

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

## **Новые подходы и возможности динамической дифрактометрии несовершенств многопараметрических систем**

В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, Н. Г. Толмачев,  
Е. С. Скакунова, С. В. Дмитриев, Б. В. Шелудченко, С. М. Бровчук,  
Л. Н. Скапа, Р. В. Лехняк, В. В. Молодкин, Е. В. Фузик

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

Работа посвящена обсуждению открытого авторами, неизвестного ранее явления усиления на несколько порядков величины проявления дефектов в статистической картине многократного рассеяния, возможностей использования этого явления, а также установленной авторами его дисперсионной природы. Отмечается, что в отличие от статистической кинематической теории (приближение однократного рассеяния), в которой дефекты проявляют своё влияние только на амплитуды рассеянных волн (амплитуды рассеяния), при многократном (динамическом) рассеянии дополнительно формируется принципиально новый механизм влияния искажений не на амплитуды, а на волновые вектора рассеянных волн. Обнаруженный механизм экспоненциально более эффективный за счёт влияния дефектов непосредственно на показатель экспоненты (на фазу волновой функции), а характер этого влияния дефектов оказывается управляемым условиями дифракции (длина волны, толщина объекта, геометрия и углы дифракции и др.). В случае наиболее простой и экспрессной интегральной дифрактометрии обсуждаются установленные ранее авторами два закона сохранения (т.е. независимости от характеристик искажений кристаллов) первого параметра кинематической теории интегральных интенсивностей, а именно, полной (брэгговской и диффузной) интегральной интенсивности рассеяния, и сохранения (т.е. независимости от условий дифракции) второго параметра кинематической теории интегральных интенсивностей, а именно, вклада диффузной составляющей в полную интегральную интенсивность. Демонстрируется, что эти законы оказываются справедливыми в случае кинематического рассеяния и существенно ограничивают чувствительность и информативность кинематической картины рассеяния. В тоже время обнаруженный дисперсионный механизм влияния дефектов на картину многократного рассеяния приводит к ориентационно-интерференционным эффектам в отражательной и поглощательной способностях кристаллов, что обуслав-

лишает нарушение этих законов сохранения при переходе к случаям многократного рассеяния и обеспечивает этим уникальные показатели чувствительности и информативности диагностики на основе измерений полной интегральной интенсивности динамической дифракции и её диффузной составляющей, а также их зависимостей от дифракционных условий. В результате открытое явление и целый ряд являющихся следствием из него эффектов, а также их дисперсионная природа позволили авторам статьи существенно расширить функциональные возможности диагностики и создать целый ряд методов нового поколения, которые не только на несколько порядков величины повысили чувствительность, но и позволили решить проблему однозначной диагностики многопараметрических систем путём комбинирования измерений картины многократного рассеяния в различных условиях дифракции.

Роботу присвячено обговоренню відкритого авторами, невідомого раніше явища підсилення на кілька порядків величини прояву дефектів у статистичній картині багаторазового розсіяння, можливостей використання цього явища, а також встановленої авторами його дисперсійної природи. Відзначається, що на відміну від статистичної кінематичної теорії (наближення одноразового розсіяння), в якій дефекти проявляють свій вплив лише на амплітуди розсіяних хвиль (амплітуди розсіяння), за багаторазового (динамічного) розсіяння додатково формується принципово новий механізм впливу спотворень не на амплітуди, а на хвильові вектори розсіяних хвиль. Виявлений механізм експоненційно більш ефективний за рахунок впливу дефектів безпосередньо на показник експоненти (на фазу хвильової функції), а характер цього впливу дефектів виявляється керованим умовами дифракції (довжина хвилі, товщина об'єкту, геометрія і кути дифракції та ін.). У випадку найбільш простої та експресної інтегральної дифрактометрії обговорюються встановлені раніше авторами два закони збереження (тобто незалежності від характеристик спотворень кристалу) першого параметра кінематичної теорії інтегральних інтенсивностей, а саме, повної (Бреггової та дифузної) інтегральної інтенсивності розсіяння, і збереження (тобто незалежності від умов дифракції) другого параметра кінематичної теорії інтегральних інтенсивностей, а саме, внеску дифузної складової в повну інтегральну інтенсивність. Демонструється, що ці закони виявляються справедливими у випадку кінематичного розсіяння і істотно обмежують чутливість та інформативність кінематичної картини розсіяння. В той же час виявлений дисперсійний механізм впливу дефектів на картину багаторазового розсіяння призводить до орієнтаційно-інтерференційних ефектів у відбивній та поглинальній здатностях кристалів, що обумовлює порушення цих законів збереження при переході до випадків багаторазового розсіяння та забезпечує цим унікальні показники чутливості й інформативності діагностики на основі вимірювань повної інтегральної інтенсивності динамічної дифракції та її дифузної складової, а також їх залежностей від дифракційних умов. В результаті відкрите явище та цілий ряд ефектів, які з нього випливають, і його дисперсійна природа уможливили авторам статті істотно розширити функціональні можливості діагностики й створити цілий ряд методів нового покоління, які не лише на кілька порядків величини підвищили чутливість, але й уможливили розв'язати проблему однозначної

діягностики багатопараметричних систем шляхом комбінування вимірювань картини багаторазового розсіяння за різних умов дифракції.

This review deals with discussions of findings of authors, the previously unknown phenomenon of amplification of manifestation of defects in statistical pattern of multiple scattering by several orders of magnitude as well as possibilities of using this phenomenon, taking into account its dispersive nature, which is also established by authors. As stressed, there is an additional new mechanism of influence of distortions on the wave vectors of scattered waves rather than on the amplitudes in case of multiple (dynamical) scattering (in contrast to the traditionally used kinematical theory, *i.e.* single-scattering approach). The revealed mechanism is exponentially more effective due to influences of defects on the power exponent directly (*i.e.* on the wave-function phase). The character of this influence is found to be controlled by the diffraction conditions (wavelength, object thickness, geometry and diffraction angles, *etc.*). For case of the most simple and express integral diffractometry, we discuss our previously established two conservation laws for the first and second parameters of kinematical theory of integral intensities. These are independence on characteristics of crystal distortions, namely, total (Bragg and diffuse) integral intensity of scattering, and independence on diffraction conditions, namely, diffuse component contribution to the total integral intensity. As demonstrated, these laws, being correct within the kinematical scattering, essentially restrict sensitivity and informativity of kinematical scattering pattern. At the same time, the revealed dispersion mechanism of the influence of defects on the multiple-scattering pattern results in the orientation-interference effects in the reflectivity and absorptivity of the crystals that causes violation of these laws in case of multiple scattering and hereby ensures unique indexes of sensitivity and informativity of diagnostics based on measurements of total integral intensity of dynamical diffraction and its diffusion component as well as their dependences on diffraction conditions. As a result, the discovered phenomenon and following effects as well as their dispersion nature allowed authors essentially extend diagnostics features and create state-of-the-art methods, which not only increased diagnostics sensitivity by several orders of magnitude, but also solved the problem of unambiguous diagnostics of multiparameter systems by means of combining measurements of multiple-scattering pattern in different diffraction cases.

**Ключевые слова:** динамическая дифрактометрия, дисперсионный механизм, многопараметрическая диагностика, микродефекты.

*(Получено 7 июня 2014 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Классическая кристаллография [1–4] изучает параметры только идеально периодических кристаллических решёток; кристаллография на диффузном рассеянии [5] изучает отклонения от периодичности, обуславливающие это диффузное рассеяние, т.е.

количественно устанавливает без разрушений характеристики дефектов и параметры искусственно созданных нанотехнологиями сверхструктур, которые и определяют основные физические свойства разрабатываемых материалов.

Именно эффекты многократности диффузного и брэгговского рассеяния (как рентгеновских лучей, так и нейтронов и других частиц) обеспечили, как показано авторами в самое последнее время в работах [6–9], возможность повышения на несколько порядков величины чувствительности картины к характеристикам дефектов. Показано также появление зависимости от условий дифракции этой чувствительности и самого характера влияния дефектов на картину динамического рассеяния. В результате продемонстрирована возможность экспериментальной реализации впервые многопараметрической и при этом существенно более высокочувствительной диагностики.

