

PACS numbers: 61.10.Dp, 61.10.Kw, 61.46.+w, 61.72.Dd, 61.72.Ff, 81.70.Ex

Интегральная дифрактометрия наноразмерных дефектов в упруго изогнутом монокристалле

А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

С целью создания новых высокоинформативных методов диагностики случайно распределенных наноразмерных дефектов (СРНД), которые не могут наблюдаться традиционными неразрушающими методами, такими, как рентгеновская топография, для которой такие наноразмерные в одном из измерений либо во всех трех измерениях дефекты оказываются за пределами чувствительности метода, разработаны физические основы метода деформационных зависимостей полной интегральной отражательной способности (ПИОС), которая оказалась уникально чувствительной к СРНД. Впервые теоретически и экспериментально доказано наличие зависимостей от однородной упругой макроскопической деформации интегральной интенсивности диффузного рассеяния, экстинкционных факторов или коэффициентов экстинкции, обусловленных рассеянием на дефектах, как для когерентной (μ_{ds}), так и для диффузной (μ^*) составляющих ПИОС и эффективного статического фактора Дебая–Валлера, показатель которого считается пропорциональным интегральной интенсивности диффузного рассеяния. Установлена природа возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния упругих деформаций (УД) и СРНД в объеме динамически рассеивающего монокристалла на величину ПИОС при различной степени асимметрии отражений, которая позволяет существенно усиливать эффект влияния УД на ПИОС. Показано, что неаддитивность совместного влияния СРНД и УД на величину ПИОС Лауэ-рефлексов свидетельствует о существенной роли эффектов экстинкции из-за рассеяния на СРНД и об относительном росте их влияния на ПИОС при возрастании УД, что обеспечивается, например, присутствием в исследуемом монокристалле крупных в двух измерениях СРНД, влияние которых на величину ПИОС оказывается, по отмеченным причинам, сравнимым с влиянием упругой деформации при любой силе изгиба и при любой степени асимметрии используемых Лауэ-рефлексов. Мелкие дефекты при обычно достаточно низких их концентрациях из-за слабого проявления для них указанных экстинкционных эффектов приводят к аддитивному влиянию СРНД и УД на ПИОС при любой степени асимметрии.

рии отражений. Доказана возможность разделения влияния на ПИОС СРНД и УД путем факторизации выражений для ПИОС на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. В том числе впервые деформационные поправки к факторам экстинкции деформационных зависимостей Брегговской и диффузной составляющих ПИОС упруго изогнутых монокристаллов с микродефектами феноменологически также факторизованы на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. При этом найдена в явном виде зависимость указанных поправок от характеристик СРНД. Это впервые обеспечило возможность адекватного количественного определения характеристик СРНД путем подгонки теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС.

З метою створення нових високоінформативних методів діагностики випадково розподілених нанорозмірних дефектів (ВРНД), які не можна спостерігати традиційними неруйнівними методами, такими, як Рентгенова топографія, для якої такі нанорозмірні в одному з вимірів або в усіх трьох вимірах дефекти виявляються за межами чутливості методу, розроблено фізичні основи методу деформаційних залежностей повної інтегральної відбивної здатності (ПІВЗ), яка виявилася унікально чутливою до СРНД. Вперше теоретично і експериментально доведено наявність залежностей від однорідної пружної макроскопічної деформації інтегральної інтенсивності дифузного розсіювання, екстинкційних факторів чи коефіцієнтів екстинкції, обумовлених розсіюванням на дефектах, як для когерентної (μ_{as}), так і для дифузної (μ^*) складових ПІВЗ та ефективного статичного фактору Дебая–Валлера, показник якого вважається пропорційним до інтегральної інтенсивності дифузного розсіювання. Встановлено природу можливих механізмів як адитивного, так і неадитивного впливу пружних деформацій (ПД) та ВРНД в об'ємі динамічно розсіювального монокристалу на величину ПІВЗ при різному ступені асиметрії відбиттів, яка дозволяє суттєво посилювати ефект впливу ПД на ПІВЗ. Показано, що неадитивність сумісного впливу ВРНД і ПД на величину ПІВЗ Ляве-рефлексів свідчить про суттєву роль ефектів екстинкції через розсіювання на ВРНД та про відносне зростання їх впливу на ПІВЗ при зростанні ПД, що забезпечується, наприклад, присутністю в досліджуваному монокристалі крупних у двох вимірах ВРНД, вплив яких на величину ПІВЗ виявляється за вказаними причинами порівнюваним із впливом пружної деформації при будь-якій силі вигинання та при будь-якому ступені асиметрії Ляве-рефлексів, що використовуються. Дрібні дефекти при звичайно достатньо низьких їх концентраціях через слабкий прояв для них вказаних екстинкційних ефектів призводять до адитивного впливу ВРНД і ПД на ПІВЗ при будь-якому ступені асиметрії відбиттів. Доведено можливість розділення впливу на ПІВЗ ВРНД і ПД шляхом факторизації виразів для ПІВЗ на множники, що залежать тільки від ВРНД і тільки від ПД. В тому числі вперше деформаційні поправки до факторів екстинкції деформаційних залежностей Бреґгової та дифузної складових ПІВЗ пружно вигнутих монокристалів з мікродефектами феноменологічно також факторизовано на множники, що залежать тільки від ВРНД і тільки від ПД. При цьому знайдено в явному вигляді залежність вказаних поправок від характеристик ВРНД. Це вперше забезпечило можливість адекватного кількісного визначення характеристик ВРНД шляхом припасовування

теоретичних і експериментальних деформаційних залежностей ПІВЗ.

With the purpose of development of the new high-informative diagnostic techniques for the determination of the randomly distributed nanoscale defects (RDND), which are invisible by tradition non-destructive methods such as the x-ray topography, for which such small defects in one dimension or in three dimensions are appeared outside the method sensitivity limits, the basic physics are developed for the method of the strain-dependent total integrated reflecting power (TIRP), which appears unique sensitive to RDND. For the first time, the presence of uniform elastic-strain dependence is theoretically and experimentally proved for the diffuse-scattering integral intensity, the extinction coefficients caused by the scattering on microdefects, for both coherent (μ_{ds}) and diffuse (μ^*) components of TIRP and effective static Debye–Waller factor with index, which is considered to be proportional to the integrated intensity of diffuse scattering. The nature of possible mechanisms of both additive and nonadditive influence of the elastic strains (ES) and RDND on the TIRP is revealed at the various degrees of the reflection asymmetry, which gives the possibility of the essential strengthening of the ES influence on the TIRP. As shown, the non-additivity of the mutual influence of the RDND and ES on the TIRP value of the Laue reflections is evidence of the presence of large (in two dimensions) RDND. The large (in two dimensions) RDND influence on the TIRP value becomes comparable with the elastic-strain influence at the any bending strength and at the any asymmetry degree of the Laue reflections at issue due to the essential importance of extinction effects caused by the scattering at those RDND and due to the relative rise of their influence on the TIRP with the ES increase. Small (in three dimensions) defects at the any degree of the reflection asymmetry cause the additive influence of the RDND and ES on the TIRP value due to the weak manifestation of the mentioned extinction effects for such defects. The possibility is proved for separation of the influence of RDND and only ES on the TIRP. These influences are separated by division of the expressions for TIRP into the factors, which are dependent only on the RDND characteristics and only on ES. In addition, for the first time, the corrections for the strain dependences of the Bragg and diffuse TIRP contributions are phenomenologically separated into factors, which are dependent only on the RDND characteristics and only on ES. In this case, the mentioned-corrections' dependence on the RDND characteristics is found in an explicit form. For the first time, this provides for the feasibility of the adequate quantitative determination of the RDND characteristics by the fitting of the theoretical and experimental strain dependences of TIRP.

Ключевые слова: рентгеновские лучи, Лауэ-дифракция, монокристалл, микродефект, упругий изгиб.

(Получено 29 декабря 2003 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что для образцов с дефектами характер поведения зависи-

мостей ПИОС от радиуса кривизны (ρ) упругого цилиндрического изгиба $R_i(1/\rho)$, присущий упруго изогнутым совершенным кристаллам [12], качественно сохраняется во всем рассмотренном интервале изменения деформации (кривизны $1/\rho$), т. е. как и в случае совершенных кристаллов, кривые являются немонокотонными с минимумом при отрицательных деформациях (вектор дифракции направлен от центра кривизны дифракционной плоскости). С ростом величины упругой деформации по обе стороны от этого минимума происходят сначала параболическое, а затем линейное изменения значений R_i . Однако «скорость» возрастания зависимости $R_i(1/\rho)$ до и после минимума резко уменьшается с ростом степени искажений, обусловленных дефектами, по сравнению с совершенным (без дефектов) кристаллом. Чувствительность зависимостей $R_i(1/\rho)$ к дефектам кристаллической решетки (по мере роста уровня искажений кристаллов кривые $R_i(1/\rho)$ проявляют тенденцию к распрямлению) позволяет использовать указанные зависимости для получения характеристик СРНД.

С точки зрения получения наиболее общих сведений об одновременном влиянии однородного упругого изгиба и локализованных полей дефектов на рассеяние РЛ наибольший интерес представляет изучение приближения тонкого ($\mu_0 t_0 \leq 1$, μ_0 — коэффициент фотоэлектрического поглощения, t_0 — толщина кристалла) кристалла, в котором учитывается вклад двух типов волновых полей.

Анализ литературных данных, полученных в таком приближении, показывает, что зависимость ПИОС от градиента деформации B в идеальных кристаллах можно условно разбить на три области, а именно: слабую, промежуточную ($B \leq 1$) и сильную ($B > 1$). Для слабого и промежуточного уровней деформации приближение геометрической оптики [1], являющееся главным членом разложения в ряд точного решения [2], показывает [3, 4], что зависимость ИОС $R_i(B)$ описывается последовательно параболическим и линейным законами соответственно для малой и промежуточной деформации. При больших же градиентах деформации экспериментальные зависимости могут быть количественно описаны соответствующими формулами точного решения, предусматривающими приближение ИОС с ростом B к ее кинематическому пределу [2].

При переходе к рассмотрению тонких реальных (с локализованными искажениями) упруго изогнутых кристаллов [5–7] экспериментально впервые обнаружен на качественном уровне эффект частичной потери чувствительности зависимости к присутствию упругой деформации, который, однако, может быть подавлен при переходе к сильно асимметричной геометрии дифракции.

Наблюдающиеся закономерности поведения зависимостей $R_i(1/\rho)$ в тонком совершенном и реальном кристаллах могут быть объяснены при использовании результатов динамической теории рассеяния РЛ кристаллами с однородно распределенными дефектами [9] и ее обобщения на случай неоднородного распределения [13, 14]. Для

идеальных изогнутых кристаллов известно [1–3], что с ростом деформации изменяются дифракционные условия с глубиной в поглощающем кристалле для каждой из двух волновых мод (происходит искривление этих мод). В частности, в [3, 4] показано, что это обстоятельство приводит к возникновению линейной зависимости $R_i(1/\rho)$ для промежуточных значений деформации. Учет же интерференционного поглощения, которое увеличивается с ростом деформации, и, следовательно, уменьшает ПИОС и конкурирующего влияния, т. е. увеличения ПИОС за счет уширения кривых отражения при изменении дифракционных условий, сопровождающегося миграцией точек возбуждения по дисперсионной поверхности, обеспечивает наблюдающуюся немонотонность хода рассматриваемых кривых при отрицательных деформациях. Эффект потери чувствительности $R_i(1/\rho)$ к деформации реального кристалла обусловлен конкурирующим характером влияния на дифракцию двух исследуемых типов искажений решетки: с одной стороны уменьшением экстинкционной длины в деформированном кристалле, по сравнению с идеальным, и дополнительным вкладом диффузного рассеяния, а с другой стороны — уменьшением величины структурного фактора ($F_{rh}^{Re} \rightarrow F_{rh}^P e^{-L}$) и, главное, дополнительными потерями энергии волновых полей за счет диффузного рассеяния, учитываемых коэффициентом μ_{ds} [9]. Оказалось, что при слабых и промежуточных уровнях деформации эти механизмы могут быть использованы для количественного описания экспериментальных величин ИОС в рамках следующей модели.

