

PACS numbers: 07.85.Jy, 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cp, 61.46.Hk, 61.72.Dd, 81.07.Bc

Интегральная многопараметрическая дифрактометрия наносистем на основе эффектов многократности диффузного рассеяния

А. П. Шпак, М. В. Ковальчук*, В. Б. Молодкин, В. Л. Носик*,
С. В. Дмитриев, Е. Г. Лень, С. И. Олиховский, А. И. Низкова,
В. В. Молодкин, Е. В. Первак, А. А. Катасонов, Л. И. Ниничук,
А. В. Мельник

*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*

В работе изложена обобщенная динамическая теория брэгговского и диффузного рассеяний рентгеновских лучей в кристаллах с дефектами нескольких типов. Рассмотрены выражения для дифференциальной и интегральной интенсивностей рассеяния, связывающие их с характеристиками дефектов в кристаллах при дифракции, как на отражение, так и на прохождение. Описаны экстинкционные эффекты за счет рассеяния на дефектах без ограничений на их размеры в когерентном и диффузном рассеянии при малых и больших эффектах диффузной экстинкции для дифференциального и интегральных коэффициентов и факторов экстинкции за счет многократности рассеяния на флуктуационных отклонениях от периодичности решеток кристаллов. На основе построенной динамической теории, при ее сравнении с кинематической, создана новая физическая концепция, которая позволила раскрыть и детально проанализировать физическую природу обнаруженных явлений, обуславливающих, с одной стороны, принципиальное ограничение информативности кинематической картины рассеяния, а с другой стороны, радикальное повышение информативности картины динамического рассеяния. Показано, что это повышение информативности обусловлено обнаруженным явлением очень существенной зависимости от условий дифракции характера влияния дефектов на динамическую картину, что не имеет места принципиально в кинематическом случае. Показаны обусловленные этим явлением и рядом следствий из него уникальные диагностические возможности созданной интегральной диффузодинамической комбинации

ванной дифрактометрии (ИДДКД). В частности, показаны качественно новые возможности реализации впервые многопараметрической диагностики материалов и изделий нанотехнологий. При этом на основе построения теории созданы модели высокоинформативной ИДДКД для анализа скачков интенсивности вблизи K -края поглощения и отклонений от закона Фриделя, а также их деформационных и толщинных зависимостей. Проведена экспериментальная апробация созданных моделей.

В роботі викладено узагальнену динамічну теорію Брегґового та дифузного розсіянь Рентгенових променів у кристалах з дефектами декількох типів. Розглянуто вирази для диференційної та інтегральної інтенсивностей розсіяння, котрі пов'язують їх з характеристиками дефектів у кристалах, при дифракції як на відбиття, так і на проходження. Описано екстинкційні ефекти за рахунок розсіяння на дефектах без обмежень на їх розміри в когерентнім і дифузнім розсіяннях за малих і великих ефектів дифузної екстинкції для диференційного й інтегральних коефіцієнтів та факторів екстинкції за рахунок багатократності розсіяння на флюктуаційних відхиленнях від періодичності кристалічних ґратниць. На основі побудованої динамічної теорії, у її порівнянні з кінематичною, створено нову фізичну концепцію, яка дозволила розкрити та детально проаналізувати фізичну природу відкритих явищ, що обумовлюють, з одного боку, принципове обмеження інформативності кінематичної картини розсіяння, а з іншого боку, радикальне підвищення інформативності картини динамічного розсіяння. Показано, що це підвищення інформативності обумовлене відкритим явищем дуже істотної залежності від умов дифракції характеру впливу дефектів на динамічну картину, що принципово не має місця в кінематичному випадку. Показано унікальні діагностичні можливості створеної інтегральної дифузодинамічної комбінованої дифрактометрії (ИДДКД), що обумовлені цим явищем та рядом наслідків із нього. Зокрема, показано якісно нові можливості здійснення вперше багатопараметричної діагностики матеріалів та виробів нанотехнологій. При цьому на основі побудованої теорії створено моделі високоінформативної ИДДКД для аналізу стрибків інтенсивностей поблизу K -краю вбирання та відхилів від Фрідельового закону, а також їх деформаційних і товщинних залежностей. Виконано експериментальну апробацію створених моделей.

The generalized dynamical theory of Bragg and diffuse scatterings of x-rays in crystals with defects of several types is presented in a given article. Expressions for differential and integrated scattering intensities, which connect them with characteristics of defects in crystals, are considered in cases of Bragg and Laue geometries. Extinction effects due to scatterings on defects without limitation of their sizes are described in coherent and diffuse scatterings at small and large effects of diffuse extinction for differential and integrated coefficients of extinction due to multiple scattering on fluctuating deviations from the periodicity of crystal lattices. New physical conception is created and based on the built dynamical theory, at its comparison with kinematic one, that allowed to discover and analyse in detail the physical nature of discovered effects, which stipulate the principal limit of informativity of kinematic scattering, on the one hand, and the radical increasing of informativity in case of dynamical diffraction, on the other hand. As shown, this in-

crease of informativity is caused by discovered effect of significant dependence of the character of defects' influence to dynamical scattering on diffraction conditions that is absent in kinematic case. Unique diagnostic facilities of created integral diffuse-dynamical combined diffractometry (IDDCD) are shown. They are caused by this effect and by series of consequences from it. Particularly, qualitatively new possibilities of carrying out of multiparameter diagnostics of materials and products of nanotechnologies are shown. In addition, the models of high-informative IDDCD are created on the basis of developed theory for analysis of both the intensities' leap near K -edge of extinction and the deviations from Friedel low as well as their deformation and thickness dependences. The experimental test of developed models is carried out.

Ключевые слова: кристаллы с дефектами, когерентное и диффузное рассеяние, кинематическая и динамическая картины рассеяния, неразрушающая многопараметрическая диагностика.

(Получено 6 августа 2009 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из важнейших проблем цивилизации является расширение возможностей человеческого глаза, пределов человеческого зрения. Через этот канал человек получает более 80% информации. Именно продолжению решения этой проблемы посвящена настоящая работа.

Как известно, революционный прорыв в решении этой проблемы был обеспечен открытием в 1895 году рентгеновских лучей. Это впервые позволило человеку «видеть» структуру непрозрачных предметов, что, в частности, обеспечило существенный прогресс в медицине. Кроме того, это впервые позволило «увидеть» и изучить атомную структуру кристаллов методами созданной тогда (в начале XX века) классической кристаллографии [1], которая широко применяется и сегодня.

При этом следует отметить, что классическая кристаллография, существующая уже более ста лет и основанная на кинематической (приближение однократного рассеяния) [2, 3] или динамической (с учетом эффектов многократности рассеяния) [2, 4, 5] теориях дифракции в идеальных кристаллах (без дефектов), позволяет определять только параметры идеально периодической структуры решеток кристаллов. Но, как стало ясно в последнее время, комплекс необходимых физических свойств разрабатываемых новых материалов определяется не столько этой исходной идеальной структурой, сколько целенаправленно созданными современной нанотехнологией отклонениями от периодичности, а именно, дефектами и искусственной сверхструктурой, которые в этих теориях не учитываются, и поэтому не могут быть определены методами классической кристаллографии, т.е. остаются вне поля зрения человека.

Как известно, наличие случайных отклонений от периодичности структуры приводит к появлению диффузного рассеяния, которое несет всю информацию о характеристиках этих отклонений. Впервые кинематическая теория именно диффузного рассеяния нейтронов за счет тепловых колебаний атомов в идеальных кристаллах была построена А. И. Ахиезером еще в сороковые годы XX века [6]. В пятидесятые годы М. А. Кривоглаз обобщил эту теорию с помощью разработанного им метода флуктуационных волн на случай кинематического диффузного рассеяния в кристаллах с дефектами произвольного типа [7], а в шестидесятые годы один из авторов настоящей статьи обобщил эти результаты на случай динамической теории, т.е. впервые построил теорию многократного диффузного рассеяния [8–16].

Кинематическая теория М. А. Кривоглаза брэгговского и диффузного рассеяний в кристаллах с дефектами и проведенная им с помощью этой теории классификация дефектов по характеру их влияния на кинематическую картину рассеяния стали практически во всех структурных лабораториях мира теоретической основой для наблюдений и количественных исследований характеристик структуры дефектов и их распределения в кристаллах [7]. При этом кинематическая картина диффузного рассеяния оказалась прямым, однозначным Фурье-изображением структуры дефектов. Таким образом, М. А. Кривоглазом достигнута фантастическая возможность для глаза человека непосредственно «видеть» дефекты кристаллического строения, поля смещений атомов вокруг них.

Но приближение однократного рассеяния, которое положено в основу кинематической теории, привело к существенным ограничениям возможностей ее применения. Эта теория хорошо работает в поликристаллах и в сильно искаженных дефектами монокристаллах, но не может быть применима, когда размеры кристаллов и областей когерентности рассеяния превышают длину экстинкции и необходимо обязательно учитывать эффекты многократности рассеяния, т.е. необходима динамическая теория. Кроме того, кинематическая теория позволяет исследовать однозначно характеристики дефектов произвольного типа, но при условии присутствия в кристалле преимущественно дефектов только одного определяющего типа. Вклад от остальных типов дефектов не должен превышать точности измерений. Поскольку одна кинематическая картина — это одно уравнение при любых условиях дифракции, описывающее результаты экспериментальных измерений характера влияния дефектов на картину рассеяния, то из него однозначно можно определить неизвестные характеристики только одного эффективно определяющего типа дефектов. Поэтому, когда в кристалле присутствуют в достаточном количестве одновременно дефекты многих типов, возникает проблема неоднозначности диагностики многопара-

метрической системы по кинематической картине рассеяния. Это проблема невозможности отдельного «видения» и исследования каждого из определяющих типов дефектов отдельно.

В то же время большинство современных наносистем являются многопараметрическими, а монокристаллические изделия содержат одновременно дефекты многих типов.

Поэтому авторами на основе теории именно многократного диффузного рассеяния [8–22] создано диффузодинамическую комбинированную дифрактометрию (ДДКД) [23–28] — новое поколение неразрушающей высокоинформативной структурной диагностики, которое продемонстрировало принципиальные преимущества динамической картины рассеяния перед кинематической и впервые позволило решить проблему однозначной многопараметрической диагностики, и обеспечило возможность отдельного «видения» характеристик одновременно многих типов дефектов и особенно многих параметров наноструктур [26–28]. Но при этом возник вопрос о физической природе этих преимуществ, решение которого оказалось наиболее важным и интересным. Впервые явление уникальной информативности динамической картины рассеяния открыто и объяснено в работе [23], а в работе [24] более детально рассмотрена и обоснована физическая природа этого явления. При этом установлено, что открытое явление радикального повышения информативности диагностики при переходе от кинематической картины рассеяния к динамической обусловлено появлением в динамической теории принципиального различия в характерах зависимостей брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния от условий дифракции, а также существенной разницы в зависимостях от условий динамической дифракции удельных вкладов в картину рассеяния от дефектов различного типа. Но такое объяснение носило скорее математический характер и не раскрывало до конца физический аспект природы открытого явления. Поэтому в работе [52] создана новая концепция, которая дала более углубленные представления о физической природе открытого явления. При этом установлены физические факторы, обуславливающие как существенное ограничение информативности кинематической картины рассеяния, так и физическую природу радикального повышения информативности картины динамического рассеяния. Это позволило дать единую физическую интерпретацию всего круга явлений и эффектов, обуславливающих различную информативность динамической и кинематической картин рассеяния, а также разработать новые принципы неразрушающей высокоинформативной (многопараметрической и однозначной) диагностики на основе комбинированного подхода.

Поскольку успех высокоточной однозначной многопараметрической количественной диагностики при комбинированном подходе может быть обеспечен только при наличии теоретической модели,

адекватно описывающей экспериментальные измерения при всех возможных условиях динамической дифракции (геометрии Лауэ и Брэгга, предельные случаи тонкого и толстого кристаллов, спектральные, азимутальные, деформационные зависимости и др.), а также имеющей минимум упрощений и ограничений, которые уменьшают точность и надежность диагностики, то в настоящей работе анализ проводится на основе модели, максимально удовлетворяющей указанным требованиям.

2. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КИНЕМАТИЧЕСКОЙ И ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИЙ РАССЕЯНИЯ

2.1. Кинематическая картина рассеяния

На рисунке 1 приведена схема картины рассеяния в идеальном кристалле и для кристалла с дефектами (в верхнем правом углу экрана).

Следует отметить, что за этой картиной рассеяния стоит не менее шести нобелевских лауреатов, среди которых: Рентген, Макс Планк, Луи де-Бройль, фон-Лауэ, отец и сын Брэгги, однако не хватает Кривоглаза. Слишком рано Кривоглаз ушел из жизни. В мае сего года ему исполнилось бы 80, но уже прошло более 20 лет, как его не стало.

Наиболее ярко различия между кинематической и динамической теориями рассеяния видны на примере интегральных интенсивностей дифрагированного излучения. Кинематическая теория Криво-

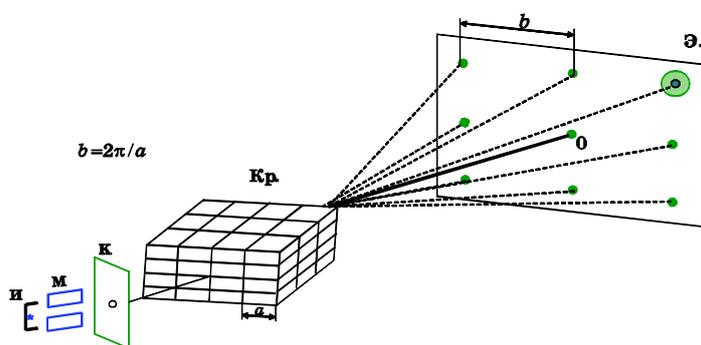


Рис. 1. Картины рассеяния в идеальном кристалле (жирные пятна на экране, размеры и форма которых определяются в кинематической теории только размерами и формой образца) и в кристалле с дефектами (в правом верхнем углу, жирная точка соответствует распределению в обратном пространстве брэгговской компоненты дифрагированной интенсивности, а более светлое пятно вокруг нее — распределению диффузной составляющей). И — источник, М — монохроматор, К — коллиматор, Кр. — кристалл, Э. — экран.

глаза дает следующие результаты для полной интегральной интенсивности (ПИИ) кристалла с дефектами (R_i) [7, 16]:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD}, \quad (1)$$

$$R_{iB} = R_{ip} e^{-2L}, \quad (2)$$

$$R_{iD} = R_{ip} (1 - e^{-2L}), \quad (3)$$

$$R_{ip} = 2CQt/\gamma_0, \quad (4)$$

$$Q = (\pi|\chi_{Hr}|)^2/[\lambda \sin(2\theta_B)], \quad (5)$$

где R_{ip} — интегральная интенсивность рассеяния в идеальных кристаллах (без дефектов), χ_{Hr} — вещественная часть Фурье-компоненты поляризуемости кристалла, θ_B — угол Брэгга, λ — длина волны используемого излучения, t — толщина кристалла, C — поляризационный множитель. Здесь следует особо подчеркнуть, что в выражениях (2) и (3) для брэгговской (R_{iB}) и диффузной (R_{iD}) составляющих ПИИ, зависящим от условий дифракции является только множитель R_{ip} , который в силу своей природы не зависит от структуры дефектов в кристалле. При этом от характеристик структуры дефектов кристаллической решетки зависят лишь множители, в которые входит статический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера ($E = e^{-L}$), определяемый независимо от условий дифракции для каждого рефлекса.

Следующим важным обстоятельством оказывается то, что интегральная интенсивность рассеяния в кристаллах с дефектами характеризуется двумя интегральными параметрами, которые целесообразно ввести следующим образом. Первый параметр — это общая яркость картины (размытого Лауэ-пятна, изображенного в правом верхнем углу на рис. 1), то есть полная интегральная интенсивность отражения R_i , равная сумме брэгговской и диффузной составляющих (1). Для удобства дальнейшего рассмотрения этот параметр целесообразно нормировать на общую яркость картины в идеальном кристалле (R_{ip}). Второй параметр — это удельный вклад диффузной составляющей или соотношение диффузной и брэгговской составляющих (R_{iD}/R_{iB}). Из выражений (1)–(3) следует, что в кинематической теории неидеальных кристаллов

$$R_i = R_{ip} \text{ или } R_i / R_{ip} = 1, \quad (6)$$

$$R_{iD} / R_{iB} = (1 - e^{-2L}) / e^{-2L} \approx 2L, \quad (7)$$

т.е. для каждого выбранного отражения полная интегральная ин-

тенсивность не зависит от степени искаженности кристаллической решетки, а единственным структурно-чувствительным фактором является второй параметр (R_{iD}/R_{iB}), не зависящий от условий дифракции.

Из выражений (6) и (7) для этих двух параметров вытекают два соответствующих закона сохранения кинематической теории. Первый закон сохранения отражает независимость полной интегральной интенсивности R_i (первого параметра) от характеристик структуры дефектов кристалла, т.е. в кинематике R_i для кристалла с дефектами остается таким же, как в идеальном кристалле (R_{iD}), и, следовательно, зависит только от условий дифракции. Однако нормализация этого параметра на R_{iD} приводит к потере его зависимости и от условий дифракции и делает его универсальной константой, равной единице в кинематической теории, т.е. полностью неинформативным. Второй закон сохранения кинематической теории указывает на независимость для каждого рефлекса относительного вклада диффузной составляющей (второго параметра) от условий дифракции. Таким образом, в кинематическом случае существует только этот единственный для любых условий дифракции структурно-чувствительный параметр.

