquad (62)$$

Напишемо крайову умову для дифрагованої хвилі на межі аморфного і кристалічного шарів:

$$D_{\mathbf{H}ka} e^{-i\mathbf{k}_\mathbf{H}\mathbf{r}} = \sum_\delta D_{\mathbf{H}c}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_{\mathbf{H}c}^{(\delta)}\mathbf{r}} \Big|_{z=t_2}. \qquad (63)$$

Використовуючи принцип взаємности, для взаємозв'язку хвильових векторів дифраґованих хвиль у вакуумі і в аморфному шарі, аналогічно до одержання (16), матимемо:

$$\mathbf{K}_\mathbf{H} = \mathbf{k}_\mathbf{H} - K\Delta_{a\mathbf{H}}\mathbf{n}, \qquad (64)$$

де $\Delta_{a\mathbf{H}} = \chi_{0a}/(2\gamma_\mathbf{H})$. Підставляючи (64) в (60), одержимо зв'язок між хвильовими векторами дифраґованих хвиль у кристалі і аморфному шарі:

$$\mathbf{K}_{c\mathbf{H}}^{(\delta)} = \mathbf{k}_\mathbf{H} - K(\Delta_{a\mathbf{H}} - \Delta_{c\delta})\mathbf{n} - (K\alpha_c / \gamma_\mathbf{H})\mathbf{n}. \qquad (65)$$

Підставляючи (65) в (63), з урахуванням (39) і (62) одержимо:

$$D_{\mathrm{Hka}} = \eta_{\mathrm{c}2} e^{iK\Delta_{\mathrm{aH}} t_2} \sum_{\delta} c_{\delta} D_{0\mathrm{c}}^{(\delta)} e^{-iK\Delta_{\mathrm{c}\delta} t_2}, \qquad (66)$$

де тут і далі

$$\eta_{nj} = \exp(iK(\alpha_n / \gamma_{\mathrm{H}}) t_j). \qquad (67)$$

Розглянемо крайову умову для дифрагованої хвилі на вхідній поверхні двошарової системи:

$$E_{\mathrm{S}} e^{-i\mathbf{K}_{\mathrm{H}}\mathbf{r}} = D_{\mathrm{Hka}} e^{-i\mathbf{k}_{\mathrm{H}}\mathbf{r}} \Big|_{z=t_1}. \qquad (68)$$

Підставляючи (64) в (68), з урахуванням (66) одержимо:

$$r_{\mathrm{Hac}}(t_2) = \frac{E_{\mathrm{S}}}{\sqrt{b} E_0} = r_{\mathrm{Hc}}(t_2) \exp\left(-iK \frac{\chi_{0\mathrm{a}}}{2\gamma} \right), \qquad (69)$$

де $1/\gamma = 1/\gamma_0 + 1/|\gamma_{\mathrm{H}}|$, $r_{\mathrm{Hc}}(t_2)$ дається виразом (50). Таким чином, вплив аморфного шару на поверхні на відбивну здатність кристалу зводиться лише до поглинання.

6. ДИФРАКЦІЯ В ДВОШАРОВІЙ КРИСТАЛІЧНІЙ СИСТЕМІ. МЕТОД ПІДСУМОВУВАННЯ АМПЛІТУД

На рисунку 4 показана схема дифракції в двошаровій кристалічній системі. Падаюча з вакууму пласка хвиля з амплітудою $\mathbf{E}_0$ потрапляє в шар k. В кристалічному шарі k хвиля дифраґує з утворенням прямого променя $\mathbf{E}_{0\mathrm{k}}^{(1)}$, що далі проходить в шар d, і відбитого променя $\mathbf{E}_{\mathrm{Hk}}^{(1)}$, який виходить у вакуум з амплітудою $\mathbf{E}_{\mathrm{H}1}$. Хвиля $\mathbf{E}_{0\mathrm{k}}^{(1)}$ дифраґує в шарі d з утворенням прямої $\mathbf{E}_{0\mathrm{d}}^{(1)}$ і відбитої $\mathbf{E}_{\mathrm{Hd}}^{(1)}$ хвиль. Хвиля $\mathbf{E}_{\mathrm{Hd}}^{(1)}$ потрапляє в шар k і знову дифраґує з утворенням відповідно прямої $\mathbf{E}_{\mathrm{Hk}}^{(2)}$ і відбитої $\mathbf{E}_{0\mathrm{k}}^{(2)}$ хвиль. Пряма хвиля утворює на поверхні хвилю з амплітудою $\mathbf{E}_{\mathrm{H}2}$. Дифраґована в шарі k хвиля $\mathbf{E}_{0\mathrm{k}}^{(2)}$ знову потрапляє в шар d, і вказаний процес перерозсіяння між шарами повторюється.