Как известно [1–36], динамическая теория рассеяния излучений в монокристаллах с однородно распределёнными дефектами различного типа предсказывает и описывает достаточно большое количество разнообразных эффектов многократности брэгговского и диффузного рассеяния и механизмов их проявления, которые принципиально отсутствуют при кинематическом рассеянии. К числу таких эффектов могут быть отнесены эффекты экстинкции и аномального прохождения как для брэгговской, так и для диффузной составляющих, обусловленные их интерференционным (стоячим) характером, и эффекты их существенно более высокой структурной чувствительности, которые получили количественное описание [10–16], наиболее чувствительный к дефектам эффект экстинкции за счёт диффузного рассеяния на отклонениях от периодичности кристаллов [10], эффект зависящего от условий дифракции аномального роста вклада диффузной составляющей, например, с увеличением толщины кристалла [15, 16], а также описанные в [6–9, 15, 16, 19–21] эффекты появления чувствительности к искажениям интегральной интенсивности и зависимости вклада диффузной составляющей от условий дифракции при переходе от кинематического к динамическому случаю и др.

Все эти эффекты и механизмы их проявления устанавливались в разное время и использовались для диагностики на протяжении последних вот уже почти 50 лет. Однако только в самые последние 2–3 года стала проясняться главная их общая особенность, т.е. их физическая природа, которая позволила радикально изменить облик современной кристаллографии.

Настоящая работа посвящена обсуждению дисперсионной природы уникальной чувствительности и информативности динамической дифрактометрии несовершенств структуры кристаллов.

Следует отметить, что обобщения динамической теории рассеяния в кристаллах с дефектами, созданной в [10–16], и её развитие, направленное на совершенствование и создание более общих методических подходов, а также расширения областей их применимости успешно реализованы в последующих работах [17–32, 34, 35], результаты которых подтверждают те основные результаты и выводы из работ [6–16], которые обобщены ниже. Кроме того, следует отметить ставшую классической работу Като [33], которая по названию совпадает с тематикой работ [10–32, 34, 35], поскольку также посвящена созданию статистической динамической теории дифракции. Однако в работе Като вообще не рассматриваются кристаллы с дефектами, а решается проблема статистических усреднений по мозаичности кристаллов. Никаких формул, связывающих распределение интенсивности дифракции в пространстве обратной решётки либо интегральную интенсивность рассеяния с характеристиками конкретных дефектов, теория Като, в отличие от теории, развитой в [6–32, 34, 35], не даёт. При этом, как и работы [29–32], теория Като основана на решении не уравнений Шредингера или Максвелла, а на решении уравнений Такаги, которые справедливы только для плавных полей смещений, и по этой причине неприменимы или недостаточно количественно корректны для микродефектов, особенно наноразмерных дефектов.

## 2. ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ В КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ

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  $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = E_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r} + it\omega/c}$ , где  $\mathbf{r}$  — пространственная координата,  $t$  — время,  $\omega$  и  $c$  — соответственно частота и скорость света,  $E_0$  — амплитуда падающей волны. Такие амплитуды можно найти, решая волновое уравнение

$$\Delta \mathbf{D}(\mathbf{r}) + K^2 \mathbf{D}(\mathbf{r}) + \text{rot rot}(\chi(\mathbf{r})\mathbf{D}(\mathbf{r})) = \mathbf{0}, \quad (1)$$

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

В отличие от восприимчивости идеального кристалла, являющейся периодической функцией пространственной координаты,

которую можно разложить в ряд Фурье, в кристалле с дефектами  $\chi(\mathbf{r})$  не будет периодической, но её можно представить в виде интеграла Фурье:

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

где  $\mathbf{G}$  — вектор обратной решётки, соответствующий периодической «в среднем» составляющей восприимчивости кристалла, умноженный на  $2\pi$ ,  $\mathbf{q}$  — переданный импульс за счёт рассеяния на искажениях, вызванных дефектами,  $V_c$  — объём элементарной ячейки кристалла.

Представляя индукцию волны  $\mathbf{D}(\mathbf{r})$ , как и восприимчивость, в виде интеграла Фурье,

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

и подставляя (2) и (3) в уравнение (1), для амплитуд волн получим следующую бесконечную систему уравнений [25]:

$$(\mathbf{K}^2 - k^2) \mathbf{D}_k - \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{G}+\mathbf{q}} \mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \mathbf{D}_{\mathbf{k}-\mathbf{G}-\mathbf{q}} = \mathbf{0}, \quad (4)$$

Переходя к важному с точки зрения практического применения двухволновому случаю динамической дифракции, в рамках развитой в [10–18] теории возмущений (ТВ) можно получить 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 решётки):

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_0 + \chi_0) D_0 + CE\chi_{-\mathbf{H}} D_H = -\sum_{\mathbf{q}} (\delta\chi_{\mathbf{q}} D_{-\mathbf{q}} + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}-\mathbf{q}}), \\ CE\chi_{\mathbf{H}} D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0) D_H = -\sum_{\mathbf{q}} (C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{-\mathbf{q}} + \delta\chi_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}-\mathbf{q}}), \end{cases} \quad (5)$$

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

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_{0q} + \chi_0) D_q + CE\chi_{-\mathbf{H}} D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = -(\delta\chi_{\mathbf{q}} D_0 + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}) - \\ \quad - \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}} (\delta\chi_{\mathbf{q}'} D_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} + C\delta\chi_{-\mathbf{H}+\mathbf{q}'} D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}), \\ CE\chi_{\mathbf{H}} D_q + (-2\varepsilon_{Hq} + \chi_0) D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = -(C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} D_0 + \delta\chi_{\mathbf{q}} D_{\mathbf{H}}) - \\ \quad - \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}} (C\delta\chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}'} D_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} + \delta\chi_{\mathbf{q}'} D_{\mathbf{H}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}), \end{cases} \quad (6)$$

где ошибки возбуждения определены как

$$\begin{aligned}\varepsilon_0 &= \frac{K_0 - K}{K} \approx \frac{K_0^2 - K^2}{2K^2}, & \varepsilon_{\text{H}} &= \frac{K_{\text{H}} - K}{K} \approx \frac{K_{\text{H}}^2 - K^2}{2K^2}, \\ \varepsilon_{0\mathbf{q}} &= \frac{K_{0\mathbf{q}} - K}{K} \approx \frac{K_{0\mathbf{q}}^2 - K^2}{2K^2}, & \varepsilon_{\text{H}\mathbf{q}} &= \frac{K_{\text{H}\mathbf{q}} - K}{K} \approx \frac{K_{\text{H}\mathbf{q}}^2 - K^2}{2K^2},\end{aligned}$$

а компоненты Фурье флуктуационной части восприимчивости кристалла задаются выражением

$$\delta\chi_{\text{G}+\mathbf{q}} = \chi_{\text{G}+\mathbf{q}} - \chi_{\text{G}}\delta_{0,\mathbf{q}}, \quad (7)$$

где  $E = e^{-L_{\text{H}}}$  — фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера,  $\chi_0, \chi_{\pm\text{H}}$  — Фурье-компоненты восприимчивости кристалла,  $C$  — поляризационный множитель ( $C = 1$  для  $\sigma$ -поляризации,  $C = \cos 2\theta_{\text{B}}$  для  $\pi$ -поляризации, где  $\theta_{\text{B}}$  — угол Брэгга), а

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

Выражение (7), определяющее Фурье-компоненту восприимчивости кристалла с дефектами  $\chi_{\text{G}+\mathbf{q}}$ , которая рассматривается как сумма Фурье-компонент средней восприимчивости  $\chi_{\text{G}}e^{-L_{\text{G}}}\delta_{0,\mathbf{q}}$  и флуктуационной части восприимчивости  $\delta\chi_{\text{G}+\mathbf{q}}$ , позволяет при решении неоднородных систем (5) и (6) воспользоваться методом модифицированной ТВ [11, 12]. При значении фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера  $E = 1$ , т.е. при отсутствии дефектов и, следовательно, при  $\delta\chi = 0$ , правые части систем (5) и (6) обнуляются, и они сводятся к системе, известной для случая идеальных кристаллов. В случае кристаллов с дефектами, подставляя решения системы уравнений (6) в (5) и используя метод модифицированной ТВ, получим следующую основную систему уравнений для сильных брэгговских волн во втором приближении ТВ:

$$\begin{aligned}(-2\varepsilon_0 + \chi_0 + \Delta\chi_{00})D_0 + (CE\chi_{-\text{H}} + \Delta\chi_{0\text{H}})D_{\text{H}} &= 0, \\ (CE\chi_{\text{H}} + \Delta\chi_{\text{H}0})D_0 + (-2\varepsilon_{\text{H}} + \chi_0 + \Delta\chi_{\text{H}\text{H}})D_{\text{H}} &= 0,\end{aligned} \quad (8)$$