2.2. Обобщенная динамическая теория рассеяния в кристаллах с дефектами нескольких типов

2.2.1. Дифференциальные отражательные способности

2.2.1.1. Общие выражения

В рамках динамической теории рассеяния неидеальными кристаллами [22, 38–40] необходимо учитывать многократность отражения, как на периодической, так и на флуктуационной частях восприимчивости кристалла. При этом присутствие дефектов в кристалле влияет не только на когерентную компоненту, но, как и в случае кинематической дифракции в неидеальных кристаллах, является причиной возникновения диффузного рассеяния. Диффузное рассеяние, сформированное при рассеянии волн на искажениях кристаллической решетки, вызванных дефектами, является наиболее чувствительным к дефектной структуре монокристалла. Характер распределения и особенности рассеяния диффузных волн сильно зависят от характеристик того типа дефекта, в результате рассеяния на полях смещения от которого они образовались. В случае дефектов небольших размеров можно ограничиться при рассмотрении интегральных выражений кинематическим, одноволновым приближением в диффузной компоненте рассеяния, когда процессы перерассеяния диффузных волн на периодической части

потенциала рассеяния не существенны из-за того, что ширина углового распределения таких волн намного больше ширины когерентного пика. При этом направления их распространения для подавляющего большинства диффузных волн существенно отличаются от условия Вульфа–Брэгга, и, следовательно, такие волны не принимают участия в динамической дифракции на периодической части потенциала рассеяния. Однако, когда в кристалле присутствуют дефекты больших размеров (соизмеримых или превышающих длину экстинкции), направления распространения таких волн не сильно отличаются от направления, соответствующего точному выполнению условия Вульфа–Брэгга, и, следовательно, такие диффузные волны попадают преимущественно в существенно динамическую область, поэтому для них должны быть существенными динамические эффекты, даже при рассмотрении интегральных вкладов от них.

Согласно вышесказанному, в самом общем случае, выражение для полной дифференциальной отражательной способности кристалла имеет вид

$$R(\Delta\theta, \Delta\theta') = R_C(\Delta\theta, \Delta\theta') + R_D(\Delta\theta, \Delta\theta'),$$

где $R_C(\Delta\theta, \Delta\theta')$ и $R_D(\Delta\theta, \Delta\theta')$ — соответственно когерентная и диффузная компоненты дифференциальной отражательной способности, параметры $\Delta\theta$ и $\Delta\theta'$ являются соответственно отклонением падающего луча от точного условия Вульфа–Брэгга и отклонением дифрагированного луча от узла обратной решетки.

С целью нахождения в рамках динамического рассмотрения выражений для когерентной и диффузной составляющих дифференциальной отражательной способности необходимо сначала определить исходные выражения для амплитуд брэгговского и диффузного волновых полей индукции в кристалле, которые создаются при падении из вакуума на кристалл плоской гармонической волны $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r} + it\omega/c}$ (\mathbf{r} — пространственная координата, t — время, ω и c — соответственно частота и скорость света, \mathbf{E}_0 — амплитуда падающей волны). Такие амплитуды можно найти, решая волновое уравнение

$$\Delta\mathbf{D}(\mathbf{r}) + K^2\mathbf{D}(\mathbf{r}) + \text{rot rot}(\chi(\mathbf{r})\mathbf{D}(\mathbf{r})) = 0, \quad (8)$$

которое можно получить из системы уравнений Максвелла. Здесь $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ — индукция волны, $K = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны излучения, $\chi(\mathbf{r})$ — восприимчивость кристалла, умноженная на 4π .

В отличие от идеального кристалла, где восприимчивость есть периодической функцией пространственной координаты и ее можно разложить в ряд Фурье, в кристалле с дефектами $\chi(\mathbf{r})$ не будет

периодической, и вместо ряда Фурье, ее можно представить в виде интеграла Фурье:

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \chi_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \approx \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} e^{-i(\mathbf{G}+\mathbf{q})\mathbf{r}}, \quad (9)$$

где \mathbf{G} — вектор обратной решетки, умноженный на 2π , \mathbf{q} — переданный импульс за счет рассеяния на искажениях, вызванных дефектами.

Представляя аналогично восприимчивости индукцию волны $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ в виде интеграла Фурье:

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \frac{V_c}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q} \mathbf{D}_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \approx \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{D}_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} e^{-i(\mathbf{G}+\mathbf{q})\mathbf{r}} \quad (10)$$

и подставляя (9) и (10) в (8), для амплитуд волн получим следующую бесконечную систему уравнений [30]:

$$(K^2 - k^2)\mathbf{D}_k - \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} \mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \mathbf{D}_{\mathbf{k}-\mathbf{G}-\mathbf{q}} = 0. \quad (11)$$

Переходя к важному с точки зрения практического применения двухволновому случаю динамической дифракции, в рамках развитой в [11, 12, 16] теории возмущений получим две связанные системы уравнений: одну для сильных брэгговских волн с волновыми векторами \mathbf{K}_0 и $\mathbf{K}_H = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ (\mathbf{H} — вектор обратной решетки) —

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0)D_0 + CE\chi_{-\mathbf{H}}D_H = -\sum_{\mathbf{q}} (\delta\chi_{\mathbf{q}}D_{-\mathbf{q}} + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}}D_{\mathbf{H}-\mathbf{q}}), \quad (12)$$

$$CE\chi_{\mathbf{H}}D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0)D_H = -\sum_{\mathbf{q}} (C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}D_{-\mathbf{q}} + \delta\chi_{\mathbf{q}}D_{\mathbf{H}-\mathbf{q}}),$$

и другую для диффузных волн с волновыми векторами $\mathbf{K}_{0\mathbf{q}}$ и $\mathbf{K}_{H\mathbf{q}}$ —

$$(-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0)D_{\mathbf{q}} + CE\chi_{-\mathbf{H}}D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = -(\delta\chi_{\mathbf{q}}D_0 + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}}D_{\mathbf{H}}), \quad (13)$$

$$CE\chi_{\mathbf{H}}D_{\mathbf{q}} + (-2\varepsilon_{H\mathbf{q}} + \chi_0)D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = -(C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}D_0 + \delta\chi_{\mathbf{q}}D_{\mathbf{H}}),$$

где ошибки возбуждения определены как

$$\varepsilon_0 = \frac{K_0 - K}{K} \approx \frac{K_0^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_H = \frac{K_H - K}{K} \approx \frac{K_H^2 - K^2}{2K^2},$$

$$\varepsilon_{0\mathbf{q}} = \frac{K_{0\mathbf{q}} - K}{K} \approx \frac{K_{0\mathbf{q}}^2 - K^2}{2K^2}, \quad \varepsilon_{H\mathbf{q}} = \frac{K_{H\mathbf{q}} - K}{K} \approx \frac{K_{H\mathbf{q}}^2 - K^2}{2K^2},$$

а флуктуационная часть Фурье-компоненты восприимчивости кристалла задается выражением:

$$\delta\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} = \chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} - \chi_{\mathbf{G}} e^{-L_{\mathbf{G}}} \delta_{0,\mathbf{q}}, \quad (14)$$

где

$$\delta_{0,\mathbf{q}} = \begin{cases} 1, & \text{при } \mathbf{q} = \mathbf{0} \\ 0, & \text{при } \mathbf{q} \neq \mathbf{0} \end{cases}$$

$E = e^{-L_{\mathbf{n}}}$ — статический фактор Дебая–Валлера, $\chi_0, \chi_{\pm\mathbf{H}}$ — Фурье-компоненты восприимчивости кристалла, C — поляризационный множитель ($C = 1$ для σ -поляризации, $C = \cos 2\theta_{\text{В}}$ для π -поляризации, где $\theta_{\text{В}}$ — угол Брэгга). Выражение (14), определяющее Фурье-компоненту восприимчивости кристалла с дефектами $\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}$, которая рассматривается как сумма Фурье-компонент средней восприимчивости $\chi_{\mathbf{G}} e^{-L_{\mathbf{G}}} \delta_{0,\mathbf{q}}$ и флуктуационной части восприимчивости $\delta\chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}}$, позволяет при решении неоднородных систем (12) и (13) воспользоваться методом модифицированной теории возмущений [11, 12]. Подставляя решения системы уравнений (6) в (12) и используя метод модифицированной теории возмущений, получим следующую основную систему уравнений для сильных брэгговских волн:

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00})D_0 + (CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi_{0\mathbf{H}})D_{\mathbf{H}} = 0, \quad (15)$$

$$(CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi_{\mathbf{H}0})D_0 + (-2\varepsilon_{\mathbf{H}} + \chi_0 + \Delta\chi_{\mathbf{H}\mathbf{H}})D_{\mathbf{H}} = 0,$$

где дисперсионные поправки к восприимчивости, которые обусловлены дефектами, определяются выражениями [17]:

$$\Delta\chi_{00} = -\sum_{\mathbf{q}} (-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0) V_{00}(\mathbf{q}) / d(\mathbf{q}),$$

$$\Delta\chi_{\mathbf{H}\mathbf{H}} = -\sum_{\mathbf{q}} (-2\varepsilon_{\mathbf{H}\mathbf{q}} + \chi_0) V_{\mathbf{H}\mathbf{H}}(\mathbf{q}) / d(\mathbf{q}), \quad (16)$$

$$\Delta\chi_{0\mathbf{H}} = C \sum_{\mathbf{q}} \chi_{-\mathbf{H}} V_{0\mathbf{H}}(\mathbf{q}) / d(\mathbf{q}),$$

$$\Delta\chi_{\mathbf{H}0} = C \sum_{\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{H}} V_{\mathbf{H}0}(\mathbf{q}) / d(\mathbf{q}),$$

$$d(\mathbf{q}) = (-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0)(-2\varepsilon_{\mathbf{H}\mathbf{q}} + \chi_0) - C^2 E^2 \chi_{\mathbf{H}} \chi_{-\mathbf{H}} = 0. \quad (17)$$

В обобщенном виде для (16) будем иметь:

$$\Delta\chi_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \sum_{\mathbf{q}} \tilde{f}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{q}) V_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{q}) / d(\mathbf{q}), \quad (18)$$

где

$$\tilde{f}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{q}) = \begin{cases} (-2\varepsilon_{\mathbf{G}\mathbf{q}} + \chi_0) & \text{при } \mathbf{G} = \mathbf{G}', \\ E\chi_{\mathbf{H}-2\mathbf{G}'} & \text{при } \mathbf{G} \neq \mathbf{G}', \end{cases}$$

$$V_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{q}) = C^2 \delta\chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{H}+2\mathbf{G}} \delta\chi_{\mathbf{q}+\mathbf{H}-2\mathbf{G}},$$

где $\delta\chi_{-\mathbf{q}-\mathbf{H}+2\mathbf{G}}$, $\delta\chi_{\mathbf{q}+\mathbf{H}-2\mathbf{G}}$ — Фурье-компоненты флуктуационной части поляризуемости.

Для дисперсионных поправок (18) справедливы [17] выражения:

$$\Delta\chi_{00} \approx \Delta\chi_{\mathbf{H}\mathbf{H}} \sim \frac{\mu_{\text{ds}}}{K},$$

где μ_{ds} — коэффициент экстинкции из-за диффузного рассеяния (см. ниже п. 3), а $\Delta\chi_{\mathbf{H}0} \approx \Delta\chi_{0\mathbf{H}} \approx 0$.

2.2.1.2. Геометрия Брэгга

Решая систему уравнений (15) с использованием граничных условий для плоскопараллельной кристаллической пластинки в случае брэгг-дифракции:

$$D_{\text{T}}(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_0^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_0^{\delta} \mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} \Big|_{z=0}, \quad D_{\text{S}}(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_{\text{H}}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{\text{H}}^{\delta} \mathbf{r}} = 0 \Big|_{z=t},$$

$$D_{\text{S}}(\mathbf{r}) = E_{\text{S}}(\mathbf{r}) \Big|_{z=0}, \quad \mathbf{K}_0^{\delta} = \mathbf{K} + K\Delta_{\delta}\mathbf{n}, \quad \mathbf{K}_{\text{H}}^{\delta} = \mathbf{K}_0^{\delta} + \mathbf{H}.$$

Здесь $E_{\text{S}}(\mathbf{r}) = E_{\text{H}}^a e^{-i\mathbf{K}_{\text{H}}^a \mathbf{r}}$ — амплитуда дифрагированной волны в вакууме, $\mathbf{K}_{\text{H}}^a = \mathbf{K}_0^{\delta} - K\Delta_{\delta}\mathbf{n}$, t — толщина кристалла, получим следующие выражения для амплитуд проходящей и отраженной когерентных волн:

$$D_0^{\delta} = (-1)^{\delta} E_0 \frac{B_1 B_2}{B_{\delta} (B_1 - B_2)}, \quad D_{\text{H}}^{\delta} = c^{(\delta)} D_0^{\delta}, \quad (19)$$

где $B_{\delta} = c^{(\delta)} e^{-iK\Delta_{\delta} t}$, $c^{(\delta)} = -\frac{2\gamma_0 \Delta_{\delta} + \chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}}{CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi_{0\mathbf{H}}^{\delta}}$,

$$\Delta_{\delta} = \frac{1}{2\gamma_0} (\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}) - \frac{\lambda}{2\Lambda} \left[y - (-1)^{\delta} \sqrt{y^2 - 1} \right], \quad y = -(\alpha - \alpha_0) \sqrt{b} / \sigma,$$

$$2\alpha_0 = \chi_0 + \Delta\chi_{\mathbf{H}\mathbf{H}}^{\delta} + (\chi_0 + \Delta\chi_{00}^{\delta}) / b, \quad b = \gamma_0 / |\gamma_{\mathbf{H}}|,$$

$\sigma^2 = (CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi_{\mathbf{H}0}^{\delta})(CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi_{0\mathbf{H}}^{\delta})$, $\Lambda = \lambda |\gamma_{\mathbf{H}}| \sqrt{b} / \sigma$ — длина экстинкции,

$\delta = 1, 2$, γ_0 и γ_H — направляющие косинусы падающей и дифрагированной волн соответственно, $\alpha = -\Delta\theta \sin 2\theta_B$.

Решения для амплитуд (19) показывают, что при падении из вакуума плоской волны в кристалле образуется два сильных динамических волновых поля с амплитудами D_0^1 и D_0^2 , которые представляют слабо и сильно поглощающиеся волны. Такая ситуация возникает из-за того, что максимумы сильно поглощающихся стоячих волн попадают на атомные плоскости, и их поглощение, которое пропорционально восприимчивости в среде, становится значительным, тогда как максимумы амплитуды второго волнового поля попадают в межплоскостное пространство, и поглощение таких волн значительно слабее.

Таким образом, для когерентной компоненты отражательной способности в геометрии дифракции по Брэггу получим [17]:

$$R_{\text{coh}}(\Delta\theta) = \frac{\text{ch}x_r - \cos x_i}{L_+ \text{ch}x_r + \sqrt{L_+^2 - 1} \text{sh}x_r - L_- \cos x_i + \sqrt{1 - L_-^2} \sin x_i}, \quad (20)$$

$$L_{\pm} = \frac{z^2 + g^2 \pm \left[(z^2 - g^2 + \kappa^2 - 1)^2 + 4(zg - p^2) \right]^{1/2}}{\left[(1 - \kappa^2)^2 + 4p^2 \right]^{1/2}},$$

$$x_r = \frac{t}{\Lambda_B} (1 - \kappa^2)^{1/2} \left[\left(\sqrt{a^2 + b^2} - a \right) / 2 \right]^{1/2},$$

$$x_i = \frac{t}{\Lambda_B} (1 - \kappa^2)^{1/2} \left[\left(\sqrt{a^2 + b^2} + a \right) / 2 \right]^{1/2}, \quad a = \frac{z^2}{1 - \kappa^2} - g^2 - 1,$$

$$b = \frac{2gz}{(1 - \kappa^2)^{1/2}} - \frac{2p}{(1 - \kappa^2)}, \quad \Lambda_B = \frac{\lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_H|}}{2\pi C |\chi_{Hr}|},$$

$$g = - \frac{(|\chi_{0i}| + \mu_{ds}(\Delta\theta) / K) (1 + |\gamma_H| / \gamma_0)}{2C |\chi_{Hr}| \sqrt{|\gamma_H| / \gamma_0}}, \quad \kappa = \left| \frac{\chi_{Hi}}{\chi_{Hr}} \right|,$$

$$z = - \frac{2\Delta\theta \sin 2\theta_B + |\chi_{0r}| (1 + |\gamma_H| / \gamma_0)}{2C |\chi_{Hr}| \sqrt{|\gamma_H| / \gamma_0}},$$

где χ_{Hr} и χ_{Hi} — действительная и мнимая части Фурье-компоненты восприимчивости χ_H , χ_{0r} и χ_{0i} — действительная и мнимая части Фурье-компоненты восприимчивости χ_0 .

