

PACS number: 07.85.Jy, 07.85.Qe, 61.05.cc, 61.05.cf, 61.05.cj, 61.72.Dd

**Новые диагностические возможности деформационных зависимостей интегральной интенсивности рассеяния кристаллами с дефектами для Лауэ-дифракции в области  $K$ -края поглощения**

А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук\*, В. Л. Носик\*,  
А. И. Низкова, В. Ф. Мачулин\*\*, И. В. Прокопенко\*\*, Е. Н. Кисловский,  
В. П. Кладько\*\*, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак, Е. Г. Лень,  
А. А. Белоцкая, Я. В. Василик, А. И. Гранкина, И. Н. Заболотный,  
А. А. Катасонов, М. Т. Когут, О. С. Кононенко, А. В. Мельник,  
В. В. Молодкин, Л. И. Ниничук, И. И. Рудницкая, Б. Ф. Журавлёв

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,  
бульв. Акад. Вернадского, 36,  
03142, Киев, Украина*

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

*\*\*Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарева  
НАН Украины,  
просп. Науки, 41,  
03028 Киев, Украина*

Создана и экспериментально апробирована модель деформационной зависимости (ДЗ) скачка интегральной интенсивности рассеяния (ИИР) в области  $K$ -края поглощения. Исследована природа и разработаны принципы расширения возможностей определения параметров хаотически распределенных дефектов (ХРД) нескольких типов за счет использования излучений вблизи  $K$ -края поглощения с целью обеспечения новых возможностей измерений в различных условиях дифракции, в частности, комбинирования приближений тонкого и толстого кристаллов при исследованиях деформационных зависимостей скачка ИИР на  $K$ -крае поглощения.

Створено та експериментально апробовано модель деформаційної залежності (ДЗ) стрибка інтегральної інтенсивності розсіяння (ІІР) в області  $K$ -краю вбирання. Досліджено природу та розроблено принципи розширення можливостей визначення параметрів випадково розподілених дефектів (ВРД) декількох типів за рахунок використання випромінення поблизу  $K$ -краю вбирання з метою забезпечення нових можливостей мірян у

різних умовах дифракції, зокрема, комбінування наближень тонкого та товстого кристалів при дослідженнях деформаційних залежностей стрибка ІІР на  $K$ -краю вбирання.

The model for deformation dependence (DD) of a jump of the integrated intensity of scattering (IIS) in the absorption  $K$ -edge region is developed and experimentally approbated. The nature of randomly-distributed defects (RDD) of several types is investigated, and principles of their parameters measurement and improvement are developed using radiations near to  $K$ -edge of absorption in order to achieve new possibilities of measurements under different diffraction conditions, in particular, for thin and thick crystals approximations combination during investigations of the IIS-jump-deformation dependences at the  $K$ -edge of absorption.

**Ключевые слова:** интенсивность рассеяния, дифракция, монокристалл, дефект кристалла, поглощение.

*(Получено 29 июня 2009 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Ранее [1, 2] измерения интегральной интенсивности рассеяния (ИИР) и ее скачка вблизи  $K$ -края поглощения атомами кристалла использовались для разделения вкладов в интерференционный коэффициент поглощения разных механизмов поглощения и выяснения на этой основе природы доминирующих в кристалле дефектов. При этом авторы [1, 2] не учитывали наличие в монокристалле с однородно распределенными дефектами диффузной составляющей ИИР, но именно благодаря ей, как будет показано, резко возрастает величина скачка ИИР в области  $K$ -края и информативность диагностики, обусловленная зависимостью характера влияния дефектов на динамическую картину рассеяния от условий дифракции.

## 2. МОДЕЛЬ ДЕФОРМАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ СКАЧКА ИИР В ОБЛАСТИ $K$ -КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ И ЕЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ АПРОБАЦИЯ

В [3] путем фитирования деформационных зависимостей (ДЗ) ИИР симметричного 220 Лауэ-отражения от монокристалла кремния, измеренных при использовании характеристического  $FeK_{\alpha}$ -излучения, получены значения параметров полуфеноменологической модели ИИР изогнутого толстого кристалла с хаотически распределенными дефектами. На ее основе здесь построена соответствующая модель ДЗ скачка ( $S$ ) ИИР вблизи  $K$ -края поглощения:

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

$$R_i(\lambda) \equiv R_i = R_{\text{icoh}}[1 + (BT\mu_0 l)0,074]\exp[-(BT\mu_0 l)^2 0,00604] + \\ + R_{\text{idif}}[1 + (BT\mu_0 l)0,0157]\exp[-(BT\mu_0 l)^2 0,00044], \quad (1)$$

$$B = \frac{\lambda^2 \sin \psi [1 + \gamma_0 \gamma_1 (1 + \nu)]}{2\pi |\chi_{\text{Hr}}|^2 r d} \quad [4], \quad T = \frac{\pi t |\chi_{\text{Hr}}|}{\lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_1}} \quad [4], \quad \lambda \text{ — длина волны}$$

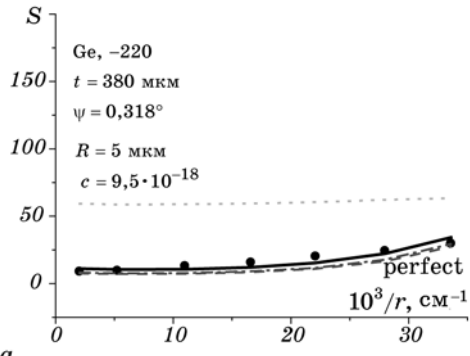
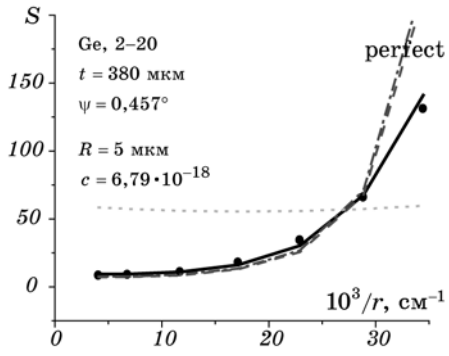
используемого излучения,  $\psi$  — угол между отражающей плоскостью и нормалью к поверхности кристалла,  $\gamma_0 = \cos(\theta_B + \psi)$ ,  $\gamma_1 = \cos(\theta_B - \psi)$ ,  $\nu$  — коэффициент Пуассона,  $\chi_{\text{Hr}}$  — реальная часть Фурье компоненты поляризуемости кристалла,  $r$  — радиус кривизны цилиндрического изгиба кристалла,  $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$ ,  $a$  — постоянная решетки,  $h, k, l$  — индексы Миллера,  $t$  — толщина кристалла,  $\mu_0$  — линейный коэффициент фотоэлектрического поглощения.

$$R_{\text{icoh}} = (2\pi)^{1/2} \left[ \frac{CE |\chi_{\text{Hr}}|}{(4 \sin 2\theta_B)} \right] \exp[-(\mu_0 - \mu_H CE) l] \left[ i_0(h_s) \frac{\exp(-\mu_{ds}^0 l)}{\sqrt{\mu_H l CE}} \right], \\ i_0(x) = 1 + \left(\frac{1}{8}\right)x + \left(\frac{9}{128}\right)x^2 + \dots; \quad (2)$$