где дисперсионные поправки к восприимчивости, которые обусловлены учётом процессов двукратного рассеяния на полях смещений атомов от дефектов, определяются выражениями [10–18]:

$$\begin{aligned}\Delta\chi_{00} &= -\sum_{\mathbf{q}} (-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0)V_{00}(\mathbf{q})/d(\mathbf{q}), & \Delta\chi_{\text{H}\text{H}} &= -\sum_{\mathbf{q}} (-2\varepsilon_{\text{H}\mathbf{q}} + \chi_0)V_{\text{H}\text{H}}(\mathbf{q})/d(\mathbf{q}), \\ \Delta\chi_{0\text{H}} &= C\sum_{\mathbf{q}} \chi_{-\text{H}}V_{0\text{H}}(\mathbf{q})/d(\mathbf{q}), & \Delta\chi_{\text{H}0} &= C\sum_{\mathbf{q}} \chi_{\text{H}}V_{\text{H}0}(\mathbf{q})/d(\mathbf{q}),\end{aligned} \quad (9)$$

$$d(\mathbf{q}) = (-2\varepsilon_{0\mathbf{q}} + \chi_0)(-2\varepsilon_{\mathbf{H}\mathbf{q}} + \chi_0) - C^2 E^2 \chi_{\mathbf{H}} \chi_{-\mathbf{H}} = 0. \quad (10)$$

В обобщённом виде для (9) будем иметь:

$$\Delta\chi_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = \sum_{\mathbf{q}} \tilde{f}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{q}) V_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{q}) / d(\mathbf{q}), \quad (11)$$

где

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

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

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

В работах [6–32] на основе решения систем (5)–(11) получены аналитические формулы, связывающие характеристики дефектов произвольных типов с наблюдаемыми параметрами картины многократного рассеяния с учётом инструментальных факторов в случаях различных методик (интегральных, дифференциально-интегральных и дифференциальных). Результаты этих работ обобщены в монографиях [34, 35] и составляют теоретические основы современной динамической дифрактометрии несовершенств кристаллов. Однако их эффективное использование сдерживается из-за отсутствия ответа на вопрос: «Какие преимущества динамической дифрактометрии и в чём их физическая природа?».

### 3. ДИСПЕРСИОННЫЙ МЕХАНИЗМ ВЛИЯНИЯ ДЕФЕКТОВ НА КАРТИНУ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ

Для выяснения природы принципиальных отличий диагностических возможностей динамической и кинематической картин рассеяния следует отметить, что при кинематическом рассмотрении в нулевом приближении ТВ остаётся отличной от нуля только одна амплитуда  $D_0$ . При этом системы уравнений (5), (6) и (8) преобразуются в формулы (12), (13) для неизвестных амплитуд волн, появляющихся в первом порядке ТВ и выражающихся через известную амплитуду  $D_0$ :

$$(K_{\mathbf{H}}^2 - K^2)D'_{\mathbf{H}} = \chi_{\mathbf{H}}D_0, \quad (12)$$

$$(K_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}^2 - K^2)D'_{\mathbf{H}+\mathbf{q}} = \chi_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}D_0. \quad (13)$$

Как видно, амплитуды рассеянных брэгговских  $D'_{\mathbf{H}}$  и диффузных  $D'_{\mathbf{H}+\mathbf{q}}$  волн определяются матричными элементами соответственно



от периодической «в среднем» ( $\chi_H$ ) и флуктуационной ( $\chi_{H+q}$ ) частей восприимчивости кристалла, взятыми между начальным ( $D_0$ ) и конечными (соответственно  $D'_H$  и  $D'_{H+q}$ ) состояниями.

Именно таким образом и реализуется амплитудный механизм влияния несовершенств структуры на кинематическую картину рассеяния. По характеру этого влияния и проведена М. А. Кривоглазом [5] качественная и количественная классификация дефектов, используемая и сегодня в большинстве лабораторий мира как теоретическая основа структурной диагностики.

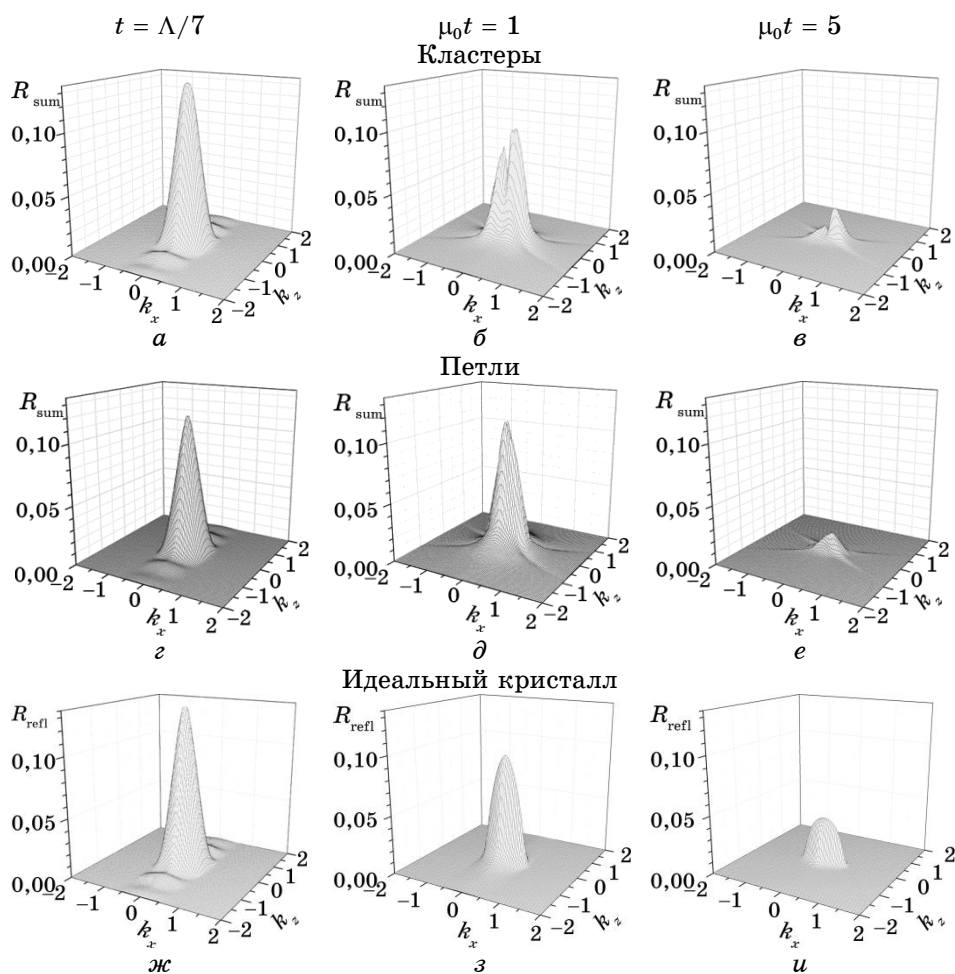
Однако, при динамическом рассмотрении формулы (12) и (13) заменяются системами уравнений (5), (6) и (8). Эти системы вместе с условиями их разрешимости (новый закон дисперсии) и граничными условиями обеспечивают и описывают, как показывает их анализ, новый механизм влияния несовершенств структуры на картину многократного рассеяния. А именно, влияние дефектов оказывается возможным не только на амплитуду рассеяния (амплитудный механизм), а и непосредственно на волновые вектора рассеянных волн через закон дисперсии (дисперсионный механизм). При этом влияние дефектов становится экспоненциально усиленным и управляемым целенаправленным изменением условий дифракции, т.к. влияния дефектов и условий дифракции перепутываются в фазе волны и становятся взаимосвязанными. В результате обнаруживается уникальная чувствительность к характеристикам дефектов оказавшихся существенно усиленными дисперсионным механизмом зависимостей от условий дифракции картин многократного рассеяния. Это и обеспечивает радикальную перестройку диагностических возможностей при использовании динамической дифракции.