Нетрудно проследить, что при выполнении условия толстого кристалла, когда $\mu_0 t \gg 1$ (μ_0 — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения) выполняется условие $x_r \gg 1$, что по-

зволяет упростить (20). Тогда для когерентной компоненты дифференциальной отражательной способности при дифракции по Брэггу получим:

$$R_{\text{coh}}(\Delta\theta) = L_+ - \sqrt{L_+^2 - 1}. \quad (21)$$

Диффузно рассеянные волны создаются из-за рассеяния сильных брэгговских волн на флуктуационных полях статических смещений атомов кристалла, которые вызваны хаотически распределенными микродефектами, и тоже формируют в кристалле динамическое волновое поле. В двухволновом случае амплитуды диффузно рассеянных проходящей и дифрагированной плоских волн соответственно D_q и $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$, которые образуют диффузные блоховские волны, удовлетворяют системе неоднородных уравнений (13). Эти уравнения описывают процессы многократного перерассеяния диффузных волн D_q и $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$ на периодической части кристаллического потенциала, а также процессы однократного рассеяния из сильных брэгговских волн с амплитудами D_0 и $D_{\mathbf{H}}$ в диффузные волны с амплитудами D_q и $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$. Для учета процессов двукратного рассеяния на отклонениях от периодичности кристаллического потенциала в диффузных волнах следует сохранить в правой части уравнений (6) все амплитуды $\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}, \mathbf{q} + \mathbf{H}$. Затем эти амплитуды можно выразить через $D_0, D_{\mathbf{H}}, D_q, D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$ с использованием уравнений (11) и подставить в уравнения (13). После этого первого итерационного шага коэффициенты при D_q и $D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$ в уравнениях (13) получают поправки $\Delta\chi'_{GG'}$, которые полностью совпадают по форме с дисперсионными поправками к волновым векторам сильных брэгговских волн $\Delta\chi_{GG'}$ (18), но зависят от углов выхода $\Delta\theta'$:

$$\begin{aligned} (-2\varepsilon_{0q} + \chi_0 + \Delta\chi'_{00})D_q + (CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi'_{0\mathbf{H}})D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = \\ = -(\delta\chi_q D_0 + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}), \end{aligned} \quad (22)$$

$$(CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi'_{\mathbf{H}0})D_q + (-2\varepsilon_{\mathbf{H}q} + \chi_0 + \Delta\chi'_{\mathbf{H}\mathbf{H}})D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = -(C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_0 + \delta\chi_q D_{\mathbf{H}}),$$

где ε_{0q} и $\varepsilon_{\mathbf{H}q}$ — ошибки возбуждения диффузно рассеянных волн и $\Delta\chi'_{GG'}$ — дисперсионные поправки, учитывающие процессы двукратного диффузного рассеяния. Поправки к коэффициентам при амплитудах D_0 и $D_{\mathbf{H}}$ в правой части системы уравнений (22), которые также возникают при выполнении указанного итерационного шага и описывают перерассеяние диффузных волн обратно в сильные брэгговские, пренебрегаются как малые величины более высокого порядка [11, 12, 16, 17].

Налагая граничные условия на амплитуды диффузных волн для случая дифракции по Брэггу и преобразуя полученные амплитуды

плоских волн на поверхности кристалла в амплитуду диффузного рассеяния в телесный угол в направлении K' , получим следующее выражение для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности кристаллической пластинки [17]:

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) = F_{\text{dyn}}\mu_{00}(\Delta\theta)t / \gamma_0,$$

$$\mu_{00}(\Delta\theta) = \mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)p(\mu_i t), \quad F_{\text{dyn}} = 1 + |\zeta'|bR_{\text{coh}} + 2 \operatorname{Re}(\zeta'c^{(\delta)}),$$

$$p(\mu_i t) = \frac{1 - e^{-2\mu_i t}}{2\mu_i t}, \quad \zeta' = \frac{|CE\chi_{\text{H}} + \Delta\chi'_{0\text{H}}|}{|CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi'_{\text{H}0}|},$$

где μ_i — интерференционный коэффициент поглощения.

2.2.1.3. Геометрия Лауэ

Для определения дифференциальной отражательной способности в геометрии дифракции по Лауэ, используем соответствующие для этого случая граничные условия для амплитуд проходящей $D_{\text{T}}(\mathbf{r})$ и дифрагированной $D_{\text{S}}(\mathbf{r})$ волн:

$$D_{\text{T}}(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_0^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{\delta}^{\delta} \mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} \Big|_{z=0}, \quad (23)$$

$$D_{\text{S}}(\mathbf{r}) = \sum_{\delta} D_{\text{H}}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{\text{H}}^{\delta} \mathbf{r}} = 0 \Big|_{z=0}, \quad D_{\text{S}}(\mathbf{r}) = E_{\text{S}}(\mathbf{r}) \Big|_{z=t}.$$

Таким образом, решая (15) вместе с (23), получим следующие выражения для амплитуд сильных брэгговских волн в кристалле в геометрии дифракции по Лауэ [15] (здесь следует учесть, что в случае лауэ-дифракции $\gamma_{\text{H}} = |\gamma_{\text{H}}|$, в отличие от случая дифракции по Брэггу, где $\gamma_{\text{H}} = -|\gamma_{\text{H}}|$):

$$D_0^{\delta} = (-1)^{\delta} \frac{A_{\delta'}}{A_1 - A_2} E_0, \quad D_{\text{H}}^{\delta} = D_0^{\delta} A_{\delta}, \quad A_{\delta} = \frac{-2\varepsilon_0^{\delta} + \chi_0 + \chi_{00}^{\delta}}{CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi_{0\text{H}}^{\delta}},$$

$$\varepsilon_0^{\delta} = \frac{1}{2} \left(-\alpha + \chi_{0r} - (-1)^{\delta} \sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{\text{Hr}}^2 - \chi_{\text{Hi}}^2)} \right) +$$

$$+ i \frac{1}{2} \left(\chi_{0i} - (-1)^{\delta} \frac{C^2 E^2 \chi_{\text{Hr}} \chi_{\text{Hi}}}{\sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{\text{Hr}}^2 - \chi_{\text{Hi}}^2)}} \right).$$

Для когерентной компоненты дифференциальной отражательной способности в геометрии Лауэ будем иметь следующее выражение:

$$R(y) = \frac{|E_H^a|^2}{|E_0|^2} = \frac{1}{|E_0|^2} \left| \sum_{\delta} D_H^{\delta} e^{-iK\Delta_{\delta}t} \right|^2 =$$

$$= \frac{e^{-(\mu_0 + \mu_{ds}(y))l}}{2(1+y^2)} \left(\operatorname{ch} \frac{\xi C(\mu_0 + \mu_{ds})l}{\sqrt{1+y^2}} - \cos 2A\sqrt{1+y^2} \right), \quad (24)$$

где $y = \frac{\Delta\theta \sin 2\theta_B}{CE|\chi_{\text{Hr}}|}$, $A = \frac{\pi C|\chi_{\text{Hr}}|l}{\lambda}$, $\xi = \frac{\chi_{\text{IH}}}{\chi_{\text{i0}}}$, $l = \frac{t}{\gamma_0}$.

Учитывая, что второе слагаемое в (24) при выполнении условия толстого кристалла $\mu_0 l \gg 1$ ($\mu_0 = K\chi_{\text{i0}}$ — коэффициент фотоэлектрического поглощения) сильно осциллирует, а также то, что при разложении функции $\operatorname{ch}(x)$ на экспоненты слагаемое с отрицательной степенью будет пренебрежимо мало, для $R(y)$ в приближении полубесконечного кристалла получим более простое выражение:

$$R(y) = R_p(y) e^{-\mu_{ds}(y)l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right)}, \quad (25)$$

где $R_p(y) = \left(\frac{1}{4(1+y^2)} \right) e^{-\mu_0 l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right)}$ — когерентная компонента дифференциальной отражательной способности идеального динамически рассеивающего кристалла при дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла.

Решая систему уравнений для амплитуд диффузно рассеянных волн с граничными условиями, соответствующими геометрии дифракции по Лауэ, для диффузной компоненты дифференциальной отражательной способности в приближении толстого кристалла получим следующее выражение [16]:

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) = \frac{1}{K^2} \int dS_K R_D(\mathbf{k}), \quad (26)$$

$$R_D(\mathbf{k}) = P_0 \frac{C^2 E^2 K^2 \chi_{\text{Hr}}^2}{|\Delta_1 - \Delta_2|^2 |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2} \sum_{\delta, \tau} |\Delta'_\tau - \Delta_{\delta}|^2 |2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2 |\mathbf{H}^0 \mathbf{u}_q|^2 \Pi_{\delta\tau}, \quad (27)$$

$$\Pi_{\delta\tau} = \frac{e^{2Kt \operatorname{Im} \Delta_{\delta}} - e^{2Kt \operatorname{Im} \Delta'_{\tau}}}{2Kt \operatorname{Im}(\Delta_{\delta} - \Delta'_{\tau})},$$

$$\Delta_{\delta} = \frac{\xi_0^{\delta}}{\gamma_0} = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-\alpha + \chi_0 - (-1)^{\delta} \sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 \chi_{\text{H}} \chi_{\text{-H}}} \right),$$

$$\Delta'_\tau = \frac{\varepsilon_{0\mathbf{q}}^\tau}{\gamma_0} = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-\alpha' + \chi_0 - (-1)^\tau \sqrt{\alpha'^2 + C^2 E^2 \chi_{\text{H}} \chi_{-\text{H}}} \right),$$

где $\alpha' = \Delta\theta' \sin 2\theta_{\text{B}}$, $\mathbf{u}_{\mathbf{q}}$ — компонента Фурье поля смещений от одиночного дефекта.

В приближении тонкого кристалла в геометрии Лауэ диффузная компонента дифференциальной отражательной способности имеет вид:

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) = \frac{C^2}{P} (1 - E^2) Q l e^{-\mu_0 l} \mu_{\text{ds}}(\Delta\theta) e^{-\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta) l}, \quad (28)$$

где $P = \int \mu_{\text{ds}}(\Delta\theta) d\theta$, $Q = \frac{(\pi |\chi_{\text{Hr}}|)^2}{\lambda \sin(2\theta_{\text{B}})}$.

2.2.2. Коэффициент экстинкции

Когда в динамически рассеивающем кристалле присутствуют дефекты, искажающие решетку, то кроме статического фактора Дебая–Валлера появляется еще один структурно чувствительный параметр $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$, впервые введенный в [8] и, независимо, в [31] (в этой работе выражение для $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ получено при условии $\Delta\theta = 0$, где $\Delta\theta$ — угловое отклонение от точного условия Вульфа–Брэгга). Параметр $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ описывает эффективное поглощение или экстинкцию когерентных волн из-за их рассеяния на дефектах и ухода в диффузные волны, которые, в свою очередь также рассеиваются динамически. В работах [8, 31] выражение для μ_{ds} имеет вид

$$\begin{aligned} \mu_{\text{ds}}(k_0) &= cC^2 E^2 m_0 J(k_0), \\ J(k_0) &= \pi^{-1} \int dS_{K'} F(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (29)$$

где интегрирование в (29) проводится по сфере Эвальда вблизи узла обратной решетки,

$$F(\mathbf{q}) = |\nu_{\mathbf{q}}|^2, \quad \nu_{\mathbf{q}} = \mathbf{H}\mathbf{u}_{\mathbf{q}}, \quad m_0 = 2\pi\nu_c \left(\frac{H |\chi_{\text{Hr}}|}{2\lambda} \right)^2,$$

λ — длина волны излучения, K' — волновой вектор диффузно рассеянной плоской волны.

В случае сферически симметричных кластеров поле смещения атомов решетки дается выражением:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = A \mathbf{r}/r^3$$

и, таким образом, $u(\mathbf{r}) = A \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{r})}{r^3}$. Для Фурье-компоненты имеем:

$$u_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi i A}{v_c} \frac{(\mathbf{H} \cdot \mathbf{q})}{q^2}.$$

Поскольку $q \ll K$, то в (29) удобно перейти от интегрирования по сфере к интегрированию по плоскости Π , аппроксимирующей сферу Эвальда вблизи узла обратной решетки H (рис. 2). Переходя в этой плоскости к полярным координатам $\mathbf{k} = (k \cos \varphi, k \sin \varphi, k_0)$, подставляя в (29) $dS_K = k dk d\varphi$, $\mathbf{H} \cdot \mathbf{q} = Hq \cos \varphi \cos \theta_B$, где θ_B — угол Вульфа–Брэгга, для μ_{ds} в соответствии с [8–10] получим:

$$\mu_{ds} = c(C|\chi_H|)^2 \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{2v_c \lambda^2} \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}; \quad (30)$$

v_c — объем элементарной ячейки кристалла, c — концентрация дефектов. Поскольку для хаотически ориентированных дислокационных петель [31]

$$\langle |u_{\mathbf{q}}|^2 \rangle = \left(\frac{\pi R_0^2 b H}{v_c} \right)^2 \frac{B_1 + B_2 (\mathbf{H}^0 \cdot \mathbf{q}^0)^2}{q^2},$$

$\mathbf{H}^0 = \mathbf{H}/H$, то можно получить для них:

$$\mu_{ds} = c(C|\chi_H|)^2 \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{v_c \lambda^2} \left(B_1 + \frac{B_2}{2} \cos^2 \theta_B \right) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2}, \quad (31)$$

где $q_m = 2\pi/R_{\text{eff}}$ — граница раздела между областями диффузного рассеяния Хуаня и Стокса–Вильсона, $q_c = 2\pi/\Lambda_\sigma$ — параметр обрезания со стороны малых q , $\Lambda_\sigma = \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_H} |\chi_{H\Gamma}|^{-1}$ — экстинкционная длина, для хаотически ориентированных дислокационных петель $B_1 = (4/15)(\pi b R_L^2 / v_c)^2$, $B_2 = \beta B_1$, $\beta = (1/4)(3\nu + 6\nu - 1)(1 - \nu)^{-2}$, b — модуль вектора Бюргера петли, R_L — радиус петли, ν — коэффициент Пуассона,

$$R_{\text{eff}} = \begin{cases} R_L \sqrt{Hb} E & \text{для дислокационных петель,} \\ \sqrt{HA_{cl}} E & \text{для кластеров,} \end{cases}$$

$A_{cl} = \Gamma \varepsilon R_p^3$, $\Gamma = (1/3)(1 + \nu)(1 - \nu)^{-1}$, ε — деформация на границе кластера, R_p — радиус кластера.

Выражение (30) получено Дедериксом с целью описания интегральных брэгговских интенсивностей в предположении при ин-

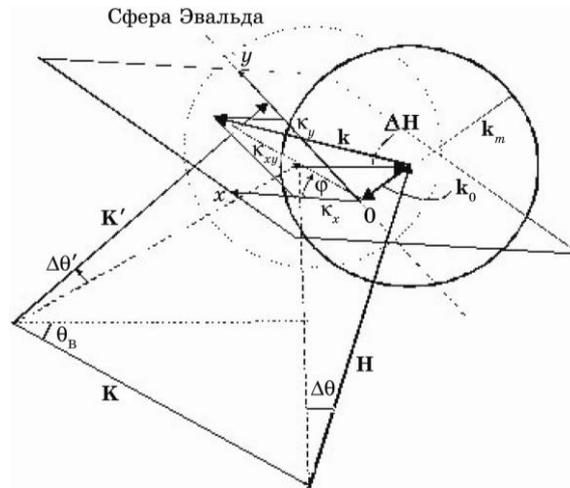


Рис. 2. Схема волновых векторов в геометрии Брэгга.

тегрировании, что $\mu_{ds}(\Delta\theta) \approx \mu_{ds}(0)$, т.е. равно всегда значению, справедливому, когда направление падающего луча K соответствует точно условию Вульфа–Брэгга.

Но в связи с широким применением метода кривых качания для диагностики реальных кристаллов и для учета динамических эффектов в диффузной компоненте отражательной способности более важным является выражение для μ_{ds} , полученное в [16, 17, 31], где оно явно зависит от отклонения $\Delta\theta$ направления падающего луча от точного Брэгговского условия. В результате такого отклонения узел обратной решетки H не попадает точно на сферу Эвальда, а отклоняется от нее на величину q_0 (рис. 2). В этом случае удобно перейти к цилиндрической системе координат $\mathbf{q} = (\kappa \cos \varphi, \kappa \sin \varphi, q_0)$, где $\kappa = \sqrt{q^2 - q_0^2}$, $dS_{K'} = \kappa d\kappa d\varphi$, $\mathbf{H}_0 = (\cos \theta_B, 0, \sin \theta_B)$, и тогда для (22) получается:

$$\mu_{ds}(q_0) = \frac{4\pi^3 A^2 H^2}{v_c \lambda^2} \times \begin{cases} \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m}{q_c} + (\sin^2 \theta_B - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B) q_0^2 \left(\frac{1}{q_c^2} - \frac{1}{q_m^2} \right), & |q_0| \leq q_c, \\ \cos^2 \theta_B \ln \frac{q_m}{q_c} + (\sin^2 \theta_B - \frac{1}{2} \cos^2 \theta_B) q_0^2 \left(\frac{1}{q_0^2} - \frac{1}{q_m^2} \right), & |q_0| > q_c. \end{cases} \quad (32)$$

Однако в приведенных выше выражениях не учитывался тот

факт, что диффузное рассеяние имеет различный характер в двух областях: Хуаня и Стокса–Вильсона, и функция $|v_{\mathbf{q}}|^2$ ведет себя в этих областях соответственно, как $\sim 1/q^2$ и $\sim 1/q^4$ [31].