ПИОС R_i реального упруго изогнутого кристалла может быть представлена в виде суммы когерентной R_i^C и диффузной R_i^D , где

$$R_i^C = \frac{C |\chi_{rh}^*|}{2 \sin 2\theta} e^{-M_0^*} \left[1 - \exp\left(-\frac{\pi C^2}{2|B|}\right) \right] \times$$

$$\times \int_{-1}^1 \frac{d\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} \frac{\text{ch}(M_\beta^* \xi) \text{ch}\left[\left(\frac{M^* C^2}{2} + 2\right) \ln\left(\sqrt{1 + \left(\frac{D}{C}\right)^2 (1-\xi^2)} + \left(\frac{D}{C}\right) \sqrt{1-\xi^2}\right)\right]}{\left[1 + \left(\frac{D}{C}\right)^2 (1-\xi^2)\right]^{1/2}}.$$
(1)

Здесь M_0^* — показатель фактора нормального поглощения, M_β^* описывает влияние поглощения в асимметричной геометрии Лауэ, $B = (\partial^2/\partial z^2 - \partial^2/\partial x^2)(\mathbf{h} \cdot \mathbf{u})$ — нормализованный градиент деформации, $D = B t_0$ — эффективная деформация, t_0 — толщина кристалла в единицах Λ^*/π , Λ^* — экстинкционная длина для σ -поляризации, M^* — коэффициент аномального поглощения, C — поляризационный

фактор, равный 1 или $\cos 2\theta$. Остальные обозначения соответствуют [2]. Однако основное отличие формулы (1) от результатов и обозначений [2] состоит в перенормировке согласно [10, 13, 14] констант динамического рассеяния $\chi_{ih}^* \rightarrow \chi_{ih} e^{-L}$, $\chi_{rh}^* \rightarrow \chi_{rh} e^{-L}$, $\mu_0^* \rightarrow \mu_0 + \mu_{ds}$ для когерентной составляющей. Для диффузной составляющей используется следующее выражение [10]:

$$R_i^D = \frac{\pi^2 (\chi_{rh})^2}{\lambda \sin 2\theta} C^2 \left(\frac{t}{\gamma_1} \right) e^{-M_0} (1 - e^{-2L}) \frac{\text{sh } M_\beta}{M_\beta} e^{-\mu^* t_0} \frac{\gamma_1}{\gamma_0}. \quad (2)$$

Экспериментально наблюдается чрезвычайно высокая чувствительность величины ПИОС как к наличию малых концентраций СРНД, так и к слабым УД [9]. Целью настоящей работы являлась разработка физических основ и апробация метода определения характеристик СРНД путем использования деформационных зависимостей ПИОС.

2. ВЛИЯНИЕ УПРУГОГО ИЗГИБА НА ДИФФУЗНОЕ РАССЕЯНИЕ И ЭКСТИНКЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В МОНОКРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ

В работах [13, 14, 16, 17] в основу модели рассеяния рентгеновских лучей упруго изогнутым монокристаллом с СРНД было заложено предположение о том, что упругая деформация не влияет на диффузное рассеяние и коэффициенты экстинкции, обусловленные рассеянием на дефектах. В работе [17] измерения значений ПИОС (с точностью 3%) проводились на двухкристальном спектрометре с использованием MoK_{α_1} -излучения в бездисперсионной схеме. Использовалось 220-отражение от плоскостей, составляющих угол ψ с нормалью к поверхности кристалла. Величины углов для образцов 1, 2 и 3 составляли соответственно $\psi = 2,13^\circ$, $\psi = 2,05^\circ$ и $\psi = 0,38^\circ$. Были получены деформационные зависимости ПИОС, изображенные маркерами на рис. 1. В табл. 1 приведены значения структурно чувствительных параметров ПИОС для динамического рассеяния, полученные фитированием зависимостей ПИОС от деформации [17] на основе указанной модели [14, 16, 17].

Дефектная структура образцов 1–3 сформировалась в результате преципитации кислорода в кремнии, широко изученной экспериментально и теоретически [19]. Известно, что при отжиге в объеме монокристалла Si, выращенного по методу Чохральского, образуются дискообразные выделения SiO_2 , концентрация и размер которых зависят от концентрации кислорода после выращивания, длительности и температуры отжига. Для образцов, изучаемых в настоящей работе, концентрация кислорода составляла $1,1 \cdot 10^{18}$ атомов/см³. Отжигались они 4, 6 и 10 ч соответственно при температуре $T = 1080^\circ\text{C}$.

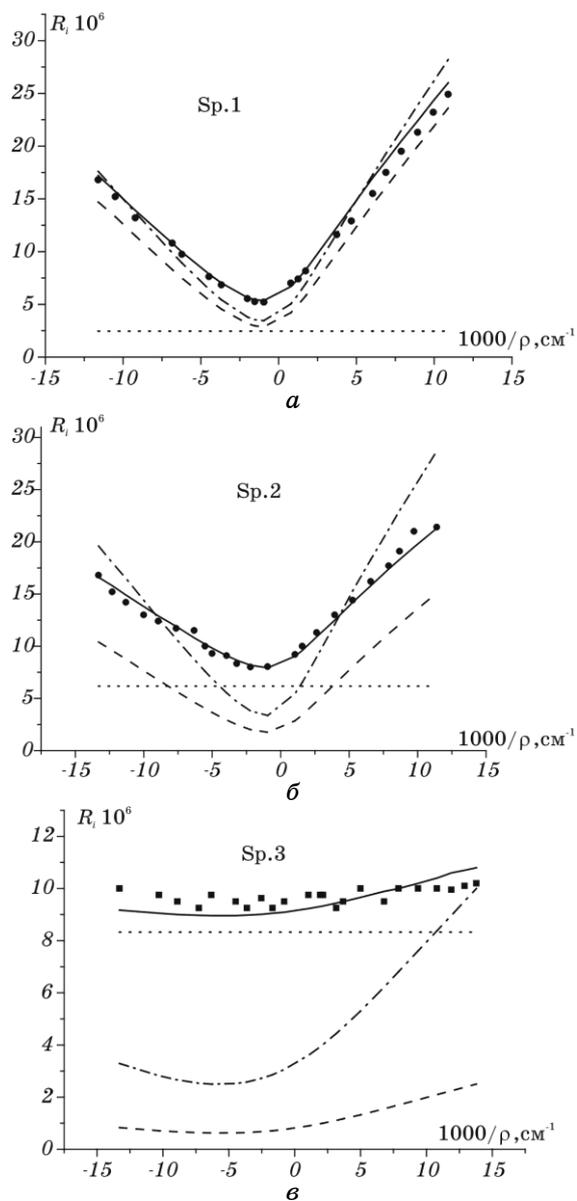


Рис. 1. Рассчитанные значения зависимостей ПИОС от кривизны монокристаллов Si, прошедших термообработку: при 1080°C в течение 4 ч. (рис. 1, а), при 1080°C в течение 6 ч. (рис. 1, б), при 1080°C в течение 10 ч. (рис. 1, в) (сплошная линия). Соответствующие экспериментальные значения (маркеры); штрих и пунктир — когерентная и диффузная составляющие ПИОС соответственно, штрих-пунктир — ПИОС кристалла без СРНД. [17].

ТАБЛИЦА 1. Значения структурно чувствительных параметров ПИОС для динамического рассеяния, полученные фитированием в рамках указанной модели [14, 16, 17] зависимостей ПИОС от деформации (маркеры на рис. 1) [17] и рассчитанные из литературных данных о дефектной структуре образцов (в круглых скобках).

№ образца	$L \times 10^3$	$\mu_{ds}, \text{см}^{-1}$	$\mu^*, \text{см}^{-1}$	GOF
1	$4 \pm 0,2$ (3,01)	$3,7 \pm 0,2$ (0,99)	0 (0,14)	0,78 (4,41)
2	$10 \pm 0,1$ (8,35)	13 ± 1 (4,30)	0 (1,03)	1,35 (32,8)
3	13 ± 3 (16,3)	20 ± 2 (17,9)	0 (2,67)	0,73 (1,19)

Известно, что при температурах отжига выше 1173 К напряжения, создаваемые в кристалле вокруг преципитатов SiO_2 , частично ослабляются за счет образования дислокационных петель. Влияние упомянутых СРНД разных типов на величины ПИОС характеризуется структурно чувствительными параметрами динамического рассеяния рентгеновского излучения, причем дефекты разного типа вносят аддитивный вклад в эти параметры, т. е. $L = L_{cl} + L_{b.l.} + L_{s.l.}$, $\mu_{ds} = \mu_{dsc} + \mu_{dsb.l.} + \mu_{dssl.}$, $\mu^* = \mu_{cl}^* + \mu_{b.l.}^* + \mu_{s.l.}^*$. Определенные с использованием комбинированного метода ПИОС [18] и литературных данных [19] значения указанных параметров динамического рассеяния для образцов 1, 2 и 3 приведены в табл. 1 в круглых скобках.

На рис. 2 линиями изображены рассчитанные зависимости ПИОС от радиуса упругого изгиба при значениях параметров динамического рассеяния MoK_α -излучения, рассчитанных из литературных данных о дефектной структуре образцов [18, 19] и приведенных в круглых скобках в табл. 1. Из этих данных следует, что различия рассчитанных и экспериментальных зависимостей ПИОС существенно превышают ошибку экспериментальных измерений.

Для образца 1 со слабо развитой дефектной структурой наблюдается меньшее, чем для образца 2, расхождение с экспериментом расчетов, проведенных в рамках модели, предполагающей независимость диффузного рассеяния и экстинкционных эффектов от упругой деформации. При этом, как видно из табл. 1, значения величин параметров динамического рассеяния L , μ_{ds} и μ^* , определенные из оптимально возможных результатов фитирования деформационной зависимости [17] в рамках указанной модели, в пределах погрешности определения практически совпадают с рассчитанными из литературных данных о дефектной структуре образца 1. Это обусловлено низкой чувствительностью ПИОС к СРНД из-за малых значений этих параметров. Для образца 3 с сильно развитой дефектной структурой значения величин параметров динамического рассеяния L , μ_{ds} и μ^* , определенные путем аналогичного фитирования деформационной зависимости [17], значительно меньше значений, рассчитанных из литературных данных о дефектной структуре образца 3.

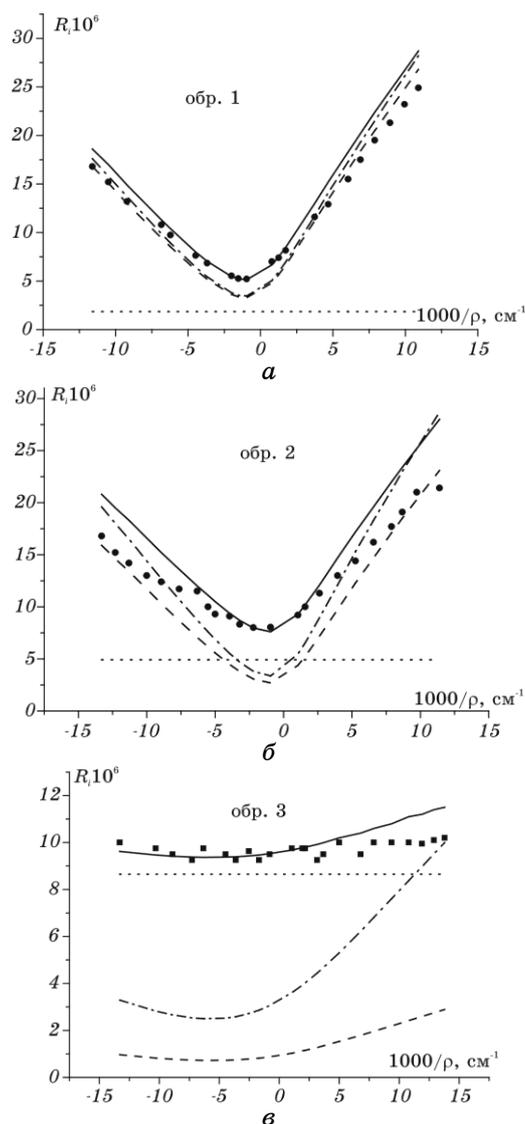


Рис. 2. Рассчитанные с использованием выражений согласно [14, 16, 17] зависимости ПИОС от кривизны монокристаллов Si, содержащих СРНД, характеризующиеся значениями параметров динамического рассеяния: $L = 0,00301$, $\mu_{ds} = 0,99 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 0,14 \text{ см}^{-1}$ (а), $L = 0,00835$, $\mu_{ds} = 4,30 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 1,03 \text{ см}^{-1}$ (б), $L = 0,0163$, $\mu_{ds} = 17,9 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 2,67 \text{ см}^{-1}$ (в) (сплошная линия). Соответствующие экспериментальные значения ПИОС (маркеры) для монокристаллов Si, прошедших термообработку: при 1080°C в течение 4 ч. (а), при 1080°C в течение 6 ч. (б), при 1080°C в течение 10 ч. (в); штрих и пунктир — когерентная и диффузная составляющие ПИОС соответственно, штрих-пунктир — ПИОС кристалла без СРНД [17].

Однако, хотя вклад диффузной составляющей в данном случае определяет величину ПИОС, из-за малой степени асимметрии использованного в данном случае рефлекса эти данные не позволяют сделать вывод о наличии и характере зависимости диффузной составляющей от степени упругой деформации. Действительно, из рис. 2, *в* видно, что в этом случае зависимость от деформации даже когерентной составляющей ПИОС проявляется слабо (штриховая линия).