#### **4. УНИКАЛЬНО ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ К ДЕФЕКТАМ ЗАВИСИМОСТИ ОТ УСЛОВИЙ ДИФРАКЦИИ ДИНАМИЧЕСКОЙ КАРТИНЫ РАССЕЯНИЯ**

Иллюстрация уникальной чувствительности к характеристикам дефектов зависимостей от условий дифракции картины многократного рассеяния представлена на рис. 1.

Результаты количественной оценки повышения чувствительности к дефектам различного типа динамической картины рассеяния представлены на рис. 2. Демонстрируется увеличение чувствительности диагностики на порядки величины при переходе от кинематической к динамической дифракции.

Обнаруженная уникальная чувствительность к дефектам зависимостей от условий дифракции динамической картины наблюдается экспериментально и может быть положена в основу решения проблемы однозначной диагностики многопараметрических



**Рис. 1.** Распределение интенсивности рассеяния в плоскости дифракции для случая Лауэ, излучение  $\text{CuK}\alpha$ , кластеры и дислокационные петли, кинематически «тонкий» ( $\mu_0 t = 0,04$ ), динамически «тонкий» ( $\mu_0 t = 1$ ) и динамически «толстый» ( $\mu_0 t = 5$ ) кристаллы.

систем путём использования комбинированного подхода при обработке экспериментальных картин рассеяния в выбранных условиях динамической дифракции.

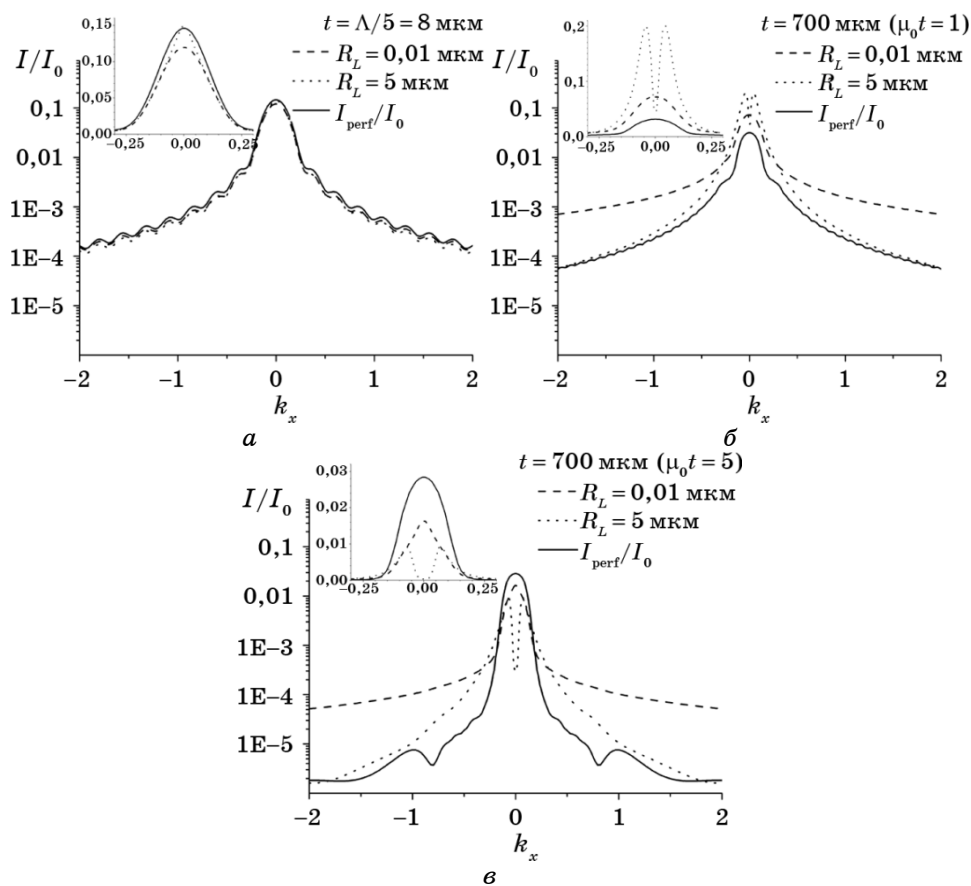
## 5. КОМБИНИРОВАННЫЙ ПОДХОД В ДИФФУЗНО ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Результаты экспериментальной апробации многопараметрической

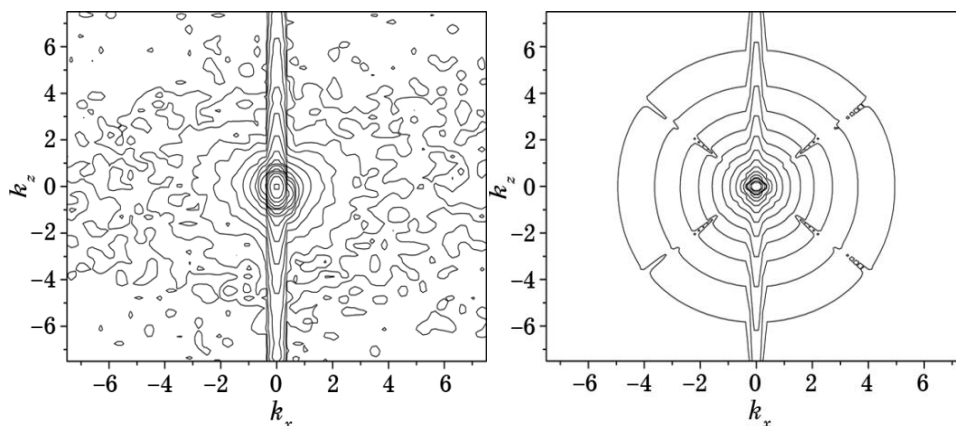
диффузно динамической комбинированной дифрактометрии кристаллов с несколькими типами дефектов представлены ниже.

Результаты комбинированной обработки, представленных на рис. 3–5 экспериментальных данных, приведены в табл. 1.

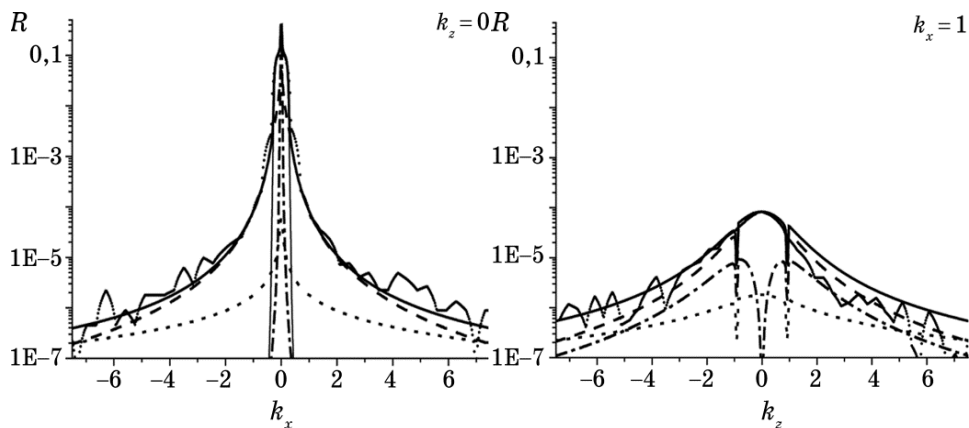
Этими результатами продемонстрированы возможности диагностики дефектов трёх типов с рекордно низкими концентрациями [8].



**Рис. 2.** Изменение характера влияния мелких и крупных дефектов при вариации условий Лауэ-дифракции (толщины кристалла) на динамическую картину рассеяния (ТКД-профили полной интенсивности при  $k_z = 0$ ) для кристаллов Si (рефлекс (220), излучение  $MoK_{\alpha 1}$ ): *а*) — кинематический предел, *б*) — динамически «тонкий» и *в*) — динамически «толстый» кристаллы. Концентрации дислокационных петель двух радиусов выбраны так, чтобы среднеквадратичные смещения атомов матрицы были одинаковы ( $L_H = 0,12$ ).