Позже, в работах [32, 33] было учтено различное поведение выражений для интенсивностей диффузного рассеяния в областях Хуаня и Стокса–Вильсона, т.е.

$$|v_{\mathbf{q}}|^2 = \left(\frac{B_1 + B_2 (\mathbf{H}^0 \cdot \mathbf{q}^0)^2}{q^2} \right) \frac{1}{q^2} \text{ в области Хуаня,} \quad (33)$$

$$|v_{\mathbf{q}}|^2 = \left(\frac{B_1 + B_2 (\mathbf{H}^0 \cdot \mathbf{q}^0)^2}{q^2} \right) \frac{k_m^2}{q^4} \text{ в области Стокса–Вильсона,}$$

где $\mathbf{q}^0 = \mathbf{q}/q$. С учетом соотношений (33), для (29) получается (при условии $R_{\text{eff}} \ll \Lambda$) [34]:

$$J(k_0) = \begin{cases} b_1 \left(1 - \frac{k_0^2}{k_c^2} \right) + b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_c^2} \right) + b_3 k_0^2 \left(\frac{1}{2k_m^2} - \frac{1}{k_c^2} \right) & (|k_0| \leq k_c), \\ b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_0^2} \right) + b_3 \left(\frac{k_0^2}{2k_m^2} - 1 \right) & (k_c \leq |k_0| \leq k_m), \\ \left(b_2 - \frac{1}{2} b_3 \right) \frac{k_m^2}{k_0^2} & (|k_0| > k_m), \end{cases} \quad (34)$$

где $k_0 = K\Delta\theta \sin 2\theta_B$, $k_c = q_c$, $k_m = q_m$, $b_1 = B_1 + B_2/3$, $b_2 = B_1 + (1/2)B_2 \times \cos^2 \theta_B$, $b_3 = (1/2) \cos^2 \theta_B (1 - 2 \operatorname{tg}^2 \theta_B)$; для хаотически ориентированных дислокационных петель $B_1 = (4/15)(\pi b R_L^2 / v_c)^2$, $B_2 = \beta B_1$, $\beta = (1/4)(3\nu + 6\nu - 1)(1 - \nu)^{-2}$; для кластеров $B_1 = 0$, $B_2 = (4\pi A_{cl} / v_c)^2$.

Когда размеры дефектов соизмеримы с глубиной экстинкции Λ , диффузное рассеяние от таких дефектов концентрируется в непосредственной близости к брэгговскому пику, т.е. в области обрезания $k \cong k_c$ выражения для полной интегральной интенсивности (ПИИ), которая представляется суммой когерентной и диффузной компонент интегральной интенсивности рассеяния, с $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ в форме (34) не являются корректными в случае крупных дефектов.

В работах [32, 33] был учтен комплексный характер передаваемого импульса $\mathbf{q} = \mathbf{k} + i\mu\mathbf{n}$, что обусловлено учетом многократности диффузного рассеяния на периодической части восприимчивости и позволило авторам устранить расходимость интеграла (29) вблизи узла обратной решетки при $k \rightarrow 0$, и получить аналитические выражения для $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$, корректные и в случае крупных дефектов:

$$J(k_0) = \begin{cases} J_H(k_0) + J_{H-SW}(k_0) + J_H^*(k_0) & \text{при } |\mathbf{k}_0| < k_m, \\ J_{SW}(k_0) & \text{при } |\mathbf{k}_0| \geq k_m, \end{cases} \quad (35)$$

где

$$J_H(k_0) = b_2 \ln \left(e^{\frac{k_m^2 + \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2}} + (b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2) \left(\frac{1}{k_m^2 + \mu_i^2} - \frac{1}{k_0^2 + \mu_i^2} \right) \right),$$

$$J_{H-SW}(k_0) = \frac{k_m^2}{k_m^2 + \mu_i^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2}{k_m^2 + \mu_i^2} \right),$$

$$J_{SW}(k_0) = \frac{k_m^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \left(b_2 - \frac{1}{2} \frac{b_3 k_0^2 + b_4 \mu_i^2}{k_0^2 + \mu_i^2} \right), \quad b_4 = B_2 \left(\frac{1}{2} \cos^2 \theta_B - 1 \right),$$

$$J_H^*(k_0) = \text{sgn}(\Delta\theta) \text{sgn}(\varepsilon) b_1 \left(\sqrt{k_m^2 + \mu_i^2} - \sqrt{k_0^2 + \mu_i^2} \right),$$

где e — основание натурального логарифма, интерференционный коэффициент поглощения μ_i в геометрии Брэгга при асимптотике $\Delta\theta', \Delta\theta \rightarrow \infty$ имеет вид $\mu_i = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} \frac{1 + \gamma_0 / |\gamma_H|}{2}$.

Рассмотрим выражение для коэффициента экстинкции в геометрии Лауэ (рис. 3) в случае больших дефектов. При интегрировании в (29) разложим волновой вектор диффузно рассеянной волны k на составляющие k_0 и k' таким образом, чтобы $k_0 \perp S_{K'}$, а k' лежал в плоскости $S_{K'}$. Кроме того, в плоскости интегрирования перейдем к полярным координатам $\mathbf{k}' = (k' \cos \varphi, k' \sin \varphi)$. Тогда $q^2 = k_0^2 + k'^2 + \mu_i^2$, $\mathbf{k} = (k' \cos \varphi, k' \sin \varphi, k_0)$, $\mathbf{H}_0 = (-\sin \theta_B, 0, \cos \theta_B)$. Таким образом, для (22) получим:

$$F(\mathbf{q}) = \left(B_1 + B_2 \frac{k'^2 \cos^2 \varphi \sin^2 \theta_B + k_0^2 \cos^2 \theta_B - k_0 k' \cos \varphi \sin 2\theta_B}{k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2} \right) \times$$

$$\times 1 / (k'^2 + k_0^2 + \mu_i^2). \quad (36)$$

Элемент площади интегрирования в выбранной системе координат будет иметь вид $dS_{K'} = k' dk' d\varphi$.

Подставляя (36) в (29) и выполняя интегрирование, с учетом различного характера рассеяния в областях Хуаня и Стокса–Вильсона для дифференциального коэффициента экстинкции когерентного рассеяния из-за ухода его части в диффузный фон, в случае геометрии дифракции по Лауэ получим такие же выражения, как и (35), но с коэффициентами b_i в виде

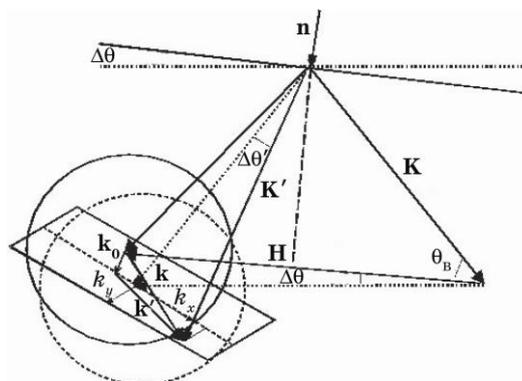


Рис. 3. Схема волновых векторов в обратном пространстве при дифракции по Лауэ.

$$b_2 = B_1 + \frac{B_2}{2} \sin^2 \theta_B, \quad b_3 = B_2 \left(\frac{1}{2} \sin^2 \theta_B - \cos^2 \theta_B \right), \quad b_4 = \frac{1}{2} B_2 \sin^2 \theta_B,$$

и с интерференционным коэффициентом поглощения в виде

$$\mu_i = \frac{KCE \chi_{Hr} \chi_{Hi}}{\gamma_0 \sqrt{\chi_{Hr}^2 - \chi_{Hi}^2}},$$

при тех же асимптотиках $\Delta\theta', \Delta\theta \rightarrow \infty$.

В случае нескольких типов дефектов, в том числе и крупных, следует учесть, что при пренебрежении корреляциями в расположении дефектов имеет место линейная суперпозиция вкладов в величины L_H и $\mu_{ds}(\Delta\theta)$ от разных типов дефектов [33, 50]:

$$L_H = \sum_{\alpha=1}^n L_H^\alpha, \quad \mu_{ds} = \sum_{\alpha=1}^n \mu_{ds}^\alpha,$$

где n — количество типов дефектов; α — индекс, обозначающий соответствующий тип дефекта.

2.2.3. Интегральные интенсивности в случае малых эффектов экстинкции

По мере развития интегральных методов диагностики, возникла необходимость получить выражения для ПИИ, которая является суммой когерентной и диффузной компонент. Динамические экстинкционные эффекты в ПИИ учитываются когерентным и диффузным факторами экстинкции, в результате чего выражения для ПИИ в разных условиях дифракции имеют универсальный вид:

$$R_i = ER_{iP}F_{ds}^{\text{coh}} + R_{iD}^{\text{kin}}F_{ds}^{\text{diff}},$$

где R_{iP} — интегральная интенсивность рассеяния для идеального динамически рассеивающего кристалла, E — фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера, R_{iD}^{kin} — диффузная компонента рассеяния кинематически рассеивающего кристалла, F_{ds}^{coh} и F_{ds}^{diff} — соответственно когерентный и диффузный факторы экстинкции.

В случае малых эффектов экстинкции интегральные интенсивности, которые в общем случае выражаются через интегральные факторы экстинкции, можно выразить через интегральные коэффициенты экстинкции.

2.2.3.1. Лауэ, тонкий кристалл

Для геометрии дифракции по Лауэ в приближении тонкого кристалла ($\mu_0 l \ll 1$, $l = t / \cos \theta_B$, t — толщина кристалла, μ_0 — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения) выражение для ПИИ дается выражением [11, 16]:

$$R_i = e^{-\mu_0 l} [CQEI_0(h_s)F_{ds}^{\text{coh}} + (1 - E^2)QlF_{ds}^{\text{diff}}], \quad (37)$$

где I_0 — функция Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента, $h_s = \mu_H l CE$ — динамический коэффициент фотоэлектрического поглощения.

Введенные в (37) интегральные факторы экстинкции определены как:

$$F_{ds}^{\text{coh}} = \int_{-\infty}^{\infty} R_C(k_0) e^{-\mu_{ds}(k_0)l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (38)$$

$$F_{ds}^{\text{diff}} = \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}(k_0) e^{-\mu_{ds}(k_0)l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mu_{ds}(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (39)$$

где $R_C(k_0)$ — когерентная компонента кривой отражения.

В случае малых эффектов экстинкции из-за диффузного рассеяния ($\mu_{ds}(0)l \ll 1$) факторы (38) и (39) сводятся к $e^{-\mu_{ds}^0 l}$ и $e^{-\mu^* l}$ соответственно:

$$F_{ds}^{\text{coh}} = e^{-\mu_{ds}^0 l}, \quad (40)$$

$$F_{ds}^{\text{diff}} = e^{-\mu^* l}, \quad (41)$$

где интегральные коэффициенты экстинкции даются выражениями:

$$\mu_{\text{ds}}^0 = \int_{-\infty}^{\infty} R_{\text{C}}(k_0) \mu_{\text{ds}}(k_0) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1}, \quad (42)$$

$$\mu^* = \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{\text{ds}}^2(k_0) dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \mu_{\text{ds}}(k_0) dk_0 \right]^{-1}. \quad (43)$$

Поскольку при малых размерах дефектов ширина функции $\mu_{\text{ds}}(\Delta\theta)$ значительно больше, чем $R_{\text{C}}(k_0)$, то последнюю можно рассматривать как δ -функцию, и в результате получим $\mu_{\text{ds}}^0 = \mu_{\text{ds}}(0)$, а с учетом (34) для (42) и (43) будем иметь:

$$\mu_{\text{ds}}^0 = cC^2 m_0 B, \quad B = b_1 + b_2 \ln \left(e \frac{k_m^2}{k_c^2} \right), \quad (44)$$

$$\mu^* = \mu_{\text{ds}}^0 f(r_0), \quad (45)$$

$$f(r_0) = \begin{cases} (5 + 2r_0 \ln r_0 - 3,8r_0)/(3(1 - \ln r_0)), & \text{для дислокационных петель,} \\ (4 + r_0 \ln r_0 - 2r_0)/(5 - 6 \ln r_0), & \text{для сферических кластеров,} \end{cases}$$

где $r_0 = R_0 / \Lambda$, R_0 — радиус дефекта.

Таким образом, для ПИИ в геометрии Лауэ, в приближении тонкого кристалла с учетом малых эффектов экстинкции будем иметь:

$$R_1 = e^{-\mu_0 l} [CQEI_0(h_s) e^{-\mu_{\text{ds}}^0 l} + (1 - E^2) Ql e^{-\mu^* l}].$$

В случае дефектов больших размеров приближение $\mu_{\text{ds}}^0 = \mu_{\text{ds}}(0)$ становится не корректным, и для определения коэффициентов экстинкции необходимо интегрировать (42), (43) с учетом (35).

2.2.3.2. Лауэ, толстый кристалл

Когерентный интегральный фактор экстинкции $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ в геометрии дифракции по Лауэ в приближении толстого кристалла согласно (25) описывается выражением:

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) e^{-\mu_{\text{ds}}(y)l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right)} dy}{\int_{-\infty}^{\infty} R_p(y) dy}. \quad (46)$$

В случае малых эффектов экстинкции будем иметь: $F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = e^{-\mu_{\text{ds}}^0 l}$.

В отличие от геометрии дифракции по Брэггу, где характерной особенностью динамической дифракции является эффект полного

отражения, в геометрии дифракции по Лауэ наблюдается эффект аномального прохождения рентгеновских лучей. Этот эффект заключается в том, что в малой угловой области в непосредственной близости от угла Брэгга наблюдается значительная интенсивность прошедшего излучения даже в достаточно толстых монокристаллах ($t \gg t_{\text{abs}}$, где t_{abs} — глубина абсорбции, обратно пропорциональная фотоэлектрическому коэффициенту поглощения μ_0), что вызвано существенным интерференционным уменьшением коэффициента поглощения для таких волн.

В случае толстого кристалла диффузное рассеяние от дефектов небольших размеров из-за его широкого углового распределения практически полностью поглощается (кроме малой части, которая попадает в указанный узкий угловой интервал), за исключением небольшого слоя (толщина которого порядка длины абсорбции) на выходной стороне кристалла.

Однако в случае дефектов больших размеров, направления распространения диффузных волн от которых преимущественно попадают в указанный узкий угловой интервал, для диффузного рассеяния также становится существенным эффект аномального прохождения. Следовательно, объем формирования диффузных волн в этом случае значительно больше, чем в случае дефектов небольших размеров. Эта особенность приводит к тому, что при исследовании кристаллов в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла чувствительность к динамическим экстинкционным эффектам в диффузном рассеянии от крупных дефектов значительно возрастает. При этом важными в данном случае являются выражения для интенсивности рассеяния в кристаллах с дефектами больших размеров, диффузное рассеяние от которых имеет преимущественно динамический характер.

Диффузный фактор экстинкции в геометрии Лауэ в толстом кристалле определяется выражением:

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{2P_0}{\pi K t} \sum_{\delta, \tau} I_{\delta\tau},$$

$$I_{\delta\tau} = \frac{1}{K^3 \sin 2\theta_{\text{B}}} \int D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') F(\mathbf{q}) \rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') (e^{2Kt m_{\delta}(\alpha)} - e^{2Kt m_{\delta}(\alpha')}) d\mathbf{k}, \quad (47)$$

$$m_{\delta}(\alpha) = \text{Im } \Delta_{\delta}(\alpha) = \frac{1}{2\gamma_0} \left(-|\chi_{0i}| - (-1)^{\delta} \frac{C^2 E^2 \chi_{\text{Hr}} \chi_{\text{Hi}}}{\sqrt{\alpha^2 + C^2 E^2 (\chi_{\text{Hr}}^2 - \chi_{\text{Hi}}^2)}} \right) - \frac{\mu_{\text{ds}}(\alpha)}{2\gamma_0 K},$$

$$P_0 = \frac{ctv_c H^2}{16\gamma_0^3 \lambda^2}, \quad D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{|\Delta'_{\tau} - \Delta_{\delta}|^2 |2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2}{|\Delta_1 - \Delta_2|^2 |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2}.$$

Здесь слагаемые $I_{\delta\tau}$ описывают вклад в интенсивность диффузного рассеяния от сильно ($\tau = 2$) и слабо ($\tau = 1$) поглощающихся диффузных волновых полей, которые сформированы при рассеянии на искажениях кристаллической решетки сильно ($\delta = 2$) и слабо ($\delta = 1$) поглощающихся когерентных волн.