У випадку, коли шар k розсіює кінематично, можна враховувати лише процес однократного перерозсіяння, оскільки амплітуда хвилі, розсіяної в шарі k, мала в порівнянні з розсіяною в шарі d. Тоді вираз для результуючої хвилі в вакуумі зводиться до появи екстинкційного множника при амплітуді розсіюваної в шарі d хвилі. Однак, коли розсіяння в шарі k носить динамічний характер, врахування однократного перерозсіяння між шарами недостатньо. В такому випадку слід враховувати повну багатократність перерозсіяння між шарами.

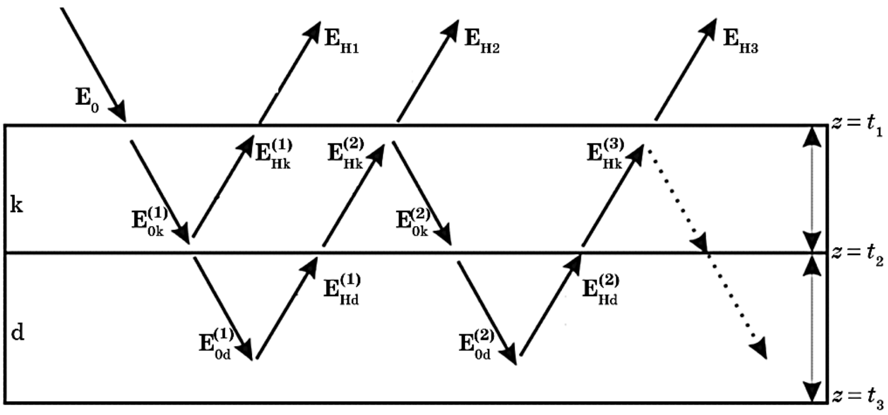

Рис. 4. Схема багатократного перерозсіяння при дифракції в двошаровій системі з кристалічними шарами k і d.

Fig. 4. Scheme of multiple scattering under diffraction in two-layer system with crystalline layers k and d.

Амплітуда хвилі $\mathbf{E}_{0\mathrm{k}}^{(1)}$, що пройшла крізь шар k (див. рис. 4):

$$E_{0\mathrm{k}}^{(1)} = E_0 r_{0\mathrm{k}}. \tag{70}$$

Введемо позначення

$$\tilde{r}_{\mathrm{Hk}} = \sqrt{b} r_{\mathrm{Hk}},\ \tilde{r}_{\mathrm{Hd}} = \sqrt{b} r_{\mathrm{Hd}}. \tag{71}$$

Амплітуда дифрагованої в шарі d хвилі:

$$E_{\mathrm{Hd}}^{(1)} = E_{0\mathrm{k}}^{(1)} \tilde{r}_{\mathrm{Hd}}(t_2) = E_0 r_{0\mathrm{k}} \tilde{r}_{\mathrm{Hd}}(t_2). \tag{72}$$

Амплітуда хвилі, що пройшла крізь шар d:

$$E_{0\mathrm{d}}^{(1)} = r_{0\mathrm{d}} E_{0\mathrm{k}}^{(1)} = r_{0\mathrm{k}} r_{0\mathrm{d}} E_0 = E_{T1}. \tag{73}$$

Для амплітуди $\mathbf{E}_{\mathrm{Hk}}^{(2)}$ необхідно користуватись виразом, аналогічним до (53), однак з врахуванням того, що у вказаному випадку вектор дифракції змінюються з **H** на –**H**. Позначимо таку амплітуду як $r_{0\mathrm{k}}^{(-)}$, тоді для $\mathbf{E}_{\mathrm{Hk}}^{(2)}$ одержимо:

$$E_{\mathrm{Hk}}^{(2)} = E_{\mathrm{Hd}}^{(1)} r_{0\mathrm{k}}^{(-)} = E_0 r_{0\mathrm{k}} \tilde{r}_{\mathrm{Hd}}(t_2) r_{0\mathrm{k}}^{(-)} = E_{\mathrm{H2}}. \tag{74}$$

Для дифрагованої в шарі k хвилі можна записати:

$$E_{\mathrm{Hk}}^{(1)} = E_0 \tilde{r}_{\mathrm{Hk}}(t_1) = E_{\mathrm{H1}}. \tag{75}$$

Таким чином, для дифрагованої хвилі у вакуумі, з урахуванням описаних вище амплітуд, з (74) і (75) одержимо:

$$E_{\text{H}}^{(2)} = E_{\text{H1}} + E_{\text{H2}} = E_0(\tilde{r}_{\text{Hk}}(t_1) + r_{0\text{k}}\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)r_{0\text{k}}^{(-)}). \quad (76)$$

Розглянемо хвилю $\mathbf{E}_{0\text{k}}^{(2)}$:

$$E_{0\text{k}}^{(2)} = E_{\text{Hd}}^{(1)}\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) = E_0 r_{0\text{k}}\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2), \quad (77)$$