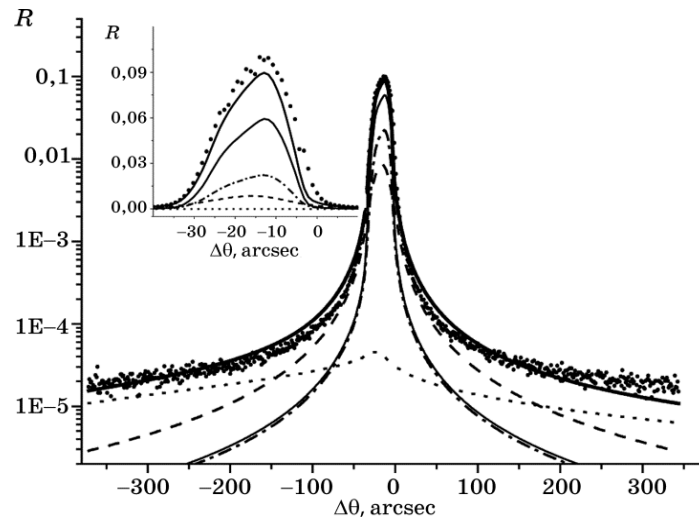
**Рис. 3.** Экспериментальная (слева) и рассчитанная (справа) карты обратного пространства образца Cz-Si, геометрия Брэгга, рефлекс 333,  $\text{CuK}_{\alpha 1}$  излучение ( $k_x$  и  $k_z$  измеряются в  $\text{r.l.u.} \cdot 10^{-4}$ ).



**Рис. 4.** Поперечное (слева) и продольное (справа) сечения карты обратного пространства, измеренной на ТОД (см. рис. 3). Измеренный и рассчитанный профили представлены соответственно маркерами и толстой сплошной линией, последний содержит когерентную компоненту и вклады в ДР от крупных и мелких дислокационных петель и сферических преципитатов кислорода (тонкая сплошная, штрихпунктирная, пунктирная и штриховая линии соответственно).

## 6. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ КОМБИНИРОВАННОЙ ДИФФУЗНО ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Наиболее чувствительные и принципиально новые методы полной интегральной интенсивности (ПИИ) динамической дифракции.



**Рис. 5.** Экспериментальные и теоретические кривые отражения (соответственно маркёры и толстые линии) для образца Cz-Si, рефлекс 333, излучение  $\text{CuK}\alpha_1$ . Остальные линии такие же, как на рис. 4. На вставке показана центральная часть КДО.

**ТАБЛИЦА 1.** Характеристики дислокационных петель (радиус  $R_L$  и концентрация  $n_L$ ) и преципитатов кислорода ( $R_p, n_p$ ) в образце Cz-Si.

Дислокационные петли		Преципитаты кислорода	
$R_L$ , мкм	$n_L$ , см <sup>-3</sup>	$R_p$ , мкм	$n_p$ , см <sup>-3</sup>
0,02	$1 \cdot 10^{16}$	1	$5 \cdot 10^{16}$
0,12	$7 \cdot 10^{11}$		

Ниже проведён сравнительный анализ чувствительности ПИИ к дефектам в кинематической и динамической теориях.

В кинематической теории ПИИ ( $R_i$ ) рассеяния имеет вид:

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

откуда следуют два закона сохранения кинематической теории:

1)  $R_i = R_{iB} + R_{iD} = R_{ip}$  (независимость ПИИ от характеристик дефектов),

2)  $R_{iD}/R_{iB} = (1 - e^{-2L})/e^{-2L} \approx 2L$  (независимость от условий дифракции вклада диффузной составляющей ПИИ),

где  $R_{ip} = C^2 Q t / \gamma_0$ ,  $Q = (\pi |\chi_{\text{Hr}}|^2) / \lambda \sin(2\theta_B)$ .

В динамической теории рассеяния ПИИ для геометрии Лауэ, приближение тонкого кристалла ( $\mu_0 l \leq 1$ ,  $l = t/\gamma_0$ ) имеет вид:

$$R_i = R_{iB} + R_{iD} = \\ = \exp(-\mu_0 l) R_{ip} [(Cl)^{-1} E I_0 (\mu_H l C E) \exp(-\mu_{0ds} l) + (1 - E^2) \exp(-\mu^* l)],$$

где  $\mu_{0ds}$  — коэффициент экстинкции из-за дефектов когерентной компоненты ПИИ,  $\mu^*$  — коэффициент экстинкции из-за дефектов диффузной компоненты ПИИ,  $E = e^{-L}$  — статический фактор Кривоглаза–Дебая–Валлера.

Оба закона сохранения кинематической теории, как следует из приведённых выражений, нарушаются при переходе к динамической дифракции.

Результаты экспериментальной апробации многопараметрической диффузно динамической комбинированной дифрактометрии кристаллов с несколькими типами дефектов представлены в качестве примера ниже в табл. 2.

При комбинированной обработке экспериментальных данных по зависимостям ПИИ от толщины и деформации в различных условиях динамической дифракции удаётся однозначно и с достаточной точностью определить параметры всех четырёх типов дефектов, одновременно присутствующих в исследуемом образце кремния, что существенно повышает информативность метода ИДДКД, в том числе, по сравнению с другими динамическими подходами (Патент Украины № 36075 от 10.10.2008 г. с участием авторов статьи) [8]. Этими результатами продемонстрированы возможности диагностики рекордно низких концентраций дефектов четырёх типов.

## 7. МЕТОД ПОЛНОЙ ИНТЕГРАЛЬНОЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ С НАРУШЕННЫМ ПОВЕРХНОСТНЫМ СЛОЕМ

Построена [35] трёхслойная (сильно нарушенный (без дифракции), кинематически и динамически рассеивающие слои) модель полной интегральной интенсивности динамической дифракции рентгеновских лучей (ПИИДД РЛ) в кристаллах с нарушенным (без дифракции и кинематически рассеивающим) поверхностным слоем (НПС), впервые справедливую, когда толщины слоёв могут быть равными или превышать длины экстинкции рентгеновских лучей, и на её основе:

➤ установлен [35] эффект асимметрии азимутальной зависимости полной интегральной интенсивности динамической дифракции рентгеновских лучей (АЗ ПИИДД РЛ), нормированной на АЗ ИИДД идеального кристалла. Эта асимметрия появляется и увеличивается с увеличением толщины НПС, благодаря увеличению вклада слагаемого, обусловленного интерференцией кинематически и динамически рассеянных лучей;

**ТАБЛИЦА 2.** Характеристики (радиусы  $R$  и концентрации  $c$ ) дефектов, определённые при комбинированной обработке экспериментальных данных, полученных в разных условиях динамической дифракции совместно для зависимостей ПИИ от толщины и деформации (комбинированная обработка).

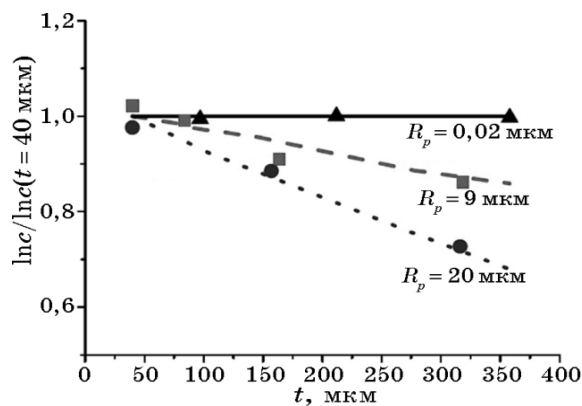
Большие петли		Кластеры		Средние петли		Малые петли	
$R$ , мкм	$c \cdot 10^{-3}$ , см $^{-3}$	$R$ , мкм; $h$ , мкм	$c \cdot 10^{-7}$ , см $^{-3}$	$R$ , мкм	$c \cdot 10^{-6}$ , см $^{-3}$	$R$ , мкм	$c \cdot 10^{-11}$ , см $^{-3}$
$8 \pm 0,8$	$5 \pm 1$	$0,45 \pm 0,01$ ; $0,012 \pm 0,01$	$1,12 \pm 0,01$	$0,84 \pm 0,01$	$8,4 \pm 1$	$0,035 \pm 0,001$	$2 \pm 0,1$

**ТАБЛИЦА 3.** Параметры толщин сильно нарушенного ( $t_{am}$ ) и кинематически рассеивающего ( $t_{ksl}$ ) слоёв для обработанных различным способом поверхностей монокристалла Si. Результаты получены путём обработки методом наименьших квадратов величин ПИИДД для отражений 004  $MoK_{\alpha}$  и 004  $FeK_{\alpha}$  ( $\Lambda/(a/d) = 2,93$  мкм).