Для более корректного описания уже обсужденных кривых на рис. 2, *а* и *в*, а также, особенно для описания их и в случае рис. 2, *б*, где наблюдается наиболее существенное расхождение рассчитанных и экспериментальных данных для реальных значений параметров L , μ_{ds} и μ^* , модель, предполагающая независимость от деформации величин факторов динамического рассеяния и величины вклада диффузной составляющей в ПИОС, по-видимому, нуждается в уточнении. Неадекватность модели подтверждается значениями показателя добротности фитирования, приведенными в круглых скобках в табл. 1, и особенно ярко иллюстрируется рис. 2, *б*, на котором рассчитанные в ее рамках зависимости ПИОС от радиуса деформации (линии) не совпадают наиболее существенно с зависимостями, полученными экспериментально (маркеры) для образца 2. Таким образом, для образца 1 наблюдается недостаточное влияние (вклад) микродефектов, а для образца 3 — деформации. В образце 2 эти вклады сравнимы и достаточно заметны.

В соответствии с [20–22] влияние упругой деформации на величины ПИОС и ее компонент при наличии в кристалле локализованных дефектов структуры можно описать, вводя поправки к величинам параметров динамического рассеяния, зависящие от степени деформации.

По определению все величины L , μ_{ds} и μ^* являются интегральными [9]:

$$\begin{aligned} L &\sim R_D \sim \int \mu_{ds}(\theta) d\theta; \\ \mu_{ds} &\sim \int \mu_{ds}(\theta) R_B(\theta) d\theta / \int R_B(\theta) d\theta; \\ \mu^* &\sim \int \mu_{ds}(\theta) \mu_{ds}(\theta) d\theta / \int \mu_{ds}(\theta) d\theta. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $\mu_{ds}(\theta) \sim R_D(\theta)$, где $R_D(\theta)$ и $R_B(\theta)$ — диффузная и Брэгговская кривые отражения. Если рассматривать более строго, то находить интегральные значения необходимо не для $\mu_{ds}(\theta)$, а для всего фактора экстинкции, и, следовательно, интегрировать следует не коэффициент экстинкции $\mu_{ds}(\theta)$, а сам фактор экстинкции $\exp(-\mu_{ds}(\theta)t_0)$ (случай Лауэ) или $1/(\mu_0 + \mu_{ds}(\theta))$ (случай Брэгга). Использованное здесь упрощение справедливо при условии $\mu_{ds}(\theta)t_0 \ll 1$, т. е. $\mu_{ds}(\theta) \ll \mu_0$, которое, как следует из данных табл. 1, выполняется для образца 2.

Как видно из формул (3) все три величины по определению должны в общем случае различным образом зависеть от деформации, т. к. сами кривые отражения под интегралом и их полуширины различным образом чувствительны к деформации изгибом. Имеется в виду эффект различного относительного изменения их ширины при деформации. Так, если распределение диффузного фона много шире Брэгговского, то более чувствительной к изгибу будет Брэгговская кривая отражения. При малых изгибах кристалла, когда происходит уширение и, следовательно, увеличение отражательной способности когерентного пучка и аналогичное увеличение за счет уширения, а также, по-видимому, конкурирующее уменьшение интенсивности диффузного рассеяния вследствие дополнительного расширения провала в диффузной кривой отражения, величина μ_{ds} может изменяться даже в сторону уменьшения, что видно из анализа формул (3). Это будет происходить до тех пор, пока полуширина $R_B(\theta)$ с ростом изгиба не станет порядка полуширины $R_D(\theta)$ или $\mu_{ds}(\theta)$, что есть практически одно и то же. При этом $\mu_{ds} \rightarrow \mu^*$, после чего изменение μ_{ds} с деформацией станет равным изменению μ^* , как по величине, так и по знаку, т. е. оно уже станет положительным, как и изменение μ^* , которое не меняет знак и положительно при любом изгибе. Таким образом, изгиб сначала устраняет причину, по которой μ_{ds} всегда существенно больше μ^* , а далее и μ_{ds} и μ^* растут одинаково. Указанный рост обусловлен уширением диффузной кривой отражения. Однако этот рост может стать скомпенсированным для R_D соответствующим ростом μ^* в факторе экстинкции. Для параметра L такая стабилизация, возможно, отсутствует, т. к. по определению $L \sim R_D$ без учета экстинкционного фактора и, следовательно, коэффициента экстинкции μ^* . Аналогично продолжают расти μ_{ds} и μ^* . Когда они станут $\sim \mu_0$, их необходимо заменить экстинкционными факторами.

Чем уже пик диффузного рассеяния, тем раньше с ростом изгиба устанавливается описанный режим одинакового увеличения μ_{ds} и μ^* , что видимо и имеет место в нашем случае узкого диффузного пика. Если дефектов несколько типов, то сначала выравниваются вклады в μ_{ds} и μ^* для самых крупных дефектов, затем менее крупных и в конце для самых мелких и, следовательно, для суммарных вкладов, т. е. μ_{ds} и μ^* будут сближаться по мере выхода на указанный механизм дефектов различного типа, пока не станут равными.

Убедившись в невозможности однозначного подбора независимых коэффициентов деформационных зависимостей для R_D , μ_{ds} , μ^* и L , используем обоснованные выше утверждения о характере изменения L , R_D , коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds} и μ^* при деформации, т. е., что при какой-то степени деформации $1/\rho_k$ величины μ_{ds} и μ^* становятся равными, а затем продолжают расти с одинаковой скоростью. R_D при какой-то степени деформации выйдет на режим стабилизации, а затем станет уменьшаться за счет преобла-

дающего влияния фактора экстинкции, а зависимость ПИОС от деформации будет определяться когерентной составляющей и ее кинематическим пределом. Из общих физических соображений, приведенных выше и анализа экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС, приведенного ниже, в работе [23] предложена следующая модель зависимостей параметров динамического рассеяния от деформации. Так, поскольку из рис. 1, 2 видно, что величины ПИОС слабо зависят от знака деформации, то определяющая зависимость величин поправок для L , R_D и коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds} и μ^* от обратного радиуса кривизны деформации квадратична ($\sim 1/\rho^2$, ρ — радиус кривизны упругого изгиба), т. е. является симметричной.

В то же время из рис. 3 видно, что прирост ПИОС за счет присутствия случайно распределенных в объеме микродефектов при отрицательных деформациях значительно больше, чем при положительных (см. рис. 3), что позволяет предположить также наличие существенно более малых поправок к величинам L и R_D , зависимость которых от обратного радиуса кривизны деформации линейна ($\sim 1/\rho$), т. е. асимметрична. Эта незначительная дополнительная асимметрия ПИОС может быть обусловлена эффектом Бормана для диффузной составляющей. Данная модель коррелирует с общими теоретическими результатами работ [20–22].

Тогда искомая модель приобретает вид [23]:
при $|1/\rho| < |1/\rho_k|$

$$L = L_0 + \Delta L_1 + \Delta L_2 = L_0 (1 + \alpha/\rho^2 + \alpha_1/\rho) \quad (4)$$

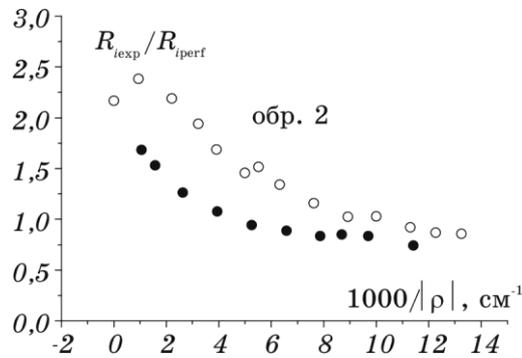


Рис. 3. Зависимости от модуля радиуса кривизны деформации отношений экспериментальных значений ПИОС образца 2 к рассчитанным для деформированного кристалла, не содержащего случайно распределенных в объеме дефектов: (\circ) — для отрицательной деформации, (\bullet) — для положительной деформации.

$$\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu_{ds0}t) + \Delta \exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu_{ds0}t) + \beta/\rho^2, \quad (5)$$

$$\exp(-\mu^*t) = \exp(-\mu^*_0t) + \Delta \exp(-\mu^*t) = \exp(-\mu^*_0t) + \delta/\rho^2; \quad (6)$$

при $|1/\rho| > |1/\rho_k|$

$$L = L_0\alpha_1/\rho \quad (7)$$

$$\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu^*t) = \exp(-\mu^*_0t) + \delta/\rho^2. \quad (8)$$

Здесь $1/\rho_k$ — изгиб, при котором Брэгговский пик уже уширился до ширины диффузного. ρ_k для каждого типа дефектов свое, но здесь введено одно эффективное, на основе анализа экспериментальной зависимости ПИОС от изгиба. ρ_k определяется из условия $\mu_{ds} = \mu^*$.

В результате фитирования для образца 2 получено: при $\alpha = -10^{12}$ мкм², $\beta = 3,1 \cdot 10^{10}$ мкм², $\alpha_1 = -2,01 \cdot 10^5$ мкм, $\delta = -10^{11}$ мкм², КДФ = 0,9, $\rho_k = 10^6$ мкм.

Тогда графически зависимости (4)–(8) могут быть представлены в виде, изображенном на рис. 4.

Таким образом, в настоящей работе впервые экспериментально доказано наличие зависимостей от деформации интегральной интенсивности диффузного рассеяния, экстинкционных факторов или коэффициентов экстинкции, обусловленных рассеянием на дефектах, как для когерентной (μ_{ds}), так и для диффузной (μ^*) составляющих полной интегральной отражательной способности и эффективного статического фактора Дебая–Валлера. Эмпирически установлены параметры и характерные особенности указанных зависимостей.

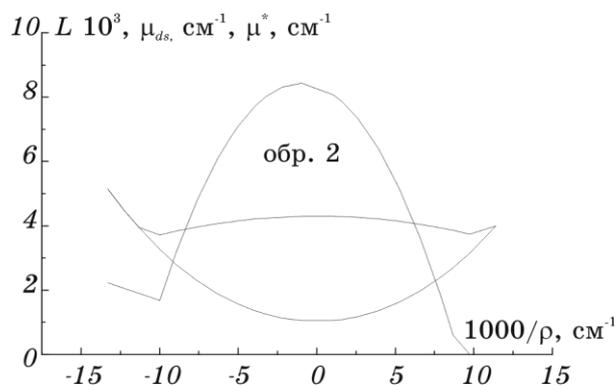


Рис. 4. Рассчитанные зависимости величины эффективного статического фактора Дебая–Валлера L (сплошная линия) и величин коэффициентов эффективного поглощения когерентной μ_{ds} (штрих) и диффузной μ^* (пунктир) компонент ПИОС от степени упругой деформации (образец 2).

3. УСТАНОВЛЕНИЕ ПРИРОДЫ ВОЗМОЖНЫХ МЕХАНИЗМОВ КАК АДДИТИВНОГО, ТАК И НЕАДДИТИВНОГО ВЛИЯНИЯ УД И СРНД НА ВЕЛИЧИНУ ПИОС

Задача определения количественных характеристик СРНД усложняется вследствие того, что совместное влияние СРНД и УД на ПИОС не всегда аддитивно [17]. Из рис. 1, 2 и 5 видно, что существуют такие значения величины радиуса положительного или отрицательного упругих изгибов, при которых деформационная зависимость ПИОС, полученная экспериментально в работе [17] для содержащего СРНД монокристалла Si, пересекается с рассчитанной деформационной зависимостью для монокристалла Si, не содержащего СРНД, т. е. при таких УД полностью исчезает чувствительность ПИОС к СРНД, а с разных сторон от точек пересечения даже знак влияния СРНД на ПИОС различен.

С другой стороны, авторы работы [6] наблюдали и возможное аддитивное влияние УД и СРНД на величину интегральной интенсивности (ИИ) (рис. 6, а), и исчезновение чувствительности ИИ упруго изогнутого кристалла к СРНД при сильной степени асимметричности используемого Лауэ-рефлекса (рис. 6, б). Однако адекватная физическая модель, объясняющая природу такого разнообразия

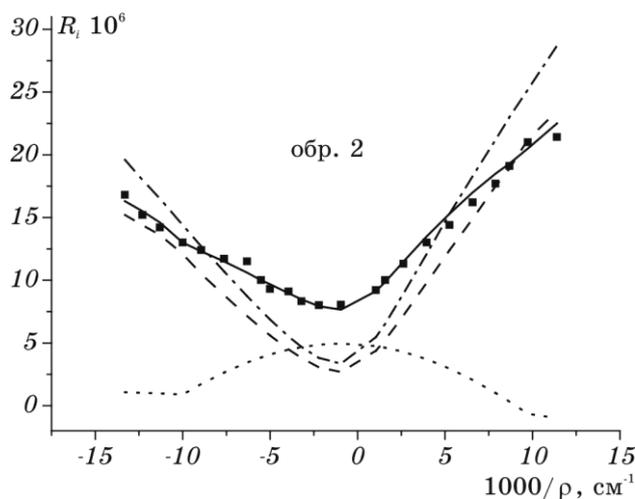


Рис. 5. Зависимости ПИОС образца 2 от радиуса кривизны деформации, рассчитанная в рамках модели, предполагающей влияние деформации на коэффициенты экстинкции и на диффузное рассеяние (сплошная линия) и полученная экспериментально (маркеры). Штриховая линия — рассчитанная зависимость когерентной компоненты ПИОС от деформации, пунктирная линия — рассчитанная зависимость диффузной компоненты ПИОС от деформации, штрих-пунктир — ПИОС кристалла без СРНД.