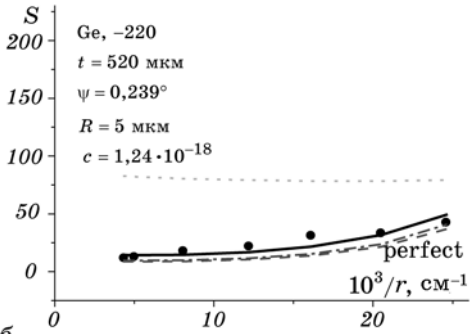
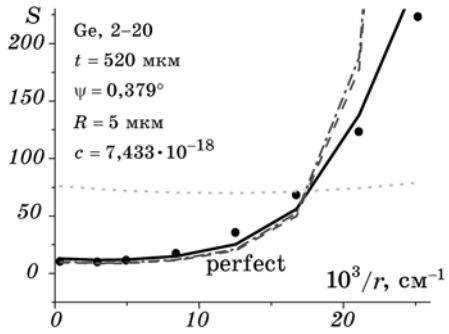
$$R_{\text{idif}} = \frac{(2\pi)^{1/2} \alpha |\chi_{\text{Hr}}| \mu_{ds}^0}{4\mu_H \sin^2 2\theta_B \sqrt{\mu_H l CE}} \exp[-(\mu_0 - \mu_H CE) l], \\ \alpha = \frac{3 \exp(-\mu_{ds}^0 l) - \exp(-\mu_H l CE)}{2 \left( 1 - \left( \frac{\mu_{ds}^0}{\mu_H CE} \right) \right)} \quad [11],$$

**ТАБЛИЦА 1.** Значения концентраций и средних радиусов, хаотически распределенных дислокационных петель, установленные путем подгонки экспериментальных ДЗ скачка ИИР, полученных в работе [2].

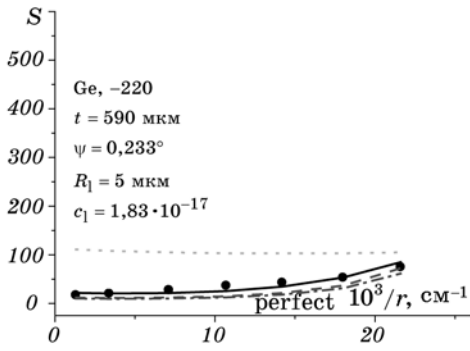
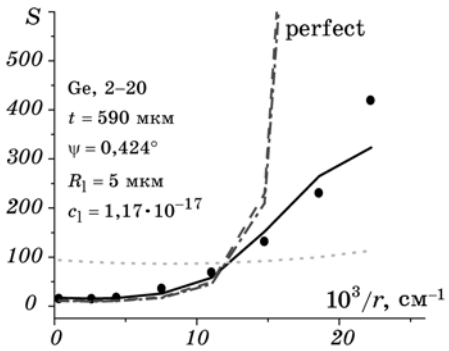
$T$ , мкм	$c_{\text{loops}}, R_{\text{loops}}$ , мкм	$\psi$ , °
380	$(5,3 \pm 1,5) \cdot 10^{-18}, 5,5 \pm 0,5$	0,457
520	$(1 \pm 0,25) \cdot 10^{-17}, 5 \pm 1$	0,379
590	$(9 \pm 3) \cdot 10^{-18}, 5,5 \pm 0,5$	0,424
650	$(1 \pm 0,3) \cdot 10^{-17}, 5,5 \pm 0,5$	0,422
740	$(1,3 \pm 0,3) \cdot 10^{-17}, 5,5 \pm 0,5$	0,341



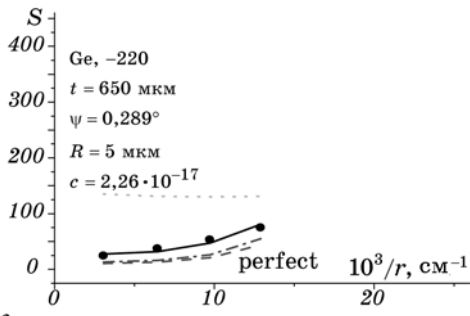
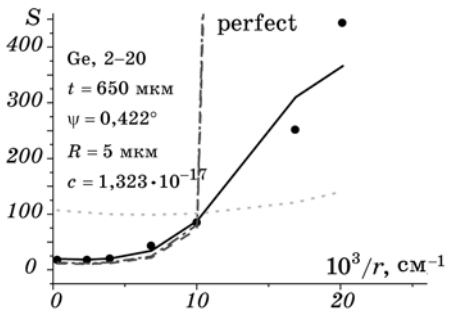
a



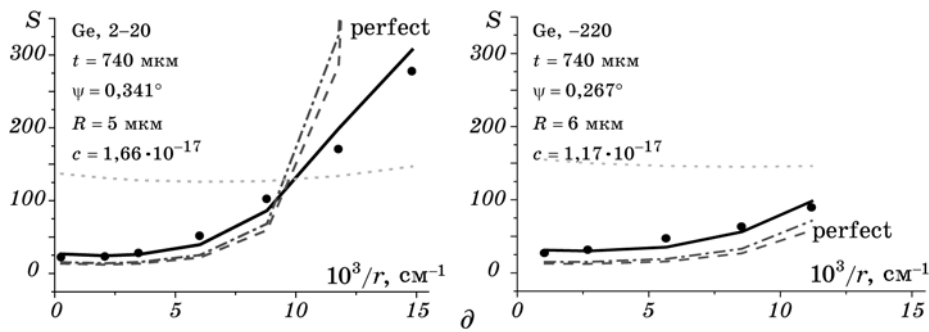
б



в



г



**Рис. 1.** Рассчитанные (линии) по модели, основанной на формулах (1) и (2) и измеренные (маркеры) в работе [2] (см. также [1]) зависимости скачка ИИР от деформации у *K*-края поглощения для кристалла Ge при различных значениях его толщины. Сплошные линии — ДЗ скачка ИИР, штрих — ДЗ скачка ее когерентной составляющей, пунктир — ДЗ скачка ее диффузной составляющей, штрих-пунктир — ДЗ скачка ИИР для идеального кристалла.

где  $h_s = \mu_H l C E$ ,  $C$  — поляризационный множитель,  $\mu_H$  — динамический коэффициент фотоэлектрического поглощения,  $\mu_{ds}^0$  — интегральный коэффициент эффективного поглощения когерентной составляющей ИИР из-за диффузного рассеяния когерентных волн на флуктуациях статических смещений атомов, вызванных дефектами.