Вид технологической обработки	$t_{am}$ , мкм	$t_{ksl}$ , мкм
Резка	6,8	8,88
Шлифовка	10,08	8,52
Химическое селективное травление	0	0,32
		0,40
Полировка химико-механическая	1,05	1,02

➤ в результате предложен метод неразрушающей диагностики толщины НПС монокристаллов после различных механических обработок.

На основе обобщения созданной модели АЗ ПИИДД в кристалле с НПС на случай наличия в динамически рассеивающем объёме дефектов, в том числе с размерами, превышающими длину экстинкции, установлен ещё один эффект асимметрии АЗ ПИИДД, который обусловлен явлением полного отражения диффузного рассеяния, возрастает с увеличением размера дефектов и имеет противоположный знак по сравнению с предыдущим эффектом асимметрии другой природы за счёт НПС. В результате создан метод диагностики одновременно и толщин



**Рис. 6.** Профили распределения по глубине дислокационных петель в объёме исходного (пунктирная линия), облучённого электронами с энергией 18 МэВ при дозах облучения 1,8 кГрэй (штриховая линия) и 3,6 кГрэй (сплошная линия) кристалла кремния толщиной  $t = 4000$  мкм, маркёры — эксперимент.



НПС, и характеристик дефектов без ограничений на их толщины и размеры.

Результаты применения метода полной интегральной динамической дифрактометрии монокристаллов с НПС приведены в табл. 3.

Таким образом, впервые без разрушения определены параметры НПС для различных видов технологической обработки.

Осуществлена экспериментальная реализация метода ПИИДД для диагностики НПС и профилей неоднородных распределений дефектов нескольких типов, соответственно толщины и размеры которых могут превышать длину экстинкции. Результаты диагностики представлены на рис. 6.

## **8. ОСНОВЫ ДИФФУЗНО ДИНАМИЧЕСКОЙ КОМБИНИРОВАННОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР**

Созданы [34] теоретические модели и на их основе впервые практически реализована многопараметрическая диффузно динамическая комбинированная дифрактометрия (ДДКД) многослойных структур, результаты которой представлены на рис. 7.

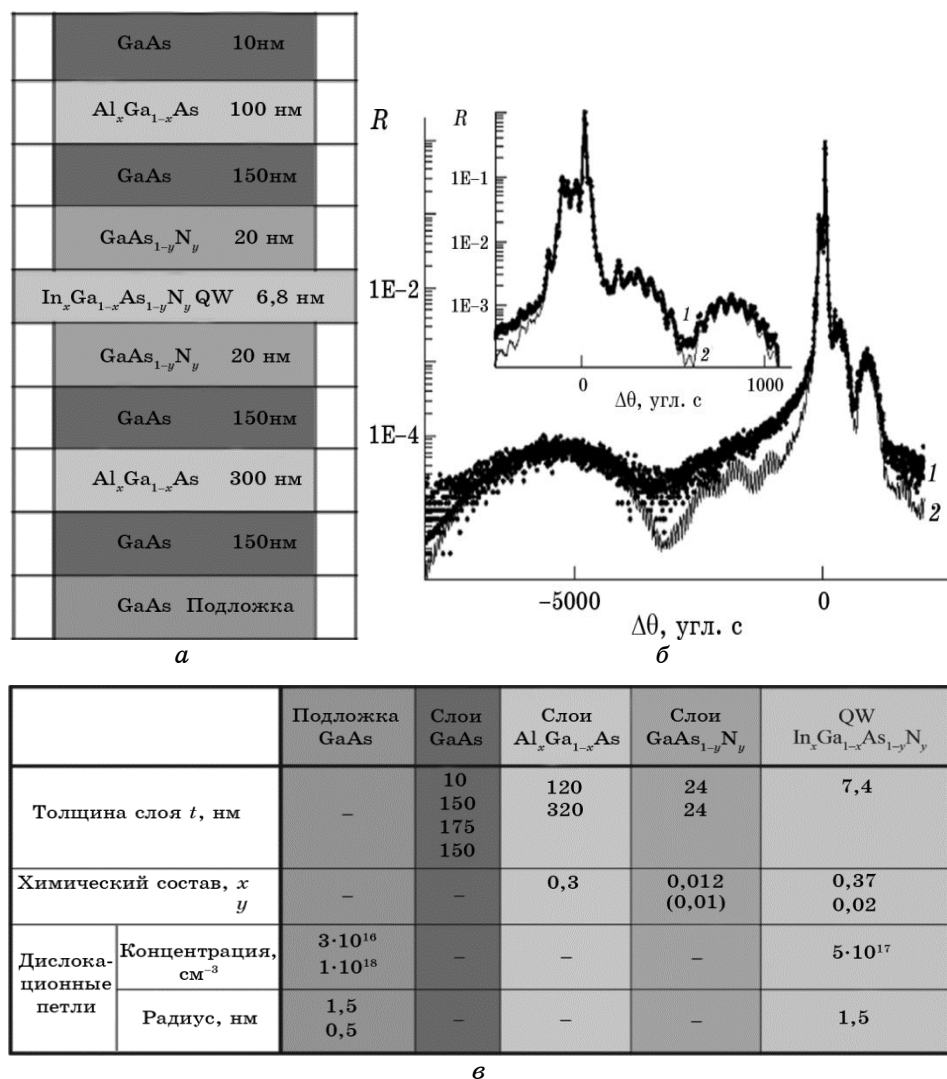
Видны обнаруженные рекордно малые концентрации дефектов для каждого слоя системы отдельно.

Также [34] впервые создана теоретическая модель и на её основе практически реализована ДДКД многопараметрических многослойных структур со сложной ячейкой и неоднородным распределением макродеформаций и микродефектов (как между слоями, так и внутри слоёв) на примере гранатовых плёночных систем (см. рис. 8, а также табл. 4 и 5).

## **9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Авторами обсуждается открытое ими и имеющее революционное значение для развития принципиально новых функциональных возможностей диагностики явление и его дисперсионная природа, а именно, явление колоссального усиления проявления дефектов в картине многократного рассеяния, которое управляется условиями дифракции селективно для каждого типа дефектов и наблюдается как уникально структурно чувствительные зависимости от условий дифракции картины многократного рассеяния.

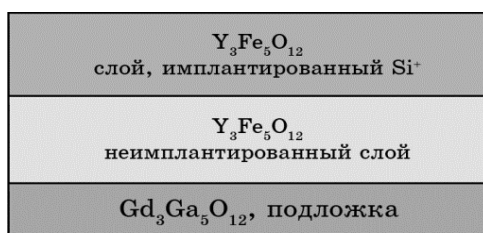
Отмечается, что открытое явление и его дисперсионная природа обеспечивают принципиально разный характер влияния дефектов на кинематическую и динамическую картины рассеяния, по которому именно и проводится диагностика дефектов, и поэтому и позволили основать качественно новое поколение диагно-



**Рис. 7.** Схема многослойной структуры с квантовой ямой (а); экспериментальная кривая дифракционного отражения (маркёры) для многослойной структуры и соответствующие теоретические кривые без учёта (кривая 2) и впервые с учётом (кривая 1) диффузного рассеяния (б); результаты многопараметрической диагностики многослойной структуры с квантовой ямой (за счёт комбинации информации о разных слоях из разных угловых диапазонов) (в). В скобках приведено номинальное значение химического состава.

стики с их использованием.