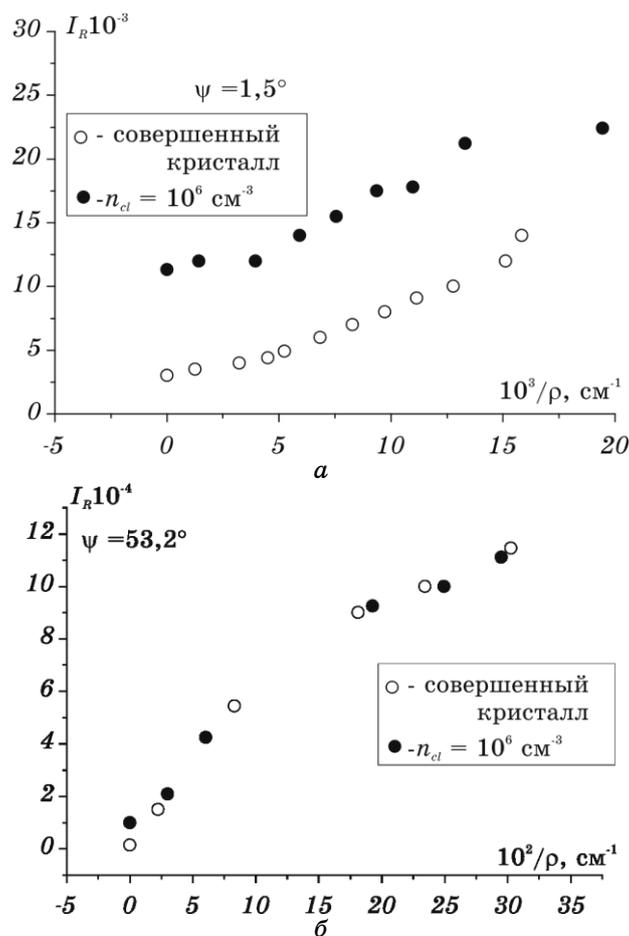


Рис. 6. Зависимости абсолютных значений интегральных интенсивностей Лауэ-дифрагированных пучков от кривизны образцов; \circ — совершенный кристалл, \bullet — образец с дефектами типа кластеров (a — $\psi = 1,5^\circ$, b — $\psi = 53,2^\circ$) [6].

явлений, отсутствовала.

В настоящей работе путем вычислений с использованием формул динамической теории рассеяния РЛ реальными монокристаллами, подвергнутыми контролируемому упругому изгибу, изучен характер влияния СРНД различных размеров и концентраций на ход деформационной зависимости ПИОС при варьировании степени асимметрии используемого Лауэ-рефлекса. Результаты вычислений представлены на рис. 7–9.

Из рис. 7 видно, что рост величины статического фактора Дебая–Валлера приводит к увеличению ПИОС, одинаковому при любых

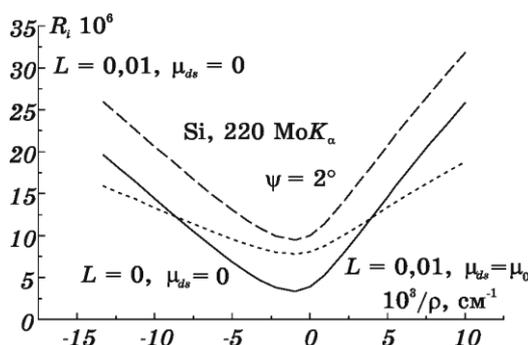


Рис. 7. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (1), (2), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД: сплошная линия — деформационная зависимость ПИОС при отсутствии СРНД, штриховая линия — деформационная зависимость при наличии очень мелких СРНД (при $\mu_{ds} \approx 0$), пунктир — деформационная зависимость при наличии крупных дефектов.

значениях упругого изгиба — наблюдается аддитивное влияние на величину ПИОС дефектов и упругой деформации. В то же время рост величины коэффициента экстинкции, т. е. эффективного поглощения за счет ухода части дифрагированных лучей в диффузный фон из-за рассеяния на СРНД (μ_{ds}) приводит к уменьшению ПИОС, причем разному при разных значениях упругого изгиба. Следовательно, неаддитивность влияния на ПИОС СРНД и упругой деформации, приводящая к снижению чувствительности величины ПИОС к упругой деформации и к появлению вышеупомянутой точки потери чувствительности ПИОС к СРНД является следствием указанной экстинкции (эффективного поглощения) как когерентной, так и диффузной составляющих ПИОС из-за их диффузного рассеяния на СРНД. Пока деформации малы для больших СРНД, ярко проявляется увеличение ПИОС за счет преобладающего над уменьшением из-за L и μ_{ds} когерентной составляющей ПИОС R_C вклада порожденной их наличием диффузной составляющей ПИОС R_D , а при больших деформациях, когда когерентная составляющая резко возрастает, абсолютная величина ее уменьшения за счет коэффициента экстинкции (μ_{ds}) начинает все более преобладать над непосредственным вкладом в ПИОС R_D , что возможно только в случае наличия достаточно крупных СРНД, дающих определяющий вклад в μ_{ds} (см. рис. 7).

Преобладание воздействия на величину ПИОС УД или СРНД зависит также от степени асимметричности используемого Лауэ-рефлекса, что иллюстрируют результаты расчетов, представленные на рис. 8, — деформационные зависимости, рассчитанные для монокристаллов Si, содержащих высокую концентрацию СРНД малых размеров, при использовании Лауэ-рефлексов с различной степенью асимметрии.

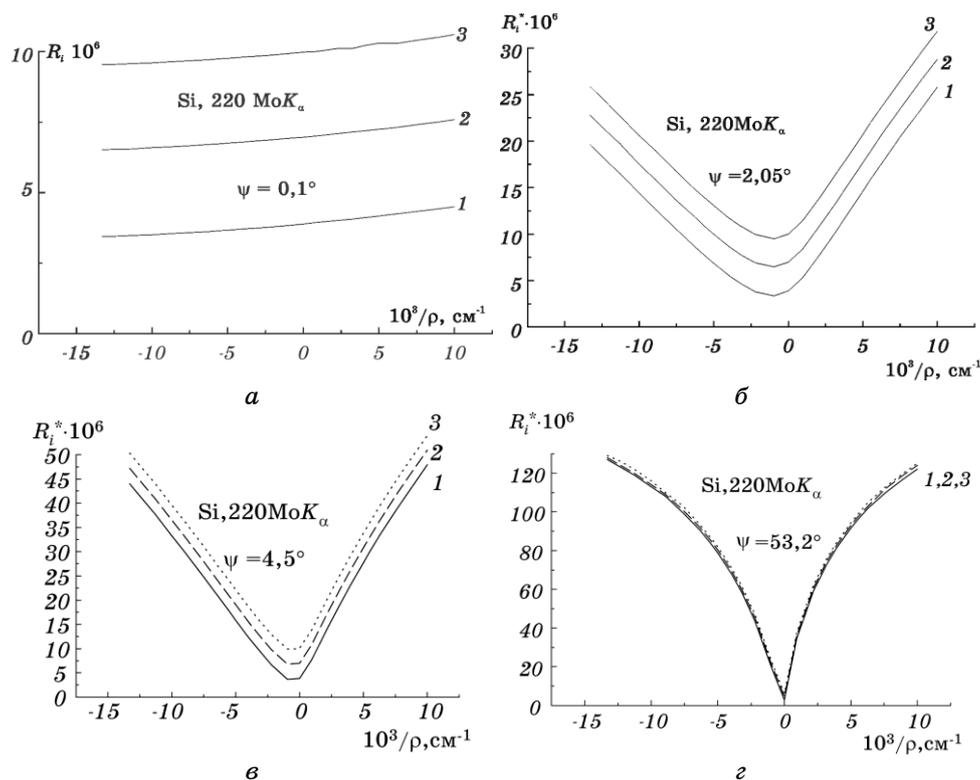


Рис. 8. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам, описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД для разных значений характеризующих СРНД параметров динамического рассеяния рентгеновского излучения: (1) $L = 0$, $\mu_{ds} = 0$, $\mu^* = 0$; (2) $L = 0,005$, $\mu_{ds} = 0$, $\mu^* = 0$; (3) $L = 0,01$, $\mu_{ds} = 0$, $\mu^* = 0$ и при различных углах наклона отражающей плоскости 011 к нормали к поверхности образца: *a* — $\psi = 0,1^\circ$, *б* — $\psi = 2,05^\circ$, *в* — $\psi = 4,5^\circ$, *г* — $\psi = 53,2^\circ$.

Из рис. 8, *a* видно, что при использовании слабо асимметричного рефлекса величина ПИОС практически не зависит от степени деформации. В то же время наличие СРНД в этом случае большой концентрации мелких дефектов увеличивает ее в 2–3 раза, благодаря вкладу диффузной составляющей ПИОС R_D , причем увеличение ПИОС практически не компенсируется уменьшением брэгговской составляющей R_B из-за рассеяния на СРНД.

При умеренной асимметрии используемого рефлекса (рис. 8, *б* и рис. 8, *в*) вследствие резкого возрастания вклада когерентной составляющей преобладает влияние на величину ПИОС упругой деформации. При сильной степени асимметрии используемого рефлекса (рис. 8, *г*) влияние СРНД на величину ПИОС становится

практически не заметным по сравнению с влиянием УД.

При неаддитивном совместном влиянии на величину ПИОС упругой деформации и крупных СРНД с увеличением степени асимметрии

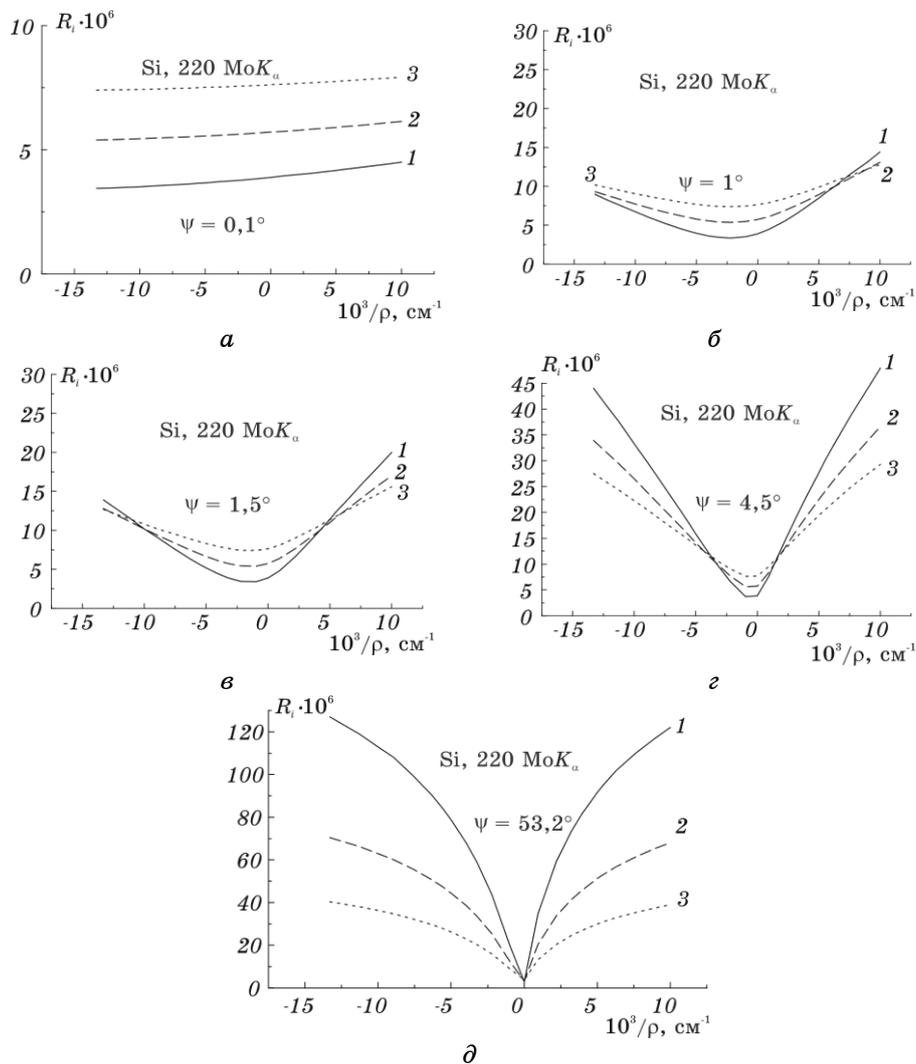


Рис. 9. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (1)–(2), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД для разных значений характеризующих СРНД параметров динамического рассеяния рентгеновского излучения: (1) $L = 0$, $\mu_{ds} = 0$, $\mu^* = 0$; (2) $L = 0,005$, $\mu_{ds} = 7,1 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 0,71 \text{ см}^{-1}$; (3) $L = 0,01$, $\mu_{ds} = 14,2 \text{ см}^{-1}$, $\mu^* = 1,42 \text{ см}^{-1}$ и при различных углах наклона отражающей плоскости 011 к нормали к поверхности образца: а — $\psi = 0,1^\circ$, б — $\psi = 2,05^\circ$, в — $\psi = 4,5^\circ$, г — $\psi = 53,2^\circ$.