де

$$\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)} = \sqrt{b^{(-)}}r_{\text{Hk}}^{(-)} = (b)^{-1/2}r_{\text{Hk}}^{(-)}.$$

Для амплітуди $\mathbf{E}_{\text{Hd}}^{(2)}$ можна одержати:

$$E_{\text{Hd}}^{(2)} = E_{0\text{k}}^{(2)}\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) = E_0 r_{0\text{k}}\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2). \quad (78)$$

Відповідно для $\mathbf{E}_{0\text{d}}^{(2)}$ і $\mathbf{E}_{0\text{d}}^{(3)}$ матимемо:

$$E_{0\text{d}}^{(2)} = E_{0\text{k}}^{(2)}r_{0\text{d}} = E_0 r_{0\text{k}}r_{0\text{d}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) = E_{T2}, \quad (79)$$

$$E_{0\text{d}}^{(3)} = E_{0\text{k}}^{(3)}r_{0\text{d}} = E_0 r_{0\text{k}}r_{0\text{d}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) = E_{T3}. \quad (80)$$

Хвиля $E_{\text{Hk}}^{(3)}$ має вигляд:

$$E_{\text{Hk}}^{(3)} = E_{\text{Hd}}^{(2)}r_{0\text{k}}^{(-)} = E_0 r_{0\text{k}}\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)r_{0\text{k}}^{(-)} = E_{\text{H3}}. \quad (81)$$

Таким чином, для трьох дифраґованих хвиль у вакуумі, згідно з (76) і (81), можна одержати:

$$\begin{gathered} E_{\text{H}}^{(3)} = E_{\text{H1}} + E_{\text{H2}} + E_{\text{H3}} = E_0[\tilde{r}_{\text{Hk}}(t_1) + r_{0\text{k}}\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)r_{0\text{k}}^{(-)} + \\ + r_{0\text{k}}\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)r_{0\text{k}}^{(-)}]. \end{gathered} \quad (82)$$

Для трьох хвиль, що пройшли крізь двошарову систему, згідно з (73), (79) і (80), матимемо:

$$E_T^{(3)} = E_{T1} + E_{T2} + E_{T3} = E_0 r_{0\text{k}}r_{0\text{d}}[1 + \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) + (\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2))^2].$$

Продовжуючи враховувати перерозсіяння більших порядків, для n-го хвильового поля можна одержати:

$$E_{\text{H}}^{(n)} = E_0(\tilde{r}_{\text{Hk}}(t_1) + r_{0\text{k}}(\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\sum_{i=1}^{n-1}(\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2))^{i-1})r_{0\text{k}}^{(-)}), \quad (83)$$

$$E_T^{(n)} = E_0 r_{0\text{k}}r_{0\text{d}}(1 + \sum_{i=1}^{n-1}(\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2)\tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2))^i). \quad (84)$$

Враховуючи повну багатократність перерозсіяння між шарами ($n \to \infty$), підсумовуючи в (83) і (84) геометричні проґресії, можна одержати:

$$E_{\mathrm{H}}^{(\infty)} = E_0 \left(\tilde{r}_{\mathrm{Hk}}(t_1) + \frac{r_{0\mathrm{k}} \tilde{r}_{\mathrm{Hd}}(t_2) r_{0\mathrm{k}}^{(-)}}{1 - \tilde{r}_{\mathrm{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\mathrm{Hk}}^{(-)}(t_2)} \right), \tag{85}$$

$$E_T^{(\infty)} = E_0 \frac{r_{0\mathrm{k}} r_{0\mathrm{d}}}{1 - \tilde{r}_{\mathrm{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\mathrm{Hk}}^{(-)}(t_2)}. \tag{86}$$

Амплітудний коефіцієнт відбивання для розглянутої двошарової системи:

$$r_{\mathrm{H}}^{(n)} = E_{\mathrm{H}}^{(n)} / (\sqrt{b} E_0). \tag{87}$$

З урахуванням (85) для (87) одержимо:

$$r_{\mathrm{H}}^{(\infty)} = E_{\mathrm{H}}^{(\infty)} / (\sqrt{b} E_0) = r_{\mathrm{Hd}}(t_2) E_{\mathrm{ext}} + r_{\mathrm{Hk}}(t_1), \tag{88}$$

де

$$E_{\mathrm{ext}} = \frac{r_{0\mathrm{k}} r_{0\mathrm{k}}^{(-)}}{1 - r_{\mathrm{Hd}}(t_2) r_{\mathrm{Hk}}^{(-)}(t_2)}. \tag{89}$$