Обсуждены созданные на основе использования открытого явле-



**Рис. 8.** Схема структуры: монокристаллическая плёнка железиттриевого граната (ЖИГ) на подложке гадолиний-галлиевого граната (ГГГ), имплантированная ионами  $Si^+$ .

**ТАБЛИЦА 4.** Результаты диагностики характеристик дислокационных петель и сферических кластеров в неимплантированной плёнке ЖИГ и подложке ГГГ.

		Подложка $Gd_3Ga_5O_{12}$		Плёнка $Y_3Fe_5O_{12}$
Дислокационные петли	Радиус $R_L$ , нм	90	5	5
	Эффективный радиус $R_{eff}$ , нм (444) (888)	391 514	23 32	23 32
	Концентрация $n_L$ , $см^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{12}$	$1 \cdot 10^{15}$	$1 \cdot 10^{15}$
Сферические кластеры	Радиус $R_C$ , нм	8		7
	Деформация $\epsilon$	0,03		-0,0823
	Мощность $A_C$ , $нм^3$	9,5		-18
	Эффективный радиус $R_{eff}$ , нм (444) (888)	18 26	25 36	
	Концентрация $n_C$ , $см^{-3}$	$1 \cdot 10^{14}$		$1 \cdot 10^{14}$

ния и детально аналитически описанного дисперсионного механизма влияния дефектов на динамическую картину теоретические и экспериментальные основы закреплённых патентами принципиально новых уникально чувствительных и информативных методов, обеспечивающих повышение в десятки тысяч раз чувствительности структурной диагностики и возможность характеристики сложных многопараметрических систем и не имеющих аналогов в мире, примеры которых проиллюстрированы в статье.

**ТАБЛИЦА 5.** Максимальные концентрации кластеров и характеристики профилей деформации, статического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера и коэффициента поглощения за счет диффузного рассеяния в имплантированном слое пленки ЖИГ при различных дозах имплантированных ионов  $\text{Si}^+$  с энергией 90 кэВ.

$D, \text{см}^{-2}$	$1 \cdot 10^{13}$	$6 \cdot 10^{13}$	$2 \cdot 10^{14}$
$\varepsilon_{\perp}^{\text{nucl,max}}, \%$	0,12	0,43	1,23
$\varepsilon_{\perp}^{\text{el,max}}, \%$	0,01	0,04	0,12
$n_C^{\text{nucl,max}}, \text{см}^{-3}$	$2 \cdot 10^{19}$	$7 \cdot 10^{19}$	$2 \cdot 10^{20}$
$t_0^{\text{nucl}}, \text{нм}$	55	55	55
$\sigma_1, \text{нм}$	45	45	45
$\sigma_2, \text{нм}$	15	15	15
$n_C^{\text{el,max}}, \text{см}^{-3}$	$2 \cdot 10^{19}$	$7 \cdot 10^{19}$	$2 \cdot 10^{20}$
$t_0^{\text{el}}, \text{нм}$	-75	-75	-75
$\sigma_{\text{el}}, \text{нм}$	50	50	50
$n_C^{\text{max}}, \text{см}^{-3}$	$2 \cdot 10^{19}$	$7 \cdot 10^{19}$	$2 \cdot 10^{20}$
$R_C, \text{нм}$	1,5	1,5	1,5
$A_C, \text{нм}^3$	0,06	0,06	0,06
$E_{444}^{\text{min}}$	0,9995	0,9983	0,9951
$E_{888}^{\text{min}}$	0,9980	0,9931	0,9804
$\mu_{\text{ds},444}^{\text{max}}/\mu_0$	0,003	0,012	0,034
$\mu_{\text{ds},888}^{\text{max}}/\mu_0$	0,005	0,016	0,043

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. M. Von Laue, *Rontgenstrahlinterferenzen* (Leipzig: Akademische Verlagsges.: 1948).
2. C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction. 2<sup>nd</sup> ed.* (London: Oxford University Press: 2001).
3. R. W. James, *Solid State Phys.* **15**: 55 (1963).
4. B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.* **36**: 681 (1964).
5. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
6. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy, A. I. Nizkova, E. G. Len, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, G. E. Ice, R. I. Barabash, and I. M. Karnaukhov, *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (Eds. R. I. Barabash, G. E. Ice, and P. E. A. Turchi) (New Jersey: Momentum Press: 2009), p. 391.
7. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, И. В. Гинько, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский, Е. Г. Лень, А. А. Бело-

- цкая, Е. В. Первак, В. В. Молодкин, *Способ многопараметрической структурной диагностики монокристаллов с несколькими типами дефектов* (Патент Украины № 36075. Зарегистрирован в Государственном реестре патентов Украины на изобретения 10.10.2008 г.).
8. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. Б. Молодкин, В. Л. Носик, В. Ю. Сторижко, Л. А. Булавин, И. М. Карнаухов, Р. И. Барабаш, Дж. Е. Айс, А. И. Низкова, И. В. Гинько, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский, В. А. Татаренко, Е. Г. Лень, А. А. Белоцкая, Е. В. Первак, В. В. Молодкин, *Способ многопараметрической структурной диагностики монокристаллов с несколькими типами дефектов* (Патент Украины № 89594. Зарегистрирован в Государственном реестре патентов Украины на изобретения 10.02.2010 г.).
  9. V. V. Molodkin, A. P. Shpak, M. V. Kovalchuk, V. F. Machulin, and V. L. Nosik, *Phys.-Usp.*, **54**, No. 7: 661 (2011).
  10. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *Физ. мет. металловед.*, **24**, № 3: 385 (1967).
  11. В. Б. Молодкин, *Металлофизика*, **2**, № 1: 3 (1980).
  12. V. V. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**: 615 (1981).
  13. V. V. Molodkin, S. I. Olikhovskii, and M. E. Osinovskii, *Phys. Metals*, **5**: 1 (1984).
  14. V. V. 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).
  17. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **227**, No. 2: 429 (2001).
  18. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **231**, No. 1: 199 (2002).
  19. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskyy, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, E. G. Len, A. I. Nizkova, V. M. Venger, and S. V. Dmitriev, *phys. status solidi (a)*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
  20. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, I. M. Fodchuk, E. S. Skakunova, E. V. Pervak, and V. V. Molodkin, *phys. status solidi (a)*, **204**, No. 8: 2606 (2007).
  21. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii, A. N. Gureev, L. I. Datsenko, A. I. Nizkova, and B. F. Zhuravlev, *phys. status solidi (a)*, **87**, No. 2 : 597 (1985).
  22. J. E. Thomas, T. O. Baldwin, P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **3**: 1167 (1971).
  23. W. L. Bond, *Acta Crystallogr.*, **13**: 814 (1960).
  24. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, E. N. Kislovskii, V. P. Kladko, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, and B. V. Sheludchenko, *phys. status solidi (a)*, **206**, No. 8: 1761 (2009).
  25. Е. А. Тихонова, *Физ. твёрдого тела*, **9**, No. 2: 516 (1967).
  26. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1306 (1970).
  27. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. V. Kovalshuk, Yu. M. Litvinov, E. N. Kislovskii, and A. I. Nizkova, *Nucl. Instrum. Meth-*