Лауэ-отражения сужается область, в которой СРНД увеличивают ПИОС, и несколько уменьшается относительная степень их воздействия на ПИОС в этой области. В то же время в области преобладания когерентной составляющей чувствительность к дефектам резко возрастает. На рис. 9 представлены деформационные зависимости, рассчитанные для монокристаллов Si, содержащего низкую концентрацию СРНД больших размеров, при использовании Лауэ-рефлексов с различной степенью асимметрии. Из рис. 9 видно, что степень деформации, при которой исчезает чувствительность к СРНД, уменьшается с увеличением степени асимметрии используемого Лауэ-отражения. При симметричном отражении (рис. 9, а) наблюдается только тот участок деформационной зависимости, на котором СРНД увеличивают ПИОС упруго деформированного кристалла. При значительной степени асимметрии отражения (рис. 9, б) практически наблюдается только тот участок деформационной зависимости, на котором преобладает вклад в ПИОС когерентного рассеяния, и наличие СРНД вызывает уменьшение ПИОС упруго деформированного кристалла.

Таким образом, в настоящей работе на основе предложенной модели теоретически и экспериментально изучены особенности дифракции в геометрии Лауэ когерентно и диффузно рассеянного рентгеновского излучения в тонких упруго изогнутых кристаллах кремния, содержащих дефекты кулоновского типа. Установлена природа возможных механизмов как аддитивного, так и неаддитивного влияния УД и СРНД на ПИОС при различной степени асимметрии отражений, которая позволяет существенно усиливать эффект влияния УД на ПИОС.

4. КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПИСАНИЕ ВЛИЯНИЯ НА ПИОС УПРУГОГО ИЗГИБА ДЛЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ С РАЗНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ СРНД

Характер зависимости от деформации факторов экстинкции, природа которого и его основные особенности установлены на основе модели, предложенной в работе [23], экспериментально подтвердившей соответствующие теоретические предсказания [20–22], оказывается, в соответствии с [20–23], существенно зависящим от степени нарушения структуры этого образца вследствие наличия в нем СРНД, и, следовательно, очень чувствительным к характеристикам СРНД. Однако для определения характеристик СРНД путем фитирования теоретических и экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС при использовании разработанной в [23] теоретической модели необходимо разделить в этой модели влияние на ПИОС УД и наноразмерных дефектов. Целью работы [27] являлось доказательство возможности разделения влияния на ПИОС СРНД и УД путем факторизации выражений для ПИОС. Это сводилось к необходимо-

сти факторизации деформационных поправок к факторам экстинкции брэгговской и диффузной составляющих ПИОС упруго изогнутых монокристаллов с микродефектами на множители, зависящие только от СРНД и только от УД. Так, для выяснения характера влияния нарушений, вызванных СРНД, и исключения путем выделения факторов собственно деформационных зависимостей общих для всех случаев дефектов, в работе [27] проанализированы деформационные зависимости факторов экстинкции, полученные для трех образцов с разными дефектными структурами. Образцы 1, 2 и 3, уже описанные выше, были вырезаны по плоскости (111) из слитка, выращенного по методу Чохральского в направлении [111] и имеющего концентрацию кислорода $1,1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и концентрацию углерода $< 1,0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Образцы были отожжены при температуре 1080°C . Средний размер и концентрация микродефектов трех типов, присутствующих в указанных образцах, определены комбинированным методом ПИОС, описанным в работе [17]. Толщины образцов, длительность их термообработки и характеристики микродефектов трех типов, присутствующих в образцах, приведены в табл. 2.

Деформационные зависимости ПИОС для этих образцов измерены в работе [6] с использованием 220-отражения MoK_α -излучения от плоскостей, составляющих с нормалью к поверхности кристалла угол $\psi = 2,13^\circ$ (для образца 1); $\psi = 2,05^\circ$ (для образца 2); $\psi = 0,38^\circ$ (для образца 3). Согласно модели, предложенной в работе [23], деформационная зависимость интегральной интенсивности диффузного рассеяния или эффективного статического фактора Дебая–Валлера L описывается выражениями (4), (7). Согласно той же модели, деформационные зависимости факторов эффективного поглощения из-за квазидиффузного рассеяния и диффузного рассеяния на микродефектах описываются выражениями (5) для $\exp(-\mu_{ds}^* t)$ и выражением (6) для $\exp(-\mu^* t)$ и выражением (8).

Путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей при использовании для упруго изогнутого монокристалла разработанной в [23] модели и формул динамической теории для

ТАБЛИЦА 2. Толщины образцов (t_0 , мкм), длительность (t , ч), средние размеры и концентрации: кластеров SiO_2 в форме дисков — R_{cl} , мкм; h_{cl} , мкм; c_{cl} ; больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргера, a — параметр решетки) — R_{bl} , мкм; c_{bl} ; мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ — $R_{sm.l}$, мкм; $c_{sm.l}$.

№ обр.	t_0 , мкм	t , ч	R_{cl} , мкм	h_{cl} , мкм	c_{cl}	R_{bl} , мкм	c_{bl}	$R_{sm.l}$, мкм	$c_{sm.l}$
1	470	4	0,354	0,0104	$2,24 \cdot 10^{-14}$	0,345	$4,67 \cdot 10^{-15}$	0,019	$2,11 \cdot 10^{-10}$
2	488	6	0,45	0,0116	$2,24 \cdot 10^{-14}$	0,45	$5,2 \cdot 10^{-15}$	0,031	$1,43 \cdot 10^{-10}$
3	675	10	0,667	0,0138	$2,24 \cdot 10^{-14}$	0,667	$6,2 \cdot 10^{-15}$	0,0057	$1,11 \cdot 10^{-8}$

ТАБЛИЦА 3. Значения критического радиуса кривизны УИ (ρ_k), радиуса кривизны УИ, при котором исчезает чувствительность ПИОС к СРНД (ρ_0), и коэффициентов $\alpha_1 L_0$ и δ , полученные при фитировании деформационных зависимостей ПИОС для образцов 1, 2 и 3, и значения отношений коэффициентов эффективного поглощения μ_{ds0}/μ_0^* в отсутствие УИ.

№ обр.	$\rho_0(-)$, мкм	$\rho_0(+)$, мкм	ρ_k , мкм	$\alpha_1 L_0$, мкм	δ , мкм ²	μ_{ds0}/μ_0^*
1	$-1,46 \cdot 10^6$	$2,68 \cdot 10^6$	$1,5 \cdot 10^6$	$-(1,4 \pm 0,4) \cdot 10^3$	$-(8 \pm 2) \cdot 10^{10}$	7,01
2	$-1,12 \cdot 10^6$	$2,22 \cdot 10^6$	10^6	$-(1,7 \pm 0,4) \cdot 10^3$	$-(1 \pm 0,2) \cdot 10^{11}$	4,18
3		$7,25 \cdot 10^5$	$2,45 \cdot 10^5$	$-(1,5 \pm 0,4) \cdot 10^3$	$-(1 \pm 0,2) \cdot 10^{11}$	6,70

монокристалла с микродефектами [17] подбираются такие значения величин поправок к L_0 , $\exp(-\mu_{ds0}t)$ и $\exp(-\mu_0^*t)$, при которых значение коэффициента добротности фитирования минимально.

Таким способом для образцов 1, 2 и 3 были определены значения критического радиуса кривизны деформации (ρ_k), при которых $\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu_0^*t)$. Полученные значения величин ρ_k , а также величины отношений μ_{ds0}/μ_0^* и значения величин радиусов упругого изгиба (УИ), при которых исчезает чувствительность ПИОС к микродефектам (ρ_0), приведены в табл. 3. Затем для участков деформационных зависимостей ПИОС, соответствующих интервалам $|\rho| < \rho_k$ при $\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu_0^*t)$ подбирались значения величин поправок ($\alpha_1 L_0$)/ ρ и δ/ρ^2 . Полученные значения $\alpha_1 L_0$ и δ также представлены в табл. 3.

Анализ данных табл. 3 позволил феноменологически установить:

$$\rho_k \approx 0,4\rho_0(+). \quad (9)$$

На втором этапе для интервала $|\rho| > \rho_k$ подбирались значения величин поправок к ΔL_1 и $\exp(-\mu_{ds0}t)$. Подобранные значения коэффициентов поправок к L_0 и к фактору экстинкции приведены в табл. 4.

Из табл. 4 видно, что значения коэффициентов α для образцов 1 ($\eta = 0,08$) и 2 ($\eta = 0,077$) одного порядка, а для образца 3 ($\eta = 0,014$) значение указанного коэффициента на порядок меньше. (Здесь $\eta = \sin\psi[1 + \cos(\theta + \psi)\cos(\theta - \psi)(1 + \nu)]$ — множитель, учитывающий изменение степени асимметрии используемого отражения в теории Петрашениа-Чуховского; см. [2, 6].) Видно, что коэффициенты α сильно

ТАБЛИЦА 4. Коэффициенты зависящих от радиуса кривизны УИ ρ поправок к L_0 и к фактору экстинкции: α/ρ^2 и β/ρ^2 .

№ обр.	α , мкм ²	β , мкм ²
1	$-(1,5 \pm 0,4) \cdot 10^{12}$	$(2,5 \pm 0,2) \cdot 10^9$
2	$-(1 \pm 0,4) \cdot 10^{12}$	$(3 \pm 0,2) \cdot 10^{10}$
3	$-(6 \pm 0,3) \cdot 10^{10}$	$(9 \pm 1) \cdot 10^{10}$

зависят от степени асимметрии используемого отражения. Для коэффициентов β наблюдается зависимость от характеристик СРНД.

На рис. 10 представлены деформационные зависимости поправок к факторам экстинкции для образцов 1, 2 и 3 в интервале деформаций $|\rho| > \rho_k$. Из рис. 10, а и б видно, что деформационные зависимости поправок к факторам экстинкции чрезвычайно чувствительны к изменению от образца к образцу характеристик СРНД и степени

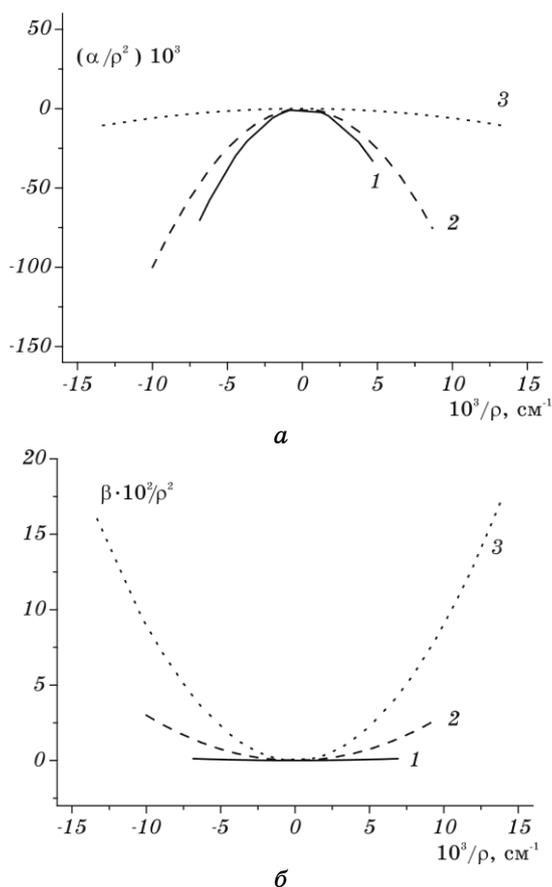


Рис. 10. а — деформационные зависимости поправок α/ρ^2 к эффективному статическому фактору Дебая–Валлера для образцов 1 (сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [6] при $|\rho| > \rho_k$ с учетом (1)–(3); б — деформационные зависимости поправок β/ρ^2 к фактору эффективного поглощения $\exp(-\mu_{a,0}t)$ для образцов 1 (сплошная линия) и 2 (штриховая линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [6] при $|\rho| > \rho_k$ с учетом (1)–(3).

асимметрии используемого отражения.