Знайдемо зв'язок між амплітудними коефіцієнтами відбивання і проходження з від'ємним вектором дифракції і відповідними коефіцієнтами з додатним вектором дифракції. Враховуючи що

$$\mathbf{n}^{(-)} = -\mathbf{n},\ \mathbf{K}_0^{(-)} = \mathbf{K}_{\mathrm{H}},\ \mathbf{K}_{\mathrm{H}}^{(-)} = \mathbf{K}_0,\ \alpha_{\mathrm{k}}^{(-)} = b\alpha_{\mathrm{k}},\ \zeta_{\mathrm{k}}^{(-)} = 1/\zeta_{\mathrm{k}}, \tag{90}$$

одержимо:

$$\gamma_0^{(-)} = \frac{\mathbf{K}_0^{(-)} \mathbf{n}^{(-)}}{K} = -\frac{\mathbf{K}_{\mathrm{H}} \mathbf{n}}{K} = -\gamma_{\mathrm{H}},\ \gamma_{\mathrm{H}}^{(-)} = \frac{\mathbf{K}_{\mathrm{H}}^{(-)} \mathbf{n}^{(-)}}{K} = -\frac{\mathbf{K}_0 \mathbf{n}}{K} = -\gamma_0,$$

$$b^{(-)} = 1/b,\ y_{\mathrm{k}}^{(-)} = y_{\mathrm{k}},\ c_{\delta\mathrm{k}}^{(-)} = c_{\delta\mathrm{k}} / (b\zeta_{\mathrm{k}}),\ \Delta_{\delta\mathrm{k}}^{(-)} = \Delta_{\delta\mathrm{k}} - \frac{\chi_0}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_{\mathrm{H}}} \right),$$

$$t_i^{(-)} = \mathbf{r}\mathbf{n}^{(-)} \Big|_{z=t_i} = -t_i,\ d_{\mathrm{k}}^{(-)} = t_1^{(-)} - t_2^{(-)} = t_2 - t_1 = d_{\mathrm{k}}. \tag{91}$$

Таким чином, для амплітудних коефіцієнтів одержимо:

$$r_{\mathrm{Hk}}^{(-)} = \frac{r_{\mathrm{Hk}}^0}{\zeta_{\mathrm{k}} \eta_{\mathrm{k}2}},\ r_{0\mathrm{k}}^{(-)} = r_{0\mathrm{k}} \exp\left(iK \frac{\chi_0}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_{\mathrm{H}}} \right) d_{\mathrm{k}} \right). \tag{92}$$

Тоді вираз (88) можна записати у вигляді:

$$r_{\mathrm{H}}^{(\infty)} = \eta_{\mathrm{k}1} \frac{r_{\mathrm{Hk}}^{0} + (\eta_{\mathrm{d}2} / \eta_{\mathrm{k}2}) r_{\mathrm{Hd}}^{0} (r_{0\mathrm{k}}^{2} e^{2i\rho_{\mathrm{k}}} - (r_{\mathrm{Hk}}^{0})^{2} / \zeta_{\mathrm{k}})}{1 - (\eta_{\mathrm{d}2} / (\zeta_{\mathrm{k}} \eta_{\mathrm{k}2})) r_{\mathrm{Hk}}^{0} r_{\mathrm{Hd}}^{0}}, \qquad (93)$$

$$\rho_{\mathrm{k}} = \frac{K}{2} \left[\frac{\chi_{0\mathrm{k}}}{2} \left(\frac{1}{\gamma_{0}} + \frac{1}{\gamma_{\mathrm{H}}} \right) + \frac{\alpha_{\mathrm{k}}}{\gamma_{\mathrm{H}}} \right] d_{\mathrm{k}}, \; r_{\mathrm{H}L}^{0} = r_{\mathrm{H}L}(0),$$

де відбивна здатність $r_{\mathrm{H}L}(t)$ шару L визначається виразом (50).

Множник E_{ext} в (88) описує вплив шару k на дифракцію в шарі d. При цьому, якщо шар k досить тонкий ($d_{\mathrm{k}} << \Lambda$) і для r_{Hk} можна використати вираз (54), то вираз (89), з урахуванням співвідношення між амплітудними коефіцієнтами відбивання і проходження (106), можна записати у вигляді:

$$E_{\mathrm{ext}} = E_{\mathrm{a}} E_{\mathrm{e}} E_{\mathrm{m}}, \; E_{\mathrm{a}} = \exp(-iKd_{\mathrm{k}} \chi_{0\mathrm{k}} / (2\gamma)), \qquad (94)$$

$$E_{\mathrm{e}} = \eta_{\mathrm{d}2} (1 + (r_{\mathrm{Hk}}^{0})^{2} e^{-2iA_{\mathrm{k}} y_{\mathrm{k}}} / \zeta_{\mathrm{k}}), \; E_{\mathrm{m}} = (1 - (\eta_{\mathrm{d}2} / (\zeta_{\mathrm{k}} \eta_{\mathrm{k}2})) r_{\mathrm{Hk}}^{0} r_{\mathrm{Hd}}^{0})^{-1}.$$

