

PACS numbers: 07.85.-m, 61.10.-i, 61.72.Dd, 68.65.-k, 78.70.Ck, 81.07.-b, 81.70.Eh

## **Уникальная информативность диффузной динамической комбинированной дифрактометрии материалов и изделий нанотехнологий**

А. П. Шпак, М. В. Ковальчук\*, И. М. Карнаухов\*\*, В. В. Молодкин,  
Е. Г. Лень, А. И. Низкова, С. И. Олиховский, Б. В. Шелудченко,  
Дж. Е. Айс\*\*\*, Р. И. Барабаш\*\*\*

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

*\*Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН,  
просп. Ленинский, 59,  
119333 Москва, Россия*

*\*\*ННЦ «Харьковский физико-технический институт» НАН Украины,  
ул. Академическая, 1,  
61108 Харьков, Украина*

*\*\*\*Оук-Риджская национальная лаборатория,  
Оук-Ридж, 37831-6118, Теннесси, США*

В работе проведен детальный систематический анализ открытого явления уникальной информативности динамической картины рассеяния в кристаллах с дефектами, установлены его физическая природа и возможности практического использования. Природа этого явления состоит в том, что в каждом из рефлексов картины рассеяния при переходе от кинематического к динамическому случаю начинают принципиально отличаться между собой зависимости от условий динамической дифракции брэгговской и диффузной составляющих рассеяния, которые всегда остаются одинаковыми в кинематической теории. Это принципиальное различие обусловлено существенно разными значениями фундаментальных величин факторов рассеяния для брэгговской и диффузной составляющих и их разным характером, а именно, для брэгговской — это усредненный по конфигурациям дефектов потенциал рассеяния (периодический), а для диффузной — флуктуации от среднего потенциала (непериодическая часть). За счет этого различаются между собой и динамические факторы брэгговской и диффузной экстинкций, а также другие закономерности проявления эффектов многократности для брэгговского и диффузного рассеяний. Установлен аналитически характер указанных зависимостей, что обеспечило уникальную возможность управления вкладом диффузной составляющей при неизменных характе-

ристикмах дефектної структури тільки за счет целенаправленого змінення умов динамічної дифракції. Благодаря тому, що вплив дефектів на брегговську і дифузну складові картини розсіяння має протилежний характер, то єсть вони завжди збільшують дифузну складову, але зменшують брегговську, зазначене явище забезпечило можливість управляемого змінення результуючого характеру впливу дефектів на картину розсіяння в цілому, по якому і проводиться їх діагностика. Це обумовило суттєві змінення самих основ проведеної в рамках кінематичної теорії кількісної і якісної класифікації дефектів по їх впливу на картину розсіяння при їх діагностиці в умовах динамічної дифракції. Найбільш важливим перевагою динамічної дифракції стало те, що можливість управління вкладом дифузної складової розсіяння шляхом целенаправленого змінення умов динамічної дифракції радикально підвищила інформативність і забезпечила принципово нові функціональні можливості динамічної дифрактометрії. Ця парадоксально висока з точки зору традиційних представлень інформативність обумовлена можливістю тільки при динамічній дифракції за счет змінення умов дифракції реалізувати і комбіновано (совместно) обробити необхідний повний набір незалежних дифракційних експериментів для одного зразка з фіксованою дефектною структурою з метою рішення оберненої задачі багатопараметричної діагностики матеріалів і виробів нанотехнологій з кількома типами дефектів. Таким чином, створено нове покоління кристаллографії — дифузної динамічної комбінованої дифрактометрії (ДДКД) багатьох типів дефектів в монокристалах і гетерогенних системах.

У роботі виконано детальну систематичну аналізу відкритого явища надзвичайної інформативності динамічної картини розсіяння у кристалах з дефектами, встановлено його фізичну природу та можливості практичного використання. Природа цього явища полягає в тому, що в кожному з рефлексів картини розсіяння при переході від кінематичного до динамічного випадку починають принципово відрізнятися між собою залежності від умов динамічної дифракції Бреґгової та дифузної складових розсіяння, які завжди залишаються однакою в кінематичній теорії. Ця принципова різниця є обумовленою суттєво різними значеннями фундаментальних величин факторів розсіяння для Бреґгової і дифузної складових та їх різним характером, а саме, для Бреґгової — це усереднені за конфігураціями дефектів потенціали розсіяння (періодичні), а для дифузної — флюктуації від середнього потенціалу (неперіодичні). Завдяки цьому відрізняються між собою і динамічні фактори Бреґгової та дифузної екстинкцій, а також інші закономірності прояву ефектів багатократності для Бреґгового та дифузного розсіянь. Встановлено аналітично характер зазначених залежностей, що забезпечило унікальну можливість керування внеском дифузної складової при незмінних характеристиках дефектної структури лише за рахунок цілеспрямованої зміни умов динамічної дифракції. Завдяки тому що вплив дефектів на Бреґгову і дифузну складові картини розсіяння має протилежний характер, тобто вони завжди збільшують дифузну складову, але зменшують Бреґгову, зазначене явище забезпечило можливість керованої

зміни результуючого характеру впливу дефектів на картину розсіяння в цілому, за яким і виконується їх діагностика. Це обумовило суттєві зміни самих основ виконаної в рамках кінематичної теорії кількісної та якісної класифікації дефектів за їх впливом на картину розсіяння у випадку їх діагностики в умовах динамічної дифракції. Найбільш важливою перевагою динамічної дифракції виявилось те, що можливість керування внеском дифузної складової розсіяння шляхом цілеспрямованої зміни умов динамічної дифракції радикально підвищила інформативність та забезпечила принципово нові функціональні можливості динамічної дифрактометрії. Ця парадоксальна з точки зору традиційних уявлень інформативність є обумовленою можливістю лише при динамічній дифракції за рахунок зміни умов дифракції реалізувати та комбіновано (спільно) обробити необхідний повний набір незалежних дифракційних експериментів для одного зразка з фіксованою дефектною структурою з метою розв'язання оберненої задачі багатопараметричної діагностики матеріалів та виробів нанотехнологій з декількома типами дефектів. Таким чином, створено нове покоління кристаллографії — дифузну динамічну комбіновану дифрактометрію (ДДКД) багатьох типів дефектів у монокристалах і гетерогенних системах.

In a given work, the detailed systematic analysis of the discovered phenomenon is carried out. This phenomenon of unique informativity of the dynamical-scattering pattern in crystals with many types of defects is described, its physical nature and possibilities of practical application are determined. The phenomenon nature lies in the fact that, for each reflex of the scattering pattern, while transition from kinematic case to dynamical one takes place, the dependences on conditions of dynamical diffraction are radically different from each other for Bragg and diffuse components, which always remain the same in the kinematic theory. This essential difference is caused by the substantially different nature and magnitudes of the fundamental characteristics of materials, namely, scattering factors, for Bragg and diffuse components. For the Bragg component, it is the scattering potential averaged over all defects' configurations (periodical), and for the diffuse one, these ones are the fluctuating deviations of scattering potential from its average value (non-periodical). As a result, the dynamical extinction factors for the coherent and diffuse-scattered waves differ from each other as well as other regularities of the multiple-scattering effects for Bragg and diffuse components. The ascertainment of a nature of the mentioned effects has provided the unique possibility of the operated change of diffuse-component contribution for the fixed defect structure just due to the purposive variation of the dynamical-diffraction conditions. The influences of defects on the Bragg and diffuse components of the scattering pattern have opposite nature, i.e. they always decrease the Bragg component, but increase the diffuse one. Due to this fact, the above-mentioned phenomenon provides the possibility of the controllable variations of the total defects' influence on the scattering pattern as a whole, which is used for its characterization. In case of the defects' diagnostics in the dynamical diffraction conditions, this one governed the essential revision of principles of the quantitative and qualitative classification of defects by their influence on the scattering pattern, which has been performed within the scope of the kinematic theory. The possibility to control the diffuse-component contribu-

tion is the most important advantage of the dynamical diffraction, which has increased radically the informativity and has provided the fundamentally new functional possibilities of the dynamical diffractometry. The dynamical diffraction only gives the possibility of realization and combined (joint) processing of full set of the independent diffraction experiments due to the changing diffraction conditions for a sample of fixed defect structure with the goal to solve an inverse problem of the multiparametric diagnostics of crystalline materials and products of nanotechnology with several types of defects. Thus, the new generation of crystallography, i.e. the diffuse dynamical combined diffractometry of complex defect structures in single crystals and heterogeneous systems, has been developed.

**Ключевые слова:** динамическая теория рассеяния рентгеновских лучей, рентгеновская дифрактометрия, диагностика микродефектов в кристаллах, условия дифракции, комбинированный подход.

*(Получено 26 мая 2008 г.)*

## ВВЕДЕНИЕ

В работе изложены новые принципы и обоснованы возможности радикального повышения информативности и чувствительности диагностики функциональных материалов и изделий нанотехнологий на основе использования открытого нового явления, обусловленного различиями в динамических эффектах для брэгговского и диффузного рассеяний и по этой причине принципиально отсутствующего при кинематическом рассеянии. Указанные различия и приводят к открытому различному характеру зависимостей от условий динамической дифракции брэгговской и диффузной составляющих. Это явление позволило создать четвертое поколение кристаллографии — диффузную динамическую комбинированную дифрактометрию (ДДКД), особенно эффективную при работе на источниках синхротронного излучения и нейтронов.

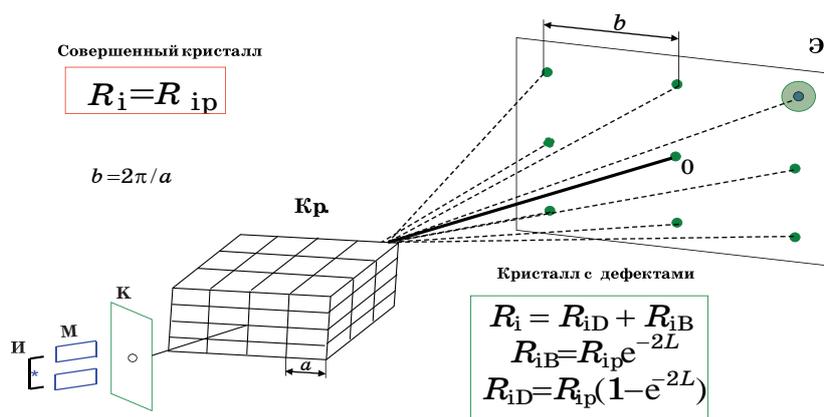
Первое и второе поколения относятся к классической кристаллографии, которая создана для установления структуры идеальных кристаллов, не содержащих дефектов. А именно, первое — это кинематическая (приближение однократного рассеяния [1, 2]), а второе — динамическая (строгое рассмотрение с учетом многократности рассеяния [1, 3, 4]) теории брэгговского рассеяния в идеальных кристаллах. Ко второму поколению можно отнести также приближенную динамическую теорию дифракции в совершенных кристаллах с существенно плавными полями макроскопически однородной деформации, разработанную S. Takagi [5, 6], D. Taupin [7] и др. [8–13], которая пренебрегает вторыми производными от волнового поля, и поэтому не может быть корректно применимой для кристаллов с микродефектами и наносистем, для которых крите-

рий плавности заведомо не выполняется.

Третье и четвертое поколения созданы именно для проведения диагностики статистических характеристик дефектов в кристаллах и связаны с рассмотрением также и диффузного рассеяния, обусловленного отклонениями от периодичности решетки, то есть дефектами кристаллов. Их теоретической основой является статистическая теория брэгговского и диффузного рассеяний излучений в кристаллах с дефектами: кинематическая (третье) и динамическая (четвертое). Мировой приоритет в создании этих теорий, а также в проведении на их основе классификации дефектов в кристаллах по их влиянию на картину рассеяния принадлежит ИМФ НАН Украины (соответственно М. А. Кривоглазу [14] и В. Б. Молодкину [15–23]). В настоящей работе проведен детальный сравнительный анализ чувствительности к дефектам и информативности диагностики на основе рассмотрений кинематической и динамической картин рассеяния. В результате, вскрыта радикально более высокая информативность динамической картины рассеяния, связанная с различным влиянием не только дефектов, но и условий динамической дифракции на когерентную и диффузную составляющие волновых полей в несовершенном кристалле. Следует отметить, что отдельные следствия этой общей закономерности, природа которой раскрывается только в данной работе, были установлены в более ранних работах [24–30] и имеют самостоятельное значение. Однако связь между ними, раскрывающая их природу, стала ясна только после анализа всей совокупности полученных на протяжении более чем 35 лет теоретических и экспериментальных результатов по динамическому рассеянию излучений кристаллическими системами, содержащими дефекты.

### **ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА КИНЕМАТИЧЕСКУЮ КАРТИНУ РАССЕЯНИЯ**

Как известно, непериодический потенциал рассеяния излучения кристаллом с дефектами, который зависит от случайных переменных, характеризующих распределение дефектов в кристалле, Кривоглаз представил в виде суммы двух слагаемых. Первое из них — усреднённый по случайным переменным при фиксированных параметрах кристалла потенциал, который становится периодическим при рассмотренном Кривоглазом хаотическом (однородном) распределении дефектов. Второе слагаемое — отклонения от периодичности, флуктуационная часть. Периодическая часть, в отличие от идеального кристалла, оказывается зависящей от статистических характеристик дефектов (в основном за счёт статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера  $\exp(-L)$ ) и непосредственно формирует и описывает брэгговское рассеяние  $R_{\text{БВ}}$  (рис. 1).



**Рис. 1.** Кинематическая картина рассеяния в идеальных кристаллах (темные пятна) и в кристаллах с дефектами (серая центральная часть — брэгговское рассеяние, более светлый ореол — диффузное). И — источник, М — монохроматор, К — коллиматор, Кр. — кристалл, Э. — экран.

Флуктуационная часть непосредственно формирует диффузное рассеяние  $R_{iD}$ , распределение интенсивности которого в пространстве обратной решётки выражено Кривоглазом при помощи разработанного им метода флуктуационных волн через характеристики дефектов. При этом диффузное рассеяние оказалось наиболее информативным при диагностике дефектов по картине рассеяния в кинематической теории (рис. 1).

## ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА ДИНАМИЧЕСКУЮ КАРТИНУ РАССЕЯНИЯ

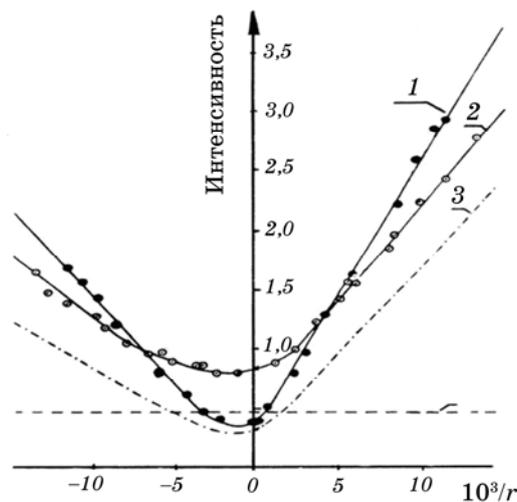
### 1. Брэгговская составляющая

При динамической дифракции, как впервые показано в работах [15–23], благодаря процессам многократности рассеяния и брэгговская, и диффузная составляющие интенсивности формируются существенно обеими частями потенциала. Это приводит к тому, что динамическое брэгговское рассеяние определяется не средним, как у Кривоглаза, а перенормированным за счёт перерассеяния на флуктуационной части эффективным периодическим потенциалом (комплексным и нелокальным), который подобен известному из электронной теории идеальных кристаллов когерентному потенциалу или оптическому из теории ядра. Этот эффективный потенциал существенно отличается от среднего по конфигурациям дефектов, являющегося лишь его первым приближением по малому динамическому параметру теории возмущений. Главное отличие

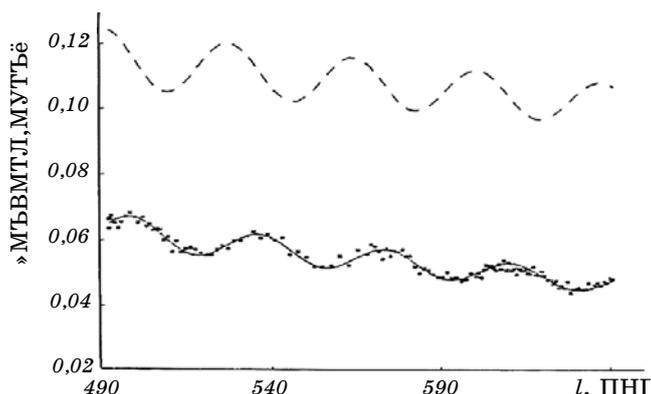
состоит в появлении фактора экстинкции за счёт диффузного рассеяния. Такое новое фундаментальное понятие динамической теории впервые введено в работе [15], в которой установлена физическая природа и связь этого фактора с характеристиками дефектов. Этот фактор описывает предсказанный авторами эффект ослабления как брэгговских, так и диффузных волн за счёт их перерасеяния на отклонениях от периодичности потенциала (первоначально был назван авторами [15] фактором эффективного поглощения) и оказался существенно более чувствительным к характеристикам дефектов, чем введенный Кривоглазом статический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера. В результате установлено, что при динамической дифракции главный эффект влияния дефектов на интенсивность брэгговского рассеяния вызывается, как правило, именно этим фактором диффузной экстинкции, а не статическим фактором Кривоглаза–Дебая–Валлера, который лишь дополнительно учитывает более слабое влияние дефектов. Это делает, в отличие от кинематического случая, брэгговское рассеяние не менее информативным и чувствительным к дефектам, чем диффузное рассеяние.

Аналогичный фактор экстинкции был введен независимо, но позже на три месяца Дедериксом [31, 32] в рамках метода оптического потенциала; однако, этот подход, в отличие от [15], не позволил описать интенсивность диффузного рассеяния непосредственно.

Результаты экспериментального подтверждения [33] эффекта экстинкции из-за диффузного рассеяния представлены на рис. 2. На-



**Рис. 2.** Деформационные зависимости ( $r$  — радиус кривизны упругого цилиндрического изгиба кристалла) интегральной интенсивности дифракции для совершенного (1) и несовершенного (2) кристаллов (3 — когерентная и 4 — диффузная составляющие кривой 2).