Авторами работы [27] феноменологически подобраны нормирующие множители к поправкам к факторам экстинкции. На рис. 11 представлены деформационные зависимости нормированных на эти множители поправок к факторам экстинкции для образцов 1–3 в интервале деформаций $|\rho| > \rho_k$. Из рис. 11 видно, что нормированные

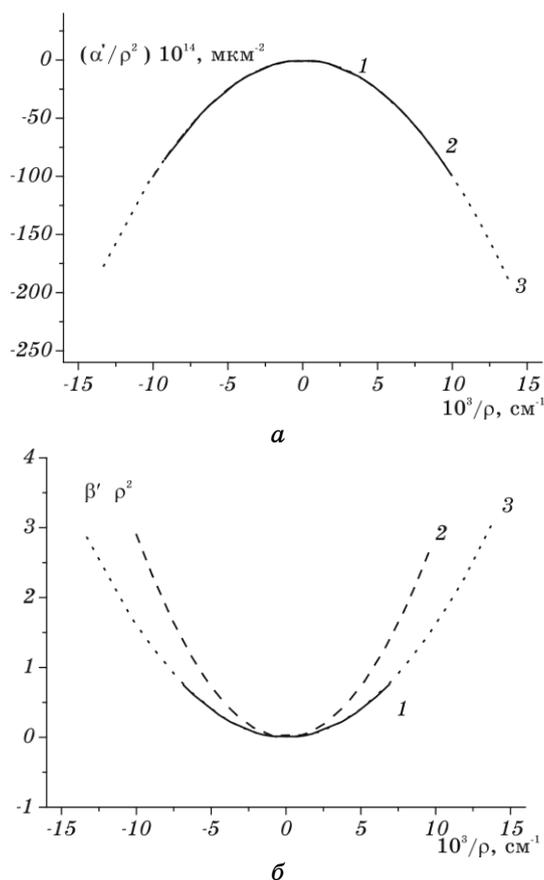


Рис. 11. *a* — деформационные зависимости поправок α/ρ^2 к эффективному статическому фактору Дебая–Валлера для образцов 1 (сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [6] с учетом (1)–(3) при $|\rho| > \rho_k$, нормированные на ρ_k^2 ; *б* — деформационные зависимости поправок β/ρ^2 к фактору эффективного поглощения $\exp(-\mu_{ds0}t)$ для образцов 1 (сплошная линия), 2 (штриховая линия) и 3 (пунктирная линия), полученные путем фитирования экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС и рассчитанных по формуле из [6] с учетом (1)–(3) при $|\rho| > \rho_k$, нормированные на $L_0/\exp(-\mu_{ds0}t)$.

значения величин поправок к факторам экстинкции одинаковы для всех образцов, т. е. не зависят от характеристик СРНД и от степени асимметрии используемого отражения.

Анализ результатов, представленных на рис. 10 и 11, при использовании соотношения (7) показывает, что для любого упруго изогнутого образца, содержащего СРНД, значения величин поправок к факторам экстинкции можно определить из следующих выражений:

$$\alpha = \alpha'(\rho_k)^2 = \alpha'(0,4\rho_0)^2, \quad \alpha_1 = \alpha_1'; \quad (10)$$

$$\beta = \beta' L_0 / \exp(-\mu_{ds0} t); \quad (11)$$

$$\delta = \delta'. \quad (12)$$

Рассмотрение деформационных зависимостей ПИОС для образцов 2 и 3, полученных при использовании 220 Лауэ-рефлексов MoK_{α_1} -излучения от плоскостей, составляющих угол ψ с нормалью к поверхности кристалла (величины углов для образцов 2 и 3 составляли соответственно $\psi = 2,05^\circ$ и $\psi = 0,38^\circ$) позволило получить зависимость величины ρ_0 от степени асимметрии используемого отражения:

$$\rho_0(2)t_0(2)/\sqrt{\eta}(2) \approx \rho_0(3)t_0(3)/\sqrt{\eta}(3), \quad (13)$$

где t_0 — толщина образца. Из выражения (13) следует, что с увеличением степени асимметрии используемого отражения должны расти величины ρ_0 .

Таким образом, поправка к фактору эффективного поглощения $\exp(-\mu_{ds0} t)$ разложена на множители, один из которых (β'/ρ^2) зависит только от деформации, а второй $[L_0/\exp(-\mu_{ds0} t)]$ представляет собой отношение структурно-чувствительных дифракционных параметров, выражения для которых через характеристики дефектов получены авторами настоящей работы ранее [18]. В табл. 5 приведены не зависящие от характеристик СРНМ и степени асимметрии универсальные коэффициенты деформационных поправок к L_0 и к факторам экстинкции $\exp(-\mu_{ds0} t)$ и $\exp(-\mu_0^* t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, полученных при ис-

ТАБЛИЦА 5. Нормированные (независящие от СРНД) коэффициенты поправок α'/ρ^2 , α_1'/ρ , β'/ρ^2 и δ'/ρ^2 к L_0 и к факторам экстинкции, $\exp(-\mu_{ds0} t)$ и $\exp(-\mu_0^* t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, полученные при использовании 220 симметричных Лауэ-отражений MoK_{α} -излучения.

α'	α_1' , мкм	β' , мкм ³	δ' , мкм ²
-1	$-1,4 \cdot 10^3$	$(1,8 \pm 0,7) \cdot 10^{12}$	$-(1 \pm 0,1) 10^{11}$

пользовании 220 симметричных Лауэ-отражений MoK_α -излучения.

Таким образом, доказана возможность разделения влияния на ПИОС СРНД и УД и получены не зависящие от характеристик СРНД универсальные коэффициенты деформационных поправок к L_0 и к факторам экстинкции $\exp(-\mu_{ds0}^* t)$ и $\exp(-\mu_0^* t)$ для деформационных зависимостей ПИОС упруго изогнутых монокристаллов Si, при использовании 220 Лауэ-отражений MoK_α -излучения. Следует отметить, что в работе [27] эмпирически установлен вид зависимостей множителей к универсальным поправкам от факторов динамического рассеяния в неизогнутом монокристалле с СРНД L_0 , $\exp(-\mu_{ds0}^* t)$ и $\exp(-\mu_0^* t)$, которые, в свою очередь, зависят от типа, размера и концентрации СРНД. Однако, как известно [18], L_0 , μ_{ds0} и μ_0^* в образцах с несколькими определяющими типами СРНД представляют собой суммы соответствующих факторов дефектов всех определяющих типов. Поэтому полученные в настоящем разделе количественные характеристики совместного влияния изгиба и СРНД являются суммарными для различных содержащихся в монокристаллах СРНД. Исследованию зависимости указанных характеристик от типа, размера и концентрации СРНД посвящен следующий раздел.

5. ИЗУЧЕНИЕ СОВМЕСТНОГО ВЛИЯНИЯ ИЗГИБА И СРНД РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ И РАЗМЕРОВ НА ВЕЛИЧИНУ ПИОС

На рис. 12 и 13 для образцов 2 и 3 представлены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные отдельно для каждого из трех определяющих типов СРНД при использовании выражений (1)–(12). Из рис. 12, 13 видно, что для обоих образцов влияние на величину ПИОС больших и сверхбольших дислокационных петель относительно невелико. При этом для образца 2 ближе всего к экспериментальной деформационной зависимости ПИОС проходит рассчитанная деформационная зависимость для наноразмерных в трех измерениях петель, а для образца 3 — рассчитанная деформационная зависимость для дискообразных кластеров с наноразмерной толщиной h . Как указано выше, процедура фитирования экспериментально полученных деформационных зависимостей ПИОС включает в себя поиск значения радиуса кривизны критического изгиба ρ_k , среднего для всех СРНД определяющих типов в образце. В этом случае справедливо выражение (9). Однако, используя выражения (11) и (12) для вычисления коэффициентов деформационных поправок к факторам экстинкции отдельно для СРНД каждого из трех определяющих типов авторы настоящей работы получили три разных значения ρ_k . При этом расчеты показали, что, несмотря на то, что для мелких петель ρ_k намного больше, чем для кластеров, хорошего совпадения с экспериментальными деформационными зависимостями удается добиться, только полагая для всех дефектов $\rho_k = 0,4\rho_0$.

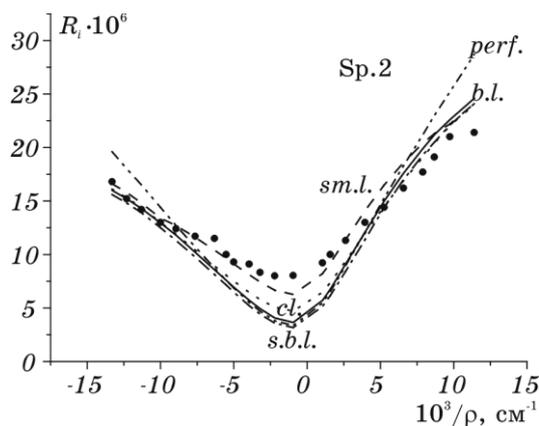


Рис. 12. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (1)–(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргерса, a — параметр решетки) $R_{bl} = 0,45$ мкм, $c_{bl} = 5,2 \cdot 10^{-15}$ (сплошная линия); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l.} = 0,031$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,43 \cdot 10^{-10}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,45$ мкм, $h_{cl} = 0,0116$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир) и сверхбольших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{s.b.l.} = 10$ мкм, $c_{s.b.l.} = 2,4 \cdot 10^{-19}$ (штрих-пунктир); деформационная зависимость ИОС кристалла без СРНД (штрих-двойной пунктир) и экспериментальная деформационная зависимость ПИОС (маркеры).

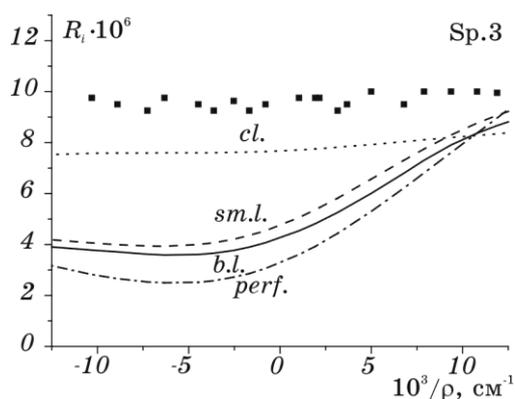


Рис. 13. Деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные по формулам (1)–(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргерса, a — параметр решетки) $R_{bl} = 0,667$ мкм; $c_{bl} = 6,2 \cdot 10^{-15}$ (сплошная линия); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l.} = 0,0057$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,11 \cdot 10^{-8}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,667$ мкм, $h_{cl} = 0,0138$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир); деформационная зависимость ИОС кристалла без СРНД (штрих-пунктир) и экспериментальная деформационная зависимость ПИОС (маркеры).

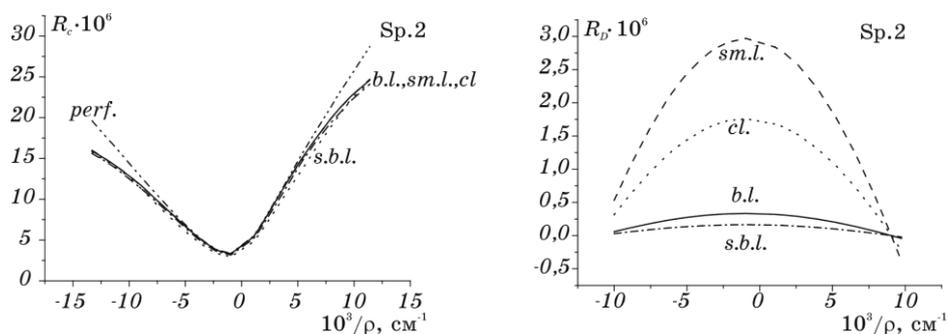


Рис. 14. Деформационные зависимости когерентной (R_C) и диффузной (R_D) составляющих ПИОС, рассчитанные по формулам (1)–(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргерса, a — параметр решетки) $R_{bl} = 0,45$ мкм, $c_{bl} = 5,2 \cdot 10^{-15}$ (сплошная линия); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l.} = 0,031$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,43 \cdot 10^{-10}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,45$ мкм, $h_{cl} = 0,0116$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир) и сверхбольших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{s.b.l.} = 10$ мкм, $c_{s.b.l.} = 2,4 \cdot 10^{-19}$ (штрих-пунктир); деформационная зависимость ИОС кристалла без СРНД (штрих-двойной пунктир).

Рис. 14 и 15 иллюстрируют природу описанной выше неаддитив-

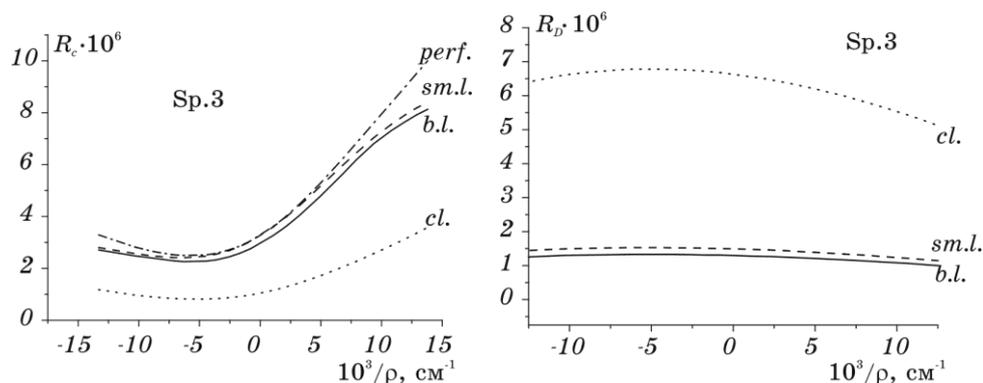


Рис. 15. Деформационные зависимости когерентной (R_C) и диффузной (R_D) составляющих ПИОС, рассчитанные по формулам (1)–(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргерса, a — параметр решетки) $R_{bl} = 0,667$ мкм; $c_{bl} = 6,2 \cdot 10^{-15}$ (сплошная линия); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l.} = 0,0057$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,11 \cdot 10^{-8}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,667$ мкм, $h_{cl} = 0,0138$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир); деформационная зависимость ИОС кристалла без СРНД (штрих-пунктир).