Для определения диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Лауэ в приближении толстого кристалла при малых эффектах экстинкции и малых размерах дефектов в (47) перейдем от переменных интегрирования k_x, k_z к переменным

$$y = (|\mathbf{K} + \mathbf{H}| - K) / (KCE\sqrt{\chi_{\text{Hr}}\chi_{-\text{Hr}}}), \quad y' = (|\mathbf{K}' - \mathbf{H}| - K) / (KCE\sqrt{\chi_{\text{Hr}}\chi_{-\text{Hr}}}),$$

воспользовавшись соотношениями

$$k_x = ((y' - y) \cos \psi / \text{tg} \theta_B) + (y' + y) \sin \psi \pi / \Lambda,$$

$$k_z = -(y' - y) \sin \psi / \text{tg} \theta_B + (y' + y) \cos \psi \pi / \Lambda.$$

В результате получим:

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{P_0 (KCE|\chi_{\text{Hr}}|)^2 (K\Lambda)^2}{16\pi^2 K \sin^2 \theta_B R_{\text{ID}}^{\text{kin}}} \sum_{\delta, \tau=1,2} I_{\delta\tau}, \quad I_{\delta\tau} = \iint yy' f_{\delta\tau}(y, y') \Pi_{\delta\tau}(y, y'), \quad (48)$$

$$f_{\delta\tau}(y, y') = \frac{|\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 |2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2}{(y^2 + 1)(y'^2 + 1)} \int dk_y |\mathbf{H}_0 \mathbf{u}(\mathbf{q}_{\delta\tau})|^2,$$

$$\Pi_{\delta\tau} = e^{-\mu_0 l} \frac{e^{-m_\delta(y)} - e^{-m_\tau(y')}}{m_\tau(y') - m_\delta(y)}, \quad m_\delta(y) = \mu_{\text{ds}}(y)l + (-1)^\delta \frac{\mu_{\text{H}} l C}{\sqrt{y^2 + 1}}.$$

Множитель $\Pi_{\delta\tau}$ в подынтегральном выражении (48) описывает эффект аномального прохождения диффузно рассеянных волн [15, 50] и является резко убывающей функцией переменных y и y' . Множители $f_{\delta\tau}$ в (48) представляют собой плавные функции y и y' . Ввиду этого для асимптотической оценки интеграла (48) при $\mu_{\text{H}} l \gg 1$ можно воспользоваться методом Лапласа [15, 50], согласно которому асимптотика интеграла

$$F(\lambda) = \int_a^b dx f(x) e^{\lambda S(x)}$$

при выполнении условий $\lambda \rightarrow \infty$, $S''(x_0) \neq 0$, $a < x_0 < b$ (x_0 — точка максимума функции $S(x)$) имеет вид

$$F(\lambda) \approx f(x_0) \sqrt{\frac{-2\pi}{\lambda S''(x_0)}} e^{\lambda S(x_0)}.$$

Таким образом, для диффузного фактора экстинкции получим:

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{\alpha CE |\chi_{\text{Hr}}| \mu_{\text{ds}}^0}{16 \sin^2 \theta_{\text{B}} \mu_{\text{H}} C \gamma_0^2 R_{\text{ID}}^{\text{kin}}} \sqrt{\frac{2\pi}{\mu_{\text{H}} l C}} e^{-(\mu_0 - \mu_{\text{H}} C + \mu_{\text{ds}}^0) l}.$$

2.2.3.3. Брэгг, тонкий и толстый кристаллы

В приближении тонкого кристалла выражение для когерентного фактора экстинкции в геометрии Брэгга имеет вид:

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (49)$$

$$\text{где } r(z; t, g, \kappa) = \frac{\text{ch} x_r - \cos x_i}{L_+ \text{ch} x_r + \sqrt{L_+^2 - 1} \text{sh} x_r - L_- \cos x_i + \sqrt{1 - L_-^2} \sin x_i}.$$

Вообще говоря, выражение (49) описывает экстинкционные эффекты в когерентном рассеянии как в приближении тонкого, так и толстого кристаллов, однако в последнем случае выражение для интегрального когерентного фактора (49) можно значительно упростить вследствие того, что при выполнении условия $\mu_0 t \rightarrow \infty$ справедливо приближение $x_r \rightarrow \infty$. Тогда когерентный фактор экстинкции в геометрии Брэгга в приближении толстого кристалла будет иметь вид:

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{3}{8} \int_{-\infty}^{\infty} r(z; t, g, \kappa) dz, \quad (50)$$

$$\text{где } r(z; t, g, \kappa) = L_+ - \sqrt{L_+^2 - 1}.$$

Когерентный фактор экстинкции при дифракции на отражение в случае малых эффектов экстинкции дается выражением

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = 1 - \frac{3\pi s}{4}, \quad (51)$$

где $s = ((\mu_0 + \mu_{\text{ds}}^0) \Lambda E) / \gamma C$ и должно выполняться условие $s \ll 1$.

Для диффузного фактора экстинкции при учете немалых эффектов экстинкции в геометрии Брэгга будем иметь

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{c\nu}{(2\pi)^3 L_{\text{H}}} \int d\mathbf{k} |\mathbf{H} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}}|^2 \frac{1 - e^{-2\mu_{\text{I}} t}}{2\mu_{\text{I}} t}. \quad (52)$$

Полагая, что $\mu_{\text{ds}}(0) \ll \mu_0$, и выполняя соответствующие разложения по малому параметру, получим в приближении толстого кристалла:

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} \approx \frac{\gamma/2}{(\mu_0 + \mu^*)t}, \quad (53)$$

где $\gamma = 1/(\mathbf{1}/\gamma_0 + \mathbf{1}/|\gamma_{\text{H}}|)$.

В приближении тонкого кристалла для интегрального диффузного фактора экстинкции в геометрии Брэгга будем иметь:

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} \approx \frac{1}{1 + (\mu_0 + \mu^*)t/\gamma}.$$

Как следует из выражений для факторов экстинкции в различных случаях дифракции, выражения для ПИИ в общем случае не являются аддитивными относительно вкладов в них дефектов разных типов. Это обусловлено нелинейным, как правило, характером зависимостей ПИИ от структурно-чувствительных параметров L_{H} , μ_{ds}^0 и μ^* .

2.2.4. Интегральные интенсивности в случае больших эффектов экстинкции

2.2.4.1. Лауэ, тонкий кристалл

Интегральный фактор экстинкции $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ когерентной составляющей ПИИ в геометрии Лауэ при приближении тонкого кристалла в случае присутствия в кристалле нескольких типов дефектов дается выражением:

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{I_{\text{coh}}}{R_{\text{ip}}} = \int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) e^{-\sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0)t} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} R(k_0) dk_0 \right]^{-1}. \quad (54)$$

Здесь $R(k_0)$ — дифференциальная отражательная способность идеального кристалла с учетом статического фактора Дебая–Валлера. Однако, в отличие от [32], здесь коэффициент эффективного поглощения или экстинкции за счет диффузного рассеяния $\mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0)$ дается выражением (35), справедливым и в случае крупных дефектов. Пренебрегая динамическими осцилляциями дифференциальной отражательной способности идеального кристалла при интегрировании и учитывая, что в таком случае

$$R(k_0) = \frac{K^2 \sigma_0^2}{2(k_0^2 b + K^2 \sigma_0^2)} e^{-\mu_0 t},$$

где $K = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны излучения, $\sigma_0^2 = C_j^2 E^2 \chi_{\text{H}} \chi_{-\text{H}}$, для R_{ip} получим:

$$R_{\text{IP}} = \frac{\pi K \sigma_0}{2\sqrt{b}} e^{-\mu_0 l}.$$

Для рассмотрения интеграла I_{coh} удобно величины $k_{m\alpha}$, разделяющие области Хуаня и Стокса–Вильсона, расположить в порядке возрастания, т.е. $k_{m1} < k_{m2} < k_{m3} < \dots < k_{mn}$, n — количество типов дефектов в кристалле. Учитывая четность подынтегрального выражения, I_{coh} можно представить следующим образом: первый интеграл берется по интервалу $k_0 \in (0, k_{m1}]$, в этом интервале все $\mu_{\text{ds}}^\alpha(k_0)$ будут представлены в виде, соответствующем области Хуаня, второй интеграл берется по интервалу $k_0 \in (k_{m1}, k_{m2}]$, здесь $\mu_{\text{ds}}^1(k_0)$ будет представляться в виде, соответствующем области Стокса–Вильсона, а все остальные $\mu_{\text{ds}}^\alpha(k_0)$ — области Хуаня, и т.д. В интервале $k_0 \in (k_{mn}, \infty)$ все интегралы будут иметь вид, соответствующий области Стокса–Вильсона. Таким образом, для $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ получим:

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{K^2 \sigma_0^2}{\gamma R_{\text{IP}}} e^{-\mu_0 l} \left(\sum_{i=0}^{n-1} e^{-\beta_{5i} + \beta_{4i}} \int_{k_{mi}}^{k_{m(i+1)}} \frac{(k_0^2 + \mu^2)^{\beta_{1i}}}{k_0^2 + A_1^2} e^{-\left(\frac{\beta_{3i}}{k_0^2} + \frac{\beta_{2i}}{2} k_0^2\right)} dk_0 + 2 \int_{k_{mn}}^{\infty} \frac{e^{-\left(\frac{\beta_{3n}}{k_0^2}\right)}}{k_0^2 + A_1^2} dk_0 \right),$$

где $\beta_{1i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{2j}$, $\beta_{2i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{3j} / k_{mj}^2$, $\beta_{3i} = \sum_{j=1}^i F_j l (b_{2j} - \frac{1}{2} b_{3j}) k_{mj}^2$,

$$\beta_{4i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{3j}, \quad \beta_{5i} = \sum_{j=i+1}^n F_j l b_{2j} \ln[e(k_{mj}^2 + \mu^2)],$$

$$A_1^2 = K^2 \sigma_0^2 / \gamma, \quad F_j = c_j C^2 E^2 m_0.$$

Когда эффективные размеры дефектов намного меньше длины экстинкции, распределение диффузного фона, создаваемого такими дефектами, намного шире когерентного пика, т.е. направления распространения определяющего большинства диффузных волн значительно отклоняются от угла Брэгга и поэтому в таком случае, при определении интегральной интенсивности диффузного фона, можно пренебречь динамическими эффектами в диффузном рассеянии, так как их удельный вклад пренебрежимо мал. Однако, когда размеры дефектов соизмеримы с длиной экстинкции, распределение диффузного фона узкое и все диффузно рассеянные волны по направлению распространения не сильно отличаются от когерентных волн, т.е. сосредоточены в существенно динамической области. В таком случае необходимо учитывать динамический характер диффузного рассеяния. При этом диффузная составляющая ПИИ имеет вид:

$$R_{\text{ID}} = C^2(1 - E^2)F_{\text{ds}}^{\text{diff}} Q l e^{-\mu_0 l}.$$

С учетом динамических эффектов в диффузном рассеянии интегральный фактор экстинкции соответствующей компоненты ПИИ будет даваться выражением:

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{I_{\text{diff}}}{I_0} = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) e^{-\sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) l} dk_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha=1}^n \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) dk_0 \right]^{-1}. \quad (55)$$

Здесь следует отметить, что, с другой стороны, справедливо также выражение:

$$I_0 = (1 - E^2)R_{\text{ip}}^{\text{kin}} \approx R_{\text{ip}}^{\text{kin}} 2L_{\text{H}}.$$

Учитывая (10) и (11), для I_0 получим:

$$I_0 = \sum_{\alpha=1}^n \int_{-\infty}^{\infty} \mu_{\text{ds}}^{\alpha}(k_0) dk_0 = 2 \sum_{\alpha=1}^n F_{\alpha} \left[b_{2\alpha} \left[3k_{m\alpha} - 2\mu_{\alpha} \operatorname{arctg} \left(\frac{k_{m\alpha}}{\mu} \right) \right] - \frac{5k_{m\alpha} b_{3\alpha}}{6} + k_{m\alpha} \left(b_{2\alpha} - \frac{1}{2} b_{3\alpha} \right) \right].$$

Упорядочивая $k_{m\alpha}$ так же, как и при вычислении $F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$, получим для $F_{\text{ds}}^{\text{diff}}$:

$$F_{\text{ds}}^{\text{diff}} = \frac{2}{I_0} \left\{ \sum_{i=0}^{n-1} e_i \left[(\beta_{5i} - \beta_{4i}) I_i - \sum_{j=1}^3 \beta_{ij} \frac{\partial I_i}{\partial \beta_{ij}} \right] + \sqrt{\beta_{3n}} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{\beta_{3n}}}{k_{mn}} \right) \right\},$$

где, $I_i = \int_{k_{mi}}^{k_{mi+1}} (x^2 + \mu^2)^{\beta_{1i}} e^{-\left(\frac{\beta_{2i} x^2 + \beta_{3i}}{x^2} \right)} dx$, $e_i = e^{-\beta_{5i} + \beta_{4i}}$.

2.2.4.2. Лауэ, толстый кристалл

В случае когерентного фактора при больших эффектах экстинкции в геометрии Лауэ будем иметь:

$$F_{\text{ds}}^{\text{coh}} = \frac{1}{R_{\text{ip}}} \int_{-\infty}^{\infty} R_{\text{p}}(y) e^{-\mu_{\text{ds}}(y) l \left(1 - \frac{\xi C}{\sqrt{1+y^2}} \right)} dy, \quad (56)$$

где $R_{\text{ip}} = \frac{B i_0 (\mu_{\text{H}} l C)}{\sqrt{2\pi \mu_{\text{H}} l C}} e^{-(\mu_0 - \mu_{\text{H}} C) l}$ — интегральная отражательная способность в случае лауэ-дифракции в приближении толстого идеаль-

ного кристалла, $B = \frac{\pi CE |\chi_{\text{Hr}}|}{2 \sin(2\theta_{\text{B}})}$, $i_0(x) = 1 + \frac{1}{8x} + \frac{9}{128x^2} + \dots$

Для вычисления диффузного фактора экстинкции можно сделать некоторые упрощения:

$$|\Delta'_\tau - \Delta_\delta|^2 \approx \frac{1}{4\gamma_0^2} \left((\alpha - \alpha') + (-1)^\delta \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} - (-1)^\tau \sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2} \right)^2,$$

$$|2\gamma_0 \Delta_{\delta'} - \chi_0|^2 \approx (\alpha + (-1)^{\delta'} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2})^2,$$

$$|\Delta_1 - \Delta_2|^2 \approx \frac{1}{\gamma_0^2} (\alpha^2 + \alpha_0^2), \quad |\Delta'_1 - \Delta'_2|^2 \approx \frac{1}{\gamma_0^2} (\alpha'^2 + \alpha_0^2),$$

$$D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{\gamma_0^2}{4} \frac{(\alpha + (-1)^{\delta'} \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2})^2}{(\alpha^2 + \alpha_0^2)(\alpha'^2 + \alpha_0^2)} \times$$

$$\times \left((\alpha - \alpha') + (-1)^\delta \sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2} - (-1)^\tau \sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2} \right)^2.$$

Выражение для $\rho_{\delta\tau}(k_0, k')$ можно свести к следующему виду:

$$\rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') = \frac{1}{2Kt \operatorname{Im}(\Delta_\delta - \Delta'_\tau)} =$$

$$= \left((\mu_{\text{ds}}(\alpha) - \mu_{\text{ds}}(\alpha'))l + \frac{\beta_0 Kl}{2} \left(\frac{(-1)^\delta}{\sqrt{\alpha^2 + \alpha_0^2}} - \frac{(-1)^\tau}{\sqrt{\alpha'^2 + \alpha_0^2}} \right) \right)^{-1}.$$

Перейдем в (47) от интегрирования по $d\mathbf{k}$ к интегралу по $d\theta d\theta' d\varphi'$, где φ' — угол отклонения диффузно рассеянной волны от плоскости дифракции. Выразим компоненты волнового вектора диффузной волны в вакууме \mathbf{k} через угловые переменные $\theta, \theta', \varphi'$. Согласно рисунку 3 такая связь будет иметь вид:

$$k_x = K(\theta' + 2\theta \cos^2 \theta_{\text{B}}), \quad k_y = K\varphi', \quad k_z = -K\theta \sin 2\theta_{\text{B}}.$$

Таким образом, при переходе в интеграле (40) к угловым переменным, для элемента интегрирования получим:

$$d\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z = K^3 \sin 2\theta_{\text{B}} d\theta d\theta' d\varphi'.$$

В случае присутствия в кристалле нескольких типов дефектов необходимо так же, как и в случае когерентной компоненты, заменить дифференциальный коэффициент экстинкции на сумму коэф-

фициентов экстинкции от каждого типа дефектов и, кроме того, необходимо также заменить выражение для $F(\mathbf{q})$ на сумму таких выражений от каждого типа дефектов, т.е.

$$F(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha} F_{\alpha}(\mathbf{q}).$$

Такие замены справедливы из-за того, что величины квадратичные по полям смещений от дефектов складываются аддитивно от разных типов дефектов (при этом предполагается, что парными корреляциями между смещениями от различных типов дефектов можно пренебречь, что справедливо в случае небольшой объемной доли дефектов, когда $c \ll 1$).