- ods. Phys. Res. A*, **308**, No. 1: 294 (1991).
28. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, R. F. Seredenko, and B. V. Sheludchenko, *Phys. Rev. B*, **78**: 224109 (2008).
  29. В. А. Бушуев, *Кристаллография*, **39**, № 6: 983 (1994).
  30. K. M. Pavlov and V. I. Punegov, *Acta Crystallogr. A*, **56**, No. 3: 227 (2000).
  31. V. Holy and K. T. Gabrielyan, *phys. status solidi (b)*, **140**: 39 (1987).
  32. А. М. Поляков, Ф. Н. Чуховский, Д. И. Пискунов, *ЖЭТФ*, **99**, № 3: 589 (1991).
  33. N. Kato, *Acta Crystallogr.*, **A36**, No. 5: 763 (1980).
  34. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаузов, В. Ф. Мачулин, В. Е. Сторижко, Э. Х. Мухамеджанов, А. И. Низкова, С. В. Лизунова, Е. Н. Кисловский, С. И. Олиховский, Б. В. Шелудченко, С. В. Дмитриев, Е. С. Скакунова, В. В. Молодкин, В. В. Лизунов, В. А. Бушуев, Р. Н. Кютт, Б. С. Карамурзов, А. А. Дышеков, Т. И. Оранова, Ю. П. Хапачев, *Основы динамической высокоразрешающей дифрактометрии функциональных материалов* (Нальчик: Кабардино-Балкарский Университет: 2013).
  35. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаузов, В. Е. Сторижко, С. В. Лизунова, С. В. Дмитриев, А. И. Низкова, Е. Н. Кисловский, В. В. Молодкин, Е. В. Первак, А. А. Катасонов, В. В. Лизунов, Е. С. Скакунова, Б. С. Карамурзов, А. А. Дышеков, А. Н. Багов, Т. И. Оранова, Ю. П. Хапачев, *Основы интегральной многопараметрической диффузодинамической дифрактометрии* (Нальчик: Кабардино-Балкарский Университет: 2013).
  36. В. В. Лизунов, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, Н. Г. Толмачев, Е. С. Скакунова, С. В. Дмитриев, Б. В. Шелудченко, С. М. Бровчук, Л. Н. Скапа, Р. В. Лехняк, *Металлофиз. новейшие технол.*, **36**, № 7: 857.

## REFERENCES

1. M. Von Laue, *Rontgenstrahlinterferenzen* (Leipzig: Akademische Verlagsges.: 1948).
2. C. Hammond, *The Basics of Crystallography and Diffraction* (London: Oxford University Press: 2001).
3. R. W. James, *Solid State Phys.*, **15**: 55 (1963).
4. B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.*, **36**: 681 (1964).
5. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals* (Berlin: Springer: 1996).
6. V. B. Molodkin, M. V. Kovalchuk, A. P. Shpak, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskiy, A. I. Nizkova, E. G. Len, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, G. E. Ice, R. I. Barabash, and I. M. Karnaukhov, *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (Eds. R. I. Barabash, G. E. Ice, and P. E. A Turchi) (New Jersey: Momentum Press: 2009), p. 391.
7. А. П. Шпак, М. В. Ковальчук, В. В. Молодкин, А. И. Низкова, И. В. Гин'ко, С. И. Олиховский, Е. Н. Кисловский, Е. Г. Лен', А. А. Белотская, Е. В. Первак, and В. В. Молодкин, *Способ Многопараметрической Струк-*

- turnoy Diagnostiki Monokristallov s Neskol'kimi Tipami Defektov* [A Method for Multiparameter Structural Diagnostics of Single Crystals with Several Types of Defects], Patent of Ukraine No. 36075 (Published 10 October 2008) (in Russian).
8. A. P. Shpak, M. V. Koval'chuk, V. B. Molodkin, V. L. Nosik, V. Yu. Storizhko, L. A. Bulavin, I. M. Karnaukhov, R. I. Barabash, G. E. Ice, A. I. Nizkova, I. V. Gin'ko, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, V. A. Tatarenko, E. G. Len, A. A. Belotskaya, E. V. Pervak, and V. V. Molodkin, *Sposob Mnogoparametricheskoy Strukturnoy Diagnostiki Monokristallov s Neskol'kimi Tipami Defektov* [A Method for Multiparameter Structural Diagnostics of Single Crystals with Several Types of Defects], Patent Ukrainy No. 89594 (Published 10 February 2010) (in Russian).
  9. V. B. Molodkin, A. P. Shpak, M. V. Kovalchuk, V. F. Machulin, and V. L. Nosik, *Phys.-Usp.*, **54**, No. 7: 661 (2011).
  10. V. B. Molodkin and E. A. Tikhonova, *Fiz. Met. Metalloved.*, **24**, No. 3: 385 (1967) (in Russian).
  11. V. B. Molodkin, *Metallofizika*, **2**, No. 1: 3 (1980) (in Russian).
  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. L. I. Datsenko, V. B. Molodkin, and M. E. Osinovskii, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey Real'nymi Kristallami* [Dynamic X-Ray Scattering by Real Crystals] (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (in Russian).
  17. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **227**, No. 2 : 429 (2001).
  18. S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len, and E. V. Pervak, *phys. status solidi (b)*, **231**, No. 1: 199 (2002).
  19. A. P. Shpak, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, Ye. M. Kyslovskii, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, E. G. Len, A. I. Nizkova, V. M. Venger, and S. V. Dmitriev, *phys. status solidi (a)*, **204**, No. 8: 2651 (2007).
  20. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, I. M. Fodchuk, E. S. Skakunova, E. V. Pervak, and V. V. Molodkin, *phys. status solidi (a)*, **204**, No. 8: 2606 (2007).
  21. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. E. Osinovskii, A. N. Gureev, L. I. Datsenko, A. I. Nizkova, and B. F. Zhuravlev, *phys. status solidi (a)*, **87**, No. 2 : 597 (1985).
  22. J. E. Thomas, T. O. Baldwin, and P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **3**: 1167 (1971).
  23. W. L. Bond, *Acta Crystallogr.*, **13**: 814 (1960).
  24. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, E. N. Kislovskii, V. P. Kladko, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, and B. V. Sheludchenko, *phys. status solidi (a)*, **206**, No. 8: 1761 (2009).
  25. E. A. Tikhonova, *Fiz. Tverdogo Tela*, **9**, No. 2: 516 (1967) (in Russian).
  26. P. H. Dederichs, *Phys. Rev. B*, **1**, No. 4: 1306 (1970).

27. V. V. Nemoshkalenko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, M. V. Kovalchuk, Yu. M. Litvinov, E. N. Kislovskii, and A.I. Nizkova, *Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A*, **308**, No. 1: 294 (1991).
28. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, R. F. Seredenko, and B. V. Sheludchenko, *Phys. Rev. B*, **78**: 224109 (2008).
29. V. A. Bushuev, *Kristallografiya*, **39**, No. 6: 983 (1994) (in Russian).
30. K. M. Pavlov and V. I. Punegov, *Acta Crystallogr. A*, **56**, No. 3: 227 (2000).
31. V. Holy and K. T. Gabrielyan, *phys. status solidi (b)*, **140**: 39 (1987).
32. A. M. Polyakov, F. N. Chukhovskiy, and D. I. Piskunov, *Zhurn. Eksp. Teor. Fiz.*, **99**, No. 2: 589 (1991) (in Russian).
33. N. Kato, *Acta Crystallogr. A*, **36**, No. 5: 763 (1980).
34. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov, V. F. Machulin, V. E. Storizhko, E. Kh. Mukhamedzhanov, A. I. Nizkova, S. V. Lizunova, E. N. Kislovskii, S. I. Olikhovskii, B. V. Sheludchenko, S. V. Dmitriev, E. S. Skakunova, V. V. Molodkin, V. V. Lizunov, V. A. Bushuev, R. N. Kyutt, B. S. Karamurzov, A. A. Dyshekov, T. I. Oranova, and Yu. P. Khapachev, *Osnovy Dinamicheskoy Vysokorazreshayushchey Difraktometrii Funktsional'nykh Materialov* [Basis of Dynamical High-Resolution Diffraction of Functional Materials] (Nalchik: Kabardino-Balkarsky University: 2013) (in Russian).
35. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov, V. E. Storizhko, S. V. Lizunova, S. V. Dmitriev, A. I. Nizkova, E. N. Kislovskii, V. V. Molodkin, E. V. Pervak, A. A. Katasonov, V. V. Lizunov, E. S. Skakunova, B. S. Karamurzov, A. A. Dyshekov, A. N. Bagov, T. I. Oranova, and Yu. P. Khapachev, *Osnovy Integral'noy Mnogoparametricheskoy Diffuznodinamicheskoy Difraktometrii* [Basis of Integral Multi-parameter Diffusion-Dynamical Diffractometry] (Nalchik: Kabardino-Balkarsky University: 2013) (in Russian).
36. V. V. Lizunov, V. B. Molodkin, S. V. Lizunova, N. G. Tolmachev, E. S. Skakunova, S. V. Dmitriev, B. V. Sheludchenko, S. M. Brovchuk, L. N. Skapa, and R. V. Lekhnyak, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **36**, No. 7: 857 (in Russian).