**Рис. 3.** Толщинные зависимости дифрагированной интегральной интенсивности совершенного (пунктирная линия) и дефектного (сплошная линия — теория, маркеры — эксперимент) кристаллов ( $l = t/\gamma_0$  — дифракционная толщина кристалла в направлении падающего пучка,  $\gamma_0$  — направляющий косинус лучей этого пучка,  $t$  — толщина кристалла).

блюдаемое изменение наклона линейного участка деформационных зависимостей интегральной интенсивности дифракции обусловлено влиянием предсказанного эффекта диффузной экстинкции.

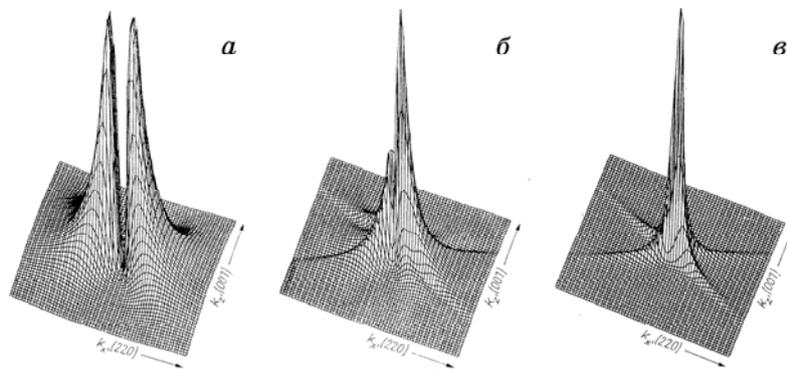
Фактор диффузной экстинкции демонстрирует также уникальную структурную чувствительность (см. рис. 3) [33].

Изменение периода осцилляций толщинной зависимости дифрагированной интегральной интенсивности, обусловленное статическим фактором Кривоглаза–Дебая–Валлера, на два порядка величины меньше, чем расстояние между кривыми, обусловленное фактором диффузной экстинкции Молодкина–Тихоновой–Дедерикса.

## 2. Динамические особенности влияния дефектов на диффузную составляющую картины рассеяния

Как показано в [15–23], многократное перерассеяние диффузных волн на периодической части потенциала преобразует их в блоховские волновые поля, для которых авторами [15–23] предсказаны и нашли многократное экспериментальное подтверждение [34–37] эффекты аномального прохождения и экстинкции диффузного рассеяния. Эти эффекты, обусловленные влиянием условий динамической дифракции, изменяют картину диффузного рассеяния существенно сильнее, чем характеристики дефектов. Указанные результаты иллюстрируют рис. 4 и 5.

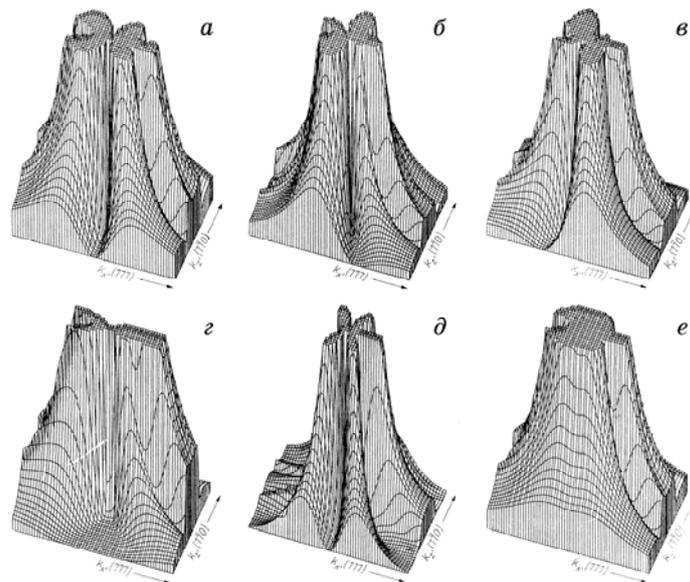
Изменение картины рассеяния с увеличением эффективной толщины кристалла  $\mu_0 t$  ( $\mu_0$  — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения,  $t$  — толщина кристалла) иллюстрирует явление



**Рис. 4.** Распределения в плоскости дифракции интенсивности диффузного рассеяния кристалла [15–23], содержащего кластеры малого радиуса, при различных значениях его толщины:  $\mu_0 t = 0,027$  (а), 1,34 (б) и 5,36 (в). Пик (в) в 40 раз выше, чем пики (а) и более чем в два раза выше пика (б).

аномального прохождения диффузно рассеянных лучей (рис. 5).

Рисунок 5 иллюстрирует, как изменяется с изменением характеристик дефектов распределение интенсивности диффузного рассеяния в пространстве обратной решетки для кристалла, содержащего мелкие призматические петли различной пространственной ориен-



**Рис. 5.** Распределения интенсивностей диффузного рассеяния (Фурье-изображения полей смещений) для мелких призматических петель различной ориентации (см. [22]).

тации.

Указанная динамическая теория рассеяния в кристаллах с дефектами была построена впервые сорок лет назад для кристаллов со слабыми отклонениями от периодичности [15–17] и двадцать пять лет назад — обобщена на случаи произвольных отклонений, что позволило провести в рамках динамической теории классификацию дефектов [18–23], а пять–десять лет назад — обобщена на случаи дефектов, размеры которых соизмеримы с длиной экстинкции, и кристаллов с упругим изгибом и дефектами [38–49].

Главными достоинством и преимуществом разработанной статистической динамической теории над аналогичными теориями [50–55], которые были позже разработаны фактически для мозаичных кристаллов (Като, Гольй, Чуховский и др.) и непригодны для диагностики дефектов (см. статью Н. М. Олехновича и др. [56] и обзор Шнайдера [57]), есть наличие прямых аналитических зависимостей интенсивностей когерентного и диффузного рассеяний от характеристик дефектов, что позволило проводить их полную количественную характеристику.

#### **ДИНАМИЧЕСКИЙ ПРИНЦИП УПРАВЛЕНИЯ ВКЛАДОМ ДИФФУЗНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ В КАРТИНУ РАССЕЯНИЯ ПУТЕМ ЦЕЛЕНАПРАВЛЕННОГО ИЗМЕНЕНИЯ УСЛОВИЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКЦИИ**

Как уже отмечалось, в более ранних работах авторов был предсказан целый ряд уникально чувствительных к характеристикам дефектов новых динамических явлений и эффектов, которые являются следствиями общей закономерности, суть которой в том, что при динамической дифракции соотношение вкладов когерентной и диффузной составляющих в картину рассеяния определяется не только характеристиками дефектов, как в кинематическом случае, а существенно зависит также и от условий дифракционного эксперимента. Это создает принципиально новую возможность, меняя условия динамической дифракции, реализовать полный набор независимых дифракционных экспериментов, необходимых для диагностики дефектов нескольких типов.

При этом изменения условий динамической дифракции могут происходить как дискретно, так и непрерывно. К случаям «дискретных» изменений можно отнести использования различных геометрий дифракции (Брэгг и Лауэ), предельных случаев тонкого и толстого кристаллов, симметричных и асимметричных отражений, различных экспериментальных методик. К числу параметров, обеспечивающих непрерывное изменение условий дифракции можно отнести толщину кристалла, азимутальный угол, длину волны, радиус кривизны упругого макроскопического изгиба.

### АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПОЛНОЙ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ДИФРАКЦИИ В ГЕОМЕТРИИ ЛАУЭ (НА ПРОСВЕТ)

В случае симметричной дифракции по Лауэ выражение для полной интегральной отражательной способности (ПИОС)  $R_i = R_{iB} + R_{iD}$ , усредненной по толщинным осцилляциям в приближении тонкого кристалла ( $\mu_0 l < 1$ ) имеет вид [23, 58]:

$$R_i = \exp(-\mu_0 l) [B_0 E I_0(h_s) \exp(-\mu_{ds}^0 l) + (1 - E^2) R_{ip} \exp(-\mu^* l)], \quad (1)$$

где  $B_0 = C\pi|\chi_{hr}|/(2\sin 2\theta_B)$ ,  $\chi_{hr}$  — вещественная часть фурье-компоненты поляризуемости кристалла,  $\theta_B$  — угол Брэгга,  $E = \exp(-L_H)$  — статический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера,  $h_s = \mu_H l C E$ ,  $C$  — поляризационный множитель,  $\mu_H$  — динамический коэффициент фотоэлектрического поглощения,  $I_0$  — функция Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента,  $R_{ip}$  — кинематическая интегральная отражательная способность (ИОС) идеального кристалла,  $\mu_{ds}^0$  — интегральный коэффициент эффективного поглощения когерентной составляющей ПИОС из-за диффузного рассеяния когерентных волн на флуктуациях статических смещений атомов, вызванных дефектами,  $\mu^*$  — интегральный коэффициент эффективного поглощения диффузной составляющей ПИОС из-за диффузного рассеяния когерентных волн и перерассеяния диффузных волн на указанных флуктуациях смещений.

При измерениях толщинных зависимостей ПИОС методом наклона (см., например, [59]) при вращении кристалла на угол  $\alpha$  вокруг вектора дифракции  $\mathbf{H}$  изменяются эффективная толщина кристалла (длина пути излучения в кристалле)  $t = t_0/\cos\alpha$  и направляющие косинусы падающего ( $\gamma_0$ ) и дифрагированного ( $\gamma_H$ ) лучей относительно внутренней нормали к входной поверхности кристалла

$$\gamma_0 = \cos\theta_B \cos\psi \cos\alpha - \sin\psi \sin\theta_B, \quad \gamma_H = \cos\theta_B \cos\psi \cos\alpha + \sin\psi \sin\theta_B,$$

где  $\psi$  — угол между нормалью к поверхности кристалла и отражающими плоскостями. В симметричном случае  $\psi = 0$ .

В противоположность кинематической теории толщинные зависимости ПИОС (1) имеют нелинейный характер, причем, различный для когерентной ( $I_0 \sim 1 + h_s^2/4 + h_s^4/64 + \dots$ ) и диффузной ( $R_{ip} \sim t$ ) компонент. Следует также обратить внимание на возможность значительного возрастания вплоть до преобладающих значений (даже в случае  $L \ll 1$ ) относительного вклада диффузной компоненты в ПИОС по сравнению с когерентной за счет увеличения как толщины  $t$ , так и множителя  $(1 - E^2)$ .

В отличие от кинематической теории, как следует из (1), кроме статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера  $E^2$ , в динамической теории появляются еще два структурно чувствительных параметра — это интегральные коэффициенты диффузной экстинкции когерентной ( $\mu_{\text{ds}}^0$ ) и диффузной ( $\mu^*$ ) компонент ПИОС. Это предоставляет уникальную возможность, принципиально отсутствующую в кинематическом случае, используя измерения ПИОС, корректно и однозначно определять параметры дефектов в динамически рассеивающих кристаллах.

В случае однородного распределения дефектов кулоновского типа с радиусом  $R_0$  и концентрацией  $c$  справедливо выражение, связывающее интегральный коэффициент экстинкции  $\mu_{\text{ds}}^0$  с характеристиками дефектов (см. [58, 60]):

$$\mu_{\text{ds}}^0 = cE^2 C^2 m_0 B; \quad m_0 = \pi v_c H^2 |\chi_{\text{Hr}}|^2 / (2\lambda^2);$$

$$B = b_1 + b_2 \ln(e/r_0^2), \quad b_1 = B_1 + B_2/3, \quad b_2 = B_1 + \cos^2 \theta_B B_2/2,$$

где  $r_0 = R_0/\Lambda$ ,  $\Lambda = \lambda(\gamma_0 \gamma_{\text{H}})^{1/2} / (C|\chi_{\text{Hr}}|)$  — экстинкционная длина,  $H$  — модуль вектора дифракции,  $\lambda$  — длина волны используемого излучения,  $e$  — основание натурального логарифма, и предполагается, что  $r_0 < 1$ . Для сферических кластеров  $B_1 = 0$ ,  $B_2 = (4\pi A_{\text{cl}}/v_c)^2$ ;  $A_{\text{cl}} = \Gamma \varepsilon R_0^3$  — мощность кластера,  $\varepsilon$  — относительная деформация на границе кластера,  $\Gamma = (1 + \nu)/[3(1 - \nu)]$ , для хаотически однородно распределенных дислокационных петель  $B_1 = 4(\pi|\mathbf{b}|R_0^2/v_c)^2/15$ ;  $B_2 = \beta B_1$ ;  $\beta = (3\nu^2 + 6\nu - 1)/[4(1 - \nu^2)]$ ;  $v_c$  — объем элементарной ячейки,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\mathbf{b}$  — вектор Бюргерса.

Если  $\mu_{\text{ds}}^0 \ll \mu_0$  и  $r_0 \ll 1$ , то справедливо приближенное соотношение [60]:

$$\mu^* \approx \mu_{\text{ds}}^0 f_{\mu}(r_0),$$

$$f_{\mu}(r_0) = \frac{(5 + 2r_0 \ln r_0 - 3/8r_0)}{3(1 - \ln r_0)} \quad \text{для дислокационных петель};$$

$$f_{\mu}(r_0) = \frac{(4 + r_0 \ln r_0 - 2r_0)}{(5 - 6 \ln r_0)} \quad \text{для кластеров}.$$

Связь показателя статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера  $L_{\text{H}} = -\ln E$  с характеристиками дефектов описывается выражениями [14]:

$$L_{\text{H}} \approx 0,5 c v_c^{-1} R_0^3 (H|\mathbf{b}|)^{3/2} \quad (\text{дислокационные петли}),$$

$$L_{\text{H}} \approx 0,5 c n_0 \eta^2 (1 - \eta^2/100) \quad (\text{сферические кластеры, } \eta^2 \ll 10),$$

$L_H \approx cn_0\eta^{3/2}$  (сферические кластеры,  $\eta^2 \gg 10$ ),

где  $n_0 = (4/3)\pi R_0^3/\nu_c$  — количество элементарных ячеек матрицы, замещаемых кластером;  $\eta = \alpha_0 n_0^{1/3} h$ ,  $\alpha_0 = \Gamma\varepsilon(6\pi^2/\nu_0)^{1/3}$ ,  $\nu_0$  — количество атомов в кубической ячейке матрицы,  $h = Ha/(2\pi)$ ,  $a$  — постоянная решетки.

Тем самым, через параметры  $E$ ,  $\mu_{ds}^0$  и  $\mu^*$  величина ПИОС  $R_i$  оказывается связанной с характеристиками дефектов ( $c$ ,  $R_0$ ,  $\varepsilon$ ,  $b$ ).

При симметричной геометрии дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла ( $\mu_0 l \gg 1$ ) ПИОС описывается выражением [58, 61]:

$$R_i = ((2\pi)^{1/2} CE |\chi_{Hr}| / 4 \sin 2\theta_B) \exp[-(\mu_0 - \mu_H CE) l] / (\mu_H l CE)^{1/2} \times \\ \times [i_0(h_s) \exp(-\mu_{ds}^0 l) + (\alpha / \sin 2\theta_B) \mu_{ds}^0 / (\mu_H CE)]; \quad (2)$$

$$i_0(x) = 1 + 1/8x + 9/128x^2 + \dots,$$

$$\alpha = (3/2) [\exp(-\mu_{ds}^0 l) - \exp(-\mu_H l CE)] / (1 - \mu_{ds}^0 / (\mu_H CE)).$$

Формула (2) описывает эффект аномального прохождения как когерентных, так и диффузно рассеянных волн.

Следует отметить сильно выраженный нелинейный характер зависимости  $R_i(t)$  и его принципиальное отличие от аналогичной зависимости (1) для случая тонкого кристалла, а также преобладающий вклад диффузной компоненты в ПИОС при  $\mu_{ds}^0 \sim \mu_H$  ( $\sim \mu_0$ ).

### ТОЛЩИННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ВКЛАДА ДИФFUЗНОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ

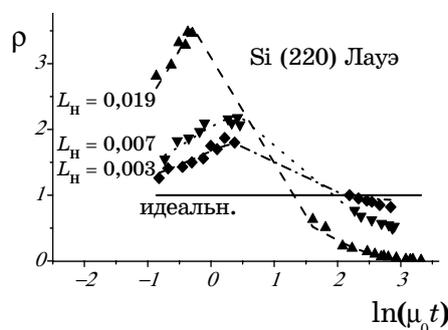
В работах [24–27, 56] установлен эффект изменения с толщиной кристалла (независящего от толщины в кинематической теории) относительного вклада диффузной составляющей интенсивности рассеяния. Этот аномальный рост обусловлен установленным авторами существенным различием между значениями величин двух динамических факторов экстинкции за счёт брэгговского и за счёт диффузного рассеяний. Затухание брэгговских волн из-за многократного рассеяния происходит на глубинах порядка глубины экстинкции. В то время как формирование диффузного волнового поля (за счет падающего пучка, имеющего значительную угловую расходимость) происходит на глубинах соизмеримых с глубиной абсорбции, которая может на порядки превосходить глубину экстинкции. В результате, как уже отмечалось, даже для предельно слабо нарушенных монокристаллов с увеличением их толщины до величин соизмеримых с глубиной абсорбции излучения этот предсказанный

авторами аномально большой динамический рост вклада диффузной составляющей, пропорциональный отношению толщины кристалла к длине экстинкции (см. (1)), может сделать диффузную составляющую преобладающей.

Обнаружение этого эффекта коренным образом изменило существовавшие физические представления о механизмах формирования диффузной составляющей и привело к качественно новым эффектам динамической дифракции в монокристаллах. Коренным образом изменилось не только представление о пренебрежимо малом вкладе диффузного рассеяния в таких системах, но и классификация дефектов кристаллов по их влиянию на картину рассеяния при динамической дифракции [23–27].