ности. Присутствие СРНД влияет как на когерентную, так и на диффузную компоненты ПИОС. При этом знак влияния различен. Кроме того, абсолютная величина этого влияния для когерентной составляющей растет, а для диффузной уменьшается с увеличением степени упругого изгиба. Наиболее ярко влияние СРНД иллюстрируют рис. 13 и 15, из которых видно, что экспериментально наблюдаемые и рассчитанные для кластеров значения величин ПИОС вследствие влияния СРНД перестают зависеть от деформации из-за отмеченного разного характера этой зависимости для составляющих ПИОС.

Сравнение деформационных зависимостей ПИОС, рассчитанных отдельно для СРНД разных размеров, с деформационной зависимостью ИОС, рассчитанной для монокристалла без СРНД, показывает, что чем крупнее СРНД, тем ярче проявляется неаддитивность влияния СРНД и УД на ПИОС. Видно, что точка исчезновения чувствительности к дефектам зависит от радиуса дефектов: чувствительность ПИОС к кластерам и дислокационным петлям, радиусы которых одинаковы, исчезает при одной и той же степени упругого изгиба (см.

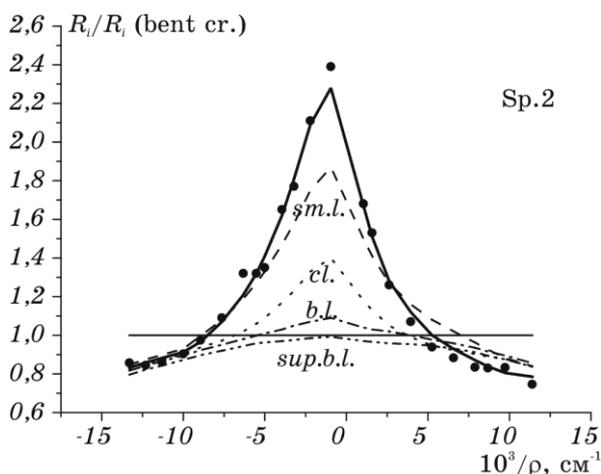


Рис. 16. Деформационные зависимости отношений ПИОС, рассчитанных по формулам (1)–(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, к рассчитанным ИОС кристалла без СРНД (R_i/R_{perf}): для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргерса, a — параметр решетки) $R_{bl} = 0,45$ мкм, $c_{bl} = 5,2 \cdot 10^{-15}$ (штрихпунктир); мелких дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{sm.l.} = 0,031$ мкм, $c_{sm.l.} = 1,43 \cdot 10^{-10}$ (штриховая линия); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,45$ мкм, $h_{cl} = 0,0116$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир), сверхбольших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ $R_{s.bl.} = 10$ мкм, $c_{s.bl.} = 2,4 \cdot 10^{-19}$ (штрихдвойной пунктир); для кристалла без СРНД (сплошная линия) и экспериментальная деформационная зависимость отношений ПИОС к рассчитанным ИОС кристалла без СРНД (маркеры).

рис. 12 и 13), несмотря на то, что степень их влияния на ПИОС резко различна. Из рис. 12 видно, что при относительно слабом влиянии малых дислокационных петель на ПИОС в отсутствие изгиба, их присутствие в образце заметно сдвигает точку исчезновения чувствительности ПИОС к дефектам в сторону большей степени деформации.

На рис. 16–18 показаны деформационные зависимости отношения ПИОС изогнутого реального монокристалла к ПИОС изогнутого монокристалла без СРНД.

Из рис. 16 видно, что максимальные отклонения кривой от единицы в сторону увеличения наблюдаются в центральной части кривых и демонстрируют существенное нарушение кинематического закона сохранения ПИОС за счет преобладания диффузной составляющей ПИОС над уменьшением из-за СРНД ее когерентной составляющей, а с ростом изгиба это преобладание уменьшается до нуля в точке потери чувствительности к СРНД (ρ_0) и далее изменяется знак и растет величина влияния СРНД на ПИОС из-за увеличивающегося преобладания уменьшения за счет СРНД когерентной составляющей ПИОС над диффузной составляющей. При слабом упругом изгибе, при $|\rho| > \rho_0$ преобладает влияние на величину ПИОС мелких дефектов, а при сильном упругом изгибе, при $|\rho| < \rho_0$ преобладает влияние на величину ПИОС крупных дефектов. Поэтому для получения характеристик крупных дефектов необходимо исследование хода деформационных зависимостей образцов при упругих изгибах, соответствующих $|\rho| < \rho_0$.

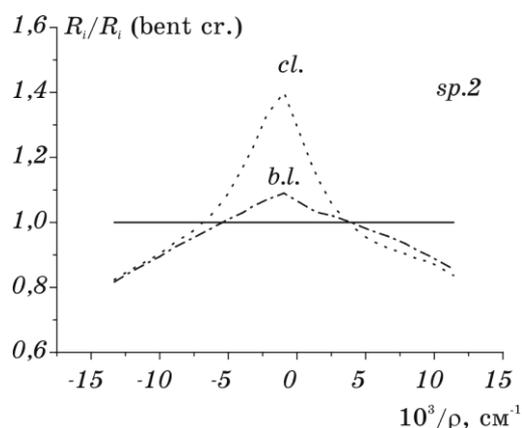


Рис. 17. Деформационные зависимости отношений ПИОС, рассчитанных по формулам (1)–(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, к рассчитанному ИОС кристалла без СРНД ($R_i/R_{perf.}$): для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргерса, a — параметр решетки) $R_{bl} = 0,45$ мкм, $c_{bl} = 5,2 \cdot 10^{-15}$ (штрихпунктир); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,45$ мкм, $h_{cl} = 0,0116$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир) и для кристалла без СРНД (сплошная линия).

Анализ выражения (13) показывает, что для выполнения указанного условия можно не увеличивая степени изгиба использовать рефлекс с большей степенью асимметрии. Ниже будет показано, что анализ деформационных зависимостей ПИОС, полученных для одного и того же образца при использовании двух 220 Лауэ-рефлексов MoK_{α_1} -излучения от плоскостей, составляющих резко различные углы ψ с нормалью к поверхности кристалла, позволяет получить величины характеристик мелких и крупных СРНД. Такую же неразрушающую количественную диагностику дефектной структуры динамически рассеивающего реального монокристалла можно осуществить комбинированным методом толщинных и азимутальных зависимостей ПИОС [18]. Но метод деформационных зависимостей ПИОС, как будет показано ниже, более чувствителен к типу СРНД. Причина повышенной чувствительности к типу дефектов обусловлена описанным выше влиянием упругой деформации на коэффициенты экстинкции.

Из рис. 17 и 18 видно, что изменение знака влияния больших петель и кластеров, имеющих одинаковый радиус, на величину ПИОС происходит при одинаково сильном положительном изгибе. Кроме того, видно, что для двух данных образцов, независимо от степени асимметрии используемого отражения, наблюдается намного большее относительное увеличение ПИОС за счет присутствия кластеров по сравнению с большими дислокационными петлями. Однако при сильном изгибе, вызвавшем изменение знака влияния СРНД (при $|\rho| < \rho_0$), уменьшение величины ПИОС за счет наличия кластеров и дис-

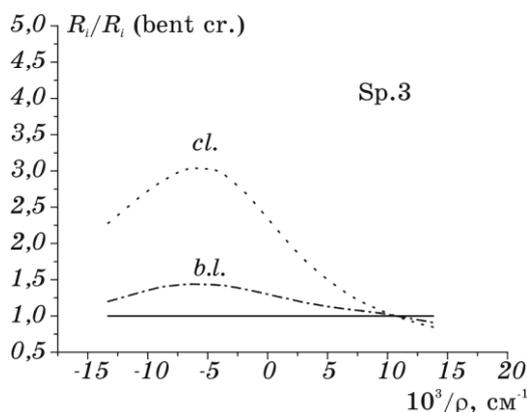


Рис. 18. Деформационные зависимости отношений ПИОС, рассчитанных по формулам (1)–(12), описывающим одновременное влияние на ПИОС упругих деформаций и СРНД, к рассчитанным ИОС кристалла без СРНД (R_i/R_{perf}): для больших дислокационных петель с $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$ (\mathbf{b} — вектор Бюргерса, a — параметр решетки) $R_{bl} = 0,667$ мкм, $c_{bl} = 6,2 \cdot 10^{-15}$ (штрихпунктир); кластеров SiO_2 в форме дисков $R_{cl} = 0,667$ мкм, $h_{cl} = 0,0138$ мкм, $c_{cl} = 2,24 \cdot 10^{-14}$ (пунктир) и для кристалла без СРНД (сплошная линия).

локационных петель становится практически одинаковым. Это позволяет путем анализа двух деформационных зависимостей с резко различными значениями ψ однозначно определить тип и величины характеристик СРНД.

6. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПИОС ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ СРНД В МОНОКРИСТАЛЛЕ

Образец № 4, толщиной 500 мкм, был вырезан из монокристалла Si, выращенного по Чохральскому с начальным содержанием кислорода $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В результате отжига в образце произошел распад твердого раствора кислорода с образованием кластеров, концентрация которых, согласно данным избирательного травления, составила $n = 10^6 \text{ см}^{-2}$ [6]. О дефектной структуре образца в отсутствие УИ известно, что она должна соответствовать одной из двух моделей, предложенных автором работы [24]. Первая модель предполагает наличие случайно распределенных в объеме образца дискообразных кластеров SiO_2 , радиус и толщина которых увеличиваются с увеличением времени отжига по установленному в работе [24] закону, а также дислокационных петель, образованных в результате конденсации собственных междоузельных атомов избыточного кремния в образце. Вторая модель предполагала наличие случайно распределенных в объеме образца сферических кластеров SiO_2 и дислокационных петель, образованных в результате конденсации собственных междоузельных атомов избыточного кремния в образце.

Авторами работы [6] для образца № 4 были получены деформационные зависимости ПИОС при использовании 220 Лауэ-отражений MoK_α -излучения от двух плоскостей, образующих разные углы с нормалью к поверхности кристалла: $\psi_1 = 1,5^\circ$ и $\psi_2 = 53,2^\circ$.

Путем сравнения указанных экспериментальных деформационных зависимостей ПИОС с рассчитанными деформационными зависимостями для упруго изогнутого кристалла, не содержащего СРНД, авторами настоящей работы для образца 4 получены значения ρ_0 , а затем из выражений ((8)–(10)) вычислены значения ρ_k , представленные в табл. 6.

ТАБЛИЦА 6. Значения критического радиуса кривизны УИ (ρ_k), радиуса кривизны УИ, при котором исчезает чувствительность ПИОС к СРНМ (ρ_0), полученные при фитировании деформационных зависимостей ПИОС для образца 4.

$\Psi, ^\circ$	$\rho_0(+), \text{ мкм}$	$\rho_k, \text{ мкм}$
1,5	$2,193 \cdot 10^5$	$8,77 \cdot 10^4$
53,2	$4,89 \cdot 10^6$	$1,96 \cdot 10^6$

Из данных табл. 6 видно, что значения величин критического радиуса кривизны изгиба ρ_k для использованных рефлексов различаются больше, чем на порядок. При слабой степени асимметрии используемого отражения ($\psi = 1,5^\circ$) вся экспериментальная деформационная зависимость ПИОС соответствует интервалу $|\rho| > \rho_k$, а при сильной степени асимметрии используемого отражения ($\psi = 53,2^\circ$) вся экспериментальная деформационная зависимость ПИОС соответствует интервалу $|\rho| < \rho_k$. В работе [25] расчеты деформационных зависимостей без учета влияния УИ на диффузное рассеяние показали, что при сильной асимметрии используемого отражения чувствительность ПИОС к микродефектам растет при усилении упругого изгиба и проявляется в заметном уменьшении когерентной составляющей ПИОС пропорционально $\exp(-\mu_{ds0}t)$.