Интегрируя (47) по ϕ' , получим:

$$I_{\delta\tau} = \int D_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') F(\alpha, \alpha') \rho_{\delta\tau}(\alpha, \alpha') (e^{2Ktm_0(\alpha)} - e^{2Ktm_0(\alpha')}) d\theta d\theta', \quad (57)$$

где

$$F(\alpha, \alpha') = \begin{cases} f_H(\sqrt{k_m^2 - k_{\parallel}}) - f_H(0) + f_{SW}(\infty) - f_{SW}(\sqrt{k_m^2 - k_{\parallel}}) & \text{при } |k_{\parallel}| < k_m, \\ f_{SW}(\infty) - f_{SW}(0) & \text{при } |k_{\parallel}| \geq k_m, \end{cases},$$

$$f_H(x) = \frac{B_2 k_1^2 x}{K(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)(k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)} + \frac{B_2 k_1^2 + 2B_1(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}{K(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^{3/2}} \operatorname{arctg} \left[\frac{x}{\sqrt{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}} \right],$$

$$f_{SW}(x) = \frac{k_m^2}{4K} \left(\frac{(B_2 k_1^2 (5k_{\parallel}^2 + 3x^2 + \mu_i^2) + 4B_1(k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2))x}{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^2 (k_{\parallel}^2 + x^2 + \mu_i^2)^2} + \frac{3B_2 k_1^2 + 4B_1(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)^{5/2}} \operatorname{arctg} \left[\frac{x}{\sqrt{(k_{\parallel}^2 + \mu_i^2)}} \right] \right),$$

$$k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_z^2}, \quad k_1 = -k_x \sin \theta_B + k_z \cos \theta_B.$$

2.2.4.3. Брэгг, тонкий и толстый кристаллы

Для диффузного интегрального фактора экстинкции в геометрии Брэгга согласно (52) будем иметь:

$$F_{ds}^{\text{diff}} = \frac{1}{2\gamma_0 R_{iD}^{\text{kin}}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 - e^{-2\mu_i t}}{\mu_i} F_{\text{dyn}} \sum_{\alpha} \mu_{ds}^{\alpha}(k_0) dk_0. \quad (58)$$

В предельных случаях тонкого и толстого кристаллов экспонента в (58) превратится соответственно в 0 и $1 - 2\mu_i t$.

Когерентный и диффузный факторы в геометрии Брэгга нужно находить путем численного интегрирования выражений (49), (50) и (58) для приближений тонкого и толстого кристаллов соответственно. При этом следует учесть, что интегрирование в факторах экстинкции ведется с учетом ориентационной зависимости интерференционного коэффициента поглощения, которая в случае присутствия в кристалле больших дефектов существенно влияет на ПИИ [37].

3. МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНОЙ ДИФFUЗНОДИНАМИЧЕСКОЙ КОМБИНИРОВАННОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

3.1. Физические основы метода диффузнодородинамической комбинированной дифрактометрии

Анализ приведенных выражений динамической теории рассеяния (54)–(58) показывает, что, в отличие от кинематической теории (1)–(7), введенные выше два интегральных параметра картины рассеяния (сумма и отношение диффузной и брэгговской составляющих R_i) при динамической дифракции оба оказываются зависящими как от параметров дефектной структуры, так и от условий дифракции. При этом выражения (54)–(58) демонстрируют принципиальное различие в зависимостях брэгговской и диффузной составляющих R_i не только от параметров дефектов, но и от условий дифракции. Таким образом, благодаря учету многократного перерассеяния брэгговской и диффузной составляющих и установленному различию в проявлении эффектов многократности для этих составляющих, которое и обуславливает их различную зависимость от условий динамической дифракции, указанные выше законы сохранения кинематической теории при динамической дифракции нарушаются.

Установленное в работе [52] существование в кинематической теории рассеяния в кристаллах с дефектами и сверхструктурой двух законов сохранения для двух интегральных параметров картины рассеяния является причиной, ограничивающей информативность кинематической картины рассеяния. Учитывая, что распределения величин этих параметров в пространстве обратной решетки являются для первого параметра самой картиной рассеяния, а для второго — распределением ее диффузной составляющей, можно сделать выводы о причинах как ограничения информативности самой картины дифракции в условиях кинематического рассеяния, так и принципиальной неадекватности применения кинематического рассмотрения для динамической дифракции, не только в случае интегральных подходов, но и в случае дифференциаль-

но-интегральных и дифференциальных методов дифрактометрии.

Первый закон сохранения кинематической теории, указывающий на то, что первый из параметров (см. первое выражение в (6)) зависит только от условий дифракции (длины волны излучения, толщины кристалла, геометрии дифракции и т.д.) и не зависит от параметров структурного совершенства, и сохраняется таким, как в идеальном кристалле при произвольных отклонениях от периодичности кристаллической решетки, был установлен ранее [41–47], как закон сохранения полной интегральной интенсивности дифрагированного излучения в несовершенных кристаллах. В результате структурно-чувствительным интегральным параметром оказывался только второй параметр (7), сводящийся в кинематической теории к удвоенному показателю статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера.

На основе анализа параметра (7) М. А. Кривоглаз провел классификацию дефектов кристаллов по характеру их влияния на картину рассеяния [7]. При этом кинематическая картина рассеяния оказалась Фурье-изображением кристалла с дефектами, однозначно определяемым независимым от условий дифракции вторым параметром и его распределением в пространстве обратной решетки. Неизменность этого параметра при изменении условий дифракции является неизбежным следствием приближения однократного рассеяния и составляет суть второго закона сохранения, который, как и первый закон сохранения, автоматически вытекает из кинематической теории. Однако второй закон сохранения кинематической теории ранее не был установлен. Впервые он установлен и сформулирован в работе [52].

Рисунки 4 и 5 приведены в качестве примера и иллюстрируют радикальное изменение при динамической дифракции характера

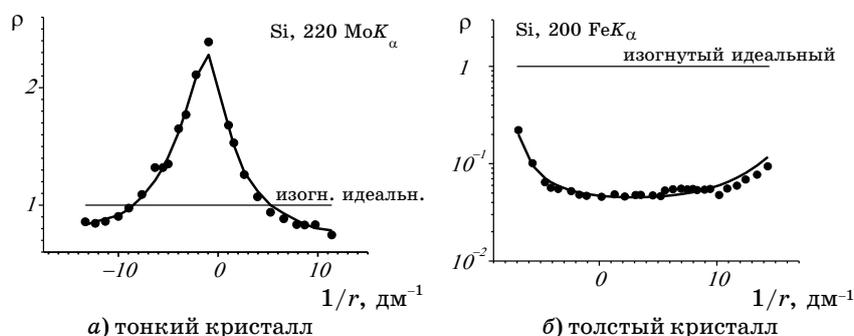


Рис. 4. Рассчитанные (жирные сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) деформационные зависимости нормализованной ПИИ ($\rho = R_i/R_{ip}$) для кристаллов Si с дефектами, а также ДЗ для идеального кристалла (тонкие сплошные линии).

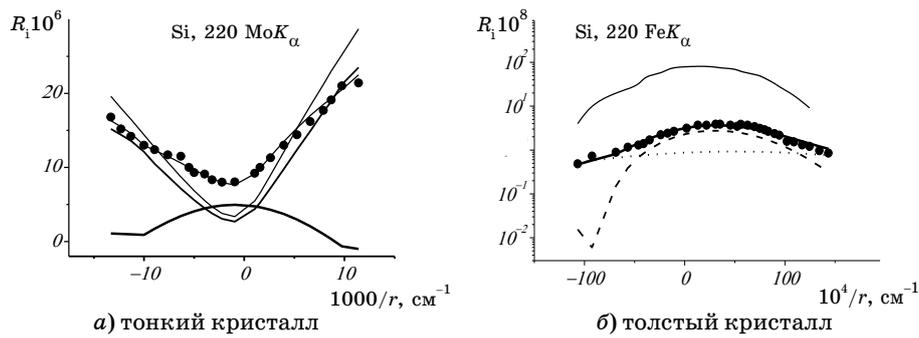


Рис. 5. Теоретические и экспериментальные значения деформационных зависимостей ПИИ неидеального кристалла изображены сплошными жирными линиями и маркерами, соответственно. Пунктирные линии представляют рассчитанные ДЗ когерентной компоненты ПИИ, штриховые — диффузной, а сплошные тонкие линии — ДЗ ПИИ кристалла без дефектов.

влияния дефектов на интегральную интенсивность рассеяния (первый параметр) в зависимости от радиуса кривизны макроскопического упругого изгиба (r) кристалла, а также изменение характера влияния дефектов на эти деформационные зависимости (ДЗ) при изменении других условий дифракции, а именно, при переходе от предельного случая динамической дифракции в тонком кристалле (*а*), когда наблюдается существенное увеличение полной интегральной интенсивности за счет дефектов относительно идеального кристалла, к предельному случаю толстого кристалла (*б*), когда имеет место ее существенное уменьшение за счет дефектов [24, 48]. Это обусловлено принципиально различными характерами влияния на брэгговскую и диффузную составляющие динамической картины дифракции, как радиуса кривизны упругого изгиба, так и толщины кристалла, что иллюстрируется на рис. 5 и объясняет этим различием и его следствиями природу нарушения при динамической дифракции второго закона сохранения, а как следствие этого, и первого.

В результате общая яркость динамической картины рассеяния, нормированная на яркость картины для соответствующего идеального кристалла, и характеры возникших даже после указанной нормировки зависимостей ее компонент от условий дифракции и их различия становятся уникально чувствительными к характеристикам дефектов или параметрам сверхструктуры. Именно это открытое уникальное явление, а также явление изменения избирательности чувствительности к дефектам разного типа при изменении условий дифракции [49, 50], были положены в основу создания комплекса новых, принципиально отсутствующих при кинематическом рассмотрении, интегральных методов ДДКД [24–26].

В работах [23, 24] показано, что нелинейные эффекты многократности рассеяния обуславливают принципиально различные для брэгговской и диффузной составляющих динамической картины рассеяния, а также различные для удельных вкладов в картину от дефектов разного типа, зависимости их от условий динамической дифракции (длины волны излучения, толщины кристалла, геометрии дифракции (на прохождение или на отражение), параметра асимметрии отражения, азимутального угла, радиуса кривизны упругого изгиба кристалла и т.д.). Как показано и проиллюстрировано на рис. 4 и 5 в настоящей работе, именно эта разница между зависимостями брэгговской и диффузной составляющих и приводит к нарушению при динамической дифракции второго закона сохранения кинематической теории, а также является причиной, которая обуславливает нарушение и первого закона сохранения, т.е. этим раскрывается физическая природа установленного ранее явления уникальной чувствительности к искажениям структуры нормированной общей яркости динамической картины рассеяния. В целом, во-первых, при динамической дифракции оба интегральных параметра динамической картины рассеяния, вводящиеся аналогично (6) и (7), становятся структурно-чувствительными. При этом, во-вторых, что более существенно, количество измеряемых экспериментально пар этих параметров теперь равно количеству условий динамической дифракции, которые могут быть экспериментально реализованы, т.е. указанные структурно-чувствительные параметры становятся многомерными, а сама динамическая картина — многообразной.

Многообразность динамической картины рассеяния иллюстрирует рис. 6. Для кристалла с фиксированной кристаллической (в

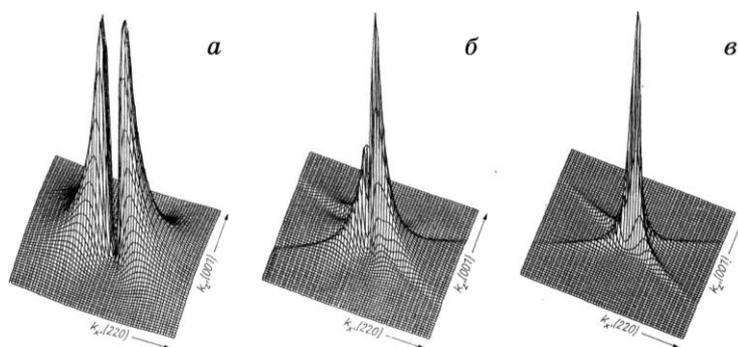


Рис. 6. Радикальное изменение картины диффузного рассеяния (двумерного распределения интенсивности в плоскости рассеяния) от кристалла с фиксированной дефектной структурой за счет изменения лишь условий динамической дифракции (с увеличением толщины t кристалла или длины волны излучения для $\mu_0 t = 0,027$ (а), 1,34 (б) и 5,36 (в)), демонстрирующее явление многообразности динамической картины рассеяния.

том числе и дефектной) структурой для каждого рефлекса кинематическая теория при любых условиях дифракции (в данном случае при изменении толщины кристалла или длины волны излучения) предполагает единую картину рассеяния, представленную на рис. 6, *а*. В отличие от кинематики, динамическая картина является многообразной (см. рис. 6, *а–в*), т.е. сколько разных условий дифракции реализовано — столько для данного рефлекса разных картин рассеяния при неизменной кристаллической структуре может быть получено. Это впервые позволило лишь при динамической дифракции целенаправленно получить необходимое количество экспериментальных данных (независимых уравнений) путем управления относительным вкладом брэгговской и диффузной составляющих картины рассеяния при изменении условий дифракции для определения произвольного, в принципе, количества неизвестных характеристик структуры и создать целый комплекс как интегральных, так и дифференциальных методов диагностики нового поколения (ДДКД) [23–28].

Главной особенностью и преимуществом разработанного нового поколения диагностики (ДДКД) являются, обоснованные в [23–26] и в настоящей работе, необходимость и уникальная возможность комбинированной компьютерной обработки результатов экспериментальных измерений параметров картины рассеяния в различных условиях динамической дифракции, а также при использовании различных методик: интегральных, дифференциально-интегральных и дифференциальных, т.е. одно-, двух- и трехкристалльных. Основой новых принципов высокоинформативной диагностики [23–28] является обеспечение возможности экспериментального измерения и теоретического анализа необходимого набора, указанных выше пар не только интегральных параметров, а также и характеристик их распределений в пространстве обратной решетки. То есть, речь идет не только о самих интегральных параметрах, а также и о дифференциально-интегральных и дифференциальных характеристиках распределения этих двух главных параметров динамических картин рассеяния, а именно о распределении в обратном пространстве яркости картины дифракции в целом и ее диффузной составляющей в частности.

3.2. Толщинные и спектральные зависимости ПИИ

Установление различий в механизмах формирования брэгговской и диффузной составляющих привело к открытию качественно новых эффектов динамической дифракции [34, 44, 45]. Одним из ярких примеров этого является установление нарушения при динамической дифракции справедливого при кинематическом рассеянии закона сохранения (независимости от искажений кристаллов) полной

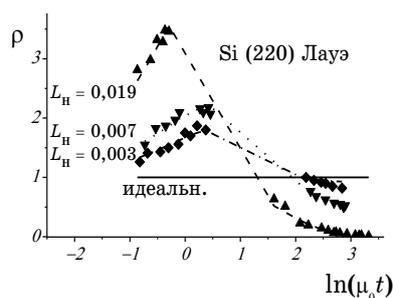


Рис. 7. Зависимости нормированной ПИИ ρ (отношения ПИИ исследуемого реального кристалла R_i к ПИИ для идеального $R_{i \text{ perf.}}$) от величины $\mu_0 t$. Линии — результаты расчетов, а маркеры — результаты измерения ПИИ для трех образцов в приближениях тонкого (с использованием MoK_α -излучения, левая часть зависимостей) и толстого (с использованием CuK_α -излучения и FeK_α -излучения, правая часть зависимостей) кристаллов.

(сумма брэгговской и диффузной составляющих) интегральной отражательной способности кристаллов с дефектами. Это явление обусловило возникновение уникально чувствительных к дефектам толщинных, спектральных, азимутальных, деформационных и др. зависимостей ПИИ, которые могут быть экспрессно измерены и интерпретированы с использованием полученных авторами оригинальных аналитических формул, связывающих их с характеристиками дефектов.

На рисунке 7 представлены результаты экспериментального подтверждения толщинной зависимости вклада ДР и нарушения закона сохранения ПИИ (маркеры — эксперимент, линии — теория).

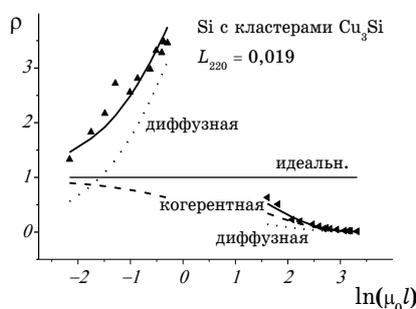


Рис. 8. Рассчитанные (сплошные линии) и экспериментальные (маркеры) толщинные зависимости нормализованной ПИИ монокристалла Si. Штриховые линии — рассчитанные толщинные зависимости когерентной составляющей, пунктирные линии — диффузной составляющей. Параметры дефектной структуры кристалла: сферические кластеры Cu_3Si с $R = 0,035$ мкм, $\varepsilon = 0,13$ и $c = 9 \cdot 10^{10}$ см³.

ПИИ представлена нормированной на ПИИ для идеального кристалла, что в кинематической теории всегда равно единице (см. формулу (6)).

Следует отметить, что на рис. 7 (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 ПИИ принципиально не чувствительна к искажениям кристалла.

Из рисунка 8, где представлены толщинные зависимости удельных вкладов диффузной и когерентной составляющих ПИИ, видно, что именно изменение относительного вклада диффузной составляющей ПИИ (непрерывное с изменением толщины кристалла и дискретное при переходе от приближения тонкого к приближению толстого кристаллов), обусловленное принципиально различным характером толщинных зависимостей составляющих ПИИ, а также изменением этого характера при переходе от предельного случая тонкого кристалла к случаю толстого, определяет ее уникальную чувствительность к дефектам.