### НАРУШЕНИЕ ЗАКОНА СОХРАНЕНИЯ ПОЛНОЙ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ОТРАЖАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

Установление различий в механизмах формирования брэгговской и диффузной составляющих привело к открытию качественно новых эффектов динамической дифракции [27, 28, 60, 62, 77, 78]. Одним из ярких примеров этого является установление нарушения при динамической дифракции справедливого при кинематическом рассеянии закона сохранения (независимости от искажений кристаллов) полной (сумма брэгговской и диффузной составляющих) интегральной отражательной способности кристаллов с дефектами. Это явление обусловило возникновение уникально чувствительных к дефектам толщинных, спектральных, азимутальных, деформаци-



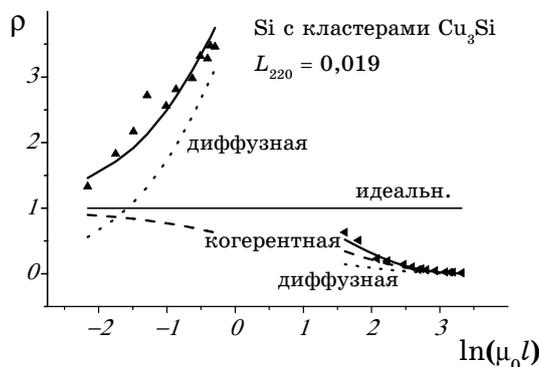
**Рис. 6.** Зависимости нормированной ПИОС  $\rho$  (отношения ПИОС исследуемого реального кристалла  $R_i$  к ИОС идеального  $R_{i\text{perf}}$ ) от величины  $\mu_0 t$ . Линии — результаты расчетов, а маркеры — результаты измерения ПИОС для трех образцов в приближениях тонкого (с использованием  $\text{MoK}_\alpha$ -излучения, левая часть зависимостей) и толстого (с использованием  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения и  $\text{FeK}_\alpha$ -излучения, правая часть зависимостей) кристаллов [62].

онных и др. зависимостей ПИОС, которые могут быть экспрессно измерены и интерпретированы с использованием полученных авторами оригинальных аналитических формул, связывающих их с характеристиками дефектов.

На рисунке 6 представлены результаты экспериментального подтверждения толщинной зависимости вклада ДР и нарушения закона сохранения ПИОС (маркеры — эксперимент, линии — теория). ПИОС представлена нормированной на ИОС идеального кристалла, что в кинематической теории всегда равно единице (см. формулы на рис. 1).

Следует отметить, что на рис. 6 (и некоторых нижеследующих графиках) сплошная горизонтальная линия соответствует идеальному кристаллу при динамическом рассмотрении ( $R_{i\text{ perf}}$ ) или любому (идеальному и неидеальному) кристаллу в кинематическом случае, т.е. в последнем случае ПИОС принципиально не чувствительна к искажениям кристалла.

Из рисунка 7, где представлены толщинные зависимости удельных вкладов диффузной и когерентной составляющих ПИОС, видно, что именно изменение относительного вклада диффузной составляющей ПИОС (непрерывное с изменением толщины кристалла и дискретное при переходе от приближения тонкого к приближению толстого кристаллов), обусловленное принципиально различным характером толщинных зависимостей составляющих ПИОС, а также изменением этого характера при переходе от предельного случая тонкого кристалла к случаю толстого, определяет ее уникальную чувствительность к дефектам.



**Рис. 7.** Рассчитанные (сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) толщинные зависимости нормализованной ПИОС монокристалла Si. Штриховые линии — рассчитанные толщинные зависимости когерентной составляющей, пунктирные линии — диффузной составляющей. Параметры дефектной структуры кристалла: сферические кластеры  $\text{Cu}_3\text{Si}$  с  $R = 0,035$  мкм,  $\epsilon = 0,13$  и  $c = 9 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ .

### АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПОЛНОЙ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ ДИФРАКЦИИ В ГЕОМЕТРИИ БРЭГГА (НА ОТРАЖЕНИЕ)

В случае произвольной (асимметричной) геометрии дифракции по Брэггу выражение для ПИОС, объединяющее предельные случаи тонкого ( $\mu_0 l \ll 1$ ) и толстого ( $\mu_0 l \gg 1$ ) кристаллов, имеет вид [28, 60, 63–65]:

$$R_i = R_i^{\text{dyn}} P E + R_{\text{ip}} \Pi (1 - E^2), \quad (3)$$

$$R_i^{\text{dyn}} = (16/3\pi) C Q \Lambda / \gamma_0,$$

$R_{\text{ip}} = C^2 Q t / \gamma_0$  — ПИОС идеально мозаичного кристалла,

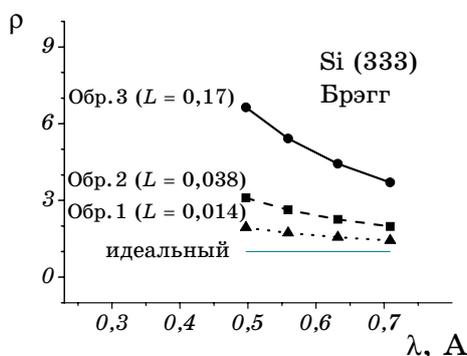
$$\Pi(\mu^*, t) \cong \begin{cases} 1 / \left[ 2(\mu_0 + \mu^*) t / \gamma \right] & \text{при } \mu_0 t \gg 1, \\ 1 / \left[ 1 + t(\mu_0 + \mu^*) / \gamma \right] & \text{при } \mu_0 t < 1, t \gg \Lambda_B, \end{cases}$$

$$1/\gamma = 1/2(1/\gamma_0 + 1/|\gamma_H|), \quad \Lambda_B = \lambda(\gamma_0 |\gamma_H|)^{1/2} / (2\pi C |\chi_H|) = \Lambda / (2\pi),$$

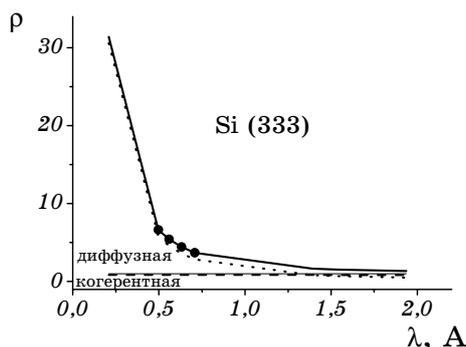
$$P \cong 1 - 3\pi s / 4 \text{ при } s \ll 1, \quad s = (\mu_0 + \mu_{\text{ds}}^0) \Lambda E / (\gamma C),$$

где  $Q = (\pi |\chi_H|)^2 / [\lambda \sin(2\theta_B)]$  — отражательная способность на единицу длины пути.

На рисунках 8 и 9 представлены спектральные зависимости ПИОС неидеальных кристаллов, служащие экспериментальным подтверждением различной функциональной зависимости (3) в



**Рис. 8.** Зависимость, в случае брэгг-дифракции, нормированной ПИОС дефектных образцов Si от длины волны излучения. Образцы 1 и 2 были отожжены на воздухе в течение 4 и 6 часов при 1000°C и 1080°C соответственно; образец 3 был отожжен в атмосфере азота в течение 7 часов при 1250°C.



**Рис. 9.** Рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (маркеры) спектральная зависимость нормированной ПИОС монокристалла Si. Штриховая линия — рассчитанная спектральная зависимость когерентной составляющей, пунктирная линия — диффузной. Расчеты проводились для следующих параметров динамического рассеяния:  $L_H = 0,17$ ,  $\mu^*/\mu_0 = 1,1$ .

приближениях тонкого (область коротких длин волн) и толстого (длинноволновая часть спектра) кристаллов.

Как следует из представленных результатов, при дифракции в геометрии Брэгга эти различия менее ярко выражены, нежели в случае лауэ-дифракции. Но и в этом случае высокая чувствительность динамической дифракции к различным типам дефектов, присутствующим в исследуемых образцах, сохраняется и существенно возрастает с ростом вклада диффузной составляющей при уменьшении длины волны, т.е. увеличении длины абсорбции и, следовательно, объема, в котором формируется диффузное рассеяние.

Из вышеприведенных выражений (1)–(3) динамической теории для брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния и проведенного анализа видно, что они имеют существенно различный характер зависимости от параметров дефектов и, что особо важно, этот характер зависит как от самих дефектов, так и от условий динамической дифракции (различные геометрии дифракции, случаи тонкого и толстого кристаллов и др.). Главный же вывод состоит в том, что зависимости от условий динамической дифракции для брэгговской и диффузной составляющих принципиально различны, следствием чего и являются все отмеченные эффекты и особенности их проявления.

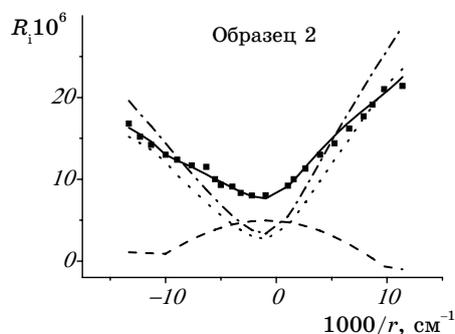
Это, как уже отмечалось, открывает возможность управления вкладом диффузной составляющей путем изменения условий дифракции. Рассмотрим для примера изменение условий дифракции за счет упругого изгиба кристалла. Рисунок 10 иллюстрирует чувствительность деформационных зависимостей (ДЗ) ПИОС кристалла к дефектам разного типа, а также принципиальное отличие их характера в предельных случаях тонкого и толстого кристаллов.



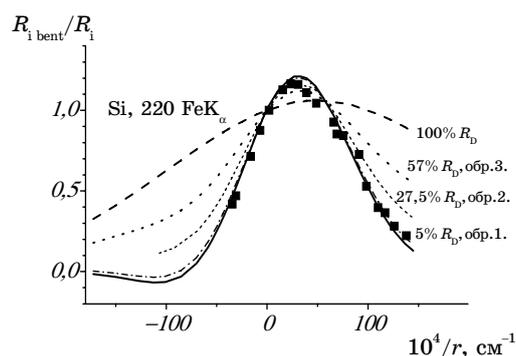
**Рис. 10.** Рассчитанные (линии) и экспериментальные (маркеры) деформационные зависимости нормализованной ПИОС для кристаллов Si с дефектами [66, 79].

Видно, что для дифракции по Лауэ в приближениях как тонкого, так и толстого кристаллов с увеличением изгиба диффузная составляющая ПИОС медленно уменьшается. В отличие от этого медленного уменьшения, брэгговская составляющая всегда изменяется резко с изгибом, кроме того, при переходе от приближения тонкого (см. рис. 10, а и 11) к приближению толстого (см. рис. 10, б и 12) кристаллов еще изменяется на противоположный сам характер влияния изгиба на эту составляющую: от увеличения в тонком к уменьшению в толстом кристаллах. Природа этого эффекта заключается в изменении механизма влияния деформации от преобладающего влияния изгиба на отражательную способность (тонкий) к преобладающему влиянию изгиба на поглощение (толстый).

Таким образом, разные характер и физическая природа дефор-



**Рис. 11.** Теоретические и экспериментальные значения ПИОС неидеального кристалла — сплошная линия и маркеры, соответственно. Пунктирная линия — рассчитанная зависимость когерентной компоненты ПИОС, штриховая — диффузной, а штрихпунктирная — рассчитанная зависимость ПИОС кристалла без дефектов [79].



**Рис. 12.** Рассчитанные ДЗ ПИОС упруго изогнутых неидеальных кристаллов Si  $R_{i \text{ b}}$ , нормированные на ПИОС неизогнутых кристаллов  $R_i$ , а также их когерентная (сплошная линия —  $R_{i \text{ coh bent}}/R_i$ ) и диффузная (штриховая линия —  $R_{i \text{ dif bent}}(\rho)/R_i$ ) составляющие. ДЗ  $R_{i \text{ b}}/R_i$  для образца 3 — пунктирная линия, для образца 2 — короткий штрих. ДЗ  $R_{i \text{ b}}/R_i$ , рассчитанная при относительном вкладе диффузной компоненты в ПИОС, составляющем 5%, для образца 1 — штрих-пунктир. Маркерами изображена экспериментальная ДЗ для образца 1.

мационных зависимостей брэгговской и диффузной составляющих ПИОС обеспечивают возможность контролируемого изменения их соотношения в картине дифракции и обуславливают уникальную чувствительность предложенного метода деформационных зависимостей ПИОС к характеристикам дефектов, и существенно повышают его информативность.

### ИНФОРМАТИВНОСТЬ ДИАГНОСТИКИ КОМБИНИРОВАННЫМ МЕТОДОМ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПИОС

Диагностика дефектной структуры монокристалла методом ДДКД с использованием особенностей, отмеченных выше, проводилась на образцах кремния толщиной  $t = 530$  мкм, выращенных по методу Чохральского (Cz-Si) [66–68]. Авторы работ [69, 70] использовали образец № 1 в качестве исходного монокристалла Si с относительно слабо развитой дефектной структурой, а образец № 2 отожгли при  $1100^\circ\text{C}$  в течение 8 часов. Ими были измерены ПИОС симметричных 220 лауэ-отражений в зависимости от кривизны четырехточечного упругого цилиндрического изгиба. Измерения проводили в приближении тонкого кристалла (при использовании  $\text{MoK}\alpha$ -излучения) и в приближении толстого кристалла (при использовании  $\text{FeK}\alpha$ -излучения).

Для описания деформационных зависимостей ПИОС была использована модель, предложенная в работах [66–68], в которой

ПИОС изогнутого кристалла с дефектами имеет следующий вид:

$$R_{ib} = R_{i\text{coh}} [1 + 0,074 BT\mu_0 t] \exp[-0,00604 (BT\mu_0 t)^2] + \\ + R_{i\text{diff}} [1 + 0,0157 BT\mu_0 t] \exp[-0,00044 (BT\mu_0 t)^2]$$

для толстого кристалла;

$$R_{ib} = R_{i\text{coh}} [1 + 0,78 BT\mu_0 t + 1,024 (BT\mu_0 t)^2] \exp[-0,078 (BT\mu_0 t)^2] + \\ + R_{i\text{diff}} [1 - 0,174 BT\mu_0 t - 0,128 (BT\mu_0 t)^2] \exp[-0,14 (BT\mu_0 t)^2]$$

для тонкого кристалла. Тут  $R_{i\text{coh}}$  и  $R_{i\text{diff}}$  — когерентная и диффузная составляющие ПИОС неизогнутого кристалла, соответственно;

$$B = \lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_0 \gamma_H (1 + \nu)] / 2\pi |\chi_{Hr}|^2 rd$$

— эффективная деформация;

$$T = \pi t |\chi_{Hr}| / \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_H}$$

— эффективная толщина [71];  $r$  — радиус цилиндрического изгиба кристалла;  $d = a / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ ,  $h$ ,  $k$ ,  $l$  — индексы Миллера; здесь и далее направляющие косинусы проходящих и дифрагированных лучей имеют вид  $\gamma_0 = \cos(\theta_B - \psi)$  и  $\gamma_H = \cos(\theta_B + \psi)$ , соответственно.

Благодаря различным функциональным зависимостям вкладов в ПИОС от когерентной и диффузной составляющих и самой ДЗ ПИОС в приближениях толстого и тонкого кристаллов, как и при любых иных отличных условиях дифракции, можно рассматривать соответствующие дифракционные эксперименты как независимые.

Таким образом, в условиях динамической дифракции при применении адекватной теории открывается возможность реализации полного набора независимых измерений для количественной диагностики сложных дефектных структур с несколькими типами дефектов.

Характеристики дефектов в исследуемых образцах были определены путем совместной обработки деформационных зависимостей, полученных в приближениях толстого и тонкого кристаллов (табл. 1). Из таблицы видно, что в рамках ДДКД удалось получить размеры и концентрации четырех типов дефектов, одновременно присутствующих в исследуемых образцах: дискообразных кластеров  $\text{SiO}_x$  (cl), малых (sm.l), средних (l) и больших (b.l) дислокационных петель. Их значения хорошо соотносятся с опубликованными данными независимых исследований по изучению дефектообразования в Si.

**ТАБЛИЦА 1.** Характеристики дефектов разных типов, определенные методом ДДКД.

Образец	$r_{cl}$ , МКМ; $h_{cl}$ , МКМ	$n_{cl}$ , см <sup>-3</sup>	$r_1$ , МКМ	$n_1$ , см <sup>-3</sup>	$r_{sm.1}$ , МКМ	$n_{sm.1}$ , см <sup>-3</sup>	$r_{b.1}$ , МКМ	$n_{b.1}$ , см <sup>-3</sup>
Исход- ный (4 часа при 1100°C)	0,4±0,04; 0,006±0,001	(12±4)· 10 <sup>8</sup>	0,4±0,04	(1,5±0,8)· 10 <sup>8</sup>	0,07±0,02	(6,6±0,6)· 10 <sup>11</sup>	10	(2,5±1,5)· 10 <sup>2</sup>
Ото- жжен- ный (8 час, при 1100°C)	0,594; 0,0131	8·10 <sup>8</sup>	0,594	2,1·10 <sup>6</sup>	0,0218	(2,075±0,02)· 10 <sup>13</sup>	10	(3,2±0,1)· 10 <sup>4</sup>

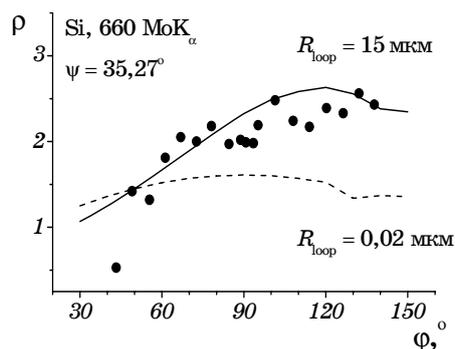
### ЭФФЕКТ АСИММЕТРИИ АЗИМУТАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ПИОС ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ С КРУПНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Для исследуемого в работе [72] монокристалла Cz-Si, была впервые получена кардинально несимметричная относительно  $\varphi = 90^\circ$  экспериментальная азимутальная зависимость (АЗ) нормализованной ПИОС  $\rho_{\text{эксп.}}(\varphi)$ . Объяснение указанной асимметрии оказалось возможным только на основании открытого явления, обсуждаемого выше в рамках динамической теории рассеяния рентгеновских лучей для монокристаллов, содержащих хаотически распределенные в объеме дефекты (ХРД). На рисунке 13 представлены результаты расчетов АЗ нормализованной ПИОС для монокристалла Cz-Si, содержащего хаотически распределенные в объеме дислокационные петли (ХРДП) с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} = [110]/2$ .

Из рисунка 13 видно, что для случая малого значения среднего радиуса дислокационных петель ( $R_{\text{loop}} = 0,02$  мкм) рассчитанная азимутальная зависимость имеет максимум при  $\varphi = 90^\circ$  и симметрично спадает по обе стороны от указанного максимума. В то же время для случая большого значения среднего радиуса дислокационных петель ( $R_{\text{loop}} = 15$  мкм) максимум рассчитанной азимутальной зависимости смещается к  $\varphi = 120^\circ$ . Таким образом, результаты расчетов, совпадающие, как видно из рис. 13, с экспериментом, указывают на возможность увеличения нормализованной ПИОС при переходе от кососимметричного отражения ( $\varphi = 90^\circ$ ) к асимметричным отражениям  $\varphi > 90^\circ$ . Установленный эффект асимметрии азимутальных зависимостей ПИОС существенно повышает информативность ДДКД при наличии в кристалле дефектов с размерами порядка длины экстинкции.