Отже, вплив шару k на дифракцію в шарі d відбувається через три механізми, відображені множниками у виразі (94). Перший

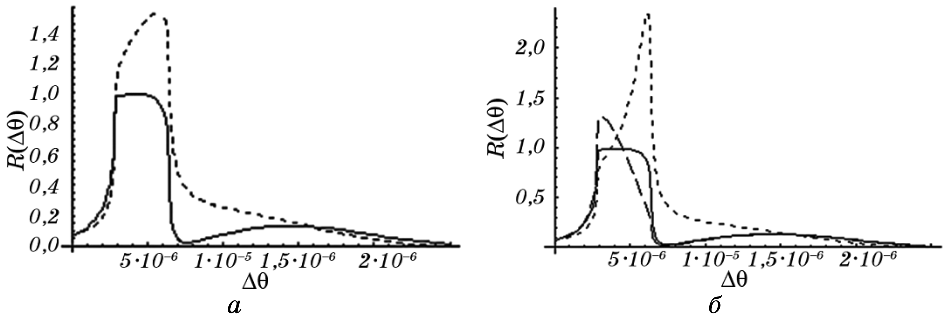

Рис. 5. Диференційна відбивна здатність двошарової кристалічної системи з малою нормальною деформацією в першому шарі: відбивна здатність з урахуванням всіх механізмів розсіяння в двошаровій системі (суцільна лінія), відбивна здатність з урахуванням лише поглинання в першому шарі (пунктирна лінія) (*а*); відбивна здатність з урахуванням всіх механізмів розсіяння в двошаровій системі (суцільна лінія), без врахування багатократного перерозсіяння між шарами (широкий пунктир), без врахування екстинкції (дрібний пунктир) (*б*).

Fig. 5. Differential reflectivity of two-layer crystalline system with small normal deformation in the first layer: reflectivity, that includes of all scattering mechanisms for two-layer system (solid line), reflectivity, that includes only absorption in the first layer (dotted line) (*a*); reflectivity, that includes of all scattering mechanisms in two-layer system (solid line), excluding multiple scattering between layers (dashed line), excluding extinction (dotted line) (*б*).

множник E_a відповідає за фотоелектричне поглинання в шарі k, другий множник E_e описує екстинкцію за рахунок дифракції в шарі k хвилі, падаючої на шар d. Третій множник, як видно із (83) і (85), описує повну багатократність перерозсіяння між шарами d і k.

На рисунку 5 показано кутові залежності диференційної відбивної здатности в двошаровій кристалічній системі, в якій шар k відрізняється від шару d малою нормальною деформацією. Розрахунки проведено для рефлексу (440), випромінення MoK_α, товщина деформованого шару $t_k = 2$ мкм, добавка до кутової змінної за рахунок нормальної деформації $\alpha_d - \alpha_k = 5\cdot 10^{-6}$. Як видно, вплив описаних вище механізмів екстинкції та багатократности перерозсіяння є суттєвим. При цьому, при збільшенні величини деформації такий влив зменшується, і навпаки.

7. ДИФРАКЦІЯ В ДВОШАРОВІЙ КРИСТАЛІЧНІЙ СИСТЕМІ. МЕТОД КРАЙОВИХ УМОВ

Крайові умови для амплітуд (рис. 6) на межах поділу шарів такі:

$$\sum_\delta D_{0\mathrm{k}}^\delta e^{-i\mathbf{K}_{0\mathrm{k}}^\delta \mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}}\Big|_{z=t_1}, \tag{95}$$

$$E_\mathrm{S} e^{-i\mathbf{K}'_\mathbf{H}\mathbf{r}} = \sum_\delta D_{\mathbf{H}\mathrm{k}}^\delta e^{-i\mathbf{K}_{\mathbf{H}\mathrm{k}}^\delta \mathbf{r}}\Big|_{z=t_1}, \tag{96}$$

$$\sum_\delta D_{0\mathrm{d}}^\delta e^{-i\mathbf{K}_{0\mathrm{d}}^\delta \mathbf{r}} = \sum_\delta D_{0\mathrm{k}}^\delta e^{-i\mathbf{K}_{0\mathrm{k}}^\delta \mathbf{r}}\Big|_{z=t_2}, \tag{97}$$

$$\sum_\delta D_{\mathbf{H}\mathrm{k}}^\delta e^{-i\mathbf{K}_{\mathbf{H}\mathrm{k}}^\delta \mathbf{r}} = \sum_\delta D_{\mathbf{H}\mathrm{d}}^\delta e^{-i\mathbf{K}_{\mathbf{H}\mathrm{d}}^\delta \mathbf{r}}\Big|_{z=t_2}, \tag{98}$$