На рисунках 9 и 10 представлены спектральные зависимости ПИИ неидеальных кристаллов, служащие экспериментальным подтверждением различной функциональной зависимости (2) в 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

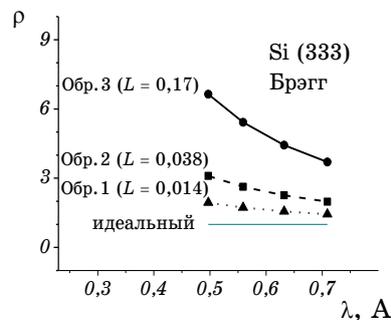


Рис. 9. Зависимость, в случае брэгг-дифракции, нормированной ПИИ дефектных образцов Si от длины волны излучения. Образцы 1 и 2 были отожжены на воздухе в течение 4 и 6 часов при 1000°C и 1080°C соответственно; образец 3 был отожжен в атмосфере азота в течение 7 часов при 1250°C.

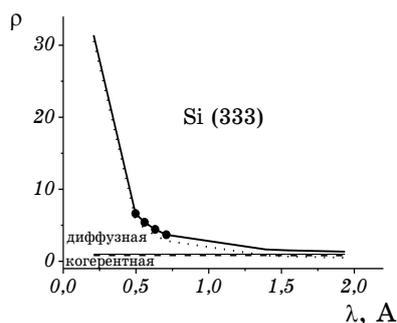


Рис. 10. Рассчитанная (сплошная линия) и экспериментальная (маркеры) спектральные зависимости нормированной ПИИ монокристалла Si. Штриховая линия — рассчитанная спектральная зависимость когерентной составляющей, пунктирная линия — диффузной. Расчеты проводились для следующих параметров динамического рассеяния: $L_D = 0,17$, $\mu^* \mu_0 = 1,1$.

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 (54)–(58) 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.

3.3. Эффект асимметрии азимутальной зависимости нормированной ПИИ

Как известно, азимутальные зависимости нормированной ПИИ (нормированной на ПИИ идеального кристалла) для различных типов искажений кристаллической решетки являются симметричными относительно угла 90° . К таким типам искажений кристалла относятся: дефекты кулоновского типа (дислокационные петли, кластеры и пр.) небольших размеров $R \ll \Lambda$, нарушенный поверхностный слой.

Для исследования вышеуказанной симметрии азимутальной зависимости были измерены азимутальные зависимости для кри-

сталла с дефектами. Объект исследования был вырезан из слитка CZ Si (p -тип проводимости, $\rho \sim 10$ Ом·см, ось роста была направлена вдоль оси $\langle 111 \rangle$, концентрации кислорода и углерода были равны $\sim 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и 10^{16} см^{-3} , соответственно). Образец был приготовлен в форме пластины, параллельной плоскости (111), толщиной $t = 4000$ мкм. Нарушения структуры поверхности, возникающие при механической обработке, были удалены путем химико-механической полировки с последующим химическим стравливанием до глубины ~ 10 мкм.

Оказалось, что в результате присутствия в этом кристалле дефектов больших размеров (дислокационных петель с радиусом 15 мкм) азимутальная зависимость нормированной ПИИ существенно несимметрична (см. рис. 11), тогда как расчеты с учетом формул (44), (46) дают симметричный результат даже при подстановке в эти выражения параметров больших дефектов. Однако, поскольку размеры дислокационных петель в исследуемом образце превышают длину экстинкции, то указанные формулы уже не дают корректного описания ПИИ, так как они выводились в предположении малых дефектов, что позволило пренебречь процессами перерасеяния диффузных волн на периодической части кристаллического потенциала. Для случая больших дефектов, как упоминалось выше, необходимо использовать выражения (50) и (58) для расчета ПИИ.

Как оказалось, результат, полученный с использованием обобщенных формул, также дает асимметрию азимутальной зависимости нормированной ПИИ и практически совпадает с экспериментом (рис. 11, сплошная линия).

Анализируя причины асимметрии азимутальной зависимости было установлено, что этот эффект вызван поведением диффузной компоненты ПИИ. То есть, установлено, что присутствие в кристалле дефектов больших размеров вызывает симметрию азиму-

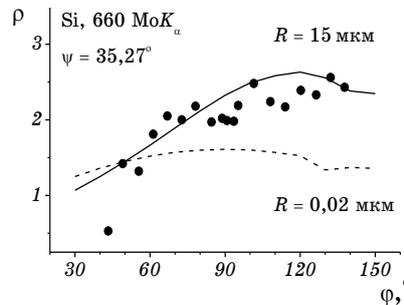


Рис. 11. Экспериментальная (маркеры) и рассчитанная с использованием выражений (50), (58) при значениях среднего радиуса дислокационных петель $R = 15$ мкм (сплошная линия) и $R = 0,02$ мкм (штриховая линия) азимутальные зависимости нормированной ПИИ.

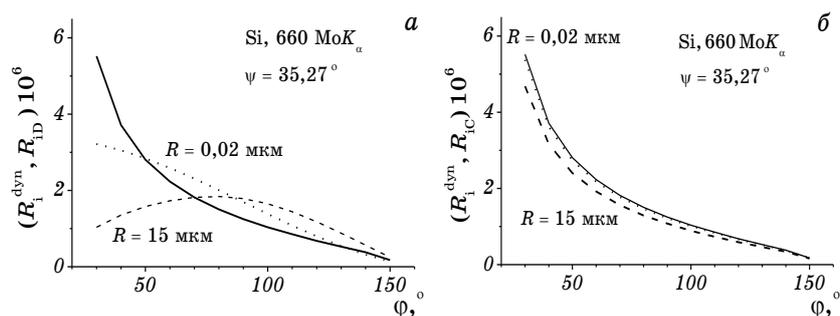


Рис. 12. Рассчитанная азимутальная зависимость ПИИ для идеального кристалла R_i^{dyn} (сплошная линия). Рассчитанные с использованием выражений (50), (58) азимутальные зависимости а) — диффузной составляющей ПИИ (R_{ID}) и б) — когерентной составляющей ПИИ R_{IC} (штриховая линия и пунктирная).

тальной зависимости ненормированной диффузной компоненты (в случае малых дефектов она асимметрична), тогда как азимутальная зависимость когерентной компоненты остается асимметричной (подобно случаю идеального кристалла), что показано на рис. 12.

Таким образом, нормируя азимутальную зависимость ПИИ кристалла с дефектами на аналогичную зависимость ПИИ идеального кристалла, получим симметричную зависимость в случае малых дефектов и несимметричную в случае дефектов больших размеров. Следовательно, благодаря принципиально различному характеру азимутальной зависимости в случаях малых и больших дефектов, и проявления избирательной чувствительности формы зависимости к большим дефектам появляется возможность определения их параметров. Параметры малых дефектов, в случае если они присутствуют в кристалле, можно определить, используя другие условия дифракции для того же образца.

3.4. Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в области K -края поглощения

Для изучения диагностических возможностей при указанных условиях необходимо сначала построить соответствующую теоретическую модель.

В [38] путем фитирования деформационных зависимостей (ДЗ) ПИИ симметричного 220 лауэ-отражения от монокристалла кремния, измеренных при использовании характеристического FeK_α -излучения, получены значения параметров полуфеноменологической модели ПИИ изогнутого толстого кристалла с хаотически рас-

пределенными дефектами. Полученная на ее основе соответствующая модель для скачка (S) ПИИ вблизи K -края поглощения имеет вид [53]:

$$S = R_i(\lambda_1) / R_i(\lambda_2), \text{ где } \lambda_1 = 0,1139 \text{ нм}, \lambda_2 = 0,1094 \text{ нм},$$

$$R_i(\lambda) \equiv R_i = R_{i \text{ coh}}[1 + (BT\mu_0 l) \cdot 0,074] \exp[-(BT\mu_0 l)^2 \cdot 0,00604] +$$

$$+ R_{i \text{ diff}}[1 + (BT\mu_0 l) \cdot 0,0157] \exp[-(BT\mu_0 l)^2 \cdot 0,00044], \quad (59)$$

$$B = \frac{\lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_1 \gamma_2 (1 + \nu)]}{2\pi |\chi_{\text{Hr}}|^2 r d}, \quad T = \frac{\pi t |\chi_{\text{Hr}}|}{\lambda \sqrt{\gamma_1 \gamma_2}},$$

$$\gamma_1 = \cos(\theta_B + \psi), \quad \gamma_2 = \cos(\theta_B - \psi),$$

$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$, a — постоянная решетки, h, k, l — индексы Миллера, r — радиус кривизны цилиндрического изгиба кристалла, $R_{i \text{ coh}} = ER_{\text{ip}} F_{\text{ds}}^{\text{coh}}$ и $R_{i \text{ diff}} = R_i^{\text{kin}} F_{\text{ds}}^{\text{diff}}$ — соответственно когерентная и диффузная компоненты интегральной интенсивности в неизогнутом кристалле, в которых факторы экстинкции определяются выражениями (56) и (48) совместно с (57), E — фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера.

Результаты сравнения расчетов по модели (59) при различных значениях параметра асимметрии ψ для отражений $[2\ 2\ 0]$ и $[2\ 20]$ представлены на рис. 13, *а, б*.

Из рисунка 13 видно, что чем больше деформация, тем заметнее отличие ДЗ скачка ПИИ от рассчитанной ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла. Видно, что это является следствием кардинального различия характера ДЗ скачков для когерентной и для диффузной составляющих ПИИ и, видимо, достаточно заметным вкладом диффузной составляющей.

На рисунке 14 показаны результаты расчетов ДЗ скачка ПИИ в кристаллах с дефектами, нормированной на ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла.

Из рисунка 14 видно, что чем больше толщина кристалла, тем сильнее влияние дефектов на деформационную зависимость ПИИ. При максимальной толщине кристалла 740 мкм, если в неизогнутом кристалле величина скачка ПИИ из-за наличия дефектов увеличивается в 2 раза, то с увеличением степени изгиба ее чувствительность к дефектам сначала уменьшается до нуля, а затем при дальнейшем росте степени изгиба величина скачка уменьшается на два порядка, а чувствительность к дефектам на два порядка возрастает.

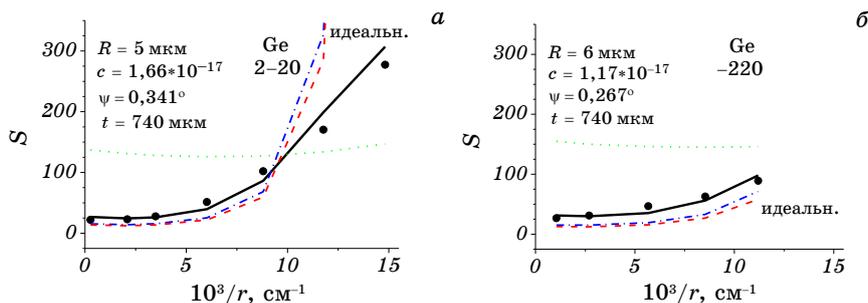


Рис. 13. Рассчитанные (линии) по модели, основанной на формулах (59), и измеренные (маркеры) в работе [39] зависимости скачка ПИИ от деформации у K -края поглощения для кристалла Ge при значении его толщины $t = 740$ мкм. Сплошные линии — ДЗ скачка ПИИ, штрих — ДЗ скачка ее когерентной составляющей, пунктир — ДЗ скачка ее диффузной составляющей, штрих-пунктир — ДЗ скачка ПИИ для идеального кристалла.

Из рисунка 15 видно, что, несмотря на малый угол наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла, деформационная зависимость ПИИ в идеальном кристалле, когерентной составляющей ПИИ и самой ПИИ в кристаллах с дефектами, для коротковолновой границы K -края поглощения резко выражены. Это обусловлено эффектом аномального прохождения, который спадает с уменьшением эффективной толщины ($\mu_0 t$). В то же время из рисунка 15 видно, что в связи с малым углом наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла деформационные зависимости когерентной и диффузной составляющих ПИИ для длинноволновой границы K -края поглощения, а также для диффузной составляющей у коротковолновой границы K -края поглощения практически отсутствуют. Это обусловлено изменением

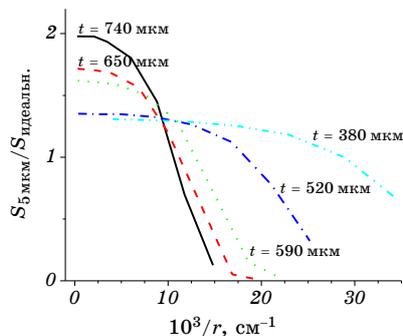


Рис. 14. Рассчитанные по формулам (59) нормированные на ДЗ скачка ПИИ в идеальных кристаллах ДЗ величины скачка ПИИ в кристаллах с дефектами при различных толщинах кристаллов.

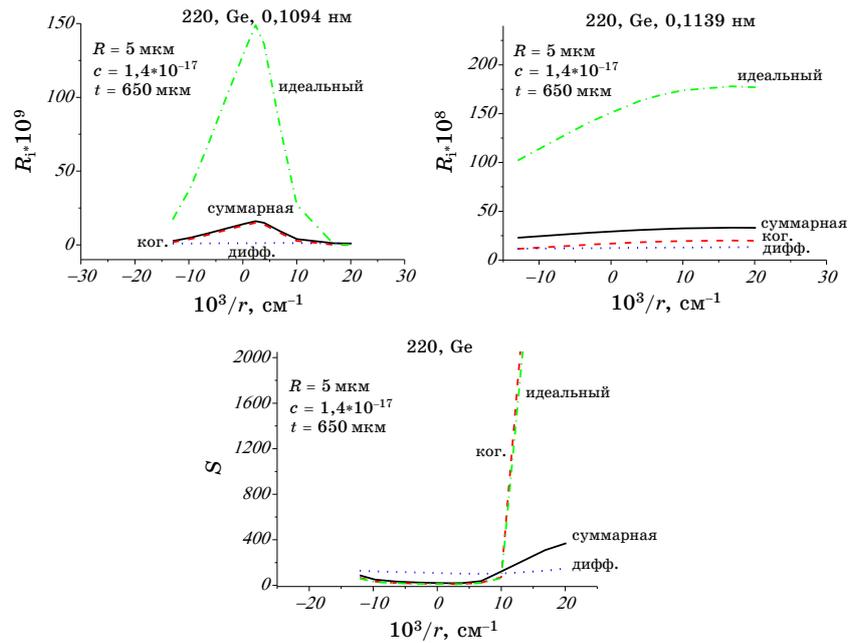


Рис. 15. Рассчитанные по модели, основанной на (59), деформационные зависимости ПИИ в идеальных кристаллах, ПИИ в кристаллах с дефектами, ее брэгговской и диффузной составляющих и их скачка в области К-края поглощения при толщине кристалла $t = 650$ мкм.

результатов конкуренции с изменением $\mu_0 t$ вкладов ДЗ отражающей и поглощающей способностей как для брэгговской, так и для диффузной составляющих в результирующую ДЗ.

3. 5. Деформационные зависимости интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для лауэ-дифракции в условиях нарушения закона Фриделя

На основе полуфеноменологической модели ПИИ изогнутого толстого кристалла с хаотически распределенными дефектами, полученной в работе [38], модель введенного и исследованного в работе [40] параметра асимметрии ДЗ ПИИ можно представить следующим образом [54]:

$$\begin{aligned}
 Y &= R_i(+)/R_i(-), \\
 R_i(+)&= R_{i\text{ coh}}[1 + (BT\mu_0 l) \cdot 0,074] \exp[-(BT\mu_0 l)^2 \cdot 0,00604] + \\
 &+ R_{i\text{ diff}}[1 + (BT\mu_0 l) \cdot 0,0157] \exp[-(BT\mu_0 l)^2 \cdot 0,00044], \quad (60)
 \end{aligned}$$

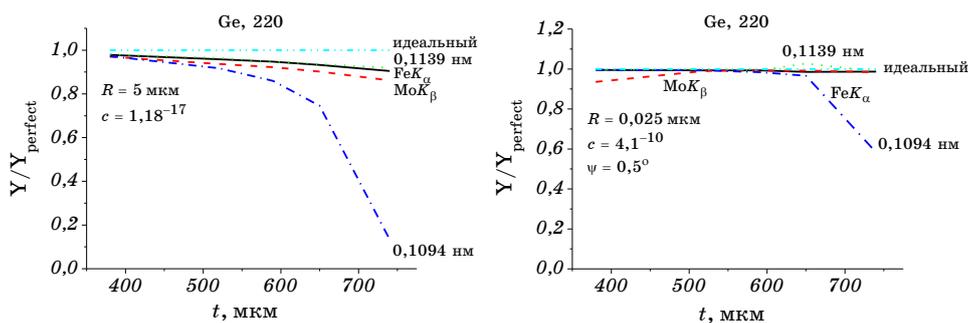


Рис. 16. Рассчитанные зависимости от толщины отношения параметра асимметрии ПИИ $Y = I^{hkl} / I^{hkl}$ кристалла с дефектами (параметры хаотически распределенных в объеме кристалла дислокационных петель (а) средний радиус $R = 5$ мкм и концентрация $c = 1,18 \cdot 10^{-17}$, (б) средний радиус $R = 0,025$ мкм и концентрация $c = 4,1 \cdot 10^{-10}$) к параметру асимметрии ПИИ для идеального кристалла Y_{perfect} . Расчеты проведены при $r = \pm 2,4$ м для случаев: излучения с длиной волны 0,1139 нм, (пунктир), излучения с длиной волны 0,1094 нм, (штрих-пунктир), для FeK_α -излучения (сплошная линия), для MoK_β -излучения (штриховая линия), а также ПИИ для идеального кристалла (двойной штрих-пунктир).