Следуя [72], исследуем природу несимметричности азимутальной зависимости нормализованной ПИОС монокристалла с ХРД.

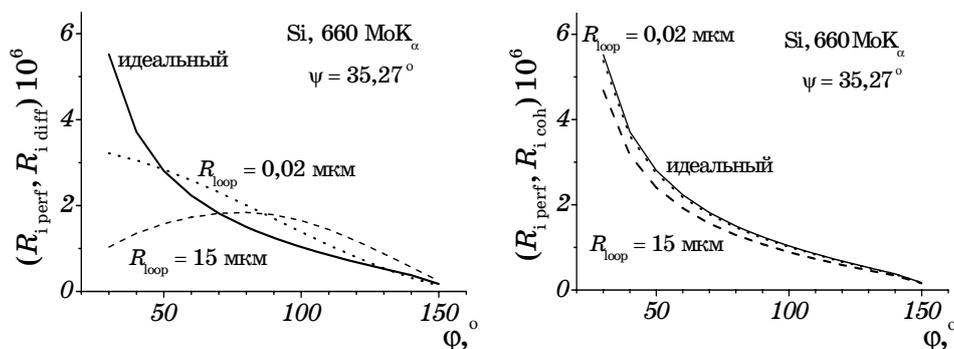
Приведенные на рис. 14 азимутальные зависимости диффузной и



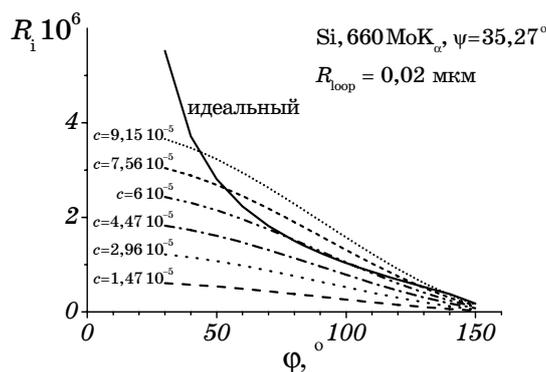
**Рис. 13.** Экспериментальная (маркеры) и рассчитанные азимутальные зависимости нормализованной ПИОС  $\rho$  при значениях среднего радиуса дислокационных петель  $R_{\text{loop}} = 15$  мкм (сплошная линия) и  $R_{\text{loop}} = 0,02$  мкм (штриховая линия) [72].

когерентной составляющих ПИОС рассчитаны для двух случаев: в первом, предполагалось наличие в монокристалле крупных ХРДП с  $R_{\text{loop}} = 15$  мкм и  $c_{\text{loop}} = 6,306 \cdot 10^{-13}$  (штриховая линия), во втором, мелких ХРДП с  $R_{\text{loop}} = 0,02$  мкм и  $c_{\text{loop}} = 9,15 \cdot 10^{-5}$  (пунктирная линия). Значения концентраций  $c_{\text{loop}}$  подбирались таким образом, чтобы  $\rho_{90^\circ}$  при разных значениях средних радиусов ХРДП было одинаковым.

Из рисунка 14 видна резкая асимметрия относительно  $\phi = 90^\circ$  зависимостей ИОС идеального кристалла и когерентной составляющей ПИОС. В то же время видно, что азимутальная зависимость диффузной составляющей ПИОС кардинально отличается от АЗ идеального кристалла и АЗ когерентной составляющей. Азимутальная зависимость диффузной составляющей ПИОС характеризуется несколько ослабленной асимметрией в случае мелких дефек-



**Рис. 14.** Азимутальная зависимость ИОС идеального кристалла  $R_{i \text{ perf}}$  (сплошная линия), а также азимутальные зависимости диффузной ( $R_{i \text{ diff}}$ ) и когерентной ( $R_{i \text{ coh}}$ ) составляющих ПИОС при различных радиусах ХРДП [72].



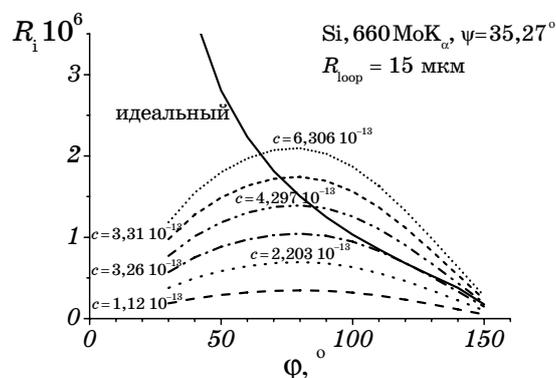
**Рис. 15.** Рассчитанные АЗ диффузной составляющей ПИОС при наличии в монокристалле ХРДП  $R_{\text{loop}} = 0,02$  мкм при разных величинах их концентрации  $c_{\text{loop}}$  (прерывистые линии) и интегральной отражательной способности идеального кристалла (сплошная линия) [72].

тов и является практически симметричной с максимумом при  $\varphi = 90^{\circ}$  в случае крупных дефектов.

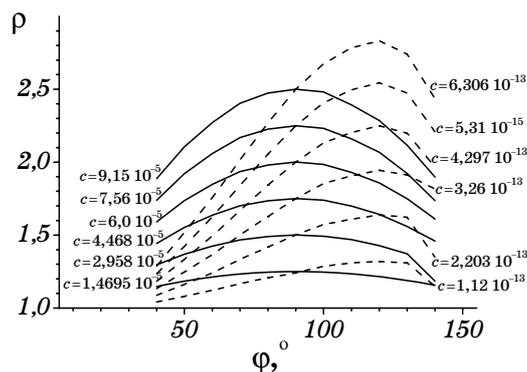
Для изучения характера влияния на симметрию азимутальных зависимостей ПИОС величин концентрации дефектов были проведены расчеты, результаты которых представлены на рис. 15, 16 и 17.

Из рисунков 14–17 видно, что асимметрия АЗ диффузной составляющей ПИОС в случае мелких петель и их симметрия в случае крупных петель сохраняются при любой концентрации дефектов.

Анализ расчетов азимутальных зависимостей диффузной составляющей ПИОС и нормализованной ПИОС (рис. 14 и 17), позволяет сделать следующий вывод: наблюдаемая экспериментально несим-



**Рис. 16.** Рассчитанные АЗ диффузной составляющей ПИОС для разных концентраций ( $c_{\text{loop}}$ ) ХРДП с  $R_{\text{loop}} = 15$  мкм (прерывистые линии) и АЗ ИОС идеального кристалла (сплошная линия) [72].



**Рис. 17.** Рассчитанные АЗ нормализованной ПИОС  $\rho = R_i/R_{i\text{ perf}}$  монокристалла при разных значениях концентрации ( $c_{\text{loop}}$ ) ХРДП с  $R_{\text{loop}} = 0,02$  мкм (сплошные линии) и  $R_{\text{loop}} = 15$  мкм (штриховые линии) [72].

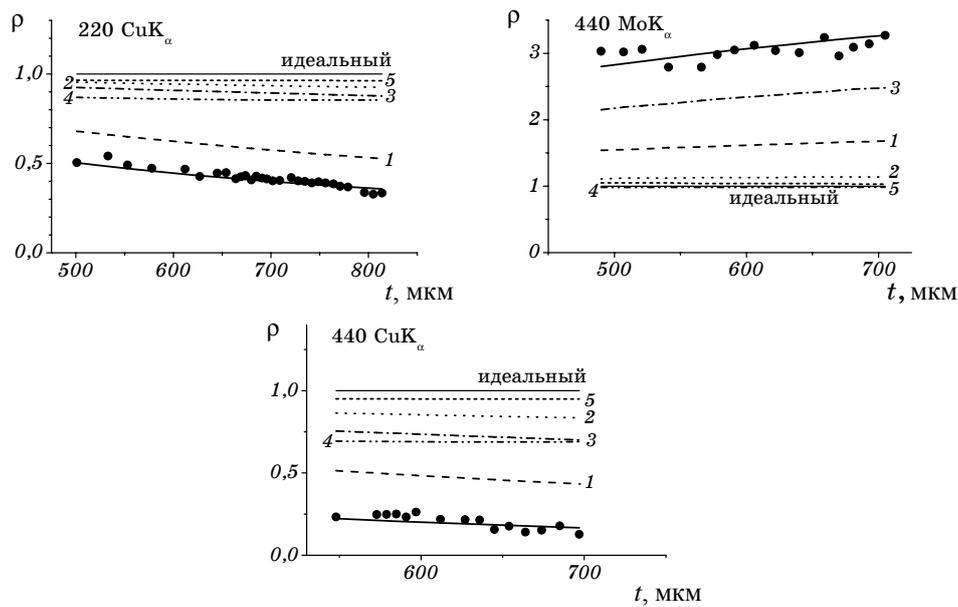
метричность АЗ нормализованной ПИОС монокристалла с ХРД обусловлена влиянием среднего размера дефектов на азимутальную зависимость диффузной компоненты ПИОС. С ростом размера дефектов характер АЗ диффузной составляющей ПИОС все в большей мере отличается от характера АЗ когерентной составляющей, что и обуславливает асимметрию относительно  $\varphi = 90^\circ$  нормализованных значений ПИОС.

Таким образом, проведенный анализ показывает, что структурная чувствительность и информативность азимутальных зависимостей ПИОС определяется, с одной стороны, различием характера азимутальных зависимостей брэгговской и диффузной составляющих ПИОС между собой, а с другой стороны, различным характером азимутальных зависимостей самих диффузных составляющих ПИОС для дефектов разного типа.

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ДИФФУЗНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ КОМБИНИРОВАННОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ И АНАЛИЗ БРЭГГОВСКОЙ И ДИФФУЗНОЙ СОСТАВЛЯЮЩИХ ПИОС И УДЕЛЬНЫХ ВКЛАДОВ ДЕФЕКТОВ РАЗНОГО ТИПА

На основе новых эффектов, которые принципиально отсутствуют в кинематической теории, в Украине совместно с учеными России (М. В. Ковальчук, Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова РАН; Р. Н. Кютт, Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН) была создана экспериментальная база, на которой реализованы все преимущества четвертого поколения кристаллографии — ДДКД.

Ниже на рис.18–24 приведены результаты диагностики методом



**Рис. 18.** Толщинные зависимости (линии — теория, маркеры — эксперимент) ПИОС и удельных вкладов отдельных дефектов:

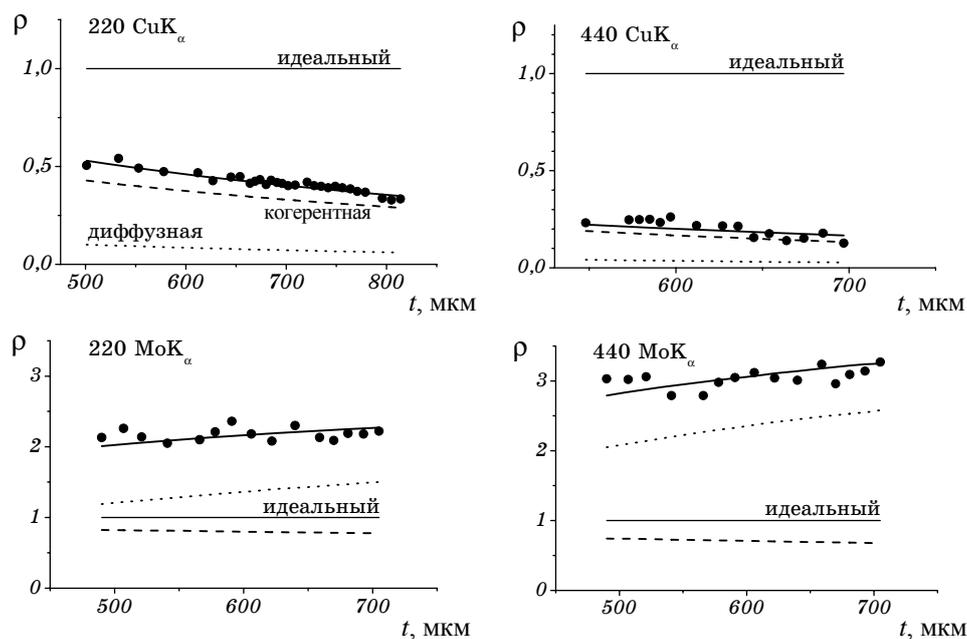
1. кластеры  $\text{SiO}_2$  в форме дисков  $R = 0,45 \text{ мкм}$ ,  $h = 116 \text{ \AA}$ ,  $c = 1,2 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ ;
2. крупные дислокационные петли  $R = 0,45 \text{ мкм}$ ,  $c = 2,6 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$ ;
3. мелкие дислокационные петли  $R = 30 \text{ нм}$ ,  $c = 7,8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ;
4. сверхкрупные дислокационные петли  $R = 10 \text{ мкм}$ ,  $c = 1,2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$ ;
5. нарушенный поверхностный слой [80].

ДДКД образца кремния с 5-ю типами дефектов на основе использования толщинных и спектрально-азимутальных зависимостей ПИОС, а также дан анализ различного характера этих зависимостей отдельно для диффузной и брэгговской составляющих ПИОС и удельных вкладов в ПИОС от каждого типа дефектов, демонстрирующий избирательность ПИОС к дефектам разного типа.

Из рисунка 18 видно, что в зависимости от соотношения длины экстинкции и эффективной толщины кристалла, т.е. при изменении рефлекса и длины волны излучения, изменяется соотношение между вкладами от различных типов дефектов и даже «преобладающий» тип дефекта, дающий наиболее близкий к экспериментальным точкам вклад.

Однако при изменении эффективной толщины кристалла изменяются не только соотношения между вкладами отдельных дефектов в диффузную компоненту ПИОС, но и отношение между результирующими по вкладам дефектов разных типов когерентной и диффузной составляющими картины рассеяния (рис. 19).

Из рисунка 19 видно, что для случая дифракции по Лауэ в при-

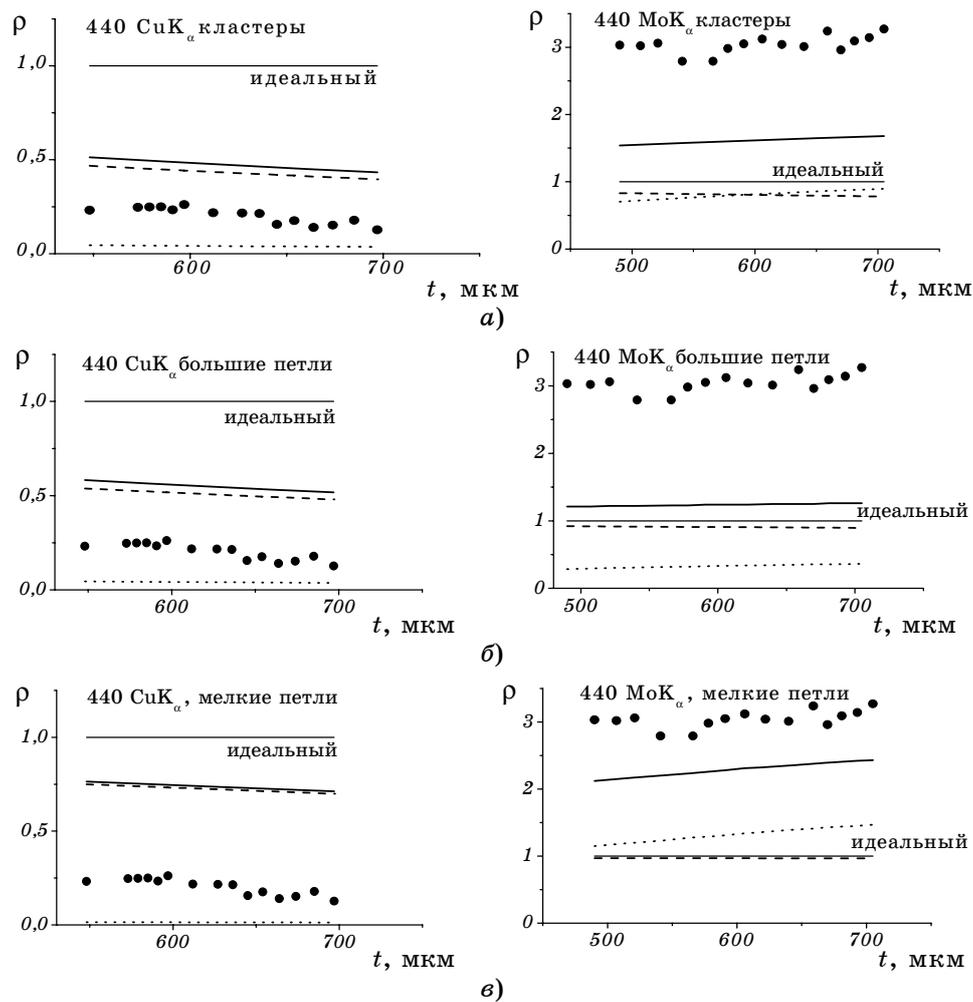


**Рис. 19.** Рассчитанные (сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) толщинные зависимости нормализованной ПИОС монокристалла Si. Штриховые линии соответствуют рассчитанному вкладу когерентной составляющей нормализованной ПИОС, а пунктирные — вкладу диффузной компоненты.

ближении толстого кристалла (при использовании  $\text{CuK}_\alpha$ -излучения) экспериментально наблюдаемые величины ПИОС близки к величинам когерентной составляющей ПИОС, причем вклад диффузной составляющей уменьшается при увеличении модуля вектора дифракции. В приближении тонкого кристалла (при использовании  $\text{MoK}_\alpha$ -излучения), наоборот, экспериментально наблюдаемые величины ПИОС ближе к величинам диффузной составляющей ПИОС, причем вклад диффузной составляющей увеличивается с увеличением модуля вектора дифракции.

На рисунке 20 представлены вклады когерентной и диффузной составляющих в толщинные зависимости нормализованной ПИОС монокристалла Si, рассчитанные для разных длин волн в предположении о наличии в монокристалле только одного типа дефектов (кластеров, больших или мелких петель).