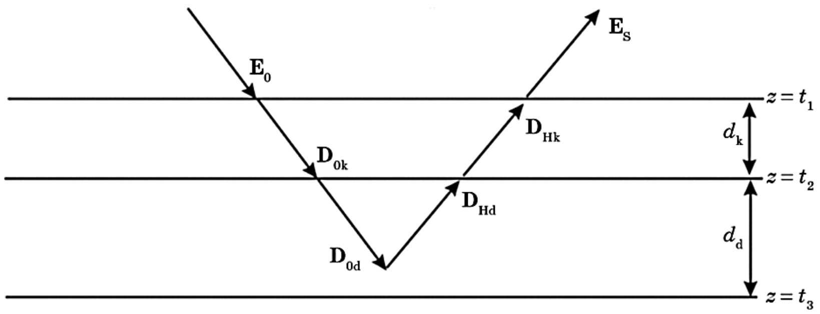

Рис. 6. Амплітуди хвильового поля в двошаровій кристалічній системі.

Fig. 6. Amplitudes of wave field in two-layer crystalline system.

$$\sum_{\delta} D^{\delta}_{\mathbf{H}\mathrm{d}} e^{-i\mathbf{K}^{\delta}_{\mathbf{H}\mathrm{d}}\mathbf{r}} = 0\Big|_{z=t_3}. \tag{99}$$

Тут і далі індексами k і d позначатимемо величини в першому і другому шарах відповідно. З умов (95) і (97)–(99) напишемо наступну систему рівнянь для визначення амплітуд $D^{(1)}_{0\mathrm{k}}$, $D^{(2)}_{0\mathrm{k}}$, $D^{(1)}_{0\mathrm{d}}$ і $D^{(2)}_{0\mathrm{d}}$:

$$\begin{cases} D^{(1)}_{0\mathrm{k}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}1}t_1} + D^{(2)}_{0\mathrm{k}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}2}t_1} = E_0, \\ D^{(1)}_{0\mathrm{d}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}1}t_2} + D^{(2)}_{0\mathrm{d}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}2}t_2} = D^{(1)}_{0\mathrm{k}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}1}t_2} + D^{(2)}_{0\mathrm{k}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}2}t_2}, \\ \eta_{\mathrm{k}2}(c_{\mathrm{k}1} D^{(1)}_{0\mathrm{k}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}1}t_2} + c_{\mathrm{k}2} D^{(2)}_{0\mathrm{k}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}2}t_2}) = \eta_{\mathrm{d}2}(c_{\mathrm{d}1} D^{(1)}_{0\mathrm{d}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}1}t_2} + \\ \qquad\qquad + c_{\mathrm{d}2} D^{(2)}_{0\mathrm{d}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}2}t_2}), \\ c_{\mathrm{d}1} D^{(1)}_{0\mathrm{d}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}1}t_3} + c_{\mathrm{d}2} D^{(2)}_{0\mathrm{d}} e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}2}t_3} = 0. \end{cases} \tag{100}$$

Введемо для скорочення записів позначення:

$$e_{\mathrm{k}\delta n} = e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}\delta}t_n},\; e_{\mathrm{d}\delta n} = e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}\delta}t_n}.$$

Тоді систему рівнянь (100) можна записати у вигляді:

$$\begin{pmatrix} e_{\mathrm{k}11} & e_{\mathrm{k}21} & 0 & 0 \\ e_{\mathrm{k}12} & e_{\mathrm{k}22} & -e_{\mathrm{d}12} & -e_{\mathrm{d}22} \\ \eta_{\mathrm{k}2}c_{\mathrm{k}1}e_{\mathrm{k}12} & \eta_{\mathrm{k}2}c_{\mathrm{k}2}e_{\mathrm{k}22} & -\eta_{\mathrm{d}2}c_{\mathrm{d}1}e_{\mathrm{d}12} & -\eta_{\mathrm{d}2}c_{\mathrm{d}2}e_{\mathrm{d}22} \\ 0 & 0 & c_{\mathrm{d}1}e_{\mathrm{d}13} & c_{\mathrm{d}2}e_{\mathrm{d}23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^{(1)}_{0\mathrm{k}} \\ D^{(2)}_{0\mathrm{k}} \\ D^{(1)}_{0\mathrm{d}} \\ D^{(1)}_{0\mathrm{d}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{101}$$

