

PACS Numbers: 61.05.cc, 61.72. Dd, 61.72.jj, 61.72.Nn, 61.72.Qz, 61.72.uf, 61.80.Fe, 61.82.Fk

РЕНТГЕНІВСЬКА ДИФРАКТОМЕТРІЯ ЗМІН МІКРОДЕФЕКТНОЇ СТРУКТУРИ КРИСТАЛІВ КРЕМНІЮ ПІСЛЯ ОПРОМІНЕННЯ ВИСОКОЕНЕРГЕТИЧНИМИ ЕЛЕКТРОНАМИ

І.М.Фодчук, Т.П.Владімірова*), В.В. Довганюк, О.В. Решетник*), В.П.Кладько**), В.Б.Молодкін*), С.Й.Оліховський*), Є.М.Кисловський*), Є.В.Кочелаб*), Т.В. Литвинчук, Р.Ф.Середенко*), 2010

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
2, вул.Коцюбинського, м.Чернівці, 58012, Україна,*

**)Інститут металофізики ім.Г.В.Курдюмова НАН України,
36, бульв.Вернадського, м.Київ-142, UA-03680, Україна*

***Інститут фізики напівпровідників ім.В.Є. Лашкарьова НАН України,
41, просп. Науки, Київ-028, UA-03028, Україна*

X-RAY DIFFRACTOMETRY OF TRANSFORMATIONS OF MICRODEFECT STRUCTURE OF SILICON CRYSTALS AFTER HIU-ENERGY ELECTRON IRRADIATION

I.M. Fodchuk, T. P. Vladimirova, V.V. Dovganyuk, O.V. Reshetnyk, V.P. Klad'ko, V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. V. Kochelab, T.V. Lytvynchuk, R. F. Seredenko, 2010

Методами високороздільної рентгенівської дифрактометрії проведено кількісну характеристику складних мікродфектних структур у кристалах кремнію, вирощених за методом Чохральського і опромінені різними дозами високоенергетичних електронів (18 MeV). На основі результатів характеристики, що проводилась з використанням формул статистичної динамічної теорії дифракції рентгенівських променів у недосконалих кристалах з випадково розподіленими мікродфектами декількох типів, визначено дозові залежності концентрацій та середніх розмірів дислокаційних петель і приєднаних до них після опромінення міжвузольних атомів кремнію.

Методами високорозрешаючої рентгеновської дифрактометрії проведено кількісну характеристику складних мікродфектних структур в кристалах кремнія, вирощених по методу Чохральського і облучених різними дозами високоенергетических електронів (18 МэВ). На основі результатів характеристики, котра проводилась з використанням формул статистическої динамическої теорії дифракції рентгеновських лучей в несовершенних кристалах со случайно распределенными мікродфектами нескількох типів, определены дозові зависимости концентрацій і середніх розмірів дислокаційних петель і присоединенных к ним междузельных атомів кремнія.

The quantitative characterization of complex microdefect structures in silicon crystals grown by Czochralski method and irradiated with various doses of high-energy electrons (18 MeV) has been performed by methods of the high-resolution X-ray diffractometry. Dose dependencies of concentrations and average sizes of dislocation loops and attached interstitial silicon atoms have been determined on the base of characterization results obtained by using the formulas of the statistical dynamical theory of X-ray diffraction by imperfect crystals with randomly distributed microdefects of several types.

Ключові слова: трикристальний рентгенівський дифрактометр, дифузне розсіяння, дифракційний профіль, кремній, преципітат кисню, дислокаційна петля, електронне опромінення, радіаційні дефекти

1. Вступ

Дослідження змін структури і фізичних властивостей кристалів кремнію [1-23] та інших напівпровідникових матеріалів [24-35] під дією опромінення електронами має важливе як наукове, так і практичне значення. Воно обумовлене тим, що для розвитку сучасних технологій виробництва приладів мікро- і наноелектроніки, оптоелектроніки, сенсорів і датчиків і т. п. необхідно вдосконалювати відомі та створювати нові способи виготовлення матеріалів із наперед заданими фізичними властивостями. Розробка таких способів тісно пов'язана зі знанням механізмів утворення первинних і вторинних радіаційних дефектів та їх взаємодії з ростовими мікродфектами. Таке знання дозволяє керованим чином впливати на структурні зміни та пов'язані з ними механічні, електрофізичні, оптичні та інші фізичні властивості створюваних функціональних матеріалів [14, 18, 20, 22, 24-31].

Експериментальні дослідження утворення і трансформацій дефектів у напівпровідниках після опромінення електронами стосуються переважно точкових дефектів і їх дрібних комплексів з атомами домішок. Для спостереження цих дефектів використовуються методи нестационарної спектроскопії глибоких рівнів [3, 8, 11-16, 35], електронного парамагнітного резонансу [17], інфрачервоного поглинання [21] та інші спектроскопічні методи. Невеликі кластери власних точкових дефектів та включень частинок нових фаз в опромінені електронами кристалах напівпровідників спостерігають також за допомогою методів просвічуючої електронної мікроскопії [1, 4-6] та диференційної рентгенівської дифрактометрії [36,37].

Набагато менше робіт присвячено спостереженню в таких кристалах крупних ростових мікродефектів та аналізу їх взаємодії з первинними радіаційними дефектами (див., наприклад, [38-40]). Можливою причиною цього може бути те, що відповідні дослідження можна здійснити тільки методами високороздільної рентгенівської дифрактометрії з використанням результатів статистичної динамічної теорії дифракції рентгенівських променів у недосконалих кристалах, яка була розроблена відносно недавно і дає самоузгоджений опис когерентної і дифузної компонент дифракції у кристалах з кількома типами дефектів довільних розмірів [41-43].

Мета даної роботи полягає у встановленні з допомогою методів високороздільної рентгенівської дифрактометрії змін концентрацій та розмірів домінуючих типів мікродефектів у монокристалах кремнію, вирощених за методом Чохральського, після їх опромінення високоенергетичними електронами. Тим самим буде з'ясовано роль цих мікродефектів у формуванні балансів первинних і вторинних радіаційних дефектів та в утворенні остаточних розподілів електрично активних центрів та пасток. Врахування взаємодії точкових і мікродефектів дозволить більш коректно кількісно описувати результати досліджень іншими методами впливу опромінення високоенергетичними частками на дефектно-домішкову структуру монокристалів кремнію та інших напівпровідникових структур.

Статтю організовано наступним чином. У розд. 2 описано досліджувані зразки та деталі дифракційних вимірювань. В розд. 3 наведено аналітичні вирази теоретичної моделі динамічної рентгенівської дифрактометрії складних дефектних структур у недосконалих кристалах, які описують диференційні розподіли інтенсивності когерентного і дифузного розсіяння (ДР) від мікродефектів різних типів з врахуванням інструментальних особливостей трикристального дифрактометра (ТКД). З допомогою цих виразів проведено аналіз вимірних мап оберненого простору для

досліджуваних зразків, а також відповідних дифракційних профілів, виміряних в режимі ω - 2θ -сканування. В розд. 4. наведено аналогічні аналітичні вирази для опису кривих дифракційного відбиття (КДВ), які вимірюються від досліджуваних кристалів на високороздільному двокристальному дифрактометрі (ДКД) з широко відкритим вікном детектора. З використанням цих виразів проаналізовано виміряні КДВ і уточнено характеристики дефектних структур в досліджуваних зразках. В розд. 4 міститься резюме і короткі висновки з отриманих результатів.

2. Експеримент

Кристали для досліджень мали майже однакову товщину й були вирізані з одного зливка кремнію, вирощеного за методом Чохральського. Два кристали було опромінено високоенергетичними електронами ($E \sim 18$ MeV) дозами 1,8 і 3,6 кГрей (відповідно зразки № 1А і 1Б, див. Табл. 1). Опромінювання високоенергетичними електронами проводилось в Інституті електронної фізики (м. Ужгород).