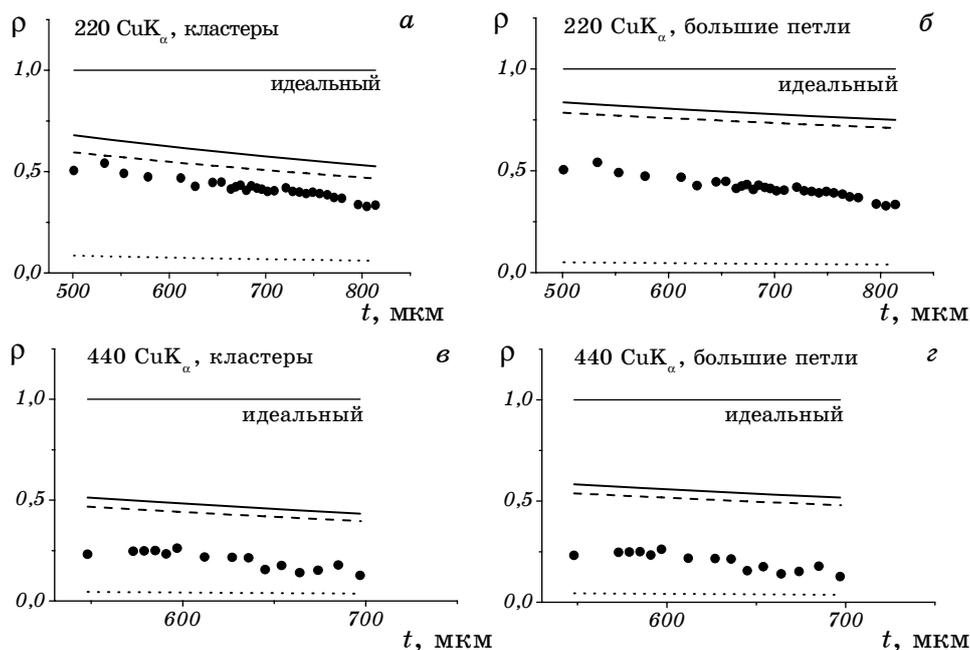
Как следует из рис. 20, в приближении толстого кристалла вклад диффузной составляющей тем меньше, чем меньше размеры и мощность дефектов. В приближении же тонкого кристалла вклад диффузной составляющей растет с уменьшением размеров при су-



**Рис. 20.** Рассчитанные (сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) толщинные зависимости нормализованной ПИОС монокристалла Si. Штриховые линии — рассчитанные толщинные зависимости когерентной, а пунктирные — диффузной составляющих ПИОС. Расчеты проводились в предположении о наличии в монокристалле только одного типа дефектов: а) кластеров, б) крупных петель, в) мелких петель.

щественном росте концентрации дефектов, а также с увеличением их мощности.

Рисунок 21 иллюстрирует для разных типов дефектов изменение вкладов когерентной и диффузной составляющих ПИОС в зависимости от рефлекса. При увеличении модуля вектора дифракции (рис. 21) величина когерентной составляющей уменьшается силь-



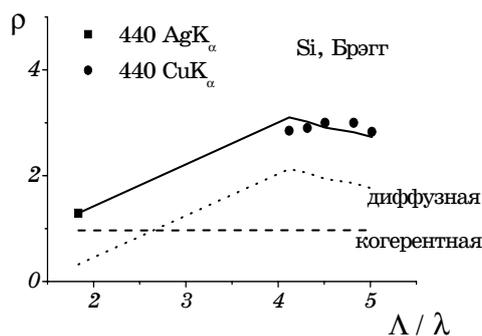
**Рис. 21.** Рассчитанные (сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) толщинные зависимости нормированной ПИОС монокристалла Si. Штриховые линии — рассчитанные толщинные зависимости когерентной, а пунктирные — диффузной составляющих ПИОС. Расчеты проводились в предположении о наличии в монокристалле только одного типа дефектов: кластеров (*a* и *в*) и больших петель (*б* и *г*).

нее для крупных петель, чем для кластеров с большей мощностью, но с меньшим размером.

Из приведенных выше результатов видно, что в геометрии Лауэ при изменении условий дифракции имеет место как изменение относительных вкладов в толщинные зависимости ПИОС ее брэгговской и диффузной компонент, так и различие функциональных зависимостей этих компонент для разных типов дефектов. Это позволяет установить наличие в кристалле нескольких типов дефектов и оценить их размеры и концентрации, и, таким образом, обеспечивает увеличение информативности динамического подхода.

Уточнение параметров дефектов возможно с привлечением, например, спектрально-азимутальных зависимостей ПИОС (рис. 22–24) в геометрии Брэгга.

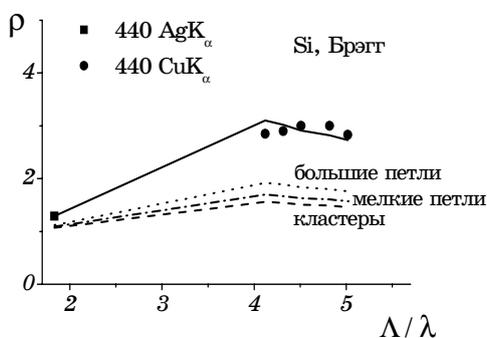
Как и должно быть, согласно общим принципам ДДКД, при изменении условий дифракции опять наблюдается изменение как относительных вкладов когерентной и диффузной составляющих, так и их различные зависимости для различных типов дефектов. С



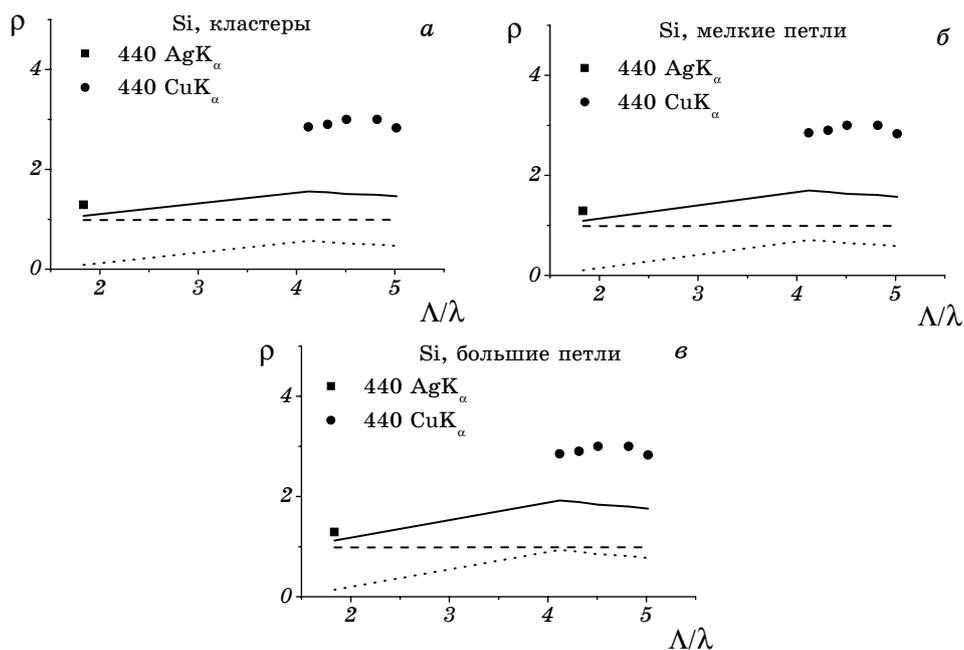
**Рис. 22.** Рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (маркеры) спектрально-азимутальные зависимости нормированной ПИОС монокристалла Si. Штриховая линия — рассчитанная когерентная составляющая нормированной ПИОС, пунктирная линия — ее диффузная составляющая.

уменьшением длины волны используемого излучения, когда осуществляется переход от приближения толстого к приближению тонкого кристаллов, вклад диффузной составляющей в ПИОС брэгг-рефлексов возрастает (рис. 22), становясь равным вкладу когерентной составляющей ПИОС, а затем значительно (в 2 раза) превышает его.

При этом, в отличие от рассмотренного выше случая толщинных зависимостей при лауэ-дифракции, когда в зависимости от условий динамической дифракции преобладающими типами дефектов оказывались мелкие петли или кластеры (также с малыми размерами) (см. рис. 18, 20, 21), в случае брэгг-дифракции основной вклад в ПИОС дают большие дислокационные петли (рис. 23).



**Рис. 23.** Рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (маркеры) спектрально-азимутальные зависимости нормированной ПИОС монокристалла Si. Прерывистые линии соответствуют нормированной ПИОС для кристалла, содержащего лишь один тип дефектов: штриховая линия — кластеры, пунктирная — большие петли, штрихпунктирная — мелкие петли.



**Рис. 24.** Рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (маркеры) спектрально-азимутальная зависимость нормированной ПИОС монокристалла Si. Штриховая линия соответствует когерентной составляющей нормированной ПИОС, а пунктирная — диффузной. Расчеты проводились в предположении о наличии в монокристалле только одного типа дефектов: кластеров (а), больших петель (б) и мелких петель (в).

Как уже отмечалось, сохраняется и зависимость соотношения вкладов когерентной и диффузной составляющих от типа дефекта. Из рисунка 24 видно, что вклад диффузной составляющей ПИОС с уменьшением длины волны сильнее возрастает для больших петель, чем для кластеров и мелких петель.

Анализ представленных зависимостей от различных условий динамической дифракции, таких как толщина кристалла, азимут, длина волны и др., как самих ПИОС, так и их брэгговской и диффузной составляющих и удельных вкладов от дефектов различного типа показал, что главной причиной информативности ДДКД является возможность управления соотношением между брэгговской и диффузной составляющими ПИОС путем изменения условий динамической дифракции, а также, что дополнительную роль играет изменение характера этих зависимостей с изменением типа дефектов, отсутствующее в кинематической теории. Последнее обеспечивает изменение избирательности чувствительности к дефектам разного типа при изменении условий дифракции и тем самым раскрывает

физическую природу этого явления, обнаруженного ранее в [80, 86].

Следует подчеркнуть, что сделанные выше выводы справедливы для динамически рассеивающих кристаллов с дефектами произвольных размеров, в том числе, с размерами, превышающими длину экстинкции (обобщение вышеприведенной теории на случай крупных дефектов выполнено в работах [72, 74, 81]).

## ДВУХ- И ТРЕХКРИСТАЛЬНЫЕ ПРОФИЛИ ДИФРАГИРОВАННОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ

Различие в зависимостях брэгговской и диффузной компонент дифрагированной интенсивности, формируемой динамически рассеивающим кристаллом, от параметров дефектов и условий дифракции наиболее просто отследить по выражениям для ПИОС. Но эти различия, хотя и в менее наглядной форме, имеют место и для дифференциальных методик, реализующихся на двухкристалльном (ДКД) и трехкристалльном (ТКД) дифрактометрах. Несмотря на то, что указанные различия имеют единую природу, а именно, различие в процессах формирования в неидеальном кристалле брэгговских и диффузных волновых полей и зависимость этих волновых полей от граничных условий (т.е. условий дифракции), каждая из интегральных и дифференциальных методик может рассматриваться при исследовании дефектной структуры образца как независимый эксперимент. Это связано с дополнительным аппаратным интегрированием дифрагированной на образце интенсивности при переходе от ТКД к ДКД методике, а также от измерений на ДКД к регистрации ПИОС. В результате для этих методик характерны не только различные функциональные зависимости регистрируемой интенсивности (а также ее брэгговской и диффузной составляющих) от параметров дефектов и условий дифракции, но и различная чувствительность к дефектам разных типов (например, за счет увеличения интегрального вклада мелких дефектов в зависимости, снятые на ДКД, по сравнению с аналогичным вкладом в профили, полученные на ТКД).

Распределение интенсивности, которое регистрируется детектором ТКД в случае брэгг-дифракции на дефектном образце можно приближенно описать как сумму брэгговской (индекс В) и диффузной (D) составляющих [23, 82]:

$$I(\Delta\theta, \Delta\theta') = \sum_{j=1}^2 (I_j^B + I_j^D), \quad (4)$$

$$I_j^B = \int dx R_M^{n_M}(y_M) R_{\text{coh}}(y_S) R_A^{n_A}(y_A), \quad (5)$$

$$I_j^D = \int dx \int du R_M^{n_M}(y'_M) r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) R_A^{n_A}(y_A), \quad (6)$$

где  $\Delta\theta$  и  $\Delta\theta'$  — углы отворота соответственно кристалла-образца (S) и кристалла-анализатора (A) от точных отражающих положений,  $j=1$  и  $2$  соответствует  $\sigma$ - и  $\pi$ -поляризациям,  $n_M$  и  $n_A$  — кратности отражений на монохроматоре (M) и анализаторе (A),  $R_M$ ,  $R_A$  и  $R_{\text{coh}}$  — соответственно отражательные способности монохроматора, анализатора и когерентная составляющая отражательной способности образца. Безразмерные аргументы в (5) и (6) связаны с угловыми отклонениями следующими соотношениями [23, 61]:

$$y_A = 2(x - \Delta\theta' - \eta_A)/w_A, \quad y_S = 2(b_S^{-1}(x - \Delta\theta) - \eta_S)/w_S, \\ y_M = 2(b_M^{-1}b_S^{-1}(x - \Delta\theta) - b_M^{-1}\Delta\theta - \eta_M)/w_A, \quad y'_M = 2(u - \eta_M)/w_M. \quad (7)$$

В выражениях (7)  $w$  и  $\eta$  — ширина области полного отражения и сдвиг ее центра в соответствующих кристаллах рентгенооптической схемы:

$$w = 2C_j|\chi_{Hr}|E/(\sqrt{b} \sin 2\theta_B), \quad \eta = \chi_{0r}(1 + b^{-1})/(2 \sin 2\theta_B),$$

$C_1 = 1$  и  $C_2 = |\cos 2\theta_B|$  — поляризационные множители,  $\chi_{Hr}$  и  $\chi_{0r}$  — фурье-компоненты вещественной части поляризуемости совершенного кристалла,  $b = \gamma_0/|\gamma_H|$  — параметр асимметрии,  $x$  — отклонение отраженного образцом луча от точного брэгговского направления,  $u$  — отклонение луча в падающем на монохроматор пучке от точного брэгговского направления.

Когерентную составляющую отражательной способности кристалла с дефектами в выражении (5) можно представить в виде [76]:

$$R_{\text{coh}}(\Delta\theta) = |r(\Delta\theta)|^2, \quad (8)$$

$$r(\Delta\theta) = (\zeta b)^{-1/2} \left( y - s\sqrt{y^2 - 1} \right), \quad (9)$$

где  $s = \text{sgn } y_r$ ,  $y_r = \text{Re } y$ ,  $\zeta = (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H})^{-1}$ , а  $\chi_G$  — компонента Фурье идеального кристалла,  $\mathbf{G} = \mathbf{0}, \mathbf{H}$ . Нормированное угловое отклонение волнового вектора  $\mathbf{K}$  падающей на кристалл плоской волны описывается выражением:

$$y = (\tilde{\alpha} - \alpha_0)\sqrt{b}/\sigma, \quad (10)$$

$$\sigma^2 = (CE\chi_H + \Delta\chi_{H0})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}),$$

$$2\alpha_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{HH} + (\chi_0 + \Delta\chi_{00})/b, \quad \tilde{\alpha} = (\mathbf{K} + \mathbf{H})\Delta\mathbf{H}/K^2 = -\Delta\theta \sin(2\theta_B).$$

Дисперсионные поправки к волновым векторам когерентных волн (для ветви  $\delta = 1, 2$  дисперсионной поверхности) могут быть пред-

ставлены в виде [40, 41]:

$$\Delta\chi_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{\delta}(\Delta\theta) = P_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{\delta}(\Delta\theta) - i\mu_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}^{\delta}(\Delta\theta)/K, \quad \mathbf{G}, \mathbf{G}' = \mathbf{0}, \mathbf{H}. \quad (11)$$

Для упрощения (11) можно воспользоваться следующими соотношениями:

$$P_{\mathbf{0}\mathbf{H}}^{\delta}(\Delta\theta) \approx P_{\mathbf{H}\mathbf{0}}^{\delta}(\Delta\theta) \approx 0, \quad \mu_{\mathbf{0}\mathbf{H}}^{\delta}(\Delta\theta) \approx \mu_{\mathbf{H}\mathbf{0}}^{\delta}(\Delta\theta) \approx 0, \quad (12)$$

$$P_{\mathbf{H}\mathbf{H}}^{\delta}(\Delta\theta) \approx K^{-1}\mu_{\mathbf{H}\mathbf{H}}^{\delta}(\Delta\theta),$$

$$b^{-1}P_{\mathbf{0}\mathbf{0}}^{\delta}(\Delta\theta) \approx P_{\mathbf{H}\mathbf{H}}^{\delta}(\Delta\theta), \quad b^{-1}\mu_{\mathbf{0}\mathbf{0}}^{\delta}(\Delta\theta) \approx \mu_{\mathbf{H}\mathbf{H}}^{\delta}(\Delta\theta) \approx \mu_{\text{ds}}(\Delta\theta),$$

где  $\mu_{\text{ds}}$  — коэффициент экстинкции брэгговских волн из-за диффузного рассеяния [40, 41].

В случае присутствия в кристалле нескольких типов дефектов и выполнении принципа суперпозиции полей упругих деформаций, вызванных ими, коэффициент экстинкции брэгговских волн из-за диффузного рассеяния можно представить в виде суммы вкладов от каждого типа дефекта  $\alpha$  (индекс  $\alpha$  учитывает не только тип дефекта, но и распределение дефектов каждого типа по размерам):

$$\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta) \equiv \mu_{\text{ds}}(k_0) = \sum_{\alpha} \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0), \quad (13)$$

где  $k_0 = K\Delta\theta \sin(2\theta_{\text{B}})$  — отклонение конца вектора диффузно рассеянной волны  $\mathbf{K}'$  от сферы Эвальда. При этом для статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера будет справедливо аналогичное выражение:

$$L_{\text{H}} = \sum_{\alpha} L_{\text{H}}^{\alpha}. \quad (14)$$

Коэффициент экстинкции брэгговских волн из-за диффузного рассеяния на дефектах типа  $\alpha$  имеет известный вид [41, 76, 83]:

$$\mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) = c_{\alpha} C^2 E^2 m_0 J^{\alpha}(k_0), \quad (15)$$

$$m_0 = \frac{\pi v_c}{4} (H|\chi_{\text{Hr}}|/\lambda)^2, \quad (16)$$

$$J^{\alpha}(k_0) = \frac{1}{\pi} \int d\mathbf{k}' F_{\alpha}(\mathbf{q}), \quad (17)$$

где  $c_{\alpha}$  — концентрация дефектов сорта  $\alpha$ ,  $\mathbf{q} = \mathbf{k} + i\mu_i \mathbf{n}$  — комплексный переданный импульс,  $\mathbf{n}$  — внутренняя нормаль ко входной поверхности кристалла,  $\mu_i$  — интерференционный коэффициент поглощения, учитывающий поправки вследствие многократности

диффузного рассеяния. Вектор  $\mathbf{k} = \mathbf{K}' - \mathbf{K} - \mathbf{H}$  описывает отклонение волнового вектора  $\mathbf{K}'$  диффузно рассеянной волны от узла обратной решетки  $\mathbf{H}$  в вакууме. Интегрирование в (17) производится после разложения переданного импульса  $\mathbf{k}$  на параллельную ( $\mathbf{k}_0$ ) и перпендикулярную ( $\mathbf{k}'$ ) волновому вектору  $\mathbf{K}'$  компоненты. Тогда выполняются соотношения  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 + \mathbf{k}'$  и  $|\mathbf{q}|^2 = k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2$ , а интегрирование проводится в полярной системе координат, выбранной в плоскости, тангенциальной к сфере Эвальда в области узла обратной решетки  $\mathbf{H}$ .