З (101) для $D^{(1)}_{0\mathrm{k}}$ і $D^{(2)}_{0\mathrm{k}}$ можна одержати:

$$D^{(1)}_{0\mathrm{k}} = E_0 \frac{e_{\mathrm{k}2\mathrm{k}}}{e_{\mathrm{k}11}} \frac{(\eta_{\mathrm{d}2}\sqrt{b}r^0_{\mathbf{H}\mathrm{d}} - c_{\mathrm{k}2}\eta_{\mathrm{k}2})}{(c_{\mathrm{k}1}e_{\mathrm{k}1\mathrm{k}} - c_{\mathrm{k}2}e_{\mathrm{k}2\mathrm{k}})(\eta_{\mathrm{k}2} - (\eta_{\mathrm{d}2}/\zeta_{\mathrm{k}})r^0_{\mathbf{H}\mathrm{k}}r^0_{\mathbf{H}\mathrm{d}})}, \tag{102}$$

$$D^{(2)}_{0\mathrm{k}} = E_0 \frac{e_{\mathrm{k}1\mathrm{k}}}{e_{\mathrm{k}21}} \frac{c_{\mathrm{k}1}\eta_{\mathrm{k}2} - \eta_{\mathrm{d}2}\sqrt{b}r^0_{\mathbf{H}\mathrm{d}}}{(c_{\mathrm{k}1}e_{\mathrm{k}1\mathrm{k}} - c_{\mathrm{k}2}e_{\mathrm{k}2\mathrm{k}})(\eta_{\mathrm{k}2} - (\eta_{\mathrm{d}2}/\zeta_{\mathrm{k}})r^0_{\mathbf{H}\mathrm{k}}r^0_{\mathbf{H}\mathrm{d}})}, \tag{103}$$

де

$$e_{\mathrm{d}\delta\mathrm{d}} = e_{\mathrm{d}\delta 3}/e_{\mathrm{d}\delta 2} = e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}\delta}(t_3-t_2)} = e^{-iK\Delta_{\mathrm{d}\delta}d_{\mathrm{d}}},\; e_{\mathrm{k}\delta\mathrm{k}} = e_{\mathrm{k}\delta 2}/e_{\mathrm{k}\delta 1} = e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}\delta}(t_2-t_1)} = e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}\delta}d_{\mathrm{k}}},$$

d_{k} і d_{d} — товщини шарів k і d відповідно.

Тепер використаємо крайову умову (96), з якої, з урахуванням (39) і (44), можна одержати:

$$E_{\mathrm{S}} = \eta_{\mathrm{k}1}c_{\mathrm{k}1}D^{(1)}_{0\mathrm{k}}e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}1}t_1} + \eta_{\mathrm{k}1}c_{\mathrm{k}2}D^{(2)}_{0\mathrm{k}}e^{-iK\Delta_{\mathrm{k}2}t_1}. \tag{104}$$

Підставляючи (102) і (103) в (104), одержимо:

$$r_H = \frac{E_S}{\sqrt{b}E_0} = \eta_{k1}\frac{r_{Hk}^0 + r_{Hd}^0(\eta_{d2}/\eta_{k2})(1 - 2y_k r_{Hk}^0/\sqrt{\zeta_k})}{1 - (\eta_{d2}/(\zeta_k\eta_{k2}))r_{Hk}^0 r_{Hd}^0}. \quad (105)$$

Враховуючи справедливість рівности

$$r_{0k}^2 e^{2i\rho_k} = (r_{Hk}^0)^2/\zeta_k - 2y_k r_{Hk}^0/\sqrt{\zeta_k} + 1, \quad (106)$$

вираз (105) зводиться до (93).

8. ВИСНОВКИ

В результаті проведеного аналізу механізмів формування статистичної динамічної картини Бреґґового розсіяння у багатошарових системах на основі використання побудованої моделі такого розсіяння для визначаючих вказані механізми головних складових цих систем, а саме для двошарових кристалічних систем з аморфним поверхневим шаром, встановлено наступне.

Теоретичні моделі, які описують розсіяння у системі шарів шляхом складання амплітуд дифраґованих окремо, наприклад, у кінематично та динамічно розсіювальних шарах хвиль, можуть використовуватись лише у випадках, коли товщина кінематично розсіювального шару складає лише декілька відсотків від довжини екстинкції.

При цьому, коли вказана товщина досягає або перевищує десятки відсотків від довжини екстинкції, суттєвими стають ефекти екстинкції за рахунок кінематичної дифракції у першому шарі променя, що проходить у другий шар, а також ефекти багатократности перерозсіяння між шарами.

В останньому випадку необхідно використовувати створену у представленій роботі статистичну динамічну модель, яка враховує відмічені ефекти шляхом розв'язання загального хвильового рівняння для Рентґенових хвиль в середовищі з використанням відповідних крайових умов як на поверхні двошарової системи, так і на межі поділу шарів.

При цьому дана модель при зростанні товщини першого шару до величин, рівних або більших довжини екстинкції, описує ефекти повного пригнічення екстинкцією як променя, що проходив при менших товщинах у другий шар в області кутів Бреґґової дифракції, так і ефектів багатократного перерозсіяння між шарами, якщо бреґґівські кути розсіяння у шарах однакові, а дефекти у шарах відсутні, тобто в такому випадку працює лише перший шар.