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

Значения среднего радиуса дислокационных петель $R = 5$ мкм и их концентрации $c = 1,69 \cdot 10^{-17}$, взятые при построении толщинных зависимостей параметров асимметрии для кристаллов с дефектами, представленных на рис. 12, близки к значениям параметров дислокационных петель, установленным в работе [38] путем фитирования деформационных зависимостей скачка ПИИ вблизи K -края поглощения, полученных экспериментально авторами работы [39]. Результаты расчетов представлены на рисунке 16.

Из рисунка 16 видно, что для излучения с длиной волны 0,1094 нм присутствие дефектов вызывает заметное уменьшение нормированного коэффициента асимметрии. При этом изменение с увеличением толщины кристалла нормированного коэффициента асимметрии намного чувствительнее к крупным дефектам, чем к мелким.

Из рисунка 17 видно, что для идеального кристалла Y резко возрастает с толщиной для интенсивности сильно поглощающейся длины волны вблизи K -края поглощения. Следовательно, Y резко уменьшается с толщиной для скачка интенсивностей на K -крае, причем указанное уменьшение тем больше, чем больше степень уп-

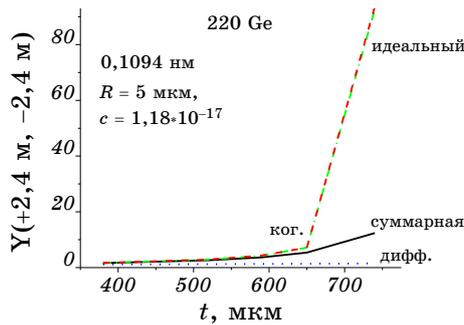


Рис. 17. Рассчитанные зависимости параметра асимметрии $Y = I^{hkl} / I^{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$ от толщины кристалла при $r = \pm 2,4$ м для ПИИ для излучения с длиной волны $\lambda = 0,1094$ нм. Сплошная линия — для ПИИ кристалла с дефектами, штрих — для когерентной составляющей ПИИ, пунктир — для диффузной составляющей ПИИ, штрих-пунктир — для ПИИ в идеальном кристалле.

ругого изгиба образца. При этом отличие указанных зависимостей Y или скачка Y вблизи K -края поглощения для ПИИ в кристалле с дефектами от Y для ПИИ в идеальном кристалле, или его нормированных величин от единицы, демонстрирует высокую чувствительность метода к дефектам.

3. 6. Экспериментальная апробация метода ИДДКД

Совместная комбинированная обработка приведенных экспериментальных данных по толщинным и деформационным зависимостям ПИИ в описанном выше образце при использовании предложенных в работе теоретических моделей в рамках метода ИДДКД позволила установить характеристики двух типов дефектов: крупных дислокационных петель с вектором Бюргера $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R = 5$ мкм, $c = 8,85 \cdot 10^{-18}$ и мелких дислокационных петель с вектором Бюргера $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$, $R = 0,02$ мкм, $c = 1,47 \cdot 10^{-10}$. Величина фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера $E = e^{-L_{ch}} = 0,998$ больше величины динамического фактора Дебая–Валлера для используемого отражения 220: $e^{-M} = 0,966$, т.е. среднеквадратичные смещения атомов, вызванные присутствием дефектов, меньше тепловых. Это говорит о высоком совершенстве исследуемого монокристалла Ge, что подтверждается полученными малыми концентрациями дефектов. Возможность определения параметров дефектов, создающих столь малые искажения, свидетельствует о высокой структурной чувствительности метода ИДДКД.

Также, в качестве иллюстрации преимуществ комбинированной обработки результатов рентгенодифракционного эксперимента, т.е.

ТАБЛИЦА. Характеристики (радиусы R и концентрации c) дефектов, определенные при независимой и комбинированной обработке экспериментальных данных, полученных в разных условиях динамической дифракции, отдельно только для толщинных зависимостей ПИИ и совместно для толщинных и деформационных зависимостей ПИИ (комбинированная обработка).

способ диагностики	Большие петли R , мкм	Большие петли c , см ⁻³	Кластеры R , мкм; Высота дискообразного кластера h , мкм	Кластеры c , см ⁻³	Средние петли R , мкм	Средние петли c , см ⁻³	Малые петли R , мкм	Малые петли c , см ⁻³
толщинные зависимости ПИИ	10 ± 1	$0,5 - 3,3 \times 10^3$	$0,45 \pm 0,01$; $0,012 \pm 0,001$	$(1,12 \pm 0,01) \times 10^7$	$0,45 \pm 0,01$	$(2,6 \pm 0,1) \times 10^6$	$0,001 - 0,033$	$7,3 \times 10^1$
комбинированная обработка (ДДКД)	$8 \pm 0,8$	$(5 \pm 1) \times 10^3$	$0,45 \pm 0,01$; $0,012 \pm 0,01$	$(1,12 \pm 0,01) \times 10^7$	$0,84 \pm 0,01$	$(8,4 \pm 1) \times 10^6$	$0,035 \pm 0,001$	$(2 \pm 0,1) \times 10^1$

методов ИДДКД, приведена таблица, где представлены радиусы и концентрации четырех типов дефектов, определенные при обработке толщинных зависимостей ПИИ и при комбинированной обработке толщинных и деформационных зависимостей ПИИ, полученных в разных условиях динамической дифракции для образца кремния на трехкристальном дифрактометре.

Как видно из таблицы, при обработке результатов эксперимента только для толщинных зависимостей удастся более или менее надежно установить лишь характеристики дефектов средних размеров (дискообразных преципитатов кислорода (кластеров) с высотой h и дислокационных петель среднего радиуса), что объясняется частичной компенсацией вкладов в ПИИ от крупных и мелких дефектов, из-за их различного влияния на брэгговскую и диффузную составляющие динамической картины рассеяния (дефекты с малыми размерами и большой концентрацией преимущественно увеличивают диффузную составляющую, а дефекты больших размеров и малой концентрации преимущественно уменьшают когерентную составляющую). При этом следует напомнить, что кинематическое описание подобных экспериментов в принципе невозможно из-за рассмотренных выше законов сохранения и, как следствие, абсолютной нечувствительности кинематической картины рассеяния к любым видам искажений кристаллической решетки на уровне интегральных отражательных способностей неидеальных кристаллов, а также ее низкой информативности (или полной неадекватности в условиях динамической дифракции) на уровне дифференциальных коэффициентов отражения. При комбинированной же обработке экспериментальных данных по толщинным и деформационным за-

висимостям ПИИ в различных условиях дифракции удается однозначно и с достаточной точностью определить параметры всех четырех типов дефектов, одновременно присутствующих в кристалле, что существенно повышает информативность метода ИДДКД, в том числе, по сравнению с другими динамическими подходами.

Дополнительным преимуществом подхода, использованного выше для определения характеристик нескольких типов дефектов, является применение трехкристальной схемы дифракционного эксперимента. Это позволило в рамках метода ПИИ отдельно измерять интенсивности брэгговских и диффузных волн, т.е. напрямую определять оба структурно-чувствительных параметра динамической теории.

Следует подчеркнуть, что методы ДДКД позволяют «видеть» примеси с концентрацией меньшей, чем миллионные доли процента и смещения атомов, которые в миллион раз меньше, чем размеры самих атомов. Чувствительность наблюдений методами ДДКД структуры дефектов достигает микро- и нанометров, обеспечивая возможность управляемых технологий даже на микро- и наномасштабе.

4. ВЫВОДЫ

В работе детально изложена динамическая теория интегральных интенсивностей рассеяния и проведен анализ динамических экстинкционных эффектов, как для когерентного, так и для диффузного рассеяния. Детально рассмотрен коэффициент экстинкции из-за диффузного рассеяния в случаях присутствия в кристалле, как малых, так и больших дефектов с учетом двух областей рассеяния: Хуаня и Стокса–Вильсона. Представлены выражения для интегральных коэффициентов и факторов экстинкции в случае малых и больших дефектов при малых эффектах экстинкции. Кроме того, в работе получены выражения для интегральных факторов экстинкции при больших эффектах экстинкции и произвольных размерах дефектов. Рассмотрение указанных случаев проводилось в геометриях дифракции по Лауэ и по Брэггу в приближениях толстого и тонкого кристаллов, в которых протекание дифракционных процессов в когерентной и в диффузной компонентах ПИИ существенно различно, что оговорено в соответствующих разделах.

Такое различие в условиях протекания дифракционных процессов обуславливает различный характер зависимостей компонент ПИИ от параметров эксперимента, таких как длина волны, толщина кристаллов, азимутальный угол и пр. Имея выражения для указанных случаев, а также соответствующие экспериментальные данные, проведение диагностики дефектов нескольких типов в кристаллах становится значительно надежнее и информативнее, нежели в случае исследования какого-либо одного условия дифракции.

Комбинированное использование различных условий дифракции для одного и того же образца представляет собой новое поколение диагностики, названное диффузнодинамической комбинированной дифрактометрией [23, 24, 51, 52].

В данной работе рассмотрены в качестве примера дефекты кулоновского типа, а именно, дислокационные петли и сферические кластеры. Однако полученные выражения также использовались как базис для построения теоретических моделей в случаях других типов искажений кристаллической решетки, например таких, как упругий изгиб, нарушенный поверхностный слой, неравномерное распределение дефектов с глубиной и т.п., а также для построения динамических моделей в различных гетероструктурах [22].

Таким образом, в настоящей работе созданы теоретические основы для реализации нового метода интегральной диффузнодинамической комбинированной дифрактометрии (ИДДКД).

В работе также проведен детальный сравнительный анализ информативных возможностей кинематической и динамической картин рассеяния на основе результатов соответственно кинематической и динамической теорий интегральных интенсивностей рассеяния и распределений интенсивностей в пространстве обратной решетки. Во-первых, установлено, что физической причиной, которая существенно ограничивает информативность кинематической картины рассеяния и описывающей ее теории, оказывается наличие двух интегральных параметров кинематической картины рассеяния и соответственно двух законов сохранения кинематической теории, а именно независимости полной интегральной интенсивности дифракционного отражения (первый параметр) от характеристик дефектов (первый закон) и отсутствия зависимости от условий дифракции удельного вклада в эту интегральную интенсивность ее диффузной составляющей (вторые соответственно параметр и закон сохранения).

Во-вторых, показано, что именно нарушение этих законов при динамической дифракции и ряд следствий из этого составляют физическую природу радикального повышения информативности ДДКД и обеспечивают появление возможности диагностики кристаллов с дефектами нескольких типов и многопараметрических наносистем при переходе от кинематической картины рассеяния Кривоглаза к динамической, т.е. при обобщении теории Кривоглаза на случай динамического рассеяния. При динамической дифракции оба из введенных здесь параметров (первый — общая яркость отражения и второй — доля в общей яркости ее диффузной составляющей) становятся структурно-чувствительными и при этом многомерными, т.е. зависящими от условий дифракции, а динамическая картина рассеяния становится многообразной. То есть, для всех экспериментально возможных условий динамической ди-

фракции существуют своя динамическая картина рассеяния и своя пара интегральных параметров (или их распределений в обратном пространстве) этой картины со своим (разным для различных условий дифракции) характером влияния дефектов кристалла как на саму картину рассеяния в целом, так и на оба ее параметра в отдельности. На этой основе разработаны новые принципы повышения информативности диагностики и обеспечены новые функциональные возможности разработанных методов диффузодинамической комбинированной дифрактометрии.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. W. C. Röntgen, *Nobel Lectures. Physics 1901–1921* (Amsterdam: Elsevier Publishing Co.: 1967).
2. M. Von Laue, *Röntgenstrahlinterferenzen* (Leipzig: Akademische Verlagsges: 1948), p. 410.
3. C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction. 2nd Ed.* (London: Oxford University Press: 2001), p. 320.
4. R. W. James, *Solid State Phys.*, **15**: 55 (1963).
5. B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.*, **36**: 681 (1964).
6. А. И. Ахиезер, И. Я. Померанчук, *Некоторые вопросы теории ядра* (ОГИЗ: 1948).
7. М. А. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996), p. 466.
8. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *ФММ*, **24**, № 3: 385 (1967).
9. В. Б. Молодкин, *ФММ*, **25**, № 3: 410 (1968).
10. В. Б. Молодкин, *ФММ*, **27**, № 4: 582 (1969).
11. В. Б. Молодкин, *Металлофизика*, **2**, № 1: 3 (1980).
12. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**: 615 (1981).
13. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 1 (1984).
14. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 847 (1985).
15. V. V. Kochelab, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Status Solidi A*, **108**, No. 1: 67 (1988).
16. Л. И. Даценко, В. Б. Молодкин, М. Е. Осиновский, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (Киев: Наукова думка: 1988), с. 200.
17. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len et al., *Phys. Status Solidi B*, **227**, No. 2: 429 (2001).
18. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len et al., *Phys. Status Solidi B*, **231**, No. 1: 199 (2002).
19. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, О. С. Кононенко, А. А. Катасонов и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 7: 887 (2007).
20. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, О. С. Кононенко, А. А. Катасонов и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 9: 1225 (2007).
21. С. И. Олиховский, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, О. С. Кононенко и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **29**, № 10: 1333 (2007).

22. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, А. П. Шпак, В. Ф. Мачулин и др., *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика: 2005).
23. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak, S. I. Olikhovskii et al. *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (New Jersey: Momentum Press: 2009), p. 401.
24. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаузов, В. В. Молодкин и др., *Успехи физ. мет.*, **9**, № 3: 305 (2008).
25. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, Г. І. Низкова, І. В. Гінько та ін., *Спосіб багатопараметричної структурної діагностики монокристалів з декількома типами дефектів* (Патент України № 36075) (Зареєстровано в Державному реєстрі патентів України на винаходи 10 жовтня 2008).
26. А. Н. Багов, Ю. А. Динаев, А. А. Дышеков, Т. И. Оранова и др., *Рентгенодифракционная диагностика упруго-напряженного состояния наногетероструктур* (Нальчик: Каб.-Балк. ун-т: 2008), с. 206.
27. А. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy et al., *Phys. Status Solidi A*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
28. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, I. M. Fodchuk et al., *Phys. Status Solidi A*, **204**, No. 8: 2606 (2007).
29. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика* (Москва: Наука: 1982).
30. Е. А. Тихонова, *ФТТ*, **9**, № 2: 516 (1967).
31. Р. Н. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1306 (1970).
32. В. В. Немошкаленко, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 2: 51 (2000).
33. С. Й. Оліховський, С. М. Кисловський, В. Б. Молодкін, Є. Г. Лень та ін., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 6: 3 (2000).
34. В. Г. Барьяхтар, Е. Н. Гаврилова, В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, *Металлофизика*, **14**, № 11: 68 (1992).
35. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. V. Kovalchuk et al., *Nucl. Instrum. and Meth. in Physics Research A*, **308**, № 1: 294 (1991).
36. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев, Е. Г. Лень и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 7: 953 (2006).
37. В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак, А. А. Белоцкая и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **28**, № 8: 1047 (2006).
38. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1189 (2008).
39. Л. И. Даценко, Е. Н. Кисловский, *УФЖ*, **20**, № 5: 810 (1975).
40. L. I. Datsenko, E. N. Kislovsky, and I. V. Prokopenko, *УФЖ*, **22**: 513 (1977).
41. В. Б. Молодкин, Г. И. Гудзенко, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, *Металлофизика*, **5**, № 3: 10 (1983).
42. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, А. Н. Гуреев и др., *Металлофизика*, **6**, № 2: 18 (1984).
43. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осиновский, А. Н. Гуреев и др., *Металлофизика*, **6**, № 3: 105 (1984).
44. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii, A. N. Gureev et al., *Phys. Status Solidi A*, **87**, No. 2: 597 (1985).
45. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, and M. T. Kogut, *Металлофизика*, **16**, № 2: 48 (1994).
46. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, *Успехи физ. мет.*, **5**, № 1: 51

- (2004).
47. А. И. Низкова, В. Б. Молодкин, И. А. Московка, *Металлофиз. новейшие технол.*, **26**, № 6: 783 (2004).
 48. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, *Успехи физ. мет.*, **5**, № 1: 51 (2004).
 49. В. Б. Молодкин, В. В. Немощкаленко, А. И. Низкова, С. И. Олиховский и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **22**, № 3: 3 (2000).
 50. В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, С. В. Дмитриев, Е. Г. Лень и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **27**, № 12: 1659 (2005).
 51. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, T. P. Vladimirova et al., *Phys. Rev. B*, **78**: 224109 (2008).
 52. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, В. Л. Носик и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 5: 615 (2009).
 53. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, В. Л. Носик и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 7: 927 (2009).
 54. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, В. Л. Носик и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 8: 1041 (2009).