При интегрировании в (17) следует учесть различные функциональные зависимости  $F_\alpha(\mathbf{q})$  для областей рассеяния Кривоглаза–Хуаня ( $0 \leq k'^2 + k_0^2 \leq k_{m\alpha}^2$ ) и Стокса–Вильсона ( $k'^2 + k_0^2 \geq k_{m\alpha}^2$ ):

$$F_\alpha(\mathbf{q}) = \begin{cases} F_\alpha^H(\mathbf{q}) = H^2 \left( B_1^\alpha + B_2^\alpha \left| \frac{\mathbf{H}_0 \mathbf{q}}{q} \right|^2 \right) \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} + H \frac{B_3^\alpha}{|\mathbf{q}|} \text{ при } 0 \leq k'^2 + k_0^2 \leq k_{m\alpha}^2, \\ F_\alpha^{SW}(\mathbf{q}) = F_\alpha^H(\mathbf{q}) k_{m\alpha}^2 / |\mathbf{q}|^2 \text{ при } k'^2 + k_0^2 \geq k_{m\alpha}^2. \end{cases} \quad (18)$$

В выражении (18) введен единичный вектор  $\mathbf{H}_0 = \mathbf{H} / H$ .

Каждый тип микродефектов характеризуется определенным значением модуля вектора переданного импульса  $k$  на границе между областями рассеяния Кривоглаза–Хуаня и Стокса–Вильсона  $k_{m\alpha} = 1 / R_{\text{eff}}^\alpha$ , который зависит от эффективного радиуса  $R_{\text{eff}}^\alpha$  дефекта типа  $\alpha$  (для преципитатов  $R_{\text{eff}}^1 = \sqrt{H|A_C|E}$ , а дислокационных петель  $R_{\text{eff}}^2 = R_L \sqrt{HbE}$ ).

Коэффициенты  $B_1^\alpha$  и  $B_2^\alpha$  в (18) связаны непосредственно с характеристиками дефектов [41, 76, 84]. Как отмечалось, для дислокационных петель ( $\alpha = 1$ )  $B_1^1 = 4(\pi|b|R_L^2/v_c)^2/15$ ,  $B_2^1 = \beta B_1^1$ , где  $R_L$  — радиус петли, а для сферически симметричных кластеров ( $\alpha = 2$ )  $B_1^2 = 0$ ,  $B_2^2 = (4\pi A_C / v_c)^2$ , где мощность кластера  $A_C = \Gamma \epsilon R_C^3$ ,  $R_C$  — радиус кластера. Однако, для кластеров с более низкой симметрией (например, пластинчатые, эллипсоидальные или дискообразные частицы новой фазы (преципитаты), которые залегают в плоскостях  $\{100\}$  кубического кристалла) более адекватными будут коэффициенты  $B_1^2 = B_2^2$ ,  $A_C = 3\Gamma \epsilon V_C / (4\pi)$ , где объем  $V_C = L^2 d$ ,  $2\pi R_C^2 d / 3$ ,  $\pi R_C^2 d$  записан, соответственно для пластинчатых ( $L$  — длина стороны квадратного основания,  $d$  — толщина), эллипсоидальных ( $R_C$  — радиус большой оси,  $d$  — диаметр малой оси) и дискообразных преципитатов. Константу  $B_3^\alpha$  можно положить равной  $2L_H \sqrt{B^\alpha} / c_\alpha$ , при этом для кластеров  $B^\alpha = B_2^\alpha$ , а для дислокационных петель  $B^\alpha = B_1^\alpha$ .

Интерференционный коэффициент поглощения для некоторого значения комплексного переданного импульса  $\mathbf{q}$  имеет вид:

$$\mu_i = K \operatorname{Im}(\Delta'_{\delta\tau} - \Delta_\delta) \quad (\tau, \delta = 1, 2), \quad (19)$$

где аккомодации к волновым векторам сильных брэгговских волн

$$\Delta_\delta = \frac{1}{2\gamma_0} (\chi_0 + \Delta\chi_{00}^\delta) + \frac{\lambda}{2\Lambda} \left[ y + (-1)^\delta \sqrt{y^2 - 1} \right] \quad (\Lambda = \lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_H|} / \sigma) \quad (20)$$

по форме схожи с аккомодациями к волновым векторам диффузно рассеянных волн

$$\Delta'_{\delta\tau} = \frac{1}{2\gamma_0} (\chi_0 + \Delta\chi'_{00}{}^{\delta\tau}) + \frac{\lambda}{2\Lambda'} \left[ y' + (-1)^\tau \sqrt{y'^2 - 1} \right]. \quad (21)$$

В (21) введены следующие обозначения (индексы  $\tau, \delta$  опущены):

$$y' = (\alpha' - \alpha'_0) \sqrt{b} / \sigma', \quad 2\alpha'_0 = \chi_0 + \Delta\chi'_{HH} + (\chi_0 + \Delta\chi'_{00}) / b,$$

$$\Lambda' = \lambda |\gamma_H| \sqrt{b} / \sigma', \quad \sigma'^2 = (CE\chi_H + \Delta\chi'_{H0})(CE\chi_{-H} + \Delta\chi'_{0H}), \quad \alpha' = -\Delta\theta' \sin(2\theta_B).$$

В выражениях для дисперсионных поправок к волновым векторам диффузно рассеянных волн

$$\Delta\chi'_{GG'}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') = P'_{GG'}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') - i\mu'_{GG'}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') / K \quad (\delta, \tau = 1, 2) \quad (22)$$

можно сделать приближения, аналогичные (12):

$$P'_{0H}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx P'_{H0}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx 0, \quad \mu'_{0H}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx \mu'_{H0}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx 0, \quad (23)$$

$$b^{-1} P'_{00}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx P'_{HH}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta'), \quad b^{-1} \mu'_{00}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx \mu'_{HH}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx \mu'_{ds}(\Delta\theta, \Delta\theta'),$$

где  $\mu'_{ds}$  — коэффициент экстинкции диффузно рассеянных волн из-за диффузного рассеяния [40, 41] и

$$P'_{HH}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx K^{-1} \mu'_{HH}{}^{\delta\tau}(\Delta\theta, \Delta\theta').$$

После интегрирования в (17) можно получить [76, 83]:

$$J^\alpha(k_0) = \begin{cases} J_H^\alpha(k_0) + J_{H-SW}^\alpha(k_0) + J_H^{*\alpha}(k_0) & \text{при } |k_0| \leq k_{ma}, \\ J_{SW}^\alpha(k_0) & \text{при } |k_0| \geq k_{ma}. \end{cases} \quad (24)$$

В области рассеяния Кривоглаза–Хуаня симметричные компоненты интенсивности диффузного рассеяния имеют следующий вид:

$$J_{\text{H}}^{\alpha}(k_0) = b_2^{\alpha} \ln \frac{k_{\text{ma}}^2 + \mu^2}{k_0^2 + \mu^2} + (b_3^{\alpha} k_0^2 + b_4^{\alpha} \mu^2) \left( \frac{1}{k_{\text{ma}}^2 + \mu^2} - \frac{1}{k_0^2 + \mu^2} \right), \quad (25)$$

$$J_{\text{H-sw}}^{\alpha}(k_0) = \frac{k_{\text{ma}}^2}{(k_{\text{ma}}^2 + \mu^2)} \left( b_2^{\alpha} + \frac{1}{2} \frac{b_3^{\alpha} k_0^2 + b_4^{\alpha} \mu^2}{k_{\text{ma}}^2 + \mu^2} \right). \quad (26)$$

Антисимметричная компонента интенсивности диффузного рассеяния в этой области описывается выражением

$$J_{\text{H}}^{*\alpha}(k_0) = \text{sgn}(\Delta\theta) \text{sgn}(\varepsilon) b_1^{\alpha} \left( \sqrt{k_{\text{ma}}^2 + \mu^2} - \sqrt{k_0^2 + \mu^2} \right), \quad (27)$$

где  $\text{sgn}(\varepsilon) = \pm 1$ . В случае дислокационных петель знак деформации на границе дефекта  $\varepsilon$  определяет их тип: петлям внедренного типа соответствует верхний знак, а вакансионного — нижний. В области рассеяния Стокса–Вильсона имеем

$$J_{\text{sw}}^{\alpha}(k_0) = \frac{k_{\text{ma}}^2}{k_0^2 + \mu^2} \left( b_2^{\alpha} - \frac{1}{2} \frac{b_3^{\alpha} k_0^2 + b_4^{\alpha} \mu^2}{k_0^2 + \mu^2} \right). \quad (28)$$

Константы в формулах (25)–(28) определяются следующим образом:

$$b_1^{\alpha} = \frac{4L_{\text{H}}^{\alpha} \sqrt{B_2^{\alpha}}}{c_{\alpha} H}, \quad b_2^{\alpha} = B_1^{\alpha} + \frac{1}{2} B_2^{\alpha} \cos^2 \theta_{\text{B}},$$

$$b_3^{\alpha} = B_2^{\alpha} \left( \frac{1}{2} \cos^2 \theta_{\text{B}} - \sin^2 \theta_{\text{B}} \right), \quad b_4^{\alpha} = B_2^{\alpha} \left( \frac{1}{2} \cos^2 \theta_{\text{B}} - \cos^2 \psi \right). \quad (29)$$

В выражениях (25)–(28) интерференционный коэффициент поглощения  $\mu_i$  был заменен на его предельное значение  $\mu$  при  $|\text{Re } y| \gg 1$ , т.е.  $\mu(\Delta\theta) = \mu_i(\Delta\theta, \Delta\theta' \rightarrow \infty)$ .

Таким образом, приведенные выше в этом разделе выражения определяют функциональную зависимость от параметров дефектов когерентной составляющей интенсивности, регистрируемой ТКД. Из них, в частности, следует, что для различных типов дефектов эти зависимости будут различны как за счет различия в выражениях для  $L_{\text{H}}$  [14] и коэффициентов в  $\mu_{\text{ds}}$ , записанных для кластеров и петель, так и из-за различного положения границ между областями Стокса–Вильсона и Кривоглаза–Хуаня для дефектов с различными эффективными радиусами (это относится и к дефектам одной природы). Аналогичной является природа чувствительности к разным типам дефектов и диффузной составляющей интенсивности, регистрируемой на ТКД. Однако вид самой этой зависимости принципиально отличается от таковой для когерентной составляющей.

Функция  $r_{\text{diff}}(\mathbf{p})$ , входящая в (6), представляет собой проинтег-

рированную по вертикальной расходимости  $\phi$  диффузную составляющую отражательной способности кристалла-образца  $R_D(\mathbf{k})$ :

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \int d(k_y / K) R_D(\mathbf{k}), \quad (30)$$

где  $\mathbf{p} = k_x \mathbf{e}_x + k_z \mathbf{e}_z$ ,  $k_y = K\phi$ ,  $K = 2\pi/\lambda$ . Компоненты  $k_x$ ,  $k_z$  вектора  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ , лежащие в плоскости дифракции ( $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{H}$ ), описывают отклонение вектора  $\mathbf{K}'$  от узла обратной решетки  $\mathbf{H}$ . Орт  $\mathbf{e}_z$  представляет собой внутреннюю нормаль к поверхности кристалла; орт  $\mathbf{e}_x$  лежит на линии пересечения этой поверхности с плоскостью дифракции. В случае асимметричной дифракции в геометрии Брэгга:

$$\begin{aligned} k_x &= -K(u+x) \sin(\theta_B + \psi) + 2K(\Delta\theta + u) \sin \theta_B \cos \psi, \\ k_z &= -K(u+x) \cos(\theta_B + \psi) - 2K(\Delta\theta + u) \sin \theta_B \sin \psi. \end{aligned} \quad (31)$$

Для полубесконечного кристалла ( $\mu_0 t \gg 1$ ), когда в волновых полях сильных брэгговских и диффузно рассеянных волн сохраняется только по одной квазиблоховской волне, диффузную составляющую отражательной способности кристалла-образца можно записать в виде

$$R_D(\mathbf{k}) \cong \frac{1}{\gamma_0 S} \left( \frac{CVK^2}{4\pi} \right)^2 F_{\text{dyn}}(\Delta\theta) S(\mathbf{q}) p(t), \quad (32)$$

где  $p(t) = (1 - e^{-2\mu_1 t}) / (2\mu_1 t) \approx 1 / (2\mu_1 t)$ ,  $F_{\text{dyn}}(\Delta\theta) = |1 - c^\delta|^2$  — интерференционный множитель,  $c^\delta = -\frac{2\gamma_0 \Delta_\delta + \chi_0 + \Delta\chi_{00}^\delta}{CE\chi_{-H} + \Delta\chi_{0H}^\delta}$ ,  $S$  — площадь входной поверхности кристалла,  $V$  — его объем.

Корреляционная функция в выражении (32) в случае нескольких типов дефектов может быть представлена через уже известную функцию (18) как сумма вкладов от каждого типа дефектов:

$$S(\mathbf{q}) = \sum_\alpha S_\alpha(\mathbf{q}), \quad S_\alpha(\mathbf{q}) = \frac{c_\alpha}{N} E^2 |\chi_H| F_\alpha(\mathbf{q}). \quad (33)$$

После интегрирования в (30) по вертикальной расходимости с учетом (31)–(33) получим для области рассеяния Кривоглаза–Хуаня ( $p \leq k_{m\alpha}$ ) [76]:

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \sum_\alpha M_\alpha [A_H^\alpha(\mathbf{p}) + A_{S-W}^\alpha(\mathbf{p}) + A_a^\alpha(\mathbf{p})], \quad (34)$$

$$A_H^\alpha(\mathbf{p}) = \frac{K}{\pi \sqrt{p^2 + \mu^2}} (2\beta_1^\alpha + a_p \beta_2^\alpha) \arctg \frac{\sqrt{k_{m\alpha}^2 - p^2}}{\sqrt{p^2 + \mu^2}}, \quad a_p = \frac{(\mathbf{H}_0 \mathbf{p})^2}{p^2 + \mu^2}, \quad (35)$$

$$A_{S-w}^{\alpha}(\mathbf{p}) = \frac{K}{\pi\sqrt{p^2 + \mu^2}} \left( \beta_1^{\alpha} + \frac{3}{4} a_p \beta_2^{\alpha} \right) \left[ \left( \frac{\pi}{2} - \operatorname{arctg} \frac{\sqrt{k_{m\alpha}^2 - p^2}}{\sqrt{p^2 + \mu^2}} \right) \frac{k_{m\alpha}^2}{p^2 + \mu^2} - \frac{\sqrt{k_{m\alpha}^2 - p^2}}{\sqrt{p^2 + \mu^2}} \right] + \frac{K}{2\pi} a_p \beta_2^{\alpha} \frac{\sqrt{k_{m\alpha}^2 - p^2}}{\sqrt{p^2 + \mu^2}}, \quad (36)$$

$$A_a^{\alpha}(\mathbf{p}) = \frac{K}{\pi H} \beta_3^{\alpha} \left[ \ln \frac{\sqrt{k_{m\alpha}^2 + \mu^2} + \sqrt{k_{m\alpha}^2 - p^2}}{\sqrt{k_{m\alpha}^2 + \mu^2} - \sqrt{k_{m\alpha}^2 - p^2}} + \frac{2k_{m\alpha}^2}{p^2 + \mu^2} \left( 1 - \frac{\sqrt{k_{m\alpha}^2 - p^2}}{\sqrt{k_{m\alpha}^2 + \mu^2}} \right) \right], \quad (37)$$

$$M_{\alpha} = c_{\alpha} m_0 C^2 E^2 (2\gamma_0 \mu)^{-1}, \quad \beta_i^{\alpha} = B_i^{\alpha} / B^{\alpha}, \quad i = \overline{1, 3}.$$

Аналогично для области Стокса–Вильсона ( $p \geq k_{m\alpha}$ ):

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \sum_{\alpha} M_{\alpha} B_{S-w}^{\alpha}(\mathbf{p}),$$

$$B_{S-w}^{\alpha}(\mathbf{p}) = \frac{K k_{m\alpha}^2}{2(p^2 + \mu^2)^{3/2}} \left( B_1^{\alpha} + \frac{3}{2} a_p B_2^{\alpha} \right). \quad (38)$$

Выше приведены выражения динамической теории рассеяния рентгеновских лучей для случая брэгг-дифракции на ТКД в приближении полубесконечного (толстого) кристалла с дефектами произвольных размеров. Переход к иным условиям дифракции (геометрии Лауэ [21–23, 74], приближению тонкого кристалла [23, 81, 86], макроскопической деформации [87–90]) из-за изменения граничных условий приводит к существенным изменениям конечных выражений. При этом, для всех случаев имеет место эффект существенно различного влияния условий динамической дифракции на зависимости от дефектов брэгговской и диффузной составляющих, изменяющий соотношение вкладов в картину рассеяния от дефектов разного типа.