Поява дефектів та дифузного розсіяння може суттєво змінити всі обговорені параметри, умови та ефекти, але відповідну теоретичну модель буде представлено в окремій роботі.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. P. F. Fewster, *Rep. Prog. Phys.*, **59**: 1339 (1996).
2. U. Pietsch, V. Holy, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering. From Thin Films to Lateral Nanostructures* (New York: Springer-Verlag: 2004).
3. A. M. Afanasev, M. V. Kovalchuk. E. K. Kovev, and V. G. Kohn, *phys. status solidi (a)*, **42**: 415 (1977).
4. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаухов, В. Ф. Мачулин, В. Е. Сторижко, Э. Х. Мухамеджанов, А. И. Низкова, С. В. Лизунова, Е. Н. Кисловский, С. И. Олиховский, Б. В. Шелудченко, С. В. Дмитриев, Е. С. Скакунова, В. В. Молодкин, В. А. Бушуев, Р. Н. Кютт, Б. С. Карамурзов, Т. И. Оранова, Ю. П. Хапачев, *Основы динамической высокоразрешающей дифрактометрии функциональных материалов* (Нальчик: Кабардино-Балкарский университет: 2013).
5. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаухов, В. Е. Сторижко, С. В. Лизунова, С. В. Дмитриев, А. И. Низкова, Е. Н. Кисловский, В. В. Молодкин, Е. В. Первак, А. А. Катасонов, Е. С. Скакунова, Б. С. Карамурзов, А. А. Дышеков, А. Н. Багов, Т. И. Оранова, Ю. П. Хапачев, *Основы интегральной многопараметрической диффузнодинамической дифрактометрии* (Нальчик: Кабардино-Балкарский университет: 2013).
6. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика* (Москва: Наука: 1982).
7. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988).
8. С. В. Дмитриев, Р. В. Лехняк, В. Б. Молодкин, В. В. Лизунов, Л. Н. Скапа, Е. С. Скакунова, С. В. Лизунова, С. И. Олиховский, Е. Г. Лень, Н. Г. Толмачёв, Б. В. Шелудченко, Е. В. Фузик, Г. О. Велиховский, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 9: 1169 (2015).
9. T. Vreeland, A. Dommann. C.-J. Tsai, and M.-A. Nicolet, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **130**: 1989 (2011).

REFERENCES

1. P. F. Fewster, *Rep. Prog. Phys.*, **59**: 1339 (1996).
2. U. Pietsch, V. Holy, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering. From Thin Films to Lateral Nanostructures* (New York: Springer-Verlag: 2004).
3. A. M. Afanasev, M. V. Kovalchuk. E. K. Kovev, and V. G. Kohn, *phys. status solidi (a)*, **42**: 415 (1977).
4. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov, V. F. Machulin, V. E. Storizhko, E. Kh. Mukhamedzhanov, A. I. Nizkova, S. V. Lizunova, E. N. Kislovskiy, S. I. Olikhovskiy, B. V. Sheludchenko, S. V. Dmitriev, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, V. V. Lizunov, V. A. Bushuev, R. N. Kyutt, B. S. Karamurzov, A. A. Dyshekov, T. I. Oranova, and Yu. P. Khapachev, *Osnovy Dinamicheskoy Vysokorazreshayushchey Difraktometrii Funktsional'nykh Materialov* [Fundamentals of Dynamical High-Resolution Diffractometry of Functional Materials] (Nal'chik: Kabardino-Balkarskiy Universitet: 2013) (in Russian).
5. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov, V. E. Storizhko, S. V. Lizunova, S. V. Dmitriev, A. I. Nizkova, E. N. Kislovskii, V. V. Molodkin,

E. V. Pervak, A. A. Katasonov, V. V. Lizunov, E. S. Skakunova, B. S. Karamurzov, A. A. Dyshekov, A. N. Bagov, T. I. Oranova, and Yu. P. Khapachev, *Osnovy Integral'noy Mnogoparametricheskoy Diffuznodinamicheskoy Difraktometrii* [Fundamentals of Integrated Multiparametric Diffuse-Dynamical Diffractometry] (Nal'chik: Kabardino-Balkarskiy Universitet: 2013) (in Russian).

6. Z. G. Pinsker, *Rentgenovskaya Kristallooptika* [X-ray Crystal Optics] (Moscow: Nauka: 1982) (in Russian).
7. L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, and M. E. Osinovskiy, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey Real'nymi Kristallami* [Dynamical X-Ray Scattering by Real Crystals] (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).
8. S. V. Dmitriev, R. V. Lekhnyak, V. B. Molodkin, V. V. Lizunov, L. M. Skapa, O. S. Skakunova, S. V. Lizunova, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, M. G. Tolmachyov, B. V. Sheludchenko, K. V. Fuzik, and G. O. Velikhovskii, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 9: 1169 (2015) (in Russian).
9. T. Vreeland, A. Dommann. C.-J. Tsai, and M.-A. Nicolet, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **130**: 1989 (2011).