Однако экспериментальная деформационная зависимость ПИОС, полученная авторами работы [6] при $\psi_2 = 53,2^\circ$, практически совпадает с рассчитанной для идеального кристалла. Это объясняется тем, что, при учете влияния УД согласно модели, предложенной авторами настоящей работы в работе [23], при $|\rho| < \rho_k$ фактор эффективного поглощения для когерентной составляющей ПИОС становится равным фактору эффективного поглощения для диффузной составляющей ПИОС: $\exp(-\mu_{ds}t) = \exp(-\mu^*t)$. Сравнительно малое максимальное при $\delta = -1,3 \cdot 10^{10}$ значение величины поправки $(1 - \delta/\rho^2) = (1 - 0,036) = 0,964$ указывает на то, что реальное уменьшение ПИОС по сравнению с идеальным кристаллом должно быть на самом деле гораздо менее заметным, т. е. предполагаемое в [25] повышение чувствительности к СР микродефектам и к СРНМ нивелируется.

Однако, фитирование теоретической и экспериментальной деформационных зависимостей ПИОС для образца № 4, полученных при $\psi_1 = 1,5^\circ$, было осуществлено при использовании взятых из таблицы 5 значений коэффициентов поправок к факторам экстинкции (α_1/ρ и δ/ρ^2) и значений нормированных коэффициентов поправок α'/ρ^2 и β'/ρ^2 . На рис. 19 сплошной линией изображены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные в рамках первой и второй моделей дефектной структуры с учетом влияния деформации на диффузное рассеяние.

Из рис. 19 видно, что фитирование деформационных зависимостей ПИОС, полученных при использовании только отражения со слабой степенью асимметрии ($\psi_1 = 1,5^\circ$), не позволяет установить тип СРНД, присутствующих в исследуемом образце. Однако совместное фитирование деформационных зависимостей, полученных при использовании рефлексов с различной степенью асимметрии, позволило однозначно определить, что наноразмерными являются дислокационные петли.

Из рис. 19 видно, что экспериментальные деформационные зависимости ПИОС совпадают с рассчитанными с учетом зависимости диффузного рассеяния от деформации только для первой модели

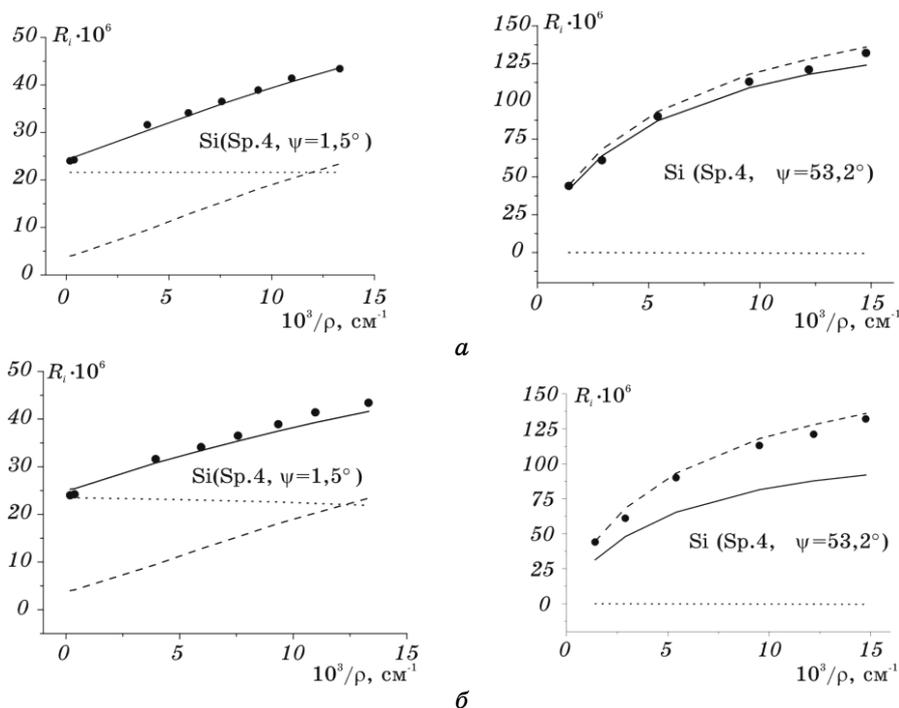


Рис. 19. *a* — экспериментальные зависимости ПИОС (маркеры) и теоретические зависимости ИОС бездефектного изогнутого монокристалла (штрих), рассчитанные с учетом влияния УИ на диффузное рассеяние в рамках модели 1, предполагающей наличие в исследуемом образце дискообразных кластеров ($R_{cl} = 0,22$ мкм, $h_{cl} = 8,4$ нм, $c_{cl} = 8 \cdot 10^{-13}$) и наноразмерных петель ($R_{sl} = 32$ нм, $c_{sl} = 8,5 \cdot 10^{-10}$) (при $\mu_{ds0}/\mu_0^* = 6,26$) зависимости ПИОС (сплошные линии) и диффузной составляющей ПИОС R_D (пунктир); *б* — экспериментальные зависимости ПИОС (маркеры) и теоретические зависимости ИОС бездефектного изогнутого монокристалла (штрих), рассчитанные с учетом влияния УИ на диффузное рассеяние в рамках модели 2, предполагающей наличие в исследуемом образце сферических кластеров ($R_{cl} = 72$ нм) и призматических дислокационных петель ($R_l = 0,22$ мкм, $c_l = 1,5 \cdot 10^{-13}$) (при $\mu_{ds0}/\mu_0^* = 3,43$) зависимости ПИОС (сплошные линии) и диффузной составляющей ПИОС R_D (пунктир).

при $\mu_{ds0}/\mu_0^* = 6,26$ (рис. 19, *a*). В этом случае в рамках модели 1 для образца 4 определены следующие значения средних радиусов и концентраций дискообразных кластеров, больших петель и наноразмерных петель:

$$R_{cl} = 0,22 \text{ мкм}, \quad h_{cl} = 8,4 \text{ нм}, \quad c_{cl} = 8 \cdot 10^{-13}, \quad R_{sl} = 32 \text{ нм}, \quad c_{sl} = 8,5 \cdot 10^{-10}.$$

Полученное значение величины концентрации кластеров соглас-

но выводам работы [26] соответствует температуре отжига 896°C . Известно, что при температуре отжига ниже 900°C не происходит образование больших дислокационных петель, радиус которых превышает радиус выдавливающих их кластеров. Таким образом, полученные в рамках модели 1 размеры кластеров согласуются с тем фактом, что они наблюдались в данном образце методом избирательного травления авторами работы [6]. Наличие в исследуемом образце наноразмерных петель, размеры и концентрация которых определены в настоящей работе, не могло быть зафиксировано методом избирательного травления. При отсутствии влияния УД на диффузное рассеяние наличие в образце кластеров с указанными характеристиками должно было бы приводить к заметному уменьшению ПИОС по сравнению с идеальным кристаллом при использовании резко асимметричного отражения.

На рис. 20 сплошной линией изображены деформационные зависимости ПИОС, рассчитанные в рамках первой модели дефектной структуры без учета влияния деформации на диффузное рассеяние при следующих значениях средних радиусов и концентраций дискообразных кластеров, а также малых петель:

$$R_{cl} = 0,22 \text{ мкм}, R_{cl}/h_{cl} = 26,05, c_{cl} = 8,7 \cdot 10^{-13};$$

$$R_{sl} = 0,032 \text{ мкм}, c_{sl} = 9,24 \cdot 10^{-10}.$$

Следует отметить, что расхождение расчета с экспериментом,

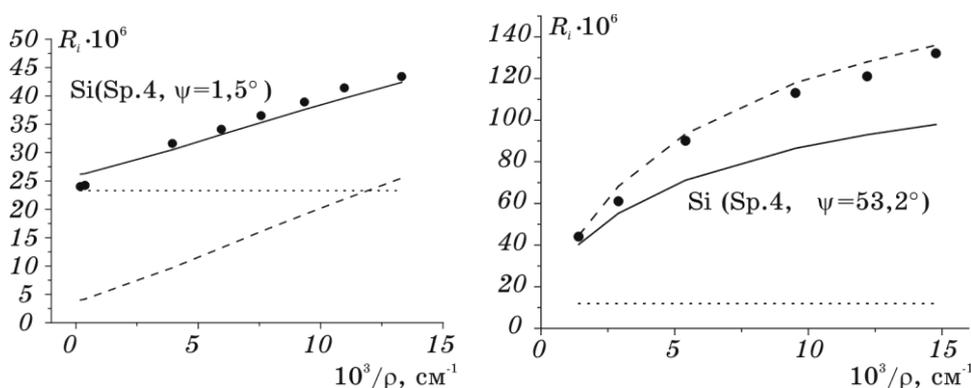


Рис. 20. Экспериментальные зависимости ПИОС (маркеры) и теоретические зависимости ИОС бездефектного изогнутого монокристалла (штрих), рассчитанные без учета влияния УИ на диффузное рассеяние в рамках модели 1, предполагающей наличие в исследуемом образце дискообразных кластеров ($R_{cl} = 0,22 \text{ мкм}$, $h_{cl} = 8,4 \text{ нм}$, $c_{cl} = 8,7 \cdot 10^{-13}$) и наноразмерных петель ($R_{sl} = 32 \text{ нм}$, $c_{sl} = 9,2 \cdot 10^{-10}$) зависимости ПИОС (сплошные линии) и диффузной составляющей ПИОС R_D (пунктир).

показанное на рис. 20, наблюдается для деформационных зависимостей, рассчитанных без учета зависимости диффузного рассеяния от деформации в рамках обеих моделей дефектной структуры, что экспериментально подтверждает необходимость учета деформационных поправок, найденных в настоящей работе.

Определены тип и характеристики СРНД, ненаблюдаемых методами избирательного травления и рентгеновской топографии.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. N. Kato, *J. Phys. Soc. Jap.*, **19**, No. 6: 971 (1964).
2. F. N. Chukhovskii and P. V. Petrashen, *Acta crystallogr. A*, **33**, No. 2: 311 (1977).
3. N. Kato, *X-Ray Diffraction* (Eds. L. V. Azaroff, R. Karlow, N. Kato et al.) (New York: John Wiley: 1974).
4. Z. N. Kalman and S. Weissmann, *J. Appl. Crystallogr.*, **12**, No. 2: 209 (1979).
5. В. И. Хрупа, Е. Н. Кисловский, Л. И. Даценко, *Металлофизика*, **2**, № 4: 55 (1980).
6. В. И. Хрупа, Л. И. Даценко, Е. Н. Кисловский, А. С. Васильковский, *Металлофизика*, **6**, № 6: 70 (1984).
7. V. I. Khrupa, E. N. Kislovskii, and L. I. Datsenko, *Phys. Status Solidi*, **63**, No. 1: 439 (1981).
8. Y. Matsushita, S. Kishino, and M. Kanamori, *Jap. J. Appl. Phys.*, **19**, No. 2: L101 (1980).
9. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наук. думка, 1988).
10. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii et al., *Phys. Status Solidi A*, **87**, No. 2: 597 (1985).
11. В. И. Кушнир, Э. В. Суворов, К. Ю. Мухин, *ФТТ*, **22**, № 7: 2435 (1980).
12. L. I. Datsenko and E. N. Kislovskii, *Phys. Status Solidi*, **25**, No. 2: 551 (1974).
13. П. В. Петрашень, *Металлофизика*, **8**, № 1: 35 (1986).
14. П. В. Петрашень, Ф. Н. Чуховский, *Металлофизика*, **8**, № 3: 45 (1986).
15. В. В. Николаев, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, В. Н. Хрупа, *Металлофизика*, **11**, № 2: 52 (1989).
16. Г. В. Гринь, Е. Н. Кисловский, П. В. Петрашень, А. Ю. Разумовский, *Металлофизика*, **12**, № 5: 113 (1990).
17. Е. Н. Кисловский, Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин и др., *Металлофизика*, **12**, № 6: 37 (1990).
18. В. Б. Молодкин, В. В. Немешкаленко, А. И. Низкова и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 3: 3 (2000).
19. A. Borghesi, B. Pivac, A. Sassela, and A. Stella, *J. Appl. Phys.*, **77**, No. 9: 4169 (1995).
20. A. N. Kostyuk, V. B. Molodkin, and S. I. Olikhovskii, *Phys. Status Solidi B*, **178**, No. 1: 45 (1993).
21. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and A. N. Kostyuk, *Phys. Status Solidi B*,

- 183, No. 1: 59 (1993).
22. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, А. Н. Костюк, Л. Г. Ткачук, *Металлофиз. новейшие технол.*, **23**, № 7: 861 (2001).
 23. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, С. И. Олиховский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **25**, № 1: 107 (2003).
 24. S. M. Hu, *Appl. Phys. Lett.*, **48**, No. 2: 115 (1986).
 25. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, С. И. Олиховский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **24**, № 11: 1483 (2002).
 26. F. M. Livingston, S. Messoloras, R. C. Newman, B. C. Pike, R. J. Stewart, W. J. Binns, W. P. Brown, and J. G. Wilkes, *J. Phys.*, **17**: 6253 (1984).
 27. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, И. И. Рудницкая и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **25**, № 11: (2003).