В высокоразрешающем ДКД, как и в ТКД, часто используются три кристалла, при этом образец размещается перед детектором (на месте анализатора), а в качестве монохроматора используются, как правило, два монокристалла во взаимно дисперсионном положении. Такое изменение рентгенооптической схемы, при широко открытом окне детектора, приводит к дополнительному аппаратурному интегрированию интенсивности дифрагированного на образце пучка рентгеновских лучей по вертикальной расходимости и изменению, в сравнении с ТКД, функциональной зависимости регистрируемой на ДКД интенсивности от параметров дефектов. Интенсивность рентгеновских лучей, отраженных от исследуемого образ-

ца, в таких схемах является сверткой коэффициентов отражения всех кристаллов [85]:

$$P(\Delta\theta) = \int_{\lambda_0 - \Delta\lambda}^{\lambda_0 + \Delta\lambda} d\lambda I(\lambda) \int_{-\Phi_m}^{\Phi_m} d\varphi \int_{-x_m}^{x_m} dx G(x, \varphi) R_1^{n_1}(x - \Phi_1) R_2^{n_2}(-x - \Phi_2) R_3(\Delta\theta - x - \Phi_3), \quad (39)$$

где функция  $I(\lambda) = I_0 / [1 + 4(\lambda - \lambda_0)^2 / w_\lambda^2]$  описывает форму линии характеристического излучения длиной волны  $\lambda_0$  и шириной  $w_\lambda$ ,  $I_0$  — интенсивность падающего пучка,  $2\Delta\lambda$ ,  $2\Phi_m$  и  $2x_m$  — диапазоны интегрирования соответственно по длине волны  $\lambda$ , вертикальной ( $\varphi$ ) и горизонтальной ( $x$ ) расходимостях падающего пучка рентгеновских лучей,  $G(x, \varphi)$  — функция углового распределения интенсивности падающего пучка,  $R_i$  — коэффициент отражения  $i$ -го кристалла ( $i = 1, 2, 3$ ),  $n_1$  и  $n_2$  — кратности отражений соответственно на первом и втором кристаллах монохроматора,  $\Phi_i = (\varphi^2/2 + (\lambda - \lambda_0)/\lambda_0) \operatorname{tg} \theta_B^i$ ,  $\theta_B^i$  — угол Брэгга  $i$ -го кристалла.

При достаточно большой горизонтальной расходимости можно считать  $x_m \rightarrow \infty$  и после замены  $u = x + \Phi_3$  свести выражение (39) к однократной свертке:

$$P(\Delta\theta) = V_0 \int_{-\infty}^{\infty} du v(u) R_3(\Delta\theta - u). \quad (40)$$

Нормированная инструментальная функция в (40) имеет вид:

$$v(u) = V(u)/V_0, \quad V_0 = P_0^\sigma + P_0^\pi, \quad P_0^{\sigma, \pi} = \int_{-\infty}^{\infty} du V^{\sigma, \pi}(u), \quad (41)$$

$$V(u) = \int_{\lambda_0 - \Delta\lambda}^{\lambda_0 + \Delta\lambda} d\lambda I(\lambda) \int_{-\Phi_m}^{\Phi_m} d\varphi R_1^{n_1}(u - \Phi_3 - \Phi_1) R_2^{n_2}(-u + \Phi_3 - \Phi_2), \quad (42)$$

где  $P_0^{\sigma, \pi}$  — интенсивность соответственно  $\sigma$ - и  $\pi$ -компонент поляризации падающих на образец рентгеновских волн, причем считается, что  $G(x, \varphi) \approx 1$ . В случае неполяризованного излучения для коэффициента дифракционного отражения исследуемого (третьего) кристалла имеем:

$$R(\Delta\theta) = \frac{P^\sigma(\Delta\theta) + P^\pi(\Delta\theta)}{P_0^\sigma + P_0^\pi} = R^\sigma(\Delta\theta) + R^\pi(\Delta\theta), \quad (43)$$

$$R^{\sigma, \pi}(\Delta\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} du v^{\sigma, \pi}(u) R_3^{\sigma, \pi}(\Delta\theta - u).$$

При наличии дефектов и, соответственно, диффузного рассеяния

только в исследуемом (третьем) кристалле, то выражение (39) необходимо дополнительно проинтегрировать только по телесному углу  $d\Omega_{K'}$ , т.е. по углу выхода диффузно рассеянных волн. Вследствие такого интегрирования коэффициент отражения  $R_3$  в выражении (39) приобретает следующий вид:

$$R_3(\Delta\theta) = R_{3\text{coh}}(\Delta\theta) + R_{3\text{diff}}(\Delta\theta), \quad R_{3\text{diff}}(\Delta\theta) = \int_{K'=K} d\Omega_{K'} R_{3D}(\mathbf{k}), \quad (44)$$

где интегрирование происходит по плоскости, касательной к сфере Эвальда;  $d\Omega_{K'} = dS_{K'} / K^2$ ;  $dS_{K'}$  — элемент площади на этой поверхности. Когерентная компонента отражательной способности третьего кристалла  $R_{3\text{coh}}$  дается выражением (8), а величина  $R_{3D}$ , определяющая диффузную составляющую коэффициента отражения образца в схеме ДКД с широко открытым окном детектора, выражением (32).

Если в рентгенооптических схемах как ТКД, так и ДКД используются несовершенные кристаллы монохроматора и анализатора, то выражения для дифференциальных распределений отражательной способности этих монокристаллов также следует представлять в виде суммы брэгговской и диффузной компонент

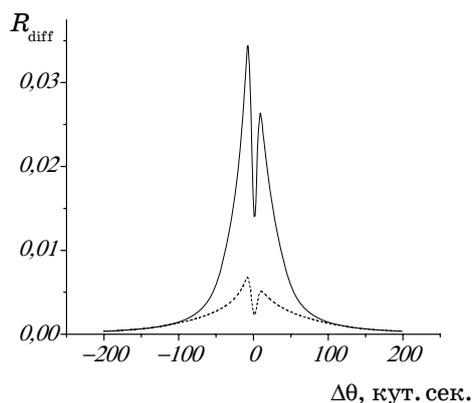
$$R(\mathbf{k}) = R_B(\mathbf{k}) + R_D(\mathbf{k}), \quad (45)$$

где диффузная компонента  $R_D(\mathbf{k})$  определяется выражением (32), а когерентная компонента отражательной способности кристалла имеет вид:

$$R_B(\mathbf{k}) = R_{\text{coh}}(\Delta\theta) \delta(\Delta\theta' - b\Delta\theta) \delta(\varphi' - \varphi), \quad (46)$$

тут  $\delta(x)$  —  $\delta$ -функция Дирака,  $\varphi$  и  $\varphi'$  — угловые отклонения волновых векторов падающей и рассеянной плоских волн от соответствующих точных брэгговских направлений в вертикальной плоскости (перпендикулярно плоскости рассеяния  $(\mathbf{K}, \mathbf{H})$ ),  $R_{\text{coh}}$  дается выражением (8). Такая модификация коэффициентов отражения монохроматора и анализатора требует в формулах (5) и (6) дополнительного интегрирования по телесным углам  $d\Omega_K$  и  $d\Omega_{K'}$ , которые отвечают отклонениям волновых векторов диффузно рассеянных волн соответственно в монохроматоре и анализаторе [76].

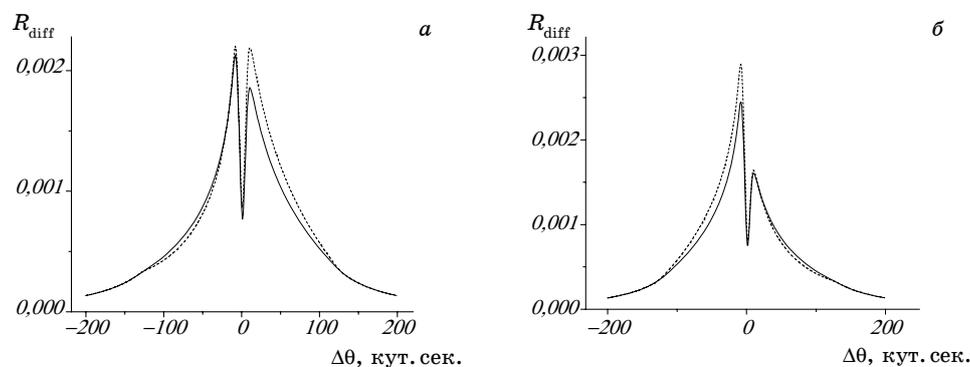
При анализе одномерных и двумерных распределений дифрагированной интенсивности дефекты разных типов с одинаковыми радиусами достаточно легко отличить благодаря тому, что они имеют разные эффективные радиусы. Это отличие иллюстрируется на рис. 25, где изображены рассчитанные диффузные компоненты коэффициента отражения для дислокационных петель с радиусом  $R_L = 0,05$  мкм и концентрацией  $n_L = 1 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup> и преципитатов с ра-



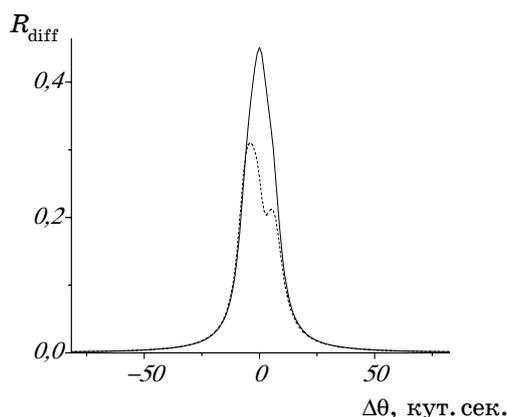
**Рис. 25.** Диффузные компоненты коэффициента отражения для дефектов разных типов при одинаковых радиусах. Сплошная линия соответствует вкладу диффузного рассеяния от дислокационных петель, штриховая — от преципитатов.

диусом  $R_p = 0,05$  мкм и концентрацией  $n_p = 1,34 \cdot 10^{12}$  см<sup>-3</sup>. При этом эффективные радиусы петель и преципитатов равны соответственно  $R_{eff}^L = 0,24$  мкм и  $R_{eff}^P = 0,08$  мкм.

Сравнение диффузных компонент коэффициента отражения, представленное на рис. 25, проводилось при концентрации дефектов, подобранной таким образом, чтобы рассчитанные кривые совпадали на «хвостах», а основные отличия наблюдались в центральной части кривых дифракционного отражения (КДО). Отметим, что на рисунках 25–27 представлены результаты численного модели-



**Рис. 26.** Диффузные компоненты коэффициента отражения с учетом антисимметричной составляющей ДР для дефектов разных типов с одинаковыми эффективными радиусами (*а* — для отрицательных знаков деформаций, *б* — для положительных). Сплошная линия соответствует вкладу ДР от дислокационных петель, штриховая — от преципитатов.



**Рис. 27.** Влияние интерференционного коэффициента поглощения интенсивности ДР на диффузные компоненты коэффициента отражения для разных типов дефектов, имеющих одинаковые эффективные радиусы ( $R_{\text{eff}} = 4,5$  мкм). Сплошная линия соответствует вкладу ДР от дислокационных петель с радиусом  $R_L = 0,87$  мкм и концентрацией  $n_L = 2,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ , штриховая — от преципитатов с радиусом  $R_p = 1,55$  мкм и концентрацией  $n_p = 2,5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$ .

рования с использованием вышеописанной модели дифракции на ДКД для кристалла кремния (рефлекс (111),  $\text{CuK}_\alpha$ -излучение).

Обратим внимание на то обстоятельство, что выражения для угловых распределений интенсивностей диффузного рассеяния (ДР) от микродефектов разных типов формально совпадают, и содержат параметр  $k_{m\alpha}$ , задающий размер области рассеяния Кривоглаза–Хуаня и связанный с эффективным радиусом микродефектов типа  $\alpha$ . В связи с этим можно было бы ожидать, что при одинаковых эффективных радиусах микродефектов разных типов угловые распределения интенсивностей ДР от них будут совпадать и установить тип дефектов и их характеристики по измеренным КДО будет невозможно.

На самом деле, ситуация не такая безнадежная. Благодаря учету эффектов интерференции рентгеновских лучей, рассеянных на дальних и ближних полях статических смещений атомов матрицы, связанных с наличием дефектов, появляется антисимметричная компонента в интенсивности ДР (см. (27) и (37)). Антисимметричная компонента чувствительна к знаку поля деформации возле дефекта и существенно отличается для дефектов разных типов.

Рисунок 26 иллюстрирует отличия между диффузными компонентами коэффициента отражения для дислокационных петель ( $R_L = 0,016$  мкм,  $n_L = 3,6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ) и преципитатов ( $R_p = 0,05$  мкм,  $n_p = 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$ ), имеющих одинаковые эффективные радиусы  $R_{\text{eff}} =$

= 0,08 мкм, при отрицательных (рис. 26, а) и положительных (рис. 26, б) знаках деформаций на границах дефектов.

Дополнительным фактором, который помогает различать типы дефектов, является то, что при одинаковых эффективных радиусах микродефектов и, соответственно, одинаковых размерах областей рассеяния Кривоглаза–Хуаня величины показателей статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, который определяется вызванной микродефектами средней деформацией по всему кристаллу и зависит также от концентрации микродефектов, практически всегда существенно отличаются.

Аналогичные отличия существуют не только в амплитудах антисимметричных компонент, но и в величинах интерференционного коэффициента поглощения интенсивности ДР. Эти отличия наиболее сильно проявляются в области полного отражения (см. рис. 27).

Следует подчеркнуть, что сравнение диффузных компонент коэффициента отражения на рис. 26 и 27 проводилось умышленно для наименее благоприятного случая, когда совпадают не только эффективные радиусы, но и концентрации микродефектов выбраны таким образом, чтобы величины интенсивностей ДР от дефектов разного типа совпадали на хвостах КДО.

## ДДКД ГОМО- И ГЕТЕРОГЕННЫХ СТРУКТУР

Как отмечалось, повышение информативности и однозначности диагностики в рамках ДДКД обусловлено уникальной возможностью только при динамической дифракции целенаправленно реализовать необходимый полный набор независимых дифракционных экспериментов для одного образца со сложной дефектной структурой с целью решения обратной задачи многопараметрической диагностики материалов и изделий нанотехнологий. Так, в работе [73] метод ДДКД был обобщен на случай гетероструктур и применен к многослойной системе с квантовой ямой (КЯ)  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$  (рис. 28).

Это впервые позволило путем подгонки экспериментальных и теоретических (полученных в рамках динамической теории дифракции для слоистых систем) данных (рис. 29) определить не только химический состав каждого слоя и его толщину, но и характеристики дефектов, эффектов сегрегации и полей упругой деформации в подложке и в каждом слое.

Определенные в рамках ДДКД характеристики отдельных слоев исследуемой многослойной структуры с квантовой ямой, а также параметры дефектов в них представлены в табл. 2.

Для реализации необходимого полного набора экспериментальных данных можно использовать не только продемонстрированное выше изменение условий дифракции (случаи Брэгга и Лауэ, преде-

GaAs	10 нм
Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	100 нм
GaAs	150 нм
GaAs <sub>1-y</sub> N <sub>y</sub>	20 нм
КЯ In <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As <sub>1-y</sub> N <sub>y</sub>	6,8 нм
GaAs <sub>1-y</sub> N <sub>y</sub>	20 нм
GaAs	150 нм
Al <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> As	300 нм
GaAs	150 нм
GaAs	подложка

Рис. 28. Схема многослойной структуры с квантовой ямой In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub>.

лы тонкого и толстого кристаллов, асимметрия дифракции, длина волны, разные рефлексы), но и изменение самих методик измерений от дифференциальных, через интегро-дифференциальные до интегральных, которые реализуются на трехкристалльных (ТКД), двухкристалльных (ДКД) и однокристалльных дифрактометрах.

Возможность рассматривать результаты, полученные при использовании различных методик, как независимые экспериментальные данные связана с тем, что, к примеру, для дефектов кулоновского типа распределение дифрагированной интенсивности в обратном пространстве (пространстве обратной решетки) характеризуется наличием двух областей (см. (18)). Это область Кривоглаза-Хуаня, где  $I \sim q^{-2}$  (в прямом пространстве ей соответствует область искажений кристаллической решетки вне дефекта, спадающих по кулоновскому закону) и область Стокса-Вильсона или об-

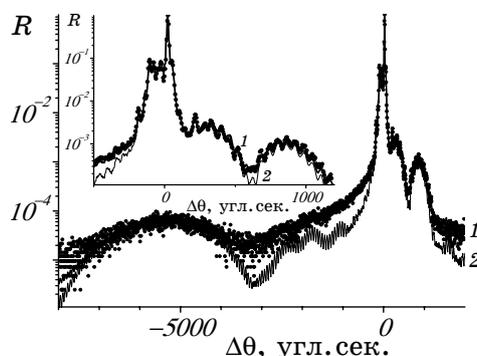


Рис. 29. Экспериментальная кривая (маркеры) дифракционного отражения для многослойной структуры In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub>/GaAs и соответствующие теоретические кривые с учетом (1) и без учета (2) диффузного рассеяния от дефектов в подложке и слоях.

**ТАБЛИЦА 2.** Параметры многослойной полупроводниковой структуры с квантовой ямой  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$ .

		Подложка GaAs	Слой GaAs	Слой $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	Слой $\text{GaAs}_{1-y}\text{N}_y$	КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{N}_y$
Толщина слоя $t$ , нм		—	150 175 150 10	320 120	24 24	7,4
Химический состав <sup>*)</sup> , $x$ $y$		—	—	0,3	0,012 (0,01)	0,37 0,02
Дислокационные петли	Концентрация $n_L$ , $\text{см}^{-3}$	$3 \cdot 10^{16}$ $1 \cdot 10^{18}$	—	—	—	$5 \cdot 10^{17}$
	Радиус $R_L$ , нм	1,5 0,5	—	—	—	1,5
	$L_H$	$3,79 \cdot 10^{-3}$ $4,68 \cdot 10^{-3}$	—	—	—	$6,31 \cdot 10^{-2}$

<sup>\*)</sup> В скобках приведено номинальное значение химического состава.

ласть асимптотического диффузного рассеяния, где интенсивность  $I \sim q^{-4}$  (в прямом пространстве ей отвечает область, занимаемая самим дефектом).

При использовании ТКД измеряется интенсивность, просуммированная по вертикальной расходимости падающего пучка рентгеновских лучей, что приводит к необходимости интегрирования исходных выражений по соответствующей компоненте волнового вектора флуктуационной волны статических смещений. Это изменяет закон спадания измеряемой интенсивности (см. (34)–(38)), к примеру, в области Стокса–Вильсона на  $I \sim q^{-3}$ .