Дифракційні вимірювання проводились на високороздільному рентгенівському дифрактометрі *PANalytical X'Pert Pro MRD XL*. В цьому дифрактометрі в якості коліматора використовуються два щілинні монохроматори Ge з двократним відбиттям (220), які розташовані в дисперсійному положенні один відносно одного, а в якості аналізатора – щілинний монохроматор Ge з трикратним відбиттям (220).

Вимірювання мап оберненого простору від досліджуваних зразків здійснювалось для симетричного відбиття Si(333). Крім того, проводились вимірювання дифракційних профілів для симетричних відбиттів (111) і (333) від досліджуваних зразків в режимі θ - 2θ сканування, а також вимірювання їх КДВ за відсутності кристала-аналізатора і при широко відкритому вікні детектора.

3. Теорія дифракційних вимірювань

3.1. Мапи оберненого простору

При дослідженні недосконалих монокристалів з дефектами мапи оберненого простору, які реєструється детектором ТКД, є результатом інтегрування розподілів інтенсивності, що дифрагована третім кристалом-аналізатором, по горизонтальній і вертикальній розбіжностях. Ці розподіли

залежать від двох кутових змінних, а саме, відхилень $\Delta\theta$ і $\Delta\theta'$ досліджуваного зразка і кристала-аналізатора від їх точних відбиваючих положень [43 – 45]:

$$I(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_B(\Delta\theta, \Delta\theta') + I_D(\Delta\theta, \Delta\theta'). \quad (1)$$

Коли в ТКД застосовується бездисперсійна схема $(n, -n, n)$, то когерентна (I_B) і дифузна (I_D) компоненти вимірюваної інтенсивності описуються виразами:

$$I_B(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M \left\{ b_M^{-1} \left[b_S^{-1}(x - \Delta\theta) - \Delta\theta \right] \right\} R_{\text{coh}} \left[b_S^{-1}(x - \Delta\theta) \right] R_A(x - \Delta\theta'), \quad (2)$$

$$I_D(\Delta\theta, \Delta\theta') = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M \left\{ b_M^{-1} \left[b_S^{-1}(x - \Delta\theta) - \Delta\theta \right] \right\} \int_{-\infty}^{\infty} dx' r_{\text{diff}}(k_x, k_z) R_A(x' - \Delta\theta'), \quad (3)$$

де I_0 – інтенсивність рентгенівських променів, що падають на зразок, R_M і R_A – коефіцієнти відбиття відповідно монохроматора і аналізатора, а b_M і b_S – параметри асиметрії монохроматора і досліджуваного кристала. У випадку квазидисперсійної схеми $(m, -n, m)$, яка використовувалася в проведених вимірюваннях, строго кажучи, необхідно проводити інтегрування не тільки по горизонтальній, але й по вертикальній розбіжності і по довжині хвилі. Щоправда, завдяки застосуванню багатократних відбиттів у монохроматорі та аналізаторі вплив ефектів дисперсії на дифракційну картину значно зменшується, завдяки чому можна обмежуватись інтегруваннями у вигляді (2) і (3).

Функція r_{diff} у виразі (3) є диференційною дифузною компонентою коефіцієнта відбиття досліджуваного кристала, яку проінтегровано по вертикальній розбіжності дифузно розсіяних променів $\varphi = k_y / K$:

$$r_{\text{diff}}(k_x, k_z) = K^{-1} \int dk_y R_D(\mathbf{k}), \quad (4)$$

де $K = 2\pi/\lambda$, довжина хвилі рентгенівського випромінювання. Компоненти k_x і k_z вектора $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ лежать в площині когерентного розсіяння (\mathbf{K}, \mathbf{H}) , компонента k_z направлена вздовж нормалі \mathbf{n} до вхідної поверхні кристала, а компоненти k_x і k_y лежать на поверхні кристала. Вектор \mathbf{k} описує відхилення хвильового вектора дифузно розсіяної хвилі \mathbf{K}' в оберненому просторі від вузла оберненої ґратки H і його компоненти k_x і k_z зв'язані простими співвідношеннями з кутовими відхиленнями в площині розсіяння хвильових векторів \mathbf{K} падаючого (x) і \mathbf{K}' розсіяного (x') променів від точних бреггівських напрямків. В симетричному випадку дифракції за Бреггом ці співвідношення мають вигляд:

$$\begin{aligned} k_x &= K(2\Delta\theta + x - x')\sin\theta_B, \\ k_z &= -K(x + x')\cos\theta_B. \end{aligned} \quad (5)$$

де θ_B – кут Бреґга.

Якщо півширина функції r_{diff} у виразі (3) набагато більша півширин коефіцієнтів відбиття R_M і R_A , то останні можна замінити δ -функціями і тоді

$$I_{\text{diff}}(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx I_0 R_{iM} R_{iA} r_{\text{diff}}(k_x, k_z), \quad (6)$$

де аргументи описуються виразами:

$$\begin{aligned} k_x &= K(2\Delta\theta - \Delta\theta')\sin\theta_B, \\ k_z &= -K\Delta\theta'\cos\theta_B. \end{aligned} \quad (7)$$

а R_{iM} і R_{iA} – інтегральні відбивні здатності монохроматора і аналізатора.

Після інтегрування у виразі (4) по вертикальній розбіжності k_y функція r_{diff} в області розсіювання Хуаня ($p \leq k_m$) має вигляд:

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = M[A_H(\mathbf{p}) + A_{S-W}(\mathbf{p}) + A_a(\mathbf{p})], \quad (8)$$

$$A_H(\mathbf{p}) = \frac{K}{\pi\sqrt{p^2 + \mu^2}} (2\beta_1 + a_p\beta_2) \arctg \frac{\sqrt{k_m^2 - p^2}}{\sqrt{p^2 + \mu^2}}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} A_{S-W}(\mathbf{p}) &= \frac{K}{\pi\sqrt{p^2 + \mu^2}} \left(\beta_1 + \frac{3}{4}a_p\beta_2 \right) \cdot \\ &\left[\left(\frac{\pi}{2} - \arctg \frac{\sqrt{k_m^2 - p^2}}{\sqrt{p^2 + \mu^2}} \right) \frac{k_m^2}{p^2 + \mu^2} - \frac{\sqrt{k_m^2 - p^2}}{\sqrt{p^2 + \mu^2}} \right] + \end{aligned} \quad (10)$$

$$\frac{K}{2\pi} a_p \beta_2 \frac{\sqrt{k_m^2 - p^2}}{p^2 + \mu^2},$$

$$A_a(\mathbf{p}) = \frac{K}{\pi H} \beta_3 \left[\ln \frac{\sqrt{k_m^2 + \mu^2} + \sqrt{k_m^2 - p^2}}{\sqrt{k_m^2 + \mu^2} - \sqrt{k_m^2 - p^2}} + \frac{2k_m^2}{p^2 + \mu^2} \left(1 - \frac{\sqrt{k_m^2 - p^2}}{\sqrt{k_m^2 + \mu^2}} \right) \right]; \quad (11)$$

а в області розсіювання Стокса-Вільсона ($p \geq k_m$):

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = MB_{S-W}(\mathbf{p}), \quad (12)$$

$$B_{S-W}(\mathbf{p}) = \frac{Kk_m^2}{2(p^2 + \mu^2)^{3/2}} \left(\beta_1 + \frac{3}{4}a_p\beta_2 \right), \quad (13)$$

де $\mathbf{p} = k_x \mathbf{e}_x + k_z \mathbf{e}_z$, \mathbf{e}_x і $\mathbf{e}_z \equiv \mathbf{n}$ – орти в площині розсіювання, $k_m = 1/R^{\text{eff}}$ – радіус межі в просторі оберненої ґратки між областями розсіювання Хуаня і Стокса-Вільсона.

Ефективний радіус дислокаційних петель описується виразом $R_L^{\text{eff}} = R_L \sqrt{H|\mathbf{b}|E}$, де R_L – радіус петель, H – модуль вектора оберненої ґратки, \mathbf{b} – вектор Бюргерса, E – статичний фактор Дебая-Валера.

Ефективний радіус кластерів має вигляд $R_C^{\text{eff}} = \sqrt{H|A_C|E}$, де величина $A_C = \Gamma \varepsilon R_C^3$ – потужність кластера, $\Gamma = (1+\nu)(1-\nu)^{-1}/3$, ε – деформація на межі кластера з матрицею, R_C – радіус сферичного кластера, ν – коефіцієнт Пуассона.

У формулах (8) – (13) використано також позначення:

$$M = cm_0 C^2 E^2 B (2\gamma_0 \mu)^{-1}, \quad \beta_i = B_i / B, \quad i = \overline{1, 3} \quad (14)$$

$$m_0 = \frac{\pi}{4} v_c (H|\chi_{\mathbf{H}}|/\lambda)^2, \quad a_p = \frac{(\mathbf{H}_0 \mathbf{p})^2}{p^2 + \mu^2}, \quad (15)$$

де $\mathbf{H}_0 = \mathbf{H}/H$ – одиничний вектор, c – концентрація дефектів на один вузол кристалічної ґратки, v_c – об'єм елементарної комірки,

Константи B_1 і B_2 у виразі (14) мають різний вигляд для різних типів мікрodefektів [46, 47], а саме, для сферичних кластерів

$$B_1 = 0, \quad B_2 = (4\pi A_C / v_c)^2, \quad (16)$$

а для дислокаційних петель

$$B_1 = \frac{4}{15} (\pi |\mathbf{b}| R_L^2 / v_c)^2, \quad B_2 = \beta B_1, \quad \beta = \frac{1}{4} (3\nu^2 + 6\nu - 1) / (1 - \nu)^2, \quad (17)$$

Константа B_3 у виразі для антисиметричної компоненти (11) має вигляд $B_3 = 2L_{\mathbf{H}} \sqrt{B}/c$, де для випадку кластерів $B = B_2$, а для випадку дислокаційних петель $B = B_1$.

Для кластерів з більш низькою симетрією, наприклад, дископодібних частинок нової фази (преципітатів), які залягають в площинах $\{100\}$ кубічного кристала, більш адекватною моделлю для опису ДР будуть вирази (8) – (14) з коефіцієнтами $B_1 = B_2$, в яких потужність кластера визначається як $A_C = 3\Gamma \varepsilon V_c / (4\pi)$, де $V_c = \pi R_c^2 d$ – об'єм, d – товщина преципітата.

Також у випадку крупних дислокаційних петель для більш точного опису форми розподілів інтенсивності ДР необхідно враховувати дискретність їх орієнтацій. Відповідні формули, які є більш громіздкими у порівнянні з (8) – (13), можна знайти в роботах [48, 49].

У формулах (9) – (11) і (13) – (15) інтерференційний коефіцієнт поглинання μ грає роль параметра обрізання і усуває розбіжність при $p \rightarrow 0$,

яка існує в аналогічних формулах кінематичної теорії. Його залежність від кутових змінних описується виразом:

$$\mu = \frac{\mu_0}{2\gamma_0} \frac{1+b}{2} \frac{E}{|g|} [r_i(z) + r_i(z')], \quad r_i(z) = \sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{u^2 + v^2} - u)}, \quad (18)$$

$$u(z) = (z^2 - g^2)E^{-2} + \kappa^2 - 1, \quad v(z) = 2(zgE^{-2} - p),$$

де нормовані змінні та параметри означено наступним чином:

$$z = \frac{\Delta\theta \sin(2\theta_B)}{C|\chi_{\text{TH}}|} \sqrt{b}, \quad z' = \frac{(\Delta\theta' - 2\Delta\theta) \sin(2\theta_B)}{C|\chi_{\text{TH}}|} \sqrt{b}, \quad (19)$$

$$g = -|\chi_{i0}| \frac{1+b^{-1}}{2C|\chi_{\text{TH}}|} \sqrt{b}, \quad \kappa = \frac{|\chi_{\text{IH}}|}{|\chi_{\text{TH}}|}, \quad p = \frac{\chi'_{\text{TH}}\chi'_{\text{IH}} + \chi''_{\text{TH}}\chi''_{\text{IH}}}{|\chi_{\text{TH}}|^2},$$

При наявності у кристалі випадково розташованих дефектів декількох типів α з розподілами за розмірами i дифузна компонента коефіцієнта відбиття (4) описується виразом (порівн. [46, 47]):

$$r_{\text{diff}}(\mathbf{p}) = \sum_{\alpha} \sum_i r_{\text{diff}}^{\alpha i}(\mathbf{p}), \quad (20)$$

де $r_{\text{diff}}^{\alpha i}(\mathbf{p})$ – дифузна компонента коефіцієнта відбиття для дефектів типу α з i -м розміром.

Аналогічно, показник статичного фактора Дебая-Валера за відсутності кореляцій в розташуванні дефектів складається з суми внесків кожної популяції дефектів $\{\alpha i\}$:

$$L_{\text{H}} = \sum_{\alpha} \sum_i L_{\text{H}}^{\alpha i}. \quad (21)$$

Детальні вирази для показника статичного фактора Дебая-Валера для різних типів дефектів можна знайти у відомих джерелах [46, 47, 50].

Слід зауважити, що при наявності у кристалі кількох типів дефектів слід очікувати, що найкраще на мапах будуть розрізнятися дефекти середніх і крупних розмірів завдяки створюваним ними вузьким і високим розподілам інтенсивності ДР (див. рис. 1).

3.2. Дифракційний профіль при ω -2 ϑ скануванні

При вимірюваннях на ТКД в режимі ω -2 ϑ сканування детектор реєструє дифракційний профіль, який описується виразом (1) при $\Delta\theta' = 2\Delta\theta$ і після нормування на інтенсивність променів, що падають на досліджуваний зразок, у випадку поляризованого випромінювання має вигляд:

$$R_{\text{ТКД}}(\Delta\theta) = I(\Delta\theta, 2\Delta\theta) / (I_0 R_{\text{IM}}) = [I_{\text{B}}(\Delta\theta, 2\Delta\theta) + I_{\text{D}}(\Delta\theta, 2\Delta\theta)] / (I_0 R_{\text{IM}}), \quad (22)$$

тобто, в цей дифракційний профіль, крім когерентної робить внесок також і дифузна компонента. В умовах симетричної геометрії дифракції за Бреггом на монохроматорі та досліджуваному зразку, коли $b_s = b_m = 1$, будемо мати (див. також [51]):

$$I_B(\Delta\theta, 2\Delta\theta) = I_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx R_M(x - 2\Delta\theta) R_{\text{coh}}(x - \Delta\theta) R_A(x - 2\Delta\theta), \quad (23)$$

$$I_D(\Delta\theta, \Delta\theta') \approx I_0 R_{\text{im}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' r_{\text{diff}}(k_x, k_z) R_A(x' - 2\Delta\theta), \quad (24)$$

де компоненти вектора \mathbf{k} мають вигляд:

$$k_x = K(2\Delta\theta - x') \sin\theta_B, \quad k_z = -Kx' \cos\theta_B. \quad (25)$$

Тоді у випадку неполяризованого випромінювання отримаємо вираз для нормованого дифракційного профілю:

$$R_{\text{TCD}}(\Delta\theta) = \sum_j \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[\rho R_M^{(j)}(x' - 2\Delta\theta) R_{\text{coh}}^{(j)}(x' - \Delta\theta) + \rho_j r_{\text{diff}}^{(j)}(k_x, k_z) \right] R_A^{(j)}(x' - 2\Delta\theta), \quad (26)$$

де сумування ведеться по σ - і π -поляризаціях, а вагові множники поляризації означено як

$$\rho = 1 / (R_{\text{im}}^{(\sigma)} + R_{\text{im}}^{(\pi)}), \quad \rho_j = R_{\text{im}}^{(j)} / (R_{\text{im}}^{(\sigma)} + R_{\text{im}}^{(\pi)}). \quad (27)$$

Інтегрування дифузної компоненти по куту виходу у виразі (26) було залишено для того, щоб згладити екстинкційні ефекти, які спостерігаються на дифракційному профілі в області повного відбиття.

Як видно з виразів (26) і (27), за рахунок нерівності $\rho_j \ll \rho$ дифузна компонента в дифракційному профілі ω -2 ϑ -сканування буде дуже сильно пригніченою у порівнянні з когерентною компонентою (див. рис. 2). В зв'язку з цим слід очікувати, що основний вплив дефектів на дифракційні профілі R_{TCD} буде здійснюватись через статичний фактор Дебая-Валера і коефіцієнт поглинання внаслідок ДР, які входять у когерентну компоненту і спричиняють її ослаблення.

3.3. Криві дифракційного відбиття

У випадку брегг-дифракції рентгенівських променів в монокристалі з однорідно розподіленими дефектами дифузна компонента КДВ, що вимірюється на ТКД з усунутим аналізатором і при широко відкритому вікні детектора, може бути виражена через уявну частину дисперсійної поправки внаслідок ДР до хвильового вектора когерентних хвиль [46, 47]:

$$R_{\text{diff}}(\Delta\theta) = F_{\text{dyn}}(\Delta\theta) \mu_{\text{HH}}(\Delta\theta) / (2\gamma_0 \mu_i) \quad (28)$$

де $F_{\text{dyn}} \sim 1$ – динамічний інтерференційний множник, γ_0 – направляючий косинус хвильового вектора падаючої плоскої хвилі, μ_i – інтерференційний множник, який можна оцінити в області повного відбиття як $\mu_i \sim \pi/\Lambda$, а поза нею як $\mu_i \approx (1+b)\mu_0/(2\gamma_0)$.

Дисперсійна поправка μ_{HH} в (28) безпосередньо пов'язана з коефіцієнтом екстинкції внаслідок ДР μ_{ds} і при наявності у кристалі випадково розташованих дефектів декількох типів α з розподілами за розмірами i описується виразом [46, 47]:

$$\mu_{\text{HH}}(\Delta\theta) = \mu_{\text{ds}}(k_0) = \sum_{\alpha} \sum_i \mu_{\text{ds}}^{\alpha i}(k_0) \quad (29)$$

де $\mu_{\text{ds}}^{\alpha i}$ – коефіцієнт поглинання внаслідок ДР від дефектів типу α з i -м розміром, $k_0 = K \Delta\theta \sin(2\theta_B)$, $K = 2\pi/\lambda$, λ – довжина хвилі рентгенівського випромінювання, θ_B – кут Брега.

Вирази (28) і (29) дозволяють описувати кутові розподіли дифузної компоненти КДВ, яка складається з внесків декількох типів дефектів з розподілами за розмірами. Крім того, вираз (29) описує також поглинання когерентної компоненти КДВ внаслідок ДР. Як наслідок, формули (28) і (29) дозволяють проводити самоузгоджений кількісний опис КДВ, які вимірюються від монокристалів зі складною дефектною структурою.

4. Аналіз вимірювань і обговорення результатів

У монокристалах кремнію, які вирощені за методом Чохральського, спостерігаються, як правило, декілька типів так званих ростових мікрodefektів, а саме, преципітати кисню, дефекти упаковки, дислокаційні петлі впровадженого типу або вакансійні пори. Утворені при охолодженні кристала мікрodefekти мають різні розподіли за розмірами в широких межах від нано- до мікрометрів. Ці розподіли еволюціонують під час будь-яких термічних обробок при підвищеній температурі шляхом взаємодії з точковими дефектами (міжвузельними атомами кисню та кремнію, а також вакансіями). Зокрема, трансформація мікрodefектної структури кристалів кремнію може відбуватися внаслідок термічних навантажень на кристал, які виникають при його опроміненні високоенергетичними частинками.

В моделі мікрodefектної структури монокристала, яка була використана при обробці вимірних мап оберненого простору, дифракційних профілів і КДВ, припускалось, що в кристалі наявні мікрodefekти трьох типів, а саме, сферичні і дископодібні (з товщиною h_p) преципітати з радіусом R_p і

концентрацією n_p , а також кругові дислокаційні петлі з радіусом R_L і концентрацією n_L . При аналізі вимірених дифракційних профілів і КДВ враховувався також внесок теплового ДР та вплив інструментальних факторів.

Результати рентгенівських високороздільних дифрактометричних вимірювань неопроміненого (еталонного) зразка кремнію № 1 та зразків кремнію, які були опромінені високоенергетичними електронами (№ 1А і № 1Б), показано на рис. 1 – 3, а відповідні результати характеристики мікродфектної структури цих кристалів, які отримано шляхом обробки цих дифракційних картин, наведено в табл. 2.

Слід відмітити, що ключову роль в отриманні цих детальних кількісних характеристик мікродфектів належить виміреним КДВ, які дозволяють ефективно реалізувати компроміс між найвищою інформативністю мап оберненого простору і найвищою чутливістю інтегральних дифракційних методів. Можливість одночасного визначення характеристик мікродфектів кількох типів при обробці КДВ була реалізована завдяки значним зсувам меж між областями розсіяння Хуаня та Стокса-Вільсона для преципітатів кисню та дислокаційних петель з сильно відмінними ефективними радіусами. Крім того, істотним для досягнення однозначності діагностики було узгодження внесків когерентної та дифузних компонент в області повного відбиття, а також врахування наявності антисиметричної компоненти в інтенсивності ДР від преципітатів кисню та дислокаційних петель.

Аналіз отриманих результатів обробки КДВ для обох рефлексів (рис. 3 і табл. 2) показує, що під впливом теплового навантаження на кристал внаслідок опромінення різними дозами високоенергетичних електронів помітних змін в характеристиках преципітатів кисню не відбувається. В той же час, для дислокаційних петель спостерігаються відчутні зміни, а саме, майже на порядок збільшується концентрація дислокаційних петель середніх розмірів (50 нм), хоча дрібні (1 нм) і крупні (15 мкм) петлі залишаються в початкових концентраціях. Крім того, згідно з результатами аналізу вимірених КДВ для рефлексу (111), які більш чутливі до структури тонкого приповерхневого шару з товщиною близько кількох мікрометрів, в цьому шарі після обох доз опромінення майже вдвоє виросла концентрація дрібних петель.

Ріст петель відбувається за рахунок агломерації надлишкових міжвузольних атомів кремнію, які виникли в якості радіаційних дефектів після опромінення кристала високоенергетичними частинками. При цьому згідно з результатами обробки КДВ дещо несподівано виявляється нелінійний характер залежності кількості агломерованих надлишкових

міжвузольних атомів кремнію в основному об'ємі кристала від дози опромінення, оскільки при подвоєнні дози вона виявилась вдвічі меншою. Це видиме протиріччя розв'язується з допомогою аналізу мап оберненого простору, які більш чутливі до розмірів дефектів порівнянно з КДВ.

Аналіз мап оберненого простору (рис. 1) і відповідних їм дифракційних профілів (рис. 2) показує, що насправді при більшій дозі опромінення відбувся подальший перерозподіл розмірів дислокаційних петель внаслідок якого середній розмір дислокаційних петель, які мали радіус 50 нм зменшився приблизно до 25 нм при збільшенні їх концентрації приблизно в вісім разів. Такий перерозподіл характеристик дислокаційних петель знімає вказане вище протиріччя, оскільки в цьому випадку вклад дислокаційних петель середніх розмірів в КДВ залишається приблизно таким самим, як і при попередніх характеристиках петель, але концентрація агломерованих надлишкових міжвузольних атомів кремнію в них ($C_i^L \approx 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$) стає приблизно в два рази більшою, ніж для зразка з удвічі меншою дозою опромінення ($C_i^L \approx 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$).

Це спостереження підтверджується поведінкою когерентних компонент відповідних КДВ, які фактично вимірюються на ТКД в режимі ω - 2θ сканування (рис. 2). Ці дифракційні профілі показують наявність сильнішого поглинання внаслідок ДР і більшу асиметрію для зразка № 1Б у порівнянні зі зразком № 1А. Причиною таких відмінностей є якраз зміна характеристик петель і пов'язане з нею збільшення показника статичного фактора Дебая-Валера приблизно вдвоє.

На завершення слід відзначити, що проведене дослідження демонструє корисність і перспективність вивчення структурних змін у монокристалах кремнію після їх опромінення високоенергетичними електронами з допомогою методів високороздільної рентгенівської дифрактометрії, які ґрунтуються на результатах статистичної динамічної теорії дифракції рентгенівських променів у недосконалих кристалах. Отримана в таких дослідженнях кількісна інформація про взаємодію точкових дефектів і мікрodefektів дозволить більш коректно аналізувати результати досліджень впливу опромінення високоенергетичними частками на дефектно-домішкову структуру монокристалів кремнію та інших напівпровідникових структур, які проводяться іншими, зокрема, спектроскопічними методами.

5. Резюме і висновки

Кількісну характеристику складних мікроефектних структур у кристалах кремнію, вирощених за методом Чохральського і опромінених двома дозами високоенергетичних електронів (18 MeV), було проведено методами високороздільної рентгенівської дифрактометрії, а саме, методом вимірювання мап оберненого простору для досліджуваних зразків з допомогою ТКД і відповідних дифракційних профілів в режимі ω - 2θ -сканування, а також КДВ, які вимірюються в режимі високороздільного ДКД (ω -сканування).

На основі результатів характеристики, що проводилась з використанням формул статистичної динамічної теорії дифракції рентгенівських променів у недосконалих кристалах з випадково розподіленими мікроефектами декількох типів, визначено вплив різних доз опромінення електронами на характеристики ростової мікроефектної структури кристала кремнію.

Встановлено, що під впливом теплового навантаження на кристал внаслідок опромінення різними дозами високоенергетичних електронів помітних змін в характеристиках преципітатів кисню не відбувається. Серед дислокаційних петель різних розмірів сильних змін в сторону збільшення зазнають тільки концентрації дислокаційних петель середніх розмірів, що відбувається за рахунок агломерації надлишкових міжвузольних атомів кремнію, які виникли в якості радіаційних дефектів після опромінення кристала високоенергетичними частинками.

При збільшенні дози опромінення вдвоє виявлено перерозподіл дислокаційних петель середніх розмірів в сторону зменшення радіусів майже в два рази при одночасному збільшенні їх концентрації майже на порядок. При цьому кількість агломерованих надлишкових міжвузольних атомів кремнію для подвоєної дози опромінення збільшується приблизно в два рази.

Проведене дослідження демонструє важливість вивчення структурних змін у монокристалах кремнію після їх опромінення високоенергетичними електронами з допомогою методів високороздільної рентгенівської дифрактометрії, які можуть дати додаткову корисну кількісну інформацію про взаємодію точкових дефектів і мікроефектів у цих кристалах. Отримане в таких дослідженнях знання дозволить більш коректно аналізувати результати досліджень іншими методами впливу опромінення високоенергетичними частинками на дефектно-домішкову структуру монокристалів кремнію та інших напівпровідникових структур.

Література

1. *L. Fedina, A. Gutakovskii, A. Aseev, J. Van Landuyt, J. Vanhellemont.* Extended Defects Formation in Si Crystals by Clustering of Intrinsic Point Defects Studied by in-situ Electron Irradiation in an HREM. – Phys. Stat. Sol. A. – 1999. – **171**, No. 1. – P. 147–158.
2. *Yu. I. Golovin, A. A. Dmitrievskii, I. A. Pushnin, N. Yu. Suchkova.* Reversible Changes in the Microhardness of Silicon Crystals under Electron Irradiation with Low Doses. – Phys. Solid State. – 2004. – **46**, No. 10. – P. 1851–1854.
3. *V. Neimash, M. Kras'ko, A. Kraitchinskii, V. Voytovych, V. Tishchenko, E. Simoen, J. M. Rafi, C. Claeys, J. Versluys, O. De Gryse, P. Clauws.* DLTS Studies of high-temperature electron irradiated Cz n-Si. – Phys. Stat. Sol. – A. – 2004. – **201**, No. 3. – P. 509–516.
4. *J. Yamasaki, Y. Ohno, H. Kohno, N. Ozaki, S. Takeda.* Novel amorphization process in silicon induced by electron irradiation. – J. Non-cryst. Solids. – 2002. – **299-302**. – P. 793–797.
5. *S. Takeda, J. Yamasaki.* Amorphization in silicon by electron irradiation. – Phys. Rev. Lett. – 1999. – **83**, No. 2. – P. 320–323.
6. *S. Takeda, J. Yamasaki, Y. Kimura.* Electron irradiation effects in Si observed at 4.2–25 K by means of in situ transmission electron microscopy. – Physica B. – 1999. – **273-274**. – P. 476–479.
7. *Ю. И. Головин, А. А. Дмитриевский, Н. Ю. Сучкова.* Структура комплексов, ответственных за радиационно-стимулированное разупрочнение монокристаллов кремния. – ФТТ. – 2006. – **48**, №2. – С. 262–265.
8. *М. В. Бадьлевич, И. В. Блохин, Ю. И. Головин, А. А. Дмитриевский, С. В. Карцев, Н. Ю. Сучкова, М. Ю. Толотаев.* Немонотонные изменения концентрации радиационных дефектов донорного и акцепторного типов в кремнии, индуцируемые потоками β -частиц малой интенсивности. – ФТП. – 2006. – **40**, № 12. – С. 1409–1411.
9. *Б. Н. Мукашев, Х. А. Абдуллин, Ю. В. Горелкинский.* Метастабильные и бистабильные дефекты в кремнии. – Успехи физических наук. – 2000. – **170**, № 2. – С.143–155.
10. *Л. И. Федина.* О рекомбинации и взаимодействии точечных дефектов с поверхностью при кластеризации точечных дефектов в Si. – ФТП. – 2001. – **35**, № 9. – С. 1120–1127.
11. *M. Mikelsen, E. V. Monakhov, G. Alfieri, B. S. Avset, B. G. Svensson* Kinetics of divacancy annealing and divacancy-oxygen formation in oxygen-enriched high-purity silicon. – Phys. Rev. B. – 2005. – **72**, No. 19. – P. 195207[6].
12. *J. L. Lindström, T. Hallberg, D. Åberg, B. G. Svensson, L. I. Murinz, V. P. Markevich.* Formation of oxygen dimers in silicon during electron-irradiation above 250 °C. – Mater. Sci. Forum. – 1997. – **258-263**. – P. 367–372.
13. *M. Mikelsen, J. H. Bleka, J. S. Christensen, E. V. Monakhov, B. G. Svensson, J. Härkönen, B. S. Avset.* Annealing of the divacancy-oxygen and vacancy-oxygen complexes in silicon. – Phys. Rev. B. – 2007. – **75**, No. 15. – P. 155202[8].

14. *S. M. Kanga, T. J. Eoma, S. J. Kima, H. W. Kima, J. Y. Chob, Lee Chongmu.* Reverse recovery characteristics and defect distribution in an electron-irradiated silicon p–n junction diode. – *Mater. Chem. Phys.* – 2004. – **84**. – P. 187–191.
15. *S. Kaschieva, V. Gueorguiev, E. Halova, S. N. Dmitriev, J. Višniakov, A. J. Marcinkevičius.* Defect Formation in 18 MeV Electron Irradiated MOS Structures. – *Bulg. J. Phys.* – 2006. – **33**. – P. 48–54.
16. *J. Višniakov, A. J. Marcinkevičius.* Investigation of Silicon Defects Parameters in Electron Irradiated Diodes. – *Electronics and Electrical Engineering*. – Kaunas: Technology. – 2007. – No. 4(76). – P. 13–16.
17. *A. Astakhov, F. Finger, R. Carius, A. Lambertz, I. Neklyudov, Yu. Petrusenko, V. Borysenko, D. Barankov.* Paramagnetic centers in amorphous and microcrystalline silicon irradiated with 2 MeV electrons. – *Вопросы атомной науки и техники*. – 2007. – № 2.40 Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (90), С. 39–42.
18. *S. Borini, G. Amato, M. Rocchia, L. Boarino, A. M. Rossi.* Electron-beam irradiation of porous silicon: Application to micromachining. – *J. Appl. Phys.* – 2003. – **93**. – P. 4439–4442.
19. *N. Inoue, H. Ohyama, Y. Goto, T. Sugiyama.* Quantitative analysis of complexes in electron irradiated CZ silicon. – *Physica B*. – 2007. – **401–402**. – P. 477–482.
20. *W. Bronner, J. P. Kleider, R. Brüggemann, M. Mehring.* Defects and transport properties of electron-irradiated microcrystalline silicon with successive annealing. – *Thin Solid Films*. – 2003. – **427**, No. 1-2. – P. 51–55
21. *A. Nakanishi, M. Suezawa, N. Fukata.* Optical Absorption Study of Electron-irradiated Czochralski-grown Silicon Doped with Hydrogen. – *Jpn. J. Appl. Phys.* – 2002. – **41**. – P. 3629–3636.
22. *L. Vines, E. V. Monakhov, A. Yu. Kuznetsov, R. Kozłowski, P. Kaminski, B. G. Svensson.* Formation and origin of the dominating electron trap in irradiated p-type silicon. – *Phys. Rev. B*. – 2008. – **78**, No. 8. – 085205[7].
23. *H. Cui, Y. Li, G. Chen, L. Cai, E. Zhao.* Thermal Behavior of Electron Irradiation defects in CZ-Si. – *Mater. Sci. Forum*. – 2007. – **561–565**. – P. 1113–1116.
24. *M. Ghoranneviss, A. H. Sari, M. H. Hantehzadeh, H. Hora, F. Osman, K. R. Doolan, R. Höpfl, G. Benstetter.* Subthreshold defect generation by intense electron beams in semiconductors for microelectronics. – *Proc. SPIE*. – 2005. – **6035**, – P. 60351[7].
25. *A. Y. Polyakov, N. B. Smirnov, A. V. Govorkov, I.-H. Lee, J. H. Baek, N. G. Kolin, V. M. Boiko, D. I. Merkurisov, S. J. Pearton.* Electron Irradiation Effects in GaN/InGaN Multiple Quantum Well Structures. – *J. Electrochem. Soc.* – 2008. – 155, H31.
26. *F. Tuomisto, V. Ranki, D. C. Look, G. C. Farlow.* Introduction and recovery of Ga and N sublattice defects in electron-irradiated GaN. – *Phys. Rev. B* – 2007. – **76**, No. 16. – P. 165207[10].

27. *A. Khan, J. Gou, M. Imazumi, M. Yamaguchi.* Interaction of electron irradiation with nitrogen-related deep levels in InGaAsN. – Appl. Phys. Lett. – 2007. – **91**, No. 4. – P. 043503[3].
28. *K. Danno, D. Nakamura, T. Kimoto.* Investigation of carrier lifetime in 4H-SiC epilayers and lifetime control by electron irradiation. – Appl. Phys. Lett. – 2007. – **90**, No. 20. – P. 202109[3].
29. *A. E. Kar'kin, V. V. Shchennikov, B. N. Goshchitski, S. E. Danilov, V. L. Arbuzov, V. A. Kul'bachinski.* Effect of Electron Irradiation on the Galvanomagnetic Properties of $\text{In}_x\text{Bi}_{2-x}\text{Te}_3$ Semiconductor Single Crystals. – Phys. Solid State – 2003. – **45**, No. 12. – P. 2249-2254.
30. *L. Ion, S. Antohe.* Electron-irradiation effects on CdSe thin films investigated by thermally stimulated current method. – J. Appl. Phys. – 2005. – **97**, No.1. – P. 013513[4].
31. *E.-M. Pavelescu, A. Gheorghiu, M. Dumitrescu, A. Tukiainen, T. Jouhti, T. Hakkarainen.* Electron-irradiation enhanced photoluminescence from GaInNAs/GaAs quantum wells subject to thermal annealing. – Appl. Phys. Lett. – 2004. – **85**, No. 25. – P. 6158[3].
32. *S. J. Henley, D. Cherns.* Cathodoluminescence studies of threading dislocations in InGaN/GaN as a function of electron irradiation dose. – J. Appl. Phys. – 2003. – **93**, No. 7. – P. 3934[6].
33. *X. Du, M. Takeguchi, M. Tanaka, K. Furuya.* Formation of crystalline Si nanodots in SiO_2 films by electron irradiation. – Appl. Phys. Lett. – 2003. – **82**, No. 7. – P. 1108[3].
34. *M. D'Amico, F. Messina, M. Cannas, M. Leone, R. Boscaino.* Inhomogeneous width of oxygen-deficient centers induced by electron irradiation of silica. – Phys. Rev. B – 2009. – **79**, No. 6. – P. 064203[8].
35. *S. Kaschieva, K. G. Stefanov, D. Karpuzov.* Electron irradiation of ion-implanted n-type Si-SiO₂ structures studied by deep-level transient spectroscopy. – Appl. Phys. A – 1998. – **66**. – P. 561–563.
36. *K. Karsten, P. Ehrhart.* Frenkel pairs in low-temperature electron-irradiated InP: X-ray diffraction. – Phys. Rev.B. – 1995. – **51**, No. 16. – P. 10508–10519.
37. *A. Pillukat, K. Karsten, P. Ehrhart.* Point defects and their reactions in e^- irradiated GaAs investigated by X-ray diffraction methods. – Phys. Rev.B. – 1996. – **53**, No. 12. – P. 7823–7835.
38. *V. V. Dovganyuk, I. M. Fodchuk, O. G. Gimchinsky, A. V. Oleinych-Lysyuk, A. I. Nizkova.* Determination of dominant type of defects in Cz-Si single crystals after irradiation with high-energy electrons by a change in X-ray reflectivity. – Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 2006. – **9**, No. 2. – P. 95–103.
39. *V.V. Dovganyuk, N.V.Litvinchuk V.V.Slobodjan, I.M.Fodchuk.* Defect structure changes in the single Si-crystals after irradiation by high-energy electrons and long natural aging by high-resolution three-crystal X-ray diffractometry// Proc. of SPIE. – 2008. - V. 7008, 7008 (1B1-1B7)
40. *В. В. Довганюк, И. М. Фодчук, А. Г. Гимчинский, А. В. Олейнич-Лысюк, Е. Н. Кисловский, Т. П. Владимирова, Н. Д. Раранский, З. Свянтек.* Особенности в

- распределении микродефектов в монокристаллах Cz-Si после облучения высокоэнергетическими электронами по данным кривых дифракционного отражения рентгеновских лучей. – *Металлофиз. и новейшие технол.* – 2006. – **28**, № 10. – С. 1280–1295.
41. *V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, E. G. Len', E. V. Pervak.* Bragg Diffraction of X-Rays by Single Crystals with Large Microdefects. I. Generalized Dynamical Theory. – *Phys. Stat. Sol. B.* – 2001. – **227**, No. 2. – P.429–447.
42. *S. I. Olikhovskii, V. B. Molodkin, E. N. Kislovskii, E. G. Len', E. V. Pervak.* Bragg Diffraction of X-Rays by Single Crystals with Large Microdefects. II. Dynamical Diffuse Scattering Amplitude and Intensity. – *Phys.Stat. Sol. B.* – 2002. – **231**, No. 1. – P.199–212.
43. *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, G. E. Ice, R. A. Barabash, I. M. Karnaukhov.* Dynamical Bragg and diffuse scattering effects and implications for diffractometry in the 21st century. – *Diffuse scattering and the fundamental properties of materials.* – Editors: R. I. Barabash, G. E. Ice, and P. E.A. Turchi. – Momentum Press, New Jersey, 2009. – P.
44. *С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкін, Є. М. Кисловський, О. В. Решітник, Т. П. Владімірова, Є. Г. Лень, Дж. Е. Айс, Р. О. Барабаши, Р. Келер, Д. О. Григор'єв.* Роль об'ємних дефектів і деформацій в приповерхневих шарах трьох монокристалів у формуванні профілів трикристальної рентгенівської дифрактометрії. – *Металлофиз.* – 2005. – **27**, № 7. – С. 947–970.
45. *С. Й. Оліховський, В. Б. Молодкін, Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, Т. П. Владімірова, Дж. Е. Айс, Р. О. Барабаши, Р. Келер, Д. О. Григор'єв.* Аналітичний опис дифузних піків на профілях трикристальної рентгенівської дифрактометрії від монокристалів з мікро дефектами. – *Металлофиз.* – 2005. – **27**, № 9. – С. 1223–1231.
46. *Т. П. Владімірова, Р. Ф. Середенко, В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Є. М. Кисловський.* Модифікований динамічний модель високороздільної двокристальної рентгенівської дифрактометрії мікродефектів у монокристалах. – *Металлофиз. новейшие технол.* – 2007 – **29**, № 6. – С. 711–726.
47. *V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, R. F. Seredenko, B. V. Sheludchenko.* Dynamical theoretical model of the high-resolution double-crystal x-ray diffractometry of imperfect single crystals with microdefects. – *Phys. Rev. B.* – 2008. – **78**, No. 22. – P. 224109–224121.
48. *В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, Б. В. Шелудченко, Є. Г. Лень, М. Т. Когут.* Анізотропна модель динамічної трикристальної Брегг-дифрактометрії монокристалів з дефектами. Когерентна і дифузна складові динамічної картини розсіяння. – *Металлофиз. новейшие технол.* – 2008. – **30**, № 9. – С.1173–1188.

49. *V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. G. Len, E. N. Kislovskii, V. P. Kladko, O. V. Reshetnyk, T. P. Vladimirova, B. V. Sheludchenko.* Sensitivity of triple-crystal X-ray diffractometers to microdefects in silicon. – Phys. Stat. Sol. A. – 2009. – **206**, No. 8.– P.1761–1765.
50. *М.А. Кривоглаз.* Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. – Киев: Наук. думка, 1983. – 408 с.
51. *В. Б. Молодкин, С. И. Олиховский, М. Е. Осинковский, В. В. Кочелаб, А. Ю. Казимиров, М. В. Ковальчук, Ф. Н. Чуковский.* Применение в трехкристальной рентгеновской дифрактометрии динамической теории рассеяния кристаллами с однородно распределенными дефектами. – Металлофиз. – 1984 – **6**, № 3. – С. 7–15.

Таблиця 1

Характеристики досліджуваних кристалів кремнію.

Зразок №	Доза опромінення, кГрей	Товщина, мм
1	-	4,271
1А	1,8	4,263
1Б	3,6	4,261

Таблиця 2

Характеристики преципітатів кисню (середній радіус R_p , концентрація n_p) і дислокаційних петель (R_L, n_L), та концентрації атомів кисню і кремнію відповідно в преципітатах (C_o^p) і дислокаційних петлях (C_i^L).

Зразок №	Рефлекс hkl	Преципітати кисню					Дислокаційні петлі		
		Форма	R_p , нм	h_p	$n_p, \text{см}^{-3}$	$C_o^p, \text{см}^{-3}$	R_L , нм	$n_L, \text{см}^{-3}$	$C_i^L, \text{см}^{-3}$
1	111	сфера	1300	–	$4 \cdot 10^6$	$1,6 \cdot 10^{18}$	1	$5,0 \cdot 10^{16}$	$2,46 \cdot 10^{18}$
		диск	500	10,7	$9 \cdot 10^5$	$3,5 \cdot 10^{14}$	50	$1,0 \cdot 10^{12}$	$0,12 \cdot 10^{18}$
							15000	$1,7 \cdot 10^6$	$0,02 \cdot 10^{18}$
	333	сфера	1300	–	$7 \cdot 10^5$	$0,3 \cdot 10^{18}$	1	$2,0 \cdot 10^{16}$	$0,99 \cdot 10^{18}$
		диск	500	10,7	$9 \cdot 10^5$	$3,5 \cdot 10^{14}$	50	$1,0 \cdot 10^{12}$	$0,12 \cdot 10^{18}$
						$\Sigma=1,6 \cdot 10^{18}$	15000	$1,7 \cdot 10^6$	$0,02 \cdot 10^{18}$
								$\Sigma=2,60 \cdot 10^{18}$	
1А	111	сфера	1300	–	$4 \cdot 10^6$	$1,6 \cdot 10^{18}$	1	$9,0 \cdot 10^{16}$	$4,43 \cdot 10^{18}$
		диск	500	10,7	$9 \cdot 10^5$	$3,5 \cdot 10^{14}$	50	$1,9 \cdot 10^{13}$	$2,34 \cdot 10^{18}$
							15000	$1,7 \cdot 10^6$	$0,02 \cdot 10^{18}$
	333	сфера	1300	–	$7 \cdot 10^5$	$0,3 \cdot 10^{18}$	1	$2,0 \cdot 10^{16}$	$0,99 \cdot 10^{18}$
		диск	500	10,7	$9 \cdot 10^5$	$3,5 \cdot 10^{14}$	50	$8,0 \cdot 10^{12}$	$0,99 \cdot 10^{18}$
							15000	$1,7 \cdot 10^6$	$0,02 \cdot 10^{18}$
					$\Sigma=0,3 \cdot 10^{18}$			$\Sigma=6,79 \cdot 10^{18}$	
1Б	111	сфера	1300	–	$4 \cdot 10^6$	$1,6 \cdot 10^{18}$	1	$9,0 \cdot 10^{16}$	$4,43 \cdot 10^{18}$
		диск	500	10,7	$9 \cdot 10^5$	$3,5 \cdot 10^{14}$	50	$7,5 \cdot 10^{12}$	$0,92 \cdot 10^{18}$
							15000	$1,7 \cdot 10^6$	$0,02 \cdot 10^{18}$
	333	сфера	1300	–	$7 \cdot 10^5$	$0,3 \cdot 10^{18}$	1	$2,0 \cdot 10^{16}$	$0,99 \cdot 10^{18}$
		диск	500	10,7	$9 \cdot 10^5$	$3,5 \cdot 10^{14}$	50	$4,0 \cdot 10^{12}$	$0,49 \cdot 10^{18}$
							15000	$1,7 \cdot 10^6$	$0,02 \cdot 10^{18}$
					$\Sigma=0,3 \cdot 10^{18}$			$\Sigma=5,37 \cdot 10^{18}$	
								$\Sigma=1,50 \cdot 10^{18}$	

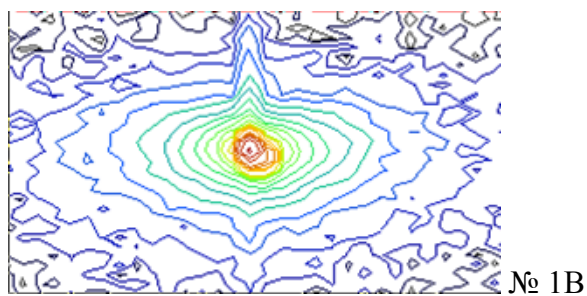
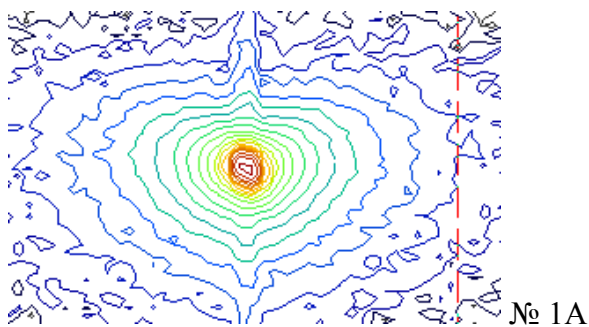
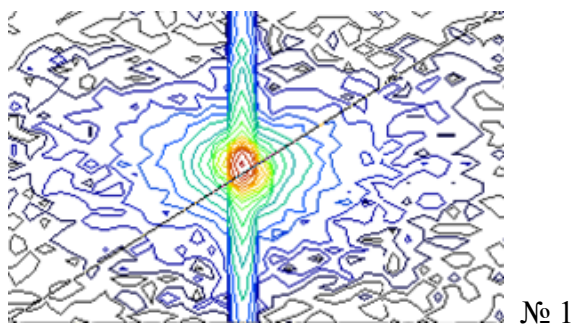


Рис. 1. Експериментальні мапи оберненого простору для еталонного (№ 1) та опромінених електронами (№ 1A і 1B) кристалів кремнію, рефлекс (333), випромінювання $\text{CuK}_{\alpha 1}$.

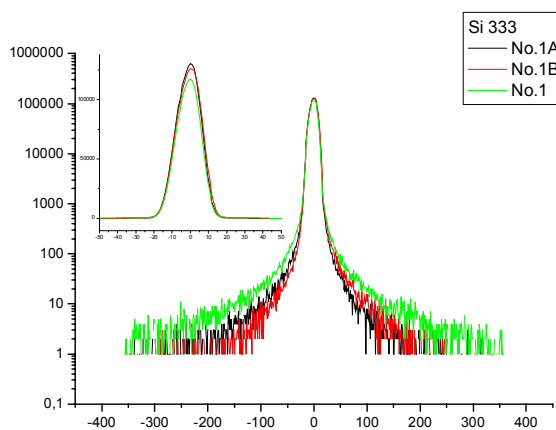


Рис. 2. Експериментальні дифракційні профілі ω - 2θ сканування для еталонного (№ 1) та опромінених електронами (№ 1A і 1B) кристалів кремнію, рефлекс (333), випромінювання $\text{CuK}_{\alpha 1}$. На вставці показано центральні частини профілів в області повного внутрішнього відбиття.

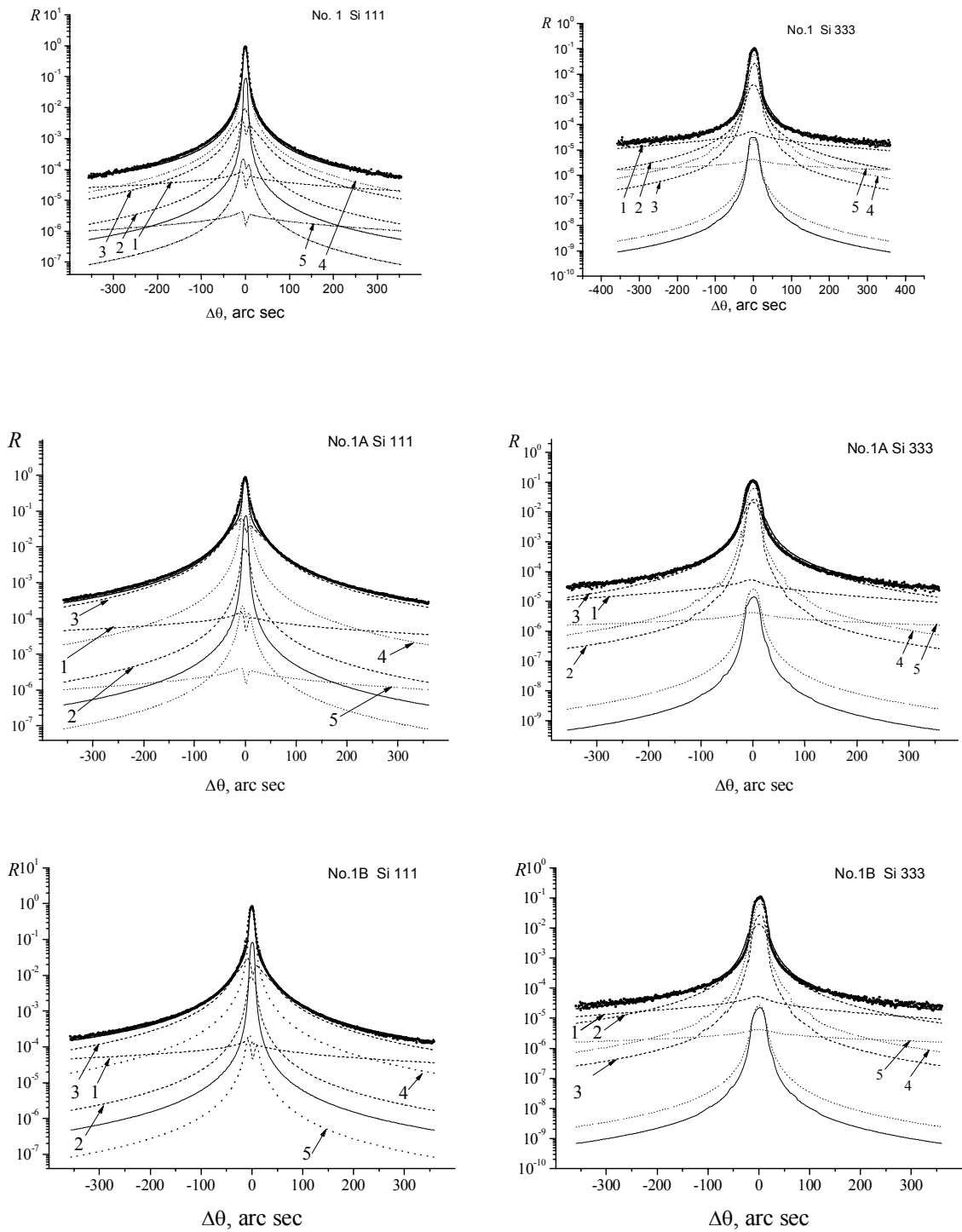


Рис.3. Експериментальні і розрахункові КДВ (відповідно маркери і товста суцільна лінія) еталонного (№ 1) та опромінених електронами (№ 1А і 1В) кристалів кремнію для рефлексів (111) і (333), випромінювання $\text{CuK}\alpha_1$. Тонка суцільна лінія описує вклад когерентного розсіяння, штрихові і пунктирні лінії – вклади ДР відповідно від дислокаційних петель різних розмірів (1, 2, 3) і дископодібних (4) та сферичних (5) преципітатів кисню (див. Табл. 2).