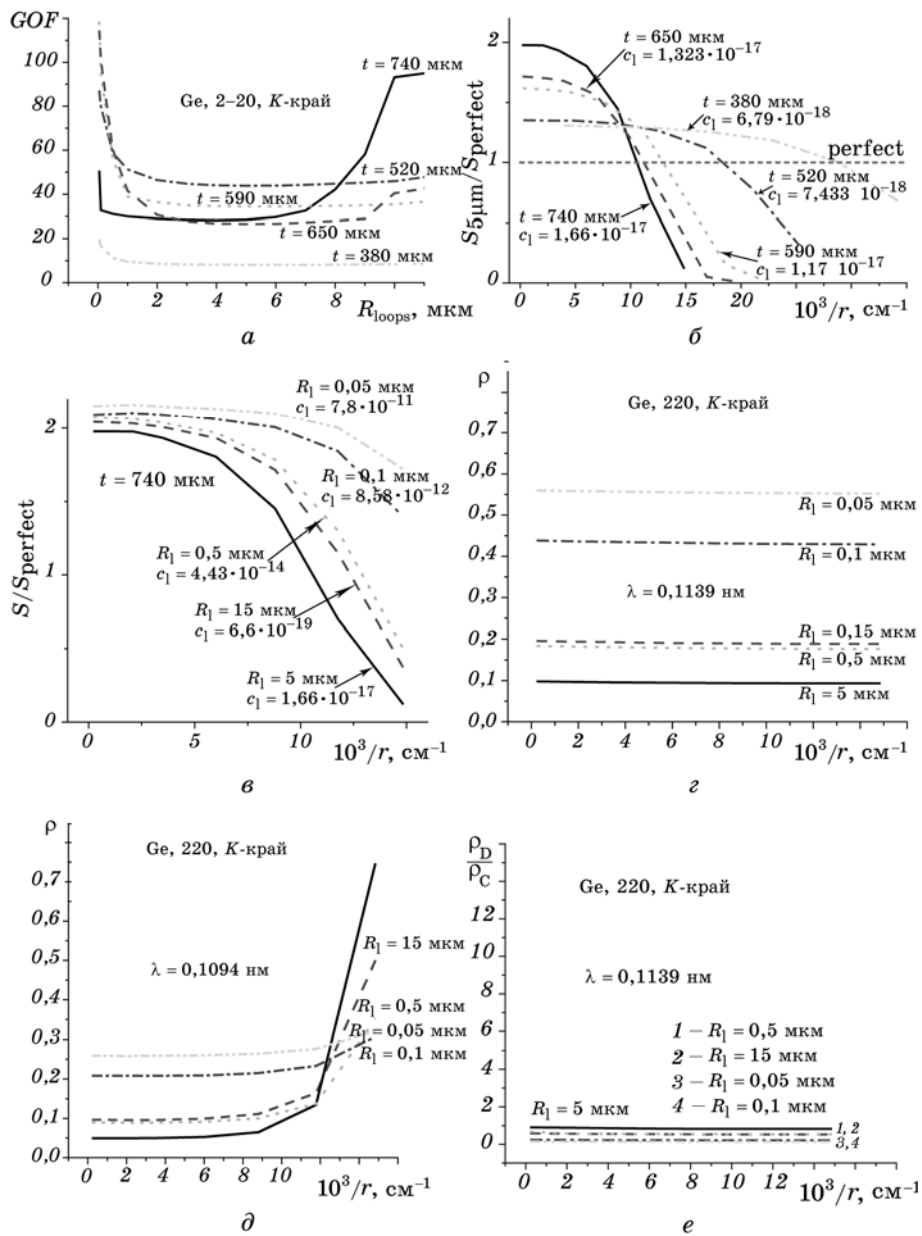
В настоящей работе установлено, что найденные в [3] значения параметров полуфеноменологической модели для кремния хорошо описывают и ДЗ скачка интенсивности вблизи *K*-края поглощения германия для симметричного 220 Лауэ-отражения. По созданной модели (1) рассчитаны ДЗ скачка ИИР при пяти различных толщинах монокристалла Ge.

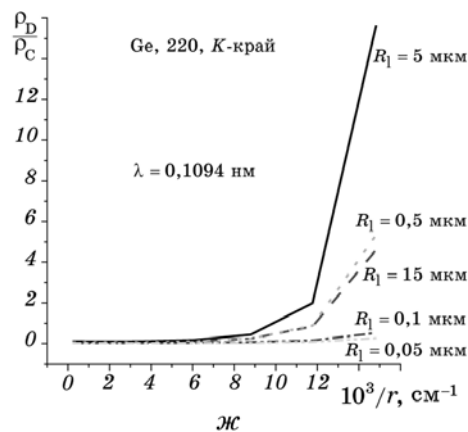
В таблице 1 приведены найденные путем фитирования теории и эксперимента средние радиусы и концентрации дислокационных петель, хаотически (однородно) распределенных в объеме монокристалла.

На рисунке 1 представлены результаты подгонки теоретических ДЗ скачка, к экспериментальным. На рисунке кроме кривых наилучшей подгонки, изображены рассчитанные для подобранных параметров дефектов ДЗ скачка когерентной и диффузной составляющих ИИР. Из рисунка 1 видно, что чем толще монокристалл и чем больше угол между отражающей плоскостью и нормалью к поверхности образца, тем заметнее отличие ДЗ скачка ИИР от рассчитанной ДЗ скачка ИИР для идеального кристалла такой же толщины. Кривые на рис. 1 демонстрируют, что это является следствием кардинального различия характера ДЗ скачков отдельно когерентной и диффузной составляющих ИИР и роста относительного вклада

диффузной составляющей с увеличением толщины. Из таблицы 1 и рисунка 1 также видно, что значения параметров дефектов, определенные при разных толщинах кристалла, совпадают в пределах погрешности их определения.

На рисунке, 2, а приведены зависимости величины коэффициен-





**Рис. 2.** Зависимости величины коэффициента добротности подгонки GOF от среднего радиуса дислокационных петель  $R_{\text{loops}}$  для различных толщин образца Ge (а); нормированные (на скачок ИИР для идеального кристалла) ДЗ скачка ИИР (S) Ge при  $R_{\text{loops}} = 5$  мкм (б); нормированные ДЗ скачка ИИР Ge при  $t = 740$  мкм (в) и различных параметрах дефектов; нормированные (на ИИР для идеального кристалла) ДЗ ИИР для кристаллов с различными параметрами дефектов, рассчитанные для близких длин волн по разные стороны K-края поглощения ( $\varepsilon$ ,  $\delta$ ), а также аналогичные ДЗ отношения диффузной и когерентной составляющих ИИР (е, ж).

та добротности подгонки (КДП–GOF) рассчитанных ДЗ скачка ИИР к экспериментальным ДЗ скачка ИИР от среднего радиуса дислокационных петель  $R_{\text{loops}}$ , случайно распределенных в объеме кристалла, для различных толщин образца Ge.

Из рисунка 2, а видно, что при больших толщинах кристалла усиливается чувствительность скачка ИИР к среднему радиусу дислокационных петель. При этом точность их определения возрастает с ростом толщины кристалла. Так, при толщинах образца от 380 до 590 мкм экспериментальные ДЗ удовлетворительно описываются ДЗ, рассчитанными при средних радиусах петель от 2 до 10 мкм, т.е. значение среднего радиуса дислокационных петель, равномерно распределенных в образце, соответствующее наилучшему фитированию при таких толщинах:  $R_{\text{loops}} = 6 \pm 4$  мкм. В то же время при толщинах образца от 650 до 740 мкм экспериментальные ДЗ удовлетворительно описываются ДЗ, рассчитанными при средних радиусах петель от 2,5 до 4,5 мкм, т.е. значение среднего радиуса дислокационных петель, равномерно распределенных в образце, соответствующее наилучшему фитированию при больших толщинах:  $R_{\text{loops}} = 3,5 \pm 1$  мкм.

Плохая точность определения среднего радиуса дефектов при малых толщинах является признаком наличия в кристалле дефектов

еще одного типа — малых размеров.

Рост с толщиной образца чувствительности ДЗ скачка ИИР к ХРД иллюстрируют также результаты расчетов ДЗ нормированного на значение в идеальном кристалле скачка ИИР при разных толщинах кристалла, представленные на рис. 2, б.

Из рисунка 2, б видно, что чем больше толщина кристалла, тем сильнее влияние дефектов на деформационную зависимость скачка ИИР. При максимальной толщине кристалла 740 мкм, если в неизогнутом кристалле величина скачка ИИР 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.

Рост с увеличением радиуса дефекта чувствительности ДЗ скачка ИИР к ХРД иллюстрируют также результаты расчетов ДЗ нормированного скачка ИИР при разных радиусах дефектов, представленные на рис. 2, в.

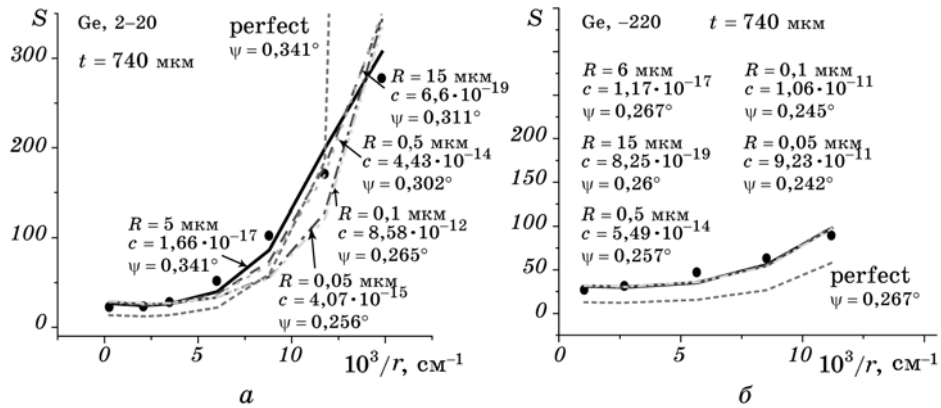
Из рисунка 2, в видно, что деформационная зависимость чувствительности скачка к дефектам кардинально зависит от их среднего радиуса  $R_1$ . Причиной этого является наличие более существенной деформационной зависимости чувствительности к дефектам ИИР излучения с длиной волны, соответствующей коротковолновой границе  $K$ -края поглощения (рис. 2, д), в отличие от независимой от деформации чувствительности к дефектам ИИР излучения с длиной волны, соответствующей длинноволновой границе  $K$ -края поглощения (рис. 2, з). Важно также и то, что для дефектов с разными значениями среднего радиуса указанная деформационная зависимость чувствительности разная (рис. 2, д).

Отсутствие деформационной зависимости чувствительности для длинноволновой границы  $K$ -края (рис. 2, з) и ее наличие для коротковолновой границы (рис. 2, д) обусловлено разным характером деформационных зависимостей отношения диффузной составляющей ИИР к ее когерентной составляющей. Поведение указанных зависимостей иллюстрируют рис. 2, е, ж.

С целью уточнения возможностей определения параметров ХРД по модели, основанной на (1), рассчитаны ДЗ скачка ИИР при толщине монокристалла Ge  $t = 740$  мкм для набора неразличимых без использования ДЗ пар средних радиусов и концентраций дислокационных петель. Результаты расчетов представлены на рис. 3.

Следует отметить, что на рис. 3 представлены рассчитанные (линии) по модели, основанной на формулах (1) и (2), и измеренные (маркеры) в работе [2] (см. также [1]) зависимости скачка ИИР от деформации у  $K$ -края поглощения для кристаллов с различными характеристиками ХРД, при которых значение скачка интенсивно-





**Рис. 3.** ДЗ скачка ИИР для отражений (2, -2, 0) (а); (-2, 2, 0) (б) и различных параметров дефектов. Сплошная линия представляет результат наилучшей подгонки ( $R = 5 \text{ мкм}$ ,  $c = 1,66 \cdot 10^{-17}$ ,  $\psi = 0,341^\circ$ ).

стей неизогнутого исследуемого монокристалла остается постоянным для  $t = 740 \text{ мкм}$ .

Анализ результатов, представленных на рис. 3, показывает, что использование ДЗ скачка существенно повышает информативность диагностики.

В [5] путем подгонки ДЗ ИИР симметричного 220 Лауэ-отражения от монокристалла кремния, измеренных при использовании характеристического  $\text{MoK}_\alpha$ -излучения, получены значения параметров полуфеноменологической модели ИИР изогнутого тонкого кристалла с хаотически распределенными дефектами:

$$R_i = R_{\text{coh}}[1 + (BT\mu_0 l) 0,78 + (BT\mu_0 l)^2 1,024] \exp[-(BT\mu_0 l)^2 0,078] + R_{\text{dif}}[1 - (BT\mu_0 l) 0,232 - (BT\mu_0 l)^2 0,158] \exp[-(BT\mu_0 l)^2 0,138], \quad (3)$$

$$R_{\text{coh}} = \exp(-\mu_0 l) B_0 E I_0 (h_s) \exp(-\mu_{ds}^0 l), \quad B_0 = \frac{C\pi |\chi_{hr}|}{2 \sin 2\theta_B},$$

$$R_{\text{dif}} = \exp(-\mu_0 l) 2LR_{ip} \exp(-\mu^* l), \quad (4)$$

где  $\mu^*$  — интегральный коэффициент эффективного поглощения диффузной составляющей ИИР из-за диффузного рассеяния когерентных волн и перерассеяния диффузных волн на флуктуациях статических смещений атомов, вызванных дефектами,  $I_0$  — функция Бесселя нулевого порядка от мнимого аргумента.

По разные стороны  $K$ -края поглощения Ge для излучений с приблизительно равными длинами волн для кристалла толщиной  $t = 40 \text{ мкм}$

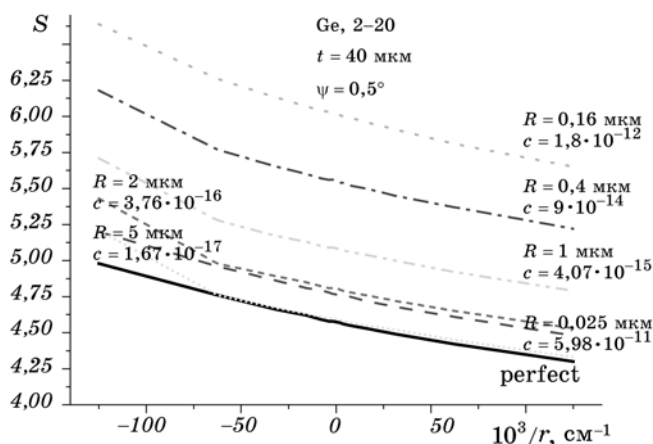


Рис. 4. Рассчитанные по моделям, основанным на (1)–(4), деформационные зависимости скачка ИИР в области  $K$ -края поглощения для  $\mu_0 t = 0,6435\text{--}43,878$ .

появляется возможность реализовать приближения как «тонкого», так и «толстого» кристаллов. В этом случае  $R_i(\lambda_1)$  описывается выражением (2), а  $R_i(\lambda_2)$  — выражением (1).

Результаты моделирования деформационной зависимости скачка на основании выражений (1) и (2) представлены на рис. 4.

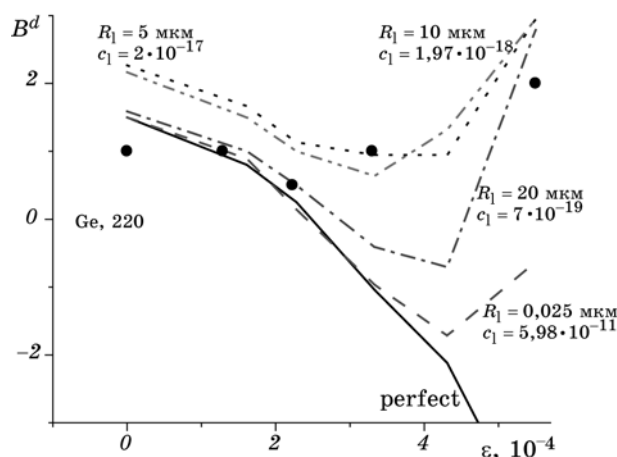
Из этих результатов следует, что комбинация разных предельных случаев (1) и (2) в области  $K$ -края дополнительно повышает информативность диагностики.

### 3. ДЕФОРМАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ, ОПИСЫВАЮЩИХ ЛИНЕЙНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ИИР ОТ ТОЛЩИНЫ КРИСТАЛЛА

В работе [2] путем использования данных эксперимента, изображенных маркерами на рис. 1, построены толщинные зависимости  $\ln S(t)$  для различных уровней деформации  $\varepsilon$ . В работе [2] показано, что в определенном интервале толщин зависимость  $\ln S = f(t)$ , измеренная при Лауэ-дифракции рентгеновских лучей при различных уровнях деформации упруго изогнутого кристалла Ge, линейна. Пересечение ее продолжения с осью ординат характеризуется параметром  $B^d$ .

Обнаруженное авторами работы [2] увеличение параметра  $B^d$  с ростом уровня деформации  $\varepsilon$  противоречит выводам теории для идеально упругодеформированного кристалла, не содержащего дефектов.

Величины  $B^d$ , отсекаемые продолжениями этих линейных зависимостей на оси ординат, представлены на рисунке 5 маркерами. Для различных значений степеней упругого изгиба  $\varepsilon$ , с использованием предложенной в данной работе модели, рассчитаны толщин-



**Рис. 5.** Экспериментальные (маркеры) и рассчитанные (линии) деформационные зависимости величины  $B^d(\epsilon)$ .

ные зависимости скачка ИИР при разных парах значений средних радиусов и концентраций дислокационных петель, для которых значение скачка интенсивностей неизогнутого монокристалла равно экспериментальному значению для соответствующей толщины монокристалла, изображенному маркером на рис. 1. Определены величины  $B^d$ , отсекаемые продолжениями этих линейных зависимостей на оси ординат. Рассчитанные таким образом зависимости  $B^d(\epsilon)$  представлены на рис. 5 линиями.

На рисунке 5 видно, что экспериментально определенная величина  $B^d(\epsilon)$  при малых деформациях не зависит от степени деформации, однако при больших деформациях  $B^d(\epsilon)$  увеличивается.

Из рисунка 5 видно, что при больших деформациях ход рассчитанной зависимости  $B^d$  от степени деформации определяется не только степенью искажения кристаллической решетки, обусловленного наличием дефектов, но и их характеристиками.

Для случаев бездефектного кристалла и кристаллов с мелкими дефектами рассчитанные значения  $B^d$  с ростом степени деформации уменьшаются, а для случая кристаллов с крупными дислокационными петлями — возрастают.

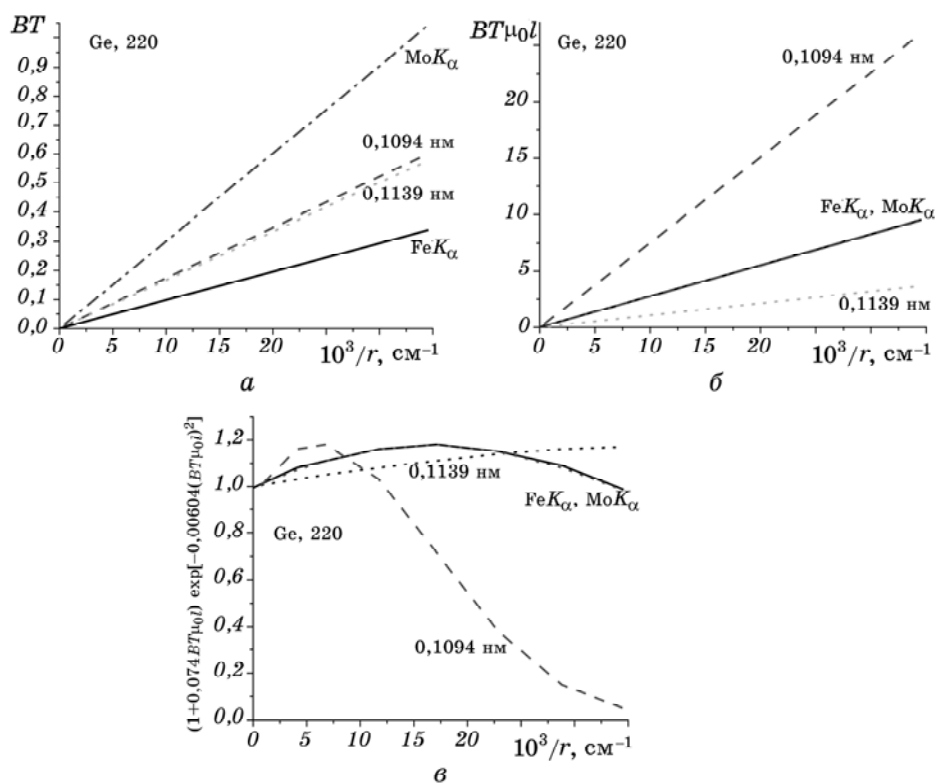
Таким образом, наблюдаемая в работе [2] деформационная зависимость  $B^d$  обусловлена наличием в кристалле Ge хаотически распределенных крупных дислокационных петель.

Расхождение с экспериментом для  $B^d$  при малых  $\epsilon$ , но крупных дефектах свидетельствует о наличии также и мелких дефектов. Использование также и этих данных для дополнительного повышения информативности диагностики ХРД будет описано в следующей статье.

#### 4. АНАЛИЗ ПРИЧИН И МЕХАНИЗМОВ ПОВЫШЕНИЯ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ДИАГНОСТИКИ ХРД В ПРИБЛИЖЕНИИ ТОЛСТОГО КРИСТАЛЛА ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ИЗМЕРЕНИЙ ДЗ СКАЧКА ИИР ВБЛИЗИ К-КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ

Известно [6], что для достижения максимальных значений  $|B|$  необходима определенная оптимизация параметров, характеризующих условия эксперимента, а именно:

- 1) использование характеристического излучения с возможно более короткой длиной волны  $\lambda$  для достижения больших значений экстинкционной длины;
- 2) для уменьшения  $R$  уменьшение толщины образца  $l$ , что содействует реализации условия достижения приближения тонкого кристалла;
- 3) проведение измерений интенсивностей  $R_i$  в условиях сильно асимметричной дифракции из-за роста градиента деформации с



**Рис. 6.** Рассчитанные деформационные зависимости факторов влияния деформации на величину ИИР монокристалла германия для асимметричного Лауэ-рефлекса 220 при угле между нормалью к поверхности кристалла и отражающими плоскостями  $\psi = 0,45^\circ$  при  $t = 380 \text{ мкм}$ .

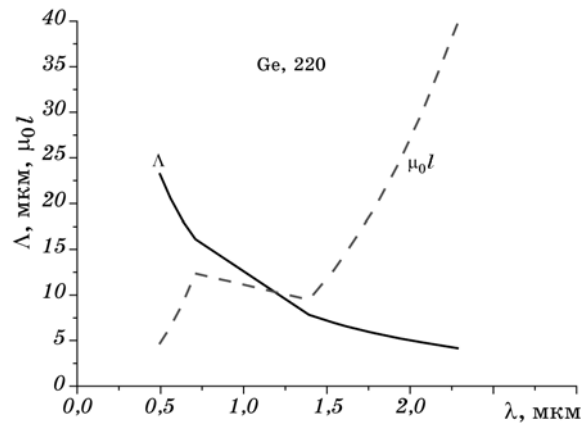
увеличением угла асимметрии  $\psi_0$ :  $B \propto \sin\psi_0$ .

Причину наличия деформационной зависимости (ДЗ)  $\rho$  для аномально поглощающегося излучения, в условиях эксперимента, отличных от трех вышеуказанных, позволяют объяснить представленные на рис. 6 и 7 результаты расчетов и анализ множителей ИИР изогнутого кристалла с дефектами, описывающих влияние упругого изгиба на ИИР.

На рисунке 6 изображены результаты расчетов деформационных зависимостей факторов эффективной деформации:  $BT$  (рис. 6, а); произведения  $BT$ , коэффициента нормального поглощения и толщины кристалла —  $BT\mu_0l$  (рис. 6, б); фактора, описывающего влияние изгиба на отражательную и поглощательную способности идеального кристалла —  $1 + 0,074BT\mu_0l \exp[-(BT\mu_0l)^2 0,00604]$  (рис. 6, в).

Как видно из рис. 6, а, зависимость  $BT$  от степени деформации тем больше, чем меньше длина волны излучения. Величина  $BT$  определяется тем, под каким углом происходит дифракция, т.е. чем меньше угол Брэгга  $\theta$ , тем больше  $BT$  зависит от радиуса кривизны изгиба  $r$ . Она прямо пропорциональна длине экстинкции, т.е. обратно пропорциональна ширине кривой отражения. Зависимость длины экстинкции от длины волны изображена сплошной линией на рис. 7. В предложенной модели параметром, описывающим влияние изгиба на ИИР, считается произведение  $BT$  и эффективной толщины кристалла  $\mu_0l$ . Зависимость  $\mu_0l$  от длины волны изображена на рис. 7 штриховой линией.

Из рисунка 7 видно, что чем больше длина волны используемого излучения, тем меньше длина экстинкции и шире кривая отражения неизогнутого кристалла и тем менее заметным будет ее уширение при изгибе, описываемое параметром  $BT$ . Однако рост с увеличением



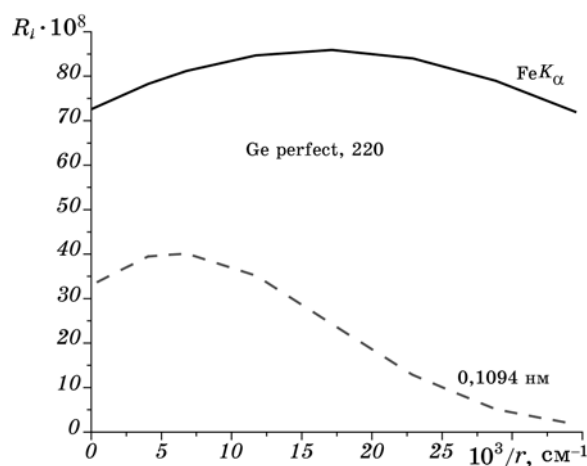
**Рис. 7.** Рассчитанные зависимости экстинкционной длины и эффективной толщины от длины волны излучения.

длины волны эффективной толщины кристалла компенсирует указанную потерю чувствительности к изгибу.

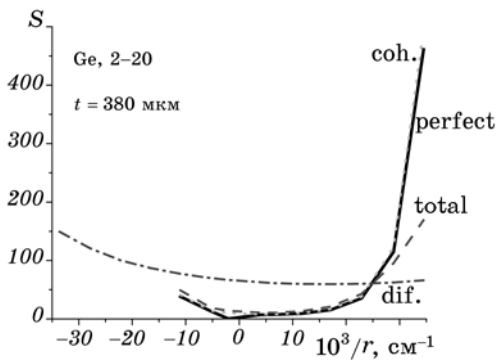
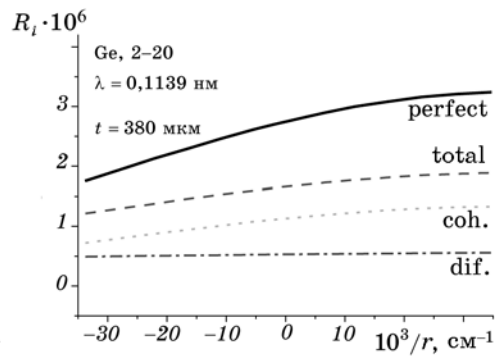
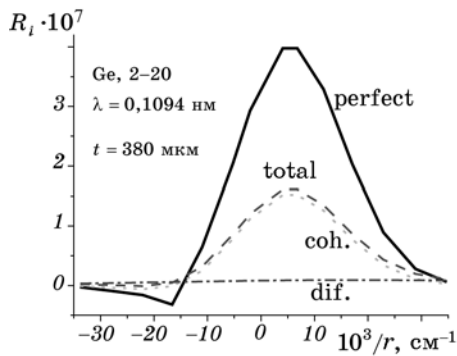
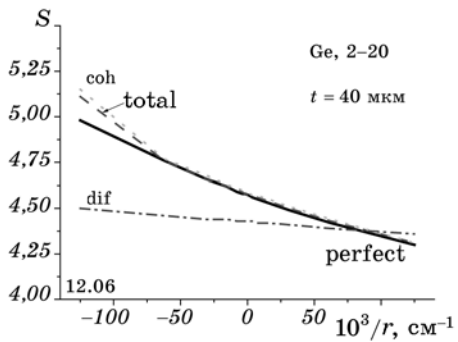
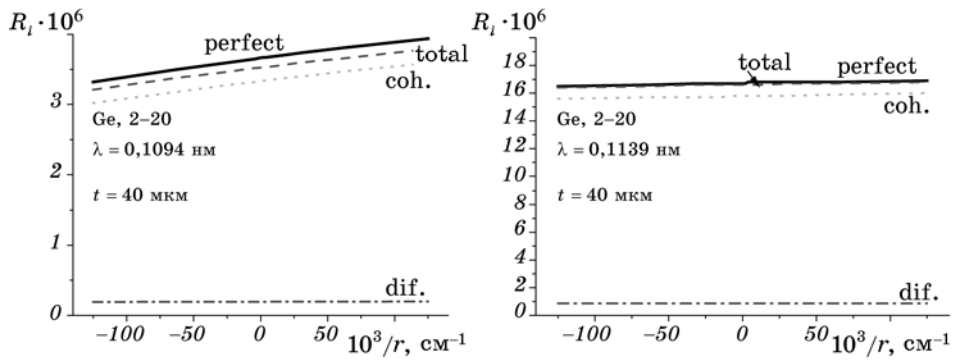
Поэтому, как видно из рис. 6, б, зависимости от степени упругого изгиба величины  $BT\mu_0l$  для слабо поглощающегося излучения  $MoK_\beta$  и сильно поглощающегося излучения  $FeK_\alpha$ -излучения сливаются. По этой же причине зависимости величины  $BT\mu_0l$  для слабо поглощающегося излучения непрерывного спектра с длиной волны 0,1139 нм и сильно поглощающегося излучения непрерывного спектра с практически такой же длиной волны 0,1094 нм резко расходятся. В то же время для этих двух излучений с длинами волн вблизи  $K$ -края поглощения величины длины экстинкции практически одинаковы. Таким образом, одновременное влияние двух факторов  $BT$  и  $\mu_0l$  обеспечивает повышение чувствительности картины рассеяния к деформации для  $FeK_\alpha$ -излучения до чувствительности, характерной для  $MoK_\beta$ -излучения. Такой же механизм обеспечивает чрезвычайную чувствительность к деформации измеряемых интенсивностей для излучения с длиной волны 0,1094 нм (сильно поглощающегося излучения, отражающегося под малым углом).

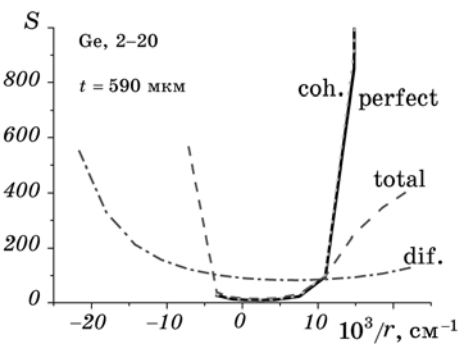
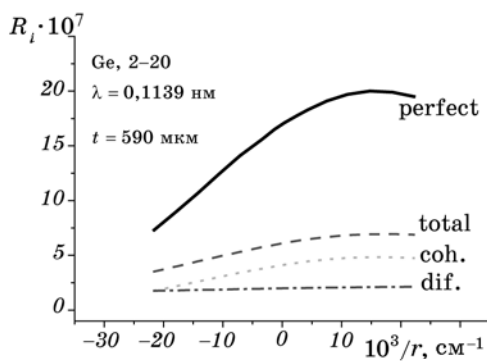
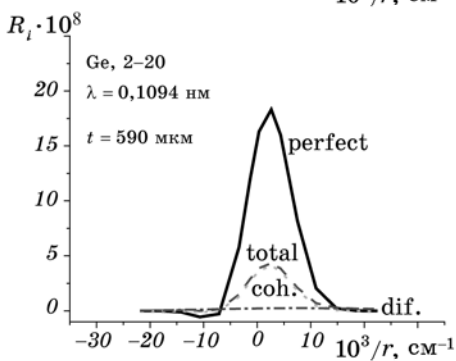
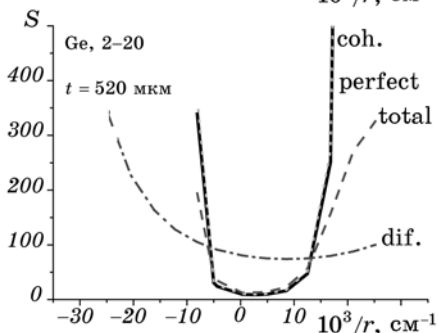
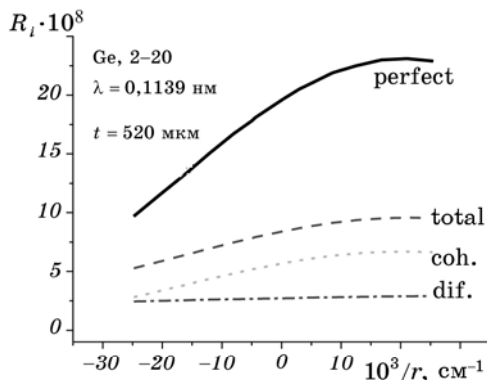
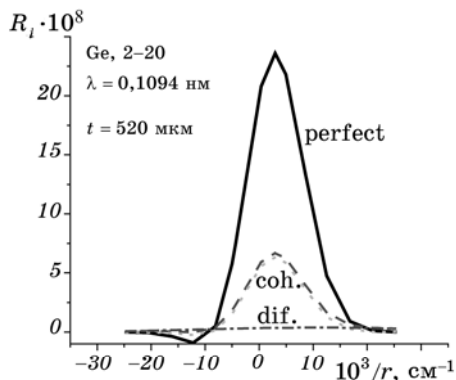
В результате, как видно из рис. 8, для аномально поглощающегося излучения резко возрастает по сравнению с излучениями, поглощающимися нормально, крутизна деформационной зависимости ИИР.

Характер зависимостей от деформации ИИР, ее когерентных и диффузных составляющих по разные стороны от  $K$ -края поглощения, а также их скачков вблизи  $K$ -края поглощения при разных толщинах образцов показан на рис. 9.

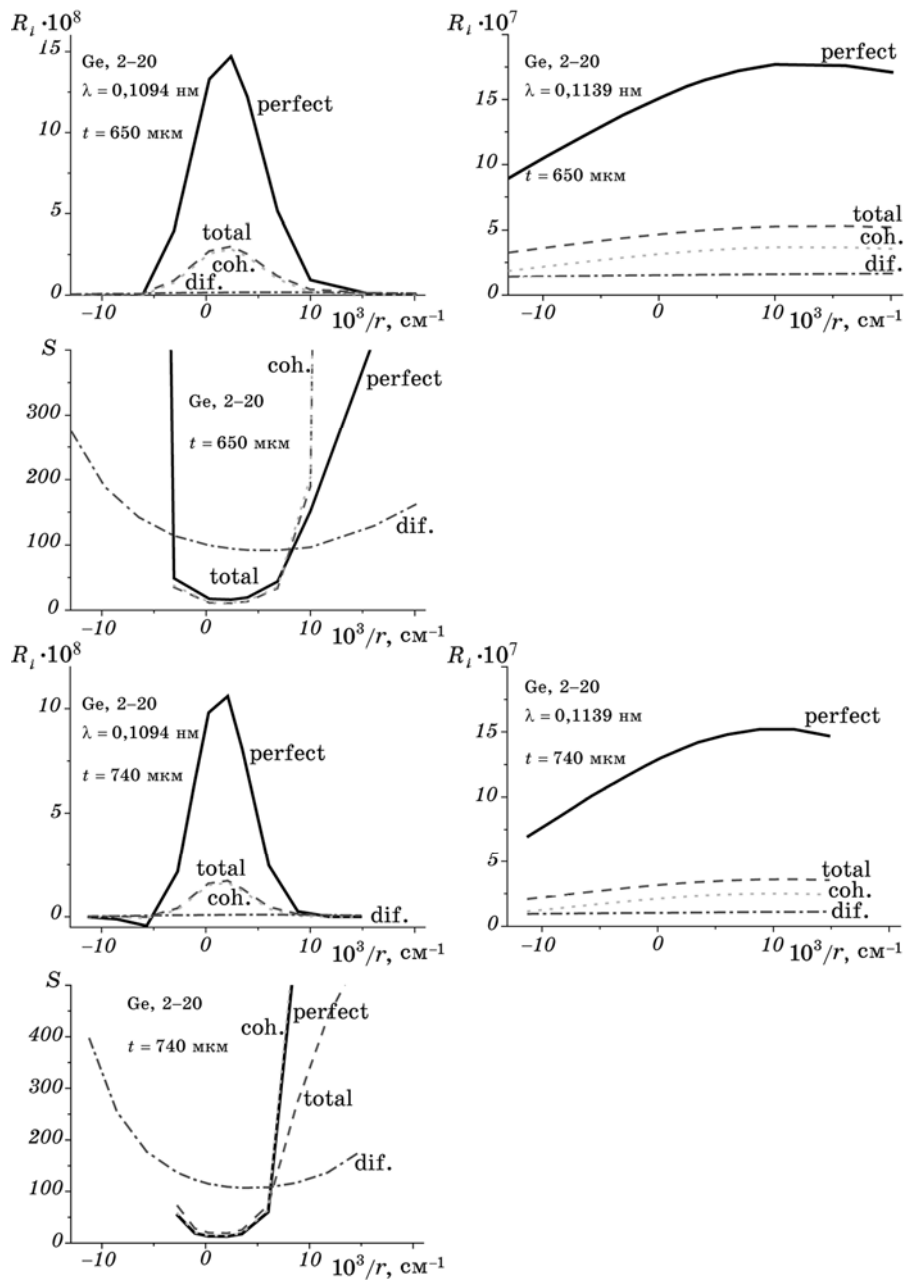


**Рис. 8.** Рассчитанные деформационные зависимости ИИР для идеального монокристалла германия для асимметричного Лауэ-рефлекса 220 при угле между нормалью к поверхности кристалла и отражающими плоскостями  $\psi = 0,45^\circ$  для различных  $\lambda$  ( $FeK_\alpha$  и 0,1094 нм).









**Рис. 9.** Рассчитанные по модели, основанной на (1) и (2), деформационные зависимости ИПР, ее брэгговской и диффузной составляющих и их скачка в области  $K$ -края поглощения для широкого интервала значений  $\mu_0 t$  для кристалла, содержащего дислокационные петли с  $R = 5$  мкм и  $C = 10^{-12}$ . Угол асимметрии дифракции  $\psi = 0,5^\circ$ .

Из рисунка 9 видно, что, несмотря на малый угол асимметрии дифракции деформационная зависимость ИИР для идеального кристалла, а с уменьшением толщины и уменьшением вклада диффузной составляющей и диффузной экстинкции, когерентной составляющей ИИР и самой ИИР, для коротковолновой границы  $K$ -края поглощения резко выражены за счет эффекта аномального прохождения, который также спадает с уменьшением толщины кристалла.

В то же время из рис. 9 видно, что в связи с малым углом наклона отражающей плоскости к нормали к поверхности кристалла деформационные зависимости когерентной и диффузной составляющих ИИР для длинноволновой границы  $K$ -края поглощения, а также для диффузной составляющей у коротковолновой границы  $K$ -края поглощения практически отсутствуют, особенно при больших толщинах. Это обусловлено конкуренцией с изменением  $t$  и  $\lambda$  вкладов существенно различающихся ДЗ отражающей и поглощающей способностей как для брэгговской, так и для диффузной составляющих в суммарную ДЗ. В результате ДЗ как ИИР, так и ее скачка в области  $K$ -края оказываются различными при разных условиях дифракции. Высокая чувствительность к ХРД и информативность их диагностики на основе указанных ДЗ обусловлены принципиальными различиями, показанными в работе, ДЗ для брэгговской и диффузной составляющих указанных величин ИИР и их скачков, а также для вкладов в них от дефектов разного типа.

## 5. ВЫВОДЫ

Скачок ИИР вблизи  $K$ -края поглощения в приближении толстого кристалла чрезвычайно чувствителен к упругому изгибу даже при использовании почти симметричных Лауэ-отражений вследствие совместного влияния на ИИР отражательной и поглощательной способностей кристалла и резко изменяющегося с толщиной результата конкуренции их ДЗ. Поэтому даже в случае, когда толщина монокристаллического образца такова, что на скачке реализуется только приближение «толстого» кристалла, деформационная зависимость скачка ИИР оказывается уникально чувствительной к ХРД. При этом она тем более чувствительна к размеру дефектов при одном и том же уровне нарушенности кристаллического совершенства, чем больше эффективная толщина кристалла, так как с её ростом растут вклады, как самого диффузного рассеяния, так и эффектов экстинкции за счет диффузного рассеяния.

Использование толщинных зависимостей фактора асимметрии ДЗ и изучение скачка ИИР при толщине образца, позволяющей сочетать на скачке приближения тонкого и толстого кристаллов, позволяет дополнительно повысить точность определения параметров ХРД. Последнее будет дополнительно исследовано в отдельной ра-

боте.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Л. И. Даценко, В. П. Кладько, В. Ф. Мачулин, В. Б. Молодкин, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами в области аномальной дисперсии* (Киев: Академперіодика: 2002).
2. Л. И. Даценко, Е. Н. Кисловский, *УФЖ*, **20**, № 5: 810 (1975).
3. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 9: 1189 (2008).
4. П. В. Петрашень, Ф. Н. Чуховский, *Кристаллография*, **21**: 283 (1976).
5. А. П. Шпак, В. Б. Молодкин, С. В. Дмитриев, Е. В. Первак и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **30**, № 7: 873 (2008).
6. П. В. Петрашень, Е. Н. Кисловский, *Phys. Status Solidi*, **56(a)**: 663 (1979).
7. L. I. Datsenko and I. V. Prokopenko, *Proc. of IV Conf. on 'Dynamical Scattering of X-Rays and Electrons'* (Leningrad: 1977).
8. R. Bubacova and L. Trousil, *Z. Naturforsch. B*, **28a**: 1199 (1973).
9. L. I. Datsenko, E. N. Kislovsky, and I. V. Prokopenko, *Ukr. Fiz. Zh.*, **22**: 513 (1977) (in Russian).
10. I. V. Prokopenko, T. G. KryshTAB, and P. M. Lytvyn, *Met. Phys. Adv. Tech.*, **17**: 237 (1998).
11. В. Б. Молодкин, А. И. Низкова, А. П. Шпак и др., *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (Киев: Академперіодика: 2005).