Измерения на ДКД требуют дополнительного интегрирования по углам выхода в плоскости дифракции, что изменяет закон спадания измеряемой интенсивности уже на  $I \sim q^{-2}$ . Аналогичные изменения претерпевают и измеряемые распределения в области Кривоглаза–Хуаня (см. (24)–(28)).

Таким образом, для различных методик оказываются различными сами экспериментально измеряемые распределения интенсивности дифрагированных лучей в обратном пространстве, что позволяет рассматривать их как независимые эксперименты.

Целесообразность одновременной обработки одно- и двумерных профилей распределений дифрагированной интенсивности обусловлена не только различными для разных методик зависимостями

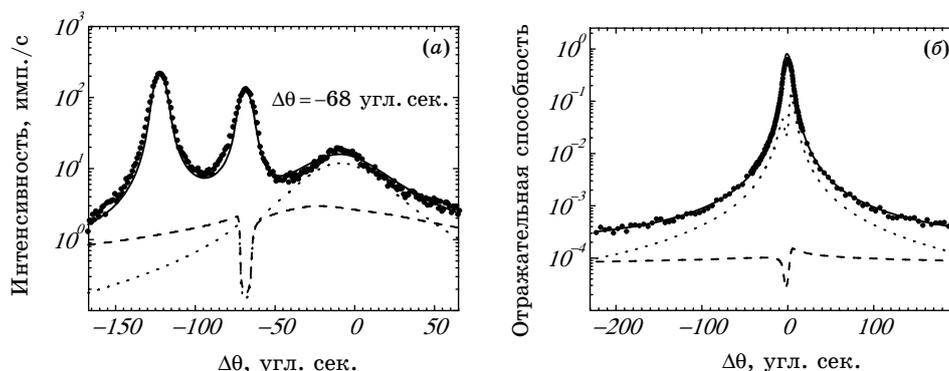
ми измеряемых интенсивностей, их брэгговской и диффузной составляющих, от параметров дефектов и условий дифракции, но и неоднозначностью при определении по профилям ДКД параметров дефектной структуры, особенно, нарушенного слоя, и потерей чувствительности двумерных профилей к дефектам либо с очень малыми радиусами (когда диффузный фон в обратном пространстве сильно «размазан»), либо с очень большими радиусами (когда диффузный пик попадает в область полного отражения).

Комбинация различных методик использовалась в работах [74, 75] для анализа дефектной структуры монокристаллов кремния.

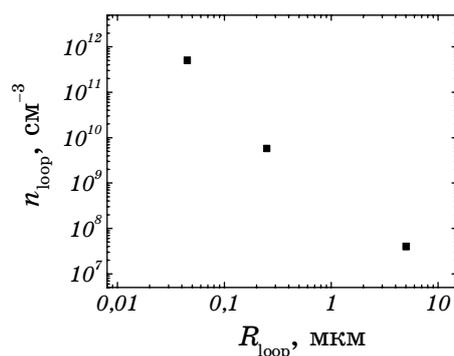
Аналогично этим работам продемонстрируем возможности комбинации ТКД и ДКД измерений для характеристики дефектов в монокристалле кремния с ориентацией поверхности (111), выращенного методом Чохральского и отожженного на протяжении 50 часов при температуре 750°C. Измерения дифракционных профилей ТКД и ДКД проводились в геометрии дифракции по Брэггу в окрестности узла обратной решетки (111).

Совместная обработка в рамках ДДКД дифракционных профилей ТКД и ДКД (см. рис. 30), позволила восстановить не только параметры мелких и крупных микродефектов в объеме образца, но и исследовать деформацию в приповерхностном слое, вызванную силами «зеркального изображения» от микродефектов.

В результате были восстановлены параметры поля упругой деформации  $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{0\perp} \exp(-z/t_0)$  в приповерхностном слое образца:  $t_0 = (7,0 \pm 0,7)$  нм, максимальная деформация  $\varepsilon_{0\perp} = (1,0 \pm 0,1) \cdot 10^{-4}$ .



**Рис. 30.** Профили ТКД (а) и ДКД (б) для отражения (111) излучение  $\text{CuK}_{\alpha_1}$  (сплошные линии — теория, маркеры — эксперимент) от образца Cz-Si, отожженного на протяжении 50 часов при температуре 750°C;  $\Delta\theta$  — угол отклонения образца от точного брэгговского положения. Штриховые линии обозначают вклады от дискообразных преципитатов кислорода  $\text{SiO}_2$ , а пунктирные — дислокационных петель.



**Рис. 31.** Распределение дислокационных петель по радиусам ( $R_{loop}$ ) в образце Cz-Si, определенное путем совместной обработки дифракционных профилей ТКД и ДКД для рефлекса (111), излучение  $CuK_{\alpha_1}$ ;  $n_{loop}$  — концентрация петель. Размер точек на графике указывает на погрешность найденных значений параметров дефектов.

Были определены характеристики дискообразных преципитатов кислорода: радиус  $R_p = (7,7 \pm 0,2)$  нм, толщина  $h_p = (2,2 \pm 0,05)$  нм, концентрация  $n_p = (2,8 \pm 0,3) \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ . Найдено распределение дислокационных петель по радиусам (рис. 31). При обработке пика монокроматора на профилях ТКД были определены параметры основного типа дефектов (дислокационных петель) в соответствующем кристалле:  $R_{loop} = 1,0$  мкм,  $n_{loop} = 1,1 \cdot 10^8 \text{ см}^{-3}$ . Был также учтен вклад в картину дифракции от теплового диффузного рассеяния.

Таким образом, реализация ДДКД путем совместного фитирования дифракционных профилей ТКД и ДКД позволила выполнить на качественно новом уровне однозначности и достоверности количественную диагностику сложной дефектной структуры исследуемого образца, а также кристалла монокроматора.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Первое упоминание об открытом явлении опубликовано нами с соавторами в работе [76]. В настоящей работе проведено его детальное обоснование и анализ важных следствий из него. Информация об обнаруженных авторами отдельных следствиях из явления уникальной информативности динамической картины рассеяния в кристаллах с дефектами и результатах их использования для повышения информативности диагностики опубликована авторами в ряде более ранних работ [24–30, 60, 62, 74, 75, 77, 78, 80, 91].

В настоящей работе показана принципиально динамическая природа открытой возможности существенного изменения как характера влияния дефектов на картину рассеяния, так и избирательно-

сти её чувствительности к определённым типам дефектов за счет управления как вкладом диффузной составляющей в целом, так и соотношениями вкладов в картину рассеяния дефектов разного типа, путем изменений геометрии и предельных случаев динамической дифракции, то есть при переходе от дифракции по Лауэ к дифракции по Брэггу, от приближения тонкого к приближению толстого кристаллов, а также методик дифрактометрического эксперимента (от дифференциальных к интегральным), и дополнительно, путем непрерывного изменения толщины кристалла, длины волны излучения, азимутального угла, асимметрии съемки и радиуса кривизны упруго изогнутого кристалла. Открытое явление обусловлено противоположным знаком влияния дефектов на брэгговскую и диффузную составляющие картины рассеяния и принципиально различным характером их зависимостей от условий динамической дифракции. Все это увеличивает информативность как отдельных рентгенодифракционных методик, так и обеспечивает уникальную возможность проведения целого ряда независимых экспериментов (т.е. комбинации разных подходов) для одного и того же образца, и следовательно, сертификации 21 века.

Построенная динамическая теория и предсказанные новые эффекты и явления, положенные в основу метода ДДКД, обеспечили такие принципиально новые функциональные возможности динамической дифрактометрии, как:

— количественная характеристика без разрушения одновременно нескольких типов дефектов, присутствующих в кристалле (сертификация 21 столетия), основанная на концепции комбинированного подхода путем совместной обработки экспериментальных картин рассеяния, полученных в различных геометриях и предельных случаях динамической дифракции, а также различными методиками (дифференциальными, интегральными);

— интегральная дифрактометрия быстропротекающих процессов структурных превращений (рентгеновское кино) и неразрушающая послойная диагностика макродеформаций, микродефектов и параметров сверхструктуры гетеросистем.

Главным результатом настоящей работы есть то, что в ней заложены принципы метода управления соотношением когерентной и диффузной составляющих картины динамической дифракции и соотношениями вкладов дефектов разного типа при неизменной дефектной структуре образца за счет изменения только условий дифракции, т.е. основы метода ДДКД.

Таким образом, созданы основы нового поколения кристаллографии — диффузной динамической комбинированной дифрактометрии (ДДКД), которая позволяет, не прибегая к недифрактометрическим методам исследований, обеспечивать полноту независимых экспериментальных данных для однозначного определения

параметров дефектной структуры произвольной сложности.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Von Laue M., Rontgenstrahlinterferenzen (Leipzig: Akademische Verlagsges: 1948), p. 410.
2. C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction*. 2<sup>nd</sup> ed. (London: Oxford University Press: 2001), p. 320.
3. R. W. James, *Solid State Phys.*, **15**: 55 (1963).
4. B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.*, **36**: 681 (1964).
5. S. Takagi, *Acta Crystallogr.*, **15**, No. 12: 1131 (1962).
6. S. Takagi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **26**, No. 5: 1239 (1969).
7. D. Taupin, *Bull. Soc. Franc. Miner. Cryst.*, **87**, No. 2: 469 (1964).
8. P. Penning and D. Polder, *Philips Res. Repts.*, **16**, No. 2: 419 (1961).
9. P. Penning, *Philips Res. Repts. Suppl.*, **21**, No. 5: 1 (1966).
10. N. Kato, *Acta Crystallogr.*, **16**, No. 4: 276 (1963).
11. N. Kato, *Z. Naturforsch. A.*, **28**, №1: 604 (1973).
12. L. V. Azaroff, R. Kaplow, N. Kato, R. J. Weiss et al., *X-Ray Diffraction* (New York: Me Graw-Hill: 1974), p. 652.
13. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (London: Oxford University Press: 2001), p. 661.
14. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996), p. 466.
15. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *ФММ*, **24**, № 3: 385 (1967).
16. В. Б. Молодкин, *ФММ*, **25**, № 3: 410 (1968).
17. В. Б. Молодкин, *ФММ*, **27**, № 4: 582 (1969).
18. В. Б. Молодкин, *Металлофиз.*, **2**, № 1: 3 (1980).
19. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**: 615 (1981).
20. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 1 (1984).
21. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 847 (1985).
22. V. V. Kochelab, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Stat. Solidi A*, **108**, No. 1: 67 (1988).
23. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988), с. 200.
24. В. Б. Молодкин, Г. И. Гудзенко, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, *Металлофизика*, **5**, № 3: 10 (1983).
25. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, А. Н. Гуреев и др., *Металлофизика*, **6**, № 2: 18 (1984).
26. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, А. Н. Гуреев и др., *Металлофизика*, **6**, № 3: 105 (1984).
27. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii, A. N. Gureev et al., *Phys. Status Solidi (a)*, **87**, No. 2: 597 (1985).
28. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, and M. T. Kogut, *Металлофизика*, **16**, № 2: 48 (1994).
29. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, *УФМ*, **5**, № 1: 51 (2004).

30. А. И. Низкова, В. Б. Молодкин, И. А. Московка, *Металлофиз. новейшие технол.*, **26**, № 6: 783 (2004).
31. P. H. Dederichs, *Phys. Stat. Solidi B*, **23**, No. 1: 377 (1967).
32. P. H. Dederichs, *Solid State Phys.*, **27**: 135 (1972).
33. V. B. Molodkin, A. I. Nizkova, A. P. Shpak, V. Ph. Machulin et al., *Diffractionmetry of Nanosized Defects and Heterolayers of Crystals* (Kiev: Akademperiodyka: 2005), p. 364 (in Russian).
34. В. В. Ратников, Э. К. Ковьев, Л. М. Сорокин, *ФТТ*, **26**, № 7: 2155 (1984).
35. В. В. Ратников, Л. М. Сорокин, *ФТТ*, **26**, № 11: 3445 (1984).
36. В. В. Ратников, Р. Н. Кютт, *ЖТФ*, **55**, № 2: 391 (1985).
37. Р. Н. Кютт, В. В. Ратников, *Металлофизика*, **7**, № 1: 36 (1985).
38. A. N. Kostyuk, V. B. Molodkin, and S. I. Olikhovskii, *Phys. Stat. Solidi B*, **178**, No. 1: 45 (1993).
39. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and A. N. Kostyuk, *Phys. Stat. Solidi B*, **183**, No. 1: 59 (1994).
40. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len et al., *Phys. Stat. Solidi B*, **227**, No. 2: 429 (2001).
41. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len et al., *Phys. Stat. Solidi B*, **231**, No. 1: 199 (2002).
42. V. G. Baryakhtar, V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, A. P. Shpak et al., *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **16**, No. 1: 21 (1994).
43. V. B. Molodkin, V. V. Nemoshkalenko, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii et al., *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **20**, No. 1: 29 (1998).
44. I. V. Prokopenko, E. N. Kislovskii, S. I. Olikhovskii, V. M. Tkach et al., *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, **3**, No. 3: 275 (2000).
45. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, V. P. Krivitsky et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **34**, No. 5: A82 (2001).
46. E. N. Kislovskii, S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, V. V. Nemoshkalenko et al., *Phys. Stat. Solidi B*, **231**, No. 1: 213 (2002).
47. V. B. Molodkin, M. Ando, E. N. Kislovskii, S. I. Olikhovskii et al., *Металлофиз. новейшие технол.*, **24**, № 4: 541 (2002).
48. Ye. M. Kyslovskyy, T. P. Vladimirova, S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin et al., *Phys. Stat. Solidi A*, **204**, No. 8: 2591 (2007).
49. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy et al., *Phys. Stat. Solidi*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
50. N. Kato, *Acta Crystallogr. A*, **36**: 763 (1980); *ibidem*, **36**: 770 (1980); *ibidem*, **47**: 1 (1991).
51. V. Holý and K. T. Gabrielyan, *Phys. Stat. Solidi B*, **140**, No. 1: 39 (1987).
52. V. Holý and J. Kuběna, *Phys. Stat. Solidi B*, **151**: 23 (1989); *ibidem*, **155**: 339 (1989).
53. M. Al Haddad and P. Becker, *Acta Crystallogr. A*, **44**, No. 3: 262 (1988).
54. А. М. Поляков, Ф. Н. Чуховский, Д. И. Пискунов, *ЖЭТФ*, **99**: 589 (1991).
55. J. P. Guigay and F. N. Chukhovskii, *Acta Crystallogr. A*, **51**: 288 (1995).
56. N. M. Olekhnovich, A. L. Karpey, A. I. Olekhnovich, and L. D. Puzenkova, *Acta Crystallogr. A*, **39**: 116 (1983).
57. J. R. Schneider, R. Bouchard, H. A. Graf, and H. Nagasava, *Acta Crystallogr. A*, **48**, No. 6: 804 (1992).
58. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. V. Kovalchuk et al., *Nucl. Instrum. and Meth. in Physics. A*, **308**: 294 (1991).

59. В. В. Кочелаб, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, *Металлофизика*, **13**, № 6: 84 (1991).
60. В. Г. Барьяхтар, Е. Н. Гаврилова, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, *Металлофизика*, **14**, № 11: 68 (1992).
61. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика* (Москва: Наука: 1982), с. 392.
62. В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, С. И. Олиховский и др., *Металлофизика*, **14**, № 8: 79 (1992).
63. V. G. Bar'yakhtar, M. V. Kovalchuk, Yu. M. Litvinov, V. V. Nemoshkalenko et al., *Nucl. Instrum. and Meth. in Physics. A*, **308**: 291 (1991).
64. Е. Н. Гаврилова, Е. Н. Кисловский, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, *Металлофизика*, **14**, № 3: 70 (1992).
65. В. Г. Барьяхтар, В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский и др., *Металлофизика*, **15**, № 12: 18 (1993).
66. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 8: 1009 (2007).
67. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9 (2008) (в печати).
68. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 10 (2008) (в печати).
69. L. I. Datsenko, V. I. Khrupa, and E. N. Kislovskii, *Phys. Status Solidi A*, **68**, No. 2: 399 (1981).
70. В. И. Хрупа, Е. Н. Кисловский, Л. И. Даценко, *Металлофизика*, **2**, № 4: 55 (1980).
71. Ф. Н. Чуховский, *Металлофизика*, **2**, № 6: 3 (1980).
72. В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак, А. А. Белоцкая и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 8: 1077 (2006).
73. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, I. M. Fodchuk et al., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **204**, No. 8: 2606 (2007).
74. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев, Е. Г. Лень и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 9: 1177 (2006).
75. А. Р. Шпак, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy et al., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
76. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak, S. I. Olikhovskii et al., *Dynamical Bragg and Diffuse Scattering Effects and Implications for Diffractometry in the Twenty-First Century*. In: *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (New Jersey: Momentum Press: 2008) (to be published).
77. V. B. Molodkin, L. I. Datsenko, V. I. Khrupa, M. E. Osinovskii et al., *Phys. Metals*, **5**, No. 6: 1072 (1985).
78. В. Г. Барьяхтар, А. Н. Гуреев, В. В. Кочелаб, В. Б. Молодкин и др., *Металлофизика*, **11**, № 3: 73 (1989).
79. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, *Успехи физ. мет.*, **5**, № 1: 51 (2004).
80. В. Б. Молодкин, В. В. Немошкаленко, А. И. Низкова, С. И. Олиховский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 3: 3 (2000).
81. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев, Е. Г. Лень и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 7: 947 (2006).
82. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осинковский и др., *Металлофиз.*

- новейшие технол.*, **6**, № 3: 7 (1984).
83. С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, Т. П. Владімірова, В. Б. Молодкін та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 6: 721 (2008).
84. С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський, В. Б. Молодкін та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 6: 3 (2000).
85. Є. М. Кисловський, С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкін, Є. Г. Лень та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **26**, № 9: 1241 (2004).
86. В. Б. Молодкін, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев, Е. Г. Лень и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 12: 1659 (2005).
87. С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкін, Л. Г. Ткачук, *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 9: 1229 (2006).
88. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкін, О. С. Кононенко, А. А. Катасонов и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 7: 887 (2007).
89. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкін, О. С. Кононенко, А. А. Катасонов и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 9: 1225 (2007).
90. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкін, А. И. Низкова, О. С. Кононенко и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 10: 1333 (2007).
91. В. Б. Молодкін, А. И. Низкова, А. П. Шпак, В. Ф. Мачулин и др., *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика: 2005